

## Cours de Mécanique Quantique

### L2PCSM

#### Introduction générale

Jusqu'à la fin du 19<sup>ème</sup> siècle, les connaissances physiques qui avaient atteint un degré de cohérence et d'unité particulièrement satisfaisant dans l'explication des phénomènes nous permettaient de distinguer deux catégories d'objets physiques, la matière et le rayonnement.

- la matière : elle est faite de particules assimilables à des points matériels doués d'une masse auxquels s'appliquent les lois de la Mécanique de Newton : l'état dynamique de chaque particule est exactement défini à chaque instant par sa position et sa vitesse soit six variables dynamiques.
- Le rayonnement est constitué par les ondes électromagnétiques ou vibrations de champ électrique et de champ magnétique qui se propagent conformément aux lois de l'électromagnétisme de Maxwell (1855). Tous les phénomènes connus à l'époque (diffraction, interférences) sont parfaitement expliqués par la théorie ondulatoire.

Cependant plusieurs indices inquiétants n'avaient pas échappé à quelques esprits pénétrants :

- En 1905 Einstein propose une interprétation radicalement différente de l'expérience négative de Michelson et Morley : c'est la mécanique relativiste où les événements se déroulent suivant un temps propre et non pas universel. ( le temps n'est plus absolu, il dépend du référentiel choisi).
- En 1900 Planck analyse le paradoxe des résultats de l'application de la thermodynamique classique au rayonnement émis par les objets chauds et propose de le résoudre en admettant que le transport d'énergie lumineuse n'est pas continu comme le cas de propagation des ondes mais s'opère en incréments finis ou quanta (indivisibles) d'énergie  $E = h\nu$  ;  $\nu$  = fréquence de vibration  $h$  = constante de Planck.

Cette hypothèse de quanta de Planck a permis à Einstein de donner une interprétation de l'effet photo électrique, fournissant ainsi une preuve directe du caractère corpusculaire (quantique) du rayonnement.

Le double caractère ondulatoire (interférences, diffraction) et corpusculaire (effet photo électrique) est donc établi.

Par analogie au rayonnement, Louis de Broglie suggère en 1923 que les particules de la matière et singulièrement les électrons pourraient présenter un aspect ondulatoire et propose une « mécanique ondulatoire » basée sur la relation  $\lambda = \frac{h}{p}$  ; entre la quantité mouvement  $p$  de la particule et la longueur d'onde  $\lambda$  qui lui est associée (en effet une onde est complètement déterminée que lorsqu'on connaît sa longueur d'onde  $\lambda$ , sa fréquence  $\nu$  et sa vitesse de phase  $v\varphi$  ).

Schrödinger : Born, Heisenberg et Dirac donnent une forme finale à cette nouvelle mécanique quantique de la matière qui associe les aspects corpusculaire et ondulatoire et expliquent la quantification de l'énergie des systèmes à l'échelle des atomes.

C'est ce cheminement que nous allons essayer de reproduire pour arriver à la théorie de la Mécanique Quantique.

*La Mécanique Quantique est une théorie s'appliquant à la description de la matière au niveau atomiques et subatomique (nucléaire) et aussi l'univers (astrophysique). La quantification : discontinuité d'une grandeur. Exemple : Energie : elle prend des valeurs discrètes multiples d'une valeur minimale : quantum.*

L'énergie d'un système mécanique à l'échelle atomique (atomes, molécules, noyaux) ne prend que des valeurs discrètes : niveaux d'énergie.

Il en est de même que les autres grandeurs telles que rayons d'orbite, moments cinétiques .....

## PARTIE I : Fondements de base de la Mécanique Quantique

### Chapitre I : Rappels.

Jusqu'à la fin du 19<sup>ème</sup> siècle la physique classique expliquait la plupart des phénomènes connus à l'aide de deux théories qui sont la mécanique de Newton et l'électromagnétisme.

#### A) La mécanique Newtonienne (Cinématique - dynamique)

##### A-1 Les lois Newton

Elles reposent principalement sur quatre lois fondamentales

1<sup>ère</sup> loi : un objet livré à lui-même, non perturbé persiste dans son état de repos, s'il était initialement au repos, ou bien continue à se mouvoir à vitesse constante sur une ligne droite s'il était initialement en mouvement (principe de l'inertie) ou encore :

Toute particule isolée, sur laquelle aucune force n'agit, reste au repos ou est animée d'un mouvement rectiligne et uniforme.

2<sup>ème</sup> loi : Relation fondamentale de la dynamique

La force totale appliquée à une particule quelconque est égale au produit de sa masse d'inertie  $m$ , par son accélération  $\vec{a} = \frac{d\vec{v}}{dt}$  soit  $\vec{f} = \frac{d\vec{p}}{dt} = m\vec{a}$

3<sup>ème</sup> loi : principe de l'action et de la réaction

Quand deux objets sont interaction, la force exercée par le premier sur le second et la force exercée par le second sur le premier sont coaxiales d'égale intensité et de sens contraires.

Exemple : Un objet A posé sur la table (objet B) exerce une force  $\vec{F}$  (son poids) sur la table exerce une force  $\vec{F}'$  (réaction  $\vec{R}$ ) sur l'objet

4<sup>ème</sup> loi : loi de la gravitation. Toute particule de masse  $m_1$  sur attire toute particule de masse  $m_2$  avec une force dirigée le long de la ligne qui relie les deux particules et  $|\vec{f}| = G \frac{m_1 m_2}{r^2}$ ,  $r$  : distance entre les deux particules.

##### A-2 – Hypothèses (postulats) de la mécanique de Newton

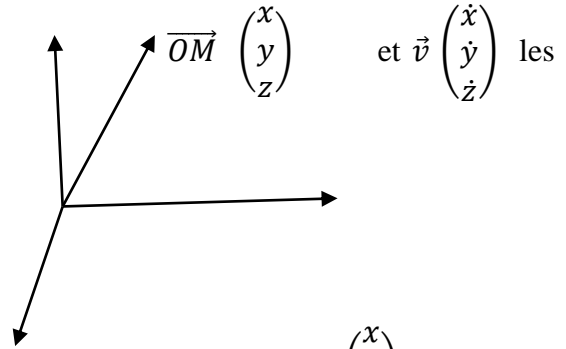
La mécanique de Newton postule les hypothèses suivantes généralement admises :

H1 : le temps est absolu et est indépendant du référentiel choisi et de même l'espace est absolu. L'espace et le temps sont indépendants l'un de l'autre. Le temps est le même dans tous les référentiels (contrairement à la relativité)

H2 : tout système est entièrement déterminé par la donnée d'un certain nombre de paramètres qui possèdent à chaque instant des valeurs précises.

.Exemple : les vecteurs position et vitesse  
conditions initiales du mouvement étant

Pour  $t=t_0$  :  $\overrightarrow{OM}_0 \begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \\ z_0 \end{pmatrix}$  et  $\vec{v}_0 \begin{pmatrix} \dot{x}_0 \\ \dot{y}_0 \\ \dot{z}_0 \end{pmatrix}$  et à l'instant  $t$  on détermine  $\overrightarrow{OM} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$



H 3 : la valeur de chaque paramètre peut au moins être déterminée avec une précision infiniment grande. Toutes les variables dynamiques ( $\overrightarrow{OM}, \vec{v}, \vec{p}, \vec{f}$ ) qui décrivent le système physique possèdent à chaque instant une valeur bien précise. L'évolution du système dans le temps est déterminée (**par la deuxième loi**) ; si on connaît un état à l'instant initial donné. Cette évolution est régie par un système d'équations différentielles.

L'objet de la dynamique est de déterminer les mouvements des particules de matière (à l'échelle macroscopique) connaissant les "actions" (appelées forces) qu'elles subissent.

Lecture

### Complément sur l'espace physique

#### *Les lois de Newton*

*La première loi de Newton correspond à ce qu'on appelle maintenant le « principe de l'inertie ».*

*Dans l'énoncé de ses lois, Newton devait parler de repos et de mouvement, mais de repos et mouvement par rapport à quoi ?*

*Pour décrire le mouvement il nous faut un référentiel c'est-à-dire un repère d'espace et une échelle de temps. Il conçut un espace absolu uniforme (ou invariable), il pouvait alors parler de mouvement rectiligne uniforme ou non. Cette idée d'espace et de temps absolus était un peu absurde.*

*Les mouvements relatifs des corps se trouvant dans un laboratoire spatial isolé donné, sont les mêmes que dans les laboratoires soit immobiles ou animés d'un mouvement rectiligne uniforme.*

*Tous les référentiels galiléens sont en mouvement de translation rectiligne et uniforme les uns par rapport aux autres. Aucun référentiel n'est absolu et aucun mouvement rectiligne uniforme ne peut être absolu. On ne peut perler donc que vitesses relatives.*

*Dans un référentiel galiléen le temps est uniforme et l'espace est homogène et isotrope.*

*Dire que le temps est uniforme : c'est dire qu'il y a reproductibilité : le résultat d'une expérience ne dépend pas du moment où elle est faite (sous réserve que toutes les autres conditions soient les mêmes).*

*Dire que l'espace est homogène : c'est dire que le résultat d'une expérience ne dépend pas du lieu où elle est faite, sous réserve que toutes les autres conditions soient identiques : il y a invariance par translation.*

*Dire que l'espace est isotrope : c'est dire que toutes les directions sont équivalentes et que le résultat d'une expérience ne dépend pas de l'orientation du laboratoire, sous réserve que toutes les autres conditions expérimentales soient identiques : il y a invariance par rotation dans l'espace.*

***On pourrait montrer que pour un système isolé dans un référentiel galiléen, à l'uniformité du temps est associé la conservation de l'énergie, à l'homogénéité de l'espace est associée la conservation de la quantité de mouvement et à l'isotropie de l'espace la conservation du moment cinétique.***

## B- Electromagnétisme

### B-1-Nature et caractéristique

Une onde électromagnétique est un modèle utilisé pour représenter le rayonnement électromagnétique.

- Les ondes électromagnétiques comprennent les ondes lumineuses, les rayons X, les rayons  $\gamma$  et les ondes hertziennes. Elles se propagent dans un milieu matériel et dans le vide.
- Comme dans tout signal ou onde (mécanique ou électromagnétique), deux grandeurs se propagent, les variations de l'une engendrent les variations de l'autre les variations de l'autre vice-versa, ce qui provoque une perturbation de proche en proche.

Pour les signaux électromagnétiques : il résulte une modification temporaire des champs électriques  $\vec{E}$  et magnétique  $\vec{B}$  en tout point de la propagation. *Une onde se présente comme la forme donnée par une corde à laquelle on imprime une extrémité.*

- La propagation des ondes ou signaux (mécaniques ou électromagnétiques) ne correspond à aucun transport de matière mais plutôt à un transport d'énergie.

### B-2-Traduction mathématique de la propagation d'une onde progressive.

Onde progressive : perturbation imprimée au milieu par la progression d'un phénomène vibratoire

Une onde permanente (non un signal) étant nécessairement entretenue à cause de son caractère d'agent transporteur d'énergie.

Un cas particulier très important d'ondes électromagnétiques est celui d'une onde dont le champ est une fonction périodique simple du temps.

Pour le cas simple d'une onde monochromatique sinusoïdale (sur dimension)

$\Psi = \psi_0 \cos \omega \left( t - \frac{x}{v} \right)$   $\psi$  : grandeur physique qui se propage est  $\vec{E}$  ou  $\vec{B}$  pour des ondes électromagnétiques

$\Psi_0$  : amplitude de la grandeur Physique,  $\omega$  : pulsation de l'onde et  $T = \frac{2\pi}{\omega}$  est la période.

Et  $\lambda = vT$  : longueur parcourue par l'onde monochromatique pour une durée  $T$  d'oscillation de la source : période spatiale.

On écrit souvent la grandeur  $\psi(\vec{E}$  ou  $\vec{B})$  sous forme complexe.  $\psi = \psi_0 e^{-i\omega \left( t - \frac{x}{v} \right)}$   
 $= \psi_0 e^{-i(\omega t - \omega \frac{x}{v})} = \psi_0 e^{-i(\omega t - kx)}$  on vérifie aisément et  $\Psi$  obéit à l'équation  $\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = 0$  ;  
 équation de propagation des ondes avec  $v = \frac{\omega}{k}$

Dans le cas général dans l'espace à trois dimensions et en posant  $\vec{n}$  vecteur unitaire de la direction de propagation.

$$\vec{r} = x\vec{i} + y\vec{j} + z\vec{k}$$

$$\psi(\vec{r}, t) = \psi_0 e^{-i\omega \left( t - \frac{\vec{n}\vec{r}}{v} \right)}$$

$$\psi(\vec{r}, \vec{t}) = \psi_0 e^{-i \left( \omega t - \frac{\omega \vec{n}\vec{r}}{v} \right)}$$

Cette forme permet d'expliquer la formation d'interférence et des phénomènes de diffraction.

Et on définit le vecteur d'onde  $\vec{k} = \frac{\omega \vec{n}}{v} = \frac{2\pi}{vT} \vec{n}$ ,  $\lambda = vT$  soit

$\vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda} \vec{n}$ , vecteur dans la direction de la propagation.

$T$  = période temporelle et  $\lambda$  = période spatiale

$\psi = \psi_0 e^{-i(\omega t - \vec{k}\vec{r})}$ . La quantité  $\omega t - \vec{k}\vec{r}$  est la phase de l'onde au point  $M$  et à l'instant  $t$ ,  
 $\vec{k}\vec{r}$  : déphasage de l'onde entre  $M$  et l'origine au même instant.

**On a  $\Delta \psi - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = 0$  : équation générale régissant la propagation des ondes.**

## Chapitre II : Les difficultés de la physique classique

### Introduction

Pour certains phénomènes sortant de notre échelle, les hypothèses des deux théories classiques précédemment citées ont été remises en cause : notamment pour des systèmes se déplaçant à des vitesses voisines de la lumière (naissance de la relativité) et les phénomènes physiques à l'échelle microscopique (naissance de la mécanique quantique). Ainsi les efforts des physiciens expérimentaux étaient orientés vers deux types de préoccupation étroitement liées.

Préoccupation 1 : effectuer l'analyse précise de la structure microscopique de la matière.

Préoccupation 2 : déterminer l'interaction mutuelle entre les particules matérielles et les interactions entre les particules matérielles avec les champs électromagnétiques.

Dans ces deux types de préoccupation certains résultats expérimentaux ont mis en évidence l'échec de la physique classique.

Nous nous proposons dans ce chapitre : d'étudier trois exemples qui ont fait échec à la description par la théorie continue des ondes électromagnétiques de Maxwell :

- Le rayonnement du corps noir
- L'effet photo électrique
- L'effet Compton

Aucune de ces trois expériences ne fut décrite correctement par la théorie continue des ondes.

La seule voie possible est l'introduction d'un concept essentiel et nouveau : **le quantum d'énergie**.

### A- Interaction rayonnement – matière.

#### A-1- Le rayonnement du corps noir

- Corps noir : corps rayonnant qui absorbe parfaitement toutes les radiations (sans réflexion ni transmission)
- Le rayonnement du corps noir est le modèle de rayonnement thermique d'un corps à température uniforme en équilibre avec son milieu extérieur. Son spectre d'émission est une fonction universelle qui passe par un maximum pour une longueur d'onde donnée et qui dépend de la température (loi de Wien).

Même un corps humain rayonne de l'énergie

Les émissions des corps incandescents : fours portés à haute température, les étoiles sont conformes au modèle de rayonnement du corps noir.

Les corps réels (absorption imparfaite), la température est définie à partir de la mesure de la puissance rayonnée elle s'appelle température de luminance.

Remarque : lorsqu'on chauffe un corps, il rayonne de l'énergie que nous évaluons sensoriellement par la quantité de chaleur que nous recevons) .

La densité d'énergie (énergie rayonnée dans une unité de volume dépend de la température ce corps que l'on note  $U = f(T)$ .

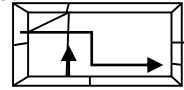
- Modèle du corps noir

L'énergie émise par unité de volume et par unité de fréquence  $u(T, \nu)$  dépend de la température et de la fréquence (densité d'énergie)

La théorie du rayonnement du corps noir n'est faisable que si on lui impose un modèle strict. On définit un type de corps rayonnant idéal que l'on appelle « corps noir » qui doit répondre aux exigences suivantes :

- Les parois sont rigides et parfaitement absorbantes au rayonnement.
- Le rayonnement émis est absorbé ainsi que les parois doivent constituer un système fermé afin que l'ensemble soit à l'équilibre ; aucun rayonnement ne doit donc sortir ou entrer dans le système fermé ainsi constitué.

C'est un four maintenu à température



-ture constante et isolé de l'extérieur

Le rayonnement émis par les parois du four (à l'intérieur) est en équilibre thermique avec les parois. L'ensemble constitue un système fermé.

Pour le besoin d'étude on effectue un petit trou qui ne perturbe pas le fonctionnement du « corps noir » car la quantité d'énergie qui s'échappe est négligeable.

- Etude

A l'équilibre au sein de la cavité la paroi émet et absorbe la même puissance à chacune des fréquences.

Lorsque l'équilibre est réalisé la densité d'énergie du champ électromagnétique à l'intérieur de la cavité correspondant à la fréquence  $\nu$  est constante à une température donnée  $T$ . De plus cette grandeur est indépendante du matériau constituant la paroi : l'énergie élémentaire émise par unité de volume et pour une variation de fréquence, de longueur d'onde ou de pulsion est :

$dE = u(\nu, T)d\nu = u(\lambda, T)d\lambda = u(\omega, T)d\omega$  avec  $u(\lambda, T)$  : densité d'énergie émise par unité de volume par unité de longueur d'onde et  $u(\omega, T)$  : densité d'énergie émise par unité de volume par unité de pulsion de l'onde.

