

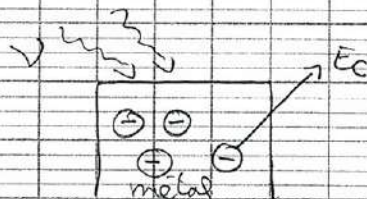
La lumière comme une particule

Effet photoélectrique

Découvert par hasard par Hertz (1887)

Étudié par Lenard (1899-1902)

- Observations:
- 1) Les UV arrachent des e^- au métal
 - 2) Nbr e^- arrachés $\propto I$ lumière
 - 3) $E_c(e^-) = \frac{1}{2} m_e v^2$ indépendante de I lumière
 - 4) $E_c(e^-) \nearrow$ qd λ lumière $\nearrow$ (cad $\lambda < \lambda_0$) $\lambda = c/\nu$
 - 5) Effet de Seuil : potentiel d'arrêt = V_0 pour l'effet photoélectrique



Echec de la théorie ondulatoire

Fréquence seuil : pour l'onde électromagnétique

 V_0 indépendant de I lumière $\propto A^2$ $\leftarrow$ amplitude de

Explication quantique (Einstein)

Interprétation de Einstein (1905)

$$E_{\text{photon}} = h\nu$$

Énergie cinétique des électrons

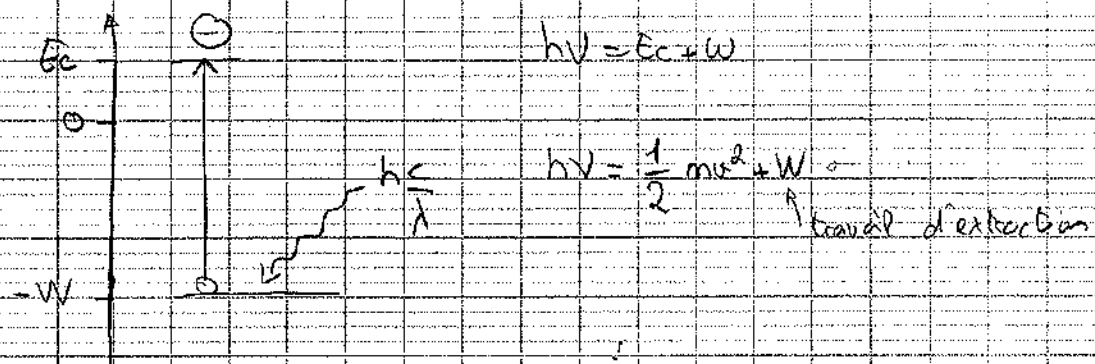
(Relation de Planck et Einstein)

$$E_c = h\nu - W$$

Expérience de Millikan (1906)

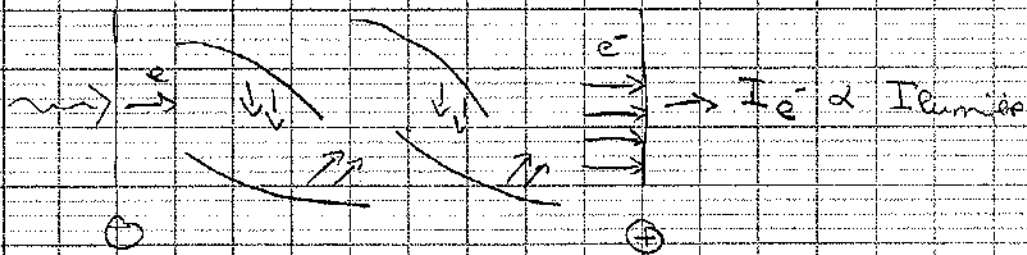
mesure de la constante de Planck

 W : travail d'extraction caractéristique des matériauxex: $W = 2 \text{ eV}$ pour le métalCollision photon / e^- mécanique



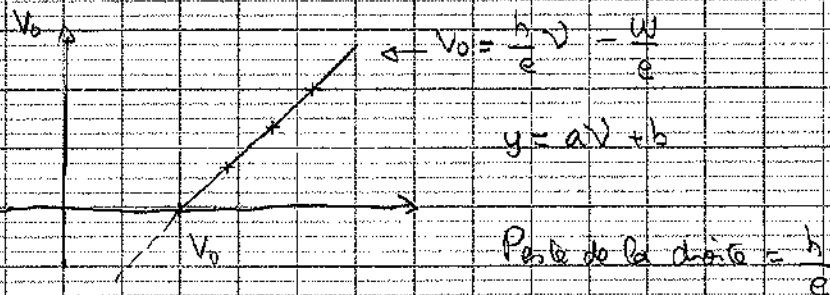
Effet de seuil V_0 : à basse fréquence $V_1 < V_0$
 → pas d' e^- extrait
 à haute fréquence $V_2 > V_0$
 → e^- extrait avec $Ec = h\nu - W$

Photomultiplicateur



Recherche de h (cette de Planck):

$$eV_0 = \frac{1}{2}m_e v^2 \text{ et } \frac{1}{2}mv^2 = h\nu - W \rightarrow eV_0 = h\nu - W$$



$$h = 6,63 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$$

Exercices

Quelle est l'énergie en eV d'un photon si $\lambda = 400 \text{ nm}$ 3,1 eV (violet)

Quelle est l'énergie en eV d'un photon si $\lambda = 700 \text{ nm}$ 1,77 eV (rouge)

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} \quad (\text{en Joule})$$

comment passer en eV? Il faut connaître la charge de e^-

$$e = 1,6 \times 10^{-19} \text{ C} \quad \text{d'où}$$

$$1 \text{ eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$

$$E = \frac{hc}{\lambda e} \quad (\text{en eV}) \quad c = 3 \cdot 10^8 \text{ m/s}$$

Intensité moyenne de la lumière solaire à la surface de la Terre est 1400 W/m^2 (env.)

Si l'énergie moyenne d'un photon est 2 eV ($\lambda \approx 600 \text{ nm}$)

Calculer le nbr de photons qui frappent une surface de 1 cm^2 à chaque seconde

À chaque s, l'énergie des photons solaires:

$$E = \text{puissance} \times 1 \text{ s} = 1400 \times 1 = 1400 \text{ J/m}^2 = 0,14 \text{ J/cm}^2$$

$$\text{Nbr photons} \times 2 \text{ eV} = 0,14 \text{ J/cm}^2$$

$$\downarrow$$
$$3,2 \times 10^{-19} \text{ J}$$

$$\text{Nbr photons/cm}^2 = \frac{0,14}{3,2 \cdot 10^{-19}} = 4,38 \cdot 10^{17}$$

a) λ_{max} pour observer l'effet photoélectrique est 564 nm pour le potassium

Calculer le travail d'extraction W .

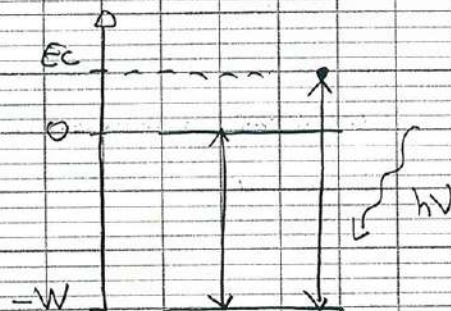
b) On utilise 1 lumière monochromatique $\lambda = 400 \text{ nm}$

Déterminer E_{max} des e^- et V_{max} .

a) Au seuil photoélectrique :

$$h\nu_0 = W \text{ car } E_c = 0$$

$$W = \frac{hc}{\lambda_{\max} e} = 2,20 \text{ eV}$$



b) $\lambda = 400 \text{ nm} < \lambda_{\max} \rightarrow$ effet photoélectrique

$$\frac{hc}{\lambda e} = E_c + W \rightarrow E_c = \frac{hc}{\lambda e} - W = 3,106 - 2,20 = 0,906 \text{ eV}$$

vitesses de l'e⁻ : $E_c = \frac{1}{2} m v^2 \rightarrow v^2 = \frac{2 E_c}{m} \rightarrow v = \sqrt{\frac{2 E_c}{m}}$

$m_e = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$

$$v = \left(\frac{2 \times 0,906 \times 1,6 \cdot 10^{-19}}{9,1 \cdot 10^{-31}} \right)^{1/2} = 5,64 \cdot 10^5 \text{ m/s} < 3 \cdot 10^8 \text{ m.s}^{-1}$$

Effet Compton (1923)

Collision élastique photon électron

La longueur d'onde du photon émergent est plus longue que celle du photon incident.

