Cours 11

Nature ondulatoire de la matière

- Principe d’incertitude de Heisenberg
- Mesure et interprétation

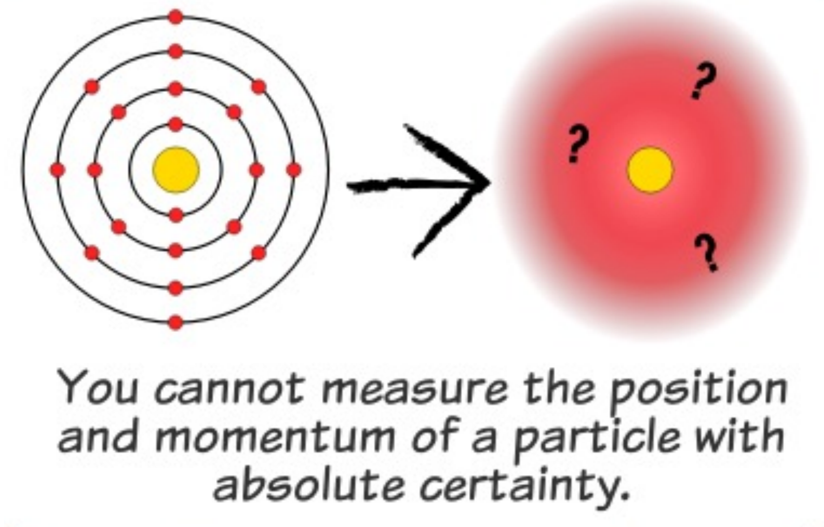
Solutions particulières de l’équation de Schrödinger

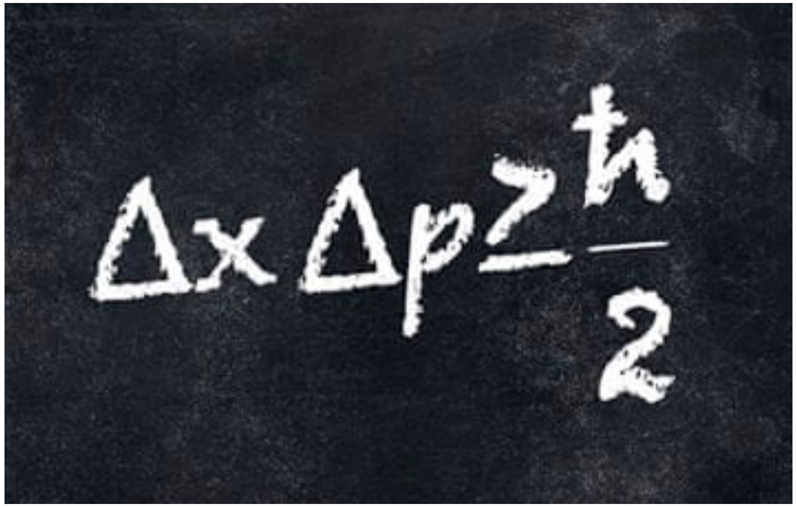
- Puits de potentiel avec barrières infinies
- Puits de potentiel avec barrières finies

Principe d'incertitude de Heisenberg (1927)

Werner Heisenberg
1901 - 1976

1932





Fonction d’onde de la particule libre

Pour une particule libre en 1D : $\phi(x) = e^{i k_0 \cdot x}$

Opérateur quantité de mouvement : $p_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$

On applique l’opérateur à la function :

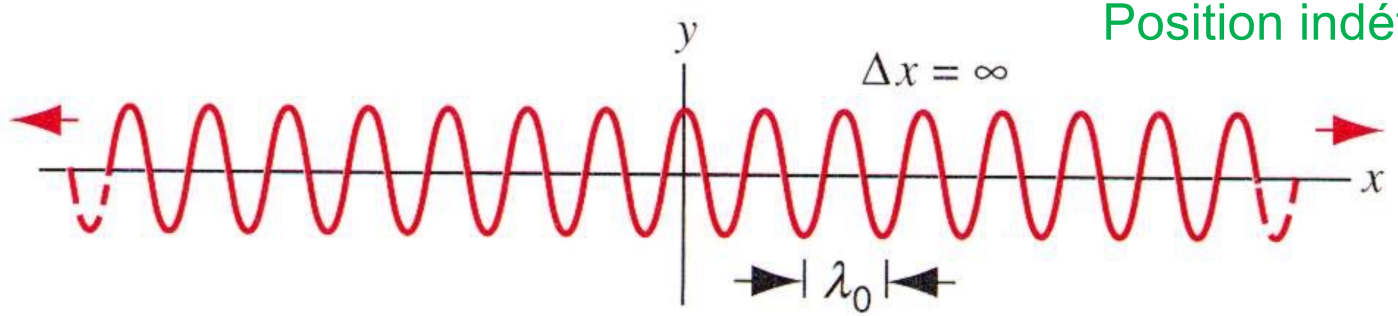
$$p_x\,\phi(x) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\phi(x) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}e^{i k_0 \cdot x}$$

$$= \hbar k_0\, e^{i k_0 \cdot x} = \hbar k_0\, \phi(x)$$

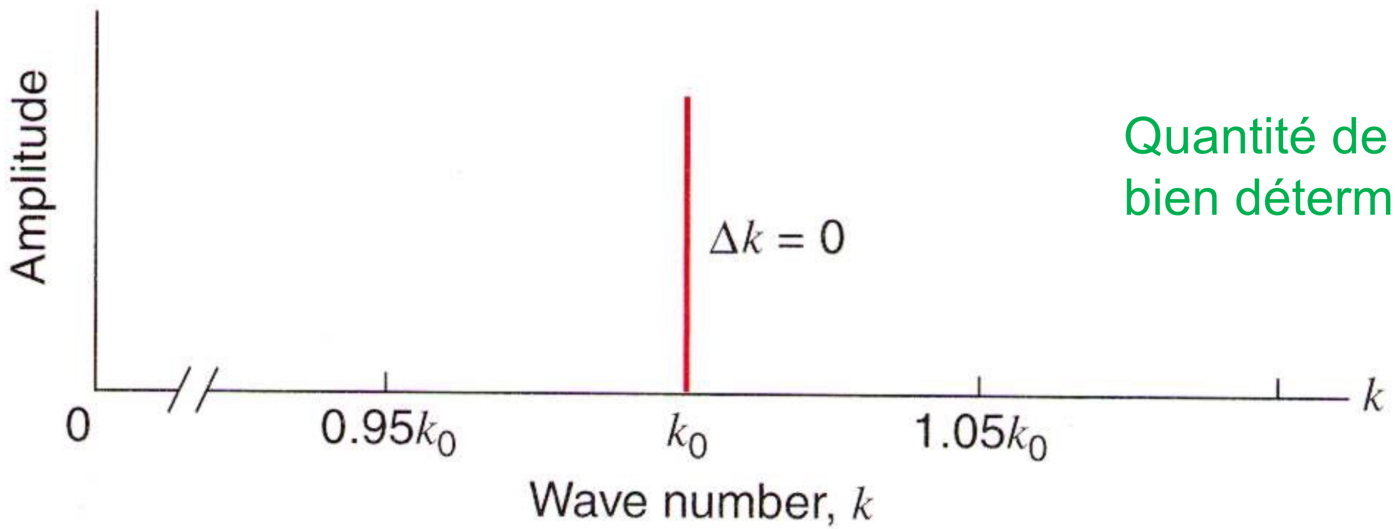
- L’onde plane est un état propre de l’opérateur quantité de mouvement.
- La valeur propre est $\hbar k_0$.
- Cette function d’onde est caractérisée par une seule longueur d’onde !

Délocalisation d'une onde plane

$$\phi(x) = e^{ik_0 \cdot x}$$



Position indéterminée !



Quantité de mouvement
bien déterminée !

Description par un paquet d'onde

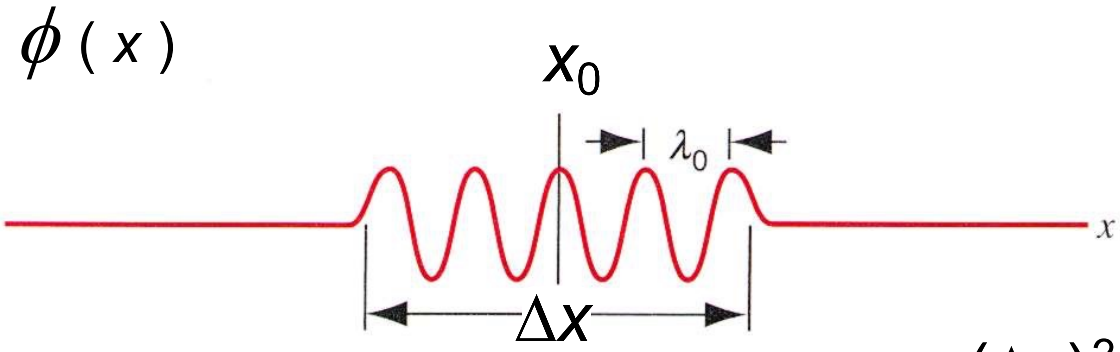
La localisation est acquise par superposition d'ondes planes :

$$\phi(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \;\; F(k)\; e^{\,i\,k\,x}$$

Amplitude d'une onde plane (analyse de Fourier) :

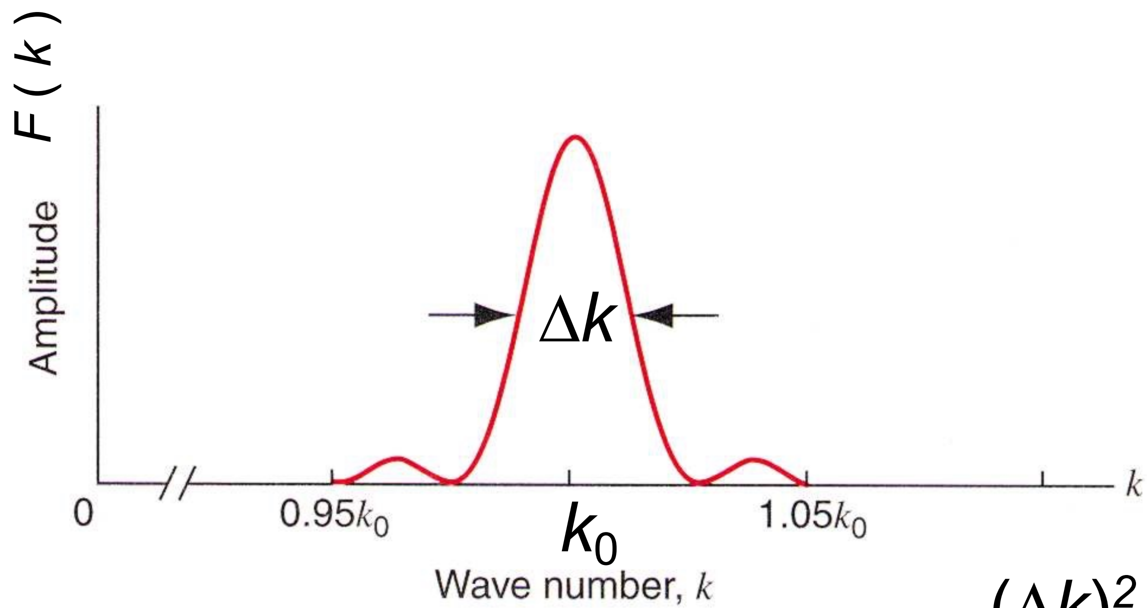
$$F(k) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \;\; \phi(x)\; e^{-i\,k\,x}$$

