

Le 05/05/11

II - Concepts de la 11Q

Dualité onde/particule si action $\propto h$.

II-a) Ondes

Fonction périodique de l'espace (x)

↳ onde stationnaire.

$$f(x+n\lambda) = f(x)$$

λ = longueur d'onde

$n \in \mathbb{N}$

⇒ Onde plane : combinaison de fonct^o sin et cos

$$f(x) = A e^{ikx} = A [\cos(kx) + i \sin(kx)]$$

↑ Amplitude.

k = nombre d'onde

tel que $k = \frac{2\pi}{\lambda}$

Onde en mouvement:

Déplacement global de l'onde à la vitesse $\vec{v}$.

Temps T nécessaire pour que l'onde se déplace de λ :

$$v = \frac{\lambda}{T} \quad (T \text{ période})$$

Fréquence de l'onde:

$$\omega = \frac{1}{T}$$

($\text{Hz} = \text{s}^{-1}$).

On définit également la pulsation:

$$\omega = 2\pi \nu$$

L'onde se déplace: $\rightarrow x$ se déplace avec t .

Au temps t' : $x' = x + vt'$

$$\text{Car } v = \frac{1}{T} = \nu \lambda = \frac{\omega}{2\pi} \times \frac{2\pi}{k}$$

$$v = \frac{\omega}{k} \rightarrow \text{Vitesse de phase.}$$

$$\Rightarrow x' = x + \frac{\omega}{k} t'$$

$\rightarrow$ Onde progressive. Convention: $\begin{cases} x > 0 \\ t > 0. \end{cases}$

$$f(x, t) = A e^{i(kx - \omega t)}$$

II-1) Description d'une particule quantique.

Postulat:

Une particule en 11Q est décrite par une fonction d'onde.

$$\Psi(\vec{r}, t) = A \exp[i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)]$$

$\Rightarrow$ en 3D: $\vec{r} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$ $\vec{k} = \begin{pmatrix} k_x \\ k_y \\ k_z \end{pmatrix}$

Ψ contient toute l'information sur la particule.

Re 05/05/11.

of De Broglie.

Impulsion $p = mv$.

$$h = \frac{2\pi}{\lambda} \Rightarrow \lambda = \frac{h}{p} \quad \left. \vphantom{\lambda = \frac{h}{p}} \right\} h = \frac{2\pi}{p} \times p = \frac{p}{\frac{1}{h}}$$

avec $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, cste de Planck réduite

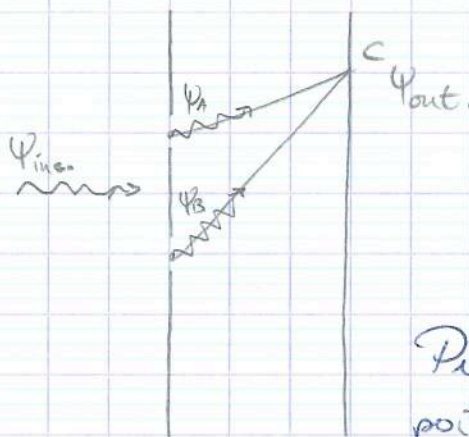
$$\left. \begin{array}{l} \omega = 2\pi \nu \\ E = h\nu \end{array} \right\} \omega = 2\pi \frac{E}{h} = \frac{E}{\hbar}$$

of Planck.

$$\text{D'où } \Psi(\vec{r}, t) = A \exp \left[\frac{i}{\hbar} (\vec{p} \cdot \vec{r} - Et) \right].$$

Sens physique de Ψ ?

Expérience des interférences (fentes d'Young) -



À l'entrée

$$\Psi_{in} = A e^{i(kx - \omega t)}.$$

À la sortie:

$$\Psi_{out}(x) = \Psi_A + \Psi_B.$$

Probabilité que l'onde/particule atteigne le point C :

$$P(C) = |\Psi_{out}(x=C)|^2 = |\Psi_A + \Psi_B|^2.$$

Analogie : mécanique classique :

mécanique quantique :

Ψ : amplitude de probabilité.

