

Mécanique

Chapitre 7

Mécanique quantique

Table des matières

Introduction	5
I La lumière LASER	6
I-1 Aspect géométrique	6
I-1 <i>·i</i> forme	6
expression et origine	6
représentation spatiale	6
longueur de RAYLEIGH	8
où la diffraction refait surface	9
I-1 <i>·ii</i> transformation par une lentille	9
faisceau parallèle en faisceau conique	9
faisceau conique en faisceau parallèle	11
I-2 Création d'un faisceau gaussien	11
I-2 <i>·i</i> milieu amplificateur	11
cavité résonante	11
récupération du faisceau, absorption	12
I-2 <i>·ii</i> inversion de population	13
simplification	13
coefficients d'EINSTEIN	13
amplification	15
pompage optique	15
I-2 <i>·iii</i> bouclage	16
amplificateur type « filtre de WIEN »	16
limites	16
II Le monde quantique	18
II-1 Dualité onde – corpuscule	18
II-1 <i>·i</i> l'onde est aussi un corpuscule	18
expérience historique	18
loi de PLANCK – EINSTEIN	18
II-1 <i>·ii</i> la matière est aussi une onde	18
expérience historique	18
relation de DE BROGLIE	19
du côté de la relativité	19
II-1 <i>·iii</i> principe d'incertitude d'HEISENBERG	20
l'acte de mesure et la mécanique quantique	20
position et vitesse	20
temps et énergie	21
II-2 L'équation de SCHRÖDINGER	22
II-2 <i>·i</i> fonction d'onde	22
densité de probabilité	22
principe de superposition	23
II-2 <i>·ii</i> le « PFD » de la quantique	23
statut	23
énoncé	24
II-3 L'équation de SCHRÖDINGER pour les états stationnaires	24
II-3 <i>·i</i> états stationnaires	24
définition	24

	la différence avec le cas réel	24
II-3-ii	réécriture de l'équation de SCHRÖDINGER	25
	séparation des variables	25
	solution de la partie temporelle	25
	réécrire la partie spatiale	25
	explication	26
II-4	Vision classique d'une particule quantique libre	27
II-4-i	la particule est une onde progressive	27
	solution de la partie spatiale	27
	rassemblement avec la partie temporelle	27
II-4-ii	la solution de la partie temporelle donne la relation de PLANCK – EINSTEIN	28
II-4-iii	la relation de dispersion donne la relation de DE BROGLIE	28
II-4-iv	le caractère « paquet d'ondes » donne le principe d'incertitude d'HEISEBERG	29
	le problème et sa solution	29
	une conséquence connue	29
	remarques	30
II-4-v	la vitesse de groupe donne la vitesse classique	30
	réécriture du paquet d'onde	30
	réécriture de la vitesse de groupe	31
II-4-vi	retour à la vision quantique : courant de probabilité	32
	position du problème	32
	de la vision « classique » à l'expression quantique	32
III	Particule quantique non libre	34
III-1	Puit infini	34
III-1-i	modèle	34
	description	34
	solution stationnaire	34
III-1-ii	solution	34
	conditions aux limites, saison 1	34
	résolution	35
III-1-iii	la quantification née du confinement	36
	énergie	36
	densité de présence	37
III-1-iv	quantification et forme du potentiel	39
III-2	Puit fini	39
III-2-i	modélisation	39
III-2-ii	solutions et quantification	40
	forme des solutions	40
	conditions aux limites, saison 2	41
	aspect de symétrie	42
	fonction d'onde paire	42
	fonction d'onde impaire	43
	rassemblement	45
III-2-iii	interprétation des résultats	45
	quantification	45
	limite du puit infini	45
	comparaison avec le puit infini	46
III-3	Effet tunnel	46
III-3-i	description	46

situation	46
modèle et mise en équation	47
résultat et interprétation	48
calculs complets	50
III-3-ii applications	51
III-4 Double puits symétrique	51
III-4-i description	51
modèle	51
discussion qualitative	52
plan de résolution complète	54
III-4-ii applications	54
liaison chimique	54
molécule d'amoniac	54
Compétences du chapitre	57

Mécanique quantique

Dans ce chapitre, nous allons aborder les bases de la mécanique quantique. Il s'agit là d'une théorie dont les bases ont été établies au début du XX^e siècle et dont les succès sont indéniables. C'est aussi une des théories physiques dont les fondements sont certainement les plus en contradiction avec l'approche « naturelle », à savoir l'approche classique et ce, bien qu'elle soit entièrement compatible avec les résultats connus (nous le montrerons).

Pour aborder ces notions, nous commencerons par nous pencher sur le LASER dont le mode de fabrication est intrinsèquement lié à la mécanique quantique. Ensuite, dans une deuxième partie, nous aborderons le cœur de ce qu'est la mécanique quantique ondulatoire : l'équation de SCHRÖDINGER. Après l'avoir énoncée et interprétée, nous la résoudrons dans le cas le plus simple, celui de la particule libre, et montrerons que toutes les lois quantiques ne sont qu'une autre vision de lois *déjà connues*. Enfin, dans la dernière partie, nous nous intéresserons à des situations classiques (et particulières) dans lesquelles les effets quantiques sont particulièrement « visibles ».

I – La lumière LASER

I.1 – Aspect géométrique

I.1.i – forme

★ expression et origine

✧ Nous admettons que l'éclairement d'un faisceau LASER peut s'écrire, avec les coordonnées cylindriques, sous la forme

$$\mathcal{E}(r,z) = \frac{A_0^2 W_0^2}{W^2(z)} \times \exp\left(-\frac{2r^2}{W^2(z)}\right) \quad \text{où} \quad W(z) = W_0 \sqrt{1 + \frac{z^2}{L_R^2}} \quad \text{et} \quad L_R = \frac{\pi W_0^2}{\lambda} \quad (\text{I.1})$$

✧ W_0 est une longueur et s'appelle le *waist*. L_R est la longueur de RAYLEIGH. Nous interpréterons ces grandeurs juste après.

✧ L'expression de l'éclairement provient de la solution de l'équation de propagation du champ électrique

$$\vec{\Delta} \vec{E} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} \quad (\text{I.2})$$

✧ Néanmoins, pour trouver ce résultat (dont la démonstration est hors programme), il a fallu faire quelques hypothèses :

- l'onde électrique est transverse ;
- l'onde se comporte presque comme une onde plane ;
- l'amplitude de l'onde est à symétrie cylindrique ;
- l'amplitude varie lentement avec la propagation (avec z), alors qu'elle peut varier plus rapidement transversalement (avec r).

✧ Autrement dit, la solution a été recherchée sous la forme

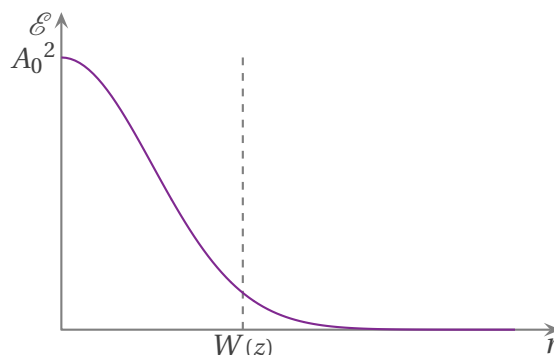
$$\vec{E} = E(r,z) e^{j(\omega t - kz)} \vec{u}_x \quad (\text{I.3})$$

★ représentation spatiale

🕒 limitation transverse

16

✧ Plaçons-nous à z fixé et regardons ce qu'il en est de l'éclairement en fonction de r .



✧ Nous pouvons constater que l'éclairement :

- est notable pour $r < W(z)$;
- est faible pour $r > W(z)$.

✧ Par ailleurs, cela se comprend fort bien puisque, pour $r > W(z)$, nous avons

$$\mathcal{E}(r,z) < \mathcal{E}(0,z) \times e^{-2} \quad \rightsquigarrow \quad \frac{\mathcal{E}(r,z)}{\mathcal{E}(0,z)} < 0,13 \quad (\text{I.4})$$

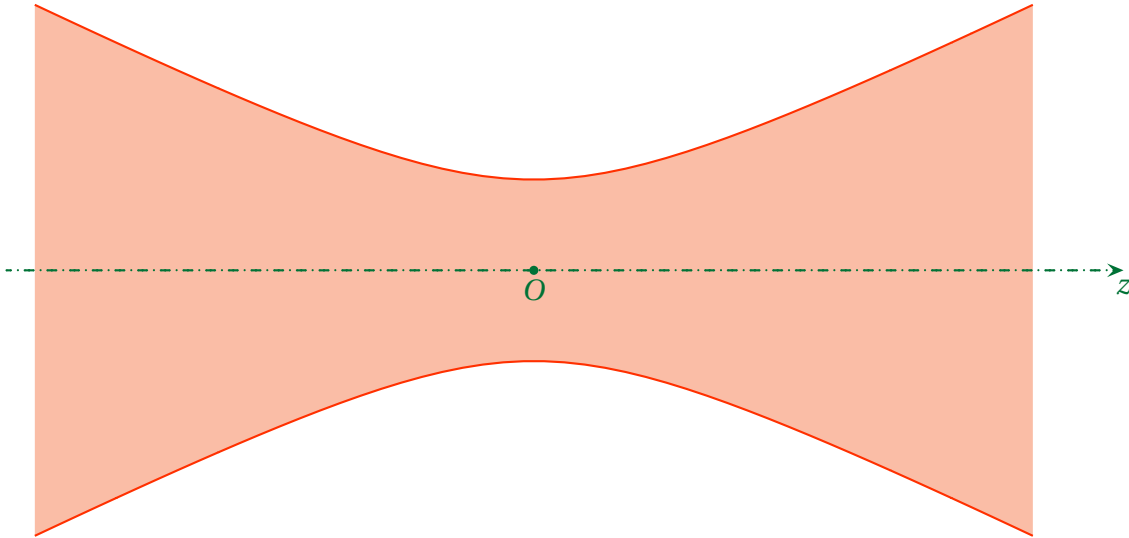
✧ C'est pourquoi, dans la suite, nous ferons comme si le faisceau LASER était :

- d'éclairement uniforme pour $r < W(z)$;
- d'éclairement nul pour $r > W(z)$.

🌀 enveloppe

✧ Représentons, maintenant, l'enveloppe du faisceau LASER.

17



✧ Comme nous l'avons précisé juste au-dessus, nous avons considéré que le faisceau était limité par $W(z)$.

🌀 faisceau cylindrique et faisceau conique

✧ Rappelons l'expression de $W(z)$

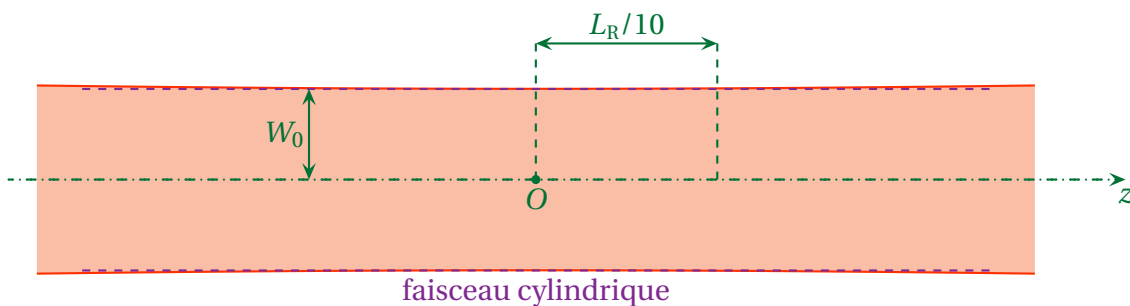
17

$$W(z) = W_0 \sqrt{1 + \frac{z^2}{L_R^2}} \quad (\text{I.5})$$

✧ Pour $|z| \ll L_R$, nous avons ainsi

$$W(z) \simeq W_0 \quad (\text{I.6})$$

✧ Autrement dit, le « rayon » du faisceau LASER est constant. Nous avons affaire là à un faisceau CYLINDRIQUE.

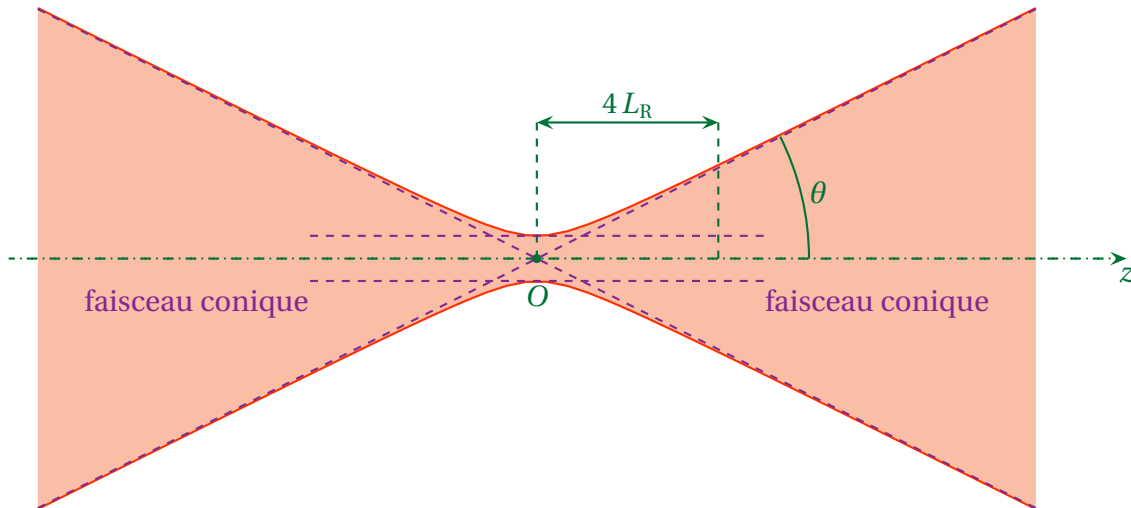


✧ Pour $|z| \gg L_R$, nous avons ainsi

$$W(z) \simeq W_0 \times \frac{|z|}{L_R} \tag{I.7}$$

✧ Nous sommes face, cette fois, à un faisceau *conique* de sommet le « centre » du faisceau et d'angle

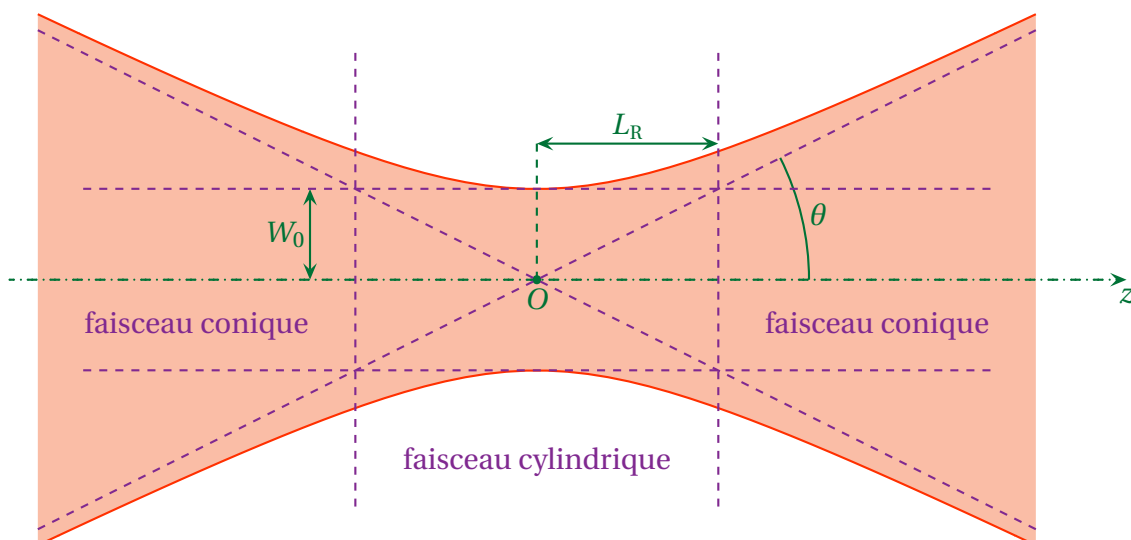
$$\theta = \frac{W_0}{L_R} \tag{I.8}$$



Loi
 Un faisceau LASER peut se voir comme la juxtaposition d'un faisceau parallèle et d'un faisceau conique.

★ **longueur de RAYLEIGH**

✧ Géométriquement, la longueur de RAYLEIGH se trouve grâce à l'angle de divergence du faisceau.



✧ Comme il s'agit aussi de la grandeur à laquelle nous avons comparé z , nous pouvons aussi dire que



Loi

La longueur de RAYLEIGH représente la distance au bout de laquelle le faisceau bascule d'un modèle cylindrique à un modèle conique. Cette distance étant calculée à partir du point où le faisceau est de largeur minimale.

✧ Par exemple, pour un LASER Hélium-néon utilisé en TP, en prenant $W_0 = 1 \text{ mm}$ et $\lambda = 633 \text{ nm}$, nous trouvons

$$L_R = \frac{\pi W_0^2}{\lambda} = 5 \text{ m} \quad (\text{I.9})$$

✧ Nous pouvons donc dire qu'à l'échelle de l'expérience, le faisceau LASER est bel et bien cylindrique.

★ où la diffraction refait surface

✧ Reprenons l'expression de la longueur de RAYLEIGH afin d'évaluer l'angle du faisceau conique.

$$\theta = \frac{W_0}{L_R} \quad \text{et} \quad L_R = \frac{\pi W_0^2}{\lambda} \quad \rightsquigarrow \quad \theta = \frac{1}{\pi} \times \frac{\lambda}{W_0} \quad (\text{I.10})$$

✧ Comparons à l'angle de première annulation du faisceau diffracté par une ouverture circulaire de diamètre $2W_0$

$$\theta_{\text{diff}} = 1,22 \times \frac{\lambda}{2W_0} = 0,61 \times \frac{\lambda}{W_0} \quad (\text{I.11})$$

✧ Nous pouvons constater que les deux résultats sont très ressemblants.

✧ En fait, tout se passe comme si le faisceau LASER diffractait par sa propre limitation géométrique.

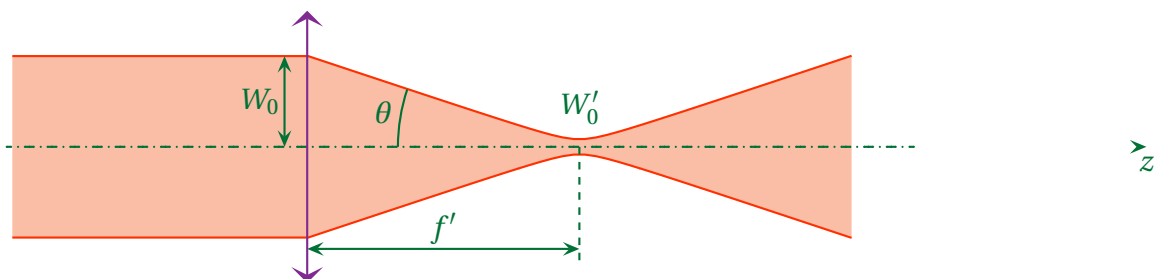
✧ La raison pour laquelle les deux résultats ne sont pas identiques est simple : les deux situations ne sont pas tout à fait analogues. En effet :

- pour la diffraction, l'éclairement de l'obstacle est uniforme (onde plane), pas pour le faisceau LASER gaussien ;
- pour la diffraction, l'angle correspond à la première *annulation* de la lumière diffractée alors que pour le LASER, nous cherchons une enveloppe définie arbitrairement.