Paquet d'onde et localisation



$$x_0 = \int x\,|\phi(x)|^2\,dx$$

$$(\Delta x)^2 = \int (x - x_0)^2\,|\phi(x)|^2\,dx$$



$$k_0 = \int k\,|F(k)|^2\,dk$$

$$(\Delta k)^2 = \int (k - k_0)^2\,|F(k)|^2\,dk$$

Propriété mathématique

Propriété mathématique associée aux transformées de Fourier :

$$\Delta x \cdot \Delta k \gtrsim 1/2$$

En utilisant $p = \hbar\, k$:

$$\Delta x \cdot \Delta p \gtrsim \hbar/2$$

Relations d'incertitude

Quantités physiques liées
par transformation de Fourier

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geqq \hbar/2$$

$$\Delta y \cdot \Delta p_y \geqq \hbar/2$$

$$\Delta z \cdot \Delta p_z \geqq \hbar/2$$

Quantités physique non liées
par transformation de Fourier

$$\Delta x \cdot \Delta p_y \geqq 0$$

$$\Delta y \cdot \Delta p_z \geqq 0$$

$$\Delta z \cdot \Delta p_x \geqq 0$$

$$\Delta x \cdot \Delta p_z \geqq 0$$

$$\Delta y \cdot \Delta p_x \geqq 0$$

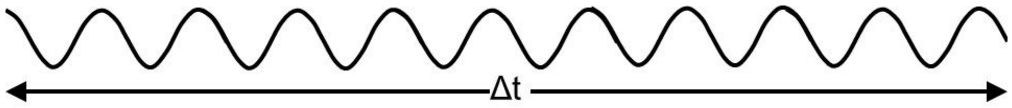
$$\Delta z \cdot \Delta p_y \geqq 0$$

Relation d'incertitude entre temps et énergie

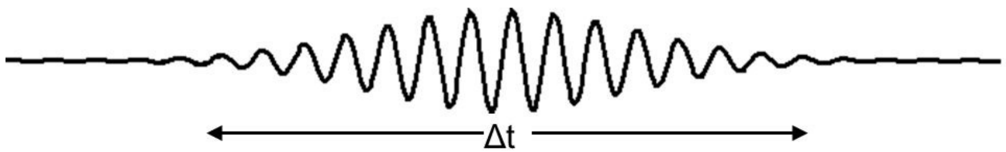
$$\Delta \omega \cdot \Delta t \geqq 1/2$$

$$\Delta \hbar\omega \cdot \Delta t \geqq \hbar/2$$

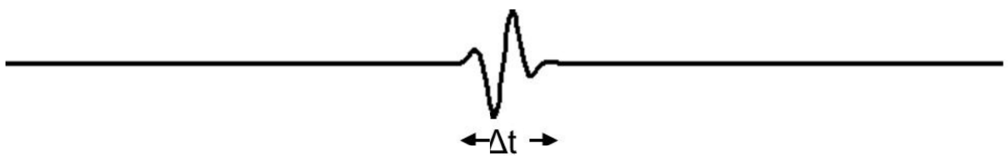
$$\Delta E \cdot \Delta t \geqq \hbar/2$$



Δt long → E précis

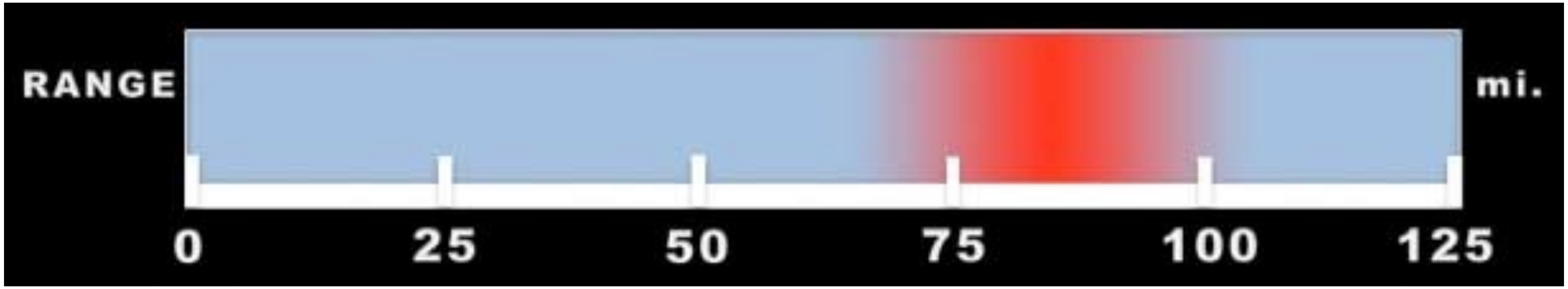


Δt moyen → E moyennement précis



Δt court → E imprécis

Et en physique classique ?



$\Delta x = 0 \quad \Rightarrow \quad \Delta x \sim 0$

$\Delta p = 0 \quad \Rightarrow \quad \Delta p \sim 0$

pas de contradiction avec $\Delta x \cdot \Delta p \geqq \hbar/2$

Cours 11

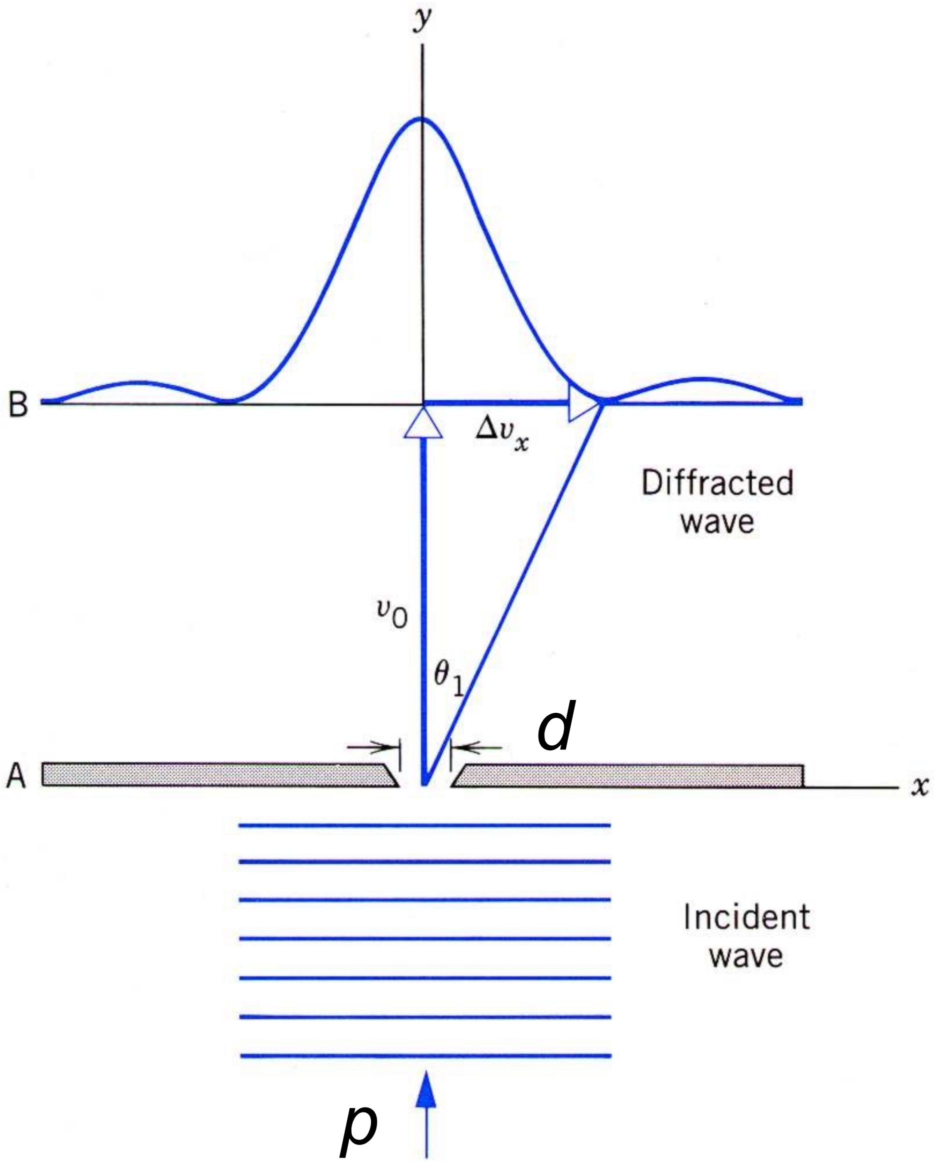
Nature ondulatoire de la matière

- Principe d'incertitude de Heisenberg
- Mesure et interprétation

Solutions particulières de l'équation de Schrödinger

- Puits de potentiel avec barrières infinies
- Puits de potentiel avec barrières finies

Principe d'incertitude de Heisenberg et mesure



Avant la fente :

x quelconque

$p_x = 0$

Après la fente :

$\Delta x = d$

$\Delta p_x = p \sin\theta$

$$= p\,\frac{\lambda}{d} = \hbar k\,\frac{\lambda}{d} = \frac{h}{2\pi}\,\frac{2\pi}{\lambda}\,\frac{\lambda}{d} = \frac{h}{d}$$

Donc :

$$\Delta x \cdot \Delta p_x = d \cdot \frac{h}{d} = h$$

en accord avec le principe d'incertitude !

Mesure et interprétation

- La mesure qui correspond à un acte propre à la physique classique perturbe l'état quantique du système sous observation.

- Dans l'interprétation de Copenhague, qui est l'interprétation prévalente de la mécanique quantique, on suppose que l'état quantique correspond à une superposition d'états sans que le système ait pris part pour un état donné.

