chapitre II :

Mecanique ondulatoire.

I l'equation de Schrödinger.

1°) la fonction d'onde.

C'est une fonction de l'espace et du temps $\Psi(x,t) \in \mathbb{C}$

- de classe C^1
- de carré sommable $\int_{\mathbb{R}} \|\Psi(x,t)\|^2 dx < \infty$ (integrale bornée)
- $\|\Psi(x,t)\|^2 = \Psi\Psi^*$ → conjugué = densité de proba de présence de la particule x à t donné.

$\|\Psi(x,t)\|^2 dx$ = proba de présence en x à t donné.

Remarque : Normalisat° de $\Psi = \alpha\varphi$ → on cherche α / $\int_{\mathbb{R}} \|\Psi\|^2 dx = 1$

2) Opérateurs

$$\frac{d}{dx}\left[f(x)\right] = f'(x)$$

A toute grandeur physique, $\mathcal{A}$, on associe un opérateur mathématique A qui aura pour effet de modifier la fonct° d'onde

Grandeur observable	opérateur associé	resultat
Quantité de mouvement p_x	$-i\hbar\frac{d}{dx}$	$-i\hbar\frac{d\Psi}{dx}$
Energie cinetique $E_c = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}\frac{(mv)^2}{m}$	$\frac{1}{2m} \times \left(-i\hbar\frac{d}{dx}\left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right)\right)$	$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi}{dx^2}$
$= \frac{p^2}{2m}$	$= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}$	

Energie potentielle $\qquad V \qquad\qquad V \times \Psi$

$E_p = V(x)$

Energie totale $\qquad H = V - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} \qquad V\Psi - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi}{dx^2} = H.\Psi$

$E_T = E_c + E_p$

Hamiltonien

$$H\Psi = i\hbar\frac{d\Psi}{dt}$$

equation de Schrödinger dependante du tps.

Remarque :

Soit une particule dans le vide se comporte comme une onde plane :

- $\Psi(x,t) = e^{i(kx-\omega t)}$ $\qquad$ Rappel $k = \|\vec{k}\| = \frac{2\pi}{\lambda}$

  ω = pulsat° $= 2\pi f$

- $\frac{d\Psi}{dt} = -i.\omega.\Psi$

$$\Rightarrow i\hbar\frac{d\Psi}{dt} = \hbar\omega\Psi$$

$$H = \cancel{V} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi}{dx^2}$$

$\cancel{V} = 0$

$$\left.\begin{aligned}\frac{d\Psi}{dx} &= ik\Psi\\ \frac{d^2\Psi}{dx^2} &= (ik)^2\Psi\end{aligned}\right\} -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d\Psi}{dx^2} = \frac{\hbar^2k^2}{2m}\Psi$$

EDS $\Rightarrow \forall x, \forall t$

$$\frac{(\hbar k)^2}{2m}\Psi = \hbar\omega\Psi \Rightarrow \hbar\omega = \frac{(\hbar k)^2}{2m}$$

λ = longueur d'onde de matière

$\hbar k = \frac{h}{2\pi} \times \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{h}{\lambda} = p \qquad \hbar\nu = \frac{h}{2\pi} \times 2\pi\nu = h\nu = E$

λ = longueur d'onde de De Broglie

Cas particulier où V ne dépend du tps.

On montre que $\Psi(x,t) = \varphi(x) \times e^{-i\omega t}$ avec $\omega = \frac{E}{\hbar}$

On trouve alors que

$$H\varphi = E\varphi$$ = eq. de Schrödinger indépendante de tps.

Applicat°

① pourquoi $\varphi_1(x) = x$ ne peut pas représenter une fo?

$$\Psi = x e^{-i\omega t}$$

$$\|\Psi\|^2 = \Psi\Psi^* = -x^2 \qquad \int_{\mathbb{R}} \|\Psi\|^2 dx \to \infty.$$

② $\varphi_2 = e^{-x^2} \to \|\Psi\|^2 = e^{-2x^2} \qquad \int_{\mathbb{R}} e^{-2x^2} dx < \infty.$

③ $\Psi(x,t) = \underbrace{A(x - x^3)}_{\varphi} e^{-i\omega t}.$

trouver $V(x)$

φ est solut° de $V(x).\varphi - \frac{\hbar^2}{2m}\varphi'' = E\varphi$

$$V \times A(x - x^3) - \frac{\hbar^2}{2m}(-6Ax) = E\varphi$$

$$\Leftrightarrow V = \frac{AE(x - x^3) - 6Ax\frac{\hbar^2}{2m}}{A(x - x^3)} = E\left(-\frac{6\hbar^2 m}{1 - x^2}\right)$$

④ ⚠ pour $1 \leq x \leq 3$ $\qquad \rho(x) = \frac{9}{4x^3}$

$$P\left[\frac{5}{2} \leq x \leq 3\right] = \int_{\frac{5}{2}}^{3} \rho(x)\, dx = \frac{9}{4} \int_{\frac{5}{2}}^{3} x^{-3}\, dx$$

$$= \frac{9}{4} \left[\frac{x^{-2}}{-2} \right]_{\frac{5}{2}}^{3}$$

⑤ $0 \leq x \leq a$.

particule confinée sur cet intervalle.