I.1.ii – transformation par une lentille

★ faisceau parallèle en faisceau conique

✧ Considérons un faisceau LASER dans sa zone cylindrique arrivant sur une lentille convergente, de diamètre suffisamment large pour pouvoir réfracter toute la lumière.



✧ Dans ces conditions, à la sortie de la lentille, le faisceau devient conique.

✧ Évaluons l'angle de convergence. Celui-ci s'écrit naturellement

$$\theta = \frac{W_0}{f'} \quad (\text{I.12})$$

✧ Mais, le caractère *faisceau* LASER et « l'auto-diffraction » l'accompagnant, impose que cet angle s'écrive aussi

$$\theta = \frac{1}{\pi} \times \frac{\lambda}{W'_0} \quad (\text{I.13})$$

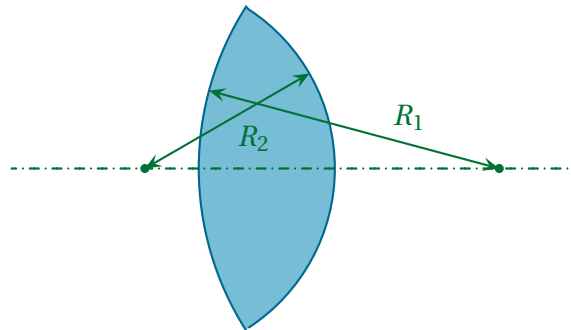
✧ En égalant les deux résultats, nous trouvons

$$W'_0 = \frac{\lambda f'}{\pi W_0} \quad (\text{I.14})$$

✧ Pour que la convergence soit la plus importante possible, il faudrait, à la fois, f' le plus petit possible et W_0 le plus grand possible.

✧ Malheureusement ces deux conditions ne sont pas simultanément possibles.

✧ En effet, f' est lié aux rayons de courbure des faces de la lentille. Une fois le rayon de courbure choisi, le diamètre de la lentille est automatiquement limité : avec un rayon de 2 cm, la lentille ne peut pas être plus grande que 4 cm. Et encore, dans ce cas, elle serait une *bille* sphérique.



✧ En d'autres termes : plus nous diminuons f' , plus nous devons diminuer la taille de la lentille et, donc, W_0 .

✧ Finalement, l'optimal n'est pas loin de $f' \sim W_0$, ce qui conduit à

$$W'_0 \sim \lambda \quad (\text{I.15})$$

✧ Nous retiendrons



Loi

Un faisceau LASER ne peut pas être concentré dans une zone de taille inférieure à sa longueur d'onde.

✧ Avec un LASER de TP, pour lequel la puissance de sortie est d'environ 1 mW, au niveau du point de convergence, cela donne une puissance surfacique

$$\mathcal{P} = \frac{P}{\pi \lambda^2} = 2,5 \times 10^9 \text{ W.m}^{-2} \quad (\text{I.16})$$

✧ À comparer avec la puissance reçue de la part du Soleil par une belle journée d'été ensoleillée : $1,4 \times 10^3 \text{ W.m}^{-2}$.

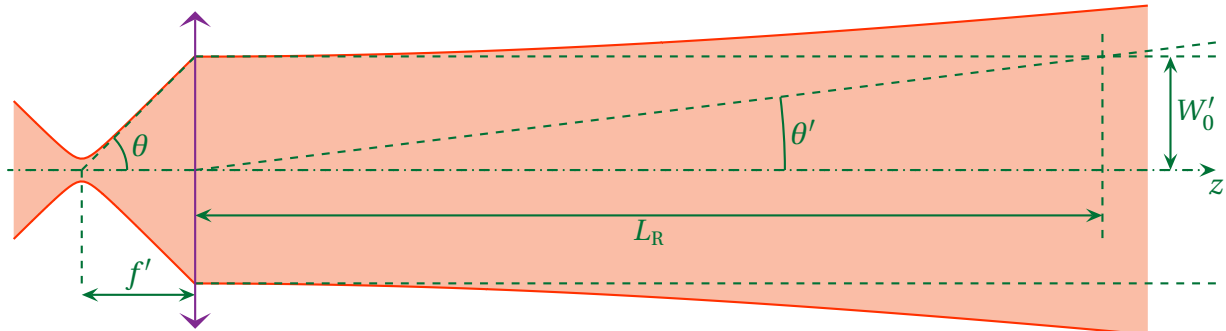
✧ Les LASER les plus puissants peuvent atteindre du 10^{23} W.m^{-2} et sont capables de découper la matière, de l'ioniser, d'accélérer des particules...

✧ Remarquons qu'un faisceau LASER concentré ($W_0 \sim \lambda$) n'est quasiment pas sous forme cylindrique. En effet, sa longueur de RAYLEIGH s'écrit

$$L_R = \frac{\pi W_0^2}{\lambda} \sim \pi \lambda \quad (\text{I.17})$$

★ faisceau conique en faisceau parallèle

- ✧ Faisons le contraire : prenons une lentille convergente et un faisceau LASER conique dont le centre est au foyer principal objet de la lentille.



- ✧ Quel est, alors, son nouvel angle de diffraction ?
 ✧ Si la lentille est assez grande pour recueillir la lumière incidente, alors le faisceau émergent a un faisceau de waist W'_0 .
 ✧ Le nouvel angle de divergence (ou « d'auto-diffraction ») s'écrit

$$\theta' = \frac{\lambda}{\pi W'_0} \quad \text{avec} \quad W'_0 = \theta \times f'. \quad (\text{I.18})$$

- ✧ Or θ est l'angle d'auto-diffraction d'un faisceau LASER concentré de telle sorte que $W_0 \sim \lambda$. Cela donne

$$\theta = \frac{\lambda}{\pi W_0} = \frac{1}{\pi} \quad \rightsquigarrow \quad \theta' = \frac{\lambda}{f'}. \quad (\text{I.19})$$

- ✧ Ainsi, avec une distance focale $f' \sim 1$ m, nous pouvons facilement obtenir

$$\theta' \sim 10^{-6} \text{ rad} \quad (\text{I.20})$$

- ✧ Autrement dit, plus la lentille a une grande distance focale ou, ce qui revient au même, plus le faisceau laser est large, plus l'angle d'ouverture angulaire est faible. 20

- ✧ Un tel faisceau LASER, de waist environ 1 m a une distance de RAYLEIGH de

$$L_R = \frac{\pi W_0^2}{\lambda} \sim 5 \times 10^3 \text{ km} \quad (\text{I.21})$$

- ✧ Après un aller-retour sur la lune, un faisceau LASER ainsi collimaté revient avec une largeur d'environ 800 m... pourvu que la réflexion au niveau de la Lune ait pu englober l'entièreté du faisceau.

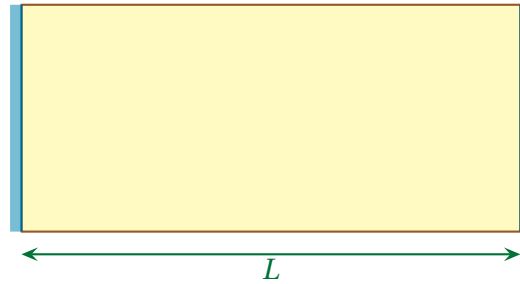
I.2 – Création d'un faisceau gaussien

I.2.i – milieu amplificateur

★ cavité résonante

- ✧ Pour réaliser une cavité optique résonante, il « suffit » de prendre deux miroirs plans¹ et parallèles.

1. En réalité les miroirs ne sont pas plans ; au moins l'un des deux est légèrement creusé (concave) de manière à éviter que les rayons lumineux ne sortent, par le haut ou le bas, de la cavité.



⇨ Dans ces conditions, à l'instar de la corde de MELDE, nous pouvons dire que les modes propres sont tels que

$$L = p \times \frac{\lambda}{2} \quad \text{avec} \quad p \text{ entier} \quad (\text{I.22})$$

⇨ En terme de fréquences, et en notant n l'indice du milieu, cela donne

$$f_p = p \times \frac{v_\varphi}{2L} = p \times \frac{c}{2nL} \quad (\text{I.23})$$

⇨ Ainsi, avec $L \sim 10$ cm, la différence de fréquence entre deux modes propres vaut

$$f_{p+1} - f_p = \frac{c}{2nL} = 1,5 \times 10^9 \text{ Hz} \quad \text{pour } n = 1 \quad (\text{I.24})$$

⇨ Fréquence à comparer avec les fréquences usuelles en optique $f_{\text{opt}} \sim 10^{15}$ Hz.

★ récupération du faisceau, absorption

⇨ Une telle cavité permet de sélectionner une fréquence très précise de rayonnement, c'est une des caractéristiques du faisceau LASER.

⇨ Toutefois, récupérer de la lumière implique récupérer de l'énergie.

⇨ Autrement dit, après un aller-retour dans la cavité, en notant r_1 le coefficient de réflexion en amplitude du premier miroir et r_2 celui du deuxième miroir, l'amplitude de l'onde s'écrit

$$\underline{a}_{\text{AR}} = \underline{a}_0 \times r_1 r_2 e^{jn k_0 2L} \quad (\text{I.25})$$

⇨ Pour que l'intensité de la lumière ne diminue pas, il faut

$$\underline{a}_{\text{AR}} = \underline{a}_0 \quad (\text{I.26})$$

⇨ Ce qui implique d'une part

$$e^{jn k_0 2L} = 1 \quad \rightsquigarrow \quad n k_0 2L = p \times 2\pi \quad (\text{I.27})$$

⇨ Cette condition conduit à l'expression des modes propres.

⇨ L'autre condition s'écrit

$$r_1 \times r_2 = 1 \quad (\text{I.28})$$

⇨ Malheureusement celle-ci ne peut pas être vérifiée car $|r_1|$ et $|r_2|$ sont majorés par 1 et que l'un des deux doit être strictement inférieur à 1 pour pouvoir « transmettre » la radiation à l'extérieur...

I.2.ii – inversion de population

★ simplification

⇨ Dans toute la suite, nous allons considérer des atomes comportant uniquement deux niveaux énergétiques E_1 et $E_2 > E_1$.

E_2 —————

E_1 —————

⇨ E_1 est le niveau fondamental et E_2 le niveau excité.

⇨ Nous noterons $E_2 - E_1 = h\nu$.

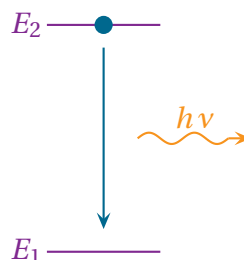
★ coefficients d'EINSTEIN

⇨ Ces coefficients représentent les différentes transitions possibles entre les deux niveaux énergétiques.

🕒 émission spontanée

⇨ Imaginons que l'atome soit dans l'état excité E_2 .

⇨ Alors, *exactement* à l'instar de la radioactivité, l'atome peut passer **spontanément** de l'état E_2 à l'état E_1 par émission de photon.



⇨ La probabilité qu'un atome se désexcite par émission de photon pendant la durée dt s'écrit

$$dP_{2 \rightarrow 1} = A dt \quad (\text{I.29})$$

⇨ Ici A est le coefficient d'EINSTEIN pour l'émission spontanée.



Loi

Lors d'une émission spontanée, le photon est émis dans une direction aléatoire et avec une polarisation aléatoire.

⇨ Avec N_2 atomes dans l'état 2, durant dt , nous pouvons dire que le nombre $\delta N_2 > 0$ d'atomes qui émettent un photon, et donc qui retournent dans l'état E_1 s'écrit

$$\delta N_2 = N_2 \times A dt \quad (\text{I.30})$$

⇨ La variation $dN_2 < 0$ du nombre d'atome N_2 s'écrit alors

$$dN_2 = -\delta N_2 = -N_2 A dt \quad \rightsquigarrow \quad \frac{dN_2}{dt}(t) + A N_2(t) = 0 \quad (\text{I.31})$$

✧ Ce qui est une équation différentielle dont la solution est

$$N_2(t) = C^{te} \times e^{-t/\tau} \quad \text{avec} \quad \tau = \frac{1}{A} \quad (\text{I.32})$$

✧ Nous voyons donc que

11

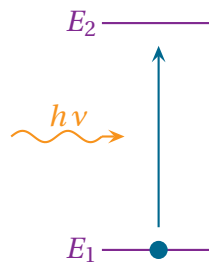


Loi

Le coefficient d'émission spontanée A est lié à la durée de vie moyenne τ d'un état excité.

🕒 absorption

✧ De manière naturelle, un atome peut **absorber** un photon de fréquence ν telle que $h\nu = E_2 - E_1$.



✧ La probabilité d'absorption sera naturellement proportionnelle :

- à la densité de photons ayant la fréquence ν (à $d\nu$ près) ;
- au temps passé.

✧ En notant u_ν la densité volumique de photons ayant la fréquence ν (à $d\nu$ près), la probabilité *qu'un* atome dans l'état E_1 absorbe un photon s'écrit donc

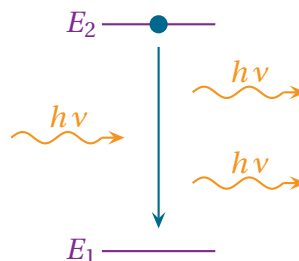
$$dP_{1 \rightarrow 2} = B_{12} u_\nu dt \quad (\text{I.33})$$

✧ B_{12} est le coefficient d'EINSTEIN relatif à l'absorption.

🕒 émission stimulée

✧ Il s'agit là d'un processus d'émission moins « naturel » au vu de la mécanique classique². C'est EINSTEIN qui l'a formalisée.

✧ L'idée est qu'un atome, initialement dans l'état E_2 va *émettre* un photon tout en retournant à son état fondamental E_1 lorsqu'un photon d'énergie $h\nu = E_2 - E_1$ « passe dans le coin ».



✧ D'une manière très imagée, nous pouvons représenter cela comme une sorte de résonance : le photon incident est à la fréquence correspondant à la transition $E_2 \rightarrow E_1$. L'atome, ainsi « excité » va réaliser cette transition et émettre, par conséquent, un autre photon.

✧ Un point remarquable de cette transition est

10

2. Mais est-il encore possible de parler de mécanique classique à cette échelle ?



Loi

Dans le cas d'une émission stimulée, le photon émis a exactement la même direction, le même sens et la même polarisation que le photon incident.

- ✧ En d'autres termes, le photon émis est un véritable « clone » de l'incident : même en contrôlant le photon incident, une fois l'émission spontanée réalisée, il est impossible de distinguer le photon du photon émis.
- ✧ Dans ces conditions, la probabilité qu'un atome passe de l'état E_2 à l'état E_1 s'écrit

$$dP_{2 \rightarrow 1} = B_{21} u_\nu dt \quad (\text{I.34})$$

- ✧ De plus, nous admettrons que

$$B_{21} = B_{12} \stackrel{\text{not}}{=} B \quad (\text{I.35})$$

- ✧ C'est bien cette émission stimulée qui est, grâce au « clonage » des photons, au cœur de l'émission LASER.

★ amplification

- ✧ Rappelons-nous la cavité résonante optique. Son but est de créer un rayonnement parallèle, *i.e.* de faire en sorte que tous les photons aient, en sortie de la cavité, la même direction et le même sens de propagation. Notons-le \vec{u}_x .
- ✧ Comptons le nombre de photons d'énergie $h\nu$ se déplaçant suivant $+\vec{u}_x$, **créés** dans la tranche située entre z et $z + \delta z$ entre les instants t et $t + \delta t$.
- ✧ Pour cela, il faut en compte les trois processus :
 - l'émission spontanée augmente le nombre de photon mais les envoie dans toutes les directions. Ceux allant dans la direction $+\vec{u}_x$ sont donc négligeables ;
 - l'absorption qui *diminue* le nombre de photons ;
 - l'émission stimulée qui en *augmente* le nombre.
- ✧ En notant $N_{h\nu}$ la densité volumique de photons intéressants d'énergie $h\nu$, le nombre créé s'écrit donc

$$\delta N_{h\nu} = \text{néglig} - N_1 \times B u_\nu dt + N_2 B u_\nu dt = B (N_2 - N_1) u_\nu dt \quad (\text{I.36})$$

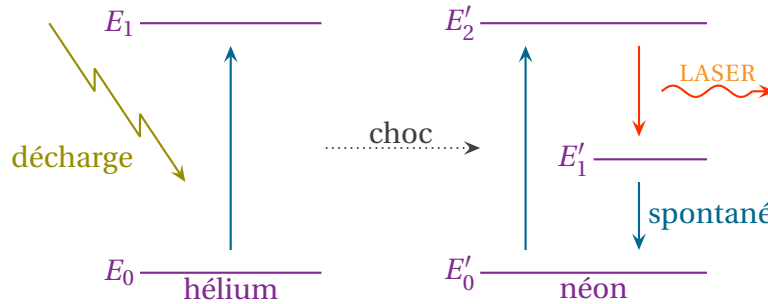
- ✧ Pour que le nombre de photons augmente, il faut donc

$$N_2 > N_1 \quad (\text{I.37})$$

- ✧ Cela revient à dire qu'il est *nécessaire* qu'il y ait plus d'atome excités que d'atomes dans leur état fondamental. Ou, autrement dit, il est nécessaire que la cavité résonante soit *hors état d'équilibre*.

★ pompage optique

- ✧ Faire en sorte que $N_2 > N_1$ revient à réaliser une *inversion de population*, sous-entendu « par rapport à l'équilibre thermodynamique ».
- ✧ Par exemple, pour le LASER Hélium-néon, cela se passe en plusieurs étapes :
 - une décharge électrique excite un atome d'hélium (85 % du mélange gazeux) de l'état E_0 à l'état E_1 ;
 - un choc avec un atome de néon fait retourner l'atome d'hélium à son état fondamental et passer l'atome de néon de l'état E'_0 à l'état E'_2 , métastable ;
 - l'état E'_2 du néon étant métastable, il va pouvoir une émission stimulée entre E'_2 et E'_1 ;
 - l'état E'_1 du néon étant très instable, l'atome de néon retourne très vite à son état fondamental et le « cycle » peut recommencer.



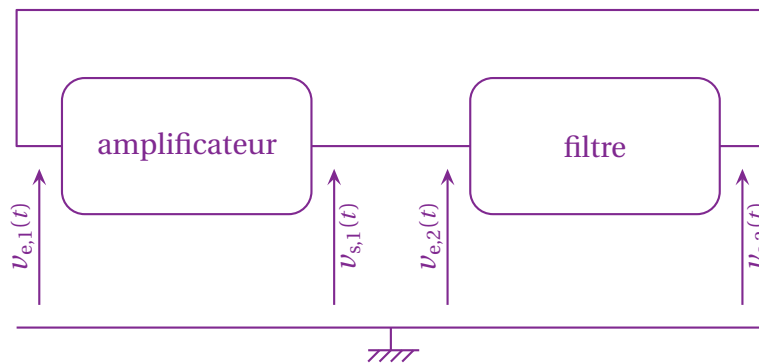
✧ L'opération qui permet d'inverser les population s'appelle le *pompage optique*.