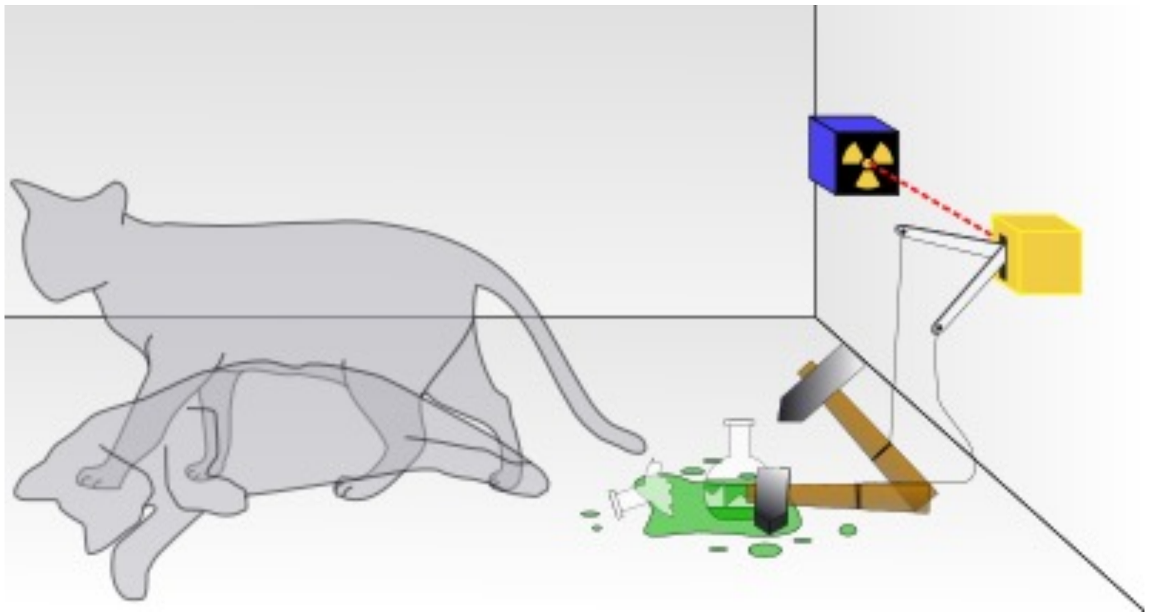
$$\psi(\vec{x}, t) = \sum_n A_n \, e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t} \, \phi_n(\vec{x})$$

- La mesure, c'est-à-dire la perturbation du système par un acte macroscopique, force le système quantique à collapser dans un état particulier de la superposition.

Le chat de Schrödinger (1935)

Il s'agit d'une critique de l'interprétation de Copenhague, qui met en évidence ses lacunes supposées ainsi que le problème de la mesure.

Gedankenexperiment (expérience de pensée).



E. Schrödinger
1887 - 1961

Un chat est enfermé dans une boîte avec un flacon de gaz mortel et une source radioactive.
Si un compteur Geiger détecte un certain seuil de radiations, le flacon est brisé et le chat meurt.
Selon l'interprétation de Copenhague, le chat est dans un état de superposition, à la fois vivant et mort. L'état du chat collapse dans un état donné lorsqu'on ouvre la boîte pour l'observer (mesure).

Cours 11

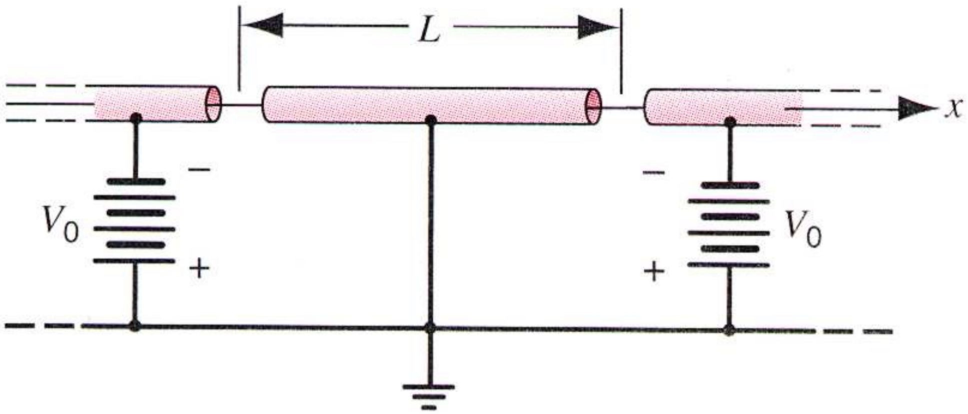
Nature ondulatoire de la matière

- Principe d'incertitude de Heisenberg
- Mesure et interprétation

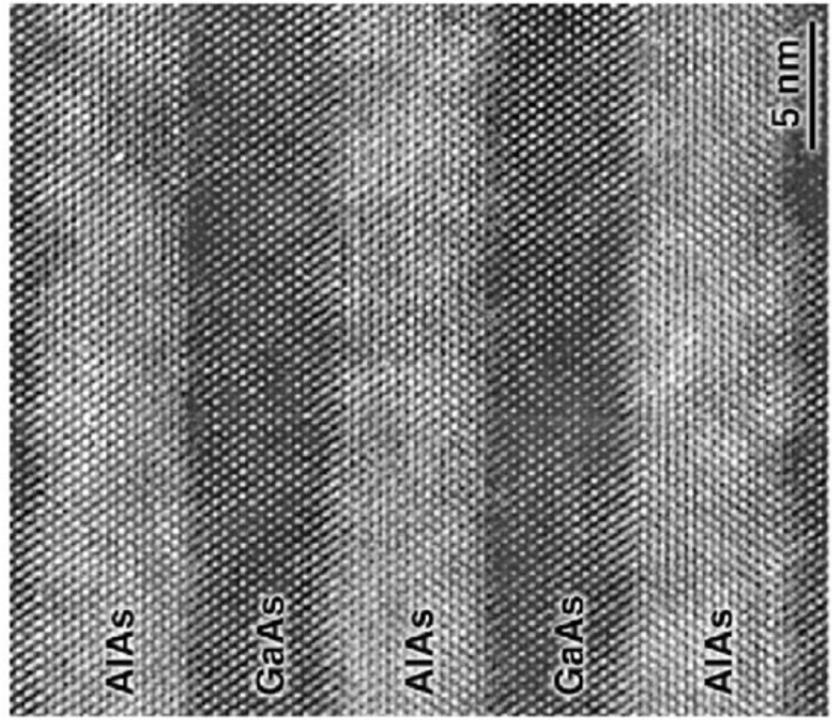
Solutions particulières de l'équation de Schrödinger

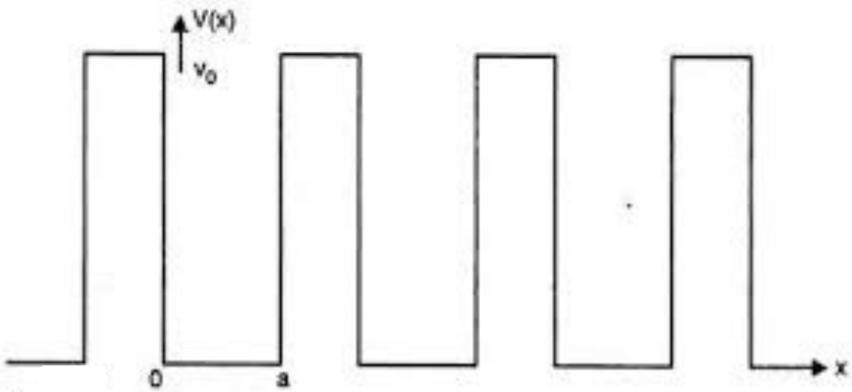
- Puits de potentiel avec barrières infinies
- Puits de potentiel avec barrières finies

Puits de potentiel

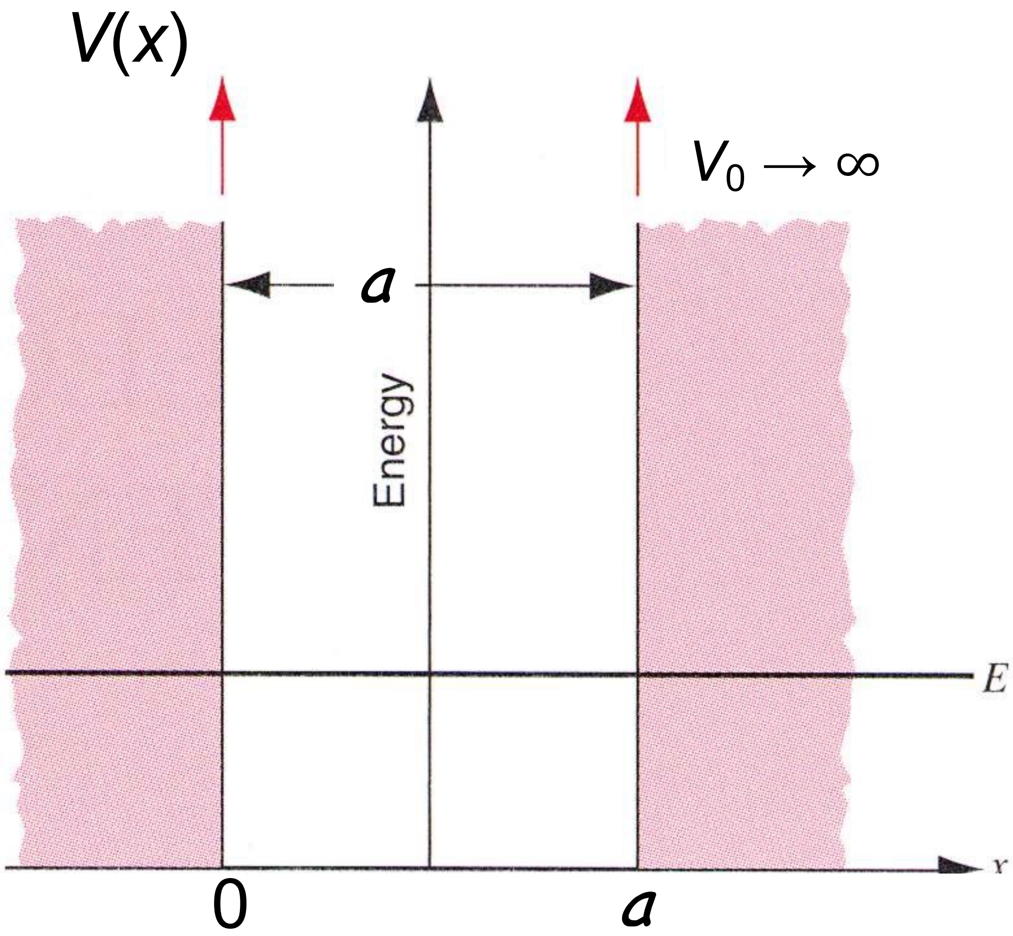


Croissance par Molecular Beam Epitaxy (MBE)





Puits de potentiel avec barrières infinies



Conditions aux bords :

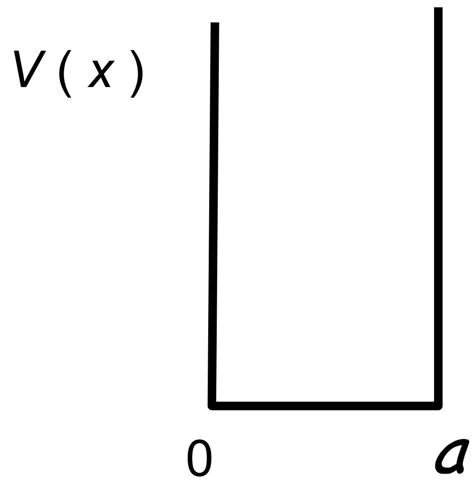
électron confiné →

$\psi\,(x,\,t) = 0$ pour $x < 0$ ou $x > a$

→ $\phi\,(x) = 0$ pour $x < 0$ ou $x > a$

Équation de Schrödinger

Le potentiel est indépendent du temps.



