

## Résumé : Aspect ondulatoire de la mécanique quantique

### I- Dualité onde – corpuscule

A tout système matériel, décrit classiquement comme une particule, on peut associer une onde et réciproquement.

Les paramètres dynamiques du système (énergie  $E$  et quantité de mouvement  $p$ ) sont liés aux paramètres ondulatoires (fréquence  $\nu$  et longueur d'onde  $\lambda$ ) par :

✓ La relation de Planck-Einstein :  $E = h\nu = \hbar\omega$

✓ la relation de L. De Broglie:  $p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k$

Avec  $h$ : constante de Planck,  $h = 6,62 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$

$\hbar = \frac{h}{2\pi}$ : constante de Planck réduite.

### II- Fonction d'onde et équation de Schrödinger

#### 1- Fonction d'onde

✓ L'état du système quantique est décrit par une fonction d'onde  $\psi(x, t)$ , fonction complexe de carré sommable.

✓ La probabilité élémentaire de présence de la particule, à l'instant  $t$  dans l'intervalle de longueur  $dx$  est donnée par la relation suivante :

$$dP(x, t) = \psi(x, t) \cdot \psi^*(x, t) dx = |\psi(x, t)|^2 dx$$

✓  $\rho(x, t) = |\psi(x, t)|^2$  : la densité de probabilité de présence.

✓ La probabilité que le système se trouve à l'instant  $t$  quelque part dans l'espace (ici sur l'axe  $(ox)$ ) s'écrit  $\int_{-\infty}^{+\infty} dP = 1 \Rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x, t)|^2 dx = 1$  : **relation de normalisation.**

#### 2- Equation de Schrödinger à une dimension

L'équation décrivant l'évolution dans l'espace et dans le temps de la fonction d'onde d'une particule quantique est due à Schrödinger :

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + E_p(x, t) \cdot \psi(x, t)$$

#### 3- Etats stationnaires de l'équation de Schrödinger

✓  $E_p(x, t) = V(x) \Rightarrow \psi(x, t) = \phi(x) \cdot f(t)$  avec  $f(t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$

$$\Rightarrow \rho(x, t) = |\psi(x, t)|^2 = \left| \phi(x) \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \right|^2 = |\phi(x)|^2 = \rho(x)$$

$\Rightarrow \rho(x)$  ne dépend pas du temps

✓  $\phi(x)$  vérifie l'équation :  $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \phi(x)}{dx^2} + V(x) \cdot \phi(x) = E \cdot \phi(x)$

**C'est l'équation de Schrödinger indépendante du temps**

### III- La particule libre ( $V=0$ )

#### 1- Solutions

✓ l'équation de Schrödinger indépendante du temps donne:  $\frac{d^2 \phi(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \phi(x) = 0$

✓ On pose  $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \Rightarrow \phi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \Rightarrow \psi(x, t) = \underbrace{Ae^{i(kx-\omega t)}}_{\text{Onde progressive}} + \underbrace{Be^{-i(kx+\omega t)}}_{\text{Onde régressive}}$

On choisit une particule libre qui provient de  $(-\infty) \rightarrow B = 0$  (pas d'onde réfléchie)

✓ vérifions la condition de normalisation:

$\rho(x) = |\psi(x, t)|^2 = |A|^2 \Rightarrow P = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x, t)|^2 dx = +\infty \Rightarrow$  Cette solution n'est pas normalisable : ne représente pas un état physique.

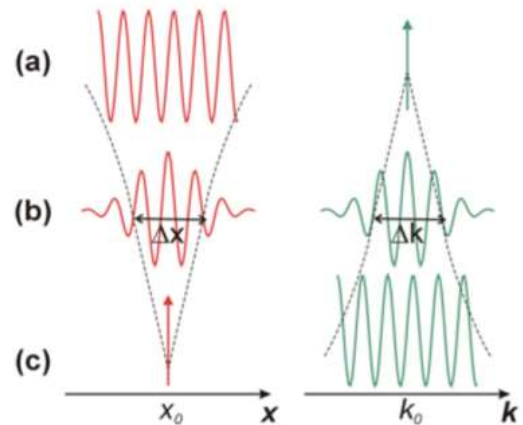
$\Rightarrow$  paquet d'onde : une superposition de plusieurs OPPH (états stationnaires libres) de vecteurs d'ondes  $k$  variant au voisinage d'une valeur moyenne  $k_0$ :  $\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) e^{-i(\omega t - kx)} dk$

