

MECANIQUE QUANTIQUE

COURS 3 - QUANTIFICATION DE L'ENERGIE POUR DES SYSTEMES SIMPLES
QUENTIN GLORIEUX

3P001 - UNIVERSITE PIERRE ET MARIE CURIE 2015-2016

BILAN COURS 1 ET 2

• A chaque grandeur physique on associe une **observable**, opérateur linéaire hermitien agissant sur les fonctions d'onde. La valeur moyenne $\langle a \rangle_t$ à l'instant t d'une observable s'obtient ainsi :

$$\langle a \rangle_t = \int \psi^*(\mathbf{r}, t) \left[\hat{A} \psi^*(\mathbf{r}, t) \right] d\mathbf{r}$$

- L'observable position \hat{r} est la multiplication par ${\bf r}$ de la fonction d'onde. L'observable impulsion \hat{p} est $\hat{p}=-i\hbar\nabla$
- Ces observables ne commutent pas : $[\hat{x},\hat{p}_x]=i\hbar$
- Pour un système isolé dans un potentiel indépendant du temps, les états propres de l'énergie sont les états stationnaires de la forme :

$$\psi(\mathbf{r},t) = \psi_{\alpha}(\mathbf{r})e^{-iE_{\alpha}t/\hbar}$$

où $\psi_{\alpha}(\mathbf{r})$ est une solution normée de l'équation de Schrödinger independant du temps :

$$\hat{H}\psi_{\alpha}(\mathbf{r}) = E_{\alpha}\psi_{\alpha}(\mathbf{r})$$

BILAN COURS 1 ET 2

- La description complète de l'état d'une particule se fait par une fonction d'onde $\psi(\mathbf{r},t)$, dont le carré donne la densité de probabilité de présence au point \mathbf{r} , à l'instant t.
- L'évolution dans le temps de la fonction d'onde placée dans un potentiel $V(\mathbf{r})$ est donnée par l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = \hat{H}\psi(x,t)$$

où \hat{H} est l'observable énergie ou Hamiltonien du système considéré.

• L'amplitude de probabilité de l'impulsion de la particule est donnée par la transformée de Fourier de la fonction d'onde (à 1D) :

$$\varphi(p,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \psi(x,t) e^{-ipx/\hbar} dx$$

• Cela entraine la relation d'incertitude d'Heisenberg qui relient les incertitudes sur x et p : $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$

Quantification de l'énergie pour des systèmes simples

2

TROIS PRINCIPES IMPORTANTS SUR LA MESURE:

• Grandeur physique décrite par une observable. La valeur moyenne :

$$\langle a \rangle_t = \int \psi^*(\mathbf{r}, t) \left[\hat{A} \psi^*(\mathbf{r}, t) \right] d\mathbf{r}$$

- Spectre discret des valeurs propres : $\hat{A}\psi_n(x) = a_n\psi_n(x)$
- 1. Théorème spectral : en dimension finie les fonctions propres d'une observable forme une base de $\mathscr{L}^2(\mathbb{R}): \psi(x) = \sum C_n \psi_n(x)$
- 2. Principe de quantification : Le resultat de la mesure de \hat{A} est certain si et seulement si l'état $\psi(x)$ est un état propre de \hat{A} . Preuve en exercice! Sakai ou HPP. Par exemple les états stationnaires (états propres de l'Hamiltonien) ont une énergie bien définie.
- 3. Reduction du paquet d'onde : Juste après la mesure ayant donné le resultat a_n la fonction d'onde de la particule est dans l'état propre $\psi_n(x)$

Une particule est dans l'état $\psi(x)=\sum_n C_n\psi_n(x)$ avant la mesure. Quelle est la probabilité p1 de mesurer le resulat a_n lors d'une mesure de l'observable A (on a : $\hat{A}\psi_n(x)=a_n\psi_n(x)$).

Tout de suite apres cette première mesure, on effectue une seconde mesure sur cette particle. Quelle est la probabilité p2 de mesurer le resulat a_n et la probabilité p3 de trouver le resultat $a_{k\neq n}$?

A. p1=1, p2=1, p3=0

B. $p1=|C_n|^2$, p2=1, p3=0

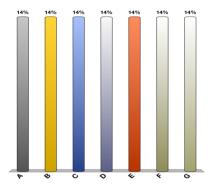
C. $p1=|C_n|^2$, $p2=|C_n|^2$, $p3=|C_k|^2$

D. p1=1, $p2=|C_n|^2$, p3=0

E. $p1 = C_n$, $p2 = C_n$, $p3 = C_k$

F. $p1=|C_n|^2$, p2=1 , p3=1

G. $p1=|C_n|^2$, p2=0 , $p3=|C_k|^2$



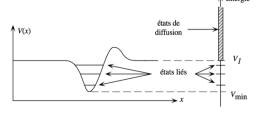
QUANTIFICATION DE L'ÉNERGIE

Résoudre l'équation de Schrödinger indépendante du temps pour des systèmes simples.

2 types de systèmes selon E : états liés et états de diffusion

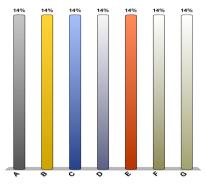
Exemple
$$V(r) = -\frac{Gmm'}{r}$$
 Classiquement
$$E = E_K + V(r)$$
 $+_o$ $+_o$ $+_o$ $+_o$

Mécanique Quantique :



Une particule est dans l'état $\psi(x) = \sum_n C_n \psi_n(x)$ avec $\hat{A}\psi_n(x) = a_n \psi_n(x)$ On ne connait pas les Cn a priori.

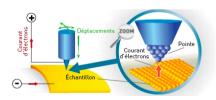
- 1- On peut connaître avec precision l'état de la particule en mesurant 1 fois A.
- 2- On peut connaître avec precision l'état de la particule en mesurant N fois A.
- 3- One ne peut pas connaître avec precision l'état de la particule en mesurant A.
- 4- On peut connaître avec precision l'état de la particule si l'on dispose de N copies identiques de la particule et que l'on realise la mesure de A, 1 fois par particule (N fois). Quelles sont les propositions VRAIES ?
- A. 1
- B. 2
- C. 1 et 2
- D. 3
- E. 1, 2 et 4
- F. 2 et 4
- G. 4

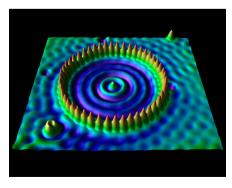


OBJECTIF DE CE COURS

Utiliser le formalisme de la mécanique ondulatoire pour aborder des problèmes physiques d'une grande importance :

- Microscope à effet tunnel
- Radioactivité alpha
- Quantification de l'énergie
- Origine de la liaison chimique





Surface d'un cristal de cuivre, 48 atomes de fer forment une enceinte de rayon 7nm

DES EXEMPLES SIMPLES

- 1. Etats de diffusion
 - Potentiel constant
 - Marche de potentiel
- 2. Etats liés
 - Oscillateur Harmomique $V(x) = Kx^2$
 - Puits de potentiel
 - Potentiel en 1/r, atome d'Hydrogène (Cours 14 et 15)

Quantification de l'énergie pour des systèmes simples

MARCHE DE POTENTIEL

Prenons la situation suivante :

onde réfléchie onde incidente onde incidente v(x)

On cherche des solutions de la forme : $\psi(x,t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}$

• Cas 1 : $E < V_0$

Dans ce cas les solutions s'écrivent :

$$x < 0 : \psi(x) = e^{ikx} + \xi e^{-ikx}$$
$$x > 0 : \psi(x) = \beta e^{-\kappa' x}$$

avec
$$k=\sqrt{2mE}/\hbar$$
 $\kappa'=\sqrt{2m(V_0-E)}/\hbar$

A l'aide de la continuité en x=0 de ψ et ψ' on en déduit $\xi=rac{k-i\kappa'}{k+i\kappa'}$

POTENTIEL CONSTANT

Placons nous dans une zone de l'espace où V est constant.

L'équation de Schrödinger indépendant du temps s'écrit à 1D :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + V\psi(x) = E\psi(x) \quad \text{ou} \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + (V-E)\psi(x) = 0$$

qui s'intègre en : $\psi(x)=\xi_+e^{ipx/\hbar}+\xi_-e^{-ipx/\hbar}$ avec $p^2/2m=E-V$

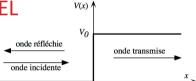
- Si E -V>0 alors p est réel et la fonction d'onde est une superposition d'onde plane monochromatique se dirigeant vers la gauche et vers la droite.
- Si E-V<0 alors $p^2/2m$ est négative, donc p est complexe. La fonction d'onde est une somme d'exponentielles réelles. Classiquement la particule ne peut pas pénetrer dans cette zone. Quantiquement nous allons voir que c'est un peu différent !

Quantification de l'énergie pour des systèmes simples

10

MARCHE DE POTENTIEL

Prenons la situation suivante :



On cherche des solutions de la forme : $\psi(x,t)=\psi(x)e^{-iEt/\hbar}$

• Cas 2 : $E > V_0$

Dans ce cas les solutions s'écrivent :

$$x < 0$$
 : $\psi(x) = \xi_{+} e^{ikx} + \xi_{-} e^{-ikx}$

$$x > 0$$
 : $\psi(x) = \beta_{+} e^{ik'x} + \beta_{-} e^{-ik'x}$

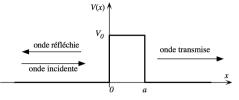
avec
$$k=\sqrt{2mE}/\hbar$$
 $k'=\sqrt{2m(E-V_0)}/\hbar$

Si on prend une particule incidente venant de gauche $:\beta_-=0$ et $\xi_+=1$

On peut en déduire
$$\xi_-=rac{k-k'}{k+k'}$$
 , $eta_+=rac{2k}{k+k'}$

EFFET TUNNEL

Prenons la situation suivante : $E < V_0$



On cherche une solutione de

la forme ·

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + \xi e^{-ikx} & x < 0 \\ \gamma e^{-\kappa' x} + \delta e^{\kappa' x} & 0 \le x \le a \\ \beta e^{ikx} & a < x \end{cases}$$

avec
$$k=\sqrt{2mE}/\hbar$$
 et $\kappa'=\sqrt{2m(V_0-E)}/\hbar$

A l aide de la continuité en x=0 de ψ et ψ' on déduit :

$$\beta = \frac{4i\,k\kappa'\,e^{-ika}}{(k+i\kappa')^2\,e^{\kappa'a}-(k-i\kappa')^2\,e^{-\kappa'a}}$$

qui se simplifie pour $\kappa' a \gg 1$ en $|\beta|^2 \simeq {16\,k^2k'^2\over (k^2+k'^2)^2}\,e^{-2\kappa' a}$

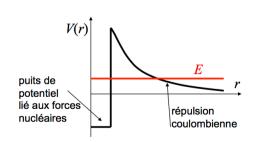
Quantification de l'énergie pour des systèmes simples

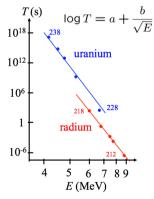
1

RADIOACTIVITÉ ALPHA

C'est aussi une conséquence de l'effet tunnel !

$$_{Z}^{A}X$$
 \rightarrow $_{Z-2}^{A-4}Y$ + $_{2}^{4}$ He





EFFET TUNNEL

EFFET TUNNEL

Toutes les animations et explications sur

Quantification de l'énergie pour des systèmes simples

_

OSCILLATEUR HARMONIQUE

Définition :

On appelle oscillateur harmonique, un système constitué d'une particule de masse m, élastiquement lié à un centre x_0 par une force de rappel :

$$F(x) = -K(x - x_0)$$

Energie potentielle : $V(x) = K(x - x_0)^2/2$

Pourquoi ce problème ?

Ce problème se retrouve dans de très nombreuses situations physiques. Si un système est à l'équilibre en x_0 , on peut en déduire que l'énergie potentielle est minimale à ce point (la somme des forces est nulle).

On a donc : $\frac{\mathrm{d}V(x)}{\mathrm{d}x}|_{x=x_0}=0$. On peut donc dévolopper V(x) :

$$V(x) = V(x_0) + V'(x_0)(x - x_0) + \frac{V''(x_0)}{2}(x - x_0)^2 + \frac{V^{(3)}(x_0)}{6}(x - x_0)^3 + \cdots$$

RAPPEL DE LA SOLUTION CLASSIQUE

Le potentiel est $V(x) = V_0 + K(x - x_0)^2/2$ ou $V(x) = Kx^2/2$

La force : F(x) = -Kx

L'équation du mouvement : $m\ddot{x} = -Kx$

Les solutions sont : $x = A\cos(\omega t + \phi)$ avec $\omega = \sqrt{K/m}$ L'énergie totale est : $E=\frac{1}{2}m\dot{x}^2+V(x)=\frac{1}{2}m\dot{x}^2+\frac{1}{2}m\omega^2x^2$

Il n'y a donc que des états liés (raisonnable comme le potentiel tend vers l'infini avec x).

Exemples: masse au bout d'un ressort, circuit LC...

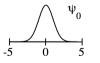
Quantification de l'énergie pour des systèmes simples

UN THEOREME IMPORTANT:

Théorème de Sturm-Liouville :

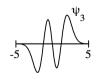
On peut classer les niveaux par valeur croissante de l'énergie en fonction du nombre de noeuds (points où le signe change) de la fonction d'onde

Polynomes de Hermite:









état fondamental 1er état excité 2eme état excité 3eme état excité

PROBLEME QUANTIQUE

L'Hamiltonien du système est : $\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$

Equation aux valeurs propres : $\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)\psi(x) = E\psi(x)$

SOLUTION:

Fonctions propres:
$$\psi_n(x) = \frac{\pi^{-1/4}}{\sqrt{2^n n! a}} e^{-x^2/2a^2} H_n(x/a)$$

avec Hn le polynome de Hermite de degré n.

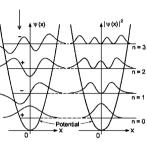
Energies propres :
$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$$

Espacement constant entre les états.

Energie de point zéro non nulle !!

Méthode algébrique au cours 8

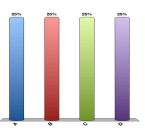
Quantification de l'énergie pour des systèmes simples

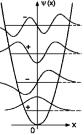


On considère un oscillateur harmonique dont les énergies sont donnés par $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$ On cherche les niveaux d'énergie du demi-puit harmonique : E_{d0} , E_{d1} , E_{d2}

- A. $E_{d0} = \hbar \omega/2$ $E_{d1} = \hbar \omega/2$, $E_{d2} = \hbar \omega/2$
- uniquement la 1ere
- B. $E_{d0} = \hbar \omega/2$ $E_{d1} = 3\hbar \omega/2$, $E_{d2} = 5\hbar \omega/2$
- les mêmes
- C. $E_{d0} = 3\hbar\omega/2$ $E_{d1} = 5\hbar\omega/2$, $E_{d2} = 7\hbar\omega/2$
- toutes sauf la 1ere
- D. $E_{d0} = 3\hbar\omega/2$ $E_{d1} = 7\hbar\omega/2$, $E_{d2} = 1\hbar\omega/2$
- les impaires
- $E. \quad E_{d0} = \hbar \omega/2 \quad E_{d1} = 5\hbar \omega/2 \quad , E_{d2} = 9\hbar \omega/2$







PUITS DE POTENTIEL CARRÉS

Potentiel constants par morceaux. 2 situations physiques importantes :

• Forces qui lient les neutrons et les protons

• Puits quantiques dans les semi-conducteurs

On cherche les états liés pour $0 < E < V_0$

Problème identique à la marche de potentiel, les solutions sont de la forme :

$$\begin{array}{rcl} I' & \psi(x) &=& D\,e^{Kx}\;,\\ II & \psi(x) &=& A\sin kx + B\cos kx\;,\\ I & \psi(x) &=& C\,e^{-Kx}\;,\\ \mathrm{avec} & K = \sqrt{2m(V_0-E)}/\hbar \;\;\mathrm{et}\; k = \sqrt{2mE}/\hbar \end{array}$$

Continuité de la fonction d'onde et de la dérivée en –a et a pour trouver les constantes A.B.C.D

Quantification de l'énergie pour des systèmes simples

V(x) (a) V_0 V_0 V_0 V_0 V_0 V_0 V_0 V_0

21

PUITS DE POTENTIEL INFINI

Limite intéressante du cas précedent : $V_0 \to \infty$ Les solutions dans II sont de la forme :

$$\psi_n(x) = A\sin(n\pi x/L)$$

avec n entier >0 et $A=\sqrt{2/L}$

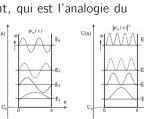
Les niveaux d'énergies correspondants sont donnés par :

$$E_n = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$$

C'est un résultat quantique très important, qui est l'analogie du phénomène d'onde stationnaire!

On voit que le théorème de Liouville s'applique également.

Notons que les étas ne sont pas équidistants en énergie.



 $\bigwedge V(x)$

PUITS QUANTIQUE CARRÉ

On a:
$$A\sin ka + B\cos ka = Ce^{-Ka}$$
,
 $-A\sin ka + B\cos ka = De^{-Ka}$.
 $Ak\cos ka - Bk\sin ka = -KCe^{-Ka}$
 $Ak\cos ka + Bk\sin ka = KDe^{-Ka}$.

Impossible d'avoir A et B non nuls simultanément.

On classe les solutions :

$$A=0 \quad \text{et} \quad C=D \qquad k\tan ka=K \quad \text{(solutions paires)} \; ,$$

$$B=0 \quad \text{et} \quad C=-D \qquad k\cot ka=-K \quad \text{(solutions impaires)} \; .$$
 Or on doit avoir $K^2+k^2=\frac{2mV_0}{\hbar} \quad \text{ou} \quad K^2a^2+k^2a^2=\frac{2mV_0a^2}{\hbar}$

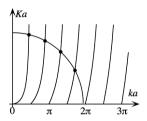
et $Ka = ka \tan ka$. $Ka = ka \cot ka$

Solution graphique dans le plan(Ka,ka)

1 seule solution si:

$$rac{a\sqrt{2mV_0}}{\hbar} < rac{\pi}{2}$$
 i.e $V_0 < rac{\pi^2\hbar^2}{8ma^2}$

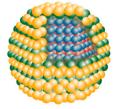
Quantification de l'énergie pour des systèmes simples

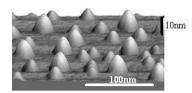


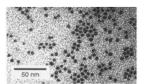
BOITES QUANTIQUES

Le puit inifini a une grande importance en nano-électronique car il permet de décrire les boites quantiques (confinement 3D).







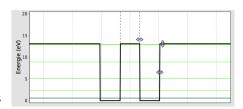


Quantification de l'énergie pour des systèmes simples

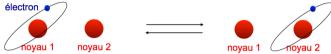
DOUBLE PUITS

Paramètres du problème :

- Largeur d'un puits
- · Hauteur d'un puits
- Ecart entre les deux puits



• Modélisation de la liaison chimique :



• Inversion de la molécule d'ammoniac



Quantification de l'énergie pour des systèmes simples

25

SOLUTIONS DU DOUBLE PUITS

Comme précédemment, on cherche les solutions sous la forme :

$$\begin{array}{lcl} \psi(x) & = & \pm \lambda \sin k (b + a/2 + x) & \text{région } G \\ \psi(x) & = & \begin{cases} \mu \, \cosh Kx & \text{Solution symétrique} \\ \mu \, \sinh Kx & \text{Solution antisymétrique} \end{cases} \text{région } M \\ \psi(x) & = & \lambda \sin k (b + a/2 - x) & \text{région } D \end{array}$$

Avec $K=\sqrt{2m(V_0-E)}/\hbar$ et $k=\sqrt{2mE}/\hbar$.

Les conditions aux limites imposent des relations sur les valeurs de E.

$$\tan ka = -\frac{k}{K} \coth K(b-a/2)$$
 pour une solution symétrique ψ_S ,
$$\tan ka = -\frac{k}{K} \tanh K(b-a/2)$$
 pour une solution antisymétrique ψ_A

Approximations : barrière haute $E \ll V_0$ et donc $K \gg k$

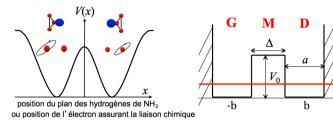
barrière large
$$K\Delta\gg 1$$
 symétrique
$$\Delta=2b-a$$

On trouve : $\tan ka \simeq -\frac{k}{K} \left(1 \pm 2e^{-K\Delta}\right)$

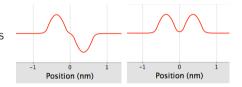
anti-symétrique

MODELISATION DU DOUBLE PUITS

On s'intéresse aux niveaux d'énergie $E < V_0$



On cherche les solutions sous la forme ci-contre avec des solutions paires et des solutions impaires .



Quantification de l'énergie pour des systèmes simples

26

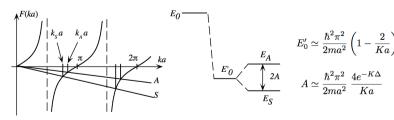
SOLUTIONS GRAPHIQUES

_ symétrique

On a :
$$an ka \simeq -rac{k}{K} \, \left(1 \pm rac{1}{2} e^{-K\Delta}
ight)$$
 anti-symétrique

On trace $y = \tan(ka)$ et $y = -\varepsilon_A ka$ $y = -\varepsilon_S ka$

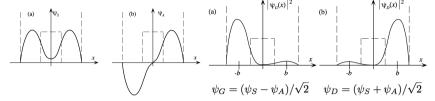
$$\text{avec} \quad \varepsilon_A = \frac{1}{Ka} \left(1 - 2e^{-K\Delta} \right) \qquad \varepsilon_S = \frac{1}{Ka} \left(1 + 2e^{-K\Delta} \right)$$



On a un résultat important : $k_S < k_A < \pi/a$ et donc $E_S < E_A < E_0$

PHÉNOMÈNE D'INVERSION

On a trouvé les solutions symétriques et anti-symétriques (ce sont les états propres de l'énergie). On peut les combiner linéairement :



Cette combinaison linéaire va donc évoluer dans le temps !!!

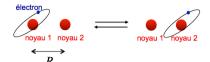
$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_S(x) e^{-iE_S t/\hbar} + \psi_A(x) e^{-iE_A t/\hbar} \right)$$
$$= \frac{e^{-iE_S t/\hbar}}{\sqrt{2}} \left(\psi_S(x) + \psi_A(x) e^{-i\omega t} \right) ,$$

avec $\nu = (E_A - E_S)/h = 2A \propto e^{-K\Delta}$, la fréquence de Bohr du système.

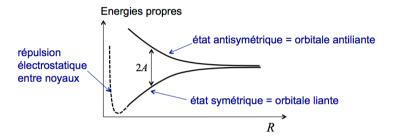
Cette valeur vaut $\nu=24~\mathrm{GHz}$ pour l'ammoniac. Très sensible à b et V_{θ}

Quantification de l'énergie pour des systèmes simples

LA LIAISON CHIMIQUE



Le clivage 2A dépend de la distance R entre les deux noyaux



Quantification de l'énergie pour des systèmes simples

3