Introduction à la physique quantique

1

Dualité onde/corpuscule

Ondes électromagnétiques et photons

1900 - Planck étudie le rayonnement du corps noir et abouti au fait que les échanges énergétiques entre le champ électromagnétique et la matière sont quantifiés.
Relation de Planck -Einstein :

$$\boxed{E = h\nu = \hbar\omega}$$

1905 - Einstein interprète l'effet photoélectrique.
Un rayonnement électromagnétique correspond à un flux de particules, les photons, qui portent une énergie

$$E_\gamma = h\nu$$

En parallèle, la théorie de la relativité attribue au photon une quantité de mouvement $\overrightarrow{p}$ telle que $E_\gamma = pc$

Ondes de matière

1923 - Compton met en évidence expérimentalement que la quantité de mouvement du photon vaut :

$$\overrightarrow{p} = \hbar \overrightarrow{k}$$

$\overrightarrow{k}$ vecteur d'onde de l'OPPH associée au photon.

1924 - Diffraction des électrons à travers des bifentes d'Young.

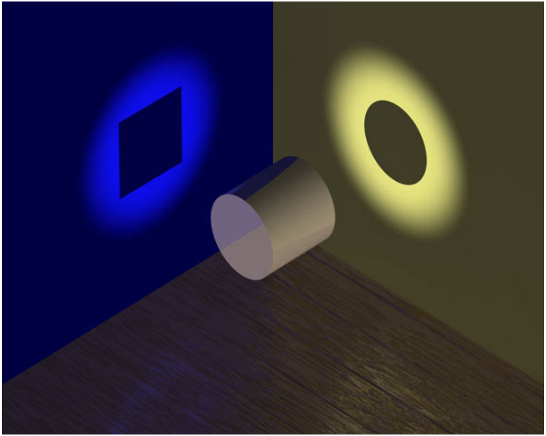
Les électrons se comportent à la fois comme des corpuscules et comme une onde.

On peut leur associer un rayonnement électromagnétique de fréquence ν tel que, dans le référentiel du laboratoire,

$$E_c = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m} \quad ; \quad E_{tot} = \hbar\omega$$

$\overrightarrow{p} = \hbar \overrightarrow{k}$ Relation de De Broglie

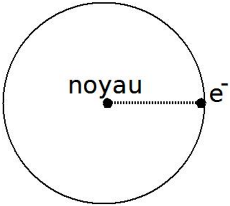
DUALITE ONDE / CORPUSCULE $\Rightarrow$ PARTICULE QUANTIQUE



2

Description d'une particule libre

Remise en cause de la notion de trajectoire



En mécanique classique on décrit une particule à partir de sa position et de sa vitesse. Par exemple l'électron tourne autour du noyau avec une vitesse v dans le référentiel du noyau.

Or l'électron possède une charge électrique $\Rightarrow \quad \exists \overrightarrow{E}$ et possède une vitesse et une accélération (radiale dans le cas d'une orbite circulaire) dans le référentiel du noyau $\Rightarrow \quad \exists \overrightarrow{B}$.

L'espace est plongé dans un champ électromagnétique causé par l'électron en rotation du noyau.

À chaque instant, l'électron devrait rayonner une énergie électromagnétique $\Rightarrow$ perte d'énergie de l'électron $\Rightarrow$ effondrement sur le noyau.

Fonction d'onde (1D)

En mécanique quantique on associe à une particule une fonction d'onde (orbitale pour les électrons en chimie).
Pour une particule évoluant en 1D,

$$\psi(x,t) = \psi_0\, \mathrm{e}^{i(kx-\omega t)}$$

Rq : En mécanique quantique on utilise des conventions particulière $(i, \nu, kx-\omega t)$

$\psi(x,t) \in \mathbb{C} \rightarrow$ Différence importante avec les ondes mécaniques ou les OEM pour lesquelles la grandeur considérée est réelle et on utilise les complexe comme outil.

Rq (HP) : Postulat de la mécanique quantique : L'état d'un système physique est complètement défini à tout instant t par la connaissance de son vecteur d'état $|\psi(t)>$

$\psi(x,t)$ est l'amplitude de probabilité (de présence) associée à la particule

La probabilité de trouver la particule entre x et $x+\mathrm{d}x$ s'écrit :

$$\mathrm{d}p = |\psi(x,t)|^2 \mathrm{d}x$$

Où $|\psi(x,t)|^2$ est la densité (linéique) de probabilité.