$\Delta x$  et  $\Delta k$  satisfont à la relation de Fourier  $\Delta x \cdot \Delta k \gtrsim 1 \Rightarrow \boxed{\Delta x \cdot \Delta p \gtrsim \hbar}$

### C'est l'inégalité de Heisenberg spatiale

On ne peut pas avoir simultanément autant de précision que l'on veut sur la position d'un système et sur son impulsion.

(si  $\Delta x \searrow, \Delta p \nearrow$ )



## 2- densité de courant de probabilité

Pour une particule libre (OPPH) on a :  $\boxed{\vec{j}(x, t) = \frac{\hbar \vec{k}}{m} |\psi(x, t)|^2 = \rho(x, t) \cdot \vec{v}}$

## IV- Etats stationnaires d'une particule dans des potentiels constants par morceau

### 1- Solutions

On a  $\boxed{\frac{d^2 \phi(x)}{dx^2} + \frac{2m(E-V)}{\hbar^2} \phi(x) = 0}$

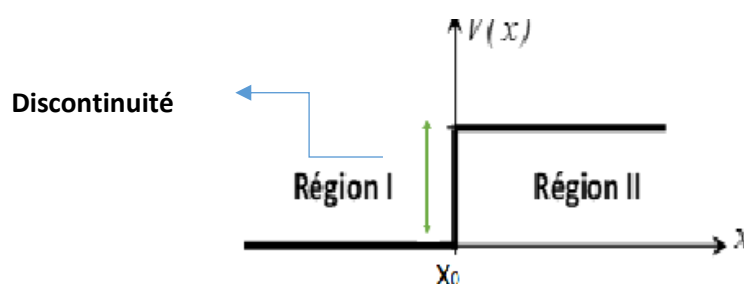
✓ Si  $E > V \Rightarrow \phi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ ,  $A$  et  $B \in \mathbb{C}$ ;  $k^2 = \frac{2m(E-V)}{\hbar^2}$

✓ Si  $E < V \Rightarrow \phi(x) = A'e^{qx} + B'e^{-qx}$ ,  $A'$  et  $B' \in \mathbb{C}$ , où  $q^2 = -k^2$

### 2- conditions aux limites

✓ Si la discontinuité est finie, alors la fonction d'onde  $\phi(x = x_0)$  et sa dérivée première  $\left(\frac{d\phi}{dx}\right)_{x=x_0}$  sont continues en ce point.

✓ Si la discontinuité du potentiel est infinie, seule la fonction  $\phi(x = x_0)$  est continue.



### 3- puits de potentiel $\infty$

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{pour } 0 < x < a \\ \infty & \text{ailleurs} \end{cases}$$

$\Rightarrow \psi(x, t)$  est nulle en dehors du puits

$$E > (V = 0) \Rightarrow \phi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \text{ où } A, B \in \mathbb{C} \text{ et } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

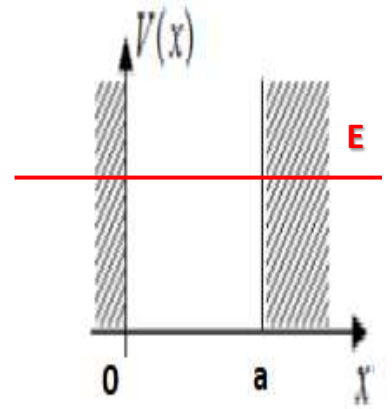
$$\checkmark \phi(0) = 0 = A + B \Rightarrow B = -A \Rightarrow \phi(x) = 2iA \sin(kx)$$

$$\checkmark \phi(a) = 0 = 2iA \sin(ka) \Rightarrow ka = n\pi$$

$$k_n = \sqrt{\frac{2mE_n}{\hbar^2}} = \frac{n\pi}{a} \Rightarrow \boxed{E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\phi(x)|^2 dx = \int_0^a |\phi(x)|^2 dx = 1 \Rightarrow \boxed{\phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)}$$