L'équation de Schrödinger indépendante du temps s'écrit :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\phi(x)}{\partial x^2} = E\,\phi(x)$$

On cherche des solutions stationnaires de la forme :

$$e^{¿ k x}$$

Forme de la function d'onde ϕ (x)

En remplaçant dans l'équation, on obtient :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\,(i\,k)^2\;e^{i\,k\,x} = E\;e^{i\,k\,x}$$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$k = \pm\sqrt{2\,m\,E}\;/\;\hbar$$

La solution générale s'écrit alors :

$$\phi(x) = A\;e^{i\,k\,x} + B\;e^{-i\,k\,x} \qquad \text{où} \qquad k = \sqrt{2\,m\,E}\;/\;\hbar$$

Imposition des conditions aux bords

$$\phi(x) = A\, e^{ikx} + B\, e^{-ikx}$$

$$\phi(x=0) = 0 \quad \Rightarrow \quad A + B = 0 \quad \Rightarrow \quad A = -B$$

$$\phi(x=a) = 0 \quad \Rightarrow \quad A\, e^{ika} + B\, e^{-ika} = 0$$

$$A\, e^{ika} - A\, e^{-ika} = 0$$

$$\sin(ka) = 0$$

$$k_n = n\frac{\pi}{a} \qquad n = 1, 2, 3, \ldots$$

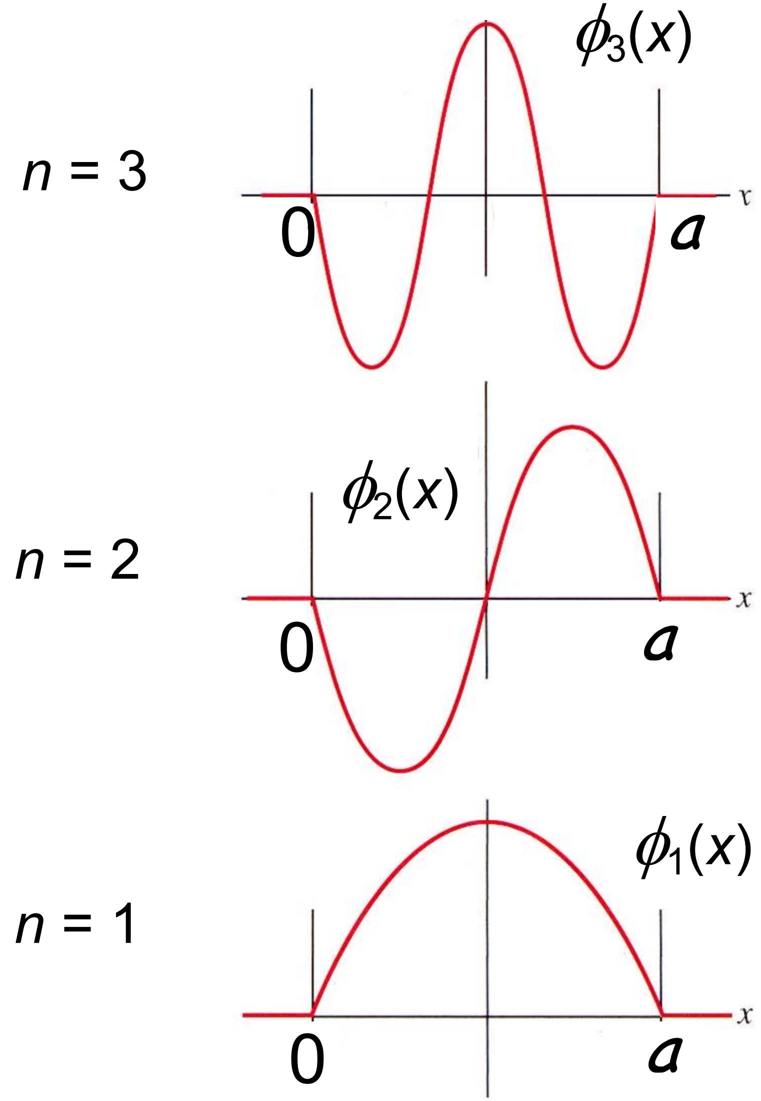
$$\boxed{\phi_n(x) = C_n \sin(k_n x)}$$

NB $n \neq 0 \longrightarrow \phi(x) = 0$
(plus de particule)

Puits avec barrières infinies : états propres

états propres :

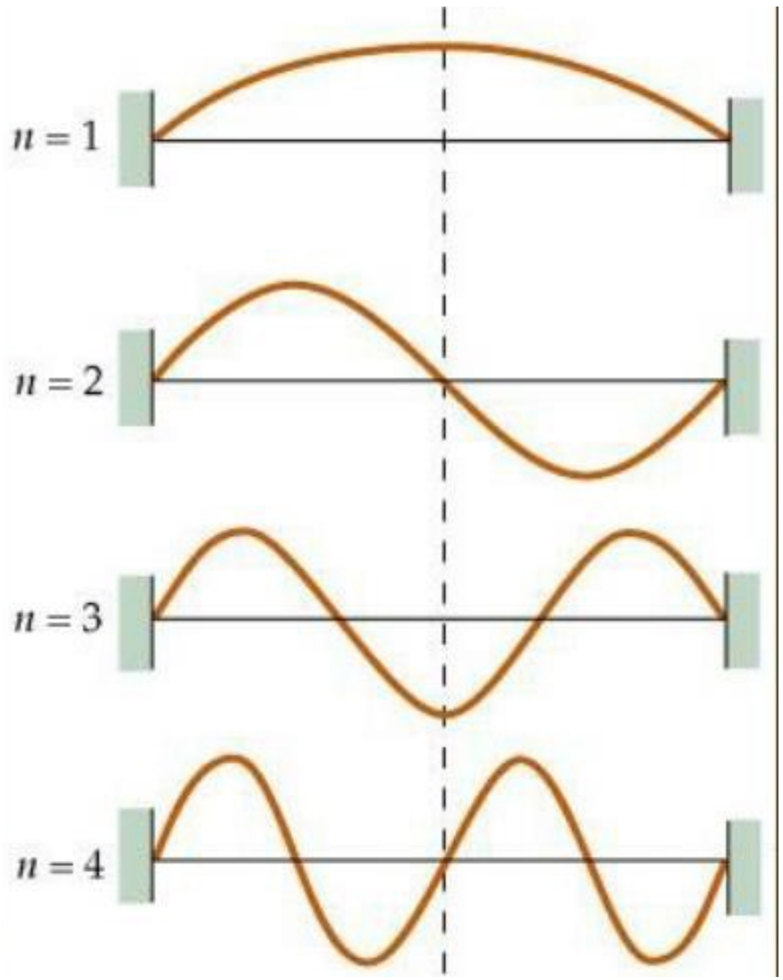
$$\boxed{\phi_n(x) = C_n \sin(k_n x)}$$



Remarque

- Les solutions $\phi(x)$ correspondent exactement aux ondes stationnaires sur une corde.

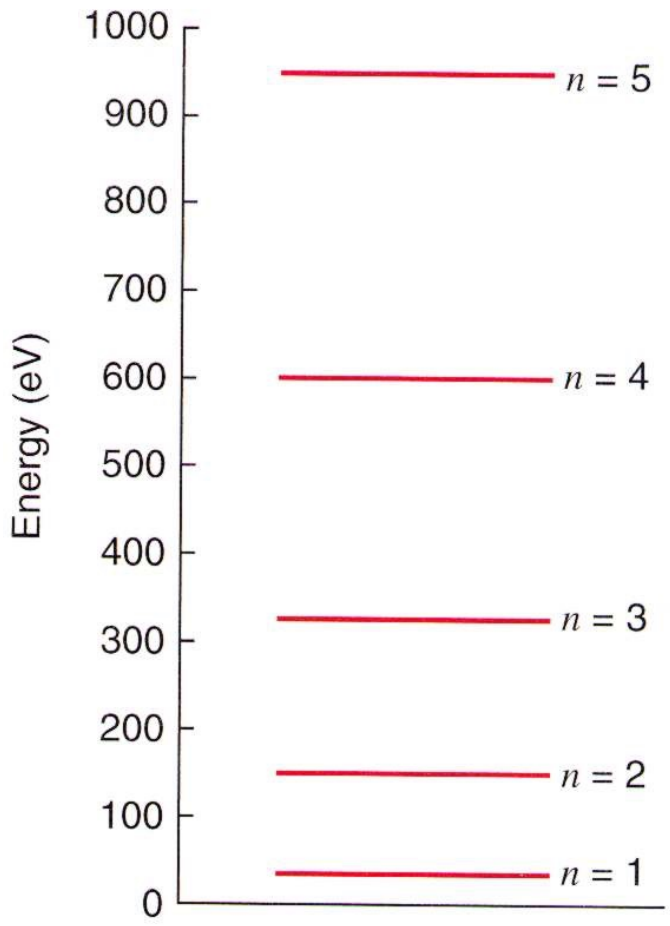
- L'équation de Schrödinger indépendante du temps pour le puits avec barrières infinies est identique à l'équation de d'Alembert stationnaire.



Puits avec barrières infinies : spectre

valeurs propres de l'énergie :

$$\boxed{E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = n^2 \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{a}\right)^2}$$



NB Niveaux discrets !

NB $E_n \propto n^2$!

nombre quantique : n

Remarque

Quantité de mouvement

$$p_n = \hbar\, k_n = n\, \hbar\, \frac{\pi}{a}$$

superposition de $+p_n$ et $-p_n$

Énergie

$$E_n = \frac{p_n^{\,2}}{2m} = n^2\, \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{a}\right)^2$$

correspond aux valeurs propres

lien entre p_n et E_n donné par la relation de de Broglie

Normalisation

$$\phi_n(x) = C_n \sin(k_n x)$$

$$\int_0^a dx \; |\phi_n(x)|^2 = \int_0^a dx \quad C_n^2 \sin^2 k_n x \overset{\theta = k_n x}{=} \frac{1}{k_n} \int_0^{k_n a} d\theta \quad C_n^2 \sin^2 \theta$$

$$= \frac{C_n^2}{k_n} \int_0^{k_n a} d\theta \; \frac{1}{2}(1 - \cos 2\theta) = \frac{C_n^2}{k_n} \left[\frac{1}{2}\theta - \frac{1}{4} \sin 2\theta \right]_0^{k_n a}$$

$$= \frac{C_n^2}{k_n} \left[\frac{1}{2} k_n a \right] = C_n^2 \frac{a}{2} = 1$$

$$\Rightarrow \quad C_n = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

NB indépendant de *n* !