I.2.iii – bouclage

★ amplificateur type « filtre de WIEN »

✧ L'ensemble de l'effet LASER, avec l'émission stimulée et la cavité résonante est analogue à l'oscillateur de WIE.

✧ Rappelons le schéma de principe de cet oscillateur



✧ Rappelons, aussi, son fonctionnement qualitatif :

- un signal est « épuré » par un filtre passe-bande ;
- la sortie (épurée) du filtre passe-bande est envoyée dans un amplificateur ;
- la sortie de l'amplificateur, à savoir le signal initial épuré et amplifié, est renvoyé dans le filtre pour un nouveau filtrage ;
- et ainsi de suite.

✧ Pour l'effet LASER c'est la même chose :

- l'émission stimulée joue le rôle de l'amplificateur ;
- la cavité résonante joue le rôle du filtre passe-bande.

★ limites

✧ Pourquoi la lumière LASER, avec l'émission stimulée, n'est-elle pas extrêmement puissante ? Qu'est-ce qui la limite ?

✧ La première limitation de l'effet LASER c'est *l'énergie* : il ne peut pas « ressortir » plus d'énergie par rayonnement LASER que d'énergie injectée pour réaliser l'inversion de population.

✧ De manière moins fondamentale, plus prosaïque, l'émission spontanée a des limites intrinsèques :

- la population des atomes dans l'état E_2 est limité par la quantité d'atomes présents dans la cavité ;
- une fois l'émission stimulée réalisée, il faut « un certain temps » pour réexciter l'atome dans l'état E_2 , *i.e.* pour réparer l'atome à une émission LASER.

✧ Ajoutons, enfin, que les LASER à gaz se répartissent en deux catégories :

- les LASER à CO_2 de rendement près de 20 % ;

→ tous les autres de rendement de l'ordre du pourcent ou bien inférieur.

✧ À noter que les diodes LASER, elles, ont un rendement de 30 à 40 %.

II – Le monde quantique

II.1 – Dualité onde – corpuscule


II.1.i – l'onde est aussi un corpuscule

★ expérience historique

- 3
- ✧ BECQUEREL, le premier, mis en évidence un effet photoélectrique. Pour cela, il monta une expérience qui consistait à mesurer le courant électrique entre deux électrodes (plongées dans un liquide) suivant l'éclairage du dispositif.
 - ✧ Il apparut alors que :
 - il n'y a du courant que si la fréquence du rayonnement dépasse une certaine valeur minimale (dépendant du matériaux) ;
 - lorsque la fréquence du rayonnement est suffisante, l'intensité est proportionnel à l'intensité de la lumière reçue ;
 - l'énergie cinétique des électrons arrachés est une fonction affine de la fréquence du rayonnement.
 - ✧ Pour interpréter cette expérience, EINSTEIN proposa, en 1905³, que la lumière était composée de particules, les photons, et que chacun d'eux contenait une énergie directement proportionnelle à leur fréquence.

★ loi de PLANCK – EINSTEIN

- ✧ IL s'agit de la loi qui donne, à chaque photon, le *quantum* d'énergie transporté



Loi

Un photon associé à un rayonnement de fréquence ν transporte l'énergie

$E_\nu = h\nu = \hbar\omega$ où :

- $h = 6,62 \times 10^{-34}$ J.s est la constante de PLANCK ;
- $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ est la constante de PLANCK réduite.

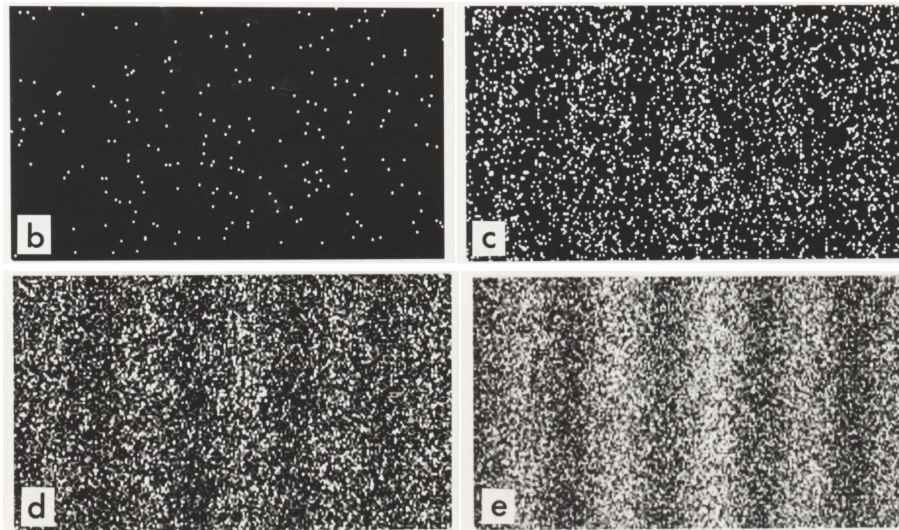
II.1.ii – la matière est aussi une onde

★ expérience historique

- 4
- ✧ En envoyant (un par un!) des électrons sur un dispositif type « fente d'YOUNG », dont l'écran est une pellicule photographique, suivant la durée d'exposition, nous obtenons quelque chose comme⁴

3. C'est cette interprétation qui lui valu le prix NOBEL en 1921.

4. Source : http://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/3/31/Double-slit_experiment_results_Tanamura_four.jpg



✧ Cela signifie que la matière (les électrons en l'occurrence) :

- est bien constitué de particules puisque chacun fait un impact sur l'écran ;
- a des propriétés ondulatoire puisque la figure formée, au bout d'un certain temps, fait apparaître des franges.

★ relation de BROGLIE

✧ Il s'agit de la loi qui associe, à une particule matérielle, un caractère ondulatoire

Loi

À une particule matérielle possédant la quantité de mouvement p , est associée une onde de longueur d'onde λ tel que

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

STOP Même si, formellement, cette loi ressemble beaucoup à celle qui donne la quantité de mouvement d'un photon à partir de la fréquence, ces deux lois n'ont **rien à voir** car elles ne s'appliquent pas aux mêmes objets ! La « preuve », c'est que, pour transformer l'une en l'autre, nous sommes obligé de dire que la particule est une onde qui se déplace à la célérité c , ce qui est **faux** ! L'onde de matière se déplace, comme nous ne verrons à la fin de cette partie, avec la même vitesse que la particule.

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{h\nu}{c} \quad (\text{II.1})$$

★ du côté de la relativité

✧ D'une manière plus générale, l'énergie contenue dans une particule s'écrit, dans le cadre de la relativité

$$E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4 \quad (\text{II.2})$$

✧ Lorsque la particule est au repos, la quantité de mouvement p est nulle et nous retrouvons ce qui est, certainement, la formule de physique la plus connue au monde⁵

$$E = m c^2 \quad (\text{II.3})$$

✧ Avec cette loi, nous retrouvons aussi, pour les photons, le lien entre énergie et quantité de mouvement

5. Malheureusement, seule la **formule** est connue. Pas la loi. Qui sait qu'il s'agit là de l'énergie d'une particule lorsqu'elle est *au repos* ?

$$E^2 = p^2 c^2 + 0 \quad \text{et} \quad E = h\nu \quad \rightsquigarrow \quad p = \frac{h\nu}{c} \quad (\text{II.4})$$

✧ Ajoutons que, dans le cadre de la relativité générale, la quantité de mouvement ne s'écrit *pas* $p = m v$ mais

$$p = \gamma m v \quad \text{avec} \quad \gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \quad (\text{II.5})$$

✧ Le lecteur (curieux) pourra vérifier que pour des faibles vitesses, l'énergie cinétique, qui n'est autre que la différence entre l'énergie totale et l'énergie au repos, tend vers

$$E - m c^2 \xrightarrow{v \ll c} \frac{1}{2} m v^2 \quad (\text{II.6})$$

II.1.iii – principe d'incertitude d'HEISENBERG

★ l'acte de mesure et la mécanique quantique

- ✧ Le principe d'incertitude est un des piliers de la mécanique quantique. Un « pilier » en plusieurs sens du terme.
- ✧ Tout d'abord, il s'agit là d'un résultat fondamental. Certes, au début, la loi fut « intuitée » par HEISENBERG dans des conditions que personne ne connaîtra jamais⁶, mais après, elle fut incluse dans une théorie plus large de manière à en devenir une *conséquence* normale.
- ✧ Mais cette loi est aussi un pilier de la mécanique quantique car elle est, pour ainsi dire, quasiment unique en physique vu qu'il s'agit d'une loi qui repose sur *l'acte de mesure*.
- ✧ Jusqu'à présent, tout ce que nous avons vu, toutes les lois que nous avons écrites sont *indépendantes* de l'observateur, de l'expérimentateur. Les ondes qui se propagent, la chute libre, tout cela arriverait même si personne n'était là pour le « voir »⁷.
- ✧ Il n'en est pas de même en mécanique quantique ! L'expérimentateur, parce qu'il cherche à **mesurer** des grandeurs, à *percevoir* des mouvements, va non seulement perturber le système, mais en plus va forcer le système quantique à répondre d'une certaine manière et pas d'une autre.
- ✧ C'est, notamment, ce rapport à la mesure, le fait que l'expérimentateur joue un rôle dans l'évolution d'un système quantique, qui fait que la mécanique quantique est très contrintuitive et gêne de manière épistémologique.
- ✧ Ceux qui veulent aller un peu plus loin sur les problèmes que peut poser l'acte de mesure en mécanique quantique, peuvent faire des recherches sur « le chat de SCHRÖDINGER » et sur la « décohérence quantique ».

★ position et vitesse

6. Il a détruit les pages de son journal intime correspondant aux jours de sa découvertes. Période où il était avec sa maîtresse...


7. Mettons de côté la question philosophique « La Lune existe-t-elle quand je ne la regarde pas ? » en répondant un « oui », clair, franc et sans ambiguïté.

 **loi**
 **Loi**

PRINCIPE D'INCERTITUDE

Les mesures **simultanées** de la position x et de la quantité de mouvement p_x d'une particule se font, respectivement, à Δx et Δp_x près tel que

$$\Delta x \times \Delta p_x \geq \hbar$$

 **Remarque.** Il est possible, aussi de trouver d'autres relations d'incertitudes

$$\Delta x \times \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \quad (\text{II.7})$$

$$\Delta x \times \Delta p_x \geq h \quad (\text{II.8})$$

$$\Delta x \times \Delta p_x \geq \hbar \quad (\text{II.9})$$

✧ Il ne faut pas se formaliser pour cela. L'important est de bien comprendre que la mesure **simultanée** et aussi précise que possible, de deux grandeurs *conjuguées* est impossible.

 **diffraction**

- ✧ la diffraction peut se voir sous l'angle du principe d'incertitude.
- ✧ En envoyant une onde plane sur une ouverture de largeur a sur \vec{u}_x , nous **obligeons** le photon à avoir une position connue à a près sur l'axe \vec{u}_x .
- ✧ Dès lors, suivant la même direction, la quantité de mouvement du photon est connue à $\delta p_x = \frac{h}{a}$ près.
- ✧ Or la **projection** de la quantité de mouvement sur \vec{u}_x s'écrit

$$p_x = p \sin \theta = \frac{h\nu}{c} \times \sin \theta = \frac{h}{\lambda} \times \sin \theta \quad (\text{II.10})$$

✧ En égalant les deux résultats nous obtenons

$$\frac{h}{a} = \frac{h}{\lambda} \sin \theta \quad \rightsquigarrow \quad \sin \theta = \frac{\lambda}{a} \quad (\text{II.11})$$

- ✧ Ce résultat signifie que, en obligeant les photons à passer dans une fente de largeur a , nous allons les éparpiller suivant cette direction avec un angle typique de $\frac{\lambda}{a}$.
- ✧ Et c'est bien ce que nous avons trouvé dans le chapitre correspondant !

 **temps et énergie**

✧ Il existe le même type de relation pour les deux grandeurs conjuguées que sont le temps et l'énergie.

 **Loi**

PRINCIPE D'INCERTITUDE

Les mesures **simultanées** de l'énergie E que possède une particule ainsi que de l'instant t où elle la possède se font, respectivement, à ΔE et Δt près tel que

$$\Delta E \times \Delta t \geq \hbar$$

II-2 – L'équation de SCHRÖDINGER

II-2-i – fonction d'onde

- ✧ La *fonction d'onde* est à la mécanique quantique ce qu'est la cinématique à la mécanique classique.
- ✧ C'est un outil qui permet de *décrire* les systèmes en mécanique quantique.
- ✧ Il est donc **fondamental** de bien comprendre ce qu'est une fonction d'onde, ce qu'elle représente, la manière dont nous allons nous en servir...

★ densité de probabilité

🔗 de manière générale



Loi

En mécanique quantique, toute particule est associée à une *fonction d'onde* $\psi(M,t)$, complexe, telle que la probabilité dP , de trouver, à l'instant t , la particule dans le volume $d\tau$ centré en M s'écrit

$$dP = |\psi(M,t)|^2 d\tau$$

- ☞ *Remarque.* Comme en mécanique quantique les fonctions d'ondes sont *intrinsèquement* des fonctions complexes, nous ne prendrons plus la peine de les souligner.

$$\underline{\psi}(M,t) \longrightarrow \psi(M,t) \quad (\text{II.12})$$

- ✧ « Avant », il était nécessaire de distinguer la notation complexe $\underline{u}(t)$ et la notation réelle $u(t)$ car il s'agissait de deux fonctions différentes, reliées, certes, mais différentes et seule la fonction réelle avait une signification. Alors qu'ici, en mécanique quantique, il n'y a pas de fonction d'onde réelle... Et, comme nous allons le voir, cela changera pas mal de choses!
- ✧ Comme nous sommes certain de trouver la particule quelque part dans l'espace, nous avons

$$\sum dP = 1 \quad \rightsquigarrow \quad \iiint_{\text{espace}} |\psi(M,t)|^2 d\tau = 1 \quad (\text{II.13})$$

- ✧ Techniquement, cela impose quelques contraintes sur la fonction d'onde puisqu'il faut que son carré soit « intégrable » sur un espace infini.
- ✧ Insistons : ce n'est pas tant la fonction d'onde qui a une « réalité physique » puisque nous ne pouvons pas la « mesurer ». C'est bien $|\psi(M,t)|^2$ qui représente la « réalité physique ».
- ✧ Cette fonction d'onde n'est autre que ce qui représente les *orbitale électronique* en chimie.

22

🔗 restriction à une dimension

- ✧ Dans le cadre du programme, nous nous limiterons à des situations sur une seule dimension. Nous avons alors



Loi

En mécanique quantique, toute particule est associée à une *fonction d'onde* $\psi(x,t)$, complexe, telle que la probabilité dP , de trouver, à l'instant t , la particule entre x et $x + dx$ s'écrit

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

- ☞ *Remarque.* Dans le cas général précédent, $|\psi^2(M,t)|$ est une densité volumique de probabilité, alors qu'ici il s'agit d'une densité *linéique*.
- ✧ Le fait d'être certain de trouver la particule se traduit par

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x,t)|^2 dx = 1 \quad (\text{II.14})$$

21

Définition

La condition de *normalisation* s'écrit, pour une particule se déplaçant sur un seul axe

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

✧ « Normalisation » venant de « normer » ou « mettre une norme ».

★ principe de superposition

Loi

Si $\psi_1(x,t)$ et $\psi_2(x,t)$ sont deux fonctions d'ondes représentant deux états possibles d'une particule, alors toute combinaison linéaire de ces fonctions d'onde est aussi une fonction d'onde représentant l'état de la particule

$$\psi(x,t) = \lambda_1 \psi_1(x,t) + \lambda_2 \psi_2(x,t)$$

- ✧ Les λ_1 et λ_2 se déterminent, notamment, *via* la condition de normalisation.
- ✧ Le fait qu'une combinaison linéaire d'états possibles pour une particule reste un état possible pour une particule découle de la *linéarité* de la loi fondamentale.
- ✧ C'est ce principe de superposition qui conduit aux résultats de l'expérience d'interférence de photons. En effet, en considérant que $\psi_1(M,t)$ est la fonction d'onde d'un électron en présence d'un des deux trous et $\psi_2(M,t)$ la fonction d'onde de ce même électron en présence de l'autre trou, lorsque les deux trous seront ouverts, les deux fonctions d'ondes se superposeront et cela donnera lieu à des interférences de probabilité, donc des interférences de présence.

23

II.2-ii – le « PFD » de la quantique

★ statut

- ✧ Il s'agit d'une loi qui a mis « un certain temps » à émerger puisqu'elle n'est apparue que vers 1925.
- ✧ Nous allons la prendre comme base et l'admettre, comme nous avons admis les lois de NEWTON, à savoir comme des lois qui, *jusqu'à présent*, décrivent très bien ce qui se passe dans un champ d'application connu.
- ✧ Le champ d'application de la mécanique classique concerne à peu près tout, tant que cela n'est ni trop petit (mécanique quantique), ni trop rapide (relativité restreinte), ni trop grand (relativité générale).
- ✧ Le champ d'application de la mécanique quantique est tout ce qui est microscopique **et** concernant peu de particules⁸.

8. Il est, en effet, très délicat, de réaliser un dispositif obéissant aux lois quantiques et comportant plus que quelques (dizaines de ?) particules. C'est cette limite qui empêche, pour l'instant, l'ordinateur quantique d'exister. Tout cela à cause de la *décohérence quantique*...

★ énoncé

**Loi**

ÉQUATION DE SCHRÖDINGER

L'équation d'onde $\psi(x,t)$ d'une particule se déplaçant sur un axe \vec{u}_x plongé dans un potentiel $V(x)$ est tel que

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

✧ Remarquons que, comme c'est l'usage en mécanique quantique, nous noterons i et non j le nombre complexe tel que $i^2 = -1$.

**Bon à retenir**

Le « potentiel » $V(x)$ dans lequel est plongée la particule n'est autre que l'énergie potentielle qu'elle possède.

- ✧ Il s'agit d'une équation aux dérivées partielles *linéaire* et à coefficients non constants (à cause de $V(x)$).
- ✧ Techniquement, cela signifie que, pour trouver les solutions, il faudra :
 - découper l'espace en zone où $V(x)$ est constant (seul cas traité dans le programme) ;
 - résoudre l'équation sur chacun de ces morceaux ;
 - raccorder ces morceaux de solutions avec des conditions aux limites.
- ✧ En toute rigueur, l'équation de SCHRÖDINGER précédente n'est valable que pour les particules sans charge et sans spin.

II.3 – L'équation de SCHRÖDINGER pour les états stationnaires

II.3.i – états stationnaires

★ définition

✧ Pas de surprise de ce point de vue

**Définition**

Un *état stationnaire* quantique est représenté par une fonction d'onde $\psi(x,t)$ qui s'écrit

$$\psi(x,t) = \varphi(x) g(t)$$

✧ Il s'agit là d'une notion que nous connaissons... enfin presque.

★ la différence avec le cas réel

✧ Dans le chapitre sur les ondes, nous avons recherché des solutions stationnaire qui s'écrivaient

$$y(x,t) = f(x) \times g(t) \tag{II.15}$$

✧ Pourtant, la situation est très différente en mécanique quantique, car les fonctions sont toujours complexes.