$|\Psi|^2$: densité de probabilité de présence.

$$|\psi|^2 = \underbrace{\psi^*}_{\substack{\text{complexe} \\ \text{conjugué} \\ \text{de } \psi}} \times \psi.$$

$$\begin{aligned} |\psi|^2 &= \underbrace{Ae^{-i(kx - \omega t)}}_{\psi^*} \times \underbrace{Ae^{i(kx - \omega t)}}_{\psi} \\ &= A^2 e^{ix} \Rightarrow 1 = A^2. \end{aligned}$$

Définit°:

Proba élémentaire la particule dans l'élément d'espace dV .

$$dP(\vec{x}) = |\psi(\vec{x}, t)|^2 dV.$$

$$(dV \Rightarrow dx \times dy \times dz).$$

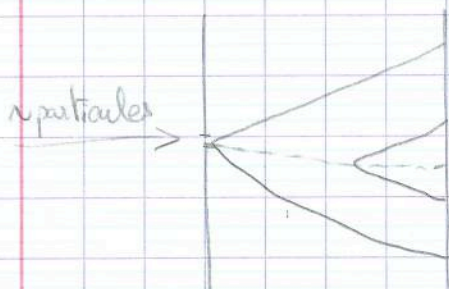
$$\Rightarrow \text{en 1D : } dV = dx.$$

Proba de trouver la particule quantique dans tout l'espace:

$$P = \int_V dP(x) = \int_V |\psi(\vec{x}, t)|^2 dV = 1$$

$\uparrow$
nécessité.

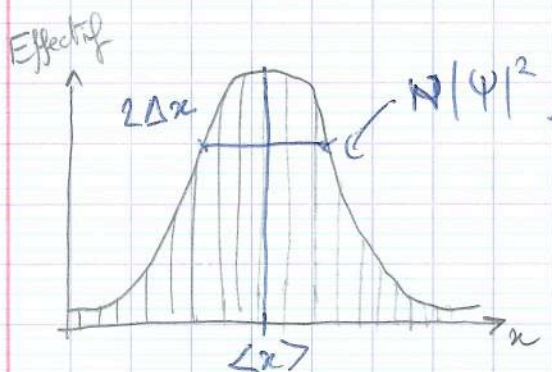
Interprétation probabiliste:



Mesure de position sur l'écran

Le résultat de la mesure n'est pas identique pour chaque point.
Distribution des impacts (sur l'écran) selon la densité de proba $|\psi|^2$.

Le 05/05/11. Histogramme des impacts:
↳ Distribution des positions.



Ensemble de N mesures caractérisé par :

- Valeur moyenne $\langle x \rangle$.
- ou espérance $\rightarrow$ VALEUR ATTENDUE.
- Dispersion Δx autour de $\langle x \rangle$.

$$\Rightarrow \langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x |\psi(x)|^2 dx \text{ en 1D.}$$

$$\Rightarrow \Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$$

II-2) Équation d'évolution des fonctions d'onde :

Construct^o de l'équation de Schrödinger.

Solution : fonction d'onde $\psi(x,t) = Ae^{i(kx - \omega t)} = Ae^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)}$.

• Dérivée (partielle) par rapport au temps.

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \psi(x,t) &= \frac{\partial}{\partial t} (Ae^{i(kx - \omega t)}) = -i\omega \underbrace{Ae^{i(kx - \omega t)}}_{\psi} \\ &= -i\omega \psi. \end{aligned}$$

Or $E = \hbar\omega = \hbar\omega$.

$$\frac{\partial}{\partial t} \psi = -\frac{i}{\hbar} E \psi.$$

Opérateur. $\Leftrightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = E \psi$ scalaire

$\rightarrow$ Equation aux valeurs propres.

Déf: opérateur Énergie: $\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$

tel que $\hat{E} \psi = E \psi$.

Dérivée $p/R \sim$ la coordonnée d'espace x (2 fois):

$$\frac{\partial}{\partial x} \psi(x, t) = i k A e^{i(kx - \omega t)}.$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) &= \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial}{\partial x} \psi \right) = \frac{\partial}{\partial x} (i k A e^{i(kx - \omega t)}) \\ &= -k^2 A e^{i(kx - \omega t)} \\ &= -k^2 \psi(x, t). \end{aligned}$$

$$\text{Or } \lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} \text{ et } \lambda = \frac{2\pi}{k}.$$

$$\Rightarrow k = \frac{2\pi p}{h} = \frac{p}{\hbar}$$

$$\text{D'où } \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi = -\frac{p^2}{\hbar^2} \psi, \text{ avec } p^2 = m^2 v^2, \text{ et } E_c = \frac{1}{2} m v^2.$$

d'où $p^2 = 2m E_c$.

$$\text{Finalement: } \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi = -\frac{2m}{\hbar^2} E_c \psi.$$

$$\text{Soit } \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi = E_c \psi.$$

$\Leftrightarrow$ Équation aux valeurs propres

Le 05/05/14.

