Résumé du chapitre XIV

Eléments de physique quantique

- **Les relations de de Broglie**

  En 1924, le prince de Broglie a proposé d'attribuer à un corpuscule matériel une "onde de matière". Cette proposition a été confirmée par les expériences de Davisson et Germer (1927).
  A une particule de masse au repos m_0, de quantité de mouvement $\vec{p}$ et d'énergie E, les relations de de Broglie associent une onde de vecteur d'onde $\vec{k}$ et de fréquence ν, telle que

$$\vec{p} = \frac{m_0 \vec{v}}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} = \hbar \vec{k} \qquad k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

$$E = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} = \hbar \omega \qquad \omega = 2\pi\nu$$

  où $\hbar = h/2\pi = 1.0546 \cdot 10^{-34}$ J·s

  Pour un **électron** accéléré avec une différence de potentiel V :

$$\lambda = \frac{1.2262}{\sqrt{V}} \text{ nm} \qquad [V] = \text{volts}$$

- **Fonction d'onde et équation de Schrödinger**

  - En physique quantique, **l'état d'une particule** à un instant t est caractérisé par sa **fonction d'onde** $\psi(\vec{x}, t)$.
  - **Interprétation standard** de la fonction d'onde :

    La probabilité d'observer la particule à l'instant t dans le volume d^3x est donnée par

$$dP(\vec{x}, t) = |\psi(\vec{x}, t)|^2 \, d^3x$$

    où $|\psi(\vec{x}, t)|^2 = \psi(\vec{x}, t) \cdot \psi^*(\vec{x}, t) =$ densité de probabilité.

    La fonction d'onde $\psi(\vec{x}, t)$ est dite de carré sommable, c'est-à-dire

$$\iiint_{\substack{\text{tout} \\ \text{l'espace}}} |\psi(\vec{x}, t)|^2 \, d^3x = 1$$

  - L'équation d'évolution de $\psi(\vec{x}, t)$ proposée par Schrödinger en 1926, est dite **équation de Schrödinger (dépendante du temps)**:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{x}, t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{x}) \right) \psi(\vec{x}, t)$$

    où $V(\vec{x}) =$ énergie potentielle.

– Les solutions de l'équation de Schrödinger telles que

$$\psi(\vec{x},t) = \phi(\vec{x}) \cdot \chi(t)$$

sont dites solutions **stationnaires**, elles correspondent à une énergie E bien définie. On montre que

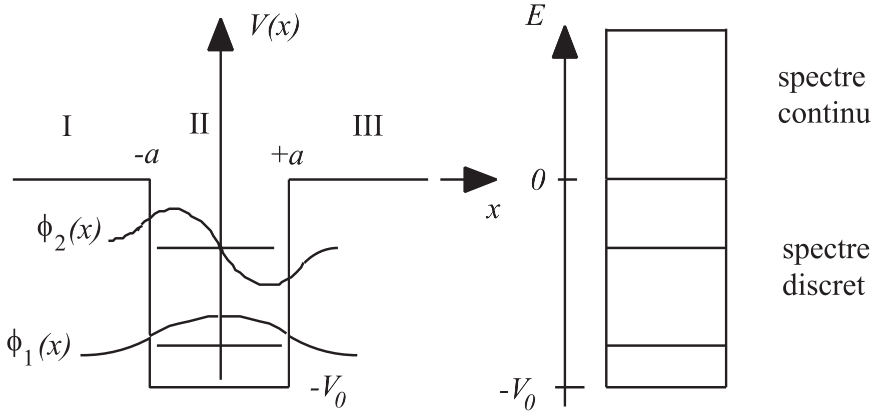
$$\psi(\vec{x},t) = \phi(\vec{x}) \cdot \exp\left(- \frac{i}{\hbar} E\, t \right)$$

où $\phi(\vec{x})$ est solution de **l'équation de Schrödinger indépendante du temps** (équation aux valeurs propres) :

$$\left(- \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{x}) \right) \phi(\vec{x}) = E\, \phi(\vec{x})$$

- **Particule dans un puits de potentiel**

L'équation de Schrödinger prévoit l'existence de **niveaux d'énergie discrets** pour une **particule confinée** dans un puits de potentiel.



$$E = E_{\text{cin}} + V(\vec{x}) = E_{\text{cin}} - V_0$$

Si $E < 0$ états **liés** - spectre d'énergie discret
$E > 0$ états **non liés** - spectre d'énergie continu

– **Puits de potentiel fini carré à une dimension**

Pour trouver les niveaux d'énergie et fonctions d'onde $\phi(x)$, il faut résoudre l'équation de Schrödinger indépendante du temps dans les domaines I, II et III (voir dessin), écrire que la fonction d'onde est bornée si $x \to \pm\infty$, écrire que $\phi(x)$ et sa dérivée sont continues en $x = \pm a$, chercher les solutions qui sont normées.