✧ Ainsi, en mécanique ondulatoire « classique », un OPPM est une solution **non** stationnaire

$$y(x,t) = A \cos(\omega t - kx) \tag{II.16}$$

✧ En revanche, une fonction d'onde qui représente une onde plane **est** une solution stationnaire

$$\psi(x,t) = \psi_0 e^{i(kx - \omega t)} = \psi_0 e^{ikx} \times e^{-i\omega t} \tag{II.17}$$

- ✧ Ainsi, en mécanique quantique, le vocable *stationnaire* est plus à rapprocher de celui utilisé en mécanique des fluides (où il pouvait y avoir du mouvement dans une situation *stationnaire*) qu'à celui utilisé avec les ondes.

II-3-ii – réécriture de l'équation de SCHRÖDINGER

★ séparation des variables

- ✧ Introduisons une solution stationnaire dans l'équation de SCHRÖDINGER et manipulons.

24

$$-\frac{\hbar^2}{2m} g(t) \times \frac{d^2 \varphi}{dx^2}(x) + V(x) \varphi(x) g(t) = i \hbar \varphi(x) \times \frac{dg}{dt}(t) \quad (\text{II.18})$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \times \frac{1}{\varphi(x)} \times \frac{d^2 \varphi}{dx^2}(x) + V(x) = i \hbar \times \frac{1}{g(t)} \times \frac{dg}{dt}(t) \quad (\text{II.19})$$

- ✧ Nous nous trouvons face à une égalité entre deux fonctions de variables différentes et indépendantes. Ces deux fonctions sont donc nécessairement égales à une constante.
- ✧ Comme cette constante est homogène à une énergie (cf. le $V(x)$), notons la E .

★ solution de la partie temporelle

- ✧ L'équation temporelle s'écrit donc

$$i \hbar \times \frac{1}{g(t)} \times \frac{dg}{dt}(t) = E \quad (\text{II.20})$$

- ✧ Ce qui donne

$$\frac{dg}{dt}(t) = -\frac{iE}{\hbar} \times g(t) \quad (\text{II.21})$$

- ✧ Dont la solution immédiate est

$$g(t) = 1 \times e^{-iEt/\hbar} \stackrel{\text{not}}{=} e^{-i\omega t} \quad (\text{II.22})$$


- ✧ Rappelons que le facteur multiplicatif est doublement sans importance ici :

- ➔ parce que cette fonction sera multipliée par $\varphi(x)$ qui contient, elle aussi, un facteur multiplicatif;
- ➔ parce que le tout forme une fonction d'onde $\psi(x,t) = \varphi(x) \times g(t)$, qui sera elle même multipliée par un coefficient pour satisfaire la condition de normalisation.

★ réécrire la partie spatiale

- ✧ En reprenant l'équation II.19 nous arrivons très vite à

28




Loi

ÉQUATION DE SCHRÖDINGER POUR LES ÉTATS STATIONNAIRES

Dans le cas d'une solution stationnaire, la fonction d'onde $\psi(x,t) = \varphi(x) \times g(t)$ est telle que

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

- ✧ Nous admettrons l'interprétation suivante.




Loi

Dans l'équation de SCHRÖDINGER des états stationnaires, la constante E représente l'énergie que possède la particule.

✧ Reste, désormais, à résoudre cette équation différentielle linéaire d'ordre 2 à coefficients **non** constants et, surtout, à en interpréter les résultats.

★ explication

 Le paragraphe qui suit est totalement hors-programme. Il est là uniquement à titre informatif pour soulever (un tout petit peu plus) le voile sur quelques rouages de la mécanique quantique. Si vous ne comprenez pas bien, si vous n'arrivez pas à vous représenter les choses, **n'insistez pas!**

✧ En mécanique quantique, si la fonction d'onde $\psi(x,t)$ représente la probabilité de présence de la particule à un instant à un endroit, elle ne représente pas la *position* de cette particule.

✧ Pour avoir ce qui représente la position de cette particule, il suffit de faire une opération sur la fonction d'onde. Officiellement, cela s'appelle « utiliser un opérateur ». Techniquement, pour la position, il suffit de multiplier par x .

$$x \xrightarrow{\text{représenté par}} x \times \varphi(x) \quad (\text{II.23})$$

✧ De même, pour connaître le potentiel (*i.e.* l'énergie potentielle) que possède

$$E_p(x) \xrightarrow{\text{représenté par}} V(x) \times \varphi(x) \quad (\text{II.24})$$

✧ Pour la quantité de mouvement, c'est un peu différent. L'opérateur à utiliser est $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$. Oui, une dérivée par rapport à la *position*.

$$p_x(x) \xrightarrow{\text{représenté par}} -i\hbar \frac{d\varphi}{dx}(x) \quad (\text{II.25})$$

✧ En mécanique classique, l'énergie mécanique s'écrit

$$E_m = E_c + E_p = \frac{1}{2} m v^2 + E_p \quad \rightsquigarrow \quad E_m = \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad (\text{II.26})$$

✧ « Donc⁹ », pour savoir ce qui représente l'énergie, nous devons :

- appliquer deux fois l'opérateur « quantité de mouvement » et diviser par $2m$;
- appliquer une fois l'opérateur potentiel ;
- additionner le tout.

✧ Cela donne

$$E_m \xrightarrow{\text{représenté par}} \frac{1}{2m} \times (-i\hbar) \frac{d}{dx} \left(-i\hbar \frac{d\varphi}{dx}(x) \right) + V(x) \times \varphi(x) \quad (\text{II.27})$$

✧ Autrement dit

$$E_m \xrightarrow{\text{représenté par}} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi}{dx^2}(x) + V(x) \times \varphi(x) \quad (\text{II.28})$$

✧ Et, en tenant compte de l'équation de SCHRÖDINGER pour les états stationnaires, nous trouvons que l'énergie mécanique se représente par une *constante*. 25

$$E_m \xrightarrow{\text{représenté par}} E \times \varphi(x,t) \quad (\text{II.29})$$

✧ Ce qui signifie que, quelle que soit sa « position », l'énergie totale de la particule est la même et vaut E .

9. Toute la magie de la mécanique quantique est dans ce « donc ».

👉 *Remarque.* Allons un dernier pas plus loin. En notant H (comme « hamiltonien ») l'opérateur qui représente l'énergie d'une particule, alors l'équation de SCHRÖDINGER s'écrit, en toute généralité

$$H\psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(x,t) \quad (\text{II.30})$$

II.4 – Vision classique d'une particule quantique libre

II.4.i – la particule est une onde progressive

★ solution de la partie spatiale

👉 Reprenons l'équation de SCHRÖDINGER pour les états stationnaires.

28

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi}{dx^2}(x) + V(x) \times \varphi(x) = E \varphi(x) \quad (\text{II.31})$$

👉 Nous allons considérer, ici, une particule *libre*, *i.e.* une particule qui ne subit aucune force, *i.e.* une particule plongé dans un potentiel $V(x)$ partout nul et pouvant se trouver dans tout l'espace.

👉 Cela donne

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi}{dx^2}(x) = E \varphi(x) \quad \rightsquigarrow \quad \frac{d^2 \varphi}{dx^2}(x) + \frac{2mE}{\hbar^2} \varphi(x) = 0 \quad (\text{II.32})$$

👉 Il y a, alors, deux possibilités de solutions.

🕒 particule avec une énergie négative

👉 La solution est alors en

$$\varphi(x) = A e^{Kx} + B e^{-Kx} \quad \text{avec} \quad K = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad (\text{II.33})$$

👉 Cette solution n'est pas possible car la particule peut accéder à tout l'espace, *i.e.* peut aller de $x = -\infty$ à $x = +\infty$.

👉 Or la condition de normalisation interdit la divergence de la fonction d'onde.

👉 Cette solution n'est pas possible.

🕒 particule avec une énergie positive

👉 N'oublions pas que nous cherchons une fonction *complexe*. La solution est donc

$$\varphi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx} \quad \text{avec} \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad (\text{II.34})$$

👉 Pour la suite, nous garderons la solution

$$\varphi(x) = A e^{ikx} \quad \text{avec} \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad (\text{II.35})$$

★ rassemblement avec la partie temporelle

👉 Nous avons trouvé que la partie temporelle s'écrivait (cf. II.22)

$$g(t) = e^{-i\omega t} \quad (\text{II.36})$$

👉 Nous pouvons donc écrire complètement la fonction d'onde

$$\psi(x,t) = A e^{ikx} \times e^{-i\omega t} = A e^{i(kx-\omega t)} \quad (\text{II.37})$$

✧ Nous trouvons ni plus ni moins qu'une onde progressive vers les x croissants, solution que nous **savons** interpréter :

- il s'agit d'une onde de pulsation temporelle ω ;
- de vecteur d'onde k .

☞ *Remarque.* Si nous avions conservé la solution en e^{-ikx} , nous aurions obtenu une onde progressive vers les x décroissants.

II.4.ii – la solution de la partie temporelle donne la relation de PLANCK – EINSTEIN

26

✧ Reprenons la partie temporelle de la fonction d'onde (cf. II.22)

$$g(t) = 1 \times e^{-iEt/\hbar} \stackrel{\text{not}}{=} e^{-i\omega t} \quad (\text{II.38})$$

- ✧ À ce moment là, ω n'était qu'une notation, certes homogène à une pulsation, mais une simple notation.
- ✧ Désormais, nous pouvons dire cette pulsation est *la* pulsation de la fonction d'onde de cette particule.
- ✧ Or la notation est liée à l'énergie de la particule par

$$\frac{E}{\hbar} = \omega \quad \rightsquigarrow \quad E = \hbar\omega \quad \rightsquigarrow \quad E = h\nu \quad (\text{II.39})$$

✧ Nous retrouvons bien, comme annoncé, la relation de PLANCK – EINSTEIN.

II.4.iii – la relation de dispersion donne la relation de DE BROGLIE

29

✧ Reprenons l'équation de SCHRÖDINGER pour les états stationnaires dans le cas de la particule libre (cf. II.32)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi}{dx^2}(x) = E\varphi(x) \quad (\text{II.40})$$

✧ En injectant la solution $\varphi(x) = A e^{ikx}$, nous trouvons

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (ik)^2 A e^{ikx} = E A e^{ikx} \quad (\text{II.41})$$

✧ En simplifiant, nous obtenons la relation de dispersion

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E \quad (\text{II.42})$$

✧ Et en identifiant à l'expression de l'énergie de la particule, restreinte à son énergie cinétique puisqu'il s'agit d'une particule libre,

$$E = \frac{p^2}{2m} \quad \rightsquigarrow \quad p^2 = \hbar^2 k^2 \quad \rightsquigarrow \quad p = \hbar k \quad (\text{II.43})$$

✧ Nous retrouvons bien, là aussi comme annoncé, la relation de DE BROGLIE.

II.4.iv – le caractère « paquet d'ondes » donne le principe d'incertitude d'HEISENBERG

★ le problème et sa solution

✧ Il y a une chose que nous n'avons pas encore abordé avec cette particule libre, c'est le problème de la normalisation qui impose

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x,t)|^2 dx = 1 \quad (\text{II.44})$$

✧ Nous ne l'avons pas abordé car, effectivement, **c'est** un problème. En effet

$$|\psi(x,t)|^2 = |A e^{i(kx-\omega t)}|^2 = |A|^2 \quad (\text{II.45})$$

✧ Et

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |A|^2 dx = \text{blick blick} \quad (\text{II.46})$$

✧ Nous pouvons donc dire, de manière certaine, que cette fonction d'onde ne représente **pas** une vraie particule.

✧ En fait, nous retrouvons là ce que nous avons déjà dit à propos des OPPM, à savoir que c'étaient des ondes qui n'existaient pas, mais qui permettaient de construire, par superposition, des ondes réelles.

✧ Eh bien c'est exactement ce que nous allons faire dans le cas des fonctions d'ondes : nous allons écrire la fonction d'onde comme la superposition de fonctions d'onde correspondant à une particule libre

$$\psi(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} A(k) e^{i(kx-\omega t)} dk \quad (\text{II.47})$$

★ une conséquence connue

✧ Comme nous l'avons vu dans le premier chapitre de l'année¹⁰, la superposition de signaux sinusoïdaux implique que, plus un paquet d'onde est petit temporellement parlant, plus il est grand spatialement parlant.

$$\Delta t \times \Delta \omega \geq 1 \quad (\text{II.48})$$

✧ Comme il s'agit, globalement, d'ondes, nous pouvons aussi avoir la vision spatiale : plus le paquet d'onde est étroit spatialement parlant, plus il contient de vecteurs d'ondes différents.

✧ Cela se traduit, techniquement, par

$$\Delta x \times \Delta k \geq 1 \quad (\text{II.49})$$

✧ Et en multipliant par \hbar et en faisant intervenir la relation de DE BROGLIE

$$\Delta x \times \Delta p \geq \hbar \quad (\text{II.50})$$

✧ Ce qui est bien l'inégalité d'HEISENBERG.

¹⁰. Et le fait de le revoir dans le dernier chapitre constitue une épanadiplose didactique!

★ remarques

✧ En « vrai », l'inégalité qui découle de la théorie de FOURIER s'écrit

$$\Delta x \times \Delta k \geq \frac{1}{2} \quad (\text{II.51})$$

✧ Ce qui donne donc la « vraie » inégalité d'HEISENBERG

$$\Delta x \times \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \quad (\text{II.52})$$

✧ Mais, comme nous l'avons déjà dit, le facteur n'a pas tellement d'importance.

✧ Remarquons aussi que, d'une certaine manière (et la rigueur en moins), nous avons *démontré* la relation d'incertitude d'HEISENBERG et sans **avoir l'impression** de faire intervenir la notion de mesure.

✧ Cela signifie que l'acte de mesure est intrinsèquement caché au cœur de la mécanique quantique.

✧ En réalité, nous avons bien utilisé l'acte de mesure *via* la condition de normalisation

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x,t)|^2 dx = 1 \quad (\text{II.53})$$

✧ En effet, cette relation dit qu'il est certain (probabilité de 1) de trouver la particule quelque part. Et pour la trouver, il faut nécessairement *mesurer* sa position.

✧ S'il n'y avait pas la condition de normalisation, il n'y aurait peut-être pas l'inégalité d'HEISENBERG. Mais qui est prêt à accepter une théorie où une particule peut exister sans être quelque part ?

✧ Cela revient à dire que l'existence même d'une particule *implique* la relation d'incertitude d'HEISENBERG ! Bienvenue dans le monde quantique !

II.4.v – la vitesse de groupe donne la vitesse classique

30

★ réécriture du paquet d'onde

✧ Dans la suite, nous allons supposer que la fonction d'onde est une superposition de fonctions d'onde *proches* de (k_0, ω_0) .

✧ Autrement dit, les seules amplitudes $A(k)$ non négligeables sont pour des vecteurs d'onde et des pulsations tels que

$$k \sim k_0 \quad \text{et} \quad \omega \sim \omega_0 \quad (\text{II.54})$$

✧ Nous pouvons alors faire un développement limité de ω autour de ω_0

$$\omega = \omega_0 + \frac{d\omega}{dk}(k_0) \times (k - k_0) \quad (\text{II.55})$$

✧ Nous reconnaissons là la définition de la vitesse de groupe

$$v_g \stackrel{\text{not}}{=} \frac{d\omega}{dk}(k_0) \quad \rightsquigarrow \quad \omega = \omega_0 + v_g (k - k_0) \quad (\text{II.56})$$

✧ En remplaçant dans l'expression de la fonction d'onde¹¹

$$\psi(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} A(k) \times \exp \left[i(kx - \omega_0 t - v_g t (k - k_0)) \right] dk \quad (\text{II.57})$$

✧ En écrivant $k = k_0 + (k - k_0)$, nous avons

11. Étant donné ce que nous avons supposé sur les amplitudes $A(k)$, nous aurions pu nous limiter à une somme entre $k_0 - \delta k$ et $k_0 + \delta k$ car les autres contributions sont négligeables.

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} A(k) \times \exp \left[i(k_0 x - \omega_0 t + (k - k_0)x - v_g t (k - k_0)) \right] dk \quad (\text{II.58})$$

✧ Nous pouvons alors factoriser par $e^{i(k_0 x - \omega_0 t)}$, ce qui donne

$$\psi(x, t) = \left(\int_{-\infty}^{+\infty} A(k) \times \exp \left[i((k - k_0)x - v_g t (k - k_0)) \right] dk \right) \times e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} \quad (\text{II.59})$$

✧ Ce qui se réécrit

$$\psi(x, t) = \left(\int_{-\infty}^{+\infty} A(k) \times \exp \left[i(k - k_0)(x - v_g t) \right] dk \right) \times \exp i(k_0 x - \omega_0 t) \quad (\text{II.60})$$

✧ La densité linéique de présence donne donc

$$dP = |\psi(x, t)|^2 = \left| \int_{-\infty}^{+\infty} A(k) \times \exp \left[i(k - k_0)(x - v_g t) \right] dk \right|^2 = F(x - v_g t) \quad (\text{II.61})$$

✧ Nous pouvons remarquer, alors, que la fonction d'onde précédente ne dépend de x et t **uniquement** via l'expression $x - v_g t$.

✧ Cela signifie que l'expression précédente correspond à une onde plane progressive se déplaçant à la célérité v_g suivant les x croissant.

✧ Autrement dit, nous venons de démontrer que la densité de présence « avance » à la vitesse v_g .

★ réécriture de la vitesse de groupe

✧ Reprenons la relation de dispersion obtenue précédemment (cf. II.42)

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E \quad (\text{II.62})$$

✧ Et comme $E = \hbar \omega$, cela donne

$$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m} \quad (\text{II.63})$$

✧ La vitesse de groupe s'écrit, alors, « tout simplement »

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k}{m} \quad (\text{II.64})$$

✧ Et avec la relation de DE BROGLIE

$$v_g = \frac{p}{m} \quad (\text{II.65})$$

✧ Et donc, pour une particule « classique » (*i.e.* qui ne va pas trop vite) pour laquelle $p = m v$, nous avons bien

$$v_g = v \quad (\text{II.66})$$



Loi

La vitesse de groupe du paquet d'onde de la fonction d'onde s'identifie, pour une particule classique, à sa vitesse.

II.4.vi – retour à la vision quantique : courant de probabilité

★ position du problème

- ✧ Bien que nous ayons, jusque là, montré que la vision quantique était cohérente avec la vision classique, il ne faut pas oublier que nous manipulons des fonctions d'ondes, *i.e.* des objets intrinsèquement quantiques.
- ✧ Dans ces conditions, nous devons (légèrement) modifier notre approche.
- ✧ C'est ainsi que, pour une particule libre, nous ne pouvons pas nous poser la question : « À quel instant la particule passe-t-elle par le point d'abscisse x_0 ? ».
- ✧ En effet, cette question n'a *aucune signification* en mécanique quantique ! La mécanique quantique est régie par un principe *d'incertitude*, sa base c'est **rien n'est certain, tout est probabilité**¹².
- ✧ Nous devons donc nous poser la question : « Quelle est la probabilité pour que, entre les instant t et $t + dt$, la particule passe par le point d'abscisse x_0 ? ». C'est très différent.