$\varphi = A \sin(kx)$.

A ? k ? $\qquad P\left[\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{3a}{4}\right] = ?$

$$\Psi = \varphi\, e^{-i\omega t}$$

$$\int_0^a \|\Psi\|^2\, dx = 1 \qquad \text{condit° de Normalisat°}$$

$\Leftrightarrow$

$$A^2 \int_0^1 \sin^2 Kx\, dx = 1. \Rightarrow$$

$$\|\Psi\|^2 = \Psi\Psi^* = \varphi e^{-i\omega t} \times \varphi^{i\omega t}.$$

$$A^2 \int_0^1 \frac{\cos^2 kx}{2}\, dx.$$

$$1 = \frac{A^2}{2} \left\{ [x]_0^a - \left[\frac{\sin 2kx}{2k}\right]_0^a \right\}$$

$$\Rightarrow A = \frac{\sqrt{2}}{a}.$$

II de puit de potentiel

1 Puits infini

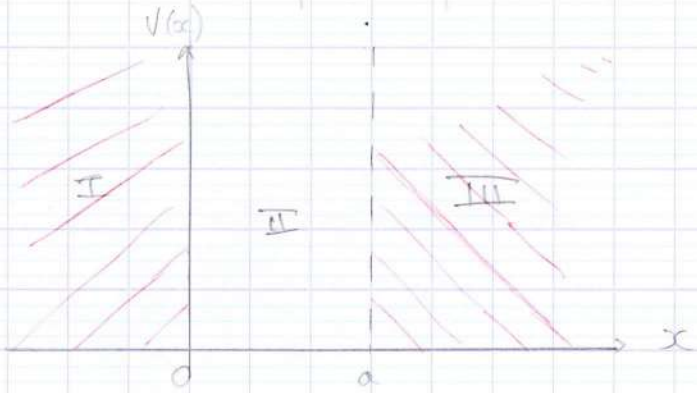
rappels :

$$H\Psi = i\hbar \frac{d\Psi}{dt} \quad \text{avec} \quad H = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V$$

cas particulier

$V = V(x)$, alors $\Psi(x,t) = \varphi(x) e^{-i\omega t}$ avec $\omega = \frac{E}{\hbar}$

cf $H\varphi = E\varphi$



resolut° d' EDS

$$H\varphi = E\varphi$$

$\varphi_I, \varphi_{II}, \varphi_{III}$ $\qquad \varphi_I = \varphi_{III} = 0$.

la particule ne peut pas être dans les 2 zones.

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + 0\right)\varphi_{II}(x) = E\varphi_{II}(x)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi''_{II} = E\varphi_{II}$$

$$\varphi''_{II} = \frac{-2mE}{\hbar^2}\varphi_{II}$$

$y'' = -k^2 y$

$y'' + \omega_0^2 y = 0$

$y = e^{\alpha x}$ $\quad y'' = \alpha^2 y = -k^2 y \quad \forall x$

$\alpha^2 = -k^2$ $\quad$ avec $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

$\alpha = \pm ik$

soit $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$

$y = C e^{ikx} + D e^{-ikx}$

$\varphi_{II}(x) = \varphi(x) = A \sin kx + B \cos kx$.

φ est de classe C^1

donc continue en 0 et en a

continuité en 0 :

$\varphi_I(0) = \varphi_{II}(0) = 0 \iff B = 0$

continuité en a

$\varphi_{II}(a) = \varphi_{III}(a) = 0$

$\iff A \sin(ka) = 0$.

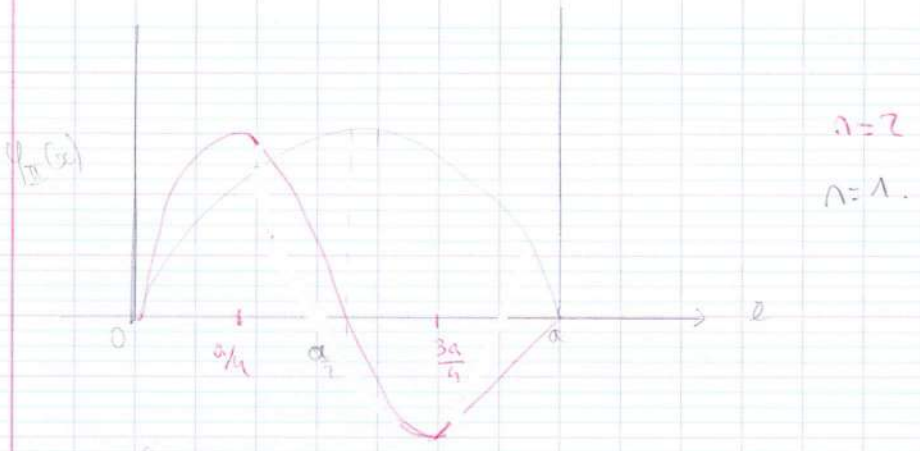
$\iff ka = n\pi \quad , n \in \mathbb{N}$