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

Rq (HP) : En notation de Dirac, $|\psi|^2 = <\psi|\psi>$

Rq : La fonction d'onde est définie à un facteur de phase près : $\psi(x,t)$ et $\psi(x,t)\,\mathrm{e}^{i\varphi}$ ($\varphi \in \mathbb{R}$) représentent le même état d'une particule quantique.

Équation d'évolution d'une particule libre

. . . .

. . . .

. . . .

. . . .

. . . .

. . . .

. . . .

. . . .

. . . .

Dérivée première du temps $\Rightarrow$ On doit absolument garder la convention $\psi(x,t) = \psi_0\, e^{i(kx-\omega t)}$ sinon tous les signes changent.

On ne simplifie pas par $\hbar$ car cette forme permet de faire apparaitre des grandeurs ayant un sens physique fort en mécanique quantique (opérateur hamiltonien d'une particule libre, non relativiste et sans spin : $\hat{H} = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\Delta$).

Rq (HP) : Postulat de la mécanique quantique : L'évolution de tout système quantique non relativiste est solution de l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar\frac{\partial|\psi(t)>}{\partial t} = \hat{H}|\psi(t)>$$

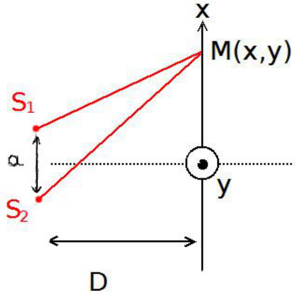
Superposition d'états quantiques

Retour sur l'expérience des bifentes :

- Si la fente 1 est la seule fente ouverte $\rightarrow \psi_1(x,t)$
- Si la fente 2 est la seule fente ouverte $\rightarrow \psi_2(x,t)$

Linéarité de l'équation de Schrödinger : Avec les 2 fentes ouvertes on a

$$\psi(x,t) = \psi_1(x,t) + \psi_2(x,t)$$



On prend :

$$\psi_1(x,t) = \psi_0 \, \mathrm{e}^{i(\overrightarrow{k_1}\cdot\overrightarrow{S_1M} - \omega t)}$$

$$\psi_2(x,t) = \psi_0 \, \mathrm{e}^{i(\overrightarrow{k_2}\cdot\overrightarrow{S_2M} - \omega t)}$$

Limite de la description en ondes planes

$|\psi(x,t)|^2$ correspond à une densité de probabilité. La condition de normalisation impose que :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x,t)|^2 \mathrm{d}x = 1$$

Pour une onde plane $\psi(x,t) = \psi_0 \, \mathrm{e}^{i(kx-\omega t)}$ on a alors $|\psi(x,t)|^2 = \psi_0^2$.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_0^2 \mathrm{d}x \neq 1!$$

Une onde plane ne peut pas représenter convenablement une particule.

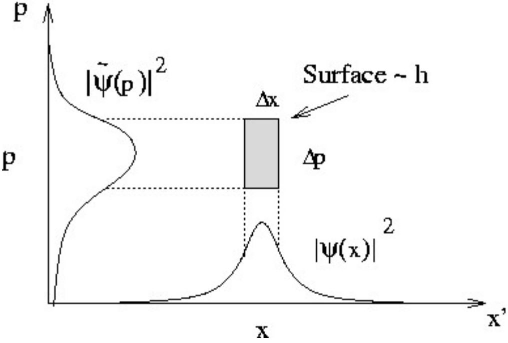
La linéarité de l'équation de Schrödinger permet de construire un paquet d'ondes normalisable par superposition d'OPH. (Th. de Fourier)

Expression d'un paquet d'ondes

$$\psi(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} A(k)\,\mathrm{e}^{i(kx-\omega t)}\,\mathrm{d}k$$

ou bien

$$\psi(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} A(p)\,\mathrm{e}^{i(\frac{p}{\hbar}x-\omega t)}\,\mathrm{d}p$$



Avec
$\widetilde{\psi}(p) = TF[A(p)]$

Valeurs moyennes

Soit A une grandeur physique (une observable) qui prendre les valeurs $A_1, A_1, ..., A_n$ avec les probabilités $p_1, p_2, ..., p_n$. La valeur moyenne de A s'exprime :

$$< A >= \sum_{i=1}^{n} p_i A_i$$

Dans le cas où A est une variable continue de la forme $A(x)$, la probabilité d'observer une valeur comprise entre $A(x)$ et $A(x + \mathrm{d}x)$ est $\mathrm{d}p = |\psi(x, t)|^2 \mathrm{d}x$.