**Conclusion:** si la particule est confinée, les niveaux d'énergie sont quantifiés.



### 4- Barrière de potentiel et effet tunnel

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{pour } 0 \leq x \leq a \\ 0 & \text{ailleurs} \end{cases}$$

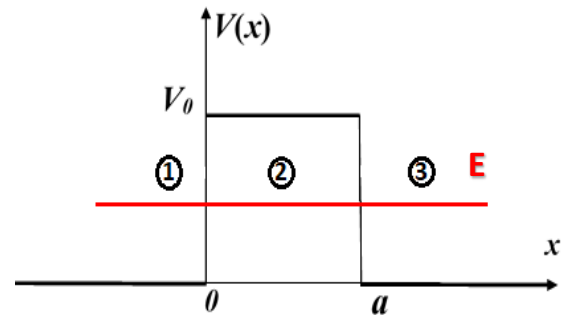
$$\checkmark \phi_1(x) = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}; A_1, B_1 \in \mathbb{C}, k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$\checkmark \phi_2(x) = A_2 e^{-qx} + B_2 e^{qx}; A_2, B_2 \in \mathbb{C}, q^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}$$

$$\checkmark \phi_3(x) = A_3 e^{ikx}; A_3 \in \mathbb{C}$$

$$\vec{j}_l = \frac{\hbar k}{m} \vec{u}_x |A_1|^2, \vec{j}_r = -\frac{\hbar k}{m} \vec{u}_x |B_1|^2 \text{ et } \vec{j}_t = \frac{\hbar k}{m} \vec{u}_x |A_3|^2$$

$$T = \frac{\|\vec{j}_t\|}{\|\vec{j}_l\|} \text{ et } R = \frac{\|\vec{j}_r\|}{\|\vec{j}_l\|} \text{ on trouve } R + T = 1: \text{ conservation du courant de probabilité.}$$



Dans la région ②, « **classiquement interdite** », on trouve une onde évanescence dont l'amplitude décroît exponentiellement avec  $x$  et caractérisée par une longueur de pénétration  $\delta = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}$ .

Si  $\delta \approx a$ , la probabilité de retrouver le système de l'autre côté de la barrière n'est pas nulle : **C'est l'effet tunnel**.

### V- Combinaison linéaire de deux états stationnaires

Considérons un système dans un puits de potentiel infini de largeur  $a$ . Les états stationnaires de ce système sont décrits par :

$$\phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$

L'équation de Schrödinger étant linéaire  $\Rightarrow$  on peut construire un état par la superposition des 2 premiers états stationnaires (par exemple)  $\Rightarrow \psi = \alpha\psi_1 + \beta\psi_2$

avec  $\psi_1(x, t) = \phi_1(x)e^{-i\omega_1 t}$  et  $\psi_2(x, t) = \phi_2(x)e^{-i\omega_2 t}$ ,  $\omega_1 = \frac{E_1}{\hbar}$  et  $\omega_2 = \frac{E_2}{\hbar}$

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\phi_1(x)e^{-i\omega_1 t} + \frac{1}{\sqrt{2}}\phi_2(x)e^{-i\omega_2 t} = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\omega_1 t}[\phi_1(x) + \phi_2(x)e^{-i(\omega_2 - \omega_1)t}]$$

Calculons la densité de probabilité de présence :

$$\rho(x, t) = \frac{1}{2} [|\phi_1|^2 + |\phi_2|^2 + \underbrace{2\phi_1 \cdot \phi_2 \cos(\omega_2 - \omega_1) t}_{\text{Terme d'interférences}}]$$

**Terme d'interférences**

La variation de  $\rho(x, t)$  est T périodique avec  $T = \frac{2\pi}{\omega_{21}} = \frac{h}{|E_2 - E_1|} \Rightarrow$  la superposition de deux états stationnaires n'est pas stationnaire (en général).