Fonction d'onde et équation de Schrödinger

- F^{ct} d'onde pour une particule à un instant t : $\boxed{\Psi(\vec{r},t)}$
- Proba : $dP(\vec{r},t) = |\Psi(\vec{r},t)|^2 d\tau$ de trouver une partic. ds $d\tau$
- densité de proba : $\boxed{\rho(\vec{r},t) = |\Psi(\vec{r},t)|^2}$ $\boxed{\iiint_{espace} dP(\vec{r},t) = 1}$ cond. de normalisation
- particule ds un pot ← Ep

Méca quantique lorsque les particules ont une longueur d'onde de l'ordre de la distance intermoléculaire

Cas 1D : $\Psi(x,t) = A e^{-\lambda|x| + i\omega t}$

$\int_{-\infty}^{+\infty} dP(x,t)dx = 1 \Rightarrow |A|^2 = \lambda \Rightarrow f^{ct}$ déf à une phase globale près

$\hookrightarrow A = \sqrt{\lambda} e^{i\varphi}$ $\hookrightarrow$ m̂ état de la partic

Équ. de Schrödinger (1D) :

$\boxed{h = 6{,}62.10^{-34} J.s} = 2\pi\hbar$

Onde-corpuscule : $\boxed{\lambda = \frac{h}{p}}$ relation de de Broglie

quantité de mvt

Particule libre (considérer uniquement l'énergie cinétique) de masse m et de vit. $\vec{v}$

$\boxed{p = mv = \hbar k}$ $\boxed{\Psi(x,t) = A e^{i(kx-\omega t)}}$

$E = \frac{1}{2}mv^2$

Formule de Planck-Einstein : $\boxed{E = h\nu = \hbar\omega}$

Relation de dispersion $\boxed{\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}}$ $\boxed{v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k}{m} = v}$

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

Si ∃ force conservative dérivant de l'Ep = V(x) : $\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} + V\Psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t}}$

CAS g^{al} (3D) : $\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + V(\vec{r},t)\Psi}$

	Méca classique	Méca quantique
état	position : $\vec{r}$ vit : $\vec{v}$	F^{ct} d'onde $\Psi(\vec{r},t)$
évol de l'état	PFD $m\frac{d^2\vec{r}}{dt^2} = \vec{F}$	Équ de sch.

Résolution : Hyp : V(x) indép du temps

F^{ct} d'onde stationnaire : $\Psi(x,t) = \varphi(x) f(t)$

≠ onde stationnaire

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

cte homog. à une énergie

ie $H\Psi = E\Psi$

sol. val. propres ⇐ Équ. aux val. propres

Cond sur $\Psi(x)$: • f^{ct} ne prend qu'1 val. • f^{ct} normalisée (ne diverge pas)

• Ψ continue • $\frac{d\varphi(x)}{dx}$ continue en tout pt où V est continue ou si la discontinuité ≠ +∞

$\frac{i\hbar}{f(t)} \cdot \frac{df}{dt} = E \Rightarrow f(t) = A e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$ $\boxed{\Psi(x,t) = \varphi(x) e^{-\frac{iEt}{\hbar}}}$ $\omega = \frac{E}{\hbar}$

$|\Psi(x,t)| = |\varphi(x)|$: dens. indép du temps pour une f^{ct} d'onde stationnaire

Si V=0 $\boxed{\Psi(x,t) = A e^{i\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x - \frac{Et}{\hbar}\right)} + B e^{-i\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x + \frac{Et}{\hbar}\right)}}$

OEMPP — propa. selon les x ↗ — ondes de de Broglie prop x ↘

dont la f^{ct} d'onde est stationnaire : stationnaire du pt de vue quantique et progressive en phys ondulatoire

Superposition de 2 états stationnaires :

Superposition de 2 états stationnaires : état non stationnaire

↳ la densité de proba dépend explicitement du temps : état non stationnaire alors que les densités de chacunes des 2 f^{cts} sont indé de t

Paquet d'ondes :