La valeur moyenne s'exprimer donc :

$$< A >= \int_{-\infty}^{+\infty} A(x) |\psi(x, t)|^2 \mathrm{d}x$$

En particulier,

- pour $A(x) = x$, $\quad <x>=\int_{-\infty}^{+\infty} x|\psi(x,t)|^2 \mathrm{d}x$
- pour $A(x) = x^2$, $\quad <x^2>=\int_{-\infty}^{+\infty} x^2|\psi(x,t)|^2 \mathrm{d}x$

Remarque (HP) : On peut également calculer $<p>$ et $<p^2>$ mais il faut encore généraliser le raisonnement :
Pour une fonction d'onde normée,

$$<p>=<\psi|\hat{p}|\psi>=-i\hbar\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x,t)\frac{\partial\psi}{\partial x}\mathrm{d}x$$

$$<p^2>=<\psi|\hat{p}^2|\psi>=-\hbar^2\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x,t)\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\mathrm{d}x$$

On peut également calculer l'écart-type de la distribution de $A(x)$:

$$\Delta A = \sqrt{< A^2 > - < A >^2}$$

Soit :

- Δx est la largeur-type du paquet d'onde dans l'espace des positions,
- Δk ou Δp est la largeur spectrale-type du paquet d'onde (ou largeur du paquet d'onde dans l'espace des impulsions)

Pour un paquet d'onde donné, on peut calculer

$$\Delta x = \sqrt{< x^2 > - < x >^2} \text{ et } \Delta p = \sqrt{< p^2 > - < p >^2}$$

Inégalité de Heisenberg position-impulsion

L'analyse de Fourier permet de montrer que, pour un paquet d'ondes de forme quelconque,

$$\Delta x \Delta k \geq \frac{1}{2} \qquad \text{ou} \qquad \Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

Il est donc impossible de mesurer simultanément la position et l'impulsion d'une particule avec une précision infinie.

Pour des calculs en ordres de grandeurs on retiendra que :

$$\Delta x \Delta k \sim \frac{1}{2} \qquad \text{ou} \qquad \Delta x \Delta p \sim \frac{\hbar}{2}$$

Rq : Cette restriction n'est pas liée à la précision des appareil de mesure mais à la nature même des observables mesurées.
Rq (HP) : les opérateurs position $\hat{x}$ et impulsion $\hat{p}$ associés à ces observables ne commutent pas ($[\hat{x}, \hat{p}] = \hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x} \neq 0$).

Propagation dispersive et étalement du paquet d'onde

. . . .

. . . .

. . . .

. . . .

. . . .

. . . .

. . . .

. . . .

. . . .

Vitesse de groupe et densité de courant de probabilité d'une particule libre

. . . .

. . . .

. . . .

. . . .

. . . .

. . . .

. . . .

. . . .

. . . .

Remarques :

- Le résultat obtenu pour une particule libre (sans interaction avec l'extérieur) reste valable pour une particule d'énergie E plongée dans un potentiel $V < E$.
- Dans le cas où $V > E$, on peut encore exprimer un courant de probabilité mais il faut utiliser une relation plus générale :

$$\vec{j}(x,t) = -\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi^*(x,t)\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial x} - \psi(x,t)\frac{\partial\psi^*(x,t)}{\partial x}\right)\vec{u_k}$$

