

RÉSUMÉ DU COURS

DUALITÉ ONDE-CORPUSCULE

Toute particule possède un double aspect ; un aspect ondulatoire et un aspect corpusculaire. La relation entre les deux aspects est donnée par :

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

La relation de Louis De Broglie : $\vec{p} = \hbar \cdot \vec{k}$ (\vec{k} est le vecteur d'onde ($k = 2\pi/\lambda$))

FONCTION D'ONDE

La détermination de la position d'une particule ne peut être que de type probabiliste.

La probabilité de présence de la particule dans un volume τ donné est égale à :

$$P_\tau = \int_\tau |\psi(\vec{r}, t)|^2 d\tau$$

$\psi(\vec{r}, t)$ est la fonction d'onde associée à la particule.

$|\psi(\vec{r}, t)|^2 = \psi^*(\vec{r}, t) \cdot \psi(\vec{r}, t)$ est appelée densité de probabilité de présence.

Condition de normalisation : la probabilité de présence de la particule dans tout l'espace est égale à l'unité.

$$\int_{\text{espace}} |\psi(\vec{r}, t)|^2 d\tau = 1$$

ÉQUATION DE SCHRÖDINGER

La fonction d'onde associée à une particule est solution de l'équation de Schrödinger :

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

$V(\vec{r}, t)$ est l'énergie potentielle de la particule (appelé **potentiel**)

Δ est l'opérateur Laplacien (en coordonnées cartésiennes $\Delta \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$)

L'équation de Schrödinger est linéaire et homogène i.e. :

Si ψ_1 et ψ_2 sont des solutions de l'équation de Schrödinger alors $\psi = c_1 \cdot \psi_1 + c_2 \cdot \psi_2$ est aussi solution de cette équation (c_1 et c_2 sont des nombres complexes)

Equation de Schrödinger à une dimension

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

PARTICULE LIBRE ($V(\vec{r}, t) = 0$)

A une dimension : Equation de Schrödinger

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

Fonction d'onde	Vitesse de phase	Relation de dispersion	
$\psi(x, t) = A \cdot e^{i(kx - \omega t)}$	$v_\phi = \frac{\omega}{k}$	$\omega = \frac{\hbar \cdot k^2}{2m}$	$E = \hbar \omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

La fonction d'onde plane n'est pas de carré sommable ($\int_{\text{espace}} |\psi(\vec{r}, t)|^2 d\tau \rightarrow +\infty$) elle ne peut pas dans ce cas représenter l'état d'une particule réelle.

Paquet d'onde libre (c'est une combinaison linéaire d'une infinité d'ondes planes)

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int g(k) \cdot e^{i(kx - \omega t)} dk$$

Vitesse de groupe d'un paquet d'ondes libres $v_g = \frac{d\omega}{dk}$

A trois dimensions : Equation de Schrödinger

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

Solution de la forme d'une **Onde Plane** $\psi(\vec{r}, t) = A \cdot e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}$

Paquet d'onde libre (c'est une combinaison linéaire d'une infinité d'ondes planes)

$$\psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int g(\vec{k}) \cdot e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} d^3k$$

PRINCIPE D'INCERTITUDE DE HEISENBERG

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar$$

PARTICULE DANS UN POTENTIEL INDÉPENDANT DU TEMPS ($V(\vec{r}, t) = V(\vec{r})$)

Equation de Schrödinger indépendante du temps

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

États stationnaires $\psi(\vec{r}, t) = \varphi(\vec{r}) \cdot \exp(-i\omega t)$	$E = \hbar\omega = \text{constante}$
	$ \psi(\vec{r}, t) ^2 = \varphi(\vec{r}) ^2$ indépendante du temps

$$H \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \quad \text{Opérateur Hamiltonien}$$

PRINCIPE DE DÉCOMPOSITION SPÉCTRALE

Lors d'une mesure l'état du système est entièrement défini par ses états propres $\psi_\alpha(\vec{r})$.

La fonction d'onde la plus générale d'une particule dans ce cas est donnée par une combinaison linéaire des états propres du système.

$$\psi(\vec{r}, t_0) = \sum_{\alpha} c_{\alpha} \cdot \psi_{\alpha}(\vec{r})$$

La probabilité que la particule soit dans un état propre lors d'une mesure est donné par

$$P_{\alpha} = \frac{|c_{\alpha}|^2}{\sum_{\alpha} |c_{\alpha}|^2}$$

SÉRIE DE TRAVAUX DIRIGÉS N° 02

ONDES ET PARTICULES

EXERCICE 01 : Longueur d'onde de De Broglie

Calculer les longueurs d'ondes associées aux particules suivantes.

- Un grain de poussière de $1 \mu\text{m}$ de diamètre ayant une masse $m = 10^{-15} \text{ kg}$ et une énergie cinétique $T = 10^{-21} \text{ Joules}$.
- Un neutron thermique ($E_c = \frac{3}{2} k_B T$ et $T = 300 \text{ K}$).
- Un électron accéléré dans un potentiel $V = 1000 \text{ Volts}$.
- Un électron dans un accélérateur de particule, dont l'énergie totale est égale à 1 GeV .