Onde de Broglie : $\Psi(x,t) = A e^{i(kx-\omega t)}$ $\rho(x,t) = |\Psi(x,t)|^2 = |A|^2 \Rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty}\rho(x,t)dx$ DV

↳ on peut pas localiser la particule

l'onde de de Broglie, (oppm) ne peut pas décrire un état physique

Paquet d'ondes : Somme infinie

$$\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) e^{i(kx-\omega t)} dk \qquad \omega(k)$$

$\Psi(x,t=0)$ et $g(k)$ sont transformées de Fourier l'une de l'autre

Dispersion pour une particule libre : $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$: phénomène dispersif ↳ étalement du paquet d'onde

Principe d'incertitude de Heisenberg :

Pour une onde de de Broglie : λ est précise $\Rightarrow \Delta p_x = 0$ mais $\Delta x = \infty$, $\lambda = \frac{h}{p}$

Pour un paquet d'onde : Δx finie Δp_x est incertain

Inég. spatiale de Heisenberg $\boxed{\Delta x \Delta p_x \geq \hbar}$

Inég temporelle de Heisenberg $\boxed{\tau \Delta E \geq \hbar}$

Courant de proba :

Équ. de conservation de la charge : $\boxed{\frac{\partial \rho_e}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j}_e = 0}$

$\vec{j}_e = \rho_e \vec{v}$

Analogie :

$\vec{J} = \rho \vec{v} = |\Psi|^2 \vec{v}$

particule libre non localisée

$\vec{p} = m\vec{v} = \frac{h}{\lambda}\vec{u} = \frac{h}{2\pi} \cdot \frac{2\pi}{\lambda} \vec{u}$

$\boxed{\vec{p} = \hbar \vec{k}}$

$\boxed{\vec{J} = |\Psi|^2 \frac{\hbar}{m} \vec{k}}$

valable uniquement pour une onde de de Broglie

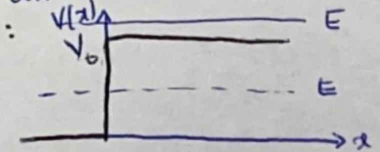
Exemples de résolution de l'équ de Schrödinger : Etats stationnaire d'une particule ds des pot. constants par morceaux

Évol. ds un pot. stationnaire $\Psi(x,t) = \psi(x) e^{-\frac{iEt}{\hbar}} = \psi(x) e^{-i\omega t}$

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

Marche de potentiel :

Modélisation $d \ll \lambda$



- E l'E_m de la particule . ici $E = E_c > 0$
  - → si $E > V_0$: alors $E = E_c + V_0$ la particule continue son chemin avec $E_c = E - V_0$
  - → si $E < V_0$: la particule est réfléchie par la barrière de pot.

pour $x < 0$ $(*) \Rightarrow V(x) = 0$: $-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x)$

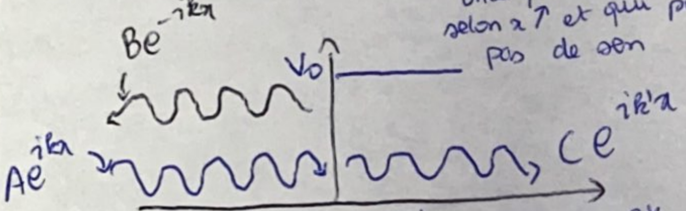
$x > 0$ $(*) \Rightarrow V(x) = V_0$ $\quad -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2\psi}{dx^2} + V_0\psi = E\psi$

par continuité : $\psi(0^-) = \psi(0^+)$ et $\frac{d\psi}{dx}(0^-) = \frac{d\psi}{dx}(0^+)$

$x < 0$: $\Psi(x,t) = A e^{i(kx - \omega t)} + B e^{-i(kx + \omega t)}$ $\quad \omega = \frac{E}{\hbar}$ $\quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$