- Observation expérimentale

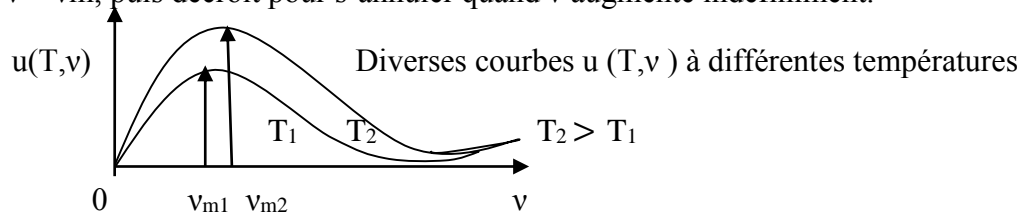
a) En interprétant les résultats expérimentaux, Stefan décrit empiriquement la densité d'énergie émise pour toutes les fréquences par une loi qui porte sur son nom

$$U(T) = \sigma T^4 ; \quad \sigma = \text{cste} ; \quad U(T) = \int dE = E = \int_0^{\infty} u(\nu, T)d\nu$$

$T$  = température du corps noir

## b) Lummer et Wien

Une étude expérimentale menée par Lummer et Wien a permis de montrer que  $u(T, \nu)$  croît proportionnellement à  $\nu^2$  aux faibles fréquences et présente un maximum aux fréquences  $\nu = \nu_m$ , puis décroît pour s'annuler quand  $\nu$  augmente indéfiniment.

**La théorie classique n'a pu interpréter ces résultats expérimentaux**

## c) Différents résultats théoriques

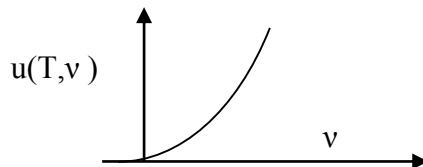
- Etude dans le domaine classique.

En considérant le champ  $\gamma$  régnant comme 1 oscillateur classique l'énergie moyenne  $\langle E_\nu \rangle = kT$  (voir théorie cinétique des gaz)

Le calcul statistique du nombre d'oscillateurs par unité de volume est  $dN(\nu) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}$

La valeur moyenne de l'énergie par unité de volume

$u(T, \nu) = dN(\nu) \langle E_\nu \rangle = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} kT$  : loi de Rayleigh et Jeans qui ne permet pas d'expliquer les courbes données expérimentalement. En effet pour cette loi de Rayleigh et Jeans on a



Le résultat obtenu par Rayleigh et Jeans est en contradiction évidente avec les courbes expérimentales obtenues car  $\int_0^\infty u(T, \nu) d\nu = +\infty$  résultat inacceptable physiquement.

- Etude dans le domaine quantique

Soit  $P_n$  la probabilité pour que l'oscillateur occupe à la température  $T$  le nième niveau. En utilisant la distribution de Boltzmann (voir la théorie cinétique des gaz)

$P_n = Ce^{-\frac{E_n}{kT}}$  et l'énergie moyenne  $\langle E \rangle = \frac{\sum_{n=0}^{+\infty} E_n P_n}{\sum_{n=0}^{+\infty} P_n} = \frac{\sum_{n=0}^{+\infty} E_n Ce^{-\frac{E_n}{kT}}}{\sum_{n=0}^{+\infty} Ce^{-\frac{E_n}{kT}}}$ ,  $\langle E \rangle$  : énergie moyenne d'une particule.

En postulant (Théorie de Planck) que les seules les valeurs possibles de l'énergie de chacun des oscillateurs est  $E_n = n\epsilon$ ; avec  $\epsilon = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$ . Soit donc :

$$\sum_{n=0}^{+\infty} e^{-\frac{E_n}{kT}} = \left( 1 + e^{-\frac{\epsilon}{kT}} + e^{-\frac{2\epsilon}{kT}} \dots \dots + e^{-\frac{n\epsilon}{kT}} \right)$$

Posons  $x = e^{-\frac{\epsilon}{kT}}$  ; on a alors  $\sum_{n=0}^{+\infty} e^{-\frac{E_n}{kT}} = (1 + x + x^2 \dots \dots + x^n) = \frac{1}{1-x}$

$$\sum_{n=0}^{+\infty} E_n C e^{-\frac{E_n}{kT}} = \sum_{n=0}^{+\infty} n\epsilon x^n = \epsilon \cdot \sum_{n=0}^{+\infty} n x^n = \epsilon \cdot x \cdot \sum_{n=1}^{+\infty} n x^{n-1} \text{ et}$$

$$\epsilon \cdot x \cdot \sum_{n=0}^{+\infty} n x^{n-1} = \epsilon \cdot x \cdot \frac{d(\sum_{n=0}^{+\infty} x^n)}{dx} = \epsilon \cdot x \cdot \frac{d}{dx} \left( \frac{1}{1-x} \right) = \frac{\epsilon x}{(1-x)^2} ; \text{ soit : } \sum_{n=0}^{+\infty} E_n C e^{-\frac{E_n}{kT}} = \frac{\epsilon x}{(1-x)^2}$$

En effet  $e^{-\frac{\epsilon}{kT}} \ll 1$  qu'on peut vérifier par une simple application dans le domaine du visible ( $hc = 12400 \text{ eV} \cdot \text{\AA}$ ) et  $kT \approx 8,62 \cdot 10^{-5} \text{ eV} \cdot \text{\AA}$  ( $T = 300 \text{ K}$ )

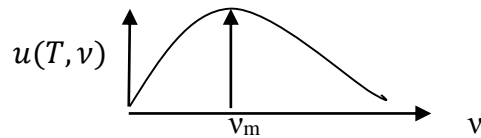
$$\text{on obtient } \langle E_V \rangle = \frac{\sum_{n=0}^{+\infty} E_n P_n}{\sum_{n=0}^{+\infty} P_n} = \frac{\sum_{n=0}^{+\infty} E_n C e^{-\frac{E_n}{kT}}}{\sum_{n=0}^{+\infty} C e^{-\frac{E_n}{kT}}} = \frac{\epsilon x \cdot (1-x)}{(1-x)^2} = \frac{\epsilon x}{1-x} = \frac{h\nu \cdot e^{-\frac{h\nu}{kT}}}{1 - e^{-\frac{h\nu}{kT}}}$$

$$u(T, \nu) = dN(\nu) \langle E_V \rangle = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{h\nu \cdot e^{-\frac{h\nu}{kT}}}{(1 - e^{-\frac{h\nu}{kT}})} = \frac{8\pi\nu^3}{c^3} \frac{h}{(e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1)}$$

$$\mathbf{u(T, \nu) = \frac{8\pi\nu^3}{c^3} \frac{h}{(e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1)}} : \text{ Loi de Planck relative à la densité d'énergie rayonnée par unité}$$

de fréquence par le corps noir.

Cette expression s'accorde bien avec les courbes expérimentales observées



Conséquences

- Pour les valeurs de  $\nu$  faibles ( $\nu \rightarrow 0$ ) ; Rappel :  $e^x \sim 1 + \frac{x}{1!} + \frac{x^2}{2!} \dots \dots + \frac{x^n}{n!}$  pour  $x \rightarrow 0$

$$e^{\frac{h\nu}{kT}} \rightarrow 1 + \frac{h\nu}{kT} \quad (\nu \rightarrow 0) \text{ on obtient } u(T, \nu) = \frac{8\pi\nu^2 kT}{c^3} \quad (\text{loi de Rayleigh et Jeans})$$

$$\square \text{ Pour les valeurs de } \nu \text{ grandes } (\nu \rightarrow +\infty) \text{ on a } u(T, \nu) = \frac{8\pi\nu^3 h \cdot e^{-\frac{h\nu}{kT}}}{c^3} \quad (\text{loi de Wien})$$

- expressions  $u(T, \lambda)$  et  $u(T, \omega)$

Ces expressions s'obtiennent en exprimant l'énergie élémentaire émise pour une variation élémentaire  $d\lambda$  ou  $d\omega$

$$dE = u(T, \nu) d\nu = u(T, \lambda) d\lambda = u(T, \omega) d\omega$$

$$\text{soit : } u(T, \lambda) = u(T, \nu) \left| \frac{d\nu}{d\lambda} \right| \text{ et tenant compte que } \nu = \frac{c}{\lambda} \text{ on obtient } \mathbf{u(T, \lambda) = \frac{8\pi c}{\lambda^5} \frac{h}{(e^{\frac{hc}{\lambda kT}} - 1)}}$$

on obtient de même  $u(\mathbf{T}, \omega) = \frac{\hbar \omega^3}{\pi^3 c^3} \frac{1}{(e^{\frac{\hbar \omega}{kT}} - 1)}$

En langage des photons ces formules montrent que l'énergie d'un champ est égale à la somme des énergies des photons qui représentent ce champ.

L'expression donnée par Planck est appelée loi de Planck ou formule de Planck.

Elle s'accorde bien avec les courbes expérimentales.

On vérifie à partir de la formule de Planck la formule de Stefan - Boltzmann.

Pour obtenir sa formule, Planck quantifie le rayonnement émis à l'émission et à l'absorption et il postule qu'à une fréquence donnée  $\nu$  les échanges d'énergies ne portent que sur des nombres entiers de quantum d'énergie valant  $h\nu$  ;  $E_n = n\varepsilon$  ;  $\varepsilon = h\nu$  (quantum d'énergie)

• **Etude du maximum de la densité d'énergie du rayonnement thermique : 2° Loi de Wien**

Utilisation la loi de déplacement de Wien pour calculer la température de surface d'une étoile géante rouge ayant une longueur d'onde d'intensité maximale d'émission  $\lambda_{\max} = 650 \text{ nm}$

➤ La loi de déplacement de Wien découle directement de la formule de Planck donnant la densité d'énergie rayonnée par un corps noir  $u(\mathbf{T}, \nu) = \frac{8\pi h \nu^3}{c^3 (e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1)}$ .

Exprimons la densité d'énergie en fonction de  $\lambda$  et T l'énergie émise par unité de volume

$$dE = u(\mathbf{T}, \lambda) d\lambda = u(\mathbf{T}, \nu) d\nu \quad ; \quad \nu = \frac{c}{\lambda} \quad \text{on tire} \quad \left| \frac{d\nu}{d\lambda} \right| = \frac{c}{\lambda^2} \rightarrow u(\mathbf{T}, \lambda) = u(\mathbf{T}, \nu) \left| \frac{d\nu}{d\lambda} \right| = \frac{8\pi h c}{\lambda^5 \left( e^{\frac{hc}{\lambda kT}} - 1 \right)}$$

Posons  $x = \frac{hc}{\lambda kT} \rightarrow \lambda = \frac{hc}{xkT}$  (1) soit  $u(\mathbf{T}, x) = \frac{8\pi h c k^5 T^5 x^5}{h^5 c^5 (e^x - 1)} = \text{Constante} \cdot \frac{x^5}{(e^x - 1)}$  :

Constante =  $\frac{8\pi h c k^5 T^5}{h^5 c^5}$  ; le coefficient est une constante pour T fixée

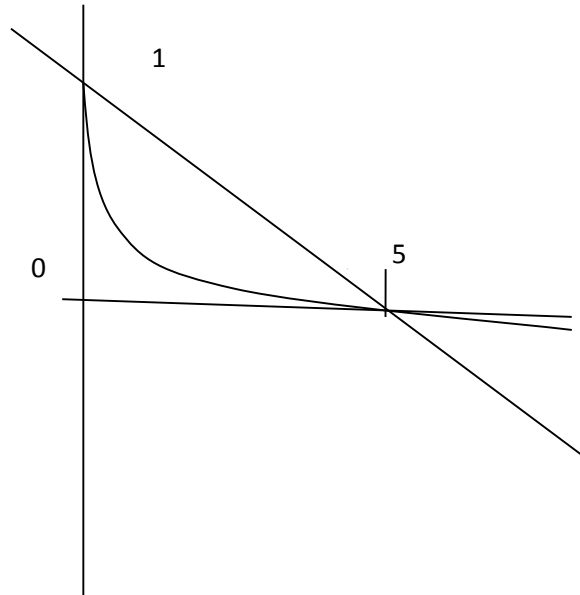
$u(x, T)$  est maximale si :

$$\frac{du(x, T)}{dx} = 0 \rightarrow 5x^4 (e^x - 1)^{-1} - x^5 (e^x - 1)^{-2} e^x \quad ; \quad \text{soit} :$$

$$x^4 (e^x - 1)^{-1} [5 - x e^x (e^x - 1)^{-1}] = 0$$

Les solutions :  $x=0$  ou  $[5 - x e^x (e^x - 1)^{-1}] = 0 \rightarrow 5(e^x - 1) = x e^x$

On obtient en définitif :  $1 - \frac{1}{5} x = e^{-x}$  ; cette dernière équation se résout graphiquement



Les deux courbes se coupent aux points  $x=0$  et  $x_m \approx 4,965$  et d'après (1)

$$\lambda_m = \frac{hc}{x_m kT} \rightarrow \lambda_m T = \frac{hc}{k x_m} = 2,89810^{-3} mK = 3000 \mu mK$$

$$\text{AN pour } \lambda_{\max} = 650 \text{ nm} ; T = \frac{3000 \mu mK}{650 \text{ nm}} = \frac{3000 \text{ nm} \cdot 10^3 K}{650 \text{ nm}} = 4,610^3 K$$

Cette loi de Wien permet de déterminer la température des étoiles ou la longueur d'onde maximum d'émission des corps noirs.

### Applications

- 1- Le rayonnement solaire a un pic situé à  $\lambda_{\max} = 500 \text{ nm} = 500 \cdot 10^{-9} \text{ m}$   
Quelle est la température à la surface du soleil si on suppose qu'il rayonne comme un corps noir ?
- 2- La température de la peau d'une personne est  $34^\circ\text{C}$  ; quelle est la longueur d'onde à laquelle le rayonnement du corps humain est maximal ?

Solution

- 1- D'après la loi de déplacement de Wien on a :  $\lambda_m \cdot T \approx 3 \cdot 10^{-3} \text{ mK}$

$$\text{On tire } T = \frac{3 \cdot 10^{-3} \text{ mK}}{500 \cdot 10^{-9} \text{ m}} = 6000 \text{ K}$$

- 2- On a  $T = 34 + 273 = 307 \text{ K}$

$$\lambda_m = \frac{3 \cdot 10^{-3} \text{ mK}}{307} = 9,7 \mu\text{m} \quad (\text{domaine de l'infrarouge})$$

Notez : Un corps humain n'est pas un corps noir parfait ainsi ce résultat ne peut être qu'approximatif

Cependant il est conforme à l'expérience que le maximum de radiance d'une personne se situe dans l'infrarouge mais pas exactement à la même longueur d'onde que celui du corps noir de même température.

### Postulat de Planck

Planck postule qu'un oscillateur harmonique ne peut prendre n'importe quelle valeur (positive) de l'énergie, mais seulement des valeurs discrètes  $n\varepsilon$  où  $n$  est un entier positif normal et  $\varepsilon$  le quantum de l'oscillateur. Les énergies  $n\varepsilon$  s'appellent encore niveaux des oscillateurs.

Lorsqu'une cavité (vide de tout gaz pour simplifier) est creusée dans une matière portée à une certaine température  $T$ , l'expérience montre qu'il règne un rayonnement électromagnétique à spectre continu.

Les parois émettent et absorbent de façon permanente des rayonnements, un état d'équilibre est vite atteint on caractérise ce rayonnement par sa densité spectrale  $\rho$  en chaque point. Si on se réfère à la pulsation  $\omega = 2\pi\nu$  d'énergie continue dans un volume unité ( $1\text{cm}^3$ ) entourant un point donné et limité aux radiations de pulsations comprises entre  $\omega$  et  $\omega + d\omega$  est  $\rho(\omega)d\omega$ . On a  $\rho(\omega)$  : la densité spectrale : énergie émise dans un volume unité ( $1\text{cm}^3$ ), pour une fréquence donnée ou pulsation donnée ou une longueur d'onde donnée.

L'énergie totale émise dans cet espace  $\rho = \int_0^{+\infty} \rho(\omega) d\omega$

Le corps noir (rayonnement isotherme)

Les oscillateurs associés aux ondes lumineuses de Planck, il s'agit d'oscillateurs fictifs associés aux ondes stationnaires dans une cavité mais il est naturel que la quantification de l'énergie s'applique aux oscillateurs (vibration des molécules, ions atomes...)

Remarque : pour la source émettrice  $\rho$  s'identifie à la puissance émise par unité de surface et unité de fréquence

On retiendra :

L'énergie d'un système mécanique à l'échelle atomique (atome, noyaux, molécules) ne prend que des valeurs discrètes.

### **Compléments**

#### • *Complément A*

*Supposons qu'un enseignant ait à corriger  $N$  copies : on peut se poser la question ; quel est le moyen le plus rapide pour calculer la moyenne générale des copies.*

*Un procédé astucieux consiste à grouper l'ensemble des copies ayant la même note ; par exemple*

$N_1$  copies ont la note  $U_1$

$N_2$  copies ont la note  $U_2$

$N_3$  Copie ont la note  $U_3$

La moyenne général  $\langle U \rangle$  sera réalisée en écrivant  $\langle U \rangle = \frac{N_1 U_1 + N_2 U_2 + N_3 U_3 + N_4 U_4}{N_1 + N_2 + N_3 + N_4}$

$$\langle U \rangle = \frac{\sum N_i U_i}{\sum N_i}$$

De même en physique pour une grandeur quelconque  $u$ , on peut calculer la moyenne à partir de la formule précédente.

$P_n \rightarrow N_i$

$U_i \rightarrow E_n$  On obtient la formule précédente  $\langle E \rangle = \frac{\sum_{n=0}^{+\infty} N_i U_i}{\sum_{n=0}^{+\infty} N_i} = \frac{\sum_{n=0}^{+\infty} P_n E_n}{\sum_{n=0}^{+\infty} P_n}$

Toutefois dans certains cas, il se trouve que l'on doit effectuer la somme sur une infinité de valeurs possibles de  $N_i$ , la somme discontinue  $\Sigma$  tend vers une intégrale.

$N_i$  est remplacé par  $f(u)$  la grandeur physique étant  $u$  :  $\langle u \rangle = \frac{\int u \cdot f(u) du}{\int f(u) du}$

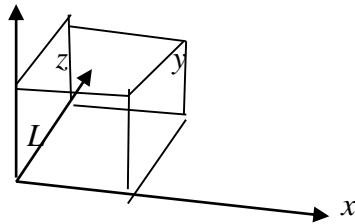
• Complément B : Champ d'ondes lumineuses

En considérant une onde monochromatique plane qui se propage par exemple le long de l'axe  $y$  et exigeons que soient remplies les conditions aux limites dites cycliques.