Pour une particule "libre" (c'est-à-dire soumise à un potentiel extérieur).

$$E = E_c + V=0$$

On aboutit à :

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

En termes d'opérateurs :

$$\hat{E}_c = \frac{\hat{p}^2}{2m}$$

$$\Rightarrow \frac{\hat{p}^2}{2m} \Psi = \hat{E} \Psi.$$

Equation de Schrödinger :

$$\hat{H} \Psi(x,t) = \hat{E} \Psi(x,t).$$

Cas de la particule soumise au potentiel $V \neq 0$

Ex : particule chargée au voisinage d'une autre particule chargée.

$$\text{Energie totale: } E = E_c + V = \frac{p^2}{2m} + V.$$

Soit :

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V.$$

↑
opérateur
Hamiltonien.

Remarque : opérateur impulsion $\hat{p}$.

$$\text{On a } \frac{\hat{p}^2}{2m} = \frac{\hat{p} \cdot \hat{p}}{2m} = \left(\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial}{\partial x} \right) \frac{\partial}{\partial x} \right)$$

$$\Rightarrow \hat{p} = \pm i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

Convention: $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$

$\hat{p}$ appliqué à Ψ donne.

$$\begin{aligned} \hat{p} \Psi &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} (A e^{i(kx - \omega t)}) \\ &= -i\hbar (ik) A e^{i(kx - \omega t)} \\ &= \hbar k \omega > 0. \end{aligned}$$

II-3) Principe de superposition.



$$\Psi_c = \Psi_A + \Psi_B.$$

Soit 2 fonct° d'onde quelconque.

$$\Phi = \alpha \Psi_1 + \beta \Psi_2.$$

... est aussi 1 fonct° d'onde. α, β

Propriété compatible avec l'éq. de Schrödinger.

$$\forall \Psi_1 \text{ solut}^\circ \text{ et } \Psi_2 \text{ solut}^\circ \Rightarrow \Phi \text{ solut}^\circ.$$

Conséquence: Ensemble $\{\Psi(x, t)\}$ forme un espace vectoriel complexe.

+ condit° de normalisat°:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x,t)|^2 dx = 1$$

$$\Rightarrow \{ \psi(x,t) \}$$

→ Espace des fonct° de carrés sommables.
(càd Espace de Hilbert).

Définit°: Produit scalaire de 2 fonct° d'ondes ψ et ϕ .

$$\langle \psi, \phi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi^*(x,t) \psi(x,t) dx.$$

$$\text{Norme de } \psi: \langle \psi | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x,t) \psi(x,t) dx (=1).$$

II- 4) Principe de correspondance

Mesure d'une grandeur. → Résultat aléatoire.

⇒ opérateurs pour décrire des qtes observables.

A chaque grandeur physique correspond un opérateur position:

$$\text{Posit°: } \vec{r} = (x, y, z) \longrightarrow \hat{r} \psi = \vec{r} \psi. \quad (1D: \hat{x} \psi = x \psi).$$

$$\text{Impulsion: } \vec{p} \longrightarrow \hat{p} \psi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi = \hbar k \psi.$$

$$\text{Énergie } E \longrightarrow \hat{E} \psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = E \psi = \hbar \omega \psi.$$

$$\begin{aligned} \text{Hamiltonien } E_c + V &\longrightarrow \hat{H} \psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V \right) \psi \\ &= \left(\frac{p^2}{2m} + V \right) \psi. \end{aligned}$$

II-5) Mesure des grandeurs physiques.

A toute grandeur mesurable A correspond un opérateur $\hat{A}$ qui agit sur Ψ .

Les valeurs propres de $\hat{A}$ sont les seules valeurs observables.