États propres avec dépendence du temps

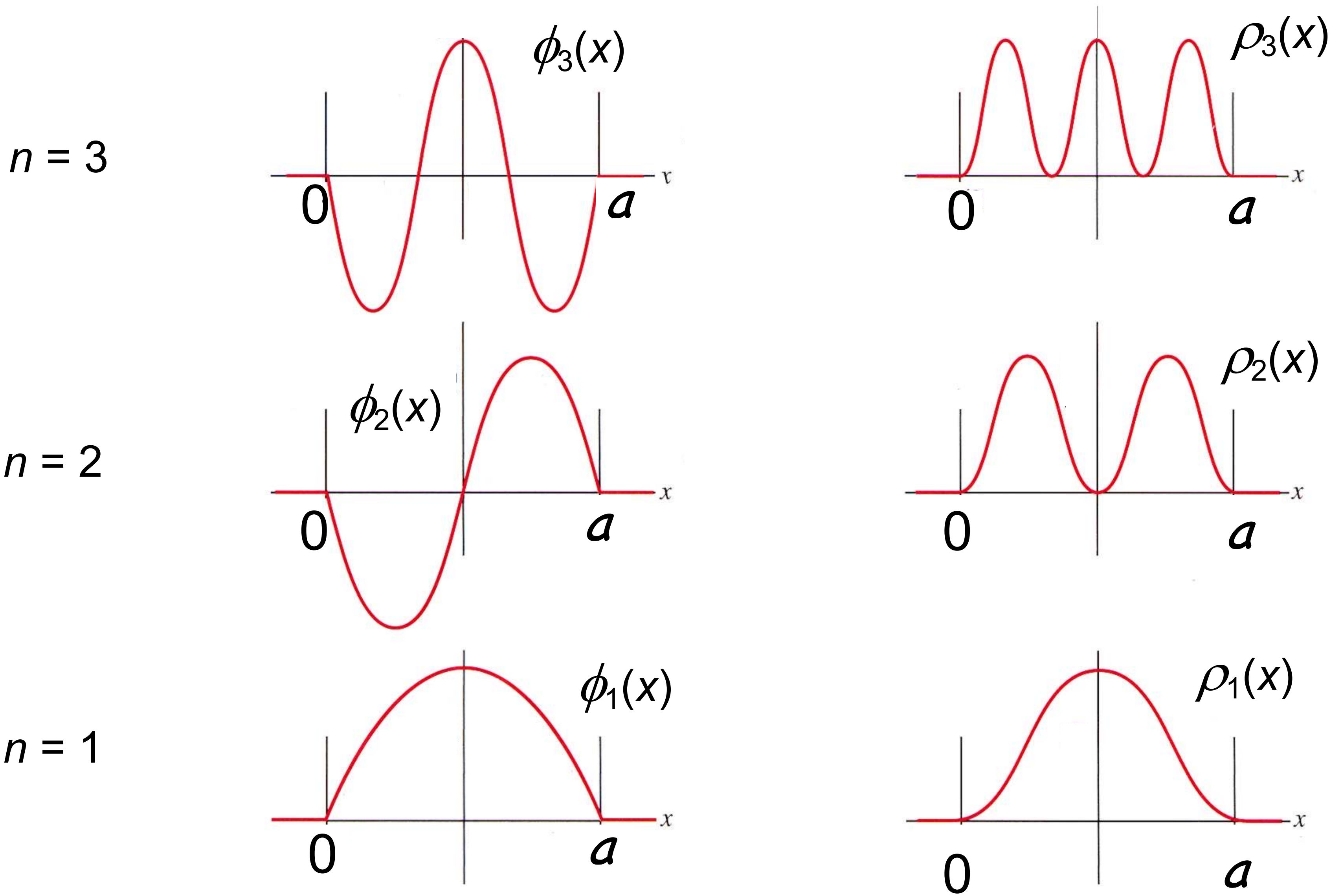
$$\psi_n(x,t) = \sqrt{\frac{2}{a}}\,\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\,\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_n t\right)$$

densité de probabilité de ces états propres :

$$\rho_n(x,t) = |\,\psi_n(x,t)\,|^2 = \frac{2}{a}\,\sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

états stationnaires !

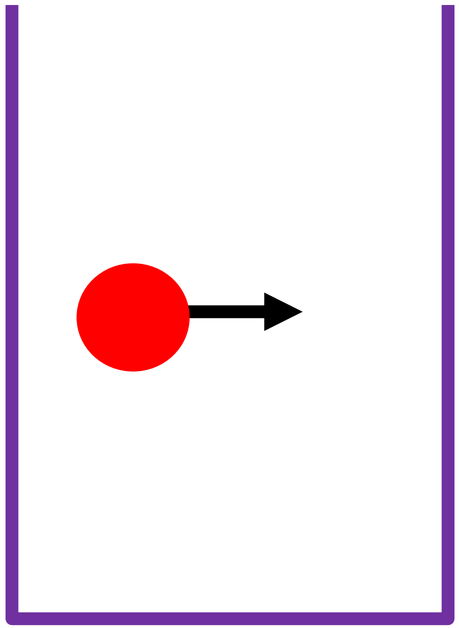
États propres et leur densité de probabilité



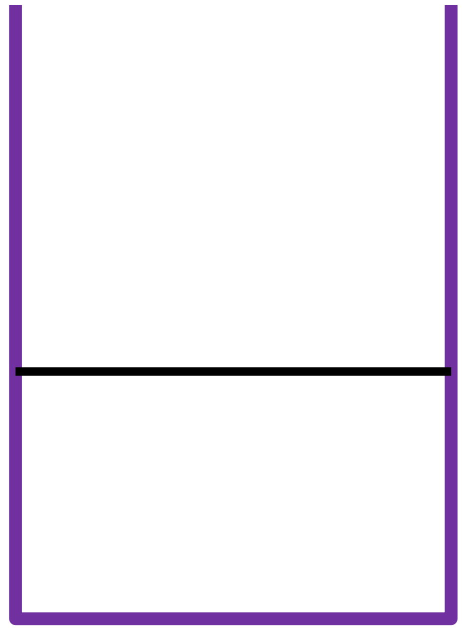
états propres

densités de probabilité

Densité de probabilité pour la particule classique



particule classique
à vitesse constante

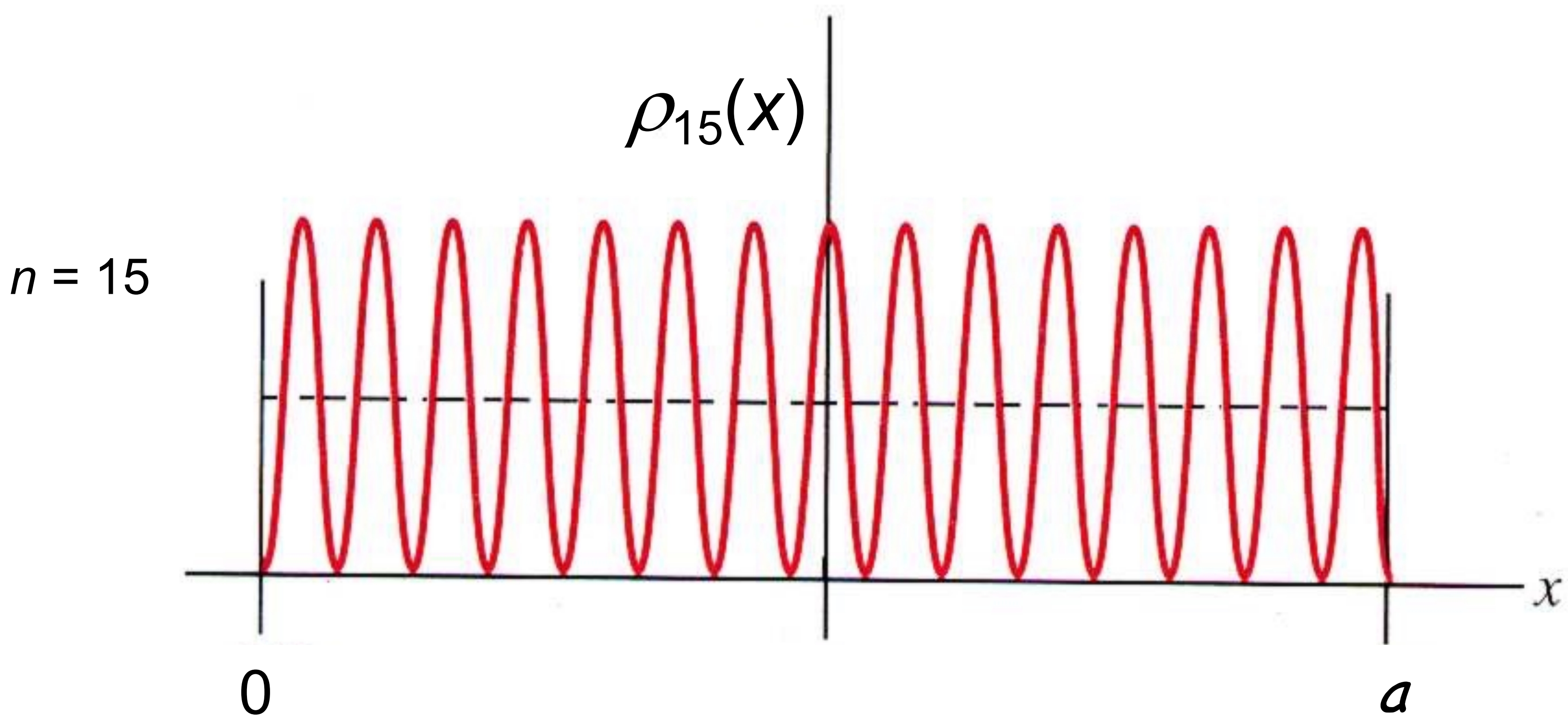


Méc. classique : densité de probabilité
uniforme de trouver la particule

Méc. quantique : la probabilité de trouver
La particule près des parois est plus faible

Limite classique pour $n \to \infty$

Densité de probabilité pour l'état avec nombre quantique n = 15



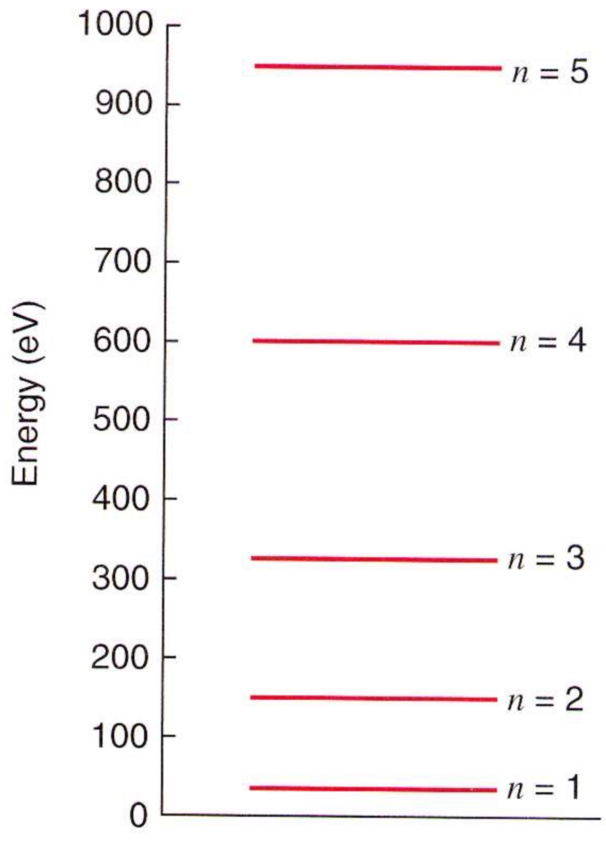
La particule quantique se rapproche du comportement classique pour grand n !