Différence des longueurs d'ondes :

$$\Delta \lambda = \lambda - \lambda' = \lambda_c (1 - \cos \theta)$$

Longueur d'onde de Compton

$$\lambda_c = \frac{h}{m_e c} = 2,43 \cdot 10^{-12} \text{ m}$$

Processus quantique aléatoire

Expérience dans laquelle les électrons sont envoyés 1 par 1

le caractère ondulatoire qui définit les figures d'interférence et observé

③

Lumière (particule) : photon

fréquence $\nu (= c/\lambda)$ longueur d'onde λ vitesse c Energie $h\nu$ Impulsion $p = E/c$
(relativité)

Lumière (onde) électromagnétique

fréquence ν puissance $P = N \times \frac{h\nu}{\Delta t}$ nbr photons frappant 1 surface unité ptt
 Δt

La mise en évidence de la nature discontinue des échanges d'énergie et son interprétation révèle, en tant que conséquence, l'aspect corpusculaire de la lumière. Toute lumière est 1 succession de quanta d'énergie.

Hypothèse ondulatoire de L. de Broglie (1923)

Conciliation de l'aspect corpusculaire et ondulatoire de la lumière

Combinaison des équations d'Einstein (relativité) et de Planck (quanta)

$$E = pc \longrightarrow pc = h\nu \longleftarrow E = h\nu$$

$$\downarrow \quad \lambda = \frac{c}{\nu}$$

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

Généralisation du concept aux particules matérielles

A toute particule d'impulsion $p = mv$, on associe 1 onde de longueur d'onde.

$$\lambda = \frac{h}{mv}$$



Dualité onde-particule

impulsion
↑
Propriété associée à
la particule

 $\propto$

1
longueur d'onde
↑
Propriété associée à
l'onde

Toutes les entités présentent les 2 caractères indissociables de particule et d'onde

Ces caractères ne sont manifestes qu'à l'échelle microscopique

0
1 particule quand elle interagit avec la matière

Une onde quand elle se propage ds la matière comme ds le vide

Exercices

Ordre de grandeur de $\lambda = h/p$

- Goutte de pluie ($d = 2 \text{ mm}$) tombe à la vitesse $V = 10 \text{ m.s}^{-1}$

$$\lambda_{DB} = \frac{h}{m_{\text{eau}} V}$$

$$m_{\text{eau}} = \rho_{\text{eau}} \times V_{\text{goutte}} = \rho_{\text{eau}} \times \frac{4}{3} \pi \left(\frac{d}{2}\right)^3$$

$$= 10^3 \times \frac{4}{3} \pi \times 10^{-9} = 4 \cdot 10^{-6} \text{ kg}$$

$$\lambda_{DB} = \frac{6,63 \cdot 10^{-34}}{4 \cdot 10^{-6} \times 10} = \frac{3}{2} 10^{-29} \text{ m} = 1,5 \cdot 10^{-19} \text{ Å} \quad 1 \text{ Å} = 10^{-10} \text{ m}$$

PAS DE SENS PHYSIQUE

- e^- d'un tube cathodique de TV accélérés avec $V = 220 \text{ V}$

$$\lambda_{DB}(e^-) = \frac{h}{mv}$$

$$E_c = 220 \text{ eV} = \frac{1}{2} m v^2 \rightarrow v = \sqrt{\frac{2 E_c}{m}}$$

$$\lambda_{DB}(e^-) = \frac{h}{m \sqrt{\frac{2 E_c}{m}}} \rightarrow \lambda_{DB}(e^-) = \frac{h}{\sqrt{2 m E_c}}$$

nm eV

Pour e^- , $\lambda_{DB} = \frac{1,23}{\sqrt{V}} = 0,083 \text{ nm}$ soit 83 pm (mesurable)

Expérience de Davisson et Germer 1927

1^{re} vérification de l'hypothèse ondulatoire de De Broglie

Electrons diffractés par un cristal de nickel

→ les électrons diffusés par 1 cristal et réfléchis selon les directions

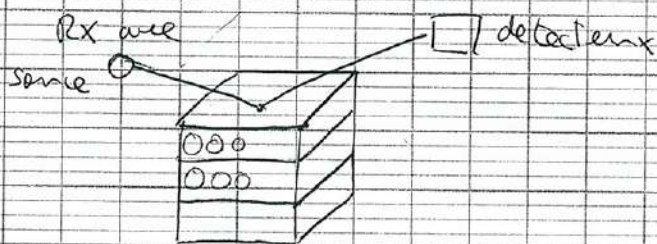
Le comportement ondulatoire

Combinaison loi de Bragg et longueur d'onde de De Broglie

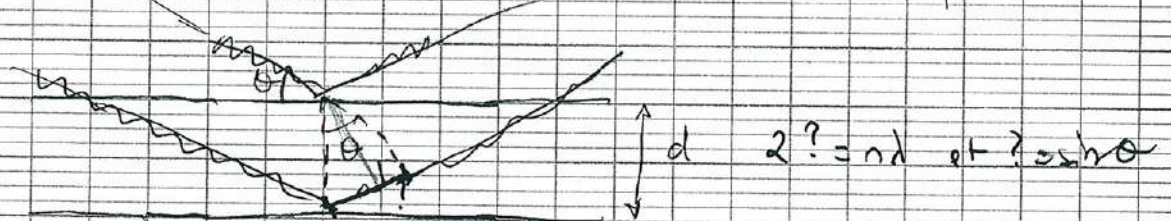
$$\frac{h}{2d \sin \theta} = \frac{p}{h}$$

$$(n\lambda = 2d \sin \theta) \text{ loi de Bragg}$$

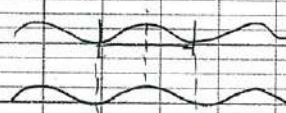
Diffraction de Bragg avec rayon X



Intensité des ondes réfléchies grande sans si elles sont en phase



les interférences constructives



$$2d \sin \theta = n\lambda \text{ loi de Bragg (n entier)}$$

Davisson et Germer $Rx = e^-$

e^- se comporte comme des ondes en utilisant Bragg + λ De Broglie

$$\left. \begin{aligned} 2d \sin \theta &= n\lambda \\ \lambda &= \frac{h}{p} \end{aligned} \right\} 2d \sin \theta = n \frac{h}{p}$$

$$\frac{n}{2d \sin \theta} = \frac{p}{h} \Rightarrow p = mv = \sqrt{2mE_c} = \sqrt{2meU}$$

↑ potentiel d'accélération

$$\hookrightarrow \frac{n}{2d \sin \theta} = \frac{\sqrt{2meU}}{h}$$

$A(\theta)$ fixé $I = f(U)$ représente des pics régulièrement espacés

$$\lambda(e^-) = \frac{1.23}{\sqrt{U}} = 0.67 \text{ nm}$$

↑ (eV)

On remonte à d ($n=1$)

$$d = \frac{\lambda}{2 \sin \theta} = 0.11 \text{ nm}$$

Expériences d'interférences avec 2 fentes et une source de particules matérielles (diffraction)

Comportement d'onde pour des particules macroscopiques

Plus gros objet diffracté : molécule de fullerène C_{60}

(4)



28



1000



10000

la figure d'interférence n'apparaît qu'en présence des 2 fentes

Expérience dans laquelle les photons sont envoyés 1 par 1
le caractère ondulatoire qui définit les figures d'interférence est conservé

Tps d'exposition:

• nature ondulatoire de la lumière

détermine la proba qu'un photon atteigne un certain endroit

• nature particulière de la lumière

traduit caractère événementiel localisé dans l'espace-tps de la présence d'un photon sur l'écran

critère de quantité

les concepts classiques cessent de s'appliquer quand:

action caractéristique $\sim$ constante de Planck h

action = longueur caractéristique $\times$ impulsion caractéristique

$$E = h\nu$$

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

$$[h] = [E] \times T \quad \text{énergie} \times \text{tmp}$$

$$[\lambda] = L \times [p]$$

Exemple : conduction d'électrons par un fil

pont d'aluminium déposé sur un isolant

électron d'impulsion p

action caractéristique = pa on compare à cette Planck

système	masse (kg)	vitesse (m/s)	taille caractéristique (m)	Pa/h
homme passant par 1 pont	70	1	1	10^{35}
globule rouge dans un capillaire	10^{-16}	10^{-1}	10^{-4}	10^{12}
electron dans 1 fil droit	$9 \cdot 10^{-31}$	10^6	10^{-9}	$1,36$

↓
quantique

La physique quantique peut aussi être macroscopique

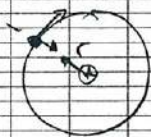
ex: Superfluidité de l'hélium liquide à basse 0° ($T < 2,3 K$)