On montre que ($E < 0$) :

◇ les niveaux d'énergie sont discrets

◇ $\phi(x)$ est non nul l'extérieur du puits de potentiel. Il existe une probabilité non nulle d'observer l'électron hors du puits de potentiel (spill-out)

– **Puits de potentiel carré infini à une dimension**

Pour un puits qui confine les particules entre $x = 0$ et $x = a$, les **énergies** et **fonctions d'onde** sont données par

$$E_n = n^2 \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{a}\right)^2 \qquad n = 1, 2, 3...$$

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

– **Autres puits de potentiel**

Potentiel **harmonique** $V(x) = +kx^2$:

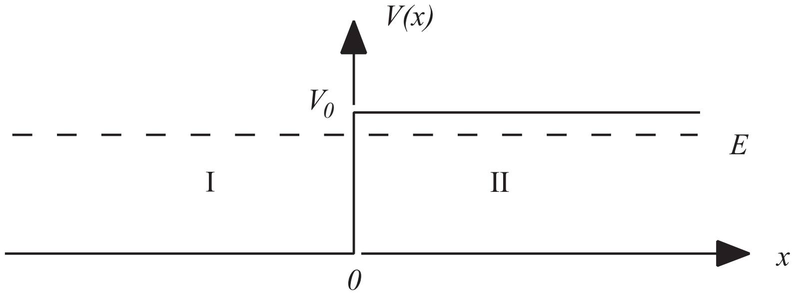
$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) h\nu \qquad n = 0, 1, 2...$$

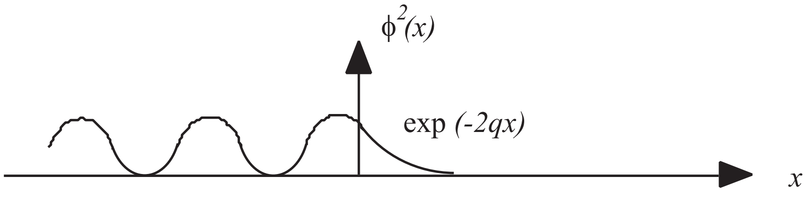
Potentiel **Coulombien** (atome H) :

$$E_n = -\frac{13.6 \text{ eV}}{n^2} \qquad n = 1, 2, 3...$$

- **Barrière de potentiel et effet tunnel**

– **Saut de potentiel carré** ($E < V_0$)



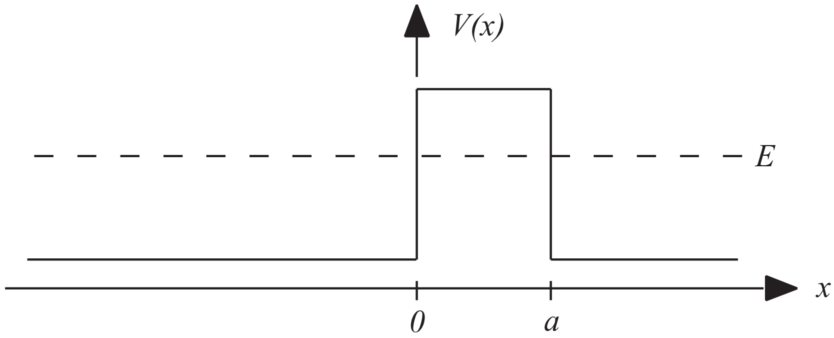


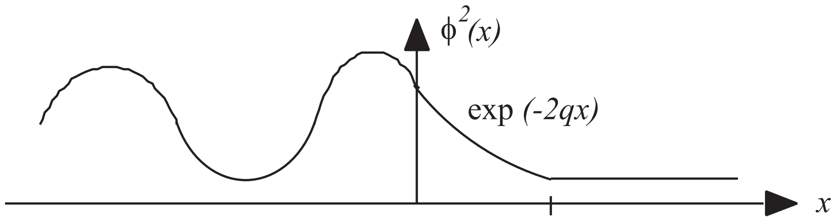
Pour résoudre ce problème, il faut chercher les solutions de l'équation de Schrödinger indépendante du temps dans les domaines I et II, écrire que $\phi(x)$ est borné si $x \to \pm\infty$, et les conditions aux limites en $x = 0$. On montre que :

$$\begin{aligned} \phi_1(x) &= \underbrace{\exp(ikx)}_{\text{onde progr.}} + \underbrace{\frac{1 - iq/k}{1 + iq/k}}_{\text{norme 1}} \cdot \underbrace{\exp(-ikx)}_{\text{onde rétr.}} \\ \phi_2(x) &= \frac{2}{1 + iq/k} \cdot \exp(-qx) \end{aligned}$$

$$\text{où} \qquad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \qquad \text{et} \qquad q = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

– **Barrière de potentiel** ($E < V_0$)





Le **coefficient de transmission** T est donné par

$$T \cong \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} \exp\left(-2 \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} a \right)$$

- **Les relations d'incertitude**

Les **relations d'incertitude** sont une conséquence de l'aspect ondulatoire que la réalité nous oblige à associer à une particule matérielle.
On associe à une particule un **paquet d'onde** d'extension finie. On montre que l'extension Δx de la densité de probabilité $|\psi(x,t)|^2$ est reliée à l'extension Δk de la transformée de Fourier au carré de $\psi(x,0)$ par

$$\Delta x \cdot \Delta k \sim 1$$

En tenant compte des relations de de Broglie ($p = \hbar k$),

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \sim h/2\pi \qquad \text{relation d'incertitude de Heisenberg}$$

Δx est le domaine de l'axe des x dans lequel on a une grande probabilité de trouver la particule si on fait une mesure pour déterminer sa position. De même, Δp_x est l'incertitude sur la détermination de la quantité de mouvement de la particule.
En d'autres termes, en augmentant la précision avec laquelle on détermine la position de la particule, on perd de l'information sur sa quantité de mouvement.