Onde lumineuse est confinée dans une boîte

$\vec{E} = E_0 \sin(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r}) \rightarrow E_0 \sin(\vec{k} \cdot \vec{r})$  ou  $E_0 \cos(\vec{k} \cdot \vec{r})$  et  $\vec{k} = k_x \vec{i} + k_y \vec{j} + k_z \vec{k}$  ;

$$k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = \frac{\omega^2}{c^2}$$



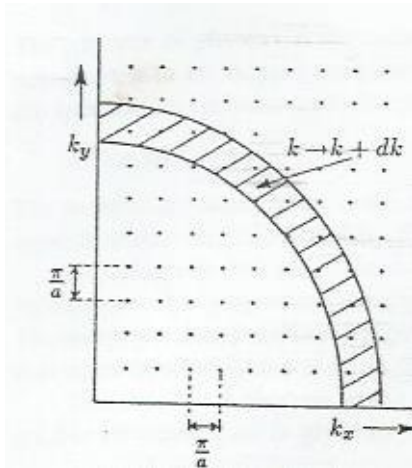
les conditions cycliques conduisent à  $\sin(k_y L) = 0 \rightarrow \sin(k_y L) = \sin(n\pi)$  ; ce qui donne

$$k_y = \frac{n_y \pi}{L}$$

De même on a :  $k_x = \frac{n_x \pi}{L}$  et  $k_z = \frac{n_z \pi}{L}$  avec  $n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, \dots, n$

En posant  $n^2 = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2$  ; on obtient  $k = \frac{n\pi}{L} = \frac{\omega}{c} \rightarrow \omega = n \frac{c\pi}{L}$ , ce qui conduit à une superposition des ondes de fréquences multiples ou oscillateurs à fréquences multiples.

En passant aux coordonnées sphériques



Le nombre d'oscillateurs dans le volume  $V(k)$  est  $\frac{4}{3}\pi n^3$

Le nombre d'oscillateurs dans un volume élémentaire est  $4\pi n^2 dn$

Le nombre d'oscillateurs dans le volume représenté est  $\frac{1}{8}4\pi n^2 dn = \frac{\pi n^2}{2} dn$  ( il y a 8 octants )

Or  $k = \frac{n\pi}{L}$  ce qui donne  $n = \frac{Lk}{\pi}$  ;  $n^2 = \frac{L^2 k^2}{\pi^2}$  et  $dn = \frac{Ldk}{\pi}$  . Soit  $\frac{\pi n^2}{2} dn = \frac{L^3 k^2 dk}{2\pi^2} = \frac{L^3 \omega^2 d\omega}{2\pi^2 c^3}$  (  $k = \frac{\omega}{c}$  )

$dN(\omega) = \frac{L^3 \omega^2 d\omega}{2\pi^2 c^3} = \frac{V \omega^2 d\omega}{2\pi^2 c^3}$  . En tenant compte que l'onde peut avoir 2 possibilités de polarisation

$dN = \frac{2V \omega^2 d\omega}{2\pi^2 c^3} = \frac{V \omega^2 d\omega}{\pi^2 c^3}$  . Pour  $V=1$  . Le nombre d'oscillateurs ou nombre d'ondes dans le volume élémentaire des  $k$  est  $dN = \frac{\omega^2 d\omega}{\pi^2 c^3}$  ;  $\omega = 2\pi \nu$  on obtient  $dN = \frac{8\pi \nu^2 d\nu}{c^3}$

$dE = u(T, \nu) d\nu =$  l'énergie élémentaire pour une variation  $d\nu$

$dE = u(T, \nu) d\nu = dN \cdot \langle E \rangle = \frac{8\pi \nu^2 d\nu}{c^3} \cdot kT$  on tire  $u(T, \nu) = \frac{8\pi \nu^2 kT}{c^3}$  ( théorie classique )

#### • Complément C : Ondes stationnaires

Le comportement des ondes lumineuses dans la boîte est similaire (champ d'ondes lumineuse dans un volume fini) à une onde stationnaire idéale.

- Considérons deux ondes sinusoïdales, de même pulsation, de même amplitude, mais se propageant suivant la même droite, en sens opposés. L'une de ces ondes se propage dans le sens des  $x$  croissants, l'autre en sens inverse.

En un point  $M$  l'onde  $u(x, t) = u_1(x, t) + u_2(x, t) = f(x - \frac{x}{c}) + f(x + \frac{x}{c})$

Pour une onde sinusoïdale :

$$u(x,t) = u_1(x,t) + u_2(x,t) = f\left(x - \frac{x}{c}\right) + f\left(x + \frac{x}{c}\right) = A \cos \omega \left(t - \frac{x}{c}\right) + A' \cos \omega \left(t + \frac{x}{c}\right)$$

$f\left(x + \frac{x}{c}\right) = A' \cos \omega \left(t + \frac{x}{c}\right)$  et on doit avoir en  $x=0$   $u(x,t) = 0$  car le point  $O$  est fixe et pour une paroi infinie la probabilité de trouver la particule en ce point à tout instant est nulle.

soit  $(A+A') \cos \omega t$  est nulle à tout instant donc  $A' = -A$  on aboutit à  $u(x,t) = u_1(x,t) + u_2(x,t) = f\left(x - \frac{x}{c}\right) + f\left(x + \frac{x}{c}\right) = A \cos \omega \left(t - \frac{x}{c}\right) - A \cos \omega \left(t + \frac{x}{c}\right)$

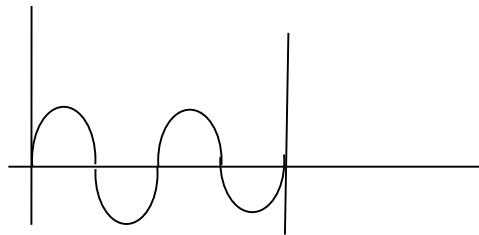
soit  $u(x,t) = 2A \sin kx \sin \omega t$ . L'onde étant limitée dans la boîte de longueur  $L$

$$u(0,t) = u(L,t) =$$

$0$ ; soit  $\sin kL = 0 = \sin n\pi$  ;  $k = \frac{n\pi}{L}$  = or  $k = \frac{2\pi}{\lambda}$  ;  $\frac{2\pi}{\lambda} = \frac{n\pi}{L}$  → ;  $L = n \frac{\lambda}{2}$  soit  $\lambda = \frac{2L}{n} = 2L, \frac{2L}{2}, \frac{2L}{3}, \dots$  et les fréquences des oscillateurs sont également limitées aux valeurs  $\nu_n = \frac{\omega}{2\pi} = n \frac{c}{2L}$

Cas :

$n=4$



Les milieux limités susceptibles de vibrer en ondes sont des oscillateurs multiples constitués par un très grand nombre d'oscillateurs élémentaires couplés les uns aux autres ce nombre peut être infini.

## A-2- L'effet photoélectrique

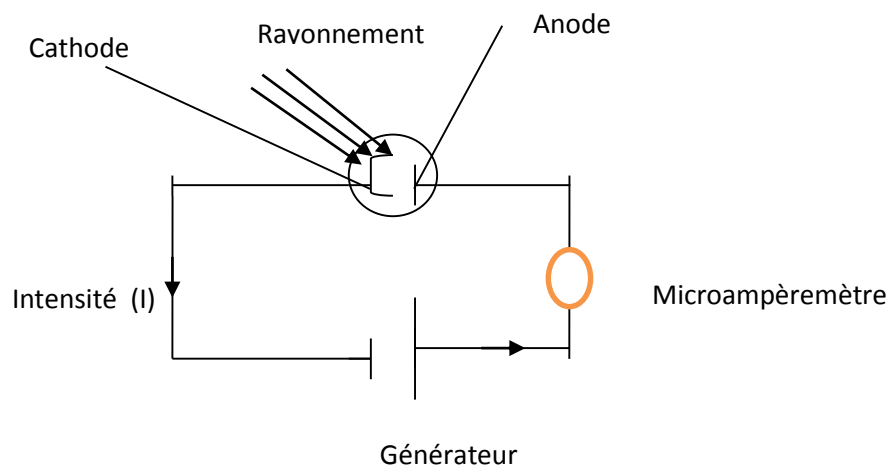
En 1887 le physicien Hertz a découvert qu'un rayonnement électromagnétique est susceptible d'arracher des électrons à un métal.

L'effet photoélectrique est l'émission d'électrons par la matière frappée par un rayonnement électromagnétique convenable .

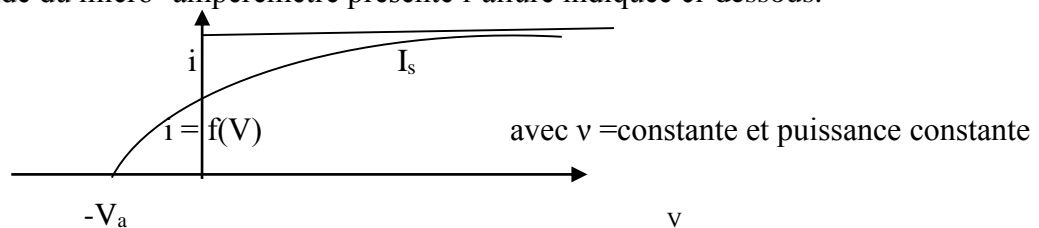
Un photon ; si son énergie est suffisante est capable d'ioniser un atome ou d'extraire un électron du métal

Le dispositif expérimental permettant d'étudier les phénomènes photo électriques comprend une cellule photo électrique, une cathode C qui est éclairée par le rayonnement électromagnétique et une anode A

Schéma d'une cellule photoélectrique



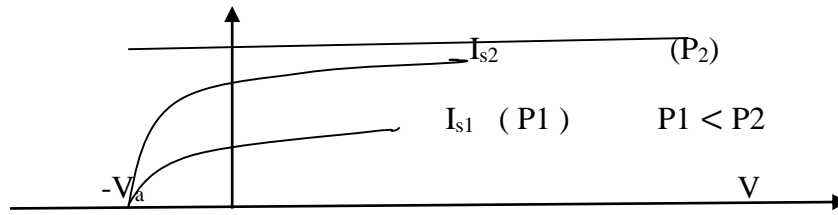
Lorsque le rayonnement électromagnétique incident n'est pas très élevé, l'intensité du courant mesuré à l'aide du micro- ampèremètre présente l'allure indiquée ci-dessous.



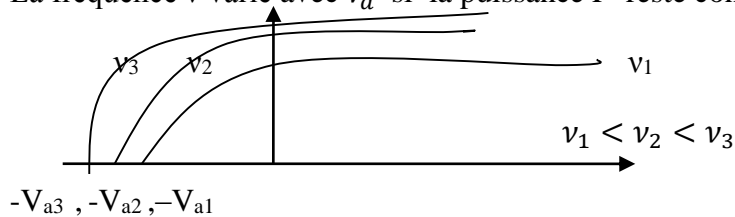
La caractéristique courant-tension présente un seuil en tension pour  $V = -V_a$  est notée parfois  $-U_0$  : tension minimale à appliquer entre l'anode et la cathode pour observer passage du courant photoélectrique avec un rayonnement convenable.

Le courant  $i$  croît et atteint une valeur limite  $I_s$  appelée courant de saturation. On observe que le courant de saturation et d'autant plus important que le flux du rayonnement électromagnétique est intense.

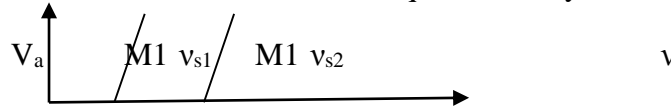
- Pour un éclairage donné produisant l'apparition du courant. Ce courant est une fonction croissante de la ddp appliqué  $V$  pour finalement saturer à une valeur  $I_s$
- Lorsque la fréquence  $\nu$  constante la puissance  $P$  varie ;  $I_s$  croît avec  $P$



c- La fréquence  $\nu$  varie avec  $V_a$  si la puissance  $P$  reste constante



d- la tension d'arrêt  $V_a$  varie en fonction de la fréquence du rayonnement incident



Les faits expérimentaux obtenus sont particulièrement en contradiction avec la théorie de Maxwell en électromagnétique.

i- Il existe un seuil en tension ou en fréquence  $\nu_s$ , seuil au-dessous duquel l'effet photoélectrique n'apparaît pas.

ii- L'absence d'un seuil en intensité lumineuse (flux lumineuse, puissance lumineuse)  $\nu > \nu_s$  explique le caractère sélectif de l'effet photoélectrique (l'émission ne dépend pas de l'intensité lumineuse mais de  $\nu$ ).

iii- L'effet observé a un caractère instantané. Einstein (1905) en reprenant les idées de Planck postule l'existence de photons (pour expliquer l'effet photo-électrique) ; chaque photon ayant une énergie

$h\nu = \varepsilon$  avec  $\nu$  : fréquence du rayonnement. Les expériences décrites ci-dessus s'interprètent aisément :

$\alpha$ ) - Un photon est alors absorbé par un électron et cette interaction peut alors arracher un électron de la substance constituant la cathode. L'électron étant lié dans le métal par une énergie  $W_s$ . pour arracher l'électron il faut que le photon ait une énergie  $\varepsilon = h\nu \geq W_s$

$\beta$ ) - La fréquence seuil  $\nu_s$  est la fréquence du rayonnement pour laquelle  $h\nu_s = W_s$  ( $W_s$  : travail d'extraction d'un électron) ; si  $\nu < \nu_s$  : on n'observe pas l'effet photoélectrique.

$\gamma$ ) - Si  $h\nu \geq W_s$  soit  $h\nu \geq h\nu_s$ ; l'électron est éjecté du métal avec une énergie cinétique

$$E_{\text{cmax}} = h\nu - h\nu_s$$

$\delta$ ) - tension d'arrêt

la tension d'arrêt est la tension qu'il faut appliquer entre la cathode et l'anode pour annuler le courant photoélectrique ( $U_0 = V_a = U_C - U_A$ )

On peut appliquer le théorème de l'énergie cinétique ou de l'énergie totale à l'électron :

la force électrique étant une force conservative l'énergie totale du système ( électron ) se conserve

A la cathode

A l'anode

$$E_p(C) = qV_C \text{ et } E_c = E_{cmax}$$

$$E_p(A) = qV_A \text{ et } E_c = E_c(A) = 0$$

$$E_t = qV_C + E_{cmax}$$

$$E_t = qV_A$$

$$\text{Soit } qV_C + E_{cmax} = qV_A \rightarrow E_{cmax} = q(V_A - V_C) \text{ et } q = -e \text{ on obtient}$$

Alors  $e(V_C - V_A) = E_{cmax}$  ;  $eU_0 = eV_a = E_{cmax}$  ( équation d'Einstein sur l'effet photoélectrique)

En tenant compte de l'expression de  $E_{cmax}$  obtenu plus haut on tire :

$$\text{Soit } U_0 = V_a = \frac{h}{e} (\nu - \nu_s)$$

$$E_{cmax} = eU_0 = eV_a = h\nu - h\nu_s$$

Remarque si on considère  $U_A - U_C$  (tension appliquée entre l'anode et la cathode elle est négative (à l'arrêt) ;  $U_A - U_C = -V_a = -U_0$  et si  $U_A - U_C \leq -V_a$  le courant photoélectrique est nul dans le circuit.

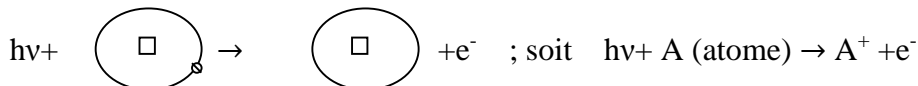
$\varepsilon$ ) - Il n'y a pas de seuil en intensité de rayonnement parce qu'un seul photon suffit pour arracher un électron du métal dès lors que sa fréquence  $\nu$  est supérieure à  $\nu_s$ . La partie croissante de la caractéristique courant tension ( $i$  en fonction de  $V$ ) s'explique par le fait que tant que la différence de potentiel demeure faible les électrons émis par la cathode ont une probabilité non nulle d'être piégés avant d'atteindre l'anode, le vide de la cellule photo électrique n'étant pas parfait. La valeur limite  $I_s$  est appelée courant de saturation.

**Conclusion : l'interprétation d'Einstein de l'effet photo électrique confère une nature corpusculaire au rayonnement électromagnétique** qui est constitué de photons, le photon étant une particule essentiellement relativiste avec les caractéristiques suivantes :

- $E = h\nu$  et la masse  $m = 0$  .  $E$  est l'énergie de la particule
- L'identité fondamentale d'une particule relativiste est  $E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4$

La masse  $m = 0$  on obtient la quantité de mouvement d'un photon  $p = \frac{h\nu}{c}$

Remarques ; - l'effet photoélectrique peut s'observer sur un atome



Si on désigne par  $I$  l'énergie de liaison on a :  $h\nu - I = \frac{1}{2} m v^2$  (processus d'absorption d'un photon)

généralement dans ces processus on considère que les électrons émis ont des énergies faibles pour la mécanique classique soit appliquée ( $E_c = \frac{1}{2} m v^2$ ) ; s'il avère que  $E_c$  est

importante on doit écrire  $E_c = \left( \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} - 1 \right) m c^2$

### A-3- L'effet Compton

L'étude de l'effet photo électrique a permis de considérer l'échange d'énergie entre le rayonnement électromagnétique et la matière par quanta d'énergie de valeur  $\epsilon = h\nu$

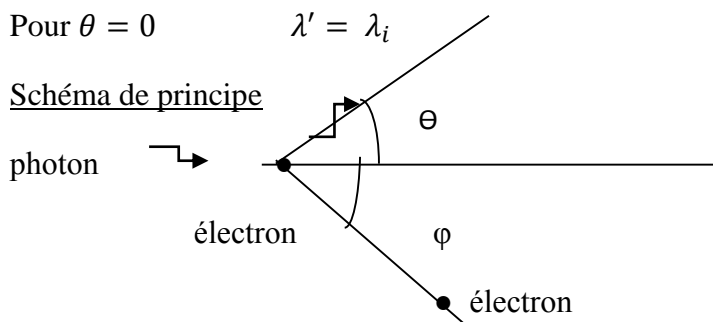
L'étude de l'effet Compton va imposer l'existence d'un corpuscule comme véhicule. Cet échange corpusculaire appelé photon qui est une particule du rayonnement.

Compton en 1923 a étudié la diffusion des rayons X par une substance contenant un certain nombre d'électrons pouvant être considérés comme libres.

Exemple : cible de calcite, cible d'aluminium ; graphite (réseau d'atomes de carbone).