Principe de correspondence.

Énergie de point zero

Principe d'incertitude de Heisenberg : $\Delta x \cdot \Delta p \gtrsim \hbar/2$

Puisque la particule se trouve dans le puits : $\Delta x = a / 2$



Il en suit : $\Delta p \gtrsim \hbar / a$

À comparer avec le p_n minimal obtenu pour $n = 1$:

$$p_1 = \pm \pi \hbar / a \rightarrow E_1 \neq 0$$

Le principe d'incertitude de Heisenberg
est donc respecté !

Cours 11

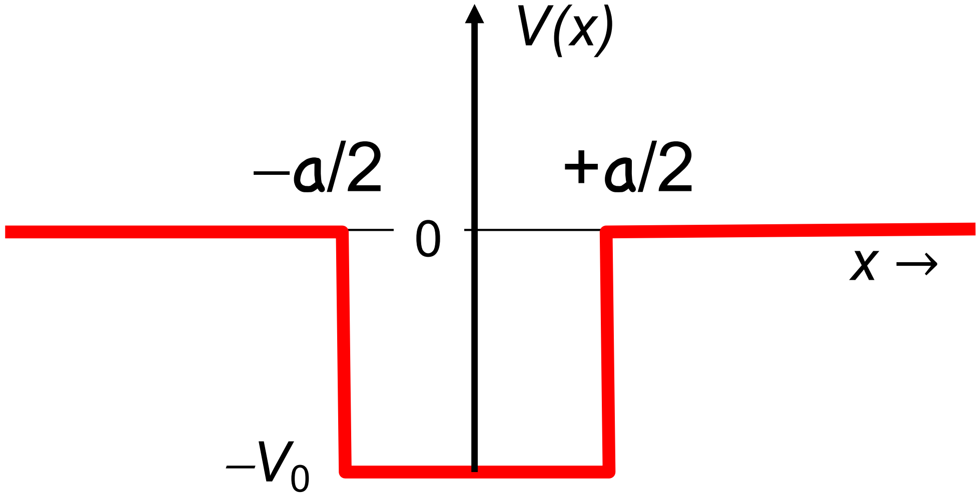
Nature ondulatoire de la matière

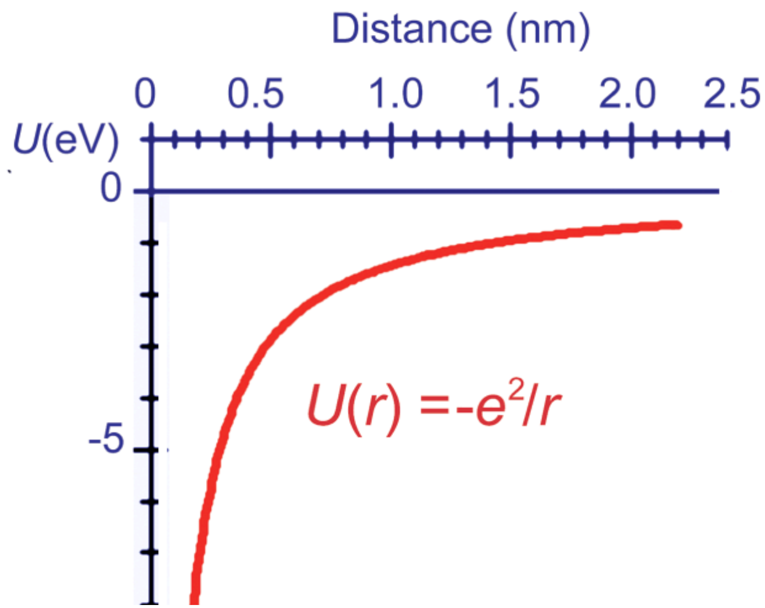
- Principe d’incertitude de Heisenberg
- Mesure et interprétation

Solutions particulières de l’équation de Schrödinger

- Puits de potentiel avec barrières infinies
- Puits de potentiel avec barrières finies

Puits de potentiel avec barrières finies

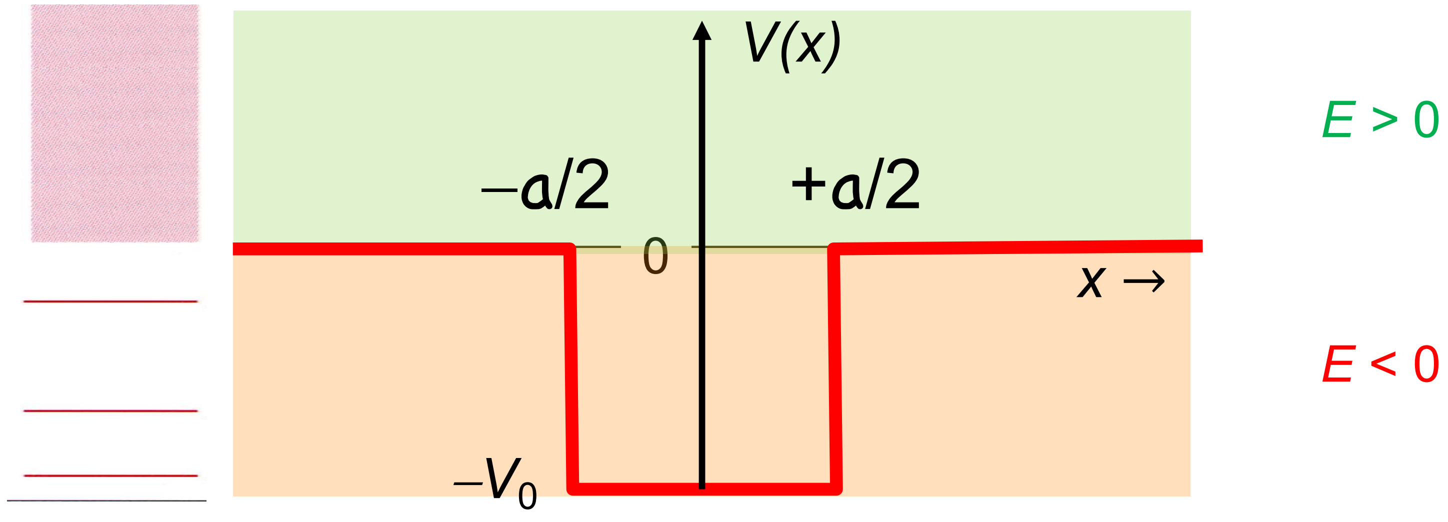




- Ce potentiel présente des caractéristiques similaires à celui du potentiel Coulombien attractif $U(r)$ auquel un électron près d'un noyau est sujet (par exemple dans l'atome d'hydrogène).

- À grande distance $x \rightarrow \infty$, le potentiel devient constant (on choisit $V \rightarrow 0$).

Différence principale par rapport au cas avec $V_0 \longrightarrow \infty$

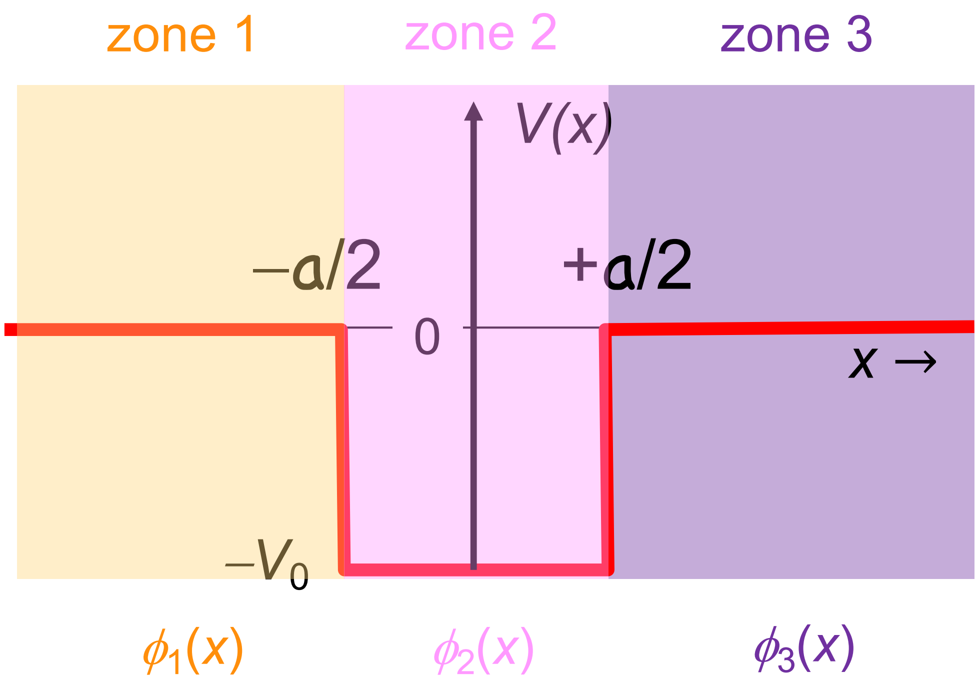


Deux régimes d'énergies

- $E < 0$: particule confinée, états liés, spectre discret (comme dans le cas avec barrières infinies). La particule reste dans le voisinage du puits.
- $E > 0$: particule non-confinée, états non-liés, spectre continu. La particule ne reste pas dans le voisinage du puits.

Éq. de Schrödinger indépendante du temps

Cas $E < 0$: états liés



1. On choisit des zones où le potential est constant.
2. On trouve la forme de la solution $\phi(x)$ dans chaque zone: $\phi_1(x)$, $\phi_2(x)$, $\phi_3(x)$.
3. On impose le conditions de continuité aux limites et la normalisation.