Elles correspondent aux états propres de l'opérateur.

$$\hat{A} \Phi_n = \alpha_n \Phi_n(x).$$

Etats propres de $\hat{A}$ normés et orthogonaux.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Phi_n^*(x) \Phi_n(x) dx = 1$$

$$\int \Phi_p^*(x) \Phi_n(x) dx = 0 \text{ avec } n \neq p.$$

- Proba d'obtention d'une valeur propre de $\hat{A}$ lors d'une mesure.

$\hat{A}$ opérateur de valeurs propres discrètes α_n associées aux fonct^o propres de $\Phi_n(x)$.

Une fonct^o d'onde quelconque $\Psi(x,t)$ se décompose sur la base $\{\Phi_n\}$.

$$\Psi(x,t) = \sum_{n=1}^N C_n(t) \Phi_n(x) = C_1(t) \Phi_1(x) + C_2(t) \Phi_2(x) + \dots$$

La proba d'obtenir la valeur α_n lors de la mesure de $\hat{A}$ est :

$$P(\alpha_n) = |C_n(t)|^2$$

Dégénérescence : α_n correspond à $\neq \phi_n$.

$$\alpha_n \text{ dégénérée } g_n \text{ fois alors } P(\alpha_n) = \sum_{k=1}^n |c_k(t)|^2$$

- Valeur moyenne d'un opérateur : N mesures de $\hat{A}$ avec N particules ds le m^{ême} état ψ .

$$\langle \hat{A} \rangle_\psi = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x, t) (\hat{A} \psi(x, t)) dx.$$

II-6) Exemples:

* Fonct^o propres de l'opérateur impulsion.

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx} \text{ en 1D.}$$

Équat^o aux valeurs propres : $\hat{p} \phi(x) = \alpha \phi(x)$.

$$\Leftrightarrow -i\hbar \frac{d}{dx} \phi(x) = \alpha \phi(x).$$

$$-i\hbar d\phi(x) = \alpha \phi(x) dx.$$

$$\frac{d\phi(x)}{dx} = -\frac{\alpha}{i\hbar} dx = -i \frac{\alpha}{\hbar} dx$$

$$\ln(\phi(x)) = -i \frac{\alpha}{\hbar} x + \text{cte.}$$

$$\phi(x) = A \exp \left[-i \frac{\alpha}{\hbar} x \right] \quad A \text{ constante}$$

$\phi(x)$ existe $\forall x \in I$ (Infinité de solut^o).

Condition aux limites : $\phi(x)$ doit être périodique de période a .

$$\Leftrightarrow \exp\left(i \frac{\alpha}{\hbar} (x+a)\right) = \exp\left(i \frac{\alpha}{\hbar} x\right)$$

$$\Leftrightarrow \exp\left(i \frac{\alpha}{\hbar} x\right) \exp\left(i \frac{\alpha}{\hbar} a\right) = \exp\left(i \frac{\alpha}{\hbar} x\right) = \boxed{1}.$$

$$\Leftrightarrow \frac{\alpha}{\hbar} a = 2\pi n, \quad n=1, 2, 3, \dots$$

$$\Rightarrow \alpha \text{ quantifié : } \alpha_n = \frac{2\pi n \hbar}{a} \quad \left. \vphantom{\alpha_n = \frac{2\pi n \hbar}{a}} \right\} \begin{array}{l} \text{valeurs propres} \\ \text{discrètes.} \end{array}$$

Fonct° d'ondes $\phi_n(x)$ associées.

$$\phi_n(x) = A \exp\left(\frac{i}{\hbar} \frac{2\pi n \hbar x}{a}\right) = A \exp\left(i 2\pi n \frac{x}{a}\right).$$

* Valeur attendue lors de la mesure d'un opérateur.

$$\text{Posit° } \langle \hat{x} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* x \psi dx = \int_{-\infty}^{+\infty} x |\psi(x)|^2 dx$$

$$\text{Impulsion } \langle \hat{p} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \left(-i\hbar \frac{d}{dx}\right) \psi dx = -i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\psi^* \frac{d\psi}{dx}\right) dx.$$

$$\langle \hat{H} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* H \psi dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V\right) \psi dx.$$

$E_c + V.$

$$\text{Incertainitude sur la valeur } \langle \hat{A} \rangle : \Delta A = \sqrt{\langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2}$$

Le 11/05/2011.

Polarisation de la lumière.



$$\vec{P} = \vec{k}$$



Polariseur → Ne laisse passer l'onde que si elle est "bien" polarisée.

$\vec{\Psi}_p$ = Vecteur polarisation des photons envoyés 1 par 1.

Observable: Polarisation.

Si $\vec{\Psi}_p \parallel \vec{P}$, alors le résultat est certain $\rightarrow 1$.

Si $\vec{\Psi}_p \perp \vec{P}$, résultat certain $\rightarrow 0$.

$\Rightarrow$ Quantification du résultat de la mesure.

Si $\vec{\Psi}_p$ est ds un état quelconque, on effectue une décomposit^o sur la base des états propres du polariseur (soit $\vec{P}$, soit $\vec{P}^\perp$).

$$\vec{\Psi}_p = \cos\theta \vec{P} + \sin\theta \vec{P}^\perp.$$

Probabilité qu'un photon passe / ne passe pas.

$$P(1) = \cos^2\theta$$

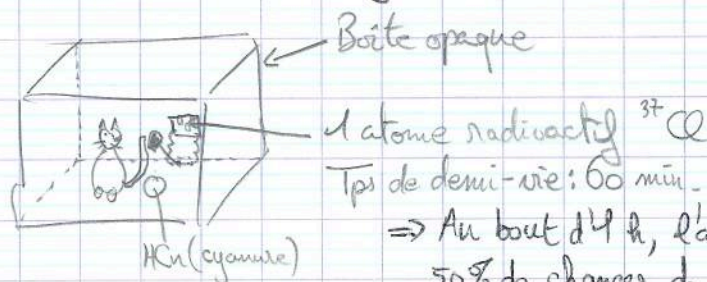
$$P(0) = \sin^2\theta.$$

$$\Rightarrow \sum_{i=0}^n P_i = 1 \rightarrow \text{c'est bon} \quad (\text{Ici } \cos^2\theta + \sin^2\theta = 1).$$

La mesure projette l'état du système dans l'un des états propres de l'observable.

$\Rightarrow$ La mesure prépare l'état du système.

Paradoxe du chat de Schrödinger.



Fluorure-cyanure: système passif.

Atome radioactif.

Lo quantique.

$$\Psi_{\text{et}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \Psi_{\text{intégrée}} + \frac{1}{\sqrt{2}} \Psi_{\text{désintégrée}}.$$

$$\Rightarrow \Psi_{\text{chat}} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_{\text{vivant}} + \Psi_{\text{mort}}).$$

Avant observat^o, superposit^o d'états pour le chat.

Observat^o: chat vivant

ou

chat mort

$\Rightarrow$ L'observateur tue le chat.

A $t=2h$: chat mort 75% - vivant 25%

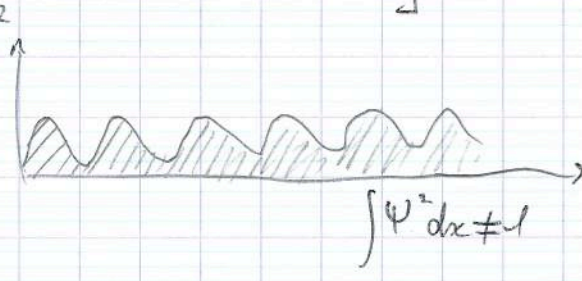
$$\Psi_{\text{chat}} = \sqrt{\frac{3}{4}} \Psi_{\text{mort}} + \sqrt{\frac{1}{4}} \Psi_{\text{vivant}} = \frac{\sqrt{3}}{2} \Psi_{\text{mort}} + \frac{1}{2} \Psi_{\text{v}}.$$

Le 11/05/2022

II- 7) Paquet d'onde et principe d'incertitude de Heisenberg.

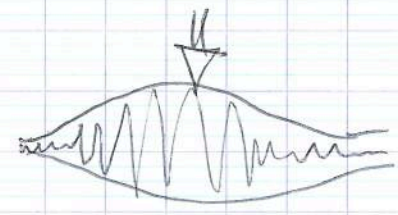
Onde plane $Ae^{i(kx - \omega t)} = A \left[\underbrace{\cos(kx - \omega t)}_{\psi^2} + i \sin(kx - \omega t) \right]$

$\neq$ fonct° de carrés sommables.