$x > 0$: $\Psi(x,t) = C e^{i(k'x - \omega t)} + \underbrace{D e^{-i(k'x + \omega t)}}$ $\quad k' = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}}$

onde qui se propage selon $x \nearrow$ et qui provient de $+\infty$ pas de sens



continuité $\Rightarrow$ $B = A \frac{k - k'}{k + k'}$ $\quad C = A \frac{2k}{k + k'}$

Courants de probabilité $\vec{J}$:

$\vec{J_i} = |\psi_i|^2 \frac{\hbar}{m} \vec{k} = |A|^2 \frac{\hbar}{m} k \vec{u_x}$ — La particule quand elle arrive sur la marche de pot. est soit réfléchie soit transmise

$\vec{J_r} = -|B|^2 \frac{\hbar}{m} k \vec{u_x}$

$\vec{J_t} = |C|^2 \frac{\hbar}{m} k' \vec{u_x}$

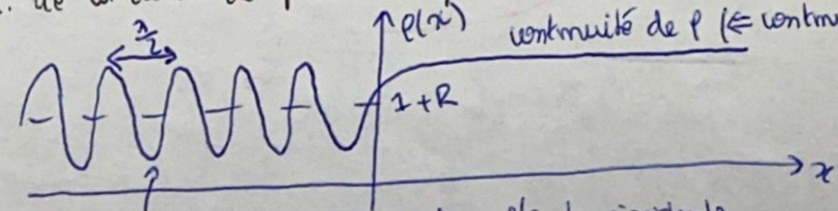
$R = \frac{|J_r|}{|J_i|} = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left(\frac{k - k'}{k + k'}\right)^2$ +

$T = \frac{|J_t|}{|J_i|} = \frac{k'|C|^2}{k|A|^2} = \frac{k'}{k}\left(\frac{2k}{k + k'}\right)^2 = \frac{4kk'}{(k + k')^2}$

$= 1$ l'onde est partiellement réfléchie

- si $E \gg V_0$ alors $R \to 0$ • si $k \approx 0$ $R \not\to 0$ (forte modélisation du mur de pot.)

Rep. de la densité de proba. de présence :



il y a interférence entre l'onde incidente et l'onde réfléchie

---

si $E < V_0$ $\quad \psi(x) = \underbrace{F e^{\alpha x}}_{\text{imp. physiquement}} + G e^{-\alpha x}$ $\quad \alpha = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$

$\Psi(x,t) = G e^{-\alpha t} e^{-i\omega t}$: onde évanescente

continuités $\Rightarrow$ $\begin{cases} B = A \frac{k - i\alpha}{k + i\alpha} \\ G = A \frac{2k}{k + i\alpha} \end{cases}$

Courants de proba $\vec{J}$: $R = \frac{|J_r|}{|J_i|} = \frac{|B|^2}{|A|^2} = 1$ $\quad \vec{J} = |\psi|^2 \frac{\hbar}{m} \vec{k}$

on ne calcule pas $\vec{J_t}$ (car ce n'est pas une onde progressive)

$R + T = 1 \Rightarrow T = 0$

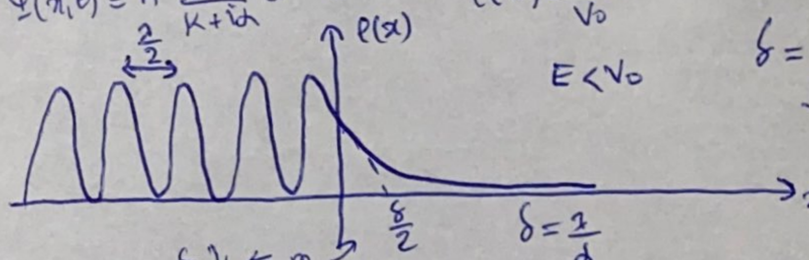
Rep de la densité de proba :

$x < 0$: $\Psi(x,t) = A e^{-i\omega t} \left(e^{ikx} + e^{-i(kx - \theta)}\right)$ avec $e^{i\theta} = \frac{k - i\alpha}{k + i\alpha}$