Lorsque la cible est assez mince on observe par transmission des rayons X diffusés en dehors de la direction des rayons X incidents avec une longueur d'onde légèrement plus élevée  $\lambda' > \lambda_i$

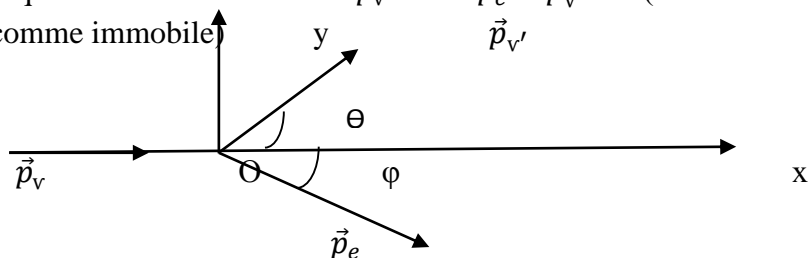
Pour une longueur  $\lambda_i$  des rayons X incidents et en mesurant  $\lambda'$  du rayonnement diffusé en fonction de  $\theta$ , Compton observe que le décalage  $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda_i = C(1 - \cos\theta)$  avec C=une constante



Une telle collision est élastique : (le nombre et la nature des particules ne sont pas modifiés)

Appliquons les lois de conservation

- ° Pour l'énergie  $E_\nu + E_o = E_{\nu'} + E_e$
- ° Pour la quantité de mouvement  $\vec{p}_\nu + 0 = \vec{p}_e + \vec{p}_{\nu'}$  (l'électron initialement est considéré comme immobile)



Les lois de conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement au cours de cette collision conduisent :

$$\begin{cases} E_V + E_0 = E_{V'} + E_e & (1) \\ \vec{p}_V + \vec{0} = \vec{p}_e + \vec{p}_{V'} & (2) \end{cases} \quad \text{or } E=hc \rightarrow p_V = \frac{h\nu}{c} \quad \text{et } p_{V'} = \frac{h\nu'}{c} \quad \text{et}$$

$$E_e^2 = p_e^2 c^2 + m^2 c^2 = p_e^2 c^2 + E_0^2 \quad ; \quad \text{soit } p_e^2 c^2 = E_e^2 - E_0^2 \quad (3)$$

projettons l'équation (2) sur les axes on obtient :

$$\begin{cases} p_V = p_e \cos\varphi + p_{V'} \cos\Theta \\ 0 = p_e \sin\varphi + p_{V'} \sin\Theta \end{cases} \quad \text{On tire alors } \begin{cases} p_e \cos\varphi = p_V - p_{V'} \cos\Theta \\ p_e \sin\varphi = -p_{V'} \sin\Theta \end{cases}$$

En élevant au carré ces deux dernières égalités et en sommant membre à membre on obtient

$$p_e^2 = p_V^2 - 2p_V p_{V'} \cos\Theta + p_{V'}^2 \rightarrow p_e^2 c^2 = c^2 p_V^2 - 2c^2 p_V p_{V'} \cos\Theta + p_{V'}^2 c^2$$

De l'équation (3) on a  $p_e^2 c^2 = E_e^2 - E_0^2$  soit

$$E_e^2 = c^2 p_V^2 - 2c^2 p_V p_{V'} \cos\Theta + p_{V'}^2 c^2 + E_0^2 \quad \text{et remplaçons dans cette relation } p_V \text{ et } p_{V'} \text{ par leurs expressions on obtient : } E_e^2 = E_V^2 + E_{V'}^2 - 2E_V E_{V'} \cos\Theta + E_0^2 \quad (4)$$

$$\text{De l'équation (1) on a } E_e^2 = (E_V + E_0 - E_{V'})^2 = E_V^2 + E_{V'}^2 + E_0^2 - 2E_V E_{V'} + 2E_V E_0 - 2E_{V'} E_0 \quad (5)$$

Des (4) et (5) on obtient :  $2E_0 (E_V - E_{V'}) = 2E_V E_{V'} (1 - \cos\Theta)$  ; or

$$E_V = \frac{hc}{\lambda} \quad \text{et } E_{V'} = \frac{hc}{\lambda'} \quad \text{et } E_0 = mc^2 \quad ; \quad \text{on tire } (\lambda' - \lambda) = \frac{h}{mc} (1 - \cos\Theta) \quad : \lambda c = \frac{h}{mc} \quad : \text{longueur d'onde Compton } \lambda_C = 0,0242 \text{ \AA} \quad ; \text{ soit : } \lambda' - \lambda = \Delta\lambda = \lambda_C (1 - \cos\Theta) \quad : \text{décalage de Compton}$$

La diffusion Compton n'est pas de type de diffusion classique d'un rayonnement par les atomes telle que la diffusion de l'atmosphère. Selon la théorie classique, développée par Rayleigh pour le phénomène analogue à la diffusion de la lumière par les atomes de l'atmosphère la diffusion est due à l'interaction du champ électromagnétique avec les électrons faiblement liés présents dans la matière. Le champ de l'onde incidente excite des électrons suivant des oscillation forcées à la même fréquence que le signal incident. Ces électrons oscillants rayonnent à leur tour dans tout l'espace une onde diffusée de même fréquence que l'onde incidente. Selon la théorie électromagnétique classique, la longueur  $\lambda_2$  du rayonnement diffusé est donc égale à la longueur d'onde du rayonnement incident. Or l'expérience réalisée avec les rayons X donne un résultat tout différent : la longueur d'onde du rayonnement diffusé est plus grande que celle des rayons X incidents et l'écart  $\lambda_{\text{diffusé}} - \lambda_{\text{incident}}$  est proportionnel à  $\sin^2 \frac{\theta}{2}$ , cette diffusion non classique constitue l'effet Compton.

Dans toutes ces expériences le transfert (photon en un lieu donné) d'énergie entre le champ et la matière est quantifié. Tout se passe comme si le rayonnement était constitué de graines indivisibles ou quanta d'énergie appelée photons.

La théorie classique de Maxwell montre que le flux d'énergie est proportionnel au carré de l'amplitude de l'onde électromagnétique. Comme les photons ont tous la même énergie

(pour un rayonnement monochromatique), le nombre de photons détecté en un lieu donné est proportionnel au carré de l'amplitude de l'onde en ce lieu. Le carré de l'amplitude de l'onde est la probabilité de détecter le photon en un lieu donné.

## B- Structure de la matière

### Introduction

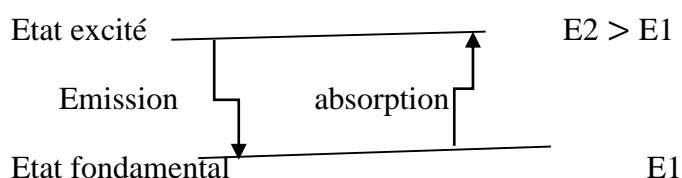
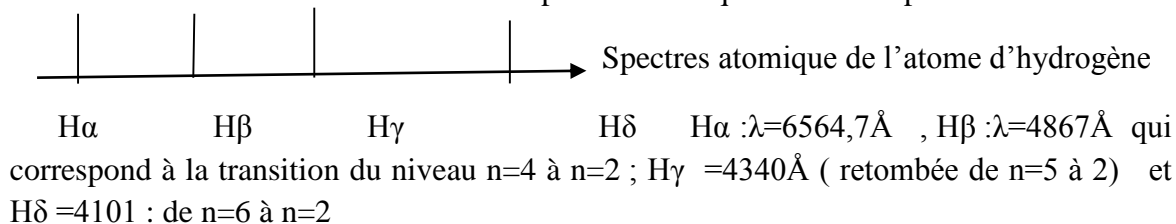
Les modèles atomiques existant à la fin du 19<sup>ème</sup> siècle ne pouvaient pas expliquer les phénomènes tels que la radioactivité, l'émission des rayons X, les spectres optiques.

A la suite des travaux de Rutherford, les expériences de diffusion de particules  $\alpha$  par divers matériaux, après que le concept du noyau atomique ait vu le jour, Niels Bohr propose un modèle d'atome dans lequel les électrons ne peuvent avoir que des valeurs discrètes de leur énergie de liaison. La théorie de Bohr de l'atome a reçu une confirmation expérimentale directe par l'expérience de Franck et Hertz.

### B-1- Spectres optiques (atomiques)

L'expérience a montré qu'un atome ne peut émettre ou absorber que des rayonnements électromagnétiques de fréquences déterminées et discrètes.

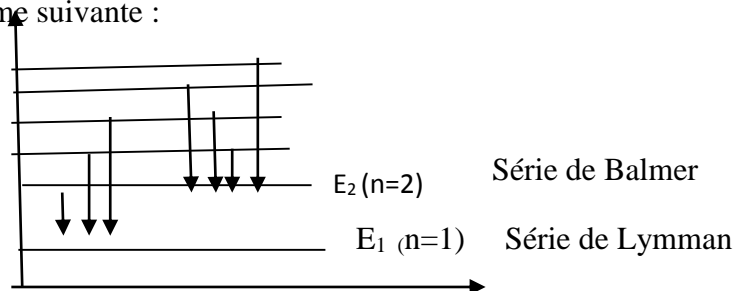
En termes de photon l'atome ne peut émettre ou absorber des photons qu'à des énergies discontinues données. Autrement dit les spectres atomiques sont des spectres de raies.



Il est possible de regrouper les raies spectrales en séries.

Les énergies des différentes raies spectrales pour une retombée des niveaux  $n$  à  $m$  peuvent être regroupées sous la forme suivante :

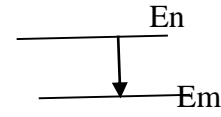
$$E = cte \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$



L'interprétation la plus simple des résultats expérimentaux consiste à admettre que dans l'atome les états électroniques possibles ont des formes  $E_n = \frac{-cte}{n^2}$

L'émission l'absorption de photons correspond à une transition entre 2 états électroniques de l'atome.

$$E_n - E_m = cte \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) : \text{Principe de combinaison de Ritz}$$



Aucun des modèles atomiques en vigueur vers les années 1900 ne pourrait expliquer une telle structure de l'atome.

En posant

$$E_n - E_m = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$$

$$\Rightarrow \frac{1}{\lambda} = RH \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) ; R_H = 1.9677107m^{-1}$$

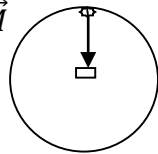
Le modèle planétaire de Rutherford (1911) qui consiste à l'existence d'un noyau autour duquel gravite des électrons liés au noyau par la force d'attraction coulombienne, n'expliquait la stabilité de l'atome.

B-2- Modèle de Bohr de l'atome d'hydrogène (1913) Niels Bohr a conçu un modèle planétaire de l'atome où la stabilité de l'atome est prise en compte (justifiée).

- Postulat 1 de Bohr : de toutes les orbites (trajectoires) Bohr a admis que seules certaines d'entre elles correspondant à des états énergétiques de l'atome sont possibles.
- Postulat 2 : les états énergétiques de l'atome sont stables ou stationnaires (pas de rayonnement comme l'exige l'électromagnétique classique)
- Postulat 3. Ces états énergétiques sont définis par une condition de quantification
- $\|\vec{L}_o\| = n\hbar. n \in N^* \text{ et } \hbar = \frac{h}{2\pi}$
- Postulat 4 : Loi des fréquences de Bohr :  $h\nu = E_n - E_m$

$$\vec{F}_e = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^3} \vec{r}$$

$$\vec{r} = \overrightarrow{OM}$$



Le modèle de Bohr sur l'atome de H : 1 modèle semi-classique (existence des trajectoires circulaires de l'électron et quantification de moment cinétique).

• **Etude de ce modèle ( de Bohr ):** (Mécanique classique)

-La force est centrale donc le mouvement est plan et  $\vec{L}_o$  : moment cinétique par rapport O (centre du cercle) est constant

$-\vec{L}_o = \overrightarrow{OM} \wedge \vec{p}$  avec  $\vec{p}$  : quantité de mouvement

-Energie totale  $E = E_c + E_p = \frac{1}{2} m v^2 + E_p = \frac{1}{2} m v^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$

-l'orbite est circulaire ou elliptique  $\vec{F}_e = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^3} \vec{r} = m\vec{a} \rightarrow a_t = 0 = a_\theta$  (accélération tangentielle). L'accélération se réduit à l'accélération normale ( $\vec{a}_r$ )

- En coordonnées polaires  $\vec{OM} = \vec{r}$  et  $\vec{v} \begin{bmatrix} 0 \\ r\dot{\theta} \end{bmatrix}$  et  $\vec{a} \begin{bmatrix} \ddot{r} - r\dot{\theta}^2 \\ 2\dot{r}\dot{\theta} + r\ddot{\theta} \end{bmatrix} = 0$

$$\dot{\theta} = \text{constante}$$

-  $a_r = -r\dot{\theta}^2$  soit  $|\vec{F}_e| = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^3} = m r \dot{\theta}^2$ ; on a alors  $\dot{\theta}^2 = \frac{e^2}{4\pi m \epsilon_0 r^3}$

-  $\vec{v}^2 = (r\dot{\theta})^2 = \frac{e^2}{4\pi m \epsilon_0 r}$  et l'énergie cinétique  $E_c = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r}$

-  $E = \frac{1}{2} m v^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r}$

$$|\vec{L}_o| = |\vec{OM} \wedge \vec{p}| = m v r = n \hbar \rightarrow v = \frac{n \hbar}{m r}; m \vec{v}^2 = \frac{n^2 \hbar^2}{m r^2} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

on obtient  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_n = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m e^2} \mathbf{n}^2$  et  $\mathbf{v}_n = \frac{n \hbar}{m r} = \frac{1}{n} \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar} \right)$ ; avec  $\epsilon_0 = 8,854.10^{-12}$  et  $\hbar = 1,054588.10^{-34}$

On trouve  $v_1 = 2,26.10^6 \text{ m.s}^{-1}$  ( dans la structure atomique les électrons ne sont pas relativistes )

et l'énergie totale  $E_n = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r} = -\frac{1}{2} \frac{m e^4}{(4\pi\epsilon_0 \hbar)^2 n^2}$

$$E_n \approx -\frac{13,6 \text{ eV}}{n^2}$$

•Emission de rayonnement par l'atome d'hydrogène

Lorsque l'e<sup>-</sup> quitte le niveau  $n_2$  pour aller au niveau  $n_1$ , ( $n_2 > n_1$ ) il émet un rayonnement électromagnétique de longueur d'onde  $\lambda$  tel que :  $E_{n_2} - E_{n_1} = \frac{hc}{\lambda}$

En tenant compte de l'expression de l'énergie  $E_n$  établie précédemment

On obtient  $\frac{1}{\lambda} = \frac{1m}{2hc\hbar^2} \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) = R \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$  avec  $R = \frac{1m}{2hc\hbar^2} \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2$  : constante de Rydberg

Remarque 1 : les résultats établis précédemment supposent que le noyau est fixe que l'e<sup>-</sup> décrit une trajectoire circulaire autour du noyau.

Remarque 2 : si on tient compte du mouvement du noyau, il faut remplacer m par  $\mu = \frac{mM}{m+M}$  masse réduite et r distance du centre de masse à l'e<sup>-</sup>

Remarque 3 : atomes hydrogénoïdes

Noyaux de charge +Ze autour duquel gravite un électron ;

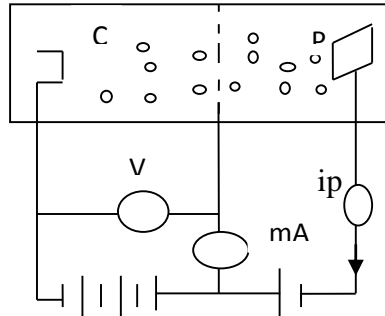
La force  $\vec{F}_e = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^3} \vec{r}$  et  $E_n = -\frac{1}{2} \frac{\mu Z^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0 \hbar)^2 n^2}$

### Limites du modèle de Bohr

- Les effets relativistes sont négligés dans ce modèle :  $v_n = \frac{1}{n} \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar} \right)$
- Les orbites sont des trajectoires circulaires ou trajectoires elliptiques (Bohr – Sommer FELD) (hypothèse non admise en Mécanique Quantique)
- Bohr ne tient pas compte du spin
- B-3 -Expérience de Franck et Hertz (1914)

Il s'agit de l'observation directe de la quantification des énergies de liaison des atomes (excitation des atomes par des électrons accélérés)

- Schéma de principe



Dans cette expérience une cathode C pour émission d'électrons par effet thermoélectronique est placée dans un four à température convenable (200°C). Il contient de la vapeur de mercure (Hg)

Le métal dans les conditions, est à l'état monoatomique.

La grille G est polarisée positivement par rapport à la cathode émissive et crée un champ électrostatique capable d'accélérer les électrons en leur communiquant une certaine énergie.

Un potentiel de freinage est appliqué entre la plaque P qui se trouve polarisée négativement par rapport à la grille G.

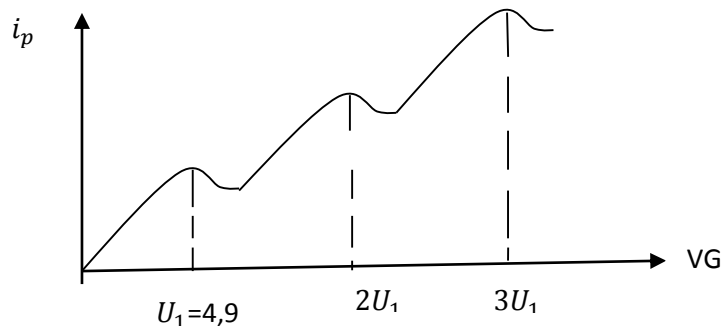
L'énergie cinétique acquise entre la cathode et la grille par les électrons est égale  $E_c = e \cdot VG$  ; si on désigne par  $VG$  la tension positive de la grille par rapport à la cathode.

Le potentiel de freinage (car le champ créé entre la plaque et la grille décélère le mouvement des électrons) entre la grille et la plaque est faible de l'ordre 0,5 V.

Les électrons ayant traversé la grille avec une vitesse trop faible n'arrivent pas à vaincre la barrière de potentiel qui les sépare de la plaque et ne passent pas donc dans le micro-ampèremètre ( $\mu A$ ) (ces électrons ont cédé leur énergie aux atomes)

Lorsqu'on augmente progressivement le potentiel d'accélération entre la cathode et la grille, les électrons, alors doués d'une énergie plus grande parviennent à vaincre le champ antagoniste qui les repousse et l'intensité du courant plaque augmente d'abord régulièrement, puis tombe brusquement quand  $VG$  atteint la valeur  $U_1 = 4,9 V$

Si on continue d'augmenter la tension accélératrice, le courant croît de nouveau, puis retombe une nouvelle fois quand  $VG = 2U_1 = 9,8 V$  et ainsi de suite, avec une nouvelle chute pour  $VG = 3U_1 = 14,7 V$



Interprétation :

Dans leur mouvement (les électrons) entre la grille et la cathode les  $e^-$  entrent en collision avec les atomes de mercure.

- Tant que l'électron accéléré n'a pas d'énergie suffisante pour changer l'état interne de l'atome qu'il rencontre, il se produit une collision élastique au cours de laquelle l'électron rebondit en conservant pratiquement son énergie, car il est beaucoup plus léger que l'atome qu'il percute : le transfert d'énergie est négligeable.
- Par contre lorsqu'on augmente suffisamment la tension accélératrice, les électrons ont assez d'énergie pour provoquer une modification de l'état interne de l'atome, subissant de ce fait des collisions inélastiques au cours desquelles ils perdent tout ou une partie de l'énergie cinétique, si bien qu'ils ne sont plus à même de franchir la barrière de potentiel jusqu'à la plaque.



Au cours de cette diffusion inélastique l'atome passe de son état fondamental à un état excité tel que le gain soit d'énergie soit  $\Delta E$ .

Conséquence : le courant plaque décroît.

Si on augmente à nouveau la tension, un nombre de plus en plus grand d'électrons ainsi <<revigorés>> peuvent atteindre la plaque, jusqu'au moment où certains électrons, suffisamment accélérés ont assez d'énergie pour provoquer une deuxième modification de l'état énergétique interne de l'atome : le courant plaque baisse à nouveau. Et ainsi de suite.

**Conclusion : les atomes ne peuvent émettre ou absorber que des quantités discrètes d'énergie.**

### Chapitre III : Dualité Onde- Corpuscule

#### A- Cas des ondes électromagnétiques

##### A-1 – Aspect ondulatoire du rayonnement électromagnétique

- L'échelle des ondes électromagnétiques s'étend des ondes hertziennes aux radiations de hautes fréquences X et  $\gamma$  soit une longueur d'onde dans le vide  $0,01\text{nm} \leq \lambda \leq 20\text{km}$
- La théorie électromagnétique de Maxwell trouve une confirmation expérimentale dans le phénomène de propagation, d'interférences et de diffraction

- la théorie ondulatoire de Maxwell postule l'existence de champs qui sont des fonctions des variables d'espace et de temps  $\vec{E}(\vec{r}, t)$  et  $\vec{B}(\vec{r}, t)$

*Cette propriété est générale ; dans tout signal ou onde deux grandeurs physiques se propagent, les variations de l'une engendrent les variations de l'autre, ce qui provoque une perturbation de proche en proche. La propagation d'une onde c'est comme l'image donnée par une corde dont on imprime une extrémité*

*Une onde électromagnétique est un modèle utilisé pour représenter le rayonnement électromagnétique*

- Ces champs satisfont aux équations de propagation appelées équations d'onde ; ce sont des équations aux dérivées partielles.

Exemple : dans le vide (il n'y a pas de charges et de courants)

$$\Delta \vec{E} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = 0 \quad \text{et} \quad \Delta \vec{B} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{B}}{\partial t^2} = 0$$

- Les équations de propagation sont linéaires et cette propriété de linéarité permet la superposition de deux ondes satisfaisant aux équations de propagation ce qui explique les phénomènes d'interférences.

Un exemple d'onde de propagation est l'onde plane. En considérant que les plans d'onde sont perpendiculaires à l'axe  $ox$  on peut écrire  $\vec{E}(x, t) = \vec{E}_0 \cdot e^{i(kx - \omega t)}$  avec  $\vec{E}_0$  parallèle à  $oy$

Dans l'espace  $\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}_0 \cdot e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)}$   $\vec{k}$  : vecteur d'onde ; direction de la propagation

La phase de l'onde est caractérisée par  $\phi = x - \omega t$  ; les plans de phase se déplacent se déplacent le long de l'axe  $ox$  avec la vitesse appelée vitesse de phase  $v_\phi = \frac{\omega}{k}$

## A-2 – Aspect corpusculaire du rayonnement électromagnétique

Nous avons vu précédemment que certains phénomènes physiques (effet photoélectrique, effet Compton, rayonnement du corps noir, absorption ou «émission de rayonnement par les atomes ect ... ) s'interprètent convenablement que dans le cas d'une structure corpusculaire de rayonnement.

- Pour rendre compte du rayonnement électromagnétique du corps noir, Planck a postulé la quantification des échanges d'énergie entre rayonnement et la matière.
- L'hypothèse de Planck fut considérée d'abord comme un artifice de calcul conduisant un résultat en accord avec l'expérience (rayonnement du corps noir)

En effet Planck ne formulait aucune hypothèse sur la nature du rayonnement électromagnétique ; c'est Einstein en 1905 qui postule que le rayonnement électromagnétique est constitué de **corpuscules appelés photons d'énergie  $E_\nu = h\nu$**

• La relation entre les caractères ondulatoire et corpusculaire du rayonnement électromagnétique sont :

$$\text{Onde : } \omega = 2\pi\nu \quad \lambda = \frac{c}{\nu} \quad \mathbf{k} = \frac{2\pi}{\lambda}$$

$$\text{Particule : } E_\nu = h\nu ; \text{ impulsion } \mathbf{p}_\nu = \frac{E_\nu}{c} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda} = \hbar\mathbf{k}$$

$\vec{p}_\nu = \hbar \vec{k}$	$\vec{p}_\nu$ : impulsion de la particule , $\vec{k}$ : vecteur d'onde
$E = \hbar\omega$	$E$ : énergie de la particule, $\omega$ : pulsation de l'onde

Ainsi la lumière est une onde définie par une fonction d'onde  $\psi(x,t) = \psi_0 e^{i(kx - \omega t)}$  qui guide un corpuscule (photon) d'énergie  $E = \hbar\omega$  de quantité de mouvement  $\vec{p} = \hbar\vec{k}$

### A-3 Lien entre l'aspect ondulatoire et l'aspect corpusculaire

- L'onde électromagnétique présente l'aspect ondulatoire et l'aspect corpusculaire et sont inséparables. Ces deux aspect ne sont nullement contradictoires : ils se complètent suivant le cas c'est ou l'autre qui devient prépondérant.

- L'onde permettant de calculer la probabilité pour qu'un corpuscule se manifeste, la prévision sur le comportement d'un photon est probabiliste

- L'information sur un photon à l'instant t est donné par  $E(r,t)$  solution des équations de Maxwell ,  $E(r,t)$  est l'amplitude de probabilité et  $|E(r,t)|^2$  est la densité de probabilité .

## B- Généralisation de la dualité onde-corpuscule aux particules atomiques

### B-1 Onde associée à une particule

En 1923 Louis DE Broglie propose de généraliser aux particules matérielles la dualité onde – corpuscule caractérisant le rayonnement électromagnétique.

Broglie associe à toute particule matérielle en mouvement une onde de pulsation  $\omega$  et de vecteur d'onde  $\vec{k}$  . Il admet que les relations de correspondance entre grandeurs ondulatoires et corpusculaires des particules matérielles sont les mêmes que les corpuscules du rayonnement électromagnétique. Autrement dit pour une particule (  $E, \vec{p}$  ) on peut associer une onde tel que  $E = \hbar\omega$  et  $\vec{p} = \hbar\vec{k}$  soit  $p = \frac{h}{2\pi} \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{h}{\lambda}$

Soit

$\lambda_B = \frac{h}{p}$	$\lambda_B$ : Longueur d'onde de Broglie
---------------------------	--

Cette relation est valable pour les particules matérielles : électron, protons, neutrons .....et pour les particules sans masse (photons...)

Exemple 1 : une balle de tennis de masse 100g est lancée avec une vitesse  $v=20\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$

La longueur d'onde de l'onde associée au mouvement de la balle selon l'hypothèse de

Broglie est  $\lambda = \frac{h}{p} = \frac{6,6310^{-34}}{0,1;20} = 3,315 \cdot 10^{-34} \text{m}$  :  $\lambda$  est très petit même par rapport aux

dimensions atomiques ; **on conclut qu'on ne peut pas mettre en évidence le caractère ondulatoire des mouvements des objets macroscopiques**

Exemple 2 : On utilise les tensions accélératrices pour obtenir des ondes électroniques de courtes longueurs d'onde pour faire fonctionner les microscopes électroniques.

Ainsi pour des électrons accélérés par une tension de 10kV on a  $E_c=10\text{keV}$

On a :  $\frac{E_c}{E_0} = \frac{10^4 \text{eV}}{0,511 \cdot 10^6} = 2\%$  ;  $E_0$  : énergie au repos des électrons

Ce rapport étant très faible devant 0,1 : les lois de la mécanique classique sont applicables

à ces électrons soit  $p=mv = \sqrt{(2m_e U)}$  et  $\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{(2m_e U)}} = \frac{6,6310^{-34}}{\sqrt{(2 \cdot 9,11 \cdot 10^{-31}; 1,6 \cdot 10^{-19} \cdot 10^4)}} =$

0,123Å

Avec les microscopes électroniques on est déjà parvenu à une limite de séparation atteignant environ 5Å permettant ainsi de rendre visible des structures très fines de grosses molécules protéiques , des virus alors que le meilleur microscope optique permet d'atteindre une limite de séparation voisine de 0,2µm=2000Å

Onde – Corpuscule

- la lumière est une onde définie par une fonction d'onde  $\psi(x)=\psi_0 e^{i(kx-\omega t)}$  qui guide un corpuscule ( photon) d'énergie  $E=\hbar\omega$  et de quantité de mouvement  $\vec{p} = \hbar\vec{k}$

- la particule matérielle (électron par exemple) d'énergie  $E$  et de quantité de mouvement  $p$  est accompagnée d'une onde de pulsation  $\omega = \frac{E}{\hbar}$  et de longueur d'onde  $\lambda = \frac{h}{p}$  et de vecteur d'onde  $\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$  ; cette fonction peut être sous la forme  $\psi(x)=\psi_0 e^{i(kx-\omega t)}$

Particule classique et particule quantique

Particule classique : si sa vitesse  $V \ll c$  et son mouvement on ne peut pas être associé une onde.

Particule quantique : si à son mouvement on peut associer une onde

Particule relativiste : sa vitesse  $V$  est voisine ou égale à  $c$  (pour les photons)

## B-2 Confirmations expérimentales de l'hypothèse de de Louis De Broglie

A la conception du comportement dynamique classique des particules Broglie a apporté une nouveauté. En effet ayant l'habitude d'appréhender les objets matériels avec nos sens on est naturellement conduit à attribuer à cet objet une forme , une dimension bien définie et ainsi qu'une localisation dans l'espace .Ceci amène les constituants

élémentaires tel que les électrons ont également des positions et une géométrie bien déterminée. Il s'agit là d'une extrapolation.

De nombreuses expériences ont montré que cette extrapolation n'était pas correcte et ont confirmé l'hypothèse de Broglie. La plus célèbre est l'expérience de diffraction d'électrons par un réseau cristallin en 1926 par Davison et Germer.

### B-2-a Diffraction des rayons X par un cristal : loi de Bragg

Un cristal est constitué d'une juxtaposition régulière et quasi infinie dans l'espace d'une unité de structure appelée maille la plus simple est cubique.

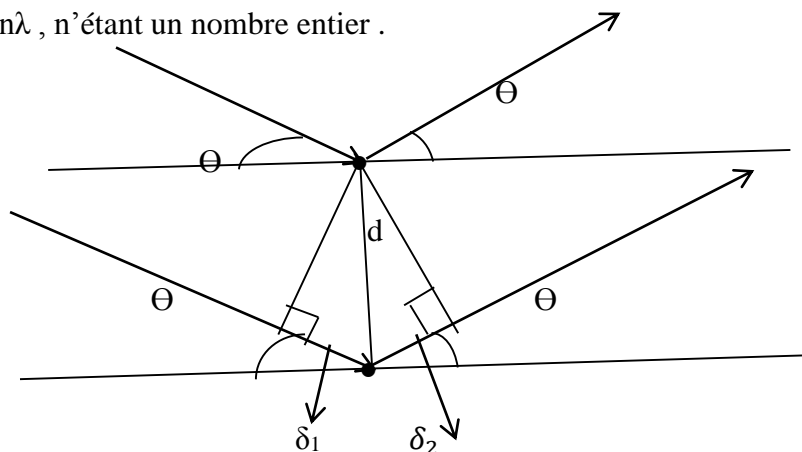
La diffraction des ondes lumineuses est possible en utilisant des ouvertures dont les dimensions sont du même ordre de grandeur que les longueurs d'onde de ces radiations ( $l \leq 3\lambda$ )

Par analogie on peut tenter de réaliser une diffraction des rayons X en utilisant un réseau dont les dimensions soient diffractant de l'ordre de l'angström : c'est le cas de la maille d'un réseau cristallin.

Un cristal (exemple KCl :  $3,14\text{\AA}$ ) recevant un faisceau de rayons X ( $0,01\text{\AA} \leq \lambda \leq 60\text{\AA}$ ) est transparent à ces rayons. Ils pénètrent donc dans le cristal (indice de réfraction est supérieure à 1). Chaque particule du réseau diffuse ou diffracte une partie du rayonnement reçu et le faisceau de rayons X diffracté dans une direction donnée de sa diffraction par toutes les particules du réseau. L'étude théorique complète a confirmé les hypothèses de Bragg qui sont les suivantes :

- Les rayons X se réfléchissent sur les plans réticulaires d'un réseau cristallin comme un miroir partiellement transparent.
- On obtient **un renforcement** du faisceau diffracté au c'est-à-dire **d'interférences constructives** dans une direction donnée si les rayonnements réfléchis sur les plans

réticulaires successifs d'une même famille présentent entre eux une différence de marche  $n\lambda$ ,  $n$  étant un nombre entier.



La différence de marche entre les deux faisceaux est  $\delta = \delta_1 + \delta_2 = d \sin \Theta + d \sin \Theta = 2d \sin \Theta$

On obtient un renforcement du faisceau diffracté dans la direction  $\Theta$  si tous les composants sont en phase c'est-à-dire si  **$2d \sin \Theta = n\lambda$  ; soit  $\delta = 2d \sin \Theta = n\lambda$**

$n$  est un nombre entier et est appelé ordre d'interférences ; cette expression est la formule qui traduit la loi de Bragg

#### B-2-b Diffraction des "ondes de matière"

Davisson et Germer ont substitué aux faisceaux de rayons X par un faisceau d'électrons accélérés par une différence de potentiel.

La figure de diffraction obtenue avec un faisceau d'électrons est semblable (au sens géométrique) à celle obtenue sur le même cristal avec les rayons X

Il a été établi que le flux de d'électrons diffracté présente une figure d'interférences constructives ; chaque fois que la relation de Bragg est satisfaite.

Ce type d'expériences de Davisson et Germer a été répété avec les particules plus lourdes que les électrons tels que les protons, les neutrons, les particules  $\alpha$ , etc...

Les longueurs d'onde déterminées à partir de l'expérience sont en accord avec les longueurs d'onde de Broglie

#### Complément

##### *Relation de Broglie*

*La longueur d'onde de Broglie d'une particule est en général très petite*

*Pour des  $e^-$  accélérés par une différence de potentiel de 100 volts par exemple on trouve*

$$E = 100 \text{ eV} \approx 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J} \quad \text{et } m = m_e = 0,91 \cdot 10^{-31} \text{ kg} \quad ; \quad \lambda = \frac{h}{\sqrt{2mE}} = 1,2 \cdot 10^{-10} \text{ m} = 1,2 \text{ \AA}$$

*On trouve de même pour des  $e^-$  peu énergétiques une longueur d'onde de l'ordre de celle des rayons X.*

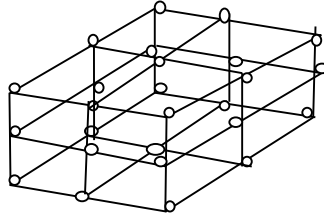
*Pour des protons de même énergie  $m_p = 1,6710^{-27} \text{ kg}$  ;  $\lambda_p = 3 \cdot 10^{-12} \text{ m} = 0,03 \text{ \AA}$*

*Le rayonnement électromagnétique correspondant appartient au domaine rayonnement  $\gamma$ .*

*La longueur d'onde associée au mouvement de l'électron est comme nous venons le voir, de l'ordre de grandeur de l'espacement interatomique dans les molécules et les cristaux. C'est pourquoi il est pratiquement impossible d'observer un phénomène d'interférences avec les*

fentes de Young. Par contre on peut utiliser la diffraction par les plans réticulaires d'un cristal comme pour les rayons X de longueur d'onde semblable (on admet qu'il y a diffraction tant que la largeur de l'ouverture  $l$  est inférieure à  $3\lambda$   $l \leq 3\lambda$ ).

Un métal est un réseau tridimensionnel d'atomes régulièrement espacés. On aperçoit aisément que les atomes forment cet édifice des alignements et des plans réticulaires tels que ceux qui apparaissent dans la figure suivante



Chaque atome d'un plan réticulaire peut diffuser une fraction d'une onde incidente tombant sur le cristal.

### B-3 Notion de fonction d'onde

Au mouvement de toute particule matérielle (à l'échelle atomique) est associée une onde représentée par une fonction d'onde  $\psi(\vec{r}, t)$  dépendant des variables d'espace et de temps.

● Postulat de Born : La probabilité de trouver la particule au point M (x,y,z) à l'instant t siuété dans un élément de volume  $dV = dx dy dz$  est donnée par

$$dP = \psi^*(x,y,z,t) \cdot \psi(x,y,z,t) \cdot dx dy dz = |\psi(x,y,z,t)|^2 dV$$

La densité de probabilité est  $\frac{dP}{dV} = \psi^*(x,y,z,t) \cdot \psi(x,y,z,t)$  : probabilité par unité de volume.

Par ailleurs ce postulat indique ou caractérise l'interprétation probabilistique de la mécanique quantique.  $\int dP = \iiint |\psi(x,y,z,t)|^2 dV = 1$ , condition de normalisation de la fonction d'onde.

Si la fonction d'onde dépend de x et t :  $\psi(x,t)$  on a :  $dP = \psi^*(x,t) \cdot \psi(x,t) dx = |\psi(x,t)|^2 dx$  et  $\int |\psi(x,t)|^2 dx = 1$  ;  $|\psi(x,t)|^2$  : densité de probabilité par unité de longueur

Remarque :  $\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x,t)|^2 dx$  est finie si on a ;  $|\psi(x,t)|^2 = 0$  lorsque  $x \rightarrow \pm\infty$

#### 3-1 L'onde plane

C'est un exemple particulièrement simple de la fonction d'onde dont l'expression est

$$\psi(\vec{r}, t) = A \cdot e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)} = A \cdot e^{i\left(\frac{\vec{p}\vec{r}}{\hbar} - Et\right)}$$

on peut associer une telle onde caractérisée par un vecteur d'onde  $\vec{k}$  et une pulsation  $\omega$  bien déterminés à une particule libre d'énergie E et de quantité de mouvement  $\vec{p}$  se déplaçant sur la direction commune à  $\vec{p}$  et  $\vec{k}$  ;  $E = \hbar\omega$  et  $\vec{p} = \hbar\vec{k}$

Calcul de la probabilité de présence :  $dP = |\psi(x, y, z, t)|^2 dV = |A|^2 dV$  ;  $\frac{dP}{dV} = |A|^2$  : densité de probabilité est uniforme en tout point. **On ne peut pas localiser la particule dans l'espace.**

$\int dP = |A|^2 \int dV$  : la fonction d'onde n'est pas de carré sommable – elle n'est pas normalisable.

Cette onde donc ne peut représenter un état physique pour la particule ( de même en optique une onde plane monochromatique n'est pas physiquement réalisable ). Par contre , une superposition d'ondes planes comme  $\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) e^{i(kx - \omega(k)t)} dk$

peut parfaitement être de carré sommable.

### 3-2 Notion de paquet d'onde

L'onde plane monochromatique d'extension infinie ne peut être une solution physiquement acceptable à l'équation de propagation des ondes. On peut construire une solution physiquement acceptable en superposant plusieurs ondes planes correspondant à des fréquences voisines.

#### 3-2-1 Cas de deux ondes de fréquences voisines

Soient  $\psi_1(x, t) = A e^{i(k_1 x - \omega_1 t)}$  et  $\psi_2(x, t) = A e^{i(k_2 x - \omega_2 t)}$  ;  $k_1 = k_0 - \Delta k$  et  $k_2 = k_0 + \Delta k$

Avec  $\frac{\Delta k}{k_0} \ll 1$  ;  $\omega_1 = \omega_0 - \Delta\omega$  et  $\omega_2 = \omega_0 + \Delta\omega$

La superposition de ces deux ondes conduit à une fonction d'onde  $\psi(x, t) = \psi_1(x, t) + \psi_2(x, t)$

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

$\psi(x, t) = 2A \cos(\Delta k x - \Delta\omega t) \cdot e^{i(k_0 x - \omega_0 t)}$  ; l'amplitude de  $\psi(x, t)$  est maximale pour  $\Delta k x - \Delta\omega t = 0$ . On définit la vitesse de groupe = **vitesse du maximum du paquet d'onde** par  $V_g = \frac{\Delta\omega}{\Delta k}$  et la vitesse de phase  $V_\phi = \frac{\omega}{k} =$  **vitesse de propagation du plan d'onde** = vitesse de propagation des points ayant la phase constante.

*Plan d'onde : points d'un plan ayant même phase et même amplitude*

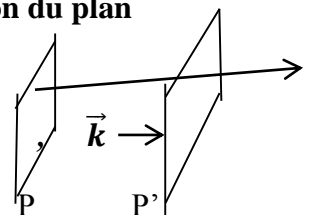
Ce sont des points d'abscisses  $x$  tel que  $\varphi = kx - \omega t =$  constante

Soit  $x = \frac{\varphi + \omega t}{k}$  ;  $dx = \omega \frac{dt}{k}$  ;  $\frac{dx}{dt} = \frac{\omega}{k}$  : vitesse de phase

#### 3-2-2 Le paquet d'onde

C'est la superposition de plusieurs ondes de fréquences voisines

$\Psi(x, t) = A \sum_i^n (e^{i(k_i x - \omega_i t)})$  si  $\Delta k$  et  $\Delta\omega$  sont petits on peut écrire  $\Psi(x, t) = \int f(k) e^{i(kx - \omega t)} dk$



- **Relation entre vitesse de groupe et vitesse de phase**

$$V_{\varphi} = \frac{\omega}{k} \text{ et } V_g = \frac{d\omega}{dk}$$

$$\text{De } V_{\varphi} = \frac{\omega}{k} \text{ on tire } \omega = V_{\varphi} \cdot k \quad ; \text{ soit } V_{\varphi} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d(V_{\varphi} \cdot k)}{dk} = V_{\varphi} \cdot \frac{dk}{dk} + k \frac{dV_{\varphi}}{dk} ; \text{ soit } V_{\varphi} + k \frac{dV_{\varphi}}{dk}$$

Exemple : cas d'une particule libre non relativiste

$$V_{\varphi} = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar\omega}{\hbar k} = \frac{E}{p} \quad \text{or } E = \frac{p^2}{2m} \quad \text{soit } V_{\varphi} = \frac{p^2}{2mp} = \frac{p}{2m}$$

$$V_g = \frac{d\omega}{dk} = V_g = \frac{d\hbar\omega}{d\hbar k} = \frac{dE}{dp} = \frac{p}{m} = v \quad : \text{ vitesse de la particule}$$

Nous regroupons ces résultats relatifs au corpuscule et onde associée

	Corpuscule classique	Particule accompagnée par une Onde : particule quantique
Quantité de mouvement	$P=mv$	$P = \frac{h\nu}{c} = \hbar k$ Avec k : vecteur de l'onde
Energie	$E = \frac{p^2}{2m}$	$E = h\nu = \hbar\omega$ : Energie de la particule Et $\omega$ : pulsation de l'onde
Vitesse	$V =$	$V_g$ : vitesse de groupe du paquet d'onde = vitesse de la particule

1- Relations d'incertitude de Heisenberg

Alors que la mécanique classique permet d'attribuer à un instant donné des caractéristiques déterminées du mouvement d'une particule telle que sa position, sa vitesse. Ce qui permet de parler de la trajectoire en mécanique classique.

La fonction d'onde donne seulement une distribution de probabilité des grandeurs considérées. Ici la notion de trajectoire est inexistante. En particulier si on s'intéresse aux variables position et de quantité de mouvement dans le cas du mouvement à une dimension, on montre qu'on ne peut pas déterminer à la fois la position et la quantité de mouvement avec une extrême précision.

$\delta x \delta k \approx 2\pi$  ;  $p = \hbar k$  ;  $\delta p_x = \hbar \delta k$  → Relation d'incertitude de Heisenberg entre la position et l'impulsion

$$\Delta x \delta p_x = 2\hbar\pi = h$$

Incompatibilité des deux grandeurs

Exemple de l'onde plane  $E = \frac{p^2}{2m}$  ;  $p$  constante →  $\delta p = 0$  soit  $\delta x = \infty$

En construisant un paquet d'onde dont on peut arriver à localiser la particule dans une région de l'espace mais pour cela il faudra superposer des ondes correspondant à une plage de valeurs de  $\vec{k}$  donc des valeurs  $\vec{p}$ . Ainsi on obtient  $\delta x \delta p_x \approx h$ . Le paquet d'onde d'extension finie de l'ordre  $\delta x$  présente un maximum se déplaçant à la vitesse  $v_g$ . Il en résulte qu'en chaque point on peut définir une durée de vie  $\delta t$  correspondant au temps mis par le paquet d'onde pour se déplacer de  $\delta x$  ; c'est à dire  $\delta t = \frac{\delta x}{v_g}$  avec  $v_g = \frac{d\omega}{dk}$  →  $\delta t = \frac{\delta x \delta k}{\delta \omega}$

$\delta t \delta \omega = \delta x \delta k = 2\pi$  ;  $\delta t \hbar \delta \omega = 2\pi \hbar$  on obtient une deuxième relation d'incertitude de Heisenberg entre l'énergie et la durée de vie dans un état :  **$\delta E \delta t = h$**

Les relations précédentes résultent de la dualité onde-corpuscule. Cet aspect souligné par Niels Bohr connu sous le nom de principe de complémentarité. Ce principe indique que les systèmes à l'échelle microscopique ne peuvent être décrits de manière complète que ferait la physique classique ainsi les grandeurs comme ( $x$ ,  $p_x$ ) sont complémentaires en mécanique quantique pour décrire la dynamique d'un système ne peuvent être déterminées simultanément avec une précision complète à l'échelle microscopique. Le principe de complémentarité s'exprime d'une manière quantitative par les relations d'incertitude de Heisenberg. **Ces relations donnent une limite inférieure** au profit des incertitudes sur la mesure de chacune des deux variables complémentaires.

Ainsi les relations s'expriment :

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar ; \Delta y \cdot \Delta p_y \geq \hbar ; \Delta z \cdot \Delta p_z \geq \hbar \text{ et } \Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar$$

**Ou encore**

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq h ; \Delta y \cdot \Delta p_y \geq h ; \Delta z \cdot \Delta p_z \geq h \text{ et } \Delta E \cdot \Delta t \geq h$$

Ces relations fournissent un moyen commode d'obtenir des ordres de grandeurs pour certaines quantités ( des estimations plus précises relevant des théories les plus élaborées )

## Applications

A- Mécanique Classique

Exercice 1 : Un grain de plomb de masse  $10^{-4}$ kg a une vitesse  $v_x$  déterminée avec une précision  $\Delta v_x = 10^{-8}$ m.s<sup>-1</sup>. Quelle est l'incertitude sur l'abscisse  $x$  ?

*Solution : La particule est classique  $p = mv_x$*

$\Delta x \Delta p_x = h$  Soit  $\Delta x = \frac{h}{\Delta p_x} = \frac{6,63 \cdot 10^{-54}}{10^{-4} 10^{-8}} = 6,6 \cdot 10^{-22} m$  :  $\Delta x$  est très faible par rapport à  $x$  donc la position du grain est déterminée avec une grande précision . Ainsi pour les particules macroscopiques le principe d'incertitude de Heisenberg n'a aucun intérêt pratique .

*Exercice 2* Un faisceau d'électrons de vitesse  $v = 10^6 m.s^{-1}$ . Cette vitesse est déterminée avec une incertitude de  $10^{-2}\%$  soit  $\Delta v_x = 10^2 m.s^{-1}$ . Quelle est l'incertitude sur sa position ?

*Solution* :  $\Delta x = \frac{h}{\Delta p_x} = \frac{1,05 \cdot 10^{-34}}{9,1 \cdot 10^{-31} 10^2} = 10^{-6} m$  ; Ce qui donne un degré de précision élevé et permet de parler de trajectoire des électrons dans un tube cathodique.

## B– Mécanique quantique

### *Exercice Cas des électrons dans un atome*

les dimensions de l'atome sont de l'ordre un  $\text{Å}$  ( $1 \text{Å} = 10^{-10} m$ ) . Il est naturel que les cas les plus défavorables l'on puisse prendre la position de l'électron avec une précision atteignant les dimensions de l'atome  $\Delta x = 10^{-10} m$ . Quelle est l'incertitude sur sa vitesse ?

*Solution* :  $m \Delta v_x \cdot \Delta x = \hbar$  soit  $\Delta v_x = \frac{1,05 \cdot 10^{-34}}{m 10^{-10}} \sim 10^6 m.s^{-1}$  et la vitesse de l'électron est de cet ordre dans l'atome (on a alors  $v_x \sim \Delta v_x$ ) :

Il est absurde de parler de la vitesse de l'électron dans l'atome, de sa trajectoire, de sa position ; il ne faut pas représenter l'électron dans l'atome comme une particule ordinaire ; c'est une particule quantique (particule à laquelle on associe une onde)

## 5 – Interprétation des relations d'incertitude

Du point de vue expérimental les relations d'incertitude affirment que les appareils dont l'expérimentateur utilise ne lui permettent pas de mesurer avec une grande précision infinie et simultanément deux grandeurs complémentaires. Ceci ne doit pas être considéré comme une insuffisance de l'opérateur et des techniques expérimentales ; c'est plutôt une loi de la nature qui fait lorsqu'on tente de mesurer avec précision l'une des grandeurs de la paire de variables complémentaires l'autre grandeur est perturbée et modifiée d'une quantité qui ne peut être calculée avec précision sans interférer l'autre mesure de la première grandeur.

Physiquement ceci résulte de l'impossibilité de séparer l'objet et de l'instrument de mesure. En effet à l'échelle macroscopique on peut imaginer un processus de mesure parfaite qui ne perturbe pas les systèmes à mesurer à l'échelle microscopique.

Même en supposant l'appareil de mesure infiniment précis, les relations d'incertitude d'Heisenberg traduisent le fait que l'intervention de l'appareil de mesure va modifier l'état dynamique du système. Cette modification jusqu'à un certain point est incontrôlable.

## II<sup>ème</sup> PARTIE ; Formulation de la mécanique quantique des particules

### Chapitre I : Les outils mathématiques de la mécanique quantique

#### A- Les fonctions d'onde

##### A-1 Introduction

La fonction d'onde permet de décrire l'état d'un système quantique à étudier. Deux cas importants sont à considérer :

1<sup>er</sup> Cas : la particule est dans un état lié, elle est alors confinée dans une région de l'espace d'extension finie (c'est le cas où les grandeurs sont quantifiées : elles prennent des valeurs discrètes) . La probabilité de présence est importante dans cette région et décroît très vite en dehors de cette région. La particule reste à distance finie et la fonction d'onde est normalisée ( $E < 0$ ) : Exemple l'électron dans l'atome est dans un état lié et  $E = -\frac{13,6eV}{n^2}$

2<sup>e</sup> Cas : Etat de diffusion (ou de collision) . Il existe une certaine probabilité de trouver la particule en tout point de l'espace . La fonction d'onde ne s'annule pas à l'infini et en général la fonction d'onde n'est pas normalisable ( $E > 0$ ) ; les grandeurs ne sont pas quantifiées : le spectre de l'énergie  $E$  est continu.

Il convient de préciser dans l'étude dynamique du système quantique comment la fonction d'onde  $\psi(\vec{r}, t)$  décrit les propriétés de ce système et comment cette fonction d'onde peut être étudiée. On se limitera le plus souvent à étudier l'état lié.

En d'autres termes nous chercherons l'équivalent de la mécanique quantique de la relation fondamentale de la dynamique de Newton  $\vec{F} = m\vec{a}$

De même que les lois de la mécanique de Newton ne sont pas démontrées mais simplement admises comme des principes justifiés à posteriori par leurs conséquences, il ne sera pas question de démontrer l'équation fondamentale de la mécanique quantique

##### A-2 Les propriétés caractéristiques de la fonction d'onde

La fonction décrit les propriétés du système considéré. Elle doit satisfaire à un certain nombre de propriétés pour décrire le système à étudier :

\*Propriété 1 : la fonction d'onde  $\psi(\vec{r}, t) = \psi(x, y, z, t) \in \mathbb{C}$  ( corps des nombres complexes)

\*propriété 2 : les fonctions d'onde  $\psi(\vec{r}, t) = \psi(x, y, z, t)$  sont des fonctions univoques c'est-à-dire à un ensemble de valeurs  $(x, y, z, t)$  ; il correspond une seule valeur de

$\psi(x, y, z, t)$

\*Propriété 3 les fonctions d'onde sont bornées dans tout l'espace où elles sont définies c'est-à-dire  $|\psi(x, y, z, t)| < M$

\*Propriété 4 : Les fonctions d'onde sont des fonctions à carré sommable c'est-à-dire

$\int (|\psi(x, y, z, t)|)^2 dv$  a une valeur finie

\*Propriété 5 : Les fonctions d'onde et leurs dérivées premières  $(\frac{\partial \psi}{\partial x}, \frac{\partial \psi}{\partial y}, \frac{\partial \psi}{\partial z})$  doivent être continues sur tout l'espace

\*Propriété 6 : Il doit exister une équation d'évolution de  $\psi$  de même qu'il existe des équations d'évolution en mécanique classique

\*Propriété 7 : Cette équation doit être linéaire et homogène car toute superposition de deux solutions doit être solution.

\*Propriété 8 : Cette équation doit être du premier ordre par rapport au temps car la connaissance de  $\psi(\vec{r}, t)$  à l'instant initial  $t$  doit suffire pour déterminer l'évolution ultérieure

Remarque : Dans certains cas certaines propriétés ne sont pas vérifiées. Lorsque cette situation se produit c'est qu'on a introduit une situation physique non acceptable ; dans ce cas on substitue une condition rendant la fonction d'onde physiquement acceptable.

3- Espace vectoriel  $L^2$  des fonctions d'onde

3-1 Ensemble des fonctions d'onde : **Espace  $L^2(a, b)$**

Les propriétés des fonctions d'onde définissent un ensemble de fonctions  $\psi$  tel que :

i- Si  $\psi \in$  à cet ensemble alors  $\lambda\psi \in$  aussi à  $L^2$   $\lambda \in \mathbb{C}$

ii- Si  $\psi_1$  et  $\psi_2 \in L^2$  et si  $\psi_1$  et  $\psi_2$  sont linéairement indépendants (c'est-à-dire  $\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2 = 0 \rightarrow \lambda_1 = \lambda_2 = 0$ ) ; et aussi  $\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2 \in L^2$

iii: On dit qu'une fonction  $\psi(x)$  est de carré intégrable sur  $(a, b)$  si l'intégrale  $= \int_a^b \psi^* \psi(x) dx =: \int_a^b \psi^2(x) dx$  existe (est finie). **L'ensemble de toutes les fonctions de carré intégrable sur  $(a, b)$  sera noté  $L^2(a, b)$  ou  $L^2$  tout court : Espace Hilbert**

Ces propriétés indiquent que l'ensemble  $L^2$  des fonctions d'onde est un **espace vectoriel** noté  $L^2$  (défini dans  $\mathbb{C}$ ) l'ensemble des fonctions  $\{\psi\} = L^2$  ; ces éléments sont des vecteurs  **$\psi(\vec{r}, t)$  est un vecteur**

3-2 Produit scalaire de deux fonctions d'onde  $\psi_1(\vec{r}, t)$  et  $\psi_2(\vec{r}, t)$

Soient deux fonctions d'onde  $\psi_1$  et  $\psi_2$ , on appelle produit scalaire de  $\psi_2$  par  $\psi_1$  qu'on note  **$(\psi_1, \psi_2) = \int \psi_1^* \cdot \psi_2 d\mathbf{v}$**   $\psi_1^*$  = fonction conjuguée de  $\psi_1$

## Notation de Dirac

$\Psi$  est noté  $|\psi\rangle = \text{ket de } \psi$  et  $\psi^*$  (conjugué de  $\psi$ ) est noté  $\langle\psi|$  bras de  $\psi$

Ainsi le produit scalaire  $(\psi_2, \psi_1) = \int \psi_2^* \cdot \psi_1 d\mathbf{v} = \langle\psi_2|\psi_1\rangle$

. Si  $\psi_1 = \psi_2 = \psi$  ;  $(\psi, \psi) = \langle\psi|\psi\rangle = \int \psi^* \cdot \psi d\mathbf{v} = \int |\psi|^2 d\mathbf{v} = \|\psi\|^2 > 0$

. Si  $(\psi_2, \psi_1) = \langle\psi_2|\psi_1\rangle = \int \psi_2^* \cdot \psi_1 d\mathbf{v} = 0$  on dit que les vecteurs sont orthogonaux ou que les deux fonctions  $\psi_1$  et  $\psi_2$  sont orthogonales

**Importance de l'orthogonalité des fonctions d'onde : La propriété d'orthogonalité des fonctions est très importante car elle permet de définir un état quelconque, non stationnaire du système par une fonction d'onde qui sera un « vecteur » repérable par ses « projections » sur des fonctions d'onde des états stationnaires constituant « une base orthogonale » :**  $|\psi\rangle = c_1|\varphi_1\rangle + c_2|\varphi_2\rangle + c_3|\varphi_3\rangle + \dots + c_n|\varphi_n\rangle$

Comme on noterait  $\vec{V} = x\vec{i} + y\vec{j} + z\vec{k}$

**Exemple de fonctions orthogonales**  $\psi_1 = \sin x$  et  $\psi_2 = \cos x \rightarrow \int_0^{2\pi} \cos x \cdot \sin x dx = 0$

Une base de  $L^2$  est constituée de  $N$  fonctions  $\varphi_i$  linéairement indépendantes tel que tout vecteur  $|\psi\rangle$  de  $L^2$  peut s'écrire  $|\psi\rangle = \sum_i c_i \varphi_i$  les  $c_i \in \mathbb{C}$ .  $N$  est la dimension de l'espace

Différentes bases existent et on passe de l'une à l'autre par des techniques de l'algèbre linéaire.

B- Notions d'opérateurs

1- Définition

Un opérateur  $\hat{A}$  est un objet mathématique qui à tout vecteur  $|X\rangle$  de l'espace  $L^2$  fait correspondre un vecteur  $|Y\rangle$  tel que  $\hat{A}|X\rangle = |Y\rangle$

Exemple 1  $\hat{A} = \frac{\partial}{\partial x}$  (opérateur dérivé) ; soit  $|\psi\rangle =$  fonction d'onde  $\cos(kx - \omega t)$

$$\hat{A}|\psi\rangle = \frac{\partial}{\partial x}(\cos(kx - \omega t)) = -k \sin(kx - \omega t) = |\psi\rangle'$$

exemple 2 ;  $\hat{A} = *$  : opérateur conjugué  $\hat{A}|\psi\rangle = |\psi\rangle^* = \psi^* = \langle\psi|$

$$:\psi(x) = A e^{ikx} : \hat{A}\psi(x) = A^* e^{-ikx}$$

Exemple 3 :  $\hat{A} = \int dx$  ;  $\hat{A}\psi = \int \psi dx$

– Un opérateur agit toujours sur la fonction d'onde située à sa droite par conséquent quand plusieurs opérateurs agissent sur une fonction l'action se fait toujours de la droite vers la gauche.

$$\text{Exemple : } \hat{A} = \frac{\partial}{\partial x} \text{ et } \hat{B} = \hat{x} \text{ (multiplication par } x \text{) et } \psi(x) = 2x^2 ; \hat{A}\hat{B}\psi(x) = \frac{\partial}{\partial x}(x\psi(x)) =$$

$$\frac{\partial}{\partial x}(2x^3)=6x^2 \text{ et } \hat{B}\hat{A}\psi(x)=x\frac{\partial}{\partial x}(2x^2)=x \cdot 4x=4x^2$$

Exemple d'opérateurs :  $\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}; \frac{\partial^2}{\partial x^2}; \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial y}; \vec{\nabla} = \vec{i} \frac{\partial}{\partial x} + \vec{j} \frac{\partial}{\partial y} + \vec{k} \frac{\partial}{\partial z}$  (opérateur nabla) ;  $\Delta = \vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$  (opérateur Laplacien)

## 2-Opérations sur les opérateurs

◦ Somme de deux opérateurs

Soient  $\hat{A}$  et  $\hat{B}$  deux opérateurs ; l'opérateur défini par  $\hat{S} = \hat{A} + \hat{B}$  est un opérateur

Si  $\hat{A} = \frac{\partial}{\partial x}$  et  $\hat{B} = \hat{x}$   $\hat{S} = \frac{\partial}{\partial x} + \hat{x}$  ; de même  $\hat{A} - \hat{B}$  est un opérateur

On peut aussi définir un opérateur  $\hat{D} = \lambda \hat{A}$  où  $\lambda$  est un réel

◦ Produit deux opérateurs :

Le produit de deux opérateurs linéaire est défini par  $(\hat{A}\hat{B})|\psi\rangle = \hat{A}(\hat{B}|\psi\rangle)$  ; on fait agir  $\hat{B}$  puis ensuite  $\hat{A}$

Soit  $\hat{M} = \hat{A} \cdot \hat{B}$  et si par exemple  $\hat{A} = \frac{\partial}{\partial x}$  et  $\hat{B} = \hat{x}$   $\hat{M} = \frac{\partial}{\partial x} \cdot \hat{x}$  et pour  $\hat{M}' = \hat{B} \cdot \hat{A} = \hat{x} \frac{\partial}{\partial x}$

◦ Commutateur de deux opérateurs

Soient deux opérateurs de l'exemple précédent  $\hat{A} = \frac{\partial}{\partial x}$  et  $\hat{B} = \hat{x}$  (multiplication par x) et  $\psi(x) = 2x^2$  ;  $\hat{A}\hat{B}\psi(x) = \frac{\partial}{\partial x}(x\psi(x)) =$

$$\frac{\partial}{\partial x}(2x^3) = 6x^2 \text{ et } \hat{B}\hat{A}\psi(x) = x\frac{\partial}{\partial x}(2x^2) = x \cdot 4x = 4x^2 \text{ on constate bien } \hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$$

On appelle commutateur de deux opérateurs  $\hat{A}$  et  $\hat{B}$  l'opérateur  $\hat{C}$  défini par

$$\hat{C} = [\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}, \text{ attention } [\hat{B}, \hat{A}] = -\hat{C}$$

**Si  $\hat{C} = 0$  on dit que les deux opérateurs commutent. Si deux opérateurs commutent ils ont même système de fonctions propres**

*Relations de Commutation :*

- Tout opérateur commute avec lui-même  $[\hat{A}, \hat{A}^n] = 0$  : exemple :  $\frac{\partial}{\partial x}$  et  $\frac{\partial^2}{\partial x^2}$
- $[\hat{A}, \hat{B}] = -[\hat{B}, \hat{A}]$
- $[\hat{A}, \hat{B} + \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{A}, \hat{C}]$
- $[\hat{A}, \hat{B} \cdot \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}]$  ; si  $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{C}$  et on a :  $[\hat{A}, \lambda \hat{B}] = \lambda \hat{C} = [\lambda \hat{A}, \hat{B}]$  ; avec

## 3-Propriétés des opérateurs

◦ linéarité : Soit un opérateur  $\hat{A}$ ,  $\lambda_1$  et  $\lambda_2$  sont deux scalaires quelconques et  $\psi_1, \psi_2$  deux fonctions d'onde  $\rightarrow |\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$

$\hat{A}$  est linéaire si et seulement si  $\hat{A}(\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2) = \lambda_1\hat{A}|\psi_1\rangle + \lambda_2\hat{A}|\psi_2\rangle$

Exemple  $\hat{A} = \frac{\partial}{\partial x}$  mais  $\hat{F}|\psi\rangle = \langle\psi|\psi^* \hat{F}$  n'est pas linéaire

En effet  $\hat{F}(\lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle) = \lambda_1^*\psi_1^* + \lambda_2^*\psi_2^* \neq \lambda_1\psi_1^* + \lambda_2\psi_2^*$

◦ Hermiticité d'un opérateur : Soit un opérateur  $\hat{A}$  et  $\psi_1$  et  $\psi_2$  deux fonctions d'onde quelconques on dit que  **$\hat{A}$  est hermitique ou  $\hat{A}$  est un hermitien ssi**

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* \cdot (\hat{A}\psi_2) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_2 \cdot (\hat{A}\psi_1)^* dx \quad \text{ou} \quad \langle\psi_1|\hat{A}|\psi_2\rangle = (\langle\psi_2|\hat{A}|\psi_1\rangle)^*$$

$$\langle\psi_1|\hat{A}|\psi_2\rangle = \langle\psi_1|\hat{A}|\psi_2\rangle, \quad \text{Exemple } \hat{A} = \hat{x} \rightarrow \hat{x}^* = \hat{x} :$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* \cdot (\hat{x}\psi_2) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_2 \cdot (\hat{x}\psi_1)^* dx = \int \psi_1^*(x\psi_2) dx$$

**Propriétés d'un opérateur hermitique**

a) Les valeurs propres sont réelles

b) Les fonctions propres sont orthogonales

4- Equations aux valeurs propres

A certains opérateurs  $\hat{A}$  on peut faire correspondre un ensemble de nombres  $a_n$  et de fonctions  $\psi_n$  définis par l'équation  $\hat{A}\psi_n = a_n\psi_n$ . Une telle équation est appelée équation aux valeurs propres.

Ainsi  $a_n$  : valeur propre et  $\psi_n$  : fonction propre

Exemple 1  $\hat{A} = \frac{\partial}{\partial x}$  et  $\psi_n = Ke^{\alpha x}$  ;  $\hat{A}\psi_n = \frac{\partial\psi_n}{\partial x} = \alpha Ke^{\alpha x} = \alpha\psi_n$  :  $\alpha$  est la valeur propre et  $\psi_n = Ke^{\alpha x}$  est la fonction propre

Exemple 2 :  $\hat{A} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$  ; chercher la fonction propre de  $\hat{A}$  avec une valeur propre  $a$

Soit  $\phi(x)$  une telle fonction :  $\hat{A}\phi(x) = a\phi(x)$  ;  $-i\hbar \frac{\partial\phi(x)}{\partial x} = a\phi(x)$  ; la résolution d'une telle équation différentielle conduit  $\phi(x) = C(t)e^{iax}$

5-valeur moyenne d'un opérateur

**La valeur moyenne de  $\hat{A}$  pour un état décrit par une fonction d'onde  $\psi$  est notée**

$$\langle\hat{A}\rangle_\psi = \frac{\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} \quad ; \quad \text{et si la fonction } \psi \text{ est normée : } \langle\psi|\psi\rangle = 1 ; \quad \langle\hat{A}\rangle_\psi = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$$

$$= \int \psi^* \hat{A} \psi dx$$

**C'est par les valeurs moyennes que la physique quantique s'identifie avec la physique classique**

**On définit de même :  $\langle A^2 \rangle = \int \psi^* \hat{A}^2 \psi dx$  et  $(\Delta A)^2 = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2$  : soit**

**$\Delta A = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}$  est appelé l'écart quadratique moyen ;**

$\langle A \rangle$  Indique l'ordre de grandeur de l'observable  $\hat{A}$  lorsque le système est dans l'état  $|\psi\rangle$ . Cependant cette valeur moyenne ne donne aucune idée sur la dispersion des résultats de la mesure que l'on peut s'attendre) obtenir dans la mesure de A. Un nombre qui rend compte de la dispersion des résultats de la mesure est l'écart quadratique moyen ; il indique la dispersion de la série de mesures autour de la valeur moyenne.

### Rappel sur les propriétés d'un opérateur hermitique

- **Les valeurs propres sont réelles**

$$\hat{A}|\psi\rangle = a\psi \quad \text{et} \quad \hat{A}^*\psi^* = a^*\psi^* \quad \hat{A} \text{ est hermitique donc} \quad \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \cdot (\hat{A}\psi) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi \cdot (\hat{A}\psi)^*$$

Soit :  $a \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \cdot (\psi) dx = a^* \int_{-\infty}^{\infty} \psi \psi^* dx$  ;  $a = a^*$  un nombre n'est égal à son conjugué que s'il est réel.

- **Les fonctions propres d'un hermitien sont orthogonales**

$$\hat{A}|\psi_1\rangle = a_1\psi_1 \quad \text{et} \quad \hat{A}|\psi_2\rangle = a_2\psi_2 \quad a_1 \neq a_2$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* \cdot (\hat{A}\psi_2) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_2 \cdot (\hat{A}\psi_1)^* dx \quad \text{car} \quad \hat{A} \text{ est hermitique}$$

$$\hat{A}^*\psi_1^* = a_1^*\psi_1^* \quad \text{soit} \quad \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* \cdot (\hat{A}\psi_2) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_2 \cdot (\hat{A}\psi_1)^*$$

$$\rightarrow a_2 \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* \cdot (\psi_2) dx = a_1^* \int_{-\infty}^{\infty} \psi_2 \psi_1^* dx \quad \text{soit} \quad (a_2 - a_1) \int_{-\infty}^{\infty} \psi_2 \psi_1^* dx = 0$$

$$a_2 \neq a_1 \quad \text{donc} \quad \int_{-\infty}^{\infty} \psi_2 \psi_1^* dx = 0 \quad : \text{les fonctions } \psi_1 \text{ et } \psi_2 \text{ sont orthogonales}$$

### **C -Opérateurs et grandeurs physiques**

Les propriétés physiques des observations correspondent exactement aux propriétés mathématiques des opérateurs

<b>Opérateurs (observable)</b>	<b>observations</b>
Valeur propre	Résultat possible des mesures
Commutateur nul	Ordre des observations n'influe pas sur le résultat de la mesure
Commutateur non nul	Ordre des observations influe sur le résultat de la mesure
Fonction propre	Etat observé

### **d- les principes fondamentaux de la mécanique quantique**

**Axiome 1** : A un instant  $t=t_0$  l'état d'un système étudié est défini et décrit par la fonction d'onde  $\psi(\vec{r}, t=t_0) \in L^2$

**En mécanique quantique on renonce à décrire le mouvement de la particule par une fonction  $x(t)$  : son abscisse en fonction du temps et on renonce à décrire la trajectoire de la particule.**

La loi du mouvement est remplacée par l'état dynamique de la particule. L'état dynamique à la date  $t$  est représenté par une fonction d'onde  $\psi(\vec{r}, t)$  dont la connaissance équivaut à la totalité de renseignements que l'on peut obtenir sur la particule et  $\int |\psi(\vec{r}, t)|^2 dv$  doit être convergente

**Axiome 2** : En mécanique quantique les observations sont représentées par les opérateurs  $\hat{A}$  (appelés observables) et il existe opérateur pour chaque grandeur physique. A chaque grandeur physique on associe un opérateur linéaire ; c'est-à-dire dont l'action transforme la fonction d'onde selon une certaine loi linéaire .

Grandeurs	Opérateurs	Résultat de l'opération
Quantité de mouvement $P_x, p_y, p_z$	$\frac{-i\hbar d}{dx}, \frac{-i\hbar d}{dy}, \frac{-i\hbar d}{dz}$	$\frac{-i\hbar d\psi}{dx}, \frac{-i\hbar d\psi}{dy}, \frac{-i\hbar d\psi}{dz},$
Energie cinétique $E_c = \frac{p^2}{2m}$	$\frac{-\hbar^2 d^2}{2mdx^2}$	$\frac{-\hbar^2 d^2\psi}{2mdx^2}$
Energie potentielle $V(x)$	$\hat{V}_x$	$\hat{V}_x\psi$
Energie totale $\frac{p^2}{2m} + V(x)$	$\frac{-\hbar^2 d^2}{2mdx^2} + \hat{V}_x$	$\frac{-\hbar^2 d^2\psi}{2mdx^2} + \hat{V}_x\psi$

Exemple : détermination de l'opérateur  $\hat{p}_x$

Soit une fonction  $\psi(x) = Ae^{i(kx - \omega t)}$

$$\hat{p}_x \psi(x) = p_x \psi(x)$$

Equation aux valeurs propres or  $p_x = \hbar k$  .D'où ;  $\hat{p}_x \psi(x) = p_x \psi(x) = \hbar k \psi$

De l'expression de  $\psi$  on  $k\psi = \frac{d\psi}{dx}$  soit

$$\hbar k \psi = \frac{\hbar d\psi}{dx} = p_x \psi$$

Des deux expressions encadrées on retrouve :  $\hat{p}_x = \frac{\hbar d}{dx} = \frac{-i\hbar d}{dx}$

ou encore  $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$

On retrouve  $\hat{p}_x^2 \psi = \hat{p}_x \hat{p}_x \psi = \frac{\hbar d}{dx} \left( \frac{\hbar d\psi}{dx} \right)$  on retrouve  $\hat{p}_x^2 = \frac{-\hbar^2 d^2}{dx^2}$

Exercice : le moment cinétique  $\vec{L} = \vec{OM} \wedge \vec{p}$

Déterminer les opérateurs associés aux différentes composantes du moment cinétique

**Axiome 3** : La mesure d'une grandeur physique A ne peut donner comme résultat possible que l'une des valeurs propres de l'opérateur  $\hat{A}$  associé à A :

- a- Le résultat d'une mesure physique est nécessairement un nombre réel donc l'opérateur associé ne peut avoir comme valeurs propres réelles de  $\hat{A}$  ; donc  $\hat{A}$  est nécessairement hermitique,  $\hat{A}$  est appelé observable
- b- Si on a une observable  $\hat{A}$  ,  $\hat{A}\psi_i = a_i\psi_i$   $a_i \in \mathbb{R}$   
 Si  $\langle \psi_i | \psi_j \rangle = \delta_{ij}$  ; l'ensemble des  $\psi_i$  constitue une base dans l'espace des fonctions d'onde et toute fonction  $\psi$  de cet espace peut s'écrire  $\psi = \sum_1^n c_i \psi_i$   
 Le spectre des valeurs propres est l'ensemble des valeurs propres de  $\hat{A}$  ; trois cas sont possibles
- Cas 1 : le spectre peut être fini si l'ensemble des  $a_i$  est fini  
 Cas 2 : le spectre est infini mais dénombrable  $a_1, a_2, \dots, a_n$   
 Dans ces deux cas on a un spectre discret ( le spectre quantique )  
 Cas 3 : c'est le cas du spectre continu : les valeurs propres  $a_i$  forment une suite infinie non dénombrable

**Axiome 4 :** Lorsqu'on effectue une mesure d'une grandeur physique A pour un système qui est dans un état décrit par la fonction d'onde  $\psi$  , la probabilité que le résultat de la mesure soit la valeur propre  $a_i$  est  $p(a_i) = |\langle \psi_i | \psi \rangle|^2 = c_i^2$  ( les fonctions d'onde étant normalisées )

**Axiome 5 :** Tous les postulats précédents indiquent comment décrire le système à un instant  $t=t_0$  . L'évolution dans le temps de la fonction d'onde est régie par l'équation de Schrödinger qui est :  $i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \hat{H}\psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V(\vec{r}, t)\psi$

II<sup>ème</sup> PARTIE

## Chapitre II – L'Equation de Erwin Schrödinger et Applications

### 1- Expression

L'équation de Schrödinger introduite comme l'un des postulats fondamentaux de la mécanique quantique permet d'étudier l'évolution dans le temps de la fonction d'onde. C'est une équation différentielle dont la résolution fournit en général une infinité de solutions. Les propriétés exigées à la fonction d'onde permettent de retenir parmi ces solutions celles qui sont compatibles avec le problème physique étudié.