EXERCICE 02 : Vitesse de phase et Vitesse de groupe

- Rappeler les relations donnant la vitesse de phase et la vitesse de groupe dans un paquet d'onde. Que représentent ces vitesses ?
- Trouver, à partir de l'équation de Schrödinger, la relation de dispersion $\omega(k)$ dans le cas d'une onde plane. En déduire la vitesse de phase et la vitesse de groupe d'un paquet d'onde libre.
- Calculer la vitesse de phase et la vitesse de groupe d'un paquet d'onde, dans le cas où la longueur d'onde λ est liée à la fréquence ν par la relation (c est une constante réelle positive).

$$\lambda = \frac{c}{\sqrt{\nu^2 - \nu_0^2}} \quad \text{avec} \quad \nu > \nu_0$$

- Calculer la vitesse de groupe si la vitesse de phase dans un paquet d'onde est donnée par (g est une constante réelle positive et λ la longueur d'onde)

$$V_\phi = \sqrt{\frac{g\lambda}{2\pi}}$$

EXERCICE 03 (*): Paquet d'onde libre

Rappeler l'expression d'un paquet d'ondes libres à une dimension.

Calculer l'expression donnant la forme d'un paquet d'ondes libres à $t = 0$ dans les cas suivants :

- $g(k) = A$ pour $k \in \left[k_0 - \frac{\Delta k}{2}, k_0 + \frac{\Delta k}{2} \right]$; $g(k) = 0$ sinon
- $g(k) = A \cdot \exp\left(-\frac{a^2}{4}(k - k_0)^2\right)$

Ecrire dans les deux cas la condition de normalisation. Calculer A dans le second cas ($A \in \mathbb{R}^{*+}$).

EXERCICE 04 : Principe d'incertitude

- Nous voulons montrer que les propriétés quantiques, dont le principe d'incertitude, sont imperceptibles dans le domaine macroscopique. Pour cela reprenons l'exemple du grain de poussière de l'exercice 01, si nous connaissons sa position à $0,01 \mu\text{m}$ près quelle serait l'incertitude minimale sur sa vitesse ? Cette incertitude est elle acceptable ?
- Dans le cas du neutron thermique, quelle est l'incertitude sur la position du neutron si l'incertitude relative sur sa vitesse est de l'ordre de 1% ?

EXERCICE 05 : Principe d'incertitude

Considérons un virus de forme circulaire dont le rayon est égal à 10 \AA . Si nous considérons que la densité du virus est égale à la densité de l'eau (1 g.cm^{-3}) et que le virus est localisé approximativement dans une région égale à son diamètre. Quelle serait alors la vitesse minimale du virus ?

EXERCICE 06 (*): Principe d'incertitude

Montrer que le modèle Bohr de l'atome d'Hydrogène est incompatible avec le principe d'incertitude de Heisenberg.

EXERCICE 07 : Particule dans une boîte de potentiel à une dimension

Calculer la fonction d'onde et l'énergie d'une particule se trouvant dans une boîte de potentiel de la forme :

$$V(x) = 0 \quad \text{pour } x \in [0, a] \quad ; \quad V(x) = +\infty \quad \text{sinon}$$

EXERCICE 08 : Particule dans une boîte de potentiel à 3 dimensions (densité d'états)

1. Calculer la fonction d'onde et l'énergie d'une particule se trouvant dans une boîte de potentiel tridimensionnelle de la forme :

$$V(x, y, z) = 0 \quad \text{pour } (x \in [0, a], y \in [0, a], z \in [0, a]) \quad ; \quad V(x, y, z) = +\infty \quad \text{sinon}$$

Remarque : dans ce cas la fonction d'onde totale peut être écrite sous la forme d'un produit de trois fonctions d'ondes à variables séparées $\varphi(x, y, z) = \phi_1(x) \times \phi_2(y) \times \phi_3(z)$.

- Calculer le nombre d'états d'énergie inférieure à une valeur E .
- En déduire la densité d'état (le nombre d'états compris entre une énergie E et $E + dE$ par unité d'énergie dE).

EXERCICE 09 (*): Barrière de Potentiel – effet tunnel.

Soit une particule ayant un potentiel de la forme

$$V(x) = V_0 \quad \text{pour } x \in [0, a] \quad ; \quad V(x) = 0 \quad \text{sinon}$$

- Ecrire l'équation de Schrödinger correspondant à chaque domaine de x .
- En déduire les solutions de ces équations dans le cas d'une particule ayant une énergie $E < V_0$ et provenant de $x = -\infty$.
- Calculer le coefficient de transmission T défini par le rapport de la densité de probabilité de l'onde transmise sur la densité de probabilité de l'onde incidente.
- A.N. : $E = 1 \text{ eV}$, $V_0 = 2 \text{ eV}$, $a = 1 \text{ \AA}$. Dans le cas d'un électron puis d'un proton.

EXERCICE 10 : Potentiel delta

Considérons une particule de masse m et d'énergie $E > 0$ dans un potentiel unidimensionnel donné par $V(x) = V_0 \cdot \delta(x - a)$. Les états stationnaires d'une telle particule peuvent être écrits sous la forme :

$$\begin{aligned} \varphi_1(x) &= A_1 \cdot e^{ikx} + B_1 \cdot e^{-ikx} & \text{pour } x < a \\ \varphi_2(x) &= A_2 \cdot e^{ikx} + B_2 \cdot e^{-ikx} & \text{pour } x > a \end{aligned}$$

Avec $k = \sqrt{2m \cdot E / \hbar^2}$

En intégrant l'équation de Schrödinger indépendante du temps entre $a - \varepsilon$ et $a + \varepsilon$ et en faisant tendre ε vers 0. Montrer que la dérivée première de la fonction d'onde présente une discontinuité en a qu'il nous faut déterminer.

Calculer alors la matrice définie par :

$$\begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}$$

EXERCICE 11 (*): Potentiel delta

Reprendre le même exercice précédent pour une énergie $E < 0$.