Supraconductivité de certains métaux à basse 0°

Caractère quantique marqué si distance entre voisins $< \lambda$ De Broglie

Quantification de l'énergie dans l'atome

Modèle atomique de Rutherford



dipôle oscillant (antenne)

rayonne de l'énergie sous forme d'onde électromagnétique (em)

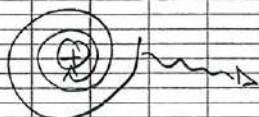
Conservation de l'énergie

Énergie rayonnée compensée par perte de vitesse de l'électron (e^-)

↳ E_c (énergie cinétique) $\searrow$

→ orbitales $\searrow$ (rayon)

→ atome instable! ? durée de vie estimée: $10^{-8} s$



Modèle atomique de Bohr (1913)

Postulats

① e^- circule à vitesse et énergie constante sur orbites stables pour lesquelles forces centrifuge et électrostatique se compensent

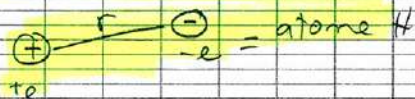
② Sur ces orbites moment cinétique orbital quantifié

$$L = m \vec{v} \wedge \vec{r}$$

$$= n \frac{h}{2\pi} \quad (n \text{ entier})$$

③ changement d'orbite par absorption / émission d'énergie

$$|E_f - E_i| = n h \nu$$



Rayon et Énergies permis pour les orbites de Bohr (modèle semi-classique).

Équilibre des forces :

$$\begin{cases} \text{centrifuge : } F_c = \frac{mv^2}{r} \\ \text{électrostatique : } F_e = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r^2} \end{cases}$$

$$F_c = F_e \Leftrightarrow \frac{mv^2}{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \times \frac{e^2}{r^2}$$

moment cinétique : $L = mvr = n \frac{h}{2\pi}$

$$mv = \frac{nh}{2\pi r}$$

$$\frac{m}{r} \times \frac{n^2 h^2}{4\pi^2 m^2 r^2} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \times \frac{e^2}{r^2} \Leftrightarrow \frac{n^2 h^2}{\pi m r} = \frac{e^2}{\epsilon_0}$$

$$\text{d'où } r_n = \left(\frac{h^2 \epsilon_0}{\pi m e^2} \right) n^2$$

$\downarrow$
 R_0

rayon des orbites

$$\int x^n dx = \frac{1}{n+1} x^{n+1}$$

$$r_n = 6n^2$$

$$r_0 = 52.9 \text{ pm} = 5.29 \times 10^{-11} \text{ m}$$

Energie atomique (niveau energie)

$$E_n = E_c + V \quad (\text{cinétique} + \text{potentielle})$$

$$E_c = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{p^2}{2m} \quad \text{or } p = \frac{nh}{2\pi r}$$

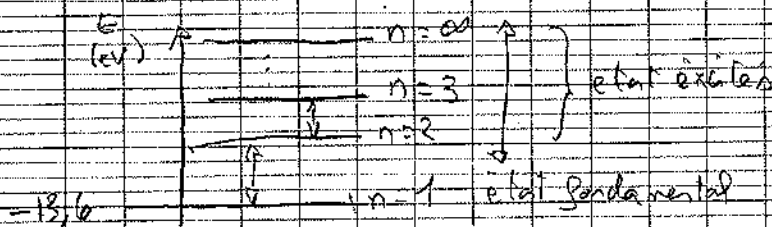
$$E_c = \frac{n^2 h^2}{4\pi^2 r_n^2 2m} = \frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^2 n^2}$$

$$V = \int_0^\infty F_e(r) dr = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int_0^\infty \frac{dr}{r^2} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(-\frac{1}{r} \right) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_n}$$

$$V = -\frac{me^4}{4\epsilon_0^2 h^2 n^2} = -2 E_c$$

$$E_n = E_c - 2 E_c = -E_c \quad \text{or } E_n = -\frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^2 n^2} = -\frac{E_0}{n^2} = \boxed{-\frac{13.6}{n^2} \text{ eV}}$$

Diagramme à énergie



Spectroscopie atomique (raies spectrales)

$$\Delta E = (E_f - E_i) = h\nu = h \frac{c}{\lambda}$$

$$= R_0 \left| \frac{1}{n_g} - \frac{1}{n_i} \right|$$

$$\frac{1}{\lambda} = \left(\frac{R_0}{hc} \right) \left| \frac{1}{n_g^2} - \frac{1}{n_i^2} \right|$$

$R = 1.09 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$ constante de Rydberg

II Concepto de la mecánica cuántica

- ① {
 - Fonction d'onde
 - Probabilité de présence
- ② Equation de Schrödinger
- ③ Principe de superposition
- ④ Principe de correspondance - Observables
- ⑤ Principe d'incertitude (Heisenberg)
- ⑥ Paquet d'ondes
- ⑦ Principe de décomposition spectrale (postulat du chat de Schrödinger)

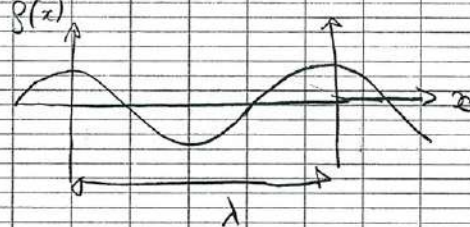
Fonction d'onde

Toute perturbation se déplace par 1 λ et périodique

$$g(x + n\lambda)$$

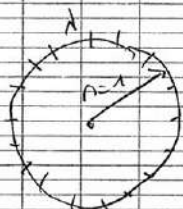
(n entier, λ longueur d'onde)

Ex: sin et cos



Onde plane : $\psi(x) = A e^{ikx}$

k = nombre d'onde = $\frac{2\pi}{\lambda}$
 (nb de longueurs d'onde à faire rentrer dans un cercle)
 A = amplitude de l'onde





$$e^{ikx} = \cos(kx) + i \sin(kx)$$

La onde stationnaire = remplit l'espace (min et max) mais ne bouge pas.

Onde en mouvement

La paramètre temporel

déplacement de l'onde à la vitesse v

Il faut le temps T (période) pour déplacement = λ

$$T = \frac{\lambda}{v}$$

fréquence de l'onde :
$$V = \frac{1}{T} = \frac{v}{\lambda}$$

exemple: cercle unité circonférence 2π unités de tps } 1 unité de tps
1 la parcouru en T unité de tps } $t_{ps} = \frac{2\pi}{T}$

$\frac{2\pi t}{T}$: nombre de cycles parcourus p'dt le tps t

pulsation
$$\omega = \frac{2\pi}{T} = 2\pi V$$

L'onde se déplace

La coordonnée x qui se déplace

$$x' = x + vt$$

$$v = \frac{\lambda}{T} = \lambda V = \frac{2\pi}{k} \frac{\omega}{2\pi} = \frac{\omega}{k}$$

Vitesse de phase de l'onde :

$$v = \frac{\omega}{k}$$

Onde propagative

$$kx' = kx + \omega t$$

$$\rightarrow \psi(x, t) = A \exp(i(kx \pm \omega t))$$

convention: propagation $x > 0$ et $t \nearrow$

$$\psi(x, t) = A \exp(i(kx - \omega t))$$

ψ contient toute l'information concernant la particule

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \quad \lambda = \frac{h}{p} \quad \Leftrightarrow \quad k = \frac{2\pi p}{h} \quad \Leftrightarrow \quad p = \frac{h k}{2\pi} = \hbar k$$

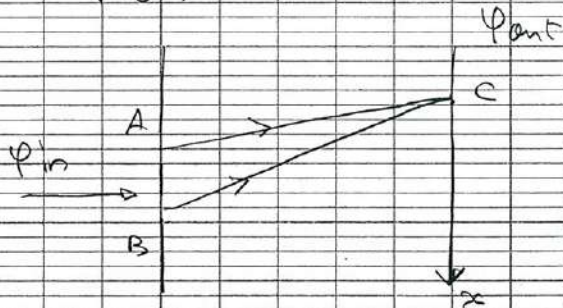
"h barre"

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

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} \approx 1,054 \times 10^{-34} \text{ J.s}$$

$$\psi(x, t) = A \exp\left(\frac{i}{\hbar}(Px - Et)\right)$$

Sens physique de la fonction d'onde?