★ de la vision « classique » à l'expression quantique

🕒 raisonnement

- ✧ Il est difficile de parler de « mouvement » pour une particule car il n'est pas possible de connaître à chaque instant sa position. En effet, si tel était le cas, nous pourrions en déduire, à chaque instant, sa vitesse, ce qui contredirait le principe d'incertitude.
- ✧ En revanche, nous avons à notre disposition :
 - ➔ une fonction d'onde traduisant la probabilité de présence d'une particule ;
 - ➔ une vitesse de groupe caractérisant la manière dont « avance » l'onde qu'est la fonction d'onde.
- ✧ Avec cela, nous allons pouvoir déterminer la probabilité pour que, entre les instant t et $t + dt$, la particule passe par le point d'abscisse x_0 .
- ✧ En effet, détecter la particule au niveau du point d'abscisse x_0 revient à dire que, juste avant, la particule était dans le petit espace avant x_0 .
- ✧ Plus précisément, pendant la durée dt , la fonction d'onde n'a avancé que de $v_g dt$. Détecter la particule passant par x_0 revient à détecter la particule entre les points d'abscisse x_0 et $x_0 - v_g dt$.
- ✧ Or, à l'instant t , la probabilité pour que la particule soit détectée entre x_0 et $x_0 - v_g dt$ s'écrit, par définition de la probabilité linéique,

$$dP = |\psi_{(x_0,t)}|^2 v_g dt \quad (\text{II.67})$$

🕒 réécriture

- ✧ En généralisant le résultat précédent à x quelconque et en l'écrivant sous forme « quantique », *i.e.* en remplaçant v_g par son expression trouvée en II.64, nous obtenons

$$dP = |\psi_{(x,t)}|^2 \frac{\hbar k}{m} dt \quad (\text{II.68})$$

- ✧ Ce que nous allons noter sous la forme

$$dP = J_{(x,t)} dt \quad (\text{II.69})$$

- ✧ $J_{(x,t)}$ représente la densité de courant de probabilité et s'interprète comme le produit densité de probabilité – vitesse.
- ✧ Remarquons que :

¹². C'est bien pour cela qu'EINSTEIN rejetait certains aspects de la théorie quantique et a prononcé ces mots célèbres : « Dieu ne joue pas aux dés ».

- dans le cas tridimensionnel, $J_{(x,t)}$ devient vectoriel, $\vec{J}_{(M,t)}$, et la probabilité recherchée s'écrit comme un *flux* puisque, et c'est normal, cette fois il faut tenir compte de la surface de détection ;
- de manière plus générale, le vecteur densité de courant de probabilité s'écrit

$$J_{(x,t)} = \frac{i\hbar}{2m} \times \left(\psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) \quad (\text{II.70})$$

✧ Il vérifie, alors, une équation de conservation de forme bien connue

$$\frac{\partial |\psi|^2}{\partial t} + \text{div } \vec{J} = 0 \quad (\text{II.71})$$

🕒 d'une « particule libre » à un flux de particules

- ✧ Puisque, pour la particule libre, nous avons $|\psi_{(x,t)}|^2 = C^{\text{te}}$, nous pouvons dire que la probabilité de voir passer la particule à un endroit à un instant est constante.
- ✧ Comme nous l'avons dit plus haut, s'il n'y a qu'une particule, c'est aberrant et c'est la raison pour laquelle nous avons introduit les paquets d'onde.
- ✧ Toutefois, si nous souhaitons conserver l'interprétation en terme probabiliste, cela implique qu'il y a des particules partout et tout le temps. Autrement dit, cela signifie qu'il y a un *flux* de particules constant dans le temps.
- ✧ Ce n'est là, ni plus ni moins, que l'interprétation en terme particulières d'une onde électromagnétique.

III – Particule quantique non libre

III.1 – Puit infini

III.1.i – modèle

★ description

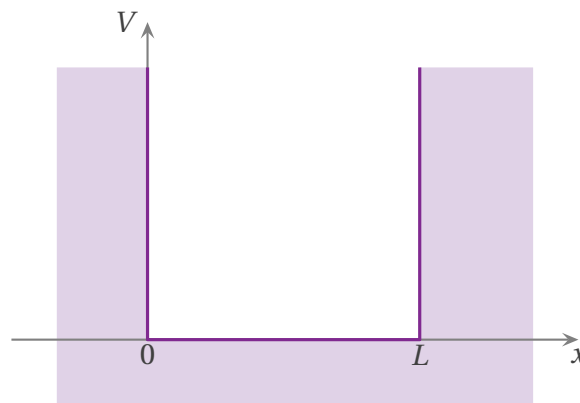
- ✧ Dans ce paragraphe, nous allons chercher à décrire quantiquement une particule confinée entre deux plans distants de L .
- ✧ Le fait qu'elle soit impérativement confinée se traduit, avec un repérage « naturel », par

$$\psi(x < 0, t) = 0 \quad \text{et} \quad \psi(x > L, t) = 0 \quad (\text{III.1})$$

- ✧ Cela revient à dire que le potentiel $V(x)$:

- est nul pour $0 < x < L$;
- est infini ailleurs.

- ✧ Nous pouvons le représenter de la manière suivante



★ solution stationnaire

- ✧ Nous devons chercher la solution de l'équation de SCHRÖDINGER pour cette forme de potentiel

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}(x, t) + V(x) \psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(x, t) \quad (\text{III.2})$$

- ✧ Sans recommencer la démonstration faite en II-3, nous pouvons d'ores et déjà rechercher $\psi(x, t)$ sous la forme

$$\psi(x, t) = \varphi(x) \times e^{-iEt/\hbar} \quad \text{avec} \quad E \text{ quelconque} \quad (\text{III.3})$$

- ✧ L'équation de SCHRÖDINGER pour les états stationnaires s'écrit alors, pour la zone comprise entre $x = 0$ et $x = L$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi}{dx^2}(x) + 0 = E \varphi(x) \quad (\text{III.4})$$

III.1.ii – solution

★ conditions aux limites, saison 1

- ✧ Pour résoudre l'équation précédente, il faut, cette fois, des conditions aux limites.

**Loi**

La fonction d'onde est une fonction continue de l'espace.

⇨ Cela se traduit, ici, par

$$\varphi(0^+) = 0 \quad \text{et} \quad \varphi(L^-) = 0 \quad (\text{III.5})$$

★ **résolution**

⇨ L'équation III.4 se réécrit

$$+\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi}{dx^2}(x) + E\varphi(x) = 0 \quad \rightsquigarrow \quad +\frac{d^2\varphi}{dx^2}(x) + \frac{2mE}{\hbar^2} \varphi(x) = 0 \quad (\text{III.6})$$

⇨ Suivant le signe de E , les solutions sont de forme différentes.

🔍 **pour une énergie négative**

⇨ Si $E < 0$ dans l'équation précédente, alors les solutions s'écrivent sous la forme

$$\varphi(x) = A e^{-Kx} + B e^{+Kx} \quad \text{avec} \quad K = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad (\text{III.7})$$

⇨ Le problème, avec cette solution, c'est qu'elle ne peut pas s'annuler deux fois (en $x = 0$ et en $x = L$) à moins d'être identiquement nulle. Ce qui n'aurait aucun intérêt.

⇨ Nous devons donc la rejeter.

🔍 **pour une énergie positive**

⇨ Si $E > 0$ dans l'équation III.6, alors les solutions s'écrivent¹³

$$\varphi(x) = A \cos(kx) + B \sin(kx) \quad \text{avec} \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad (\text{III.8})$$

⇨ La première condition aux limites impose

$$\varphi(0) = 0 \quad \rightsquigarrow \quad A = 0 \quad (\text{III.9})$$

⇨ Et la deuxième

$$\varphi(L) = 0 \quad \rightsquigarrow \quad B \sin(kL) = 0 \quad (\text{III.10})$$

⇨ Rejettons d'emblée la possibilité $B = 0$ car cela conduirait à une fonction d'onde identiquement nulle... et sans intérêt.

⇨ Nous devons donc avoir

$$kL = n\pi \quad \text{avec} \quad n \text{ entier} \quad (\text{III.11})$$

⇨ Condition qui s'écrit, aussi,

$$\frac{2\pi}{\lambda} = n\pi \quad \rightsquigarrow \quad L = n \times \frac{\lambda}{2} \quad (\text{III.12})$$

⇨ Il s'agit là de la même condition que celle trouvée pour la corde de MELDE.

34

13. Nous aurions pu écrire la solution, *a priori* sous la forme d'une somme de fonctions complexes $\alpha e^{ikx} + \beta e^{-ikx}$ comme nous l'avons fait pour la particule libre (cf. II.34) et nous serions arrivé au même résultat. Si nous avons choisi, ici, la forme réelle directement, c'est parce que nous avons des conditions aux limites qui sont nulles.

III.1.iii – la quantification née du confinement

★ énergie

🕒 expression à partir de la fonction d'onde

33

✧ Reprenons la condition trouvée en III.1.1 et injectons l'expression de k (cf. III.8)

$$kL = n\pi \quad \rightsquigarrow \quad L \times \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} = n\pi \quad (\text{III.13})$$

✧ Isolons l'énergie E

$$E \stackrel{\text{not}}{=} E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \quad (\text{III.14})$$

✧ Nous voyons là que l'énergie, bien que quelconque *a priori*, ne peut finalement pas prendre n'importe quelle valeur. Celle-ci est *quantifiée* et c'est un résultat général.



Loi

Les niveaux d'énergie d'une particule confinée sont quantifiés, *i.e.* ne peuvent prendre qu'une série discrète de valeurs.

✧ Insistons : la mécanique quantique n'implique **pas**, de manière générale, la quantification de l'énergie. La preuve, c'est que pour la particule libre étudiée dans la partie précédente, la valeur de l'énergie peut être quelconque (mais positive).

✧ Seul le *confinement* implique la quantification.

🕒 énergie minimale

35

✧ L'énergie minimale que doit posséder une particule confinée est donné par E_n avec $n = 1$ car $n = 0$ correspond à une fonction d'onde identiquement nulle.

✧ Nous avons alors

$$E_{\min} = E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \quad (\text{III.15})$$

✧ Cela signifie, entre autre, qu'une particule a *nécessairement* de l'énergie et comme cette énergie n'est pas potentielle, c'est qu'elle est cinétique.

✧ Ainsi : une particule confinée « bouge » et plus elle est confinée (plus L est petit), plus l'énergie minimale est grande, *i.e.* plus elle « bouge ». Si tant est, toujours, qu'il soit possible de parler de « mouvement » pour une particule quantique.

36

✧ Nous pouvons retrouver ce résultat avec le principe d'incertitude. En effet, celui-ci impose

7

$$\Delta p_x \geq \frac{\hbar}{\Delta x} \quad (\text{III.16})$$

✧ Or, ici, avec une particule confinée, nous sommes certain de la trouver en $x = 0$ à $\Delta x = L$ près. Cela donne donc

$$\Delta p_x \geq \frac{\hbar}{L} \quad (\text{III.17})$$

✧ Et comme l'énergie cinétique est liée à la quantité de mouvement par $E = \frac{p^2}{2m}$ nous trouvons

$$E \geq \frac{\hbar^2}{2mL^2} \quad (\text{III.18})$$

✧ Nous retrouvons bien le résultat, à un facteur multiplicatif près sans importance.

✧ Tout cela est très cohérent !

🕒 exemples numériques

✧ L'écart énergétique entre le niveau minimal d'énergie et le premier état « excité » s'écrit

$$\Delta E = E_2 - E_1 = \frac{3\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \quad (\text{III.19})$$

✧ Pour l'électron de l'atome d'hydrogène ($L = 10^{-10}$ m), cela donne

$$\Delta E = E_2 - E_1 = \frac{3\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \sim 100 \text{ eV} \quad (\text{III.20})$$

✧ Nous retrouvons là (presque), l'ordre de grandeur de l'énergie d'ionisation de l'atome d'hydrogène (à savoir 13,6 eV).

✧ La valeur trouvée surestime, néanmoins, de manière sensible la valeur réelle. Cela peut venir :

- soit d'un trop grand confinement de l'électron ;
- soit de l'aspect 3D de l'atome réel.

✧ Regardons ce qu'il en est, maintenant, d'une bille ($m = 10$ g), dans une boîte de côté $L = 10$ cm.

$$\Delta E \sim 10^{-63} \text{ J} \quad (\text{III.21})$$

✧ Autrement dit, à l'échelle macroscopique, la quantification est complètement imperceptible, ce qui signifie que l'approche classique est parfaitement suffisante.

★ densité de présence

🕒 fonction d'onde

✧ La fonction d'onde, finalement, s'écrit

$$\varphi(x) = B \sin \frac{n\pi x}{L} \quad (\text{III.22})$$

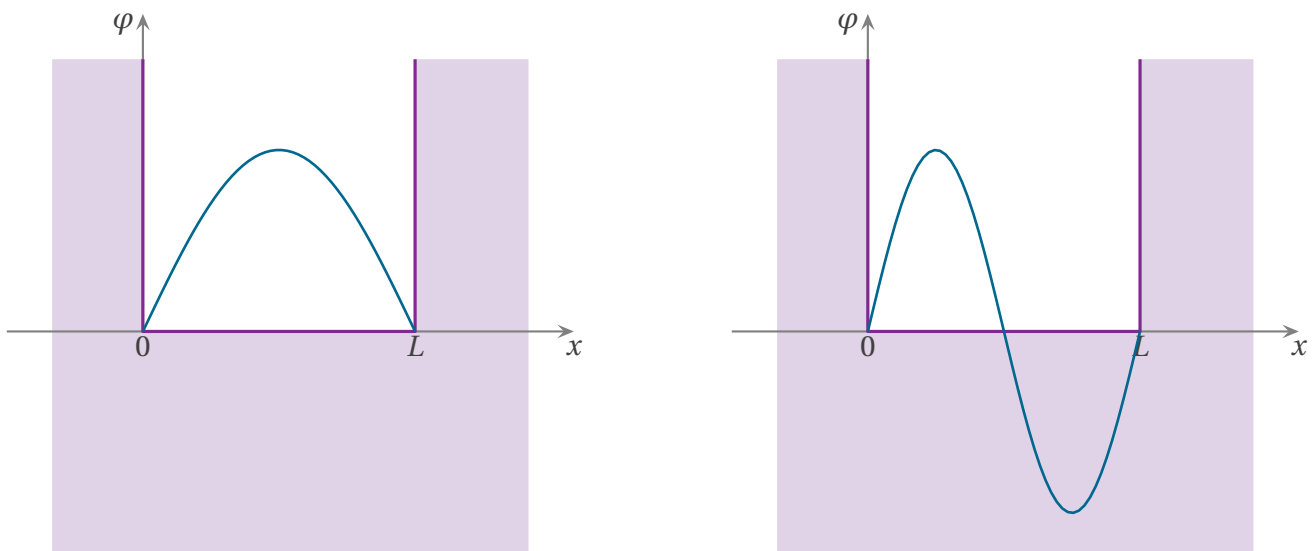
✧ Pour déterminer B , nous devons utiliser la condition de normalisation qui s'écrit, ici,

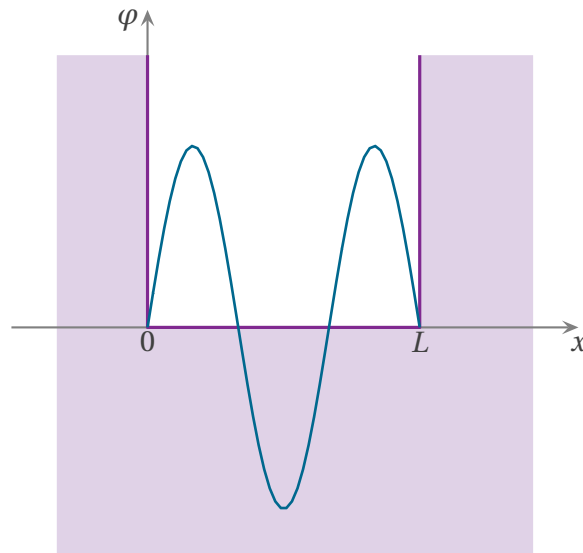
$$\int_0^L \varphi^2(x) dx = 1 \quad (\text{III.23})$$

✧ Après calculs, cela donne

$$\varphi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L} \quad (\text{III.24})$$

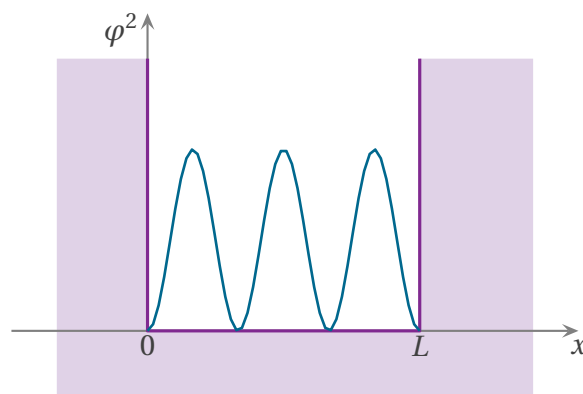
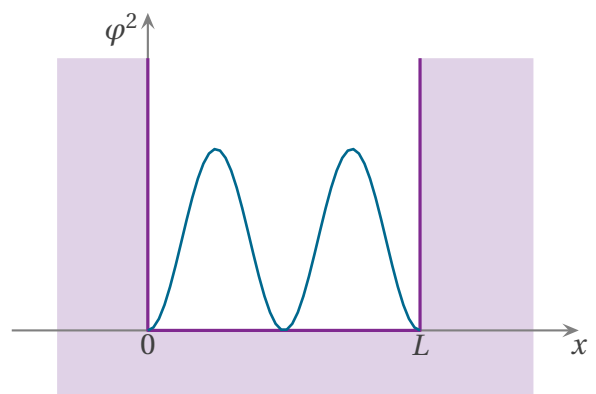
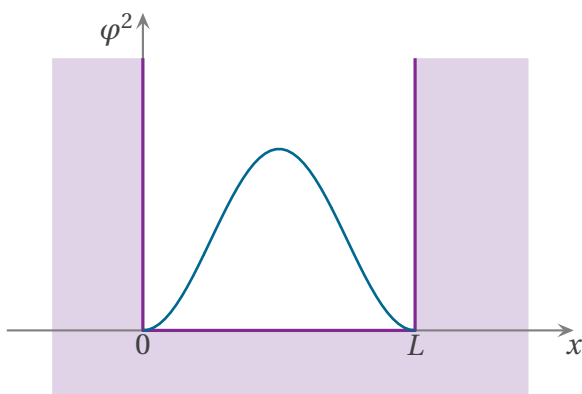
✧ Représentons, ci-dessous, les trois premiers modes.





🕒 vision plus physique

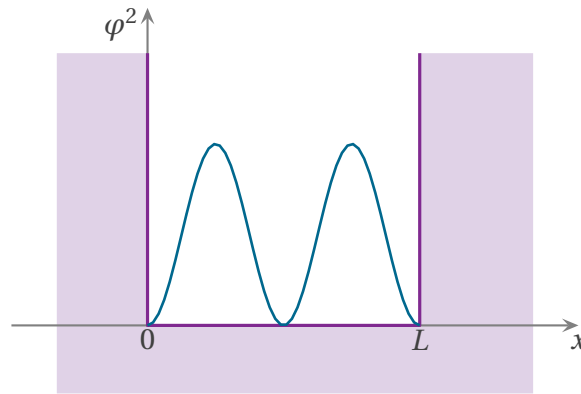
- ✧ Même si nous avons travaillé sur la fonction d'onde, il ne faut pas oublier que le lien avec la « réalité », *i.e.* avec la mesure, c'est bien plus la densité de probabilité.
- ✧ Autrement dit, physiquement, ce qui est intéressant (car mesurable), c'est la grandeur $|\psi(x,t)|^2 \stackrel{\text{ici}}{=} \varphi^2(x)$.
- ✧ Pour les trois modes, cela donne



- ✧ Nous voyons là les zones où nous avons une chance de trouver la particule.