Forme de la solution $\phi_1(x)$

Cas $E < 0$: états liés

zone 1 ($x < a/2$)

éq. de Schrödinger :

$$- \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi(x)}{\partial x^2} = \underbrace{E}_{<0} \phi(x)$$

forme générale :

$$\phi_1 = A_1 \exp(-q x) + B_1 \exp(q x)$$

$$q = \sqrt{-2 m E} / \hbar$$

Forme de la solution $\phi_2(x)$

Cas $E < 0$: états liés

zone 2 $(- a/2 < x < a/2)$

éq. de Schrödinger :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\phi(x)}{\partial x^2} = \underbrace{(E + V_0)}_{> 0}\,\phi(x)$$

forme générale :

$$\phi_2 = A_2 \exp(i\,k\,x) + B_2 \exp(-i\,k\,x)$$

$$k = \sqrt{2\,m\,(E + V_0)}\,/\,\hbar$$

Forme de la solution $\phi_3(x)$

Cas $E < 0$: états liés

zone 3 ($x > a/2$)

éq. de Schrödinger :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\phi(x)}{\partial x^2} = \underbrace{E}_{<0}\,\phi(x)$$

forme générale :

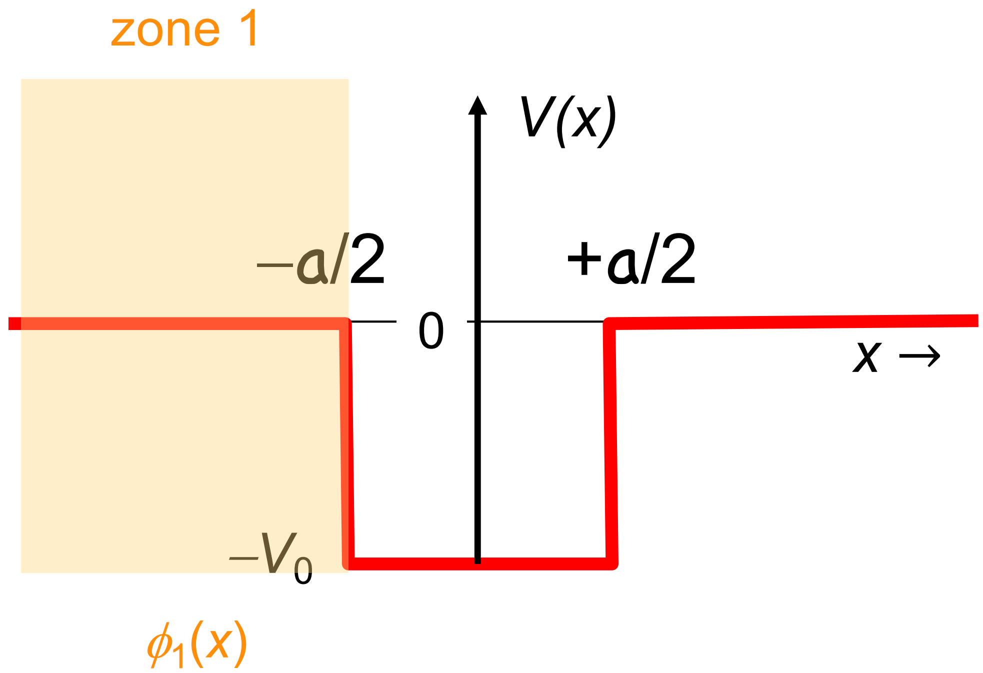
$$\phi_3 = A_3 \exp(-q\,x) + B_3 \exp(q\,x)$$

$$q = \sqrt{-2\,m\,E}\,/\,\hbar$$

(même q que dans la zone 1)

Conditions aux bords

$x \longrightarrow -\infty$



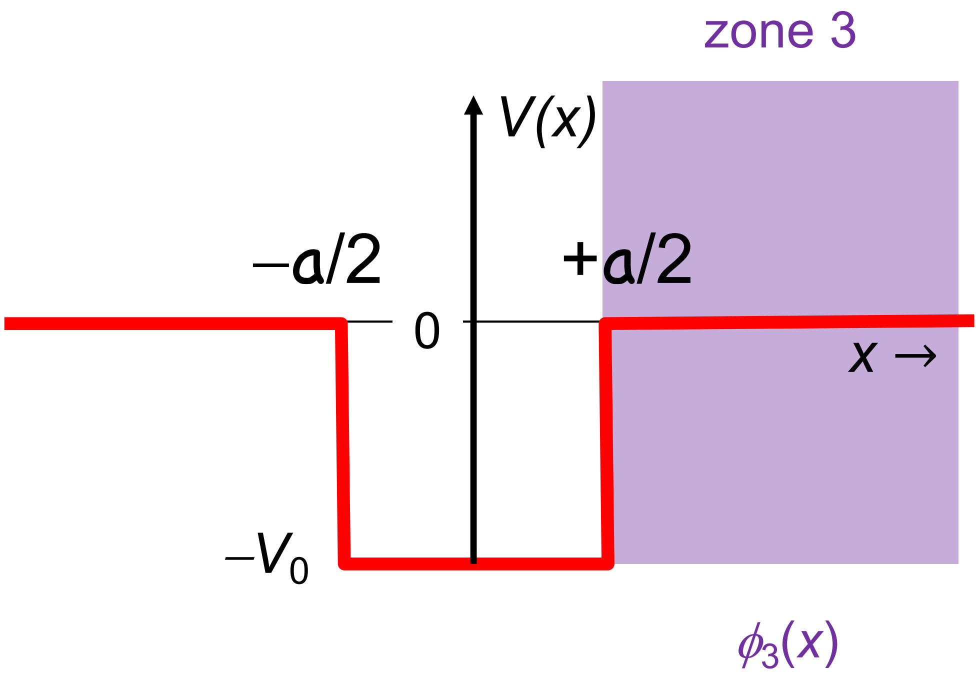
$$\phi_1 \;=\; \cancel{A_1 \exp(-q\,x)} \;+\; B_1 \exp(q\,x)$$

pas carré sommable !

$\rightarrow\; A_1 = 0$

Conditions aux bords

$x \longrightarrow +\infty$



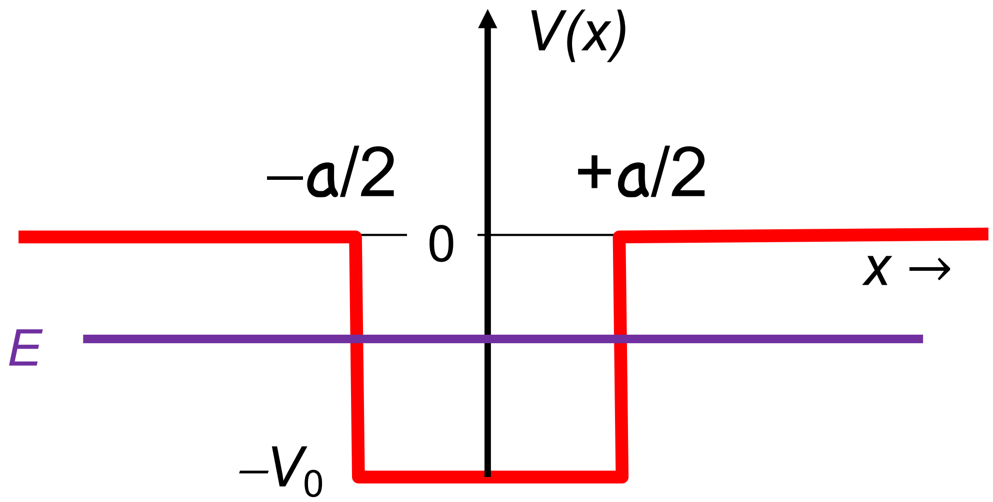
$$\phi_3 \;=\; A_3 \exp(-q\,x) \;+\; \cancel{B_3 \exp(q\,x)}$$

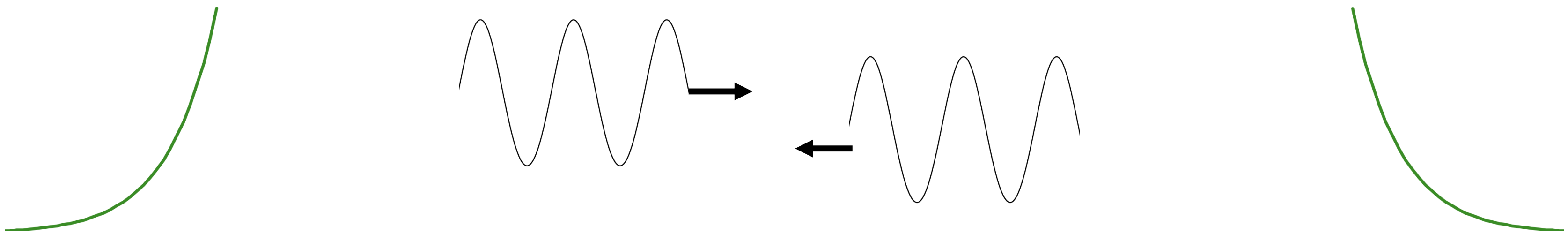
pas carré sommable !

$\longrightarrow\; B_3 = 0$

Forme de l'état propre

zone 1 zone 2 zone 3





$B_1 \exp(\,q\,x\,)$ | $A_2 \exp(\,i\,k\,x\,) + B_2 \exp(\,-i\,k\,x\,)$ | $A_3 \exp(\,-q\,x\,)$

zone 1 | zone 2 | zone 3

Détermination des coefficients restants

Inconnus

- 4 coefficients : B_1, A_2, B_2, A_3.
- L'énergie E.