$$\psi_{out} = \psi_A = \psi_B$$

onde em $\vec{E}(x) = E_A + E_B$

onde méca ψ_{out} = amplitude de proba

$$I \propto |E|^2 \quad \text{"intensité" = densité d'énergie}$$

$$|\psi_{out}|^2 = \text{densité de proba de présence}$$

$$|\psi|^2 = A^* e^{-i(kx - \omega t)} \times A e^{i(kx - \omega t)}$$

$$= |\psi^* \psi| = |A^* A| \times \frac{e^0}{1} = |A|^2 \in \mathbb{R}$$

↑
complexe
conjugué de ψ

Proba de présence

$|\psi(x, t)|^2$ ^{relé à la} proba élémentaire de "trouver" la particule dans le volume dV dP

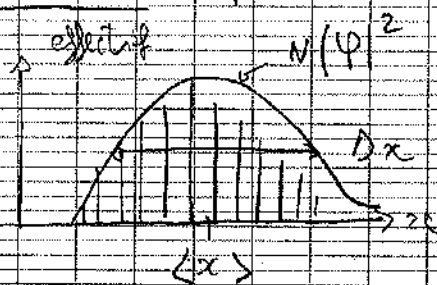
$$dV = dx \times dy \times dz$$

$$dP = |\psi(x, t)|^2 dV$$

Intégration sur tout l'espace

$$P = \int_V |\psi|^2 dV = 1$$

N mesures de position



$\langle x \rangle$ valeur moyenne attendue

$$\langle x \rangle = \int x |\psi(x, t)|^2 dx$$

$$\Delta x \text{ (q)} (\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle$$

la mesure de position

Rappel

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

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{p}{\hbar}$$

$$\omega = 2\pi \nu = \frac{E}{\hbar}$$

$$A \in \mathbb{C}$$

$$\lambda = \frac{c}{\nu}$$

⑥

$$\frac{d}{dt} e^{at} = a e^{at}$$

Signification physique

ψ : amplitude de proba

$|\psi(x, t)|^2$: densité de proba de présence de la particule

Equation de Schrödinger

Evolution de $\psi(x, t)$

Remplace le principe fondamental de la dynamique

• Dérivée par rapport à t

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

↑
dérivée partielle
par rapport à t

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

équation aux valeurs propres: $\underbrace{+i\hbar \frac{\partial}{\partial t}}_{\text{opérateur énergie}} \psi(x, t) = \underbrace{E}_{\substack{\text{scalare} \\ E \in \mathbb{R}}} \psi(x, t)$

• dérivée (2^{de}) par rapport à x :

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

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial}{\partial x} \psi(x, t) \right)}_{(\psi_{xx}(x, t))} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) = \frac{\partial}{\partial x} (i A k e^{i(kx - \omega t)}) = \underbrace{(i^2)}_{-1} A k^2 e^{i(kx - \omega t)} = -k^2 \psi(x, t)$$

Particule libre

$$E = E_c = \frac{p^2}{2m} \quad (\text{avec } p = mv)$$

$$p^2 = 2mE$$

$$h^2 = \frac{2mE}{\frac{1}{h^2}}$$

$$\rightarrow \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x,t) = -\frac{2mE}{h^2} \psi(x,t)$$

$$\underbrace{-\frac{h^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}}_{\text{opérateur } \frac{p^2}{2m}} \psi(x,t) = E \psi(x,t)$$

Equation de Schrödinger (particule libre)

$$\left[-\frac{h^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x,t) \right]$$

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

Particule soumise au potentiel $V(x)$

opérateur $\left(\frac{p^2}{2m} + V \right)$

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

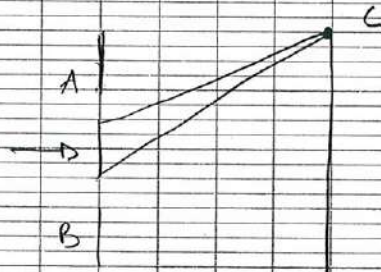
opérateur $\left(-\frac{h^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V \right)$: Hamiltonien $\hat{H}$

opérateur énergie $\hat{E}$

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

Principe de superposition

les fonctions d'ondes peuvent s'ajouter
Interférences



ψ_C : amplitude de l'onde au point C

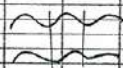
$$\psi_C = \psi_A + \psi_B$$

Soient ψ_1 et ψ_2 2 fonctions d'onde quelconques
principe de superposition:

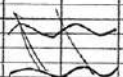
$$\psi = \underbrace{a}_{a e^{i\varphi_1}} \psi_1 + \underbrace{b}_{b e^{i\varphi_2}} \psi_2$$

$a, b \in \mathbb{C}$
est aussi
une fct d'onde

conséquence: $\{\psi(x, t)\}$ ensemble des fonctions d'ondes



est un espace vectoriel complexe



+ condition de normalisation

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

$\rightarrow \{\psi(x, t)\}$ espace de fonctions de carré sommable
= espaces de Hilbert

Hilbert

Toute combinaison linéaire de solution d'une équation diff est aussi solution.

Principe de correspondance

A mesure d'un résultat aléatoire à chaque grandeur physique, on fait correspondre un opérateur.

Un opérateur décrit une quantité physique observable.

position: $\vec{r} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \rightarrow \hat{r}\psi = \vec{r}\psi$ en 1D $\hat{r} = \begin{pmatrix} x \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \rightarrow \hat{r}\psi = x\psi$

impulsion: $\vec{p} = m \begin{pmatrix} v_x \\ v_y \\ v_z \end{pmatrix} \rightarrow \hat{p}_x = i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi = \hbar k \psi$

énergie: $E \rightarrow \hat{E}\psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \hbar \omega \psi$

hamiltonien: $\hat{E}_c + V \rightarrow \hat{H}\psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V \right) \psi = \left(\frac{p^2}{2m} + V \right) \psi$

Propriétés des opérateurs ou observables

opérateurs $\hat{A}$ linéaire

si $\hat{A}\psi_1 = \phi_1$ et $\hat{A}\psi_2 = \phi_2$ } alors $\hat{A}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = \hat{A}(c_1\psi_1) + \hat{A}(c_2\psi_2)$
 $\hat{A}\psi_1 + \hat{A}\psi_2 = c_1\phi_1 + c_2\phi_2$

$\hat{A}$ opérateur hermitien

$$\int \psi_1^* (\hat{A}\psi_2) dx = \int (\hat{A}\psi_1)^* \psi_2 dx$$

$\rightarrow$ valeur attendue de l'observable

$$\langle A \rangle = \int \psi_1^* \hat{A} \psi_2 dx \in \mathbb{R} \text{ et valeur propre de } \hat{A} \text{ si réelles}$$

$$\hat{A}\psi_n = a_n \psi_n$$

réelles

$\hat{A}$ décrit une quantité observable en toute circonstance

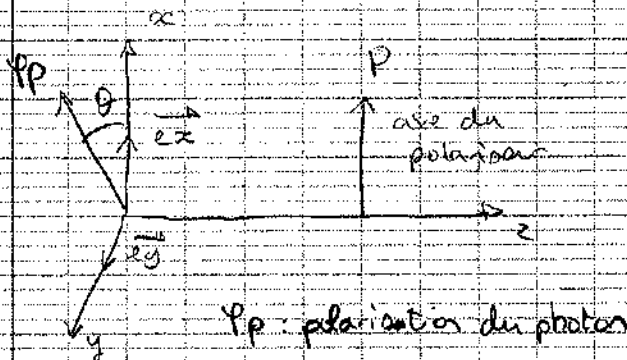
On doit pouvoir prédire les résultats d'une mesure de A

les fonctions propres de $\hat{A}$ forment une base de l'espace $\{\psi(x,t)\}$

$$\psi(x,t) = \sum_n \underbrace{C_n(t)}_{\substack{\text{amplitude} \\ \text{de proba}}} \psi_n(x)$$

$|C_n(t)|^2 \rightarrow$ proba d'obtenir le résultat n à la valeur propre

Principe de décomposition spectrale : mesure



expérience : source de photons uniques
polarisation

polariseur : 2 résultats

- photon passé (1)
- photon bloqué (0)

valeurs propres

quantification du résultat de la mesure

A chaque valeur propre correspond 1 état propre

- (1) $\rightarrow \vec{e}_x$
- (0) $\rightarrow \vec{e}_y$

si $\vec{p}_p = \vec{e}_x$ alors proba 100% photon passé
si $\vec{p}_p = \vec{e}_y$ 100% bloqué

$\vec{p}_p$ quelconque

décomposition sur les états propres du polariseur

$$\vec{p}_p = \cos \theta \vec{e}_x + \sin \theta \vec{e}_y \quad \theta \in [0, 2\pi]$$

Proba photon passe : $|\cos \theta|^2$

bloqué : $|\sin \theta|^2$

$\cos^2 \theta + \sin^2 \theta = 1 \rightarrow \Psi_P$ proba

conservation de proba

la même pertube le système

Ψ_P avant $\xrightarrow{P}$ Ψ_P après : photon passe

Préparer : l'état du système

Paradoxe du chat de Schrödinger



atome radio-actif ^{32}Cl
durée de vie 60 min

50% désintégré

Atome à $t = 1\text{h}$: proba $\frac{1}{2}$ désintégré
 $\frac{1}{2}$ intégré

$$|\Psi(\text{atome})|^2 = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2 (\Psi_{\text{intégré}} + \Psi_{\text{désintégré}})^2 = 1$$

observation à $t = 1\text{h}$: le chat est mort : qui est comptable ?

matériau + $H(\alpha)$: système purif

atome radio-actif : superposition d'états

pour observer l'atome ? faut observer son état

Tout système est quantique

$$\rightarrow \Psi_{\text{chat}} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_{\text{avant}} + \Psi_{\text{mort}}) \rightarrow \text{observer l'état du chat}$$

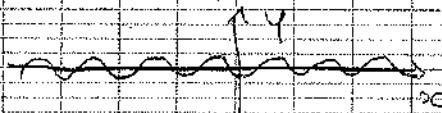
Représentation réaliste d'une particule

paquet d'onde et principe d'incertitude de Heisenberg

Onde plane (De Broglie) avec

$$\lambda = \frac{h}{mv} \quad \text{n'est pas une fonction de carré sommable } (\int |\psi|^2 dx \neq 1)$$

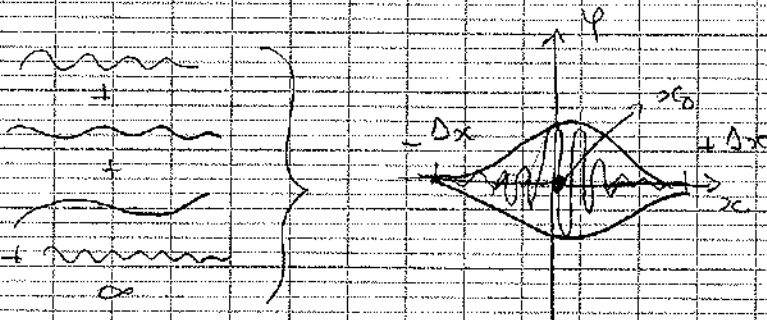
occupe tout l'espace



n'a pas de sens physique

onde physique : localisée dans l'espace à 1 instant donné
localisée dans le temps à 1 endroit donné

paquet d'onde $\rightarrow$ superposition linéaire d'ondes planes monochromatiques
 $\rightarrow$ Interférences



Cas statique $\rightarrow$ forme du paquet d'onde

Cas dynamique $\rightarrow$ vitesse de déplacement

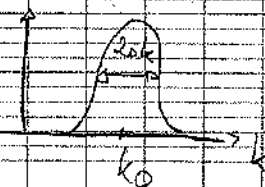
paquet d'onde :
$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \psi(k) e^{i(kx - \omega t)} dk$$

$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$: cste de normalisation
 $\psi(k)$: choix tq $\int |\psi(k)|^2 dk = 1$

Forme du paquet d'ondes à $t=0$

$$\psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \psi(k_0) e^{ik_0 x} dk$$

Soit $\psi(k)$ courbe en cloche



On considère 1 paquet d'onde de 3 ondes

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

$$\begin{aligned}\psi(x,0) &= \frac{\psi(k_0)}{\sqrt{2\pi}} \left[e^{ik_0x} + \frac{1}{2} e^{i(k_0+\Delta k)x} + \frac{1}{2} e^{i(k_0-\Delta k)x} \right] \\ &= \frac{\psi(k_0)}{\sqrt{2\pi}} e^{ik_0x} \left[1 + \frac{1}{2} e^{i\Delta kx} + \frac{1}{2} e^{-i\Delta kx} \right] \\ &= \frac{\psi(k_0)}{\sqrt{2\pi}} e^{ik_0x} \left[1 + \cos(\Delta kx) \right] \quad \frac{e^{i\Delta kx} + e^{-i\Delta kx}}{2} = \cos \Delta kx\end{aligned}$$

$$\psi(x,0) \text{ max} \Leftrightarrow \cos(\Delta kx) = +1 \Leftrightarrow \Delta kx_0 = 0 \Leftrightarrow x_0 = 0$$

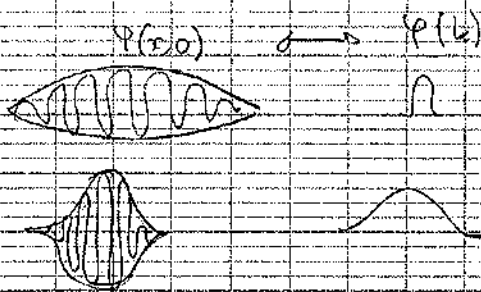
$$\psi(x,0) = 0 \Leftrightarrow \text{interférences destructives}$$

$$\psi(x,0) \text{ s'annule aux points } x_0 = +\Delta x \text{ tq } \Delta kx_0 = \pi \Leftrightarrow \Delta k \Delta x = \pi$$

Largeur du paquet

$$\Delta k \nearrow \Rightarrow \Delta x \searrow$$

$$\Delta k \searrow \Rightarrow \Delta x \nearrow$$



conséquence principe d'incertitude de Heisenberg

$$\Delta x \Delta k = \pi$$

$$\text{Or } p_x = \hbar k$$

$$\Delta p_x = \hbar \Delta k$$

$$\Delta x \Delta p_x = \pi \hbar$$

$$\Delta x \Delta p_x = \frac{h}{2}$$

En Mécanique quantique, on ne peut pas déterminer avec précision à la fois position et impulsion de la particule

De façon rigoureuse, Heisenberg a montré

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{h}{2} \quad \Delta y \Delta p_y \geq \frac{h}{2} \quad \Delta z \Delta p_z \geq \frac{h}{2}$$

Ordre de grandeur

$\Delta x \Delta p_x \approx h$ • vitesse $m = 1500 \text{ kg}$ vitesse $= 100 \pm 10 \text{ km/h}$
 précision sur la position ? $\Delta x = ?$ $\Delta x \times m \Delta v_x \approx h$
 $\Delta v_x = 10 \text{ km/h} = \frac{10000 \text{ m}}{3600 \text{ s}} \approx 3 \text{ m/s}$

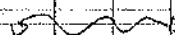
$$\Delta x \approx \frac{h}{m \Delta v_x} = \frac{6,63 \times 10^{-34}}{15 \times 10^2 \times 3} \approx 10^{-39} \text{ m}$$

pas de sens physique

• e vitesse connue à 1 m/s près $\Rightarrow \Delta v_x = 1 \text{ m/s}$

$$\Delta x \approx \frac{h}{m \Delta v_x} = \frac{6,63 \times 10^{-34}}{9,1 \times 10^{-31} \times 1} \approx 7 \times 10^{-4} \text{ m} \approx 10^6 \text{ fois la taille d'un atome}$$

• cas limite $\Delta p_x \rightarrow 0 \Rightarrow \Delta x \rightarrow \infty$

Extension de l'onde 

Bonne approximation pour décrire un faisceau de particules dont la vitesse est bien connue

La 4th relation d'incertitude $\Delta E \Delta t$

particule d'énergie cinétique $E_c = \frac{p^2}{2m}$

dérivation / p $\frac{dE_c}{dp} = \frac{p}{m}$ $dE_c = \frac{p}{m} dp \xrightarrow{\text{variation}} \Delta E_c = \frac{p}{m} \Delta p$

or $p_x = m v_x$ $\Delta E = v \Delta p_x$

Par ailleurs $\Delta x = v \Delta t$ Δt = durée d'observation

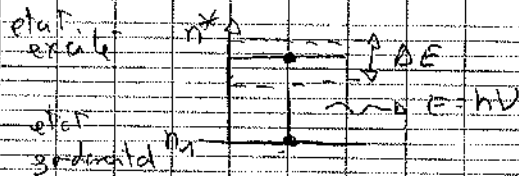
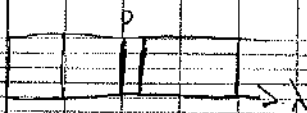
↑ vitesse de la particule

$$\Delta E = \frac{\Delta x}{\Delta t} \Delta p_x$$

$$\Delta E \Delta t = \Delta x \Delta p_x \Rightarrow \boxed{\Delta E \Delta t \geq \frac{h}{2}}$$

Implication concrète

largeur des raies spectrales : applications de H



niveau fondamental : énergie bien définie $\rightarrow \Delta t \rightarrow \infty \quad \Delta E = 0$
 niveau excité : durée de vie finie Δt finie
 $\rightarrow \Delta E \neq 0 \quad (\Delta E = \frac{hc}{\Delta \lambda}) \rightarrow \Delta \lambda \neq 0$

Déplacement du paquet d'onde

Une onde plane particulière du paquet se déplace à la vitesse de phase

$$v_{\phi}(k) = \frac{\omega}{k}$$

Relation de dispersion : $E = \hbar \omega$, $E = \frac{p^2}{2m}$ $\left\{ \begin{array}{l} \hbar \omega = \frac{p^2}{2m} \end{array} \right.$

$$\omega = \frac{p^2}{2m\hbar}$$

$$v_{\phi}(k) = \frac{p^2}{2m\hbar k}$$

$$\text{Or } p = \hbar k$$

$$v_{\phi}(k) = \frac{p(k)}{2m}$$

$$\text{Car } p = m v \Rightarrow v_{\phi}(k) = \frac{v(k)}{m}$$

milieu de propagation dispersif i.e. $v = f(k)$

Développement de 3 ondes avec phases $\neq (k_0)$

$$\psi(x, t) = \frac{\psi(k_0)}{\sqrt{2\pi}} \left[e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} + \frac{1}{2} e^{i[(k_0 + \Delta k)x - (\omega_0 + \Delta \omega)t]} + \frac{1}{2} e^{i[(k_0 - \Delta k)x - (\omega_0 - \Delta \omega)t]} \right]$$

$$\psi(x, t) = \frac{\psi(k_0)}{\sqrt{2\pi}} e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} [1 + \cos(\Delta k x - \Delta \omega t)]$$

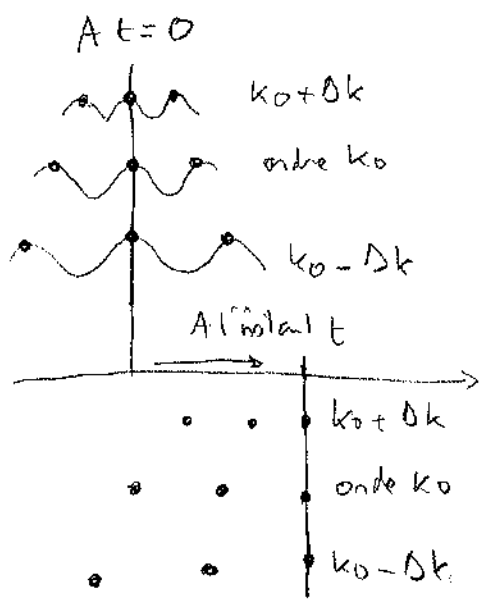
Le max de $\psi(x, t)$ initialement à $x = 0$ est maintenant à $x = x_0$

$$\Delta k x_0 - \Delta \omega t = 0 \quad \left[x_0 = \frac{\Delta \omega}{\Delta k} t \right]$$

Position des max

Définition : vitesse de groupe du paquet d'onde

$$v_g = \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k=k_0} \quad v_g \ll c$$



III - Application des Concepts : Problèmes stationnaires (indépendants du temps)

Trouver les Energies et fonctions d'onde stationnaires du problème

Solution stationnaires de $\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V \right) \psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi$

Solution du type $\psi(x,t) = \phi e^{-i\omega t} = \phi(x) e^{-i/\hbar E t}$

→ dans Schrödinger :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi(x)}{\partial x^2} + V\phi(x) \right) \cancel{\left[e^{-i/\hbar E t} \right]} = i\hbar \times \left(-\frac{i}{\hbar} \right) E \cancel{e^{-i/\hbar E t}} \phi(x)$$

$$= E \cancel{\left[e^{-i/\hbar E t} \right]} \phi(x)$$

$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V \right) \phi(x) = E \phi(x)$

 $\hat{H} \phi(x) = E \phi(x)$

équation de Schrödinger stationnaire

Etat stationnaire $\psi(x,t) = \phi(x)e^{-i\omega t}$
 Résonance $\vec{H} \phi(x) = E \phi(x)$

(Schrodinger stationnaire) $\rightarrow$ couples $E_n, \Phi_n(x)$

$$\hat{H} = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}}_{\text{energie cinétique}} + \underbrace{V(x)}_{\text{potentiel (V(x)) = cste}}$$

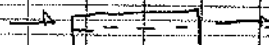
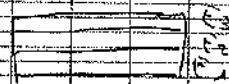
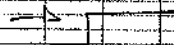
• relation de $\hat{H}\Phi = E\Phi$ avec V constante

• points de potentiel

• marche de potentiel

• effet tunnel

• barrière de potentiel



Particularisation à $V(x) = \text{cste}$

$$\begin{aligned} & \Delta V_0 \quad -E_{\text{pot}} > V_0 \\ & \quad \quad -E_{\text{pot}} < V_0 \end{aligned}$$

$$V(x) = V_0 \quad V(x)$$

Schrodinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Phi(x) + V_0 \Phi(x) = E \Phi(x)$$

$$+\frac{\hbar^2}{2m} \Phi''(x) + (E - V_0) \Phi(x) = 0$$

équation différentielle du 2nd degré à coeff constant

solution de forme

$$e^{rx} = \Phi(x)$$

$$r e^{rx} = \Phi'(x)$$

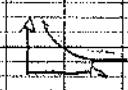
$$r^2 e^{rx} = \Phi''(x) \Rightarrow \frac{\hbar^2}{2m} r^2 e^{rx} = (E - V_0) e^{rx} \Rightarrow 0$$

équation caractéristique $-\frac{\hbar^2}{2m} r^2 = V_0 - E$ (second degré en r^2)

$$\text{solution en } r = \pm \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)} \quad \text{si } V_0 - E > 0$$

$$r = \pm i \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)} \quad \text{si } V_0 - E < 0$$

fonction d'ondes

si $E < V_0 \rightarrow \phi(x) = A e^{r x} + B e^{-r x}$ 

onde évanescente

si $E > V_0 \rightarrow \phi(x) = A e^{i r x} + B e^{-i r x}$

onde plane propagative ($x > 0$)

Cas de la puit de potentiel $V_0 < 0$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \phi''(x) + E \phi(x) = 0$$

Equation caractéristique $\frac{\hbar^2}{2m} r^2 + E = 0$

$$r = \pm i \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

$$\phi(x) = A e^{i \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} x} + B e^{-i \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} x}$$

onde plane : $A e^{i k x}$ on pose $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$

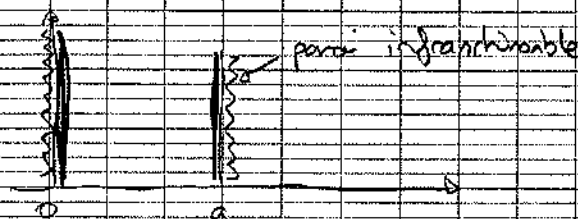
nb d'onde

On en déduit l'énergie cinétique $\hbar k = \sqrt{2mE} = p$ impulsion
puisque p ne dépend que de E

$$\text{Ls } E = E_c = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Relation de De Broglie $\lambda_{DB} = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE}}$

Puits de potentiel



$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x \in [a, c] \\ -V_0 & \text{ailleurs} \end{cases}$$

Condition de limite imposée par la géométrie des puits

$$\phi(x=0) = \phi(x=a) = 0$$

solution $\phi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$ avec $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$

• $\phi(x=0) = 0 \Rightarrow A e^{i0} + B e^{-i0} = 0 \Rightarrow A = -B$
 $\Rightarrow \phi(x) = A (e^{ikx} - e^{-ikx})$

$\phi(x) = A \cos kx + i \sin kx = \cos(-kx) = i \sin(-kx)$

$\phi(x) = \frac{2iA}{c} \sin(kx)$

$\boxed{\phi(x) = C \sin(kx)}$ avec $C = i \frac{2A}{c}$

• 2^o cas

$\phi(x=a) = 0 \Rightarrow C \sin(ka) = 0 \Rightarrow \boxed{ka = n\pi}$ avec $n \in \mathbb{N}^*$
 (Remarque: si $n=0$ alors $\phi(x)=0$)

$\hookrightarrow E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}$

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

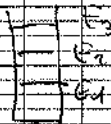
$\phi_n(x) = C_n \sin \frac{n\pi x}{a}$

Energie dans le cas d'un e⁻ de valence du magnésium $a = 3,2$
 $\text{\AA} = 0,32 \text{ nm}$

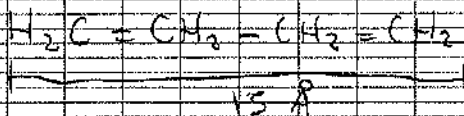
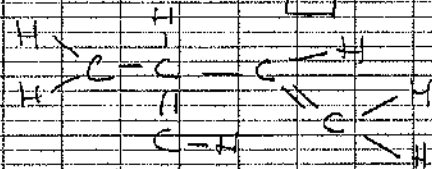
$E_n = E_1 n^2$ avec $E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} = \frac{37,6}{a^2} \text{ eV}$

$E_1 = 3,67 \text{ eV}$

$E_2 = 2^2 E_1 = 4 E_1 = 14,7 \text{ eV}$ } $\Delta E \approx 11 \text{ eV}$ (énorme comme différence d'énergie)



même question: e⁻ du butadiène



$E_1 = 37,6 / 15^2 = 0,167 \text{ eV}$
 $E_2 = 4 E_1 = 0,668 \text{ eV}$ } $\Delta E = 0,5 \text{ eV}$

même question : e^- dans chaîne d'atomes d'or $a = 0,35 \text{ nm}$

$$\left. \begin{aligned} E_1 &= 37,6 / 10^{12} = 3,76 \cdot 10^{-11} \text{ eV} \\ E_2 &= 4E_1 = 1,50 \times 10^{-10} \text{ eV} \end{aligned} \right\} \Delta E \approx 10^{-10} \text{ eV} \text{ niveaux très proches}$$

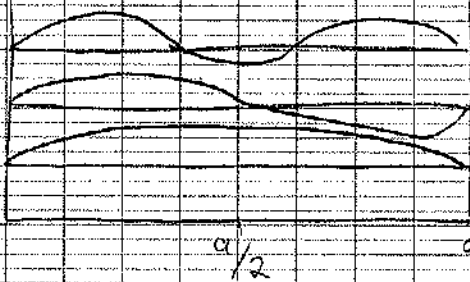
formation d'une bande d'énergie continue

les niveaux d'énergie se rapprochent quand $a \searrow$

Représentation de fonction d'onde

Longueur d'onde permise

$$\lambda_n = \frac{2\pi}{k_n} = \frac{2\pi}{n\pi/a} \Rightarrow \frac{2\lambda}{n} = a$$



$n=3$ 2^e état excité (Δ près 3^e)
 $n=2$ 1^{er} état excité
 $n=1$ état fondamental

Constante de normalisation

$$\text{c-à-d } \int_{-\infty}^{\infty} |\phi_n(x)|^2 dx = 1$$

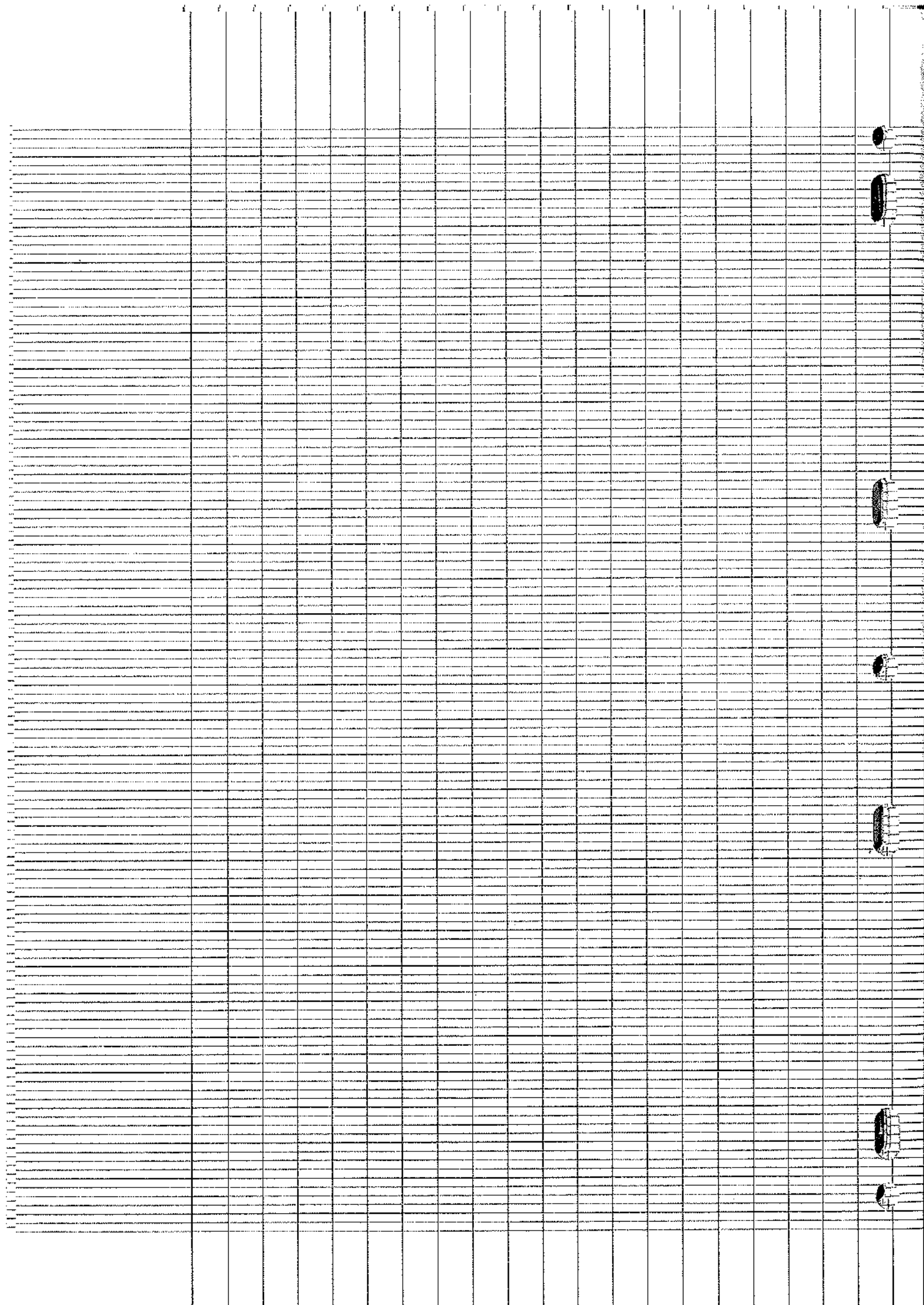
$$\Rightarrow \int_0^a (\phi_n(x) \times \phi_n^*(x)) dx = \int_0^a \left(C \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \times \left(C \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \right)^* dx \right)$$

$$= |C|^2 \int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx = |C|^2 \int_0^a \left[\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \cos\left(\frac{2n\pi}{a} x\right) \right] dx$$

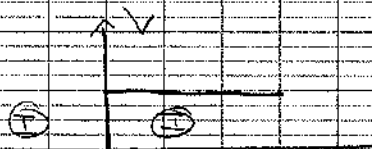
$$= |C|^2 \left[\frac{1}{2} x - \frac{1}{2} \frac{a}{2n\pi} \sin\left(\frac{2n\pi}{a} x\right) \right]_0^a$$

$$= |C|^2 \left[\frac{a}{2} - \frac{a}{4n\pi} \sin(2n\pi) - 0 + 0 \right] = 1$$

$$\Rightarrow |C|^2 \frac{a}{2} = 1 \Rightarrow C = \sqrt{\frac{2}{a}} \Rightarrow \boxed{\phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)}$$



Marche de potentiel



$$V(x) = \begin{cases} 0 & \forall x \in]-\infty, 0[\\ V_0 & \forall x \in [0, +\infty[\end{cases}$$

Equation Schrödinger

region I $\rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \phi''(x) = E \phi(x) \Leftrightarrow \frac{\hbar^2}{2m} \phi''(x) + E \phi(x) = 0$

region II $\rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \phi''(x) + V_0 = E \phi(x)$

cas $E > V_0$

$\phi(x)$ se propage dans les 2 milieux

I $\rightarrow \phi(x) = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}$

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

II $\rightarrow \phi(x) = A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x}$

$$k_2 = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$$

$$\phi'_1(x) = ik_1 A_1 e^{ik_1 x} - ik_1 B_1 e^{-ik_1 x}$$

$$\phi'_2(x) = ik_2 A_2 e^{ik_2 x} - ik_2 B_2 e^{-ik_2 x}$$

Raccordement des solutions en $x=0$

$\phi(x)$ continue en $x=0 \rightarrow A_1 + B_1 = A_2 + B_2$

$\phi'(x)$ continue en $x=0 \rightarrow ik_1 A_1 - ik_1 B_1 = -ik_2 B_2$

Calculer les coefficients de transmission $\left| \frac{A_2}{A_1} \right|^2$
de réflexion $\left| \frac{B_2}{A_1} \right|^2$

Hypothèse: les particules proviennent de $-\infty$ et se déplacent vers $x \nearrow \Rightarrow B_2 = 0$

$$A_1 + B_1 = A_2 \quad k_1 A_1 + k_1 B_1 = k_2$$

$$A_2 + B_1 = A_2 \quad (L_1)$$

$$A_1 + B_1 = \frac{k_2}{k_1} A_2 \quad (L_2) \text{ conduit à (somme } L_1 + L_2)$$

$$2A_1 = A_2 \left(1 + \frac{k_2}{k_1}\right) \rightarrow \frac{A_2}{A_1} = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} \quad \text{condition à } U_1 = U_2 \quad (1)$$

$$\frac{k_1 + k_2}{k_1}$$

$$2B_1 = A_2 \left(1 - \frac{k_2}{k_1}\right) \rightarrow \frac{A_2}{B_1} = \frac{2k_1}{k_1 - k_2} \quad (2)$$

$$R = \left(\frac{B_1}{A_1}\right)^2 = \left(\frac{(1)}{(2)}\right)^2 = \frac{(k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2} = \frac{k_1^2 + k_2^2 - 2k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2}$$

• facteur de transmission

$$T = \frac{k_2}{k_1} \left(\frac{A_2}{A_1}\right)^2 = \frac{k_2}{k_1} \frac{4k_1^2}{(k_1 + k_2)^2} = \frac{4k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2}$$

$$L \rightarrow R = \frac{1}{(k_1 + k_2)^2}$$

$$[k_1^2 + k_2^2 + 2k_1k_2](k_1 + k_2)^2 \quad \text{c.a.f.}$$

• $\cos E < V_0$

$$\psi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}$$

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

→ dans milieu II onde évanescente

$$\psi_2(x) = A_2 e^{\frac{i}{2}x} + B_2 e^{-\frac{i}{2}x}$$

$$k_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

ψ_2 doit rester bornée qd $x \rightarrow \infty$

Rappel des relations $x=0$

$$\psi(x) \text{ continue en } x=0 \rightarrow A_1 + B_1 = B_2$$

$$\psi'(x) \text{ continue en } x=0 \rightarrow ik_1 A_1 = ik_1 B_1 = -\frac{i}{2} B_2$$

$$A_1 + B_1 = B_2$$

$$A_1 - B_1 = -\frac{i}{k_1} B_2 \quad \text{condition à } 2A_1 = B_2 \left(1 + \frac{i}{k_1}\right)$$

$$2B_1 = B_2 \left(1 - \frac{i}{k_1}\right)$$

coefficient de réflexion

$$R = \left| \frac{B_1}{A_1} \right|^2 = \left| \frac{k_1 - i p_2}{k_1 + p_2} \right|^2 = 1 \quad \text{réflexion totale } R = T = 1$$

Barrière de potentielle
effet tunnel



$$V(x) = \begin{cases} 0 & \forall x \in]-\infty; 0[\cup]a; +\infty[\\ V_0 & \forall x \in [0, a] \end{cases}$$

cas $E < V_0$

k_1 dans I et III $\rightarrow$ transmission à $E = \text{cste}$

coefficient de transmission $T = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2}$

$$T = \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-2 \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} a}$$

I $\rightarrow \phi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}$

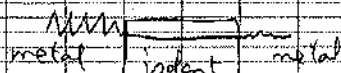
II $\rightarrow \phi_2(x) = A_2 e^{p_2 x} + B_2 e^{-p_2 x}$

III $\rightarrow \phi_3(x) = A_3 e^{ik_1 x}$

$$k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar$$

$$p_2 = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$$

$$T \propto e^{-2 \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} a}$$



$A \text{ Nème} = 9,1 \times 10^{-31} \text{ kg}$ dans le métal

barrière $a = 0,1 \text{ nm} \rightarrow T = e^{-2} = 0,135$

$P' e^-$ à 80% de chance de traverser la barrière par l'effet tunnel

Variation de T par rapport à a

$$\frac{dT}{da} \approx -2 \frac{p_2}{a} T$$

$$\frac{dT}{T} = -2 \frac{p_2}{a} da$$

$$\frac{\Delta T}{T} = +2 \frac{p_2}{a} \Delta a$$

sait $\Delta a = 1 \text{ pm} = \frac{1}{100} \text{ Å} \rightarrow \frac{\Delta T}{T} = 2\%$ T extrêmement sensible à l'épaisseur de la barrière

IV Système à 2 niveaux d'application

définition

Système physique qui possède 2 niveaux d'énergie proches entre eux et éloignés des autres niveaux

→ On cherche à évaluer l'impact d'interaction interne ou externe négligées jusqu'à la mise en couplage entre les 2 niveaux

Espace des fonctions d'onde d'm = 2

Base d'états stationnaires $\{\phi_1, \phi_2\}$
 énergies E_1, E_2 → valeurs propres de H_0

H_0 : Hamiltonien non perturbé stationnaire

$$\text{Schrödinger } H_0 \phi_1(x) = E_1 \phi_1(x)$$

$$H_0 \phi_2(x) = E_2 \phi_2(x)$$

Notation matricielle

$$\hat{H}_0 \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_1 \phi_1 \\ E_2 \phi_2 \end{pmatrix}$$

$$\hat{H}_0 = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix}$$

matrice diagonale

Introduction du couplage

Energie d'interaction W , opérateur (observable) associé : $\hat{W}$

$\hat{W}$ contient des termes non diagonaux, non nuls

$$\hat{W} = \begin{pmatrix} 0 & C e^{i\varphi} \\ C e^{-i\varphi} & 0 \end{pmatrix}$$

$C \in \mathbb{R}$
amplitude

$\varphi \in \mathbb{R}$
phase

→ Hamiltonien général du système : $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W} = \begin{pmatrix} E_1 & C e^{i\varphi} \\ C e^{-i\varphi} & E_2 \end{pmatrix}$

$\hat{H}$: matrice hermitienne → valeurs propres réelles

$$\hat{H} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_1 \phi_1 + C e^{i\varphi} \phi_2 \\ C e^{-i\varphi} \phi_1 + E_2 \phi_2 \end{pmatrix}$$

Conséquences

Les fonctions d'ondes Φ_1 et Φ_2 ne sont plus stationnaires

→ remplacées par Φ^+ et Φ^- fonctions propres de $\tilde{H}$

→ diagonalisation de $\tilde{H}$

- Valeurs propres de $\tilde{H}$: Expression de E^+ et E^- des fonctions de E_1, E_2, c
- Equation aux valeurs propres

$$\det(\tilde{H} - \lambda I) = 0 \Leftrightarrow \begin{vmatrix} E_1 - \lambda & C e^{i\varphi} \\ C e^{-i\varphi} & E_2 - \lambda \end{vmatrix} = 0$$

$$\Leftrightarrow (E_1 - \lambda)(E_2 - \lambda) - c^2 = 0$$

$$\Leftrightarrow E_1 E_2 - \lambda(E_1 + E_2) + \lambda^2 - c^2 = 0$$

$$\Leftrightarrow \lambda^2 - (E_1 + E_2)\lambda + (E_1 E_2 - c^2) = 0$$

$$\begin{aligned} \text{polynôme du 2^o degré en } \lambda : \Delta &= (E_1 + E_2)^2 - 4E_1 E_2 + 4c^2 \\ &= E_1^2 + E_2^2 + 2E_1 E_2 - 4E_1 E_2 + 4c^2 \\ &= (E_1 - E_2)^2 + 4c^2 > 0 \end{aligned}$$

$$E^+ = \lambda^+ = \frac{1}{2} \left[(E_1 + E_2) + \sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4c^2} \right]$$

$$E^- = \lambda^- = \frac{1}{2} \left[(E_1 + E_2) - \sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4c^2} \right]$$

Fonction propres (stationnaires) admissibles

$$\begin{aligned} \Psi^+(x) &= \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{-i\frac{\varphi}{2}} \Phi_1(x) + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{+i\frac{\varphi}{2}} \Phi_2(x) \\ \Psi^-(x) &= -\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{-i\frac{\varphi}{2}} \Phi_1(x) + \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{+i\frac{\varphi}{2}} \Phi_2(x) \end{aligned} \quad \tan \theta = \frac{2c}{E_1 - E_2}$$