Introduction à la physique quantique

Dualité onde/corpuscule

Description d'une particule libre

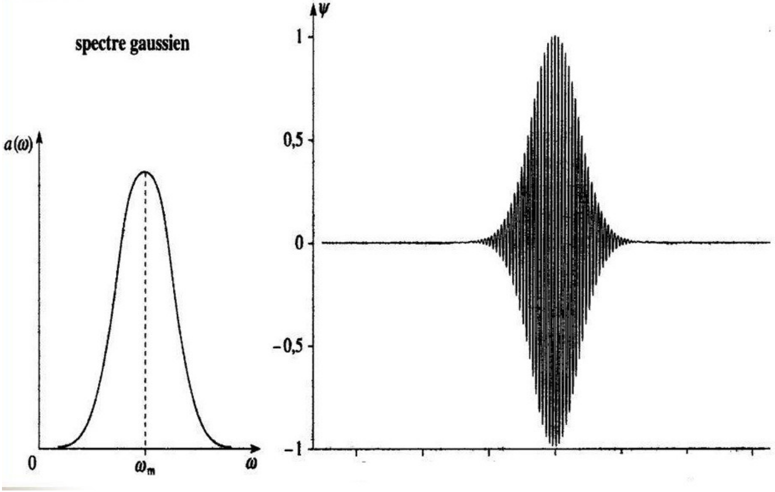
États stationnaires

États non stationnaires

Réflexion et transmission d'une particule quantique

Inégalité de Heisenberg énergie-temps

On détecte la présence d'une particule entre x et $x + \mathrm{d}x$ durant une durée τ. Avec quelle précision peut-on connaître son énergie ?



3

États stationnaires

Écriture de l'équation de Schrödinger

Dans la suite, on considère une particule quantique plongée dans un potentiel $V(x)$ continu par morceaux.

Équation de Schrödinger (dépendante du temps)

États stationnaires en mécanique quantique

Définition(s) :

- Un état stationnaire correspond à un état d'énergie bien défini.
- La fonction d'onde d'un état stationnaire peut se mettre sous la forme $\psi(x,t) = \phi(x)f(t)$

Propriété :

La densité de probabilité de présence $|\psi(x,t)|^2$ d'un état stationnaire ne dépend pas du temps

Pour l'étude des ondes classiques (OEM, ondes dans une corde, etc...) les grandeurs étudiées sont réelles.

Dans ces cas, une OPPH $\overrightarrow{E}(x,t) = \overrightarrow{E_0}\cos(\omega t - kx)$ peut être associée à une onde complexe :

$$\underline{\overrightarrow{E}}(x,t) = \overrightarrow{E_0}\exp[i(\omega t - kx)] = \overrightarrow{E_0}\,\mathrm{e}^{i\omega t}\,\mathrm{e}^{-ikx}$$

On voit donc que $\underline{\overrightarrow{E}}(x,t)$ peut se mettre sous la forme $\underline{\overrightarrow{E}}(x,t) = \underline{\overrightarrow{\phi}}(x)\underline{f}(t)$ sans pour autant qu'il s'agisse d'une solution stationnaire.

En revanche, en mécanique quantique, $\psi(x,t) = \psi_0\,\mathrm{e}^{-i\omega t}\,\mathrm{e}^{ikx}$ constitue une solution en onde stationnaire car $\psi(x,t) \in \mathbb{C}$.

Généralisation

La fonction d'onde d'un état stationnaire associée à une particule plongée dans un potentiel unidimensionnel continu par morceaux peut se mettre sous la forme :

$$\psi(x,t) = \phi(x)\, \mathrm{e}^{-i\dfrac{Et}{\hbar}}$$

- $\phi(x)$ est toujours continue (même en un point où $V(x)$ est discontinu)
- $\dfrac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}x}$ est continue à condition que $V(x)$ soit borné

Équation de Schrödinger pour un état stationnaire

. . . .

. . . .

. . . .

. . . .

. . . .

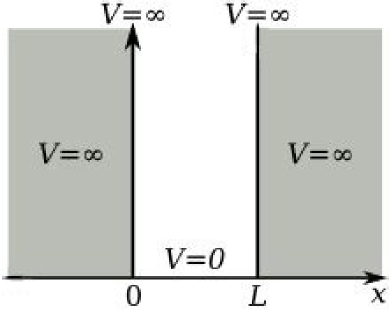
. . . .

. . . .

. . . .

. . . .

Application 1 : Particule confinée dans un puits de potentiel infini



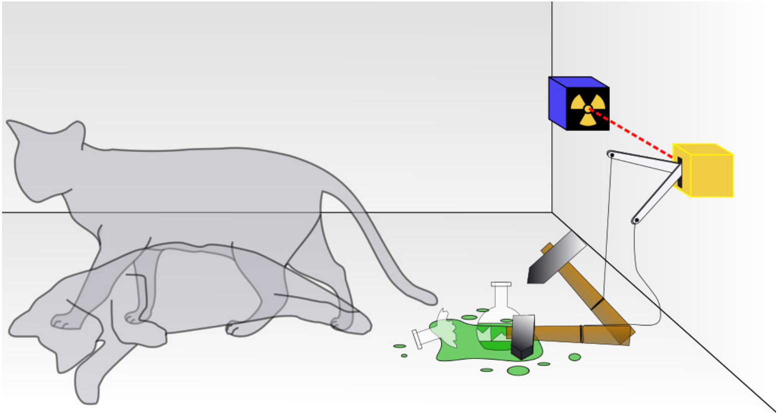
1. Déterminer l'expression de la fonction d'onde $\phi(x)$ pour un état stationnaire.
2. Montrer que l'énergie de la particule est quantifiée et déterminer l'énergie E_n associée à l'état stationnaire n $(n \in \mathbb{N}^*)$
3. Représenter la densité de probabilité de présence pour $n = \{1, 2, 3\}$.

4. Retrouver l'expression de l'énergie du niveau fondamental à un facteur prêt à l'aide de la relation de Heisenberg position-impulsion.
5. Justifier que, quelle que soit la forme du puits de largeur caractéristique L, la particule possède énergie minimale (appelée « énergie de confinement »). Donner un ordre de grandeur pour un électron dans un atome et pour un nucléon dans un noyau.

4

États non stationnaires

Superposition d'états quantiques



On considère un système possédant 2 états stationnaires A et B décrits par les fonctions d'onde :

$$\psi_A(x,t) = \phi_A(x)\,\mathrm{e}^{-i\frac{E_A t}{\hbar}} \quad \text{et} \quad \psi_B(x,t) = \phi_B(x)\,\mathrm{e}^{-i\frac{E_B t}{\hbar}}$$

Lorsqu'on réalise une mesure de l'état du système, on le trouve parfois dans l'état A et parfois dans l'état B. Autrement dit, on a une probabilité p_A de le trouver dans l'état A et une probabilité $p_B = 1 - p_A$ de le trouver dans l'état B.

Quel est l'état quantique du système juste AVANT la mesure ?

$\psi_A(x,t)$ et $\psi_B(x,t)$ sont solutions de l'équation de Schrödinger.

L'équation de Schrödinger étant une équation linéaire, toute combinaison linéaire de solutions est solution.

Juste AVANT la mesure, l'état du système est une combinaison linéaire de d'états stationnaires :

$$\psi(x,t) = \alpha\psi_A(x,t) + \beta\psi_B(x,t)$$

où α et β sont complexes tels que $\alpha^2 = p_A$ et $\beta^2 = p_B$

$\psi(x,t)$ correspond-il à un état stationnaire ?

. . . .

. . . .

. . . .

. . . .

. . . .

. . . .

. . . .

. . . .

. . . .

Puits de potentiel infini (suite)

On considère que seuls les 2 premiers niveaux du puits de potentiel sont accessibles à une particule. À $t = 0$, l'état quantique de la particule est une superposition d'état propres

$$\psi_{1-2}(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_1(x, 0) + \psi_2(x, 0)\right)$$

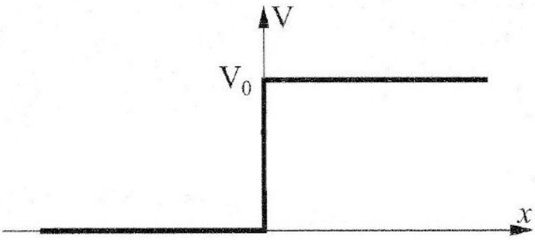
6. Exprimer $\psi_{1-2}(x, t)$ puis $|\psi_{1-2}(x, t)|^2$
7. Représenter la densité de probabilité de présence à différents instants afin d'observer l'oscillation de $|\psi_{1-2}(x, t)|^2$
8. Retrouver l'ordre de grandeur de la période d'oscillations à l'aide de l'inégalité de Heisenberg énergie-temps.

5

Réflexion et transmission d'une particule quantique

Application 2 : Marche de potentiel

Dans un métal, les électrons de conduction sont libres de se déplacer au sein du matériau. Par contre, ils n'ont pas l'énergie suffisante pour sortir du matériau, à moins qu'on leur fournisse l'énergie nécessaire appelé travail d'extraction.
On modélise l'interface vide-métal par une marche de potentiel :



1. Prévision classique : Que prévoit la mécanique classique pour $E < V_0$ et pour $E > V_0$

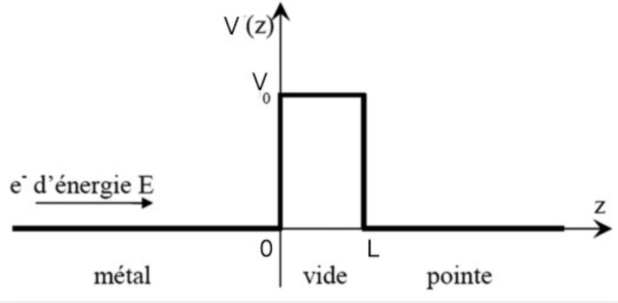
2. On se place maintenant dans le cadre de la mécanique quantique. L'électron dans un état stationnaire est décrit par une fonction d'onde solution de l'équation de Schrödinger. Déterminer les états stationnaires de l'électron dans tout l'espace lorsque $E < V_0$.
3. On prend $V_0 - E = 4.3\,\text{eV}$. Sur quelle distance les effets quantiques se manifestent-ils ?
4. Exprimer les coefficients de réflexion et de transmission en amplitude de probabilités au niveau de la marche de potentiel.
5. Exprimer les vecteurs densité de courant associés aux flux incident, réfléchi et transmis au niveau de la marche de potentiel et en déduire les probabilité de réflexion et de transmission au niveau de la marche de potentiel définis par :

$$\mathcal{R} = \frac{||\overrightarrow{j_r}(x=0^-,t)||}{||\overrightarrow{j_i}(x=0^-,t)||} \quad \text{et} \quad \mathcal{T} = \frac{||\overrightarrow{j_t}(x=0^-,t)||}{||\overrightarrow{j_i}(x=0^-,t)||}$$

6. On approche de la surface du métal un autre morceau de ce même métal. Représenter le profil du potentiel $V(x)$ formé par ce dispositif. Quel va être l'effet sur les électrons de conduction ?
7. On fournit de l'énergie aux électrons libres du métal de telle sorte que $E = 2V_0$. Reprendre les différentes questions précédentes.

Application :3 : Franchissement d'une barrière de potentiel

Un électron arrive en 0 avec une énergie $E < V_0$.



1. Quel est le comportement classique de la particule ?
2. Déterminer la forme des fonctions d'onde dans les 3 domaines de l'espace.
3. Traduire les propriétés de continuité des fonctions d'onde et de leurs dérivées sous la forme d'un système d'équations.

Le calcul (fastidieux) du coefficient de transmission en probabilité aboutit au résultat suivant :

$$\mathcal{T} = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \mathrm{sh}^2\left(\frac{L}{\delta}\right)}$$

Avec

$$\delta = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}$$

4. Approximation de la « barrière épaisse » : Dans l'hypothèse où $L \gg \delta$, montrer que le coefficient de transmission se met sous la forme :

$$\mathcal{T} = \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} \exp\left(-\frac{2L}{\delta}\right)$$

.

5. Pour un électron d'énergie $E = 2\,\text{eV}$ pénétrant dans une zone modélisée par une barrière de potentiel de largeur $L = 3\,\text{nm}$ portée au potentiel $V_0 = 4\,\text{eV}$. Vérifier l'approximation de la barrière épaisse et calculer la probabilité de traverser la zone.

Microscope à effet tunnel

Introduction à la physique quantique

Dualité onde/corpuscule

Description d'une particule libre

États stationnaires

États non stationnaires

Réflexion et transmission d'une particule quantique