🕒 interprétation quantique paradoxale

- ✧ Reprenons le mode 2.



- ✧ Cette représentation montre que, si nous cherchons la particule, des fois nous la trouverons « à droite » (entre $x = L/2$ et $x = L$) et, des fois, « à gauche » (entre $x = 0$ et $x = L/2$).
- ✧ Jusque là, ça va.
- ✧ Mais il faut bien voir, aussi, que la particule ne se trouvera **jamais** en $x = L/2$!
- ✧ Et alors ? Et alors cela veut dire que la particule peut être à droite puis, plus tard, à gauche sans *jamais* passer par $L/2$ **ni** se téléporter !
- ✧ Bienvenue dans le monde quantique !
- ✧ L'apparent paradoxe, qui n'en est pas un, vient de la vision classique que nous avons de la particule. **Non** la particule n'est pas « des fois à droite, des fois à gauche ». Elle est **partout et tout le temps** mais nous la *détections* parfois à droite et parfois à gauche. Nuance.
- ✧ Ainsi, quand nous la détectons la particule « à droite », elle est *encore* potentiellement à gauche, *via* sa fonction d'onde qui n'est pas nulle. Et c'est pourquoi il n'est pas surprenant de la retrouver, après, à gauche, sans qu'elle ne se soit « téléportée ».

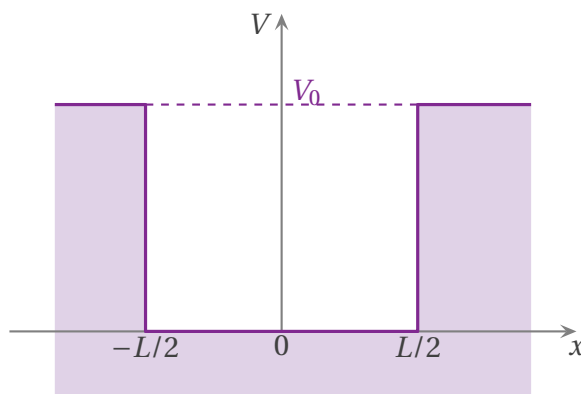
III.1.iv – quantification et forme du potentiel

- ✧ La résolution de l'équation de SCHRÖDINGER pour les états stationnaires montre que :
 - ➔ pour un puit infini carré, les états énergétiques sont proportionnels à n^2 (c'est le cas que nous venons de traiter) ;
 - ➔ pour un puit infini parabolique (modélisant les énergies potentielles élastiques), les états énergétiques sont proportionnels à n ;
 - ➔ pour un puit infini en $-\frac{1}{x}$ (modélisant l'attraction électrostatique comme pour l'atome d'hydrogène), les états énergétiques sont proportionnels à $-\frac{1}{n^2}$.

III.2 – Puit fini

III.2.i – modélisation

- ✧ Nous allons chercher la fonction d'onde d'une particule « piégée » dans un puit de potentiel carré de largeur L et de hauteur V_0 .
- ✧ Graphiquement, cela signifie que le potentiel $V(x)$ ressemble à la situation ci-dessous.



- ✧ Pour simplifier la situation et, surtout, pour faire apparaître la symétrie du problème, nous avons choisi de placer le centre du repère au centre du puit, contrairement à la situation précédente.
- ✧ Comme nous allons rechercher uniquement les solutions correspondant à des états *liés*, nous imposons *a priori*

$$0 < E < V_0 \quad (\text{III.25})$$

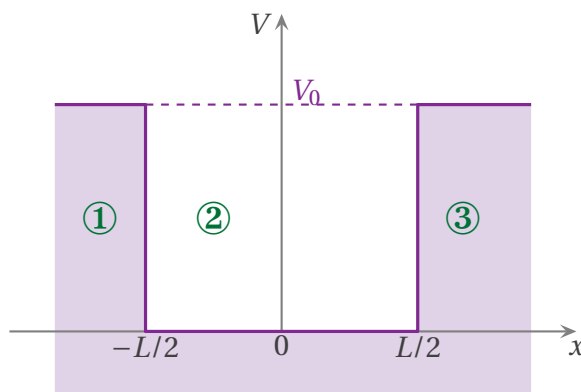
III.2.ii – solutions et quantification

★ forme des solutions

- ✧ Numérotons les trois zones « naturelles » de la manière suivante :

37

- ① pour $x < -L/2$;
- ② pour $-L/2 < x < L/2$;
- ③ pour $x > L/2$.



📍 domaine ①

- ✧ Dans le domaine ①, l'équation de SCHRÖDINGER pour les états stationnaires s'écrit

28

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi}{dx^2}(x) + V_0 \varphi(x) = E \varphi(x) \quad (\text{III.26})$$

- ✧ Ce qui se réécrit

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2}(x) - \alpha^2 \varphi(x) = 0 \quad \text{avec} \quad \alpha^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} \quad (\text{III.27})$$

- ✧ Les solutions sont donc de la forme

$$\varphi_1(x) = A_1 e^{\alpha x} + B_1 e^{-\alpha x} \quad (\text{III.28})$$

✧ À cela s'ajoute le fait que la fonction d'onde ne peut pas diverger¹⁴, ce qui implique

$$\varphi_1(x) = A_1 e^{\alpha x} \quad (\text{III.29})$$

📍 domaine ②

✧ Dans le domaine ②, l'équation de SCHRÖDINGER pour les états stationnaires s'écrit

28

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi}{dx^2}(x) = E \varphi(x) \quad (\text{III.30})$$

✧ Ce qui se réécrit

$$\frac{d^2 \varphi}{dx^2}(x) + k^2 \varphi(x) = 0 \quad \text{avec} \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (\text{III.31})$$

✧ Les solutions sont donc de la forme

$$\varphi_2(x) = A_2 \cos(kx) + B_2 \sin(kx) \quad (\text{III.32})$$

👉 *Remarque.* Ici, nous ne cherchons pas des solutions sous une forme complexe (comme en II.34), de manière à faire apparaître la parité des fonctions (ce qui nous sera bien utile par la suite).

📍 domaine ③

✧ C'est la même équation que dans le domaine ①

$$\frac{d^2 \varphi}{dx^2}(x) - \alpha^2 \varphi(x) = 0 \quad \text{avec} \quad \alpha^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} \quad (\text{III.33})$$

✧ Les solutions sont donc de la forme

$$\varphi_3(x) = A_3 e^{\alpha x} + B_3 e^{-\alpha x} \quad (\text{III.34})$$

✧ Et, en enlevant la solution divergente, il reste

$$\varphi_3(x) = B_3 e^{-\alpha x} \quad (\text{III.35})$$

📍 domaine ① et ③ : des ondes évanescentes

✧ Dans la zone ③ (il en serait de même dans la zone ①), la fonction d'onde complète s'écrit

$$\psi(x, t) = \varphi(x) \times e^{i\omega t} = B_3 e^{-\alpha x} e^{i\omega t} \quad (\text{III.36})$$

✧ Cette fonction est tout à fait analogue à l'onde évanescente que nous avons rencontrée dans le chapitre sur la propagation des ondes dans le plasma.

★ conditions aux limites, saison 2

38



Loi

En plus d'être continue et dérivable, la fonction d'onde est continuellement dérivable.

✧ Autrement dit, la dérivée de la fonction d'onde est une fonction continue.

14. Ou plutôt, comme $\varphi(x)$ est censée être complexe, c'est $|\psi(x, t)|^2 \stackrel{\text{ici}}{=} \varphi^2(x)$ qui ne doit pas diverger. Mais, ici, cela revient au même.

✧ Cela se voit avec l'équation de SCHRÖDINGER pour les états stationnaires

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi}{dx^2}(x) + V_0 \varphi(x) = E \varphi(x) \quad (\text{III.37})$$

✧ Pour que l'équation précédente ait un sens, il faut que le premier terme $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi}{dx^2}(x)$ en ait un, *i.e.* il faut que $\varphi(x)$ soit deux fois dérivable, ce qui implique que dérivée doit être continue.

✧ Pourtant, dans le cas du puit infini, nous pouvons remarquer que la fonction d'onde n'est pas dérivable au bord du puit! Cela est dû à la modélisation : le fait que le potentiel $V(x)$ soit infini implique, d'une certaine manière, que $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi}{dx^2}(x)$ le soit aussi, car E ne l'est pas.

★ aspect de symétrie

✧ N'oublions pas que même la mécanique quantique doit obéir aux règles de symétrie car ces dernières sont « supérieures » à toute théorie.

✧ Concrètement, cela signifie, ici, que la *physique* doit respecter la symétrie du problème.

✧ Or, ce qui est physique, c'est la mesure, c'est $|\psi(x,t)|^2$ et *pas* $\varphi(x)$.

✧ Comme, ici, nous avons tout fait pour faire de $V(x)$ une fonction paire, cela implique que $|\psi(x,t)|^2 = \varphi^2(x)$ est une fonction paire.

✧ Autrement dit, ici, $\varphi(x)$ est soit une fonction paire, soit une fonction impaire.

★ fonction d'onde paire

🕒 aspect technique

✧ Rappelons les formes des solutions

$$\varphi_1(x) = A_1 e^{\alpha x} \quad (\text{III.38})$$

$$\varphi_2(x) = A_2 \cos(kx) + B_2 \sin(kx) \quad (\text{III.39})$$

$$\varphi_3(x) = B_3 e^{-\alpha x} \quad (\text{III.40})$$

✧ Le fait de prendre une fonction paire implique immédiatement

$$A_1 = B_3 \quad \text{et} \quad B_2 = 0 \quad (\text{III.41})$$

✧ La continuité de la fonction d'onde en $x = \frac{L}{2}$ s'écrit

$$\varphi_2(L/2) = \varphi_3(L/2) \quad \rightsquigarrow \quad A_2 \cos \frac{kL}{2} = B_3 e^{-\alpha L/2} \quad (\text{III.42})$$

✧ De même, la continuité de la dérivée de la fonction d'onde en $x = \frac{L}{2}$ s'écrit

$$\frac{d\varphi_2}{dx}(L/2) = \frac{d\varphi_3}{dX}(L/2) \quad \rightsquigarrow \quad -k A_2 \sin \frac{kL}{2} = -\alpha B_3 e^{-\alpha L/2} \quad (\text{III.43})$$

✧ Étant donné la parité de la fonction, il est inutile de traduire les continuités en $x = -\frac{L}{2}$.

✧ Nous avons là deux équations à deux inconnues (A_2, B_3) dont une solution triviale, et inintéressante, est le couple nul (0,0).

✧ En supposant qu'il existe une fonction autre que le couple nul, nous pouvons diviser les deux équations, ce qui donne

$$k \tan \frac{kL}{2} = \alpha \quad (\text{III.44})$$

✧ Reste à traduire cette condition...

🕒 aspect graphique

✧ Comme $\alpha > 0$, nous pouvons d'ores et déjà dire que

$$n\pi < \frac{kL}{2} < n\pi + \frac{\pi}{2} \quad \rightsquigarrow \quad 2n\pi < kL < (2n+1)\pi \quad (\text{III.45})$$

✧ Pour résoudre cette équation, nous ne devons pas oublier que k et α sont liés par leurs définitions

$$\alpha^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} \quad \text{et} \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad \rightsquigarrow \quad \alpha^2 + k^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} \quad (\text{III.46})$$

✧ Ce qui donne, en injectant la condition trouvée en III.44

$$k^2 \tan^2 \frac{kL}{2} + k^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} \quad (\text{III.47})$$

✧ Et, en utilisant la relation trigonométrique $1 + \tan^2(\theta) = \frac{1}{\cos^2(\theta)}$, nous arrivons à

$$\frac{k^2}{\cos^2(kL/2)} = \frac{2mV_0}{\hbar^2} \quad (\text{III.48})$$

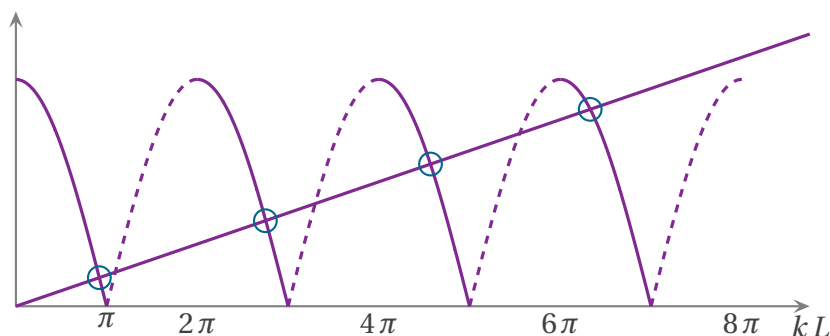
✧ Ou, encore,

$$|\cos(kL/2)| = k \times \sqrt{\frac{\hbar^2}{2mV_0}} \quad (\text{III.49})$$

✧ En introduisant la variable $X \stackrel{\text{not}}{=} kL$, cela revient à chercher l'intersection des fonctions

$$Y_1(X) = |\cos(X/2)| \quad \text{et} \quad Y_2(X) = \beta X \quad \text{avec} \quad \beta = \sqrt{\frac{L^2 \hbar^2}{2mV_0}} \quad (\text{III.50})$$

✧ En mettant en pointillés les zones interdites par la condition III.45, cela donne



★ fonction d'onde impaire

✧ C'est la même idée que pour la fonction d'onde paire.

🔗 aspect technique

✧ Reprenons les solutions « générales »

$$\varphi_1(x) = A_1 e^{\alpha x} \quad (\text{III.51})$$

$$\varphi_2(x) = A_2 \cos(kx) + B_2 \sin(kx) \quad (\text{III.52})$$

$$\varphi_3(x) = B_3 e^{-\alpha x} \quad (\text{III.53})$$

✧ Le fait de prendre une fonction impaire implique immédiatement

$$A_1 = -B_3 \quad \text{et} \quad A_2 = 0 \quad (\text{III.54})$$

✧ La continuité de la fonction d'onde en $x = \frac{L}{2}$ s'écrit

$$\varphi_2(L/2) = \varphi_3(L/2) \quad \rightsquigarrow \quad B_2 \sin \frac{kL}{2} = B_3 e^{-\alpha L/2} \quad (\text{III.55})$$

✧ De même, la continuité de la dérivée de la fonction d'onde en $x = \frac{L}{2}$ s'écrit

$$\frac{d\varphi_2}{dx}(L/2) = \frac{d\varphi_3}{dX}(L/2) \quad \rightsquigarrow \quad k B_2 \cos \frac{kL}{2} = -\alpha B_3 e^{-\alpha L/2} \quad (\text{III.56})$$

✧ Comme précédemment, pour qu'il existe une fonction autre que le couple nul, il faut que les deux équations soient proportionnelles, ce qui implique

$$k \cotan \frac{kL}{2} = -\alpha \quad (\text{III.57})$$

✧ Reste à (re)traduire cette condition...

🔗 aspect graphique

✧ Comme $\alpha > 0$, nous pouvons d'ores et déjà dire que

$$n\pi + \frac{\pi}{2} < \frac{kL}{2} < n\pi + \pi \quad \rightsquigarrow \quad (2n+1)\pi < kL < (2n+2)\pi \quad (\text{III.58})$$

✧ k et α sont toujours liés par leurs définitions

$$\alpha^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} \quad \text{et} \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad \rightsquigarrow \quad \alpha^2 + k^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} \quad (\text{III.59})$$

✧ Ce qui donne, en injectant la condition trouvée en III.57

$$k^2 \cotan^2 \frac{kL}{2} + k^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} \quad (\text{III.60})$$

✧ Et, en utilisant la relation trigonométrique $1 + \cotan^2(\theta) = \frac{1}{\sin^2(\theta)}$, nous arrivons à

$$\frac{k^2}{\sin^2(kL/2)} = \frac{2mV_0}{\hbar^2} \quad (\text{III.61})$$

✧ Ou, encore,

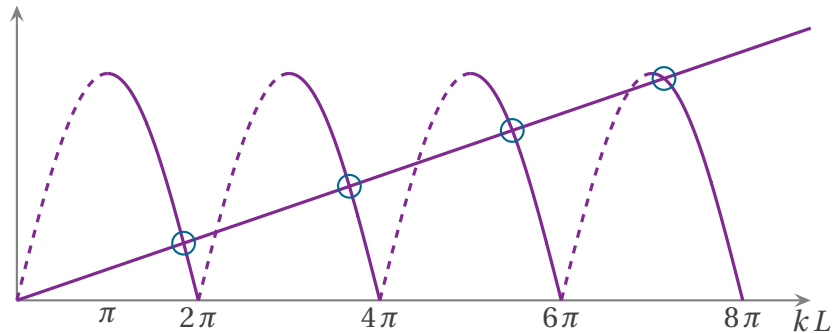
$$|\sin(kL/2)| = k \times \sqrt{\frac{\hbar^2}{2mV_0}} \quad (\text{III.62})$$

⇨ En introduisant la variable $X \stackrel{\text{not}}{=} kL$, cela revient à chercher l'intersection des fonctions

$$Y_3(X) = |\sin(X/2)| \quad \text{et} \quad Y_2(X) = \beta X \quad \text{avec} \quad \beta = \sqrt{\frac{L^2 \hbar^2}{2mV_0}} \quad (\text{III.63})$$

⇨ En mettant en pointillés les zones interdites par la condition III.58, cela donne

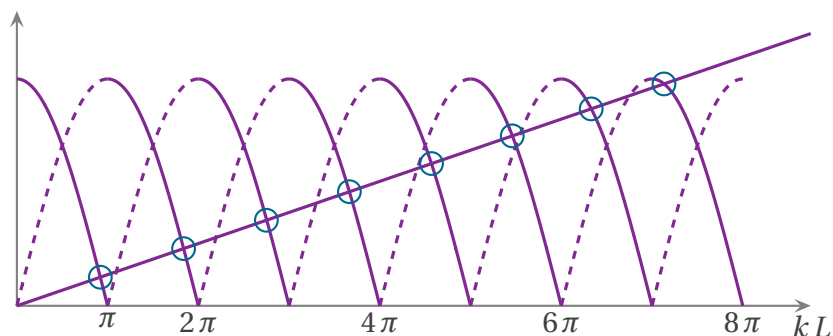
40



★ rassemblement

⇨ Superposons les deux graphiques donnant les états possibles de la particule.

40



III·2·iii – interprétation des résultats

★ quantification

⇨ Nous constatons alors que :

- l'énergie est quantifiée (puisque k l'est) ;
- le nombre d'états quantifiés est fini.

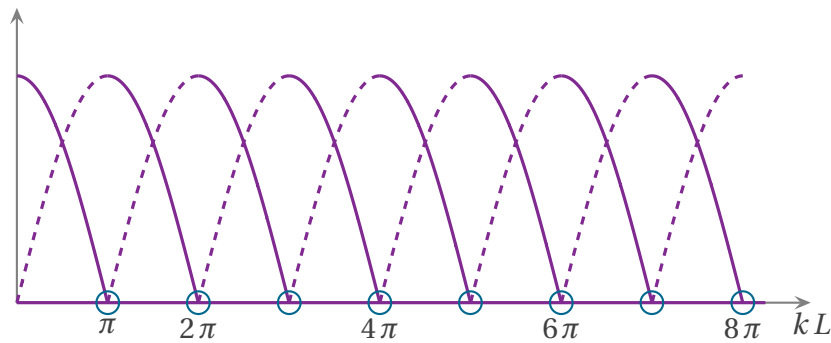
⇨ Encore une fois, nous avons une quantification de l'énergie d'une particule dans un état lié. Et ce n'est pas un hasard !