$\rho(x) = 2 + 2\cos(2kx - \theta)$

$x > 0$ $\Psi(x,t) = A \frac{2k}{k + i\alpha} e^{-\alpha x} e^{-i\omega t}$ $\quad \rho(x) = \frac{4E}{V_0} e^{-2\alpha x}$

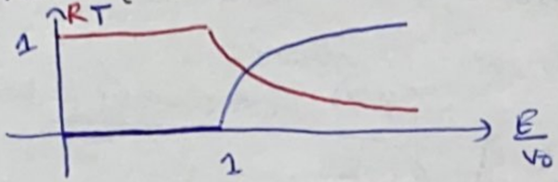
$\delta = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}$



- $\delta \propto \hbar$
- $\delta \searrow \Leftarrow m \nearrow$ (les effets quantiques sont + marqués pour m faible)
- $E \to V_0 \Rightarrow \delta \nearrow$
- ;) effet de peau / onde évanescente à la surface d'un plasma.

AN : $\delta = 94\,pm$

Evol de R et T (E) :



Etats non stationnaires d'une particule quantique :

états stationnaires $\Rightarrow$ densité de proba ne dépend pas de t

Puits de pot. infiniment profond :

F^{ct} d'onde non stationnaire : superposition d'états stationnaires

$$\Psi(x,t) = \sum_{n=1}^{+\infty} C_n(t)\varphi_n(x)$$ avec $\sum_{n=1}^{+\infty} |C_n|^2(t>0) = 1$

f^{ct} d'onde non stationnaire

↳ on injecte ds l'équ. de Sch.

on trouve $\Psi(x,t>0) = \sum_{n=1}^{+\infty} C_n(t=0)\varphi_n(x)e^{-\frac{iE_nt}{\hbar}}$ avec $\sum_{n=0} |C_n|^2 = 1$

Ex d'une CL de 2 états stationnaires :

$\Psi_1(x,t) = \sqrt{\frac{2}{L}}e^{-\frac{iE_1t}{\hbar}}\sin(\frac{\pi}{L}x)$

$\Psi_2(x,t) = \sqrt{\frac{2}{L}}e^{-\frac{iE_2t}{\hbar}}\sin(2\frac{\pi}{L}x)$

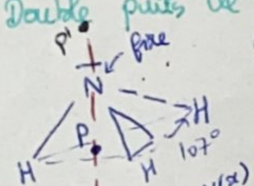
$\rho(x,t) = \phi\phi^* = \frac{1}{2}\left(\varphi_1(x)^2 + \varphi_2(x)^2 + 2\varphi_1\varphi_2\cos\left(\frac{E_2-E_1}{\hbar}t\right)\right)$

↳ oscille à $\nu = \frac{E_2-E_1}{\hbar} = \frac{3\hbar}{8mL^2}$

temps caractéristique : $\tau = \frac{\hbar}{E_2-E_1}$

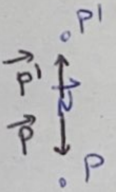
$\hbar > \hbar \Longleftrightarrow \tau\Delta E \geq \hbar$

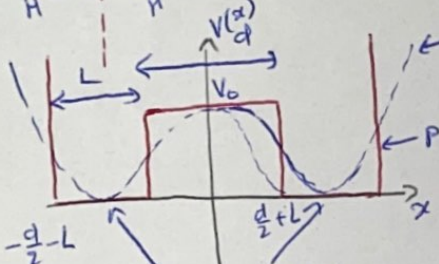
Double puits de pot symétrique :



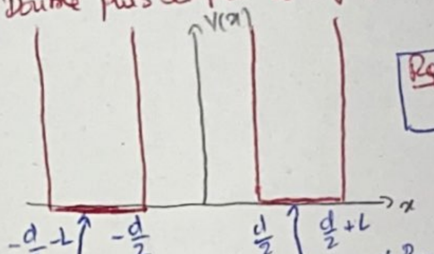
P : barycentre des 3H

$\sim$ dipôle oscillant





Double puits de pot V_0 infini



$\varphi_n^G(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(n\frac{\pi}{L}\left(x+L+\frac{d}{2}\right)\right)$