$k = n \frac{\pi}{a} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$

$\iff E = \frac{n^2 \pi^2}{a^2} \frac{\hbar^2}{2m}$

$E_n = n^2 \times E_1$

l'énergie est quantifiée



estado fundamental

$n=1$

$$\varphi_{I}(x) = A\sin\left(\frac{\pi}{2}x\right)$$

$$\langle x\rangle = \int_{\mathbb{R}} \|\Psi(x,t)\|^2\, x = \int_0^a x\, \varphi_{I}^2(x) = A^2\int_0^a x\sin^2(kx)\,dx$$

$$\sigma = \sqrt{\langle (x-\langle x\rangle)^2\rangle}$$

$$\sigma^2 = \langle (x-\langle x\rangle)^2\rangle = \langle x^2 - 2x\langle x\rangle + \langle x\rangle^2\rangle$$

$$= \langle x^2\rangle - \underbrace{2\langle x\langle x\rangle\rangle}_{-2\langle x\rangle^2} + \langle x\rangle^2$$

$$= \langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2$$

$$\sigma^2 = \langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2$$

$$\int_0^a x^2 A^2 \sin^2 kx\,dx$$

condition de normalisat°

$$\int_{\mathbb{R}} \| \psi(x,t) \|^2 \, dx = 1.$$

soit

$$\int_0^a A^2 \sin^2 kx \, dx = 1.$$

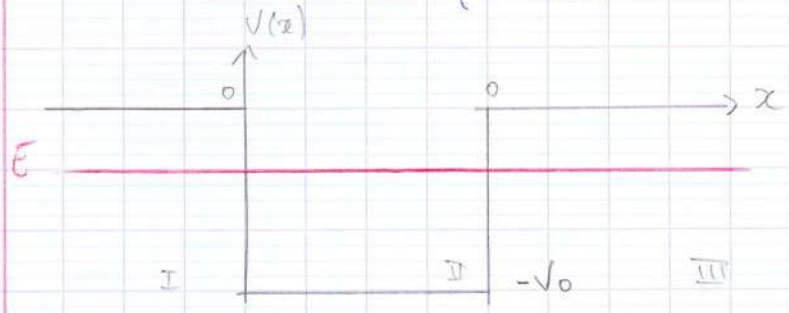
remarque : condit° de normalisat° $\Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{a}}$

1er état excité $n=2$.

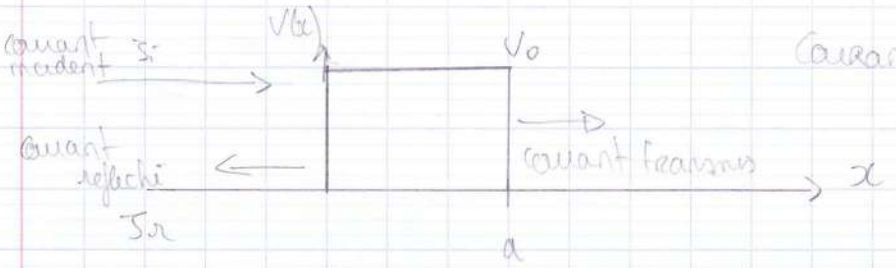
$$\varphi_{II}(x) = A \sin 2\frac{\pi}{a} x$$

$$\frac{2\pi}{a} x = \begin{cases} \frac{\pi}{a} & \Rightarrow x = \frac{a}{4} \\ \frac{3\pi}{a} & \Rightarrow x = \frac{3a}{4} \end{cases}$$

2.2 Puits de potentiel carré.



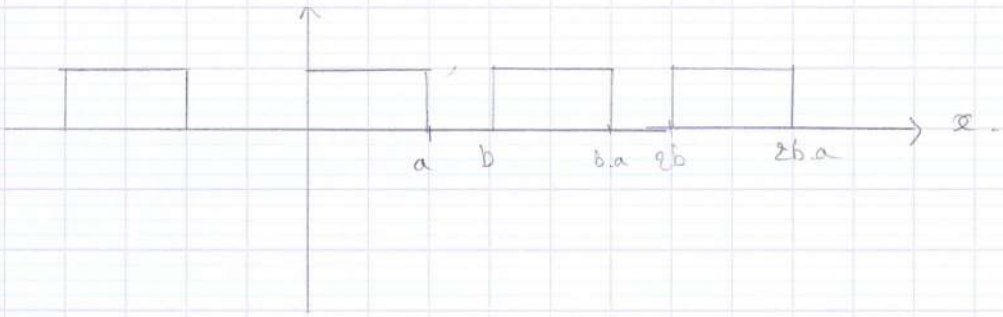
2.3. Barrière de potentiel



Courant de proba.

effet tunnel

2.4 Potentiel périodique.



2.5 atome d'hydrogène