$\Rightarrow$ Descript° réaliste d'une particule: **paquet d'onde**

Superposit° d'ondes planes
Interférences constructives sur un domaine défini de l'espace $\rightarrow$ +
destructives en dehors



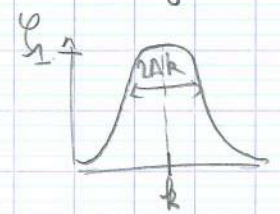
Expression du paquet d'ondes 1D:

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \underbrace{\varphi(k)}_{\text{Distribut° d'états } k} e^{i(kx - \omega t)} dk$$

$\rightarrow$ Déf de la transformée de Fourier

Forme du paquet d'onde à $t=0$.

Soit $\varphi(k)$: gaussienne.



Soit 3 ondes de ce paquet:

k_0 amplitude 1.

$k_0 + \Delta k$ amplitude $\frac{1}{2}$.

$k_0 - \Delta k$ amplitude $\frac{1}{2}$.

$$\begin{aligned} \psi(x,0) &= \frac{\varphi(k)}{2\pi} \left[e^{i(k_0 x - \omega_0 x)} + \frac{1}{2} e^{i(k_0 x - \Delta k x)} + \frac{1}{2} e^{i(k_0 x + \Delta k x)} \right] \\ &= \frac{\varphi(k)}{\sqrt{2\pi}} e^{ik_0 x} \left[1 + \frac{1}{2} e^{-i\Delta k x} + \frac{1}{2} e^{+i\Delta k x} \right] \end{aligned}$$

$$= \frac{\psi(k)}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} [1 + \cos(\Delta k x)].$$

$\psi(x)$ max. $\Leftrightarrow x=0$. (les 3 ondes en phase $\rightarrow$ interférence construct.)

$\psi(x)=0 \Leftrightarrow e^{ik_0 x}$ et $e^{i(k_0 \pm \Delta k)x}$ déphasées de $\pm \pi$.

$\psi(x)$ s'annule aux points $x_0 = \Delta x$ etc.

$$\Delta k x_0 = \Delta k \Delta x = \pi.$$

$\Rightarrow$ Définit la forme du paquet donnée par $\Delta k \Delta x = \pi$.

$$\text{Or } p = \hbar k. \Rightarrow \Delta k = \frac{\Delta p}{\hbar}$$

$$\text{Donc } \Delta p \Delta x = \pi \hbar$$

Impossibilité de mesurer simultanément p et x avec précision.

$\rightarrow$ Principe d'incertitude de Heisenberg

$$\text{De façon rigoureuse, } \Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}.$$

$$\text{et direct^o de l'espace: } \Delta y \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2}.$$

$$\Delta z \Delta p_z \geq \frac{\hbar}{2}$$

Ordres de grandeur:

Un véhicule $m = 1500 \text{ kg}$.

Roule à $100 \pm 10 \text{ km/h}$.

Incertitude sur sa posit^o?

$2,1105 \text{ km}$

$$\Delta x \cdot m \Delta v_x = \frac{h}{2} \approx h.$$

$$\Delta v_x = 10 \text{ km/h} = 2,78 \text{ m.s}^{-1}.$$

$$\Delta x \approx \frac{6,62 \times 10^{-34}}{1500 \times 2,78} \approx 1,6 \cdot 10^{-37} \text{ m}$$

• Vitesse d'un e^- connue $\approx \pm 1 \text{ m.s}^{-1}$. Δx ?

$$\Delta x \cdot m_e \Delta v_x \approx h.$$

$$\Delta x \approx \frac{6,67 \cdot 10^{-34}}{9,1 \cdot 10^{-31} \times 1} = 7,3 \cdot 10^{-4} \text{ m}$$

10^6 fois $\oplus$ grand que la taille d'un atome !.

La 4^e relation d'incertitude
(x, y, p, t)

Soit 1 particule traversant une fenêtre de largeur Δx avec l'impulsion $\vec{p} = m\vec{v}$

Énergie cinétique :

$$E_c = \frac{p_x^2}{2m}.$$

Par dérivation de $E_c(p_x)$.

$$\frac{dE_c}{dp_x} = \frac{p_x}{m}.$$

$$\Rightarrow dE_c \approx \frac{p_x}{m} dp_x \Leftrightarrow \Delta E_c = \frac{p_x^2}{m} \Delta p_x. \text{ or } \vec{p} = m\vec{v}$$