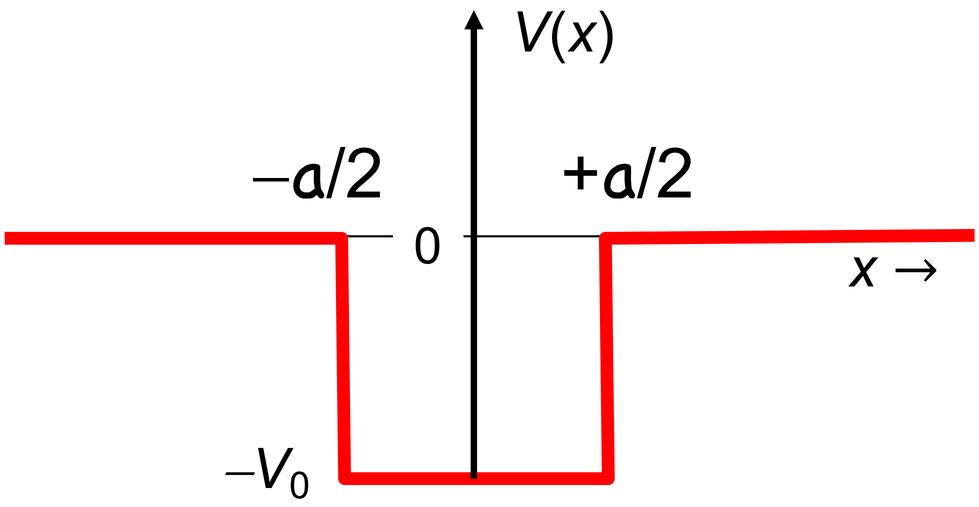
Conditions

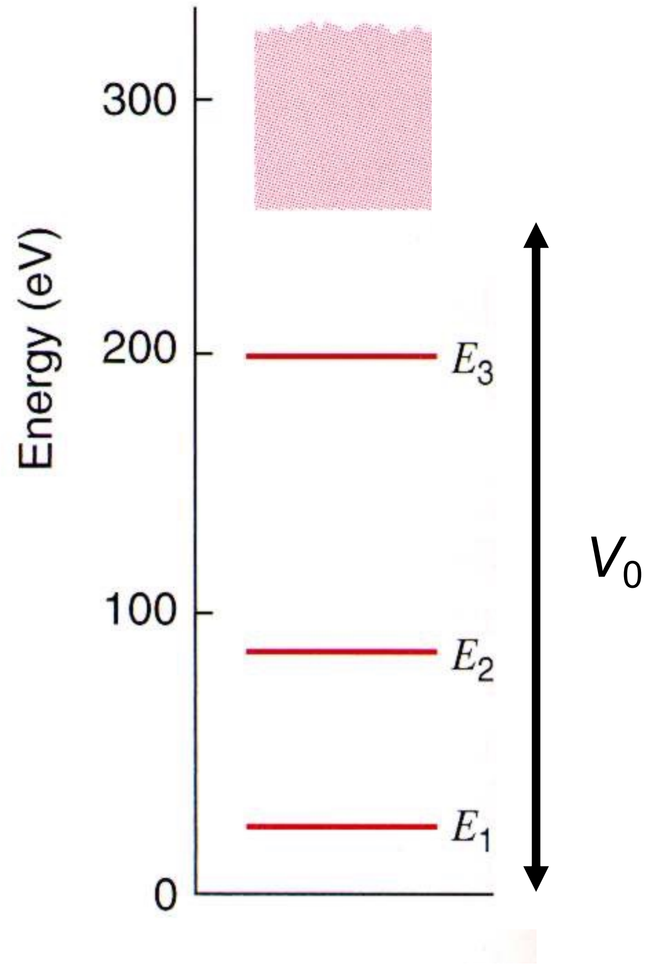
- 2 contraintes : continuité de ϕ en $x = \pm a/2$.
- 2 contraintes : continuité de $\partial\phi/\partial x$ en $x = \pm a/2$.
- 1 contrainte : normalisation de ϕ.

Résultat

- Les conditions peuvent être satisfaites par certaines valeurs discrètes de l'énergie (solution numérique).
- Le spectre est discret.

Spectre d'un puits de potential avec barrières finies



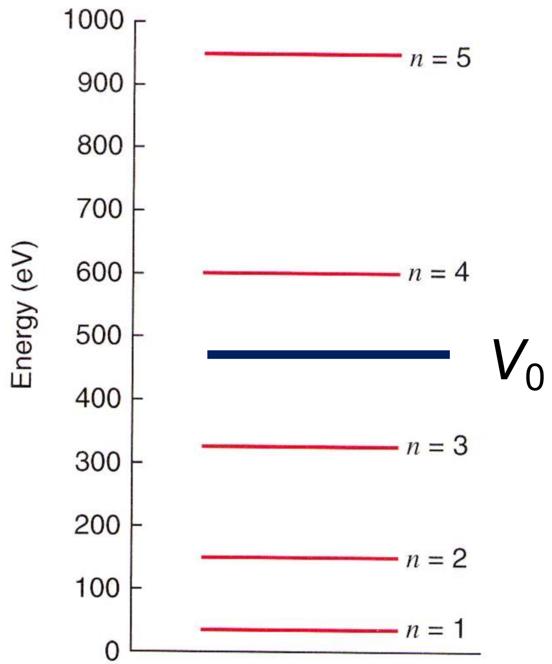


- Spectre discret jusqu'à la hauteur du puits.
- Spectre continu à énergie plus élevée.

Nombre d'états liés

- Le nombre d'états liés est limité.

- Si l'on veut augmenter le nombre d'états liés
  il suffit de penser au puits avec barrières infinies



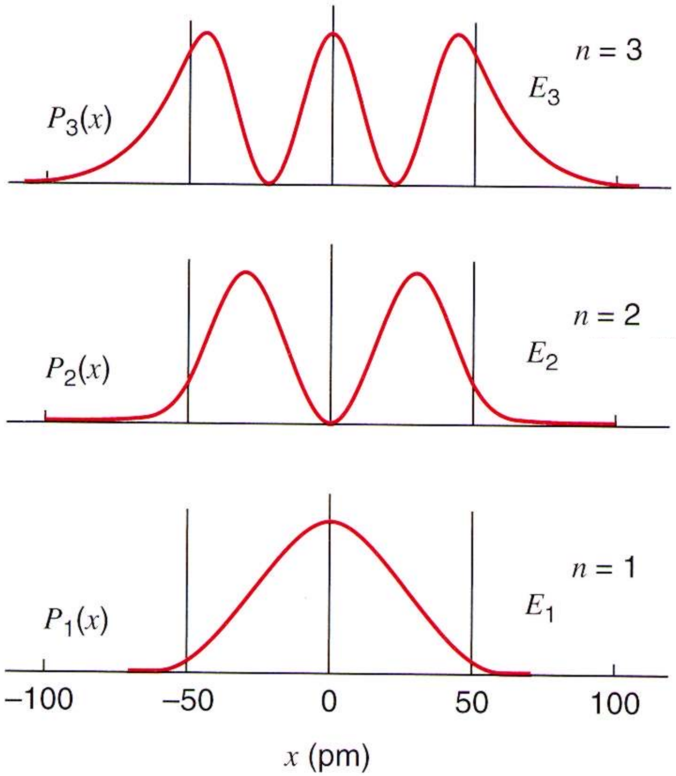
1. Augmenter V_0

2. Augmenter a

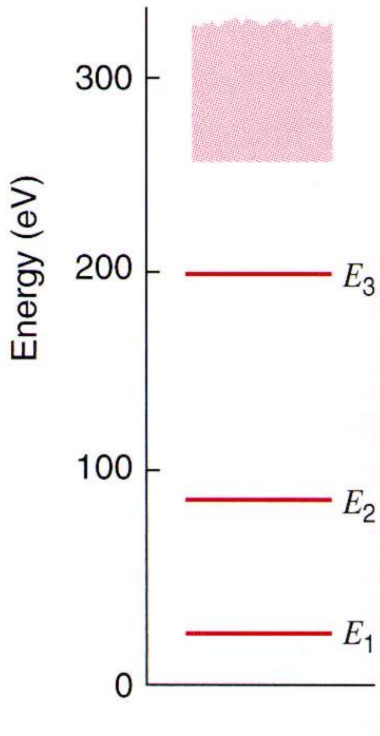
$$E_n = n^2 \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{a}\right)^2$$

Probabilité de trouver la particule hors du puits

Densité de probabilité



Spectre

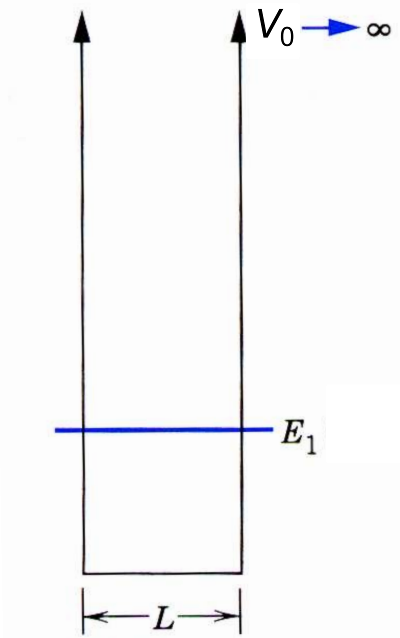


Probabilité hors du puits

Quantum Number n	*Probability of Being Outside the Well*
5	—
4	—
3	30%
2	10%
1	2%

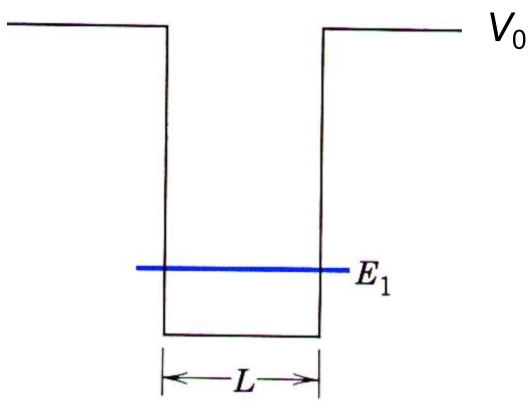
- Cette probabilité est nulle en mécanique classique (zone classiquement interdite), mais elle est finie en mécanique quantique.
- Cette probabilité augmente lorsque l’énergie se rapproche de la limite du continu.

Comparaison entre les niveaux d’énergies dans les puits avec barrières finies et infinies

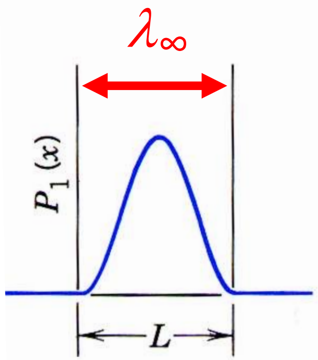


Infinite well

Quantum Number n	V_0 infini Energy (eV)	V_0 fini Energy (eV)
5	940	—
4	602	—
3	338	200
2	150	94
1	37.6	24



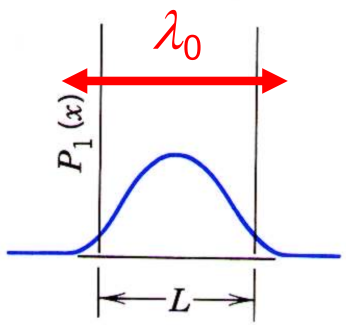
Finite well



Pour états correspondants l’énergie est plus basse dans le puits fini que dans le puits infini.

$$\lambda_0 > \lambda_\infty \rightarrow p_0 < p_\infty \rightarrow E_0 < E_\infty$$

$p = h / \lambda$ $\qquad$ $E = p^2/(2m)$



Cours 11

Nature ondulatoire de la matière

- Principe d’incertitude de Heisenberg
- Mesure et interprétation

Solutions particulières de l’équation de Schrödinger

- Puits de potentiel avec barrières infinies
- Puits de potentiel avec barrières finies