Analogie avec la mécanique classique

Mécanique classique	Mécanique Quantique
La description de l'état d'un système est régie par $\sum \vec{F}_a = m\vec{a}$ (Equation de Newton)	La description de l'état dynamique d'un système est régie par $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V(\vec{r}, t)\psi = E\psi$ (Equation de Schrödinger)

avec  $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r}, t)$ , dans le cas des où  $V(\vec{r}, t) = V(\vec{r})$  ne dépend pas du temps

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r})$$

$$\text{Equation de Schrödinger s'écrit } -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\phi + V(\vec{r})\phi = E\phi$$

Pour le mouvement à une dimension et dans le cas des états stationnaires ( E indépendante du temps ); l'opérateur  $\hat{H} = \frac{-\hbar^2 d^2}{2m dx^2} + \hat{V}_x$

Pour les états stationnaires ( E indépendant du temps ) l'équation de Schrödinger s'écrit pour un mouvement à une dimension d'une particule soumise à une énergie potentielle V(x)

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

- Pour une particule libre  $V(x)=0$   $\frac{-\hbar^2 d^2 \psi}{2m dx^2} = E\psi$  soit :  $\frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi = 0$
  - Pour une particule dans l'espace avec  $V(\vec{r}, t) = V(x, y, z, t)$
- $$\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}, t)\psi = E\psi \quad \text{avec } \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

## 2-Etats stationnaires

Lorsque l'Hamiltonien  $\hat{H}$  ne dépend pas explicitement du temps la fonction d'onde pourrait se mettre sous la forme  $\psi(x, y, z, t) = \phi(x, y, z) \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$

$$\text{Soit } -i\hbar \frac{\partial \psi(x, y, z, t)}{\partial t} = E \psi(x, y, z, t) \Rightarrow i\hbar \left(\frac{-iE}{\hbar}\right) \phi(x, y, z) \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t} = E \phi(x, y, z) \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

$$\text{Soit } E \phi(x, y, z) = E \phi(x, y, z) \quad \text{ou} \quad \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta \phi(x, y, z) + V(\vec{r}) \phi(x, y, z) = E \phi(x, y, z)$$

## Quelques propriétés de l'équation de Schrödinger

- Mathématiquement l'équation  $\hat{H}\phi = E\phi$  est l'équation aux valeurs propres de l'opérateur hamiltonien ; les valeurs propres étant l'énergie du système .  
Ce problème de valeurs propres n'est défini que si on spécifie les conditions pour que  $\phi$  soit une fonction d'onde ( $\phi \in L^2$ )

Dans le cas où  $E < 0$ , l'équation aux valeurs propres n'a de solutions physiquement acceptables que pour certaines valeurs discrètes de l'énergie.

Dans le cas où  $E > 0$ , le plus souvent l'équation aux valeurs propres admet des solutions pour toutes les valeurs  $> 0$  de l'énergie  $E$ ; le spectre est dit continu. Les fonctions d'onde ne s'annulent pas à l'infini. Les fonctions d'onde ne sont pas normalisables.

- En mécanique quantique il est impossible d'introduire une force ne dérivant pas d'un potentiel; les forces dissipatives n'existent pas en mécanique quantique. Cela se comprend mieux à partir de la thermodynamique statistique. Les phénomènes dissipatifs sont par essence des processus macroscopiques basés sur les transformations irréversibles d'énergie mécanique en chaleur.

### 3-Quelques applications à la résolution de l'équation de Schrödinger à quelques mouvements à une dimension.

Pour ces exemples à un degré de liberté, il s'agit d'un point matériel se déplaçant dans une direction  $\overrightarrow{x'x}$  et soumis à l'énergie potentielle  $V(x)$ . Nous nous intéressons **aux états stationnaires**. La fonction d'onde a donc pour expression :

$$\psi(x, t) = \varphi(x) \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

Les valeurs propres de l'énergie sont données par la résolution de l'équation de

$$\text{Schrödinger indépendante du temps soit : } \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x)]\varphi(x) = 0$$

#### 3-1- Franchissement d'une barrière de potentiel – Discontinuité de potentiel

Enoncé : Soit une barrière de potentiel défini par

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } -\infty < x < 0 \\ V_0 = \text{constante} > 0 & \text{si } x \geq 0 \end{cases}$$

Considérons un courant de particules d'énergie  $E$  commune se mouvant de  $-\infty$  à  $+\infty$  sur l'axe  $Ox$  où elles rencontrent une barrière de potentiel à  $x=0$  comme l'indique la figure ci-dessous.

A- faire une description classique

B- Etude quantique

- 1- Donner les expressions des fonctions d'onde solutions de l'équation de Schrödinger dans chaque région en fonction de l'amplitude de l'onde incidente
- 2- Donner les expressions des coefficients de réflexion dans la zone I et de transmission dans la zone II

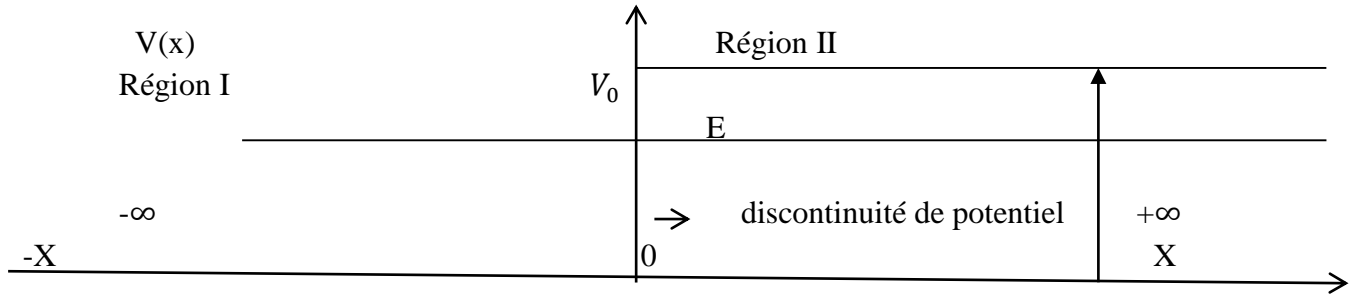
Etudions dans le cadre de la mécanique quantique le mouvement de ces particules

**1<sup>e</sup> CAS :  $E < V_0$  mais  $E > 0$**

#### Solution

◦Schéma de la barrière

$$V(x)$$



On distingue deux zones ou régions I et II

#### A- Description classique

Les particules sont libres partout à gauche, sauf au voisinage de l'origine où la discontinuité d'énergie potentielle entraîne la présence d'une force vers les  $x < 0$  ( $\vec{F}_x = -\frac{\partial V}{\partial x} \vec{i}$ ).

Supposons que la particule vient de la gauche avec une énergie  $E$  (égale à son énergie cinétique puisque  $V=0$  pour  $x=0$ ).

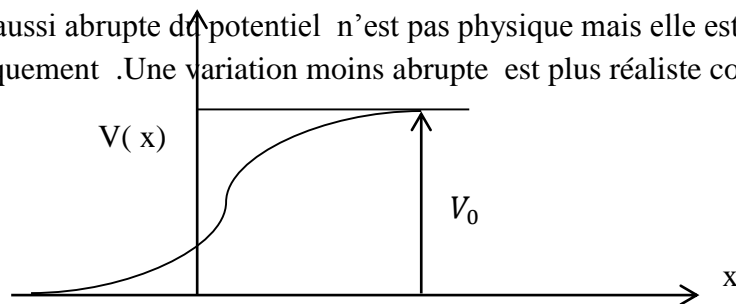
- Si  $E < V_0$ , la particule ne peut franchir la barrière ; elle se réfléchit sur cette barrière et repart vers la gauche avec la même énergie, donc la même vitesse.
- Si  $E > V_0$ , la particule franchit la barrière en perdant une partie de son énergie cinétique égale à  $V_0$ . Le mouvement se continue vers la droite avec l'énergie

cinétique  $E-V_0$  soit avec la vitesse  $v = \sqrt{\frac{2(E-V_0)}{m}}$

En résumé, du point de vue classique, il y a "réflexion totale" ou "transmission totale" de la particule selon que  $E$  est, dans l'état initial, inférieur ou supérieur à  $V_0$

Exemple physique : boule roulant sur une surface horizontale et ayant à "grimper" sur un talus, particule chargée subissant une discontinuité de potentiel.

La discontinuité aussi abrupte du potentiel n'est pas physique mais elle est plus simple à traiter mathématiquement. Une variation moins abrupte est plus réaliste comme si dessous



#### B- Etude quantique

- 1- L'énergie  $E$  est indépendante du temps ; écrivons l'équation de Schrödinger générale qui gouverne le mouvement des particules sous sa forme indépendante du temps :

$$\frac{-\hbar^2 d^2 \phi}{2m dx^2} + V(x)\phi = E\phi \quad (1) \quad ; \quad \text{il s'agit d'un mouvement à une dimension}$$

$V(x)$  a des valeurs différentes selon les régions

Région I ;  $V(x) = 0 \rightarrow$  l'équation devient (1)  $\frac{d^2 \phi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \phi = 0$  posons  $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

L'équation dans la région devient  $\frac{d^2\phi}{dx^2} + k^2\phi = 0$  les solutions :  $\phi_1 = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}$

La forme  $A_1 e^{ikx}$  est appelée onde incidente et  $B_1 e^{-ikx}$  : onde réfléchiée par la barrière située à  $x=0$ . Dans la région on a la superposition d'une onde incidente et du onde réfléchiée.

Région II  $V(x) = V_0 = \text{Constante} > E$

L'équation (1) devient  $\frac{-\hbar^2 d^2\phi}{2mdx^2} + V_0\phi = E\phi$  qui peut s'écrire  $\frac{d^2\phi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)\phi = 0$ .

Comme  $E < V_0$  on l'écrit sous la forme  $\frac{d^2\phi}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)\phi = 0$  avec  $\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E) > 0$

Dans ce cas posons que  $\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E) = \beta^2$  L'équation dans la région se présente alors

sous la forme :  $\frac{d^2\phi}{dx^2} - \beta^2\phi = 0$  les solutions  $\phi_2 = A_2 e^{-\beta x} + B_2 e^{+\beta x}$

La partie  $B_2 e^{+\beta x} \rightarrow +\infty$  lorsque  $x \rightarrow +\infty$  or les fonctions doivent être à carré sommable donc la solution physique acceptable  $\phi_2 = A_2 e^{-\beta x}$

- Les fonctions d'onde doivent être continues aux points de discontinuité ainsi que leurs dérivées. La discontinuité se produit à  $x=0$  :

$$\phi_1(0) = \phi_2(0) \rightarrow A_1 + B_1 = A_2 \quad (2)$$

$$\left. \frac{d\phi_1}{dx} \right|_{x=0} = \left. \frac{d\phi_2}{dx} \right|_{x=0} \rightarrow ik(A_1 - B_1) = -\beta A_2 \quad (3)$$

Exprimons les coefficients des différentes fonctions d'onde en fonction  $A_1$  (coefficient de la fonction d'onde incidente)

Les équations (2) et (3) conduisent : 
$$\begin{cases} A_1 + B_1 = A_2 (+\beta) \\ ik(A_1 - B_1) = -\beta A_2 \end{cases}$$
 On obtient 
$$A_1(\beta + ik) + B_1(\beta - ik) = 0$$

$$B_1 = \frac{\beta + ik}{-\beta + ik} A_1 \quad \text{et} \quad A_2 = \frac{2ik}{-\beta + ik} A_1$$

- **Cherchons la probabilité de présence de la particule dans la zone II**

La densité de présence dans la région est  $|\phi_2|^2 = A_2^2 \cdot e^{-2\beta x}$ , l'allure de cette courbe  $|\phi_2|^2(x)$  est :



En mécanique classique  $E = E_c + V$  soit  $E_c = E - V < 0$  la particule n'accède pas dans la zone or la **mécanique quantique prévoit une telle possibilité (densité de probabilité n'est pas nulle dans la zone interdite par la mécanique classique)**

**2- Densité de courant de probabilité, Coefficients de réflexion, de transmission**

### -Densité de courant- Equation de continuité

La densité de probabilité est à la position  $\vec{r}$  et à l'instant t est  $\rho(\vec{r},t)=|\psi(\vec{r},t)|^2=\psi^*\psi$

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\frac{-\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V(\vec{r},t) \quad (1) \text{ l'équation générale de Schrödinger}$$

$V(\vec{r},t)$  doit être tel que pour  $\hat{H}=\frac{-\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r},t)$  soit un hermitien

L'équation complexe conjuguée de l'équation (1) est

$$-i\hbar\frac{\partial\psi^*}{\partial t}=\frac{-\hbar^2}{2m}\Delta\psi^* + V(\vec{r},t)\psi^* \quad (2)$$

Multiplions (1) par  $\psi^*$  et (2) par  $-\psi$  et on obtient en additionnant les deux expressions obtenues Cette somme donne l'expression suivante :

$$i\hbar(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} + \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t})=\frac{-\hbar^2}{2m}(\psi^*\Delta\psi - \psi\Delta\psi^*)$$

Soit  $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}[\psi^*\psi] + \frac{\hbar^2}{2m}[\psi^*\Delta\psi - \psi\Delta\psi^*]=0$  En divisant par  $i\hbar$  on obtient

$$\frac{\partial}{\partial t}[\psi^*\psi] + \frac{\hbar}{2mi}[\psi^*\Delta\psi - \psi\Delta\psi^*] \quad , \text{ On pose } \vec{j}(\vec{r},t)=\frac{\hbar}{2mi}[\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*] \text{ densité}$$

**de courant de probabilité**

$$\text{div}\vec{j}(\vec{r},t) = \vec{\nabla}\cdot\vec{j}(\vec{r},t) \quad , \text{ on vérifie aisément } \frac{\hbar}{2mi}[\psi^*\Delta\psi - \psi\Delta\psi^*]=\text{div}\vec{j}(\vec{r},t)$$

$$\text{Soit } \frac{\partial}{\partial t}[\rho(\vec{r},t)] + \text{div}\vec{j}(\vec{r},t) = 0 \quad \text{Equation de continuité}$$

$$\text{Pour le mouvement à une dimension } \vec{j}(x,t)=\frac{\hbar}{2mi}\left[\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x} - \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\right]$$

$$\text{- Coefficient de réflexion de la barrière} \quad R = \frac{j_{\text{réfléchié}}}{j_{\text{incident}}}$$

$$\text{Coefficient de transmission} \quad T = \frac{j_{\text{transmis}}}{j_{\text{incident}}}$$

Calcul de j incident

$$\text{D'après la définition de j} \quad j_{\text{inc}} = \frac{\hbar}{2mi}\left[\psi_{\text{inc}}^*\frac{\partial\psi_{\text{inc}}}{\partial x} - \psi_{\text{inc}}\frac{\partial\psi_{\text{inc}}^*}{\partial x}\right]$$

$$\psi_{\text{inc}}=A_1e^{ikx} \quad \text{et} \quad \psi_{\text{inc}}^*=A_1^*e^{-ikx}$$

$$j_{\text{inc}} = \frac{\hbar}{2mi}\{A_1^*e^{-ikx}(ikA_1e^{ikx}) - (A_1e^{ikx})(-ikA_1^*e^{-ikx})\} = \frac{\hbar k}{m}|A_1|^2$$

$$\text{Soit } j=\rho v_g \quad (\text{ analogie classique voir cours d'électrocinétique} \quad : v_g=\frac{\hbar k}{m} \quad \text{et } \rho=|A_1|^2)$$

$$\text{On a aussi } j_{\text{réfléchié}} = \frac{\hbar}{2mi}\left[\psi_{\text{réflé}}^*\frac{\partial\psi_{\text{réflé}}}{\partial x} - \psi_{\text{réflé}}\frac{\partial\psi_{\text{réflé}}^*}{\partial x}\right]$$

$$j_{\text{réfléchié}} = \frac{\hbar}{2mi}\{B_1^*e^{ikx}(-ikB_1e^{-ikx}) - (B_1e^{-ikx})(ikB_1^*e^{ikx})\} = \frac{\hbar k}{m}|B_1|^2$$

$$\text{Soit } R = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2} \quad \text{et tenant de l'expression de } B_1 \text{ donné plus haut on trouve } R=1$$

$$\text{Donc } T=0 \quad . \text{ car } T+R=1$$

On peut vérifier  $j_{\text{trans}}=0$  . En effet

$$J_{\text{trans}} = \frac{\hbar}