$\varphi_n^D(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(n\frac{\pi}{L}\left(x-L-\frac{d}{2}\right)\right)$

pour chaque E_n on a 2 f^{cts} d'ondes

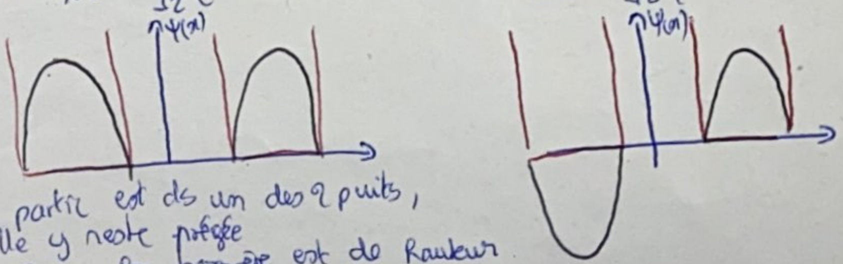
↳ le niveau d'énergie E_n est doublement dégénéré

Rq : $V(x)$ est paire $\Rightarrow \rho(x)$ doit être paire
$|\psi(x)|^2$

$x \in]-\infty, -\frac{d}{2}-L[\cup]-\frac{d}{2}, \frac{d}{2}[\cup]\frac{d}{2}+L, +\infty[$

$\varphi_n(x) = 0$ car $V = +\infty$

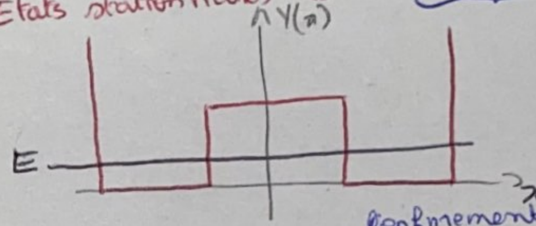
donc $\Psi_{n,s}(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_n^D(x) + \varphi_n^G(x))$ ou $\Psi_{n,a}(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_n^D(x) - \varphi_n^G(x))$



si la partic est ds un des 2 puits, elle y reste piégée puisque la barrière est de hauteur infinie

États stationnaires ds un double puits symétrique :

↳ couplés par effet tunnel



plus la particule est localisée plus l'E est grande

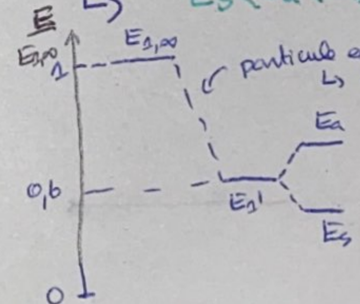
⇓

confinement moindre $\Rightarrow$ abaissement des E_n par rapport au double puits

$\Psi_{1,s}(x), \Psi_{1,a}(x)$ f^{ct} d'onde propre symétrique / antisym.] d'E $E_{s,a}$

$\Psi_{1,a}(x)$ présente un nœud de plus que $\Psi_{1,s}(x)$:

↳ $E_s < E_a < E_{1,\infty}$: couplage par effet tunnel lève la dégénérescence des niveaux d'énergie



Évol. temporelle d'une superposition de 2 état :

$\Psi_+(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_s(x,t) + \Psi_a(x,t))$

$\Psi_-(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_s(x,t) - \Psi_a(x,t))$

} ce sont les 2 seules solutions possibles

↳ ce qui compte c'est $\nu = \frac{E_a - E_s}{\hbar} = \frac{1}{T}$

$|\Psi_+(x,t)|^2 = \frac{1}{2}\left(|\Psi_s|^2 + |\Psi_a|^2 + 2\Psi_s\Psi_a\cos\left(\frac{E_a-E_s}{\hbar}t\right)\right)$

$|\Psi_-(x,t)|^2 =$ 〃 $-2\Psi_s\Psi_a\cos\left(\frac{E_a-E_s}{\hbar}t\right)\Big)$