★ limite du puit infini

⇨ La limite du puit infini est obtenu pour $V_0 \rightarrow \infty$.

⇨ Graphiquement, cette limite s'obtient en traçant la droite avec une pente horizontale.

39



✧ Les modes correspondant sont alors tels que

$$kL = n\pi \quad (\text{III.64})$$

✧ Et nous retrouvons là la condition de quantification du puit infini (cf. III.11).

★ comparaison avec le puit infini

✧ Dans le cas du puit fini, nous pouvons constater, graphiquement, que le premier mode correspond à un kL plus petit, *i.e.* à un k plus petit.

✧ Rappelons la relation entre k et E

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad (\text{III.65})$$

✧ Le fait qu'ici k soit plus petit implique que l'énergie de confinement soit plus faible.

✧ Cela est dû au fait que la fonction d'onde, parce qu'elle « pénètre » dans les zones $x < -L/2$ et $x > L/2$, « augmente » la zone à laquelle elle a « accès ».

✧ Dès lors, tout se passe comme si elle était un peu moins confinée, donc l'incertitude Δx sur sa position augmente.

✧ Le principe d'incertitude nous dit, alors, que Δp diminue.

✧ Et comme E est relié à la quantité de mouvement, si cette dernière diminue, c'est que l'énergie diminue aussi.

✧ Tout cela est très cohérent. Encore.

III.3 – Effet tunnel

III.3.i – description

★ situation

✧ Imaginons une particule, ou plutôt un flux de particules, possédant l'énergie E et arrivant devant une barrière de potentiel de hauteur V_0 .

✧ De manière classique, une telle particule ne **peut pas** franchir la barrière.

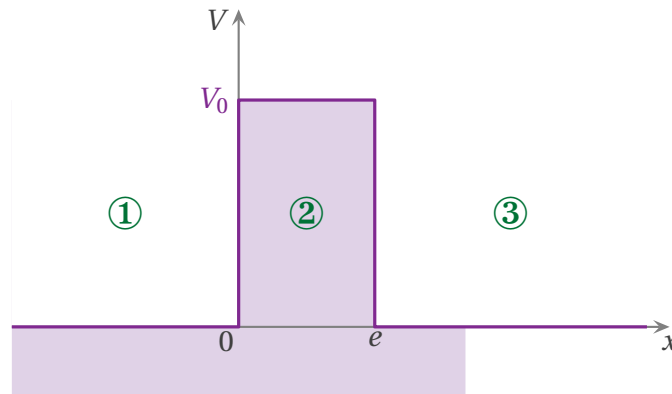
✧ En effet, la conservation de l'énergie impliquerait, au niveau de la barrière

$$E_c = E_m - E_p = E - V_0 < 0 \quad (\text{III.66})$$

✧ En revanche, en mécanique quantique, le franchissement est possible grâce à la présence d'une onde évanescente dans la barrière de potentiel.

★ **modèle et mise en équation**

✧ Représentons le potentiel.



✧ Nous sommes face à trois domaines :

- ① pour $x < 0$;
- ② pour $0 < x < e$;
- ③ pour $x > e$.

✧ Le but est de trouver la solution de l'équation de SCHRÖDINGER des états stationnaires.

🕒 **domaine ①**

✧ Dans le domaine ②, l'équation de SCHRÖDINGER pour les états stationnaires s'écrit

28

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi}{dx^2}(x) = E\varphi(x) \quad (\text{III.67})$$

✧ Ce qui se réécrit

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2}(x) + k^2\varphi(x) = 0 \quad \text{avec} \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (\text{III.68})$$

✧ Les solutions sont donc de la forme

$$\varphi_1(x) = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx} \quad (\text{III.69})$$

✧ A_1 représente le flux de particules incidentes et B_1 le flux de particules réfléchies.

🕒 **domaine ②**

✧ Dans le domaine ②, l'équation de SCHRÖDINGER pour les états stationnaires s'écrit

28

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi}{dx^2}(x) + V_0\varphi(x) = E\varphi(x) \quad (\text{III.70})$$

✧ Ce qui se réécrit

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2}(x) - \alpha^2\varphi(x) = 0 \quad \text{avec} \quad \alpha^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} \quad (\text{III.71})$$

✧ Les solutions sont donc de la forme

$$\varphi_1(x) = A_2 e^{\alpha x} + B_2 e^{-\alpha x} \quad (\text{III.72})$$

✧ Il s'agit là d'ondes évanescentes :

42

- d'amplitude croissante pour A_2 ;

→ d'amplitude décroissante pour B_2 .

✧ C'est bien parce que la densité de présence de la particule est non nulle « dans » la barrière, que celle-ci peut la traverser.

🕒 domaine ③

✧ C'est la même équation que dans le domaine ①

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2}(x) + k^2 \varphi(x) = 0 \quad \text{avec} \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (\text{III.73})$$

✧ Les solutions sont donc aussi de la forme

$$\varphi_3(x) = A_3 e^{ikx} + B_3 e^{-ikx} \quad (\text{III.74})$$

✧ A_3 représente le flux de particules allant vers les x croissant et B_3 le flux de particules allant vers les x décroissants.

✧ Comme le milieu est infini du côté $x > 0$, nous pouvons dire qu'il n'y a *pas* de particules se dirigeant vers les x décroissants, ce qui impose $B_3 = 0$ et, donc,

$$\varphi_3(x) = A_3 e^{ikx} \quad (\text{III.75})$$

★ résultat et interprétation

🕒 coefficient de transmission

✧ Dans la partie ①, la fonction d'onde fait apparaître le terme

$$\varphi_i = A_1 e^{ikx} \quad (\text{III.76})$$

✧ Ce terme correspond bien à une onde *incidente*

$$\phi_i = A_1 e^{i(kx - \omega t)} \quad (\text{III.77})$$

✧ À cette onde, nous pouvons lui associer le courant de probabilité

$$\vec{J}_i = \frac{|\psi_i(x,t)|^2 \hbar k}{m} \vec{u}_x \quad (\text{III.78})$$

✧ Pour cette onde incidente, cela donne

$$\vec{J}_i = \frac{|A_1|^2 \hbar k}{m} \vec{u}_x = \vec{C}_1^{\text{te}} \quad (\text{III.79})$$

✧ De même, pour la partie ③, le courant de probabilité associé à l'onde qui a traversé s'écrit

$$\vec{J}_t = \frac{|A_3|^2 \hbar k}{m} \vec{u}_x = \vec{C}_3^{\text{te}} \quad (\text{III.80})$$

✧ Nous pouvons donc dire que la « chance » qu'a une particule de passer la barrière de potentiel s'écrit

$$T = \frac{J_t}{J_i} = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2} \quad (\text{III.81})$$

✧ Il nous faut donc trouver A_3 en fonction de A_1

🔗 traduction des conditions aux limites

✧ La continuité de la fonction d'onde en $x = 0$ donne immédiatement

$$A_1 + B_1 = A_2 + B_2 \quad (\text{III.82})$$

✧ La continuité de $\frac{d\varphi}{dx}$ s'écrit, en $x = 0$,

$$ik(A_1 - B_1) = \alpha(A_2 - B_2) \quad (\text{III.83})$$

✧ Écrivons les continuités en $x = e$.

✧ D'abord pour φ

$$A_2 e^{\alpha e} + B_2 e^{-\alpha e} = A_3 e^{ike} \quad (\text{III.84})$$

✧ Et pour la dérivée

$$\alpha A_2 e^{\alpha e} - \alpha B_2 e^{-\alpha e} = ik A_3 e^{ike} \quad (\text{III.85})$$

✧ Nous avons là 4 équations à 4 inconnues B_1 , A_2 , B_2 et A_3 donc... « yapuka ».

🔗 résultat

✧ Nous admettrons que dans le cas où $\alpha e \gg 1$, alors le coefficient de transmission recherché est tel que

$$T \propto e^{-2e/\delta} \quad \text{avec} \quad \delta = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}} \quad (\text{III.86})$$

✧ La première chose que nous pouvons dire c'est que $T \neq 0$, autrement dit la particule **peut passer** une barrière énergétique alors qu'elle n'a pas assez d'énergie pour le faire !

✧ Cette possibilité est très clairement liée à l'existence d'une onde évanescente dans la barrière de potentiel.

✧ Nous pouvons constater, aussi, que la probabilité de passage décroît très rapidement avec l'épaisseur e de la barrière.

✧ Regardons numériquement, ce que cela donne

objet	masse	V_0	δ pour $E = V_0/2$
électron	$9,1 \times 10^{-31}$ kg	1 eV	$2,8 \times 10^{-10}$ m
proton	$1,67 \times 10^{-27}$ kg	1 MeV	$4,5 \times 10^{-15}$ m
bâton de craie	10 g	1 mJ	$2,4 \times 10^{-32}$ m

✧ Nous pouvons constater que δ décroît très vite avec la distance.

✧ Ainsi :

- ➔ pour des électrons avec des énergies typiques d'électrons, nous voyons qu'il est possible de réaliser de l'effet tunnel à des échelles atomiques ;
- ➔ pour des protons avec des énergies typiques de protons dans un noyau, nous voyons qu'il est possible de réaliser de l'effet tunnel à des échelles nucléaires ;
- ➔ pour un objet macroscopique, sans surprise, nous constatons que l'effet tunnel est rigoureusement impossible.

★ calculs complets

✧ Ce tout petit sous paragraphe est bien sûr totalement hors-programme. Ceci étant, les compétences calculatoires pour arriver à faire ce qui suit n'étant pas très importantes, cela peut valoir le coup de regarder ce qui se passe « en vrai ».

✧ L'idée est de faire de ce système 4×4 , deux systèmes 2×2 :

- avec les conditions aux limites en $x = e$, nous allons chercher A_2 et B_2 en fonction de A_3 ;
- avec les conditions aux limites en $x = 0$, nous allons exprimer A_1 en fonction de A_2 et B_2 ;
- nous allons remplacer le tout et simplifier.

🕒 première étape : A_2 et B_2 en fonction de A_3

✧ Commençons par réécrire la condition aux limites sur la continuité de la dérivée de φ en e (III.85)

$$A_2 e^{\alpha e} - B_2 e^{-\alpha e} = -\frac{ik}{\alpha} A_3 e^{ike} \quad (\text{III.87})$$

✧ Rappelons la continuité en $x = e$ (III.84)

$$A_2 e^{\alpha e} + B_2 e^{-\alpha e} = A_3 e^{ike} \quad (\text{III.88})$$

✧ En faisant la somme et la différence de ces deux relations, nous trouvons

$$2 A_2 e^{\alpha e} = \left(1 + \frac{ik}{\alpha}\right) A_3 e^{ike} \quad (\text{III.89})$$

$$2 B_2 e^{\alpha e} = \left(1 - \frac{ik}{\alpha}\right) A_3 e^{ike} \quad (\text{III.90})$$

🕒 deuxième étape : A_1 en fonction de A_2 et B_2

✧ Réécrivons la condition aux limites sur la continuité de la dérivée de φ en 0 (III.83)

$$A_1 - B_1 = \frac{i\alpha}{k} (-A_2 + B_2) \quad (\text{III.91})$$

✧ Rappelons la continuité en $x = 0$ (III.82)

$$A_1 + B_1 = A_2 + B_2 \quad (\text{III.92})$$

✧ En faisant la somme de ces deux relations, nous pouvons éliminer B_1 , ce qui donne

$$2 A_1 = \left(1 - \frac{ik}{\alpha}\right) A_2 + \left(1 + \frac{ik}{\alpha}\right) B_2 \quad (\text{III.93})$$

🕒 troisième étape : rassemblement et simplification

✧ Réinjection III.89 et III.90 dans l'équation précédente

$$4 A_1 = \left(1 + \frac{i\alpha}{k}\right) \left(1 - \frac{ik}{\alpha}\right) e^{\alpha e} e^{ike} A_3 + \left(1 - \frac{i\alpha}{k}\right) \left(1 + \frac{ik}{\alpha}\right) e^{-\alpha e} e^{ike} A_3 \quad (\text{III.94})$$

✧ En nous limitant au cas où $\alpha e \gg 1$, le second terme est négligeable, ce qui permet de simplifier en

$$4 A_1 = \left(1 + \frac{i\alpha}{k}\right) \left(1 - \frac{ik}{\alpha}\right) e^{\alpha e} e^{ike} A_3 \quad (\text{III.95})$$

✧ Soit

$$\frac{A_3}{A_1} = \frac{4e^{-ike}}{2 + i\left(\frac{\alpha}{k} - \frac{k}{\alpha}\right)} \times e^{-\alpha e} \quad (\text{III.96})$$

✧ Ainsi

$$T = \left| \frac{A_3}{A_2} \right|^2 = \frac{16}{4 + \left(\frac{\alpha}{k} - \frac{k}{\alpha}\right)^2} \times e^{-2\alpha e} \quad (\text{III.97})$$

✧ Ce qui donne

$$T = \frac{16}{\left(\frac{\alpha}{k} + \frac{k}{\alpha}\right)^2} \times e^{-2\alpha e} = \frac{16k^2\alpha^2}{(\alpha^2 + k^2)^2} \times e^{-2\alpha e} \quad (\text{III.98})$$

✧ Et, en remplaçant α^2 et k^2 par leurs expressions (cf. III.68 et III.71)

$$T = \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} \times e^{-2e/\delta} \quad \text{avec} \quad \delta = \frac{1}{\alpha} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}} \quad (\text{III.99})$$

☞ *Remarque.* Attention de ne pas conclure trop vite que lorsque $E \rightarrow V_0$ alors $T \rightarrow 0$. En effet, pour $E \rightarrow V_0$, nous n'avons plus forcément $\alpha e \gg 1$ car $\alpha \rightarrow 0$. Il faut alors reprendre III.94.

III.3.ii – applications

✧ Comme nous pouvons le voir dans l'analyse documentaire, l'effet tunnel permet d'expliquer (entre autres) :

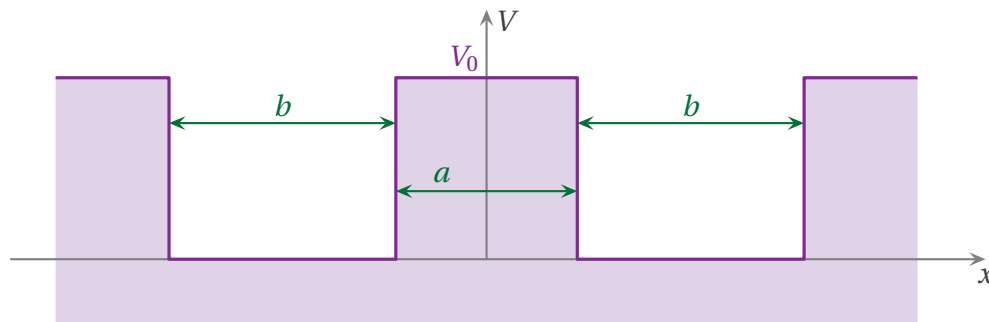
- la radioactivité α ;
- le microscope à effet tunnel.

III.4 – Double puits symétrique

III.4.i – description

★ modèle

✧ Imaginons un potentiel dit de « double puits symétrique » comme celui-ci.



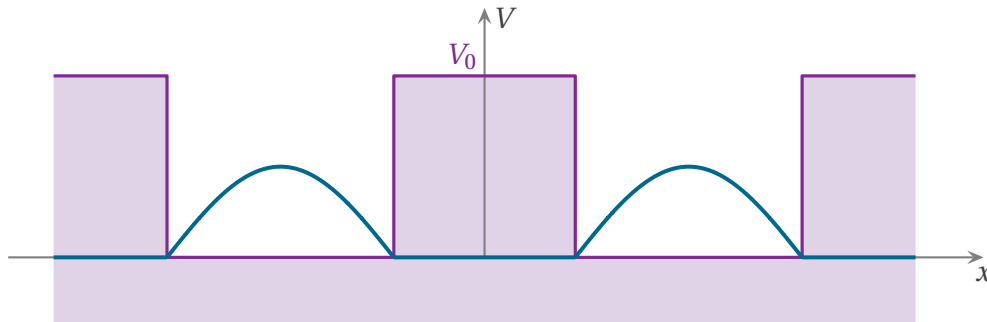
✧ Le but de ce paragraphe est de décrire, qualitativement, la fonction d'onde d'une particule plongée dans un tel potentiel et les conséquences que cela peut avoir.

✧ Pour cela, nous allons reprendre les résultats précédents.

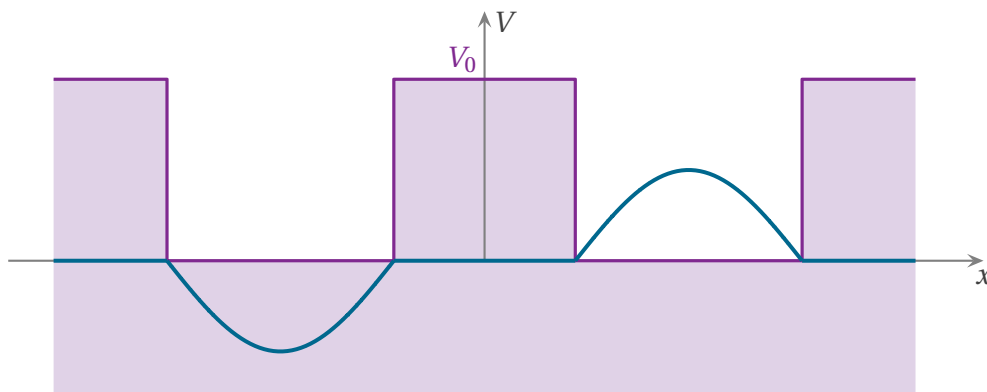
★ **discussion qualitative**

🕒 **allure des solutions**

- ✧ Étant donné le caractère paire du potentiel $V(x)$, nous devons chercher une solution paire ou impaire de la fonction d'onde.
- ✧ En nous limitant au mode de plus basse énergie, nous savons que, grosso modo, il y a une seule « arche » par zone de confinement (cf. le puit infini p. 37).
- ✧ Cela donne, pour la fonction d'onde paire

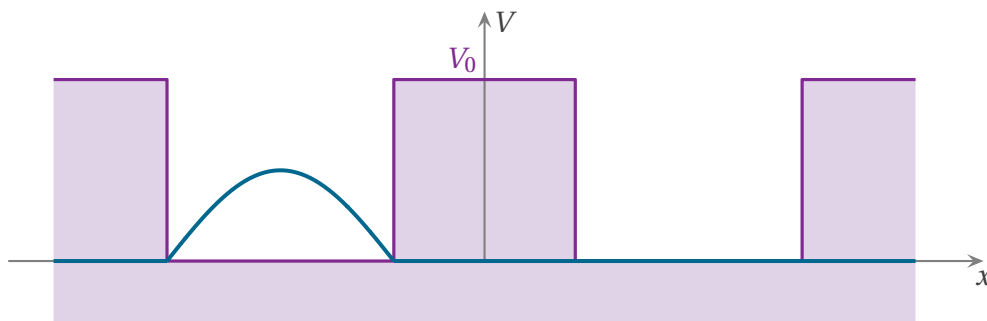


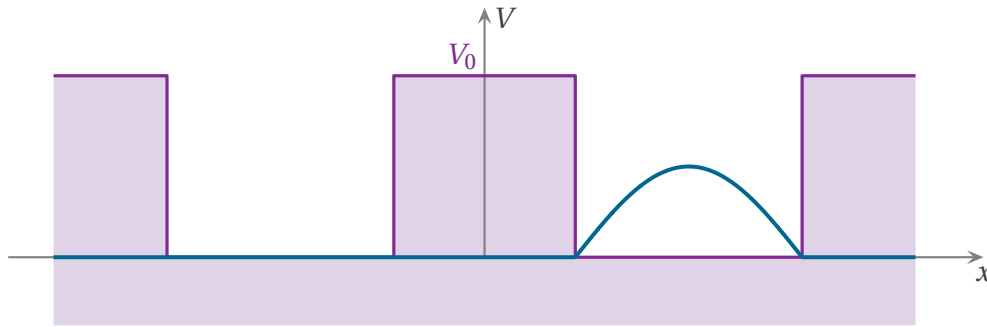
- ✧ Et pour la fonction d'onde impaire



🕒 **lien avec l'énergie**

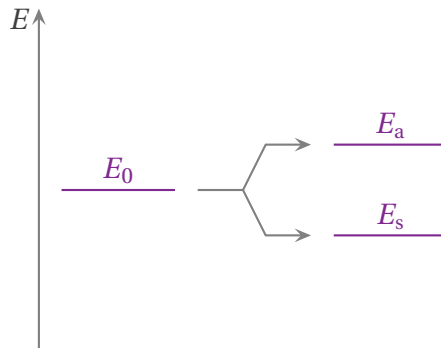
- ✧ Notons E_0 l'énergie à une seule « arche », *i.e.* l'énergie qu'aurait la particule si elle était confinée uniquement à droite ou uniquement à gauche.





- ✧ Le calcul complet montre que :
 - l'énergie associée à la fonction d'onde symétrique est plus basse que E_0 ;
 - l'énergie associée à la fonction d'onde impaire est plus élevée que E_0 .
- ✧ Remarquons, au passage, que, comme pour le puit symétrique, c'est la fonction d'onde *paire* qui possède l'énergie la plus faible.
- ✧ Nous voyons apparaître là une *dégénérescence du niveau énergétique*.

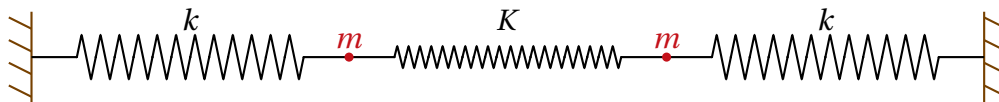
48



- ✧ Le fait que l'énergie associée à la fonction d'onde paire montre que, dans ce cas, la particule est *moins confinée* (ou plus étendue) que pour la fonction d'onde impaire.
- ✧ Bien sûr, cela ne se voit pas sur les schémas précédents qui ne montrent que des arches « pures » alors que le calcul complet fait apparaître des ondes évanescentes dans les zones de potentiel V_0 .

du déjà vu

- ✧ Dans le chapitre 3 de mécanique, lorsque nous avons étudié les oscillateurs couplés, nous avons aussi rencontré un phénomène de dégénérescence des modes.
- ✧ Rappelons le dispositif



- ✧ Nous avons trouvé, alors, que pour le mode symétrique (celui pour lequel le ressort du milieu gardait une longueur constante), la pulsation s'écrivait

$$\omega_s = \sqrt{\frac{k}{m}} \tag{III.100}$$

- ✧ Pour le mode antisymétrique, la pulsation était plus élevée et s'écrivait

$$\omega_a = \sqrt{\frac{k + 2K}{m}} \tag{III.101}$$

- ✧ Avec une pulsation plus élevée, pour une même amplitude, la vitesse, et donc l'énergie, est plus grande.
- ✧ Là aussi nous avons donc :
 - deux situations, symétriques et antisymétrique ;
 - deux situations correspondant à des énergies différentes ;
 - une situation symétrique d'énergie plus basse que la situation antisymétrique.

★ plan de résolution complète

- ✧ Stratégiquement, la résolution complète ne pose pas de problème, c'est la même que celle que nous avons employée pour le puit de profondeur finie.
- ✧ La seule difficulté tient au fait qu'ici, il y a « un peu » plus de calcul.
- ✧ Ainsi, pour résoudre, nous pouvons commencer par écrire les solutions générales dans les 5 zones de potentiels, ce qui amène deux constantes d'intégration sur chaque zone, soit 10 inconnues en tout.
- ✧ La non divergence de la fonction d'onde enlève un terme dans chacune des zones extrêmes. Il reste 8 inconnues.
- ✧ En cherchant, par principe, une fonction d'onde symétrique (paire ou impaire) nous diminuons d'un facteur 2 les inconnues. Il en reste 4. Mais il y a deux cas à traiter.
- ✧ Pour trouver les 4 inconnues, nous pouvons écrire les conditions aux limites de continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée sur les deux bords d'un puit (en $x = a/2$ et $x = a/2 + b$).
- ✧ Nous avons donc 4 inconnues et 4 équations mais qui forment un système dont le quadruplet nul est solution. La condition pour que ce système admette une infinité de solution nous conduit à la condition de quantification.
- ✧ Pour trouver *la* solution (ce que nous n'avons pas fait pour le puit de profondeur finie), il ne reste plus qu'à utiliser la condition de normalisation.
- ✧ Au fond, c'est simple !

III.4.ii – applications

★ liaison chimique

- ✧ Ce double puits peut représenter l'énergie que possède un électron près de deux noyaux.
- ✧ Chaque noyau, à cause de l'attraction électrostatique, est un puit énergétique.
- ✧ L'électron, en « rentrant » dans ce puit va baisser en énergie (cf. ci-dessus avec l'état symétrique dont l'énergie $E_s < E_0$).
- ✧ Toutefois, comme les deux noyaux sont chargés positivement, ils se repoussent.
- ✧ Finalement, la liaison chimique est un compromis entre :
 - deux noyaux dont l'énergie augmente d'autant plus qu'ils sont proches ;
 - un électron qui cherche à se délocaliser de manière à diminuer son énergie.

★ molécule d'amoniac

🌀 modèle

- ✧ La molécule d'amoniac NH_3 peut aussi être modélisée par un potentiel à double puits suivant que les atomes d'hydrogène sont à gauche ou à droite.



🕒 superposition de mode, oscillations

✧ Si l'énergie disponible est suffisante, alors la fonction d'onde représentant la molécule d'amoniac est la *superposition* des fonctions d'onde des modes symétrique et antisymétrique.

$$\psi(x,t) = \psi_s(x,t) + \psi_a(x,t) \quad (\text{III.102})$$

✧ Sauf que, cette fois, nous considérons les fonctions d'onde complètes, avec la partie temporelle.

✧ Or, puisque les fonctions d'onde ne sont pas associées aux mêmes énergies, elles ne vont pas être associées à la même pulsation.

✧ En mettant de côté les préfacteurs de normalisation, cela donne

$$\psi(x,t) = \varphi_s(x) \times e^{-i\omega_s t} + \varphi_a(x) \times e^{-i\omega_a t} \quad (\text{III.103})$$

✧ Dans ces conditions, comme pour les oscillateurs couplés, nous allons observer des *battements*.

✧ Autrement dit, à certains instant, la fonction d'onde sera, à certain instant nulle « à gauche », ce qui signifie qu'il sera *certain* que les atomes d'hydrogènes seront « à droite ».

✧ De même, à d'autres moments, la fonction d'onde sera nulle à droite, ce qui implique que les atomes d'hydrogène seront, de manière *certaine* à gauche.

✧ Finalement, il est *certain* que les atomes d'hydrogènes seront, des fois à gauche, des fois à droite : ils vont *osciller*.

✧ Ces oscillations, issues de battement, se feront à la pulsation $\omega_a - \omega_s$ soit, en terme énergétique

$$\nu_{\text{oscillations}} = \frac{E_a - E_s}{h} \quad (\text{III.104})$$

✧ Ce qui donne, avec $E_a - E_s = 10^{-4}$ eV

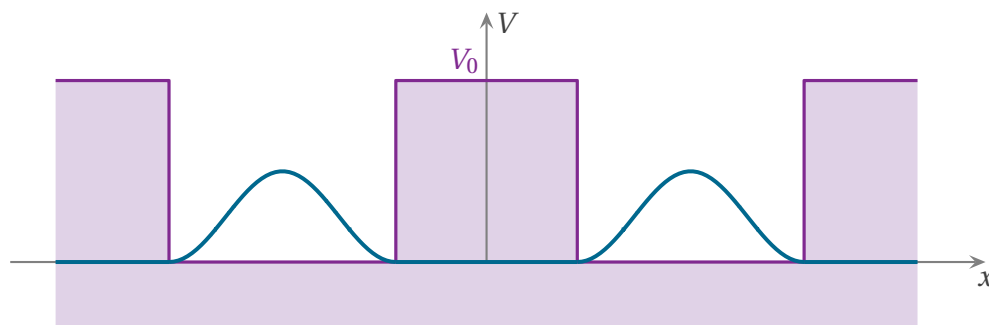
$$\nu_{\text{oscillations}} = 24 \text{ GHz} \quad (\text{III.105})$$

✧ La détection d'un tel rayonnement en astronomie est la signature de la présence de molécules d'amoniac. 49

🕒 ne pas confondre avec changer de côté sans osciller

✧ Si l'énergie disponible est très basse, alors la molécule d'amoniac est uniquement dans son état de plus basse énergie, *i.e.* dans l'état correspondant à la fonction d'onde paire.

✧ Or, cette fonction d'onde est associée à la densité de présence ci-dessous



✧ Cela signifie qu'il est possible de trouver les atomes d'hydrogène, des fois à droite, des fois à gauche. Et sans que cela soit associé à des oscillations!

✧ Étrange? Paradoxal? Non. Quantique.

✧ En effet, rien ne dit que, sur trois mesures consécutives, nous ne trouvons pas les atomes à chaque fois du même côté. C'est comme jouer à pile ou face plusieurs fois consécutives : nous n'obtenons jamais une suite parfaitement régulière « pile – face – pile – face – pile... ».

- ✧ De plus, rappelons que, du point de vue de la mécanique quantique, dans l'état stationnaire représenté, les atomes d'hydrogène sont **à la fois** à droite et à gauche. Toujours, quel que soit l'instant.
- ✧ Ce n'est que lorsque nous cherchons à les détecter, lorsque nous procédons à une mesure, que nous les voyons, aléatoirement, à droite ou à gauche.
- ✧ Une pièce, tant que nous ne l'avons pas lancée, n'est « ni pile, ni face », elle est encore les deux en même temps.

Compétences du chapitre

Les compétences à vocation essentiellement expérimentale sont indiquées en italique.

Première année

SIGNAUX PHYSIQUES

★ 2. Propagation d'un signal

✧ Diffraction à l'infini.

- 1 Connaître les conséquences de la diffraction sur la focalisation et sur la propagation d'un faisceau laser. [9]

★ 4. Introduction au monde quantique

✧ Dualité onde-particule pour la lumière et la matière. Relations de PLANCK – EINSTEIN et de LOUIS DE BROGLIE.

- 2 Évaluer des ordres de grandeurs typiques intervenant dans des phénomènes quantiques.

- 3 Approche documentaire : décrire un exemple d'expérience mettant en évidence la nécessité de la notion de photon. [18]

- 4 Approche documentaire : décrire un exemple d'expérience illustrant la notion d'ondes de matière. [18]

✧ Interprétation probabiliste associée à la fonction d'onde : approche qualitative.

- 5 Interpréter une expérience d'interférences (matière ou lumière) « particule par particule » en termes probabilistes.

✧ Inégalité de HEISENBERG spatiale.

- 6 À l'aide d'une analogie avec la diffraction des ondes lumineuses, établir l'inégalité en ordre de grandeur : $\Delta p \times \Delta x \geq \hbar$.

✧ Énergie minimale de l'oscillateur harmonique quantique.

- 7 Établir le lien entre confinement spatial et énergie minimale (induit par l'inégalité de HEISENBERG spatiale). [36]

✧ Quantification de l'énergie d'une particule libre confinée 1D.

- 8 Obtenir les niveaux d'énergie par analogie avec les modes propres d'une corde vibrante.

- 9 Établir le lien qualitatif entre confinement spatial et quantification.

Deuxième année

Physique des ondes – Introduction à la physique du laser

★ 4.1. Milieu amplificateur de lumière

✧ Absorption, émission stimulée, émission spontanée.

- 10 Distinguer les propriétés d'un photon émis par émission spontanée ou stimulée. [14]

✧ Coefficients d'EINSTEIN.

- 11 Associer l'émission spontanée à la durée de vie d'un niveau excité. Utiliser les coefficients d'EINSTEIN dans le seul cas d'un système à deux niveaux non dégénérés. [14,15]

✧ Amplificateur d'ondes lumineuses.

- 12 Justifier la nécessité d'une inversion de population. [15]

★ 4.2. Obtention d'un oscillateur

✧ Milieu amplificateur à l'intérieur d'un résonateur optique : le laser.

13 Exprimer la condition d'oscillation. [12]

14 Associer la puissance émise à la limitation du gain par une non-linéarité. [16]

★ 4.3. Propriétés optiques d'un faisceau spatialement limité

✧ Approche descriptive : rôle de la diffraction dans l'ouverture angulaire du faisceau à grande distance.

15 Relier l'ouverture angulaire λ/a et le rayon minimal a . [9]

✧ Approche descriptive : description simplifiée d'un faisceau de profil gaussien : longueur de Rayleigh L_R .

16 Utiliser l'expression fournie du profil radial d'intensité en fonction de la distance axiale. [6]

17 Construire l'allure d'un faisceau de profil gaussien à partir de l'enveloppe d'un faisceau cylindrique de rayon a et d'un faisceau conique centré sur l'orifice de sortie du laser, et de demi-ouverture angulaire λ/a . [7,7]

✧ Approche descriptive : utilisation d'une lentille pour transformer un faisceau cylindrique en faisceau conique et réciproquement

18 Exploiter la convergence angulaire du faisceau issue de l'optique géométrique, la loi du retour inverse, et le lien entre l'ouverture angulaire λ/a et le rayon minimal a pour obtenir la dimension et la position de la section minimale. [9]

19 Montrer que le rayon minimal est de l'ordre de λ . [10]

20 Utiliser un élargisseur de faisceau pour réduire l'ouverture angulaire. [11]

Physique des ondes – Approche ondulatoire de la mécanique quantique

★ 5.1. Amplitude de probabilité

✧ Fonction d'onde $\psi(x,t)$ associée à une particule dans un problème unidimensionnel. Densité linéique de probabilité.

21 Normaliser une fonction d'onde. [23]

22 Faire le lien qualitatif avec la notion d'orbitale en chimie. [22]

✧ Principe de superposition. Interférences.

23 Relier la superposition de fonctions d'ondes à la description d'une expérience d'interférences entre particules. [23]

★ 5.2. Équation de SCHRÖDINGER pour une particule libre

✧ Équation de SCHRÖDINGER.

24 Utiliser l'équation de SCHRÖDINGER fournie. [25]

✧ États stationnaires.

25 Identifier les états stationnaires aux états d'énergie fixée. [26]

26 Établir et utiliser la relation : $\psi(x,t) = \phi(x) \times e^{-iEt/\hbar}$ et l'associer à la relation de PLANCK – EINSTEIN. [28]

27 Distinguer l'onde associée à un état stationnaire en mécanique quantique d'une onde stationnaire au sens usuel de la physique des ondes. [24]

28 Utiliser l'équation de SCHRÖDINGER pour la partie spatiale $\phi(x)$. [25,27,34,34,40,41,47,47]

29 En exploitant l'expression classique de l'énergie de la particule libre, associer la relation de dispersion obtenue et la relation de DE BROGLIE. [28]

✧ Paquet d'ondes associé à une particule libre. Relation $\Delta k_x \times x \geq 1/2$

30 Identifier vitesse de groupe et vitesse de la particule. [30]

31 Faire le lien avec l'inégalité de HEISENBERG spatiale. [29]

✧ Courant de probabilité associé à une particule libre.

32 Utiliser l'expression admise $J = |\psi|^2 \hbar k / m$ et l'interpréter comme produit densité \times vitesse. [32]

★ 5.3. Équation de SCHRÖDINGER dans un potentiel $V(x)$ uniforme par morceaux

✧ Quantification de l'énergie dans un puits de potentiel rectangulaire de profondeur infinie.

33 Établir les expressions des énergies des états stationnaires. [36]

34 Faire l'analogie avec la recherche des pulsations propres d'une corde vibrante fixée en ses deux extrémités. [35]

35 Retrouver qualitativement l'énergie minimale à partir de l'inégalité de HEISENBERG spatiale. [36]

✧ Énergie de confinement quantique.

36 Associer le confinement d'une particule quantique à une augmentation de l'énergie cinétique. [36]

✧ Quantification de l'énergie des états liés dans un puits de profondeur finie. Élargissement effectif du puits par les ondes évanescentes.

37 Mettre en place les éléments du modèle : forme des fonctions d'onde dans les différents domaines. [39,40]

38 Utiliser les conditions aux limites admises : continuité de $\phi(x)$ et $\frac{d\phi}{dx}(x)$. [41,42,42,44,44]

39 Associer la quantification de l'énergie au caractère lié de la particule. [45]

40 Mener une discussion graphique. [43,45,45]

41 Interpréter qualitativement, à partir de l'inégalité de HEISENBERG spatiale, l'abaissement des niveaux d'énergie par rapport au puits de profondeur infinie. [46]

★ 5.4. Effet tunnel

✧ Notions sur l'effet tunnel.

42 Associer l'existence d'une probabilité de traverser une barrière de potentiel et l'existence de deux ondes évanescentes dans la zone classiquement interdite. [47]

✧ Coefficient de transmission associé à une particule libre incidente sur une barrière de potentiel.

43 Exprimer le coefficient de transmission comme un rapport de courants de probabilités. [48]

✧ Approche documentaire de la radioactivité alpha :

44 utiliser une expression fournie du coefficient de transmission pour analyser des documents scientifiques ;

45 expliquer le rôle de l'effet tunnel dans la radioactivité alpha.

✧ Approche documentaire de la microscopie à effet tunnel :

46 utiliser une expression fournie du coefficient de transmission pour analyser des documents scientifiques ;

47 expliquer la sensibilité à la distance de cette méthode d'observation des surfaces.

- ✧ Approche descriptive : Double puits symétrique.
- ✧ Étude des deux premiers états stationnaires : symétrique et antisymétrique.
 - 48 Exploiter les diagrammes d'énergie et faire le lien avec la chimie. [53]
- ✧ Évolution temporelle d'une superposition de ces deux états.
 - 49 Sur l'exemple de la molécule d'ammoniac, utiliser le principe de superposition pour relier la fréquence des oscillations d'une particule initialement confinée dans un des puits à la différence des énergies. [55]