

# Mécanique Quantique



TOUT JOURS INTERACTIF, PUIS QU'IL Y A DES PARTIES QUI SONT UN PEU DIFFICILES  
 1.107 ENCORE PLUS, QU'IL Y A UN PEU !!!

## 1) Etablissement de l'équation de Schrödinger

D'après [Youtube.com (Elearning - Physique) / Quantique - D'où vient l'équation de Schrödinger]

$$E_M = E_C + E_P$$

(relation de Planck  $h$ )  
 Einstein)

$$\frac{p^2}{2m} + V(x,t)$$

Dans le cas d'une particule libre ( $\equiv$  pas d'énergie potentielle externe).

$$E_M = E_C$$

$$h\nu = \frac{p^2}{2m}$$

$$\Rightarrow h\nu = \frac{p^2}{2m}$$

$p = \hbar k$  (relation de De Broglie)

$$\Rightarrow \boxed{h\nu = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}}$$

(RELATION DE DISPERSION PARTICULAIRE)

particule ( $\equiv$  onde longitudinale)

progressive

Existe-t-il un système d'équation différentielle d'onde  $\vec{\Psi}(\vec{or}, t)$  qui vérifie l'équation de dispersion  $h\nu = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$  ???

EN SUPPOSANT UNE ONDE PLANE PROGRESSIVE D'EQUATION MATHEMATIQUE  $\vec{\Psi}(\vec{or}, t) = \vec{\Psi}_0 e^{i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})}$   
 ET EN TRAVAILANT A UNE DIMENSION:  $\vec{\Psi}(x, t) = \vec{\Psi}_0 e^{-i(\omega t - \frac{p \cdot x}{\hbar})}$

$$\boxed{\frac{\partial \vec{\Psi}(x, t)}{\partial t} = -i\omega \vec{\Psi}(x, t)}, \quad \frac{\partial^2 \vec{\Psi}(x, t)}{\partial t^2} = -\omega^2 \vec{\Psi}(x, t)$$

$$\frac{\partial \vec{\Psi}(x, t)}{\partial x} = i\hbar \vec{\Psi}(x, t), \quad \frac{\partial^2 \vec{\Psi}(x, t)}{\partial x^2} = -\hbar^2 \vec{\Psi}(x, t)$$

$$\Rightarrow \hbar \omega \vec{\Psi}(x,t) = i \hbar \frac{\partial \vec{\Psi}}{\partial t}$$

et

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \vec{\Psi}(x,t) = - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \vec{\Psi}}{\partial x^2}$$

$\Rightarrow$  L'équation suivante permet d'obtenir la relation de dispersion souhaitée.

$$\boxed{i \hbar \frac{\partial \vec{\Psi}}{\partial t} = - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \vec{\Psi}}{\partial x^2}}$$

(Équation de Schrödinger pour une particule libre)

Si l'on rajoute une énergie potentielle externe, l'équation de Schrödinger devient

$$\boxed{i \hbar \frac{\partial \vec{\Psi}(x,t)}{\partial t} = - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \vec{\Psi}(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t) \vec{\Psi}(x,t)}$$

Généralisation à tous les systèmes de coordonnées avec le Laplacien vectoriel.

$\rightarrow$

$$i \hbar \frac{\partial \vec{\Psi}(\vec{O}\vec{H}, t)}{\partial t} = - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \vec{\Psi}(\vec{O}\vec{H}, t) + V(\vec{O}\vec{H}, t) \vec{\Psi}(\vec{O}\vec{H}, t)$$

(en général, le variable  $\vec{r}$  remplace  $\vec{O}\vec{H}$  :

$$\boxed{i \hbar \frac{\partial \vec{\Psi}(\vec{r}, t)}{\partial t} = - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \vec{\Psi}(\vec{r}, t) + V(\vec{r}, t) \vec{\Psi}(\vec{r}, t)}$$

Remarque 1: il s'agit d'une équation de diffusion alors qu'on l'a obtenue avec une onde

Remarque 2: l'onde utilisée pour obtenir l'équation de Schrödinger est une onde plane progressive, comment modéliser un comportement particulier ( $\equiv$  localisé dans l'espace)?

## 2) Etats Stationnaires :

D'après [YouTube.com (Optimal Sup-Spé - Groupe Ipe-sup)] / Mécanique quantique cours math spé.  
[Equation de Schrödinger ...]

Pour savoir comment la fonction d'onde se comporte au cours du temps et dans l'espace, il faut résoudre l'équation de Schrödinger



Pour simplifier l'analyse on ne considère que le cas où l'énergie potentielle est indépendante du temps  $V(\vec{r}, t) = V(\vec{r})$

C'est-à-dire le système est conservatif

Dans ces conditions, l'équation de Schrödinger a une dimension réelle

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V(x) \Psi$$

ETATS STATIONNAIRES = LA PROBABILITÉ DE TROUVER LA PARTICULE A UN ENDROIT  $r$  NE DEPEND PAS DU TEMPS

$$dP(\vec{r}, t) = |\vec{\Psi}(\vec{r}, t)|^2 = dP(\vec{r}) \quad (\text{LE MODULE DE } \Psi \text{ NE DEPEND PAS DE } t)$$

MAIS  $\vec{\Psi}(\vec{r}, t)$  DEPEND DU TEMPS

⇒ POUR DES ETATS STATIONNAIRES TOUTE LA DÉPENDANCE TEMPORÈLLE EST CACHÉE DANS LA PHASE !!!

ON APPELLE ETAT STATIONNAIRE, UNE FONCTION D'ONDE QUI SE DÉVELOPPE DANS  $\psi$  COMME UN PRODUIT D'UNE FONCTION QUI NE DEPEND UNIQUÈMENT DU TEMPS AVEC UNE FONCTION QUI NE DEPEND QUE DE L'ESPACE



## GROSSE SUBTILITÉ :

- Pour des ondes stationnaires en mécanique classique, elles sont modélisées par la partie réelle qui peut être séparée

$$A e^{i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})}$$

→ Ne modélise pas une onde stationnaire  
car  $A e^{i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})} = A e^{i\omega t} \cdot e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}}$

(mais)

$$\begin{aligned} A \operatorname{Re}(e^{i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})}) &= A \operatorname{Re}(e^{i\omega t}) \cdot \operatorname{Re}(e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}}) \\ &= A \cos(\omega t) \cdot \cos(\vec{k} \cdot \vec{r}) \end{aligned}$$

modélise une onde stationnaire

- Pour les états stationnaires en mécanique quantique :

$$A e^{i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})} = A e^{i\omega t} \cdot e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} \text{ modélise un état}$$

stationnaire car la fonction est séparable dans  $\psi$

en une fonction qui ne dépend que du temps et une

fonction qui ne dépend que de l'espace !!!

Lorsqu'on a des états stationnaires en  $t$

Pour un état stationnaire (en mécanique quantique)  $\tilde{\Psi}(\vec{r}, t) = \Psi(\vec{r}) \cdot g(t)$

$$\Rightarrow |\Psi(\vec{r}, t)|^2 = |\Psi(\vec{r})|^2 |g(t)|^2$$

Comment s'écrit l'équation de Schrödinger pour des états stationnaires ?

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + V(r) \Psi$$

$$= H(\Psi) \text{ ou } H\Psi$$

↖ En posant  $H$  l'opérateur Hamiltonien qui agit sur les fonctions d'onde,

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r})$$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = i\hbar \Psi(\vec{r}) g'(t)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} g(t) \Delta \Psi(\vec{r}) + V(\vec{r}) g(t) \Psi(\vec{r})$$

⇒ Pour des états stationnaires, l'équation de Schrödinger prend la forme.

$$i\hbar \Psi(\vec{r}) g'(t) = -\frac{\hbar^2}{2m} g(t) \Delta \Psi(\vec{r}) + V(\vec{r}) g(t) \Psi(\vec{r})$$

En se plaçant dans le cas générale où l'on peut diviser par  $g(t)$  et  $\Psi(\vec{r})$  qui ne sont pas nuls. (AFIN DE REGROUPER SÉPARÉMENT LES VARIABLES DIFFÉRENTES DE CHAQUE CÔTÉ DE L'ÉQUATION)

$$i\hbar \frac{g'(t)}{g(t)} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta \Psi(\vec{r})}{\Psi(\vec{r})} + V(\vec{r})$$

$$i\hbar \frac{g'(t)}{g(t)} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta\psi(\vec{r})}{\psi(\vec{r})} + V(\vec{r})$$

Fonction de t uniquement
Fonction de  $\vec{r}$  uniquement

Ainsi si  $\vec{r}$  est fixé et t change, le terme de gauche ne change pas

Et

de la même manière si t est fixé et  $\vec{r}$  change, le terme de gauche ne change pas

$$\Rightarrow i\hbar \frac{g'(t)}{g(t)} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta\psi(\vec{r})}{\psi(\vec{r})} + V(\vec{r}) = \text{CONSTANTE}$$

$\uparrow$  NOTÉ E

1

3) Déviation temporelle du comportement ondulatoire pour justifier une diffraction

DANS LE CAS D'ÉTAT STATIONNAIRE AVEC UN POTENTIEL CONSTANT DANS LE TEMPS, L'ÉQUATION DE SCHRÖDINGER DEVIENT :

$$i\hbar \frac{g'(t)}{g(t)} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta \Psi(\vec{r})}{\Psi(\vec{r})} + V(\vec{r}) = -E$$

EN PARTICULIER, LA DESCRIPTION TEMPORALE DE L'ÉQUATION DE SCHRÖDINGER DONNE :

$$i\hbar \frac{g'(t)}{g(t)} = -E$$

$$\rightarrow g'(t) + \frac{E}{i\hbar} g(t) = 0$$

$$\Rightarrow g(t) = g_0 e^{+\frac{iE}{\hbar} t} = g_0 e^{-\frac{Et}{i\hbar}} = g_0 e^{+i\omega t}$$

!!! L'ONDE DÉCROÎT TRÈS RAPIDEMENT DANS LE TEMPS

$\Rightarrow$  L'ÉQUATION DE SCHRÖDINGER N'EST PAS UNE ONDE  $\left( \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} \sim \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} \right)$  MAIS D'UNE

DIFFUSION  $\left( \frac{\partial \Psi}{\partial t} \sim \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} \right)$  ET CETTE DIFFUSION EST OBTENUE

EN SUPPOSANT UNE ONDE QUI DÉCROÎT TRÈS RAPIDEMENT DANS LE TEMPS !!!

$\Rightarrow$  CONCLUSION : LA CONDITION POUR POUVOIR AVOIR UNE ÉQUATION D'ONDE SOLUTION DE L'ÉQUATION DE SCHRÖDINGER EST QUE CELLE-CI S'ATTÉNUÉ TRÈS RAPIDEMENT DANS LE TEMPS DONC CETTE ONDE SE PROPAGÈRE !!!

Ainsi, l'équation de Schrödinger des états stationnaires, aussi appelée équation de Schrödinger invariante dans le temps (Time Invariant Schrödinger Equation):

$$\begin{cases} \vec{\Psi}(\vec{r}, t) = g(t) \Psi(\vec{r}) \\ g(t) = g_0 e^{-i \frac{E}{\hbar} t} \end{cases}$$

$$\Rightarrow \vec{\Psi}(\vec{r}, t) = g_0 e^{-i \frac{E}{\hbar} t} \Psi(\vec{r})$$

En remplaçant cette solution dans l'équation de Schrödinger des états stationnaires:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} g_0 \Psi(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} g_0 e^{-i \frac{E}{\hbar} t} \Delta \Psi(\vec{r}) + \overbrace{V(\vec{r}, t) g_0 e^{-i \frac{E}{\hbar} t} \Psi(\vec{r})}^{V(\vec{r}) : \text{énergie potentielle stationnaire et continue par morceaux souvent utilisée}}$$

Mais comme pour des états stationnaires :

$$\hbar \frac{g'(t)}{g(t)} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta \Psi(\vec{r})}{\Psi(\vec{r})} + V(\vec{r}) = E$$

constante : l'énergie totale de la particule

Comme le comportement temporel est connu pour des états stationnaires, dans ce cas, la résolution de l'équation de Schrödinger se réduit à l'étude du comportement spatial de la particule unguenel :


$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta \Psi(\vec{r})}{\Psi(\vec{r})} + V(\vec{r}) = E$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\vec{r}) + V(\vec{r}) \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r})$$

$$\Rightarrow H \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r}) \quad \text{avec } H \text{ l'opérateur Hamiltonien} \quad H = (\Delta + V(\vec{r}))$$

4) Interprétation de la fonction d'onde, de son élévation au carré et de sa vitesse de propagation

$$\Psi: \mathbb{R}^4 \rightarrow \mathbb{C}$$

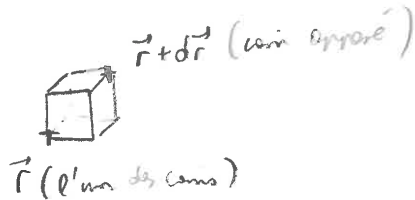
À t fixé,  $|\Psi(x, y, z, t)|^2$  est la densité de présence de la particule en un point  $M \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$   
 (dans un volume élémentaire  $dr^3$  autour de  $M$ : 

Remarque: relation mathématique entre la probabilité et la densité de probabilité  $\int_a^b f(x) dx$  (référence à un cours Galilée)

$$P(a \leq x \leq b) = \int_a^b f(x) dx$$

$$\Rightarrow dP = f(x) dx$$

par dérivation



La probabilité de trouver une particule dans ce cube est infinitésimale petite, c'est une densité de probabilité

$$dP = |\vec{\Psi}(\vec{r}, t)|^2 dr^3 \text{ (3)}$$

de fois noté  $dr^3$  pour indiquer qu'il s'agit d'un volume



À CHAQUE fois qu'on s'intéresse À UNE PROBABILITÉ INFINITESIMALE, IL S'AGIRA D'UNE DENSITÉ DE PROBABILITÉ

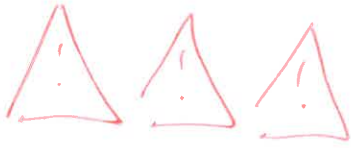
Pour obtenir la probabilité de trouver une particule dans une portion de l'espace de volume  $V$ , il faut intégrer dans l'espace considéré

$$P_V = \int_V dP = \iiint_V |\vec{\Psi}(\vec{r}, t)|^2 dr^3 \text{ (3)}$$

LA PROBABILITÉ EST MACROSCOPIQUE ET LA DENSITÉ DE PROBABILITÉ EST MICROSCOPIQUE !!!

⇒ IL NE FAUDRA PAS OUBLIER

En 1 Dimension, la valeur moyenne de  $\vec{\Psi}(x,t)$  à l'instant:  $\langle \Psi \rangle_t = \int_{\mathbb{R}} x dP = \int_{\mathbb{R}} x |\vec{\Psi}(x,t)|^2 dx$



IL S'AGIT DU CARRÉ DE LA FONCTION D'ONDE

ET NON LA FONCTION D'ONDE ELLE MÊME QUI EST

PROPORTIONNELLE À UNE DENSITÉ DE PROBABILITÉ DE TROUVER LA PARTICULE À UN ENDRUIT !!!

$$\frac{dP}{dV} = |\vec{\Psi}(\vec{r}, t)|^2$$

Densité de probabilité car il s'agit d'une probabilité qui tend vers 0

EXPLICATION : CELA PERMET DE MODÉLISER LES PHÉNOMÈNES D'INTERFÉRENCES !!! (PAR EXEMPLE LES INTERFÉRENCES DES ÉLECTRONS PASSANT DANS LES TROUS D'YOUNG) DE MANIÈRE IDENTIQUE À L'OPTIQUE ONDULAIRE

$$\vec{E}_1(\vec{r}, t) + \vec{E}_2(\vec{r}, t) = \vec{E}_{\text{tot}}(\vec{r}, t) \quad \vec{\Psi}_1(\vec{r}, t) + \vec{\Psi}_2(\vec{r}, t) = \vec{\Psi}_{\text{tot}}(\vec{r}, t)$$

↑  
Champ électrique

(les champs  $\vec{E}_i$  s'additionnent tout le temps, il s'agit de polarité) de fais

$$I_{\text{tot}} \propto \langle E_{\text{tot}}^2 \rangle = \langle E_1^2 \rangle + \langle E_2^2 \rangle$$

+ Terme d'interférence

(car il s'agit d'onde)

$$dP_{\text{tot}} \propto |\Psi_{\text{tot}}|^2 = |\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2$$

+ Terme d'interférence de ...

OPTIQUE ONDULAIRE

MÉCANIQUE QUANTIQUE

La démonstration de l'existence de l'infimum est donnée dans (Phragmén-Bout  
50-11, PG, P<sup>1</sup>, M. N. Sany, p. 1103)

Pour des états stationnaires :

$$\begin{aligned}\vec{\Psi}(\vec{r}, t) &= \psi_0(t) \varphi(\vec{r}) \\ &= e^{-i \frac{K}{E} t} \varphi(\vec{r})\end{aligned}$$

$$\Rightarrow \frac{dP}{dr^3} = |\vec{\Psi}(\vec{r}, t)|^2 = \left| e^{-i \frac{K}{E} t} \varphi(\vec{r}) \right|^2 = \underbrace{\left| e^{-i \frac{K}{E} t} \right|^2}_{1} |\varphi(\vec{r})|^2$$

$$\Rightarrow \frac{dP}{dr^3} = |\varphi(\vec{r})|^2$$

$$\Rightarrow dP = |\varphi(\vec{r})|^2 dr^3$$

pour des états stationnaires !!!

5) Onde plane localisée dans l'espace et dans le temps obtenue par création d'un paquet d'onde plane.



EN ACOUSTIQUE OU DANS LA  
NATURE UNE ONDE LOCALISÉE  
PEUT SE PROPAGER



MAIS EN PHYSIQUE ET DANS  
L'ÉQUATION DE SCHRÖDINGER  
ON MANIPULE DES ONDES  
PROGRESSIVES QUI FONT  
VIBRER TOUT L'ESPACE ET  
TOUT LE TEMPS (à nuance près,  
DE MODÉLISATION MATHEMATIQUE)

$$A e^{i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})}$$



METHODE MATHÉMATIQUE POUR MODÉLISER UNE ONDE LOCALISÉE (ONDE POUVRAIT REPRÉSENTER UNE PARTICULE) À PARTIR D'ONDES PLANES PROGRESSIVES

INFINIES D'ÉQUATION MATHÉMATIQUES :  $\Psi(\vec{r}, t) = \vec{\Psi}_0 e^{i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})}$   
 ↑ (amplitude) ↑ propagation  
 (onde transverse)

- LOCALISATION DANS L'ESPACE (DROMULAIRE SPATIAL)

$$\vec{\Psi}(\vec{r}, t) = \vec{\Psi}_0 e^{i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})} = \vec{\Psi}_0 e^{i\omega t} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}}$$

AINSI SI L'ON INTÈGRE EN FONCTION DE  $\vec{k}$  :

$$\int \vec{\Psi}(\vec{r}, t) d\vec{k} = \int \vec{\Psi}_0 e^{i\omega t} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} d\vec{k} \rightarrow \text{ON FAIT UNE TRANSFORMÉE DE FOURIER PAR RAPPORT À } \vec{k}$$

$\Rightarrow$  DÉCOMPOSITION EN  $\vec{k}$  HARMONIQUES DE  $\vec{\Psi}(\vec{r}, t)$

POUR ÊTRE DE FAIRE AUSSI LA TRANSFORMÉE DE FOURIER DU PARTI TEMPOREL  $e^{i\omega t}$  QUI EST LIÉ À  $\vec{k}$  PAR LA RELATION DE DISPERSION :  $v_{\text{ph}} = \frac{\omega}{k} \Rightarrow \omega = v_{\text{ph}} k$

ON ÉCRIT  $\omega$  EN FONCTION DE  $k$

POUR MODÉLISER LES MILIEUX DISPERSIFS :  $v_{\text{ph}}$  DÉPEND DE  $k \Rightarrow v_{\text{ph}}(k)$

OU DE MANIÈRE SIMILAIRE  $\omega(k) = v_{\text{ph}}(k) k$

UN DÉVELOPPEMENT LIÉGÉ AUTOUR DE  $k = k_0$  (POLYNOMISATION DE LA

RELATION) PERMET ALORS DE MODÉLISER AUSSI LA DISPERSION DE  $v_{\text{ph}}$

EN FONCTION DE  $k$

$$\omega(k) \approx \underbrace{\omega(k_0)}_{\omega_0} + \left( \frac{\partial \omega}{\partial k} \right) (k - k_0)$$

"v<sub>g</sub>"

Ainsi, la transformée de Fourier selon  $k$  de la fonction d'onde:

$$\int \vec{\Psi}(\vec{r}, t) dk = \int \vec{\Psi}_0 e^{i(\omega_0 t + v\phi(k-k_0)t) - ikr} dk$$

$$= e^{i(\omega_0 t - v\phi k_0 t)} \int \vec{\Psi}_0 e^{-ik(r - v\phi t)} dk$$

$$= \underbrace{C(t)}_{\text{On retrouve les}} \int \vec{\Psi}_0 e^{-ik(r-r_0)} dk \equiv \text{TRANSFORMÉE DE FOURIER CIRCULAIRE DES } k \text{ PÉTANNÉES}$$

On retrouve les

éléments de la constante

permet lequel il paramétrise de l'équation de Schrödinger

⇒ FORMULE VARIABLE UNIQUEMENT POUR LES ÉTATS STATIONNAIRES ??

L'INTERET DE FAIRE LA TRANSFORMATION DE FOURIER EST QU'UN

SIGNAL LOCAL EN POSITIONNE CORRESPOND À UN SIGNAL ÉTENDU

EN TEMPS ET INVERSEMENT

⇒ ON AIT ICI LA TRANSFORMATION DE FOURIER DANS LE SPATIAL

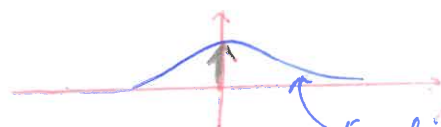
DES LONGUEURS D'ONDE DONC LA TRANSFORMATION INTERCHANGÉ

AU SENS SPATIAL

Ainsi si l'on veut connaître le signal SPATIAL, IL FAUT SORTIR DU

LE SPATIAL EN POSITIONNE POUR NE PAS QU'IL SOIT ÉTENDU

D'UN CÔTÉ !!!



En élargissant le spectre spatial, on crée un signal spatial qui réduit la largeur du signal spectral

Ainsi pour modéliser une onde localisée à partir d'ondes planes progressives, il faut synthétiser le signal pour créer un phénomène de bruitage stationnaire !!!

$$\vec{\Psi}_{\text{localisée}}(\vec{r}, t) = \int \vec{\Psi}_0 \cdot e^{i(\omega(k)t - \vec{k} \cdot \vec{r})} dk$$



Somme des  $\Psi_0(k)$

Pour modéliser une somme d'ondes progressives (voisines)

$$= \int \vec{\Psi}_0(k) e^{i(\omega(k)t - \vec{k} \cdot \vec{r})} dk$$

$$= \int \vec{\Psi}_0(k) e^{i\left(\omega(k_0) + \frac{\partial \omega}{\partial k}(k - k_0)\right)t - \vec{k} \cdot \vec{r}} dk$$

$$= e^{i(\omega_0 t - v_g k_0 t)} \int \vec{\Psi}_0(k) e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{r} - v_g k t)} dk$$

VARIABLE UNIQUEMENT

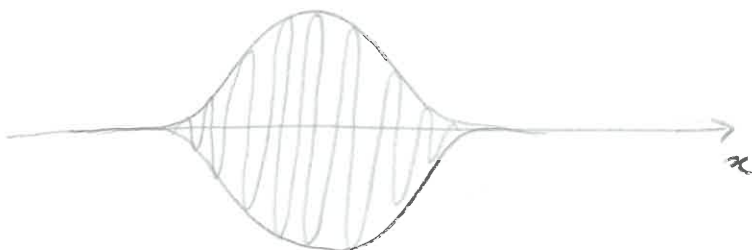
SI LE COMPORTEMENT SPATIAL

PENT ÊTRE SÉPARÉ DU COMPORTEMENT

TEMPOREL DANS  $\phi$ , C'EST

À DIRE POUR DES ÉTATS QUANTUMES STATIONNAIRES !!!

⇒ UN PAQUET D'ONDE SPATIAL LOCALISANT LES ONDES DANS UN ENDROIT PARTICULIER DE L'ESPACE EST DONC CRÉÉ À PARTIR D'ONDES PLANES PROGRESSIVES FAISANT INTERVENIR UN PHÉNOMÈNE DE BRUITAGE (Σ D'ONDES PROGRESSIVES VOISINNES) DONT LA MODÉLISATION MATHÉMATIQUE UTILISE LA TRANSFORMÉE DE FOURIER INVERSE



- LOCALISATION DANS LE TEMPS (BROUILLAGE TEMPOREL  $\equiv$  BROUILLAGE EN ÉNERGIE)

- En reprenant la méthode précédente et en créant un brouillage temporel afin de générer un paquet à onde limitée temporellement à partir d'ondes planes progressives infinies

$$\begin{aligned} \vec{\Psi}_{\text{localisé}}(\vec{r}, t) &= \int \varphi_0 e^{i(\omega t - \vec{k}(\omega) \cdot \vec{r})} \\ &= \int \varphi_0(\omega) e^{i\omega t - (k_0 + \frac{\partial k}{\partial \omega}(\omega - \omega_0))r} \\ &= e^{+i(k_0 - \frac{\omega_0}{v_{\text{gr}}})r} \int \varphi_0(\omega) e^{i(\omega t - \frac{\omega}{v_{\text{gr}}} \cdot r)} d\omega \\ &= D(r) \int \varphi_0(\omega) e^{i(\omega t - \frac{\omega}{v_{\text{gr}}} \cdot r)} d\omega \end{aligned}$$

Pour des états quantiques stationnaires uniformes

- En remarquant qu'un état quelconque peut être décomposé comme une combinaison linéaire d'états quantiques stationnaires

$$\begin{aligned} \vec{\Psi}(\vec{r}, t) &= \sum c_n \Psi_n^{\text{stationnaire}}(\vec{r}, t) \\ &= \sum c_n g_n(t) \varphi_n(\vec{r}) \\ &= \sum c_n g_n e^{+i \frac{\hbar}{E_n} t} \varphi_n(\vec{r}) \\ &= c_1 g_1 e^{+i \frac{\hbar}{E_1} t} \varphi_1(\vec{r}) + c_2 g_2 e^{+i \frac{\hbar}{E_2} t} \varphi_2(\vec{r}) + c_3 g_3 e^{+i \frac{\hbar}{E_3} t} \varphi_3(\vec{r}) + \dots \end{aligned}$$

les termes  $e^{+i \frac{\hbar}{E_n} t}$  ne peuvent pas être factorisés car les énergies sont différentes

$\Rightarrow$  le comportement temporel des états non stationnaires n'est pas une exponentielle décroissante comme pour les états stationnaires  $\Rightarrow$  un phénomène de brouillage temporel

$\Rightarrow$  l'ajout de nombreux états quantiques stationnaires crée un ajout d'énergie ( $\equiv$  de fréquences) créant un élargissement spectral des fréquences

## PHÉNOMÈNE(S) DE BRUILLAGE

Un phénomène de bruyage empêche de voir les interférences.

Il peut s'agir d'une source frontalement étendue  $\Rightarrow$  les interférences ne sont possibles que sur un très court interval de temps

Il peut s'agir d'une source spatialement étendue  $\Rightarrow$  on considérant une source spatialement étendue comme une infinité de sources ponctuelles voisines, les ondes émises par les sources voisines empêchant de voir les phénomènes d'interférences.

DANS UN DÉVELOPPEMENT EXTREMEMENT ÉLEGANT DE [Physique - Tout - En - Un, PC, PC<sup>2</sup>, M.N. Sany, p. 1167], L'EXPÉRIENCE DES TROUS D'YOUNG AVEC ÉLECTRONS LORSQU'UN DÉTECTEUR EST PLACÉ PRÈS DE L'UN DES TROUS ET QU'ALORS LE PHÉNOMÈNE D'INTERFÉRENCE S'ANNULE, IL EST INDICQUÉ QUE NIELS BOHR AURAIT DIT À ALBERT EINSTEIN QUE LORSQU'UN DÉTECTEUR EST PLACÉ PRÈS D'UN DES TROUS, IL INTRODUIT UNE INCERTITUDE SPATIALE SUR CE TROU TRÈS IMPORTANTE (DU FAIT DU POIDS PAR EXEMPLE DU DÉTECTEUR QUI TROUBLE LA SOURCE SECONDAIRE) EFFECTUANT AINSI UN BRUILLAGE TRÈS IMPORTANT SUR LA SOURCE SECONDAIRE QUI NE PERMETTRAIT PLUS DE VOIR LES INTERFÉRENCES!!!



???

IL SERAIT BEAUCOUP PLUS

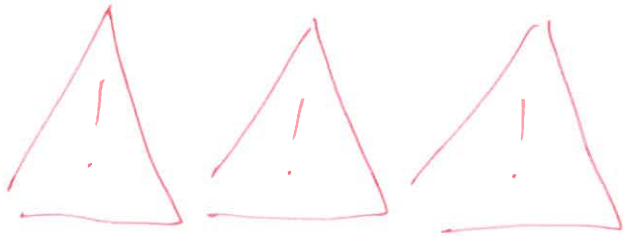
INTERRESSANT DE MODÉLISER MATHÉMATIQUEMENT

(DE FAÇON SIMPLE) UNE ONDE LOCALISÉE

ET DE PÉRIODER L'ÉQUATION DE

SCHRODINGER AVEC CETTE ONDE LOCALISÉE

(MODÉLISATION D'UNE DIFFUSION GAUCHIENNE  
... ET UNE MODÉLISATION PAR UNE ONDE LOCALISÉE)



LA VITESSE DE GROUPE

N'EST PAS EGALE À LA

VITESSE DE PHASE !!!

⇒ UN PAQUET D'ONDE

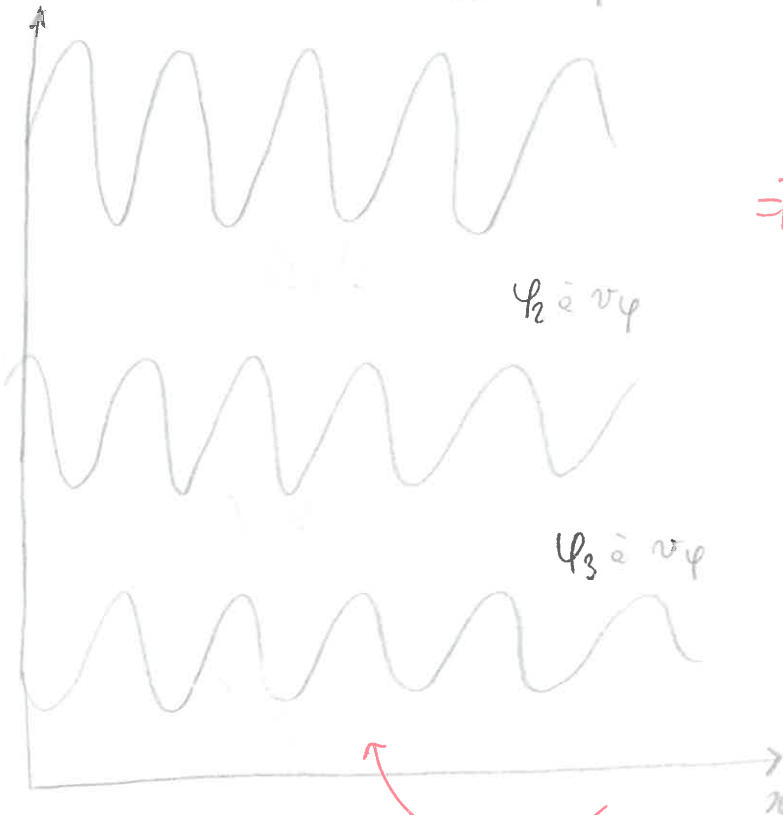
VA MOINS VITE QUE

CHACUNE DES ONDES SEULES

QUI VONT À LA MÊME

VITESSE (LA VITESSE DE

PHASE  $v_\varphi$ )



POUR CRÉER UN PAQUET D'ONDE  
PRENDRE DES ONDES

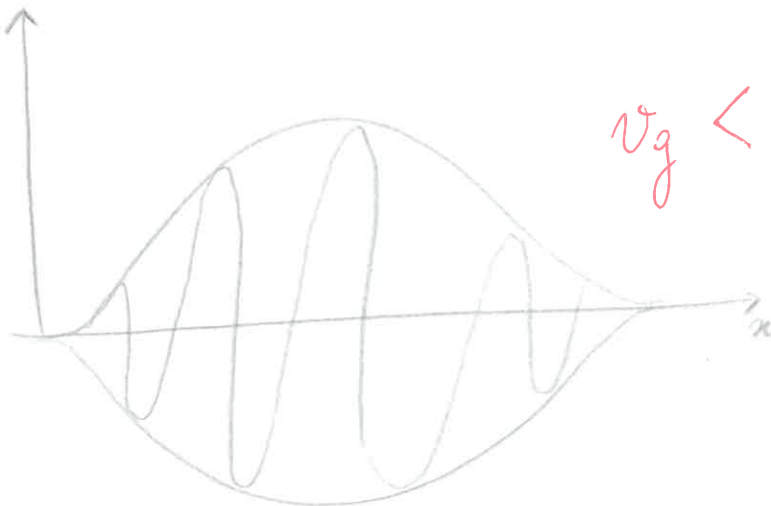
- MÊME FREQUENCE, PHASE DIFFÉRENTE

- FREQUENCE DIFFÉRENTE, MÊME PHASE (PHÉNOMÈNES DE  
BATTLEMENTS)

NE PERMET PAS DE CRÉER  
UN PAQUET D'ONDE  
CRÉE UN PAQUET D'ONDES  
SPATIAL !!!

MAS

$$\psi_{TOT} = \sum \psi_i = \psi_1 + \psi_2 + \psi_3$$



$v_g < v_\varphi$  !!!

Rappel:  $v_\varphi = \frac{\omega}{k}$  (relation de dispersion)

$v_g = \frac{d\omega}{dk}$  (dérivée d'une onde  
corpusculaire,  
formule de  
de Broglie)

$$e^{i(\omega t - kx)}$$

Somme de fréquences voisines

⇒ battements

⇒ paquet d'onde temporel

Somme de phase voisine

⇒ paquet d'onde spatial

⇒ mouvement de la particule associée

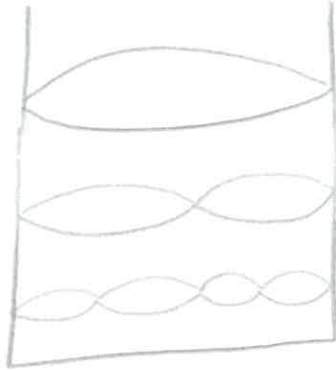


MODÉLISATION TROP  
MATHÉMATIQUE DU  
DÉPLACEMENT DE LA PARTICULE  
PAR UN PAQUET  
D'ONDES

⇒ PERTE DU SENS

PHYSIQUE ??

# 5) Quantification des énergies



Vision ondulatoire

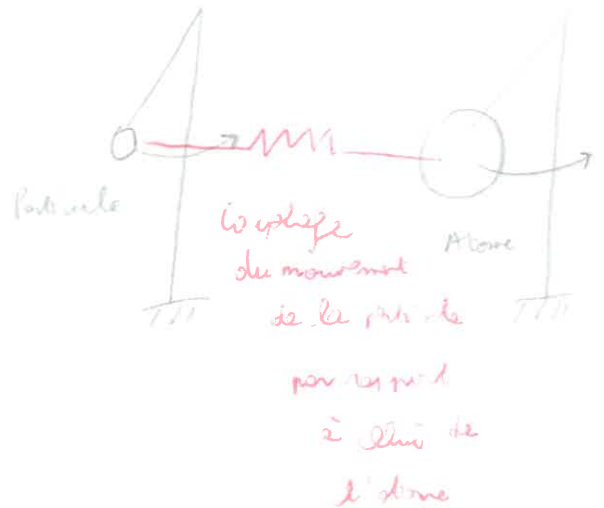
⇒ ONDES STATIONNAIRES



LE PHÉNOMÈNE DE QUANTIFICATION DES ÉNERGIES  
N'APPARAÎT QUE DANS LES Puits D'ÉNERGIE

POTENTIEL ET NON DANS LES BARRIÈRES

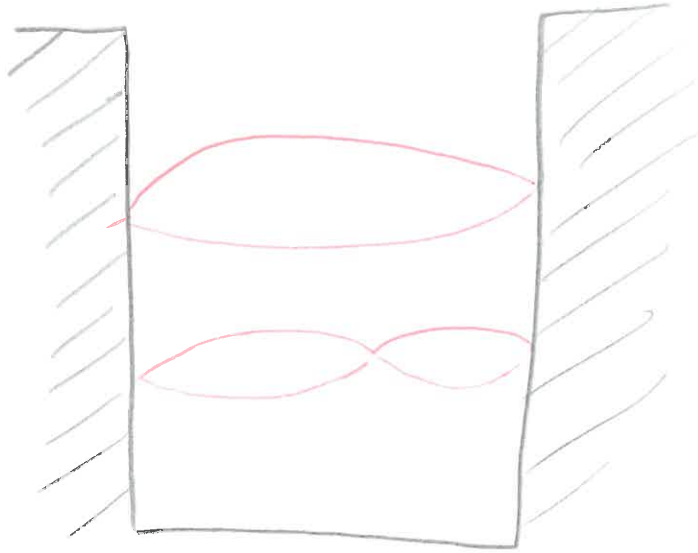
D'ÉNERGIES POTENTIELLES !!!



Vision corpusculaire

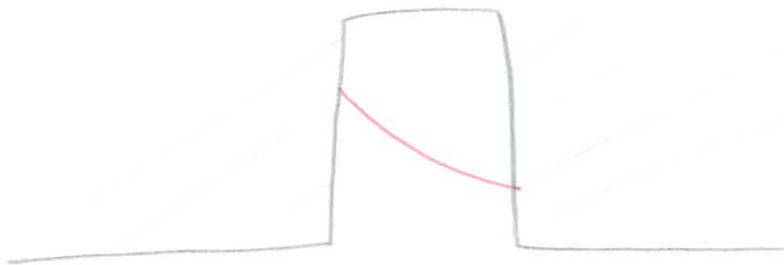
⇒ COUPLAGES DE RESSORTS

D'après les calculs développés dans [Physique - Tout - En - Un, PC, PC<sup>20</sup>, M. N. Seng, Chapitre 34,  
Evolution d'une particule quantique dans un potentiel]



Ondes stationnaires possibles dans un puits de potentiel

≡ la particule peut être piégée par l'atome



Ondes stationnaires non possible dans une barrière de potentiel

≡ la particule est repoussée par les forces coulombiennes  
autour de l'atome

≡ la particule est repoussée par les électrons autour de l'atome

# Détermination de l'énergie d'un état stationnaire :

D'après l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \vec{\Psi}(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \vec{\Psi}(\vec{r}, t)}{\partial x^2} + \underbrace{V(\vec{r}, t)}_{\substack{\text{Souvent on considère} \\ \text{un potentiel stationnaire } V(\vec{r})}} \vec{\Psi}(\vec{r}, t)$$

↳ 0 si la particule est libre

Pour des états stationnaires ET pour un potentiel stationnaire: (si on le fait passer dans l'équation temporelle)

$$i\hbar \frac{d g(t)}{dt} = E g(t) \Rightarrow i\hbar g'(t) = E g(t)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta \psi(\vec{r})}{\psi(\vec{r})} + V(\vec{r}) = E \Rightarrow \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}) + V(\vec{r}) \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r})$$

mais

$$i\hbar \frac{\partial \vec{\Psi}(\vec{r}, t)}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \vec{\Psi}(\vec{r}, t) + V(\vec{r}, t) \vec{\Psi}(\vec{r}, t) \neq E \vec{\Psi}(\vec{r}, t)$$

$$i\hbar \frac{\partial \vec{\Psi}(\vec{r}, t)}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \vec{\Psi}(\vec{r}, t) + \underbrace{V(\vec{r}, t) \vec{\Psi}(\vec{r}, t)}_{\propto E_p \vec{\Psi}(\vec{r}, t)}$$

$$\begin{aligned} & \propto E_c \vec{\Psi}(\vec{r}, t) \\ & \propto E_m \end{aligned}$$

Détermination de la constante d'énergie totale (= énergie mécanique  $E (= E_m)$ )

$$E = E_m = h\nu = \hbar\omega \rightarrow \text{ne remet pas de valeur par rapport à la taille d'un élément quantique (taille d'un puit, d'une barrière de potentiel, ...)}$$

Relation de Planck Einstein

$$E = E_c + E_p = \frac{p^2}{2m} + V \rightarrow = \frac{p^2}{2m} + V_0$$

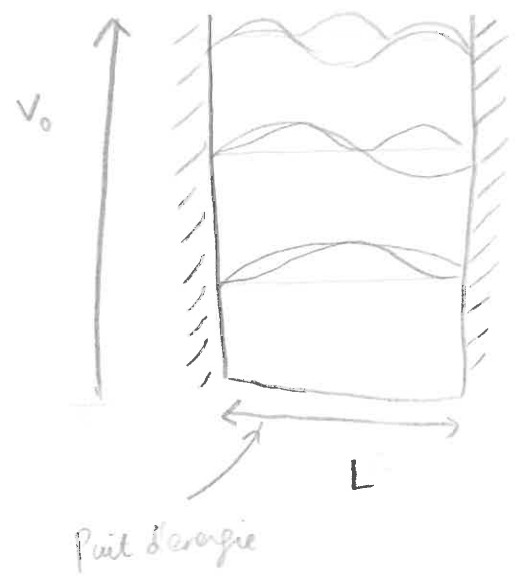
↳ Souvent nul (par exemple, à l'intérieur du puit)

$$E = \frac{p^2}{2m} + V_0$$

$$= \frac{(\hbar k)^2}{2m} + V_0 = \frac{\hbar^2 (2\pi)^2}{\lambda^2 \times 2m} + V_0 = \frac{\hbar^2 (2\pi)^2}{(2\pi)^2 \lambda^2 \times 2m} + V_0$$

↑ longueur d'onde de De Broglie pour des particules quantiques

De plus un état stationnaire se comporte comme une onde stationnaire



$$L = n \frac{\lambda}{2} \Rightarrow \lambda = \frac{2L}{n}$$

⇒ Pour des états stationnaires dans le puit de potentiel

$$E = \frac{\hbar^2 n^2}{8L^2 m}$$

Utilisation de l'indétermination d'Heisenberg sur les états stationnaires (en 1 dimension)

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

" "

L

(taille du puit)

$$\Rightarrow \Delta p \geq \frac{\hbar}{2L}$$

$$E_c = \frac{p^2}{2m} \Rightarrow p = \sqrt{2mE_c} \Rightarrow \Delta p = \sqrt{2m} \sqrt{\Delta E_c}$$

$$\Rightarrow \Delta p = \sqrt{2m} \sqrt{\Delta E_c}$$

Si on suppose que la masse n'est pas relativiste  
(pas d'indétermination sur la masse)

$$\sqrt{2m} \sqrt{\Delta E_c} \geq \frac{\hbar}{2L}$$

$$\Rightarrow \Delta E_c \geq \frac{2m}{(2L)^2} \hbar^2$$

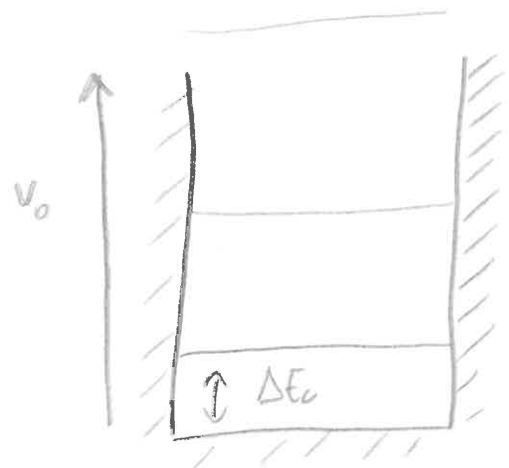
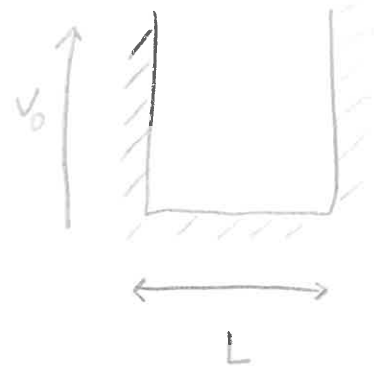
$$\Rightarrow \Delta E_c \geq \frac{m\hbar^2}{2L^2}$$

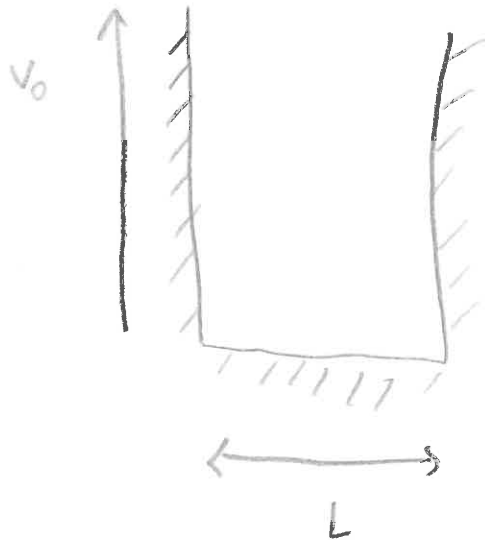
Energie minimale entre deux

états quantiques stationnaires

(lorsque la particule n'a pas d'énergie  
potentielle externe, c'est-à-dire

qu'elle est libre)





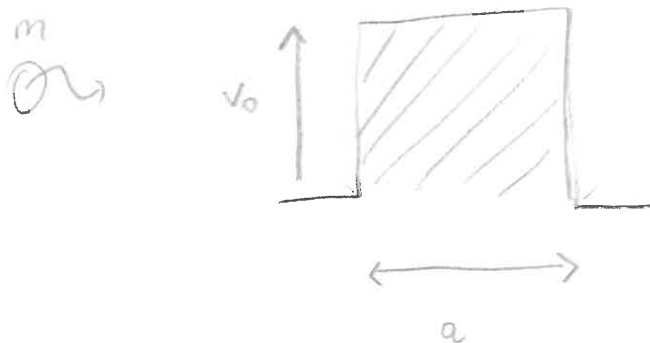
Si on confine la particule, son niveau fondamental d'énergie s'est  
pas nulle  $\Rightarrow$  il s'agit d'une très bonne explication

de l'inégalité d'Herschberg

$\Rightarrow$  plus on la confine, plus elle est à l'étroit et plus  
elle a d'énergie

## Effet tunnel :

D'après [ Philippe - Toulet - En - U.S., PC, PC\*, H.N. Seng, p. 1200 ]



Energie potentielle  $V_0$  continue par morceaux

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < -\frac{a}{2} \text{ (région I)} \\ V_0 > 0 & \text{si } x \in \left[-\frac{a}{2}; \frac{a}{2}\right] \\ 0 & \text{si } x > \frac{a}{2} \text{ (région II)} \end{cases}$$

On considère des états stationnaires, on cherche à résoudre l'équation de Schrödinger indépendante du temps (en 1 Dimension)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V(x) \psi(x) = E \psi(x)$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + (V(x) - E) \psi(x) = 0$$

$$\Rightarrow \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + \frac{(V(x) - E)}{\hbar^2/2m} \psi(x) = 0$$

Equation du second ordre à coefficients constants (ce qui ne serait pas le cas si les bornes n'étaient pas la forme carrée)

- Si  $E > V_0$  (CAS NON INTÉRESSANT)

région I:

Equation caractéristique:  $r^2 + \frac{0-E}{\hbar^2/2m} r = 0 \Rightarrow r_{1,2} = \pm \sqrt{\frac{E}{\hbar^2/2m}} > 0$

$$\Rightarrow \Psi_I(x) = A e^{-r_1 x} + B e^{-r_2 x}$$

$$= A_I e^{-kx} + B_I e^{kx}$$

$$= C_I \cosh(-kx) + D_I \sinh(kx)$$



Solutions sous forme exponentielle si onde qui se propage solution sous forme cos ou sinh si l'onde s'atténue (onde évanescente)

région II

Equation caractéristique:  $r^2 + \frac{V_0-E}{\hbar^2/2m} r = 0 \Rightarrow r_{1,2} = \pm \sqrt{\frac{(E-V_0)}{\hbar^2/2m}} > 0$

$$\Rightarrow \Psi_{II}(x) = A_{II} e^{-k'x} + B_{II} e^{k'x}$$

$$= C_{II} \cosh(k'x) + D_{II} \sinh(k'x)$$

région III (similaire à la région I):

$$\Psi_{III}(x) = A_{III} e^{-kx} + B_{III} e^{kx}$$

$$= C_{III} \cosh(kx) + D_{III} \sinh(kx)$$

Si  $E < V_0$  (CAS INTERESSANT CAR LA MÉCANIQUE CLASSIQUE PRÉVOIT QUE LA PARTICULE NE POURRAIT PAS FRANCHIR LA BARRIÈRE)



region I :  $E$  non nul,  $V_0 = 0 \Rightarrow E - V_0 > 0$

$$r^2 + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) = 0$$

$$r = \pm i \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0)} = \pm i k$$

$$\begin{aligned} \psi(x) &= A e^{i k x} + B e^{-i k x} \\ &= C \sin(kx) + D \cos(kx) \end{aligned}$$

region II :  $E$  non nul,  $V_0 = V_0$  (mais)  $E - V_0 < 0$

$$r^2 - \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) = 0$$

$$r = \pm \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)} = \pm K$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \psi(x) &= A e^{-Kx} + B e^{Kx} \\ &= C \sinh(Kx) + D \cosh(Kx) \end{aligned}$$

region III : similaire à la region I

$$\psi(x) = A e^{i k x} + B e^{-i k x}$$

$$= C \sin(kx) + D \cos(kx)$$



## UTILISATION DES CONDITIONS AUX LIMITES

ET NON PAS DES CONDITIONS INITIALES CAR

IL S'AGIT D'UNE PROPAGATION SPATIALE !!!

Continuité en  $-\frac{a}{2}$  de  $\psi(x)$

$$A_I e^{iKx\frac{a}{2}} + B_I e^{-iKx\frac{a}{2}} = A_{II} \sinh\left(-k\frac{a}{2}\right) + B_{II} \cosh\left(k\frac{a}{2}\right)$$

Continuité en  $\frac{a}{2}$  de  $\psi(x)$

$$A_{II} \sinh\left(k\frac{a}{2}\right) + B_{II} \cosh\left(k\frac{a}{2}\right) = A_{III} e^{-iKx\frac{a}{2}} + B_{III} e^{iKx\frac{a}{2}}$$

Continuité en  $-\frac{a}{2}$  de  $\psi'(x)$

$$iK A_I e^{iKx\frac{a}{2}} - iK B_I e^{-iKx\frac{a}{2}} = -A_{II} k \cosh\left(-k\frac{a}{2}\right) - B_{II} k \sinh\left(k\frac{a}{2}\right)$$

Continuité en  $\frac{a}{2}$  de  $\psi'(x)$

$$k A_{II} \cosh\left(k\frac{a}{2}\right) - k B_{II} \sinh\left(k\frac{a}{2}\right) = -iK A_{III} e^{-iKx\frac{a}{2}} + iK B_{III} e^{iKx\frac{a}{2}}$$

Pas de source d'onde dans la région III  $\Rightarrow B_{III} = 0$

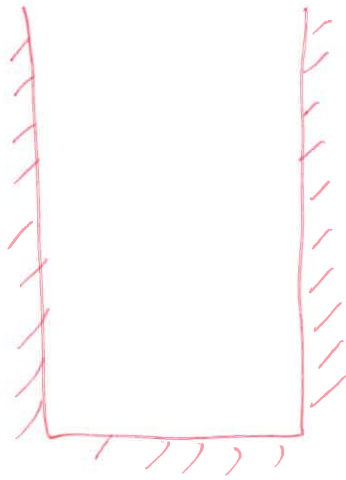
$\Rightarrow$  IL MANQUE UNE EQUATION POUR RESOUDRE LE SYSTEME

$\Rightarrow$  ANNULLATION DE L'ONDE SUR LES BORDS NON OBTENUE AVEC UNE RELATION DE PHASE (PAS ASSEZ D'INCONNUES PAR RAPPORT AU NOMBRE DE VARIABLES)  $\Rightarrow$  PHENOMENE DE REFLEXION TOTALE DANS LA BARRIERE DE POTENTIEL



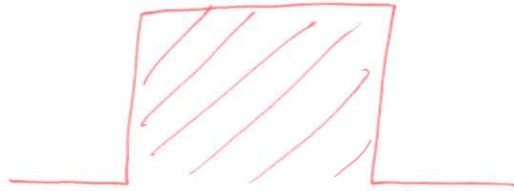
RÉSULTATS TRÈS DIFFÉRENTS DANS LE  
PUIT DE POTENTIEL ET DANS LA  
BARRIÈRE DE POTENTIEL

- DANS LE PUIT DE POTENTIEL



- + 1<sup>ère</sup> D'ÉQUATIONS PAR RAPPORT AU NOMBRE D'INCONNUES
- ⇒ RAISON SUR LA PHASE SPATIALE DE L'ONDE OBTENUE
- ⇒ PARTICULE CONFINÉE (DEGRÉ DE LIBERTÉ PERDUE)
- ⇒ MODÈSE UN ÉLECTRON AU VOISINNAGE D'UN ATOME PAR EXEMPLE,  
IL EST PIÉGÉ DANS CELUI-CI (≡ AUTOUR DU NOYAU DE CELUI-CI)

## - BARRIÈRE DE POTENTIEL



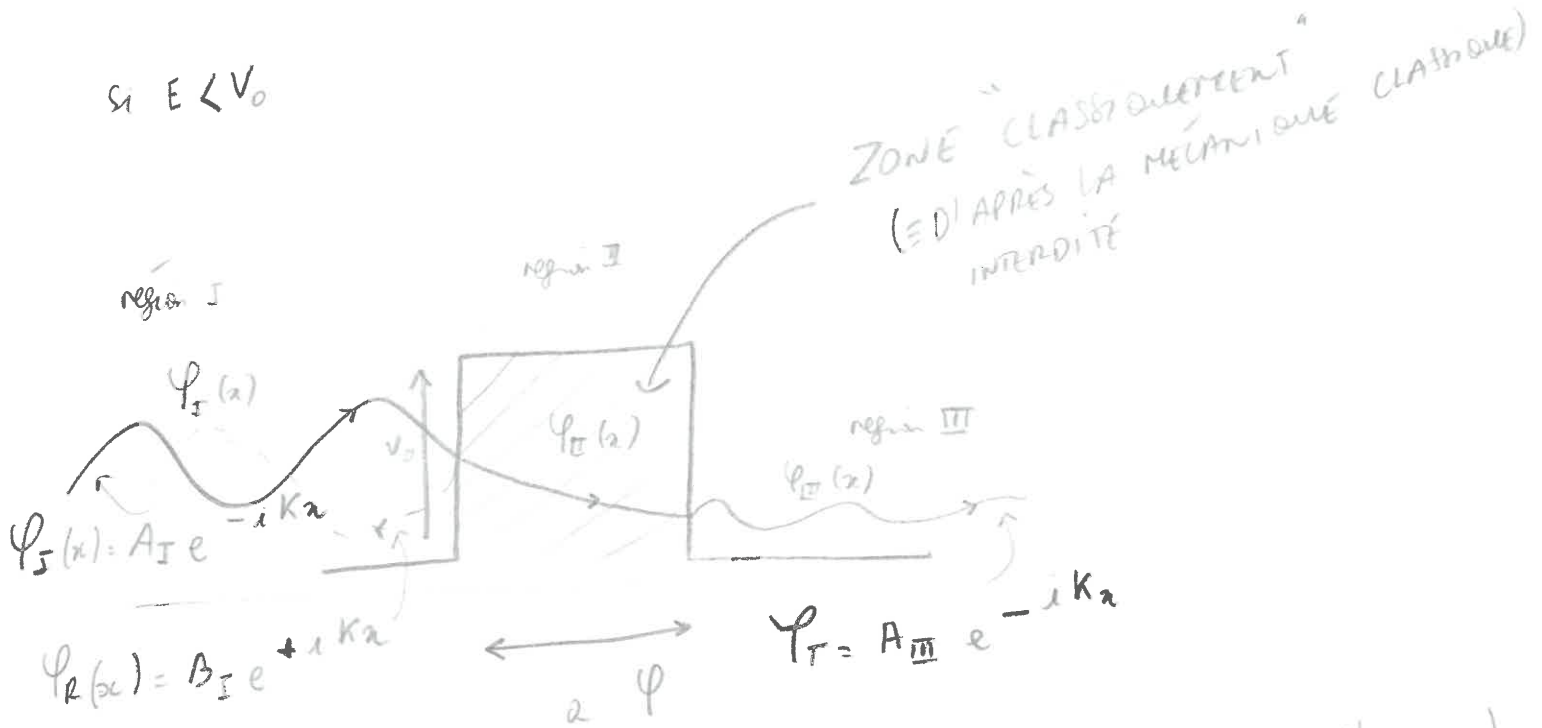
⇒ PAS ASSEZ D'ÉQUATIONS PAR RAPPORT AU NOMBRE D'INCONNUES

⇒ PAS DE RELATION QUI IMPOSE LA PHASE SPATIALE DE LA PARTICULE

⇒ LA PARTICULE EST LIBRE, ELLE N'EST PAS CONFINÉE

⇒ MODIFIÉE PAR EXEMPLE LES AUTRES ÉLECTRONS QUI EMPÊCHE LA TRAVERSÉE D'UN ATOME À CAUSE DES ÉLECTRONS DE L'ATOME

Si  $E < V_0$



Le système ne peut pas être résolu (il manque une équation par rapport au nombre d'inconnues)

mais le rapport entre les coefficients peut être obtenu

Si l'on ne s'intéresse qu'à une onde se propageant vers la droite

$$R = \frac{|B_I|^2}{|A_I|^2} = \dots = \frac{\frac{V_0^2}{4E(V_0-E)} \operatorname{sh}^2(ka)}{1 + \frac{V_0^2}{4(E-V_0)} \operatorname{sh}^2(ka)}$$

$$T = \frac{|A_3|^2}{|A_I|^2} = \dots = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0-E)} \operatorname{sh}^2(ka)}$$

QUESTION POSSIBLE ???

$$T \equiv \gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$$

correction relativiste

Que représente la réflexion R en relativité restreinte

$$R \equiv \frac{v^2/c^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} ???$$

T n'est jamais nul  $\Rightarrow$  effet tunnel toujours possible

En ajoutant les 2 expressions ci-dessus

$$R + T = 1$$

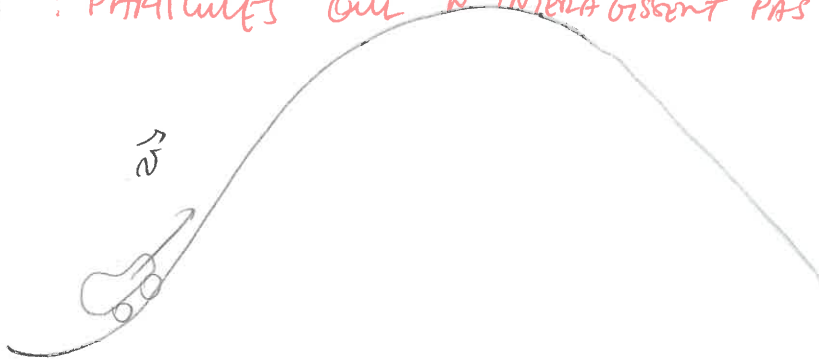
(même résultat que pour les ondes lumineuses !!!)

$\Rightarrow$  l'énergie est bien conservée

## Interprétation physique de l'effet Tunnel:

⚠️⚠️⚠️ TOUJOURS ESSAYER D'INTERPRÉTER LA MÉCANIQUE CLASSIQUE COMME UN CAS LIMITE DE LA MÉCANIQUE QUANTIQUE SIMILAIREMENT À L'INTERPRÉTATION DE L'OPTIQUE GÉOMÉTRIQUE COMME UN CAS LIMITE DE L'OPTIQUE ONDULAIRE !!!

Mécanique classique : PARTICULES QUI N'INTERAGISSENT PAS AVEC LA MATIÈRE



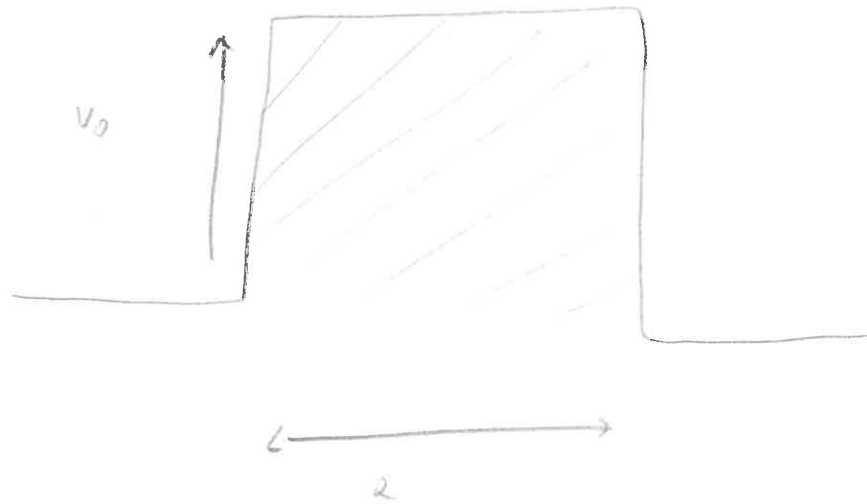
Si  $v$  n'est pas assez élevée, la particule ne passe pas la barrière de potentiel

Mécanique quantique : PARTICULES QUI AGISSENT COMME DES ONDES, C'EST-À-DIRE QUI INTERAGISSENT AVEC LA MATIÈRE



La particule passe la barrière de potentiel car elle se comporte comme une onde  $\Rightarrow$  une partie de son énergie est transmise  $\Rightarrow$  une partie de la particule interagit avec la matière

Autres propriétés



Probabilité de passage :

$$\text{Région I: } P_I(x) = \int_{-\infty}^{-a/2} |\Psi_I(x,t)|^2 dx = \int_{-\infty}^{-a/2} |\Psi_I(x)|^2 e^{-i\frac{E}{\hbar}t} e^{i\frac{E}{\hbar}t} dx$$

$$= \int_{-\infty}^{-a/2} |(A_I e^{-ikx} + B_I e^{ikx})|^2 dx$$

$$= \int_{-\infty}^{-a/2} |A_I (e^{-ikx} + \sqrt{R} e^{ikx})|^2 dx$$

$$|\vec{\Psi}(\vec{r},t)|^2$$

$$\vec{\Psi}(\vec{r},t) \vec{\Psi}^*(\vec{r},t)$$

CAR ON PREND LA VALEUR ABSOLUE AVANT DE FAIRE LE CARRÉ !!

Avec la condition de normalisation de la probabilité

$$= A_I^2 \int_{-\infty}^{+\infty} (e^{-ikx} + \sqrt{R} e^{ikx}) (e^{ikx} + \sqrt{R} e^{-ikx}) dx$$

$$= A_I^2 \int_{-\infty}^{+\infty} (1 + \sqrt{R} e^{-2ikx} + \sqrt{R} e^{2ikx} + R) dx$$

$$\int dx = 1 \Rightarrow A_I^2 = 1$$

$$= A_I^2 \int_{-\infty}^{+\infty} (1 + R + 2\sqrt{R} \cos(2kx)) dx$$

À LA PLACE, EXPRIMER PLEINÔT  $dP(a) = A_I^2 (1 + R + 2\sqrt{R} \cos(2ka))$   
 1/2 Condition de normalisation de la probabilité

- Région III :

$$\begin{aligned} \psi_{\text{III}}(x) &= A_{\text{III}} e^{-ikx} \\ &= A_{\text{I}} \sqrt{T} e^{-ikx} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow P(x) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_{\text{II}}(x) \psi_{\text{III}}^*(x) dx \\ &= A_{\text{I}}^2 T \int_{-a/2}^{+a/2} dx \\ &= A_{\text{I}}^2 T [x]_{-a/2}^{+a/2} \end{aligned}$$



Diverge ??? sauf si  $A_{\text{I}}^2 = 0$  ou  $T=0$

???

A LA PLACE, il vaut mieux chercher  $dP(x) = A_{\text{I}}^2 \times T$

- En région II : pas de relation entre R ou T avec  $A_{\text{I}}$  ou  $B_{\text{I}}$ ,  
densité de probabilité non possible à obtenir

mais

$$\begin{aligned} \psi_{\text{II}}(x) &= A_{\text{I}} e^{-kx} + B_{\text{II}} e^{kx} \\ &= A_{\text{II}} e^{-x/l} + B_{\text{II}} e^{-x/l} \end{aligned}$$

proportionnelle à une densité de probabilité de pénétration dans la barrière nulle à une épaisseur de peau en électromagnétisme

(= COEFFICIENT D'EVANESCENCE DE L'ONDE DE MATIERE)

# Quelques applications de l'effet Tunnel.

## - Microscopie à effet Tunnel

Source  $V(\vec{r}, t)$  potentiel statique

Equation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \vec{\Psi}(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \vec{\Psi}(\vec{r}, t) + V(\vec{r}, t) \vec{\Psi}(\vec{r}, t)$$

Equation de Schrödinger des états stationnaires (en 3 dimensions)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} - \frac{(V(x) - E)}{\hbar^2/2m} \Psi(x) = 0$$

Remplacé par  $E \Psi(x)$  avec  $E$  énergie totale constante

Barrière de potentiel avec une probabilité de pénétration proportionnelle à  $\delta$

(COEFFICIENT D'EVANESCENCE DE L'ONDE)

avec  $k = \pm \sqrt{\frac{E - V(x)}{\hbar^2/2m}} > 0$

$$\Psi_{II}(x) = A_{II} \sinh(kx) + B_{II} \cosh(kx)$$

$$\Rightarrow \Psi_{II}(x, t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t} (A_{II} \sinh(kx) + B_{II} \cosh(kx)) = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

Coefficient de Transmission (fonction nul contrairement à la mécanique classique)

$$T = \frac{|A_{III}|^2}{|A_I|^2} = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \sinh^2(ka)}$$

Coefficient de transmission en barrière épaisse

Barrière épaisse :  $a \gg \delta \Rightarrow a \gg \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}$

$$T \approx \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \left( \frac{1}{4} (e^{a/\delta} - e^{-a/\delta})^2 \right)}$$

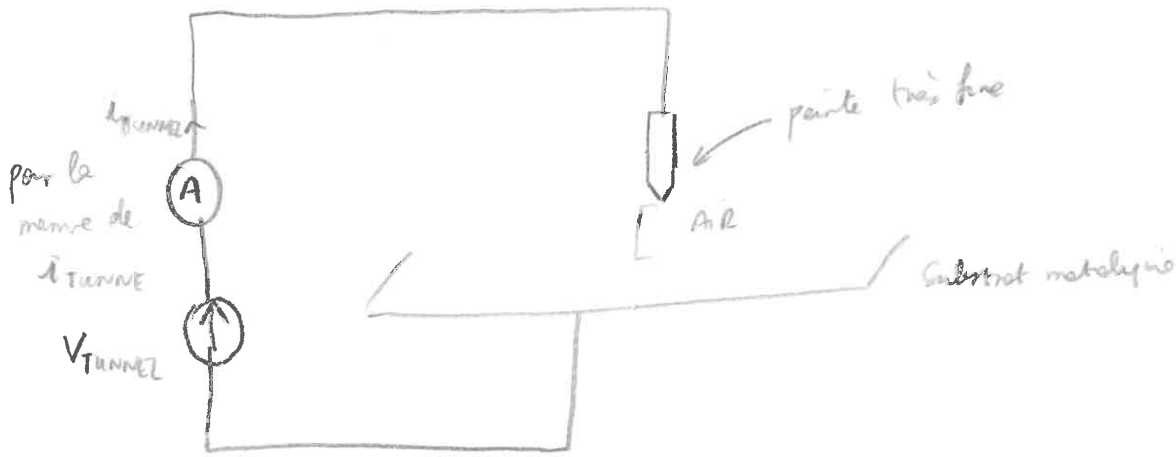
Negligible  $\equiv e^{S/2} \ll 1$

$$T \approx \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \frac{1}{4} e^{-2a/\delta}}$$

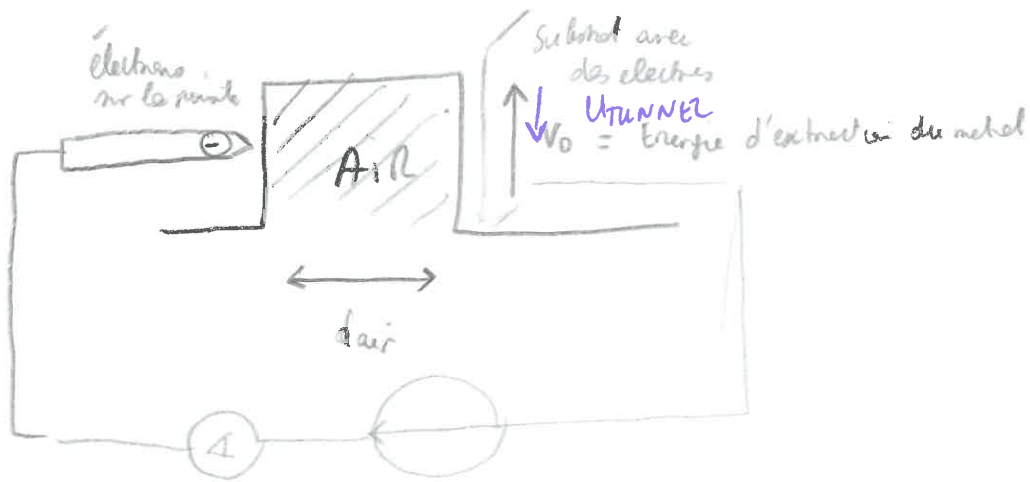
$$T \approx \frac{16 E (V_0 - E)}{V_0^2} e^{-2a/\delta}$$

Rappel:  $\cosh(x) = \frac{e^{kx} + e^{-kx}}{2}$   
 $\sinh(x) = \frac{e^{kx} - e^{-kx}}{2}$   
 Alors que:  $\cosh(x) = \frac{e^{kx} + e^{-kx}}{2}$   
 $\sinh(x) = \frac{e^{kx} - e^{-kx}}{2}$

On se place en barrière épaisse



L'air constitue une barrière de potentiel pour les électrons



$$I_{TUNNEL} = I_0 e^{-2d/\delta}$$

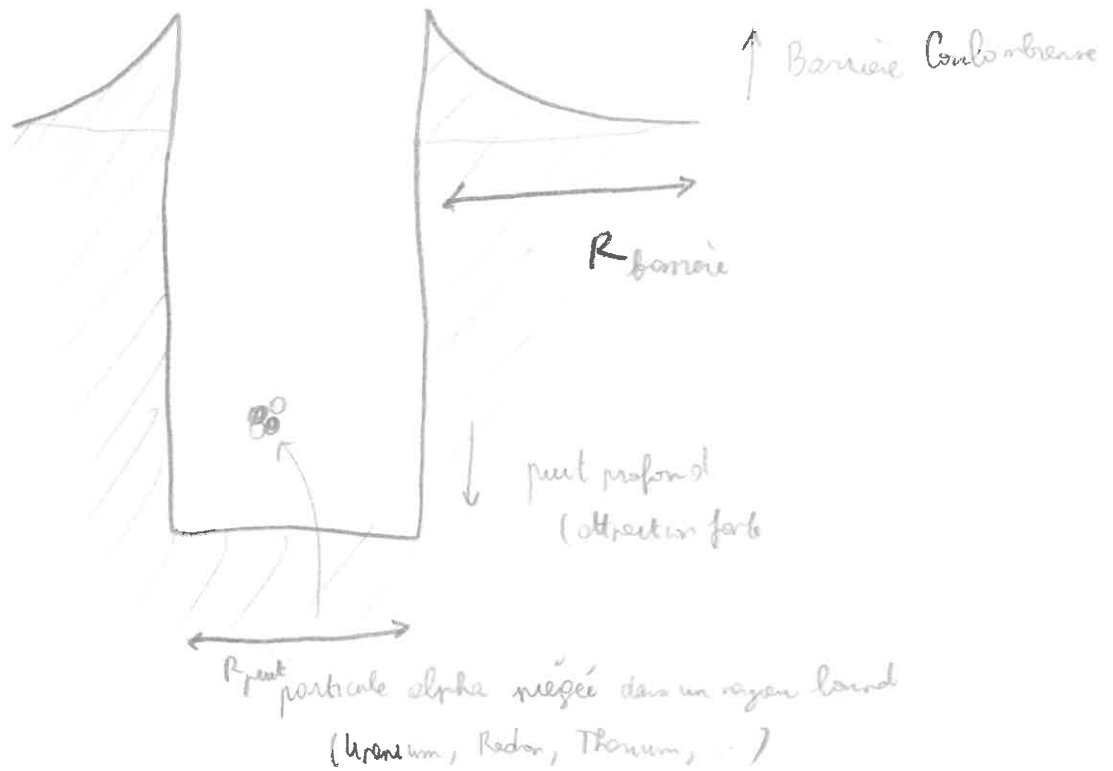
↑  
Proportionnel à la racine carrée du coefficient de transmission en barrière épaisse

$V_{TUNNEL}$  donne le travail d'extraction du métal

2 Types d'applications principales :

- Topographique : On fixe  $U_{TUNNEL}$  et on mesure  $I_{TUNNEL}$  qui est proportionnel à  $d_{air}$  (on se place sur le même potentiel) ⇒ étude des défauts de surface
- Spectroscopie : on mesure  $d$  avec un piezo électrique à une tension fixe  $U_{TUNNEL}$  et on mesure  $I_{TUNNEL}$  qui donne des informations sur l'énergie d'extraction des électrons du métal donc sur la composition physique et chimique du substrat

- Application de l'effet Tunnel à la radioactivité  $\alpha$  :



$$T = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \sinh^2(ka)} \rightarrow \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-2a/\delta}$$

$a \gg \delta$  (barrière épaisse)

$$T \approx C e^{-2 \int_a^{a_2} \frac{dr}{\delta(r)}}$$

$$T \sim e$$

lorsqu'il ne s'agit pas d'une barrière abrupte mais d'une barrière continue (il s'agit de l'approximation de la méthode précédente)

De plus, la probabilité "tère" sur la barrière à la fréquence

$$f \approx \frac{v_{particule}}{2R_{barrière}}$$

la probabilité de sortie est  $T$  (COEFFICIENT DE TRANSMISSION)

$$\Rightarrow \text{la constante de sortie est due } \lambda = f \times T = \frac{v_{particule}}{2R_{barrière}} \times T$$

$\Rightarrow$  la particule suit une loi de désintégration ( $\equiv$  d'émission de la particule  $\alpha$ ) exponentielle

$$N(t) = N_0 e^{-t/\lambda}$$

Le temps de demi-vie du noyau bord est donc:

$$N_{0/2} = N_0 e^{-t_{1/2}/\lambda}$$

$$\Rightarrow \ln(2) = t_{1/2} \times \lambda$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow t_{1/2} &= \frac{\ln(2)}{\lambda} = \frac{\ln(2) \times 2 R_{\text{barrière}}}{N_{\text{particule}}} \times T^{\ln(2)} \times \frac{1}{S(r)} \\ &= \frac{\ln(2) \times 2 R_{\text{barrière}}}{N_{\text{particule}}} \times e^{-2 \int_{r_1}^{r_2} k(r) dr} \\ &= \frac{\ln(2) \times 2 R_{\text{barrière}}}{N_{\text{particule}}} \times e^{-2 \int_{r_1}^{r_2} \sqrt{\frac{2m(V(r) - E)}{\hbar^2}} dr} \end{aligned}$$

Si  $V(r)$  est un potentiel coulombien de type  $\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$

et  $E_{\alpha} = \frac{1}{2} m v_{\text{particule}}^2$  (vitesse non relativiste)  $\Rightarrow N_{\text{particule}} = \sqrt{\frac{2 E_{\alpha}}{m}}$

$\Rightarrow \dots$  (placés à l'échelle de calcul)

$$-2 \left( \frac{\pi Z e^2}{\hbar v_{\text{particule}}} \right)$$

$\Rightarrow T \approx e$

$$\Rightarrow t_{1/2} = \frac{\ln(2) \times 2 R_{\text{barrière}} \sqrt{m}}{\sqrt{2 E_{\alpha}}} e^{-2 \left( \frac{\pi Z e^2 \sqrt{m}}{\hbar \sqrt{2 E_{\alpha}}} \right)}$$

(loi de Geiger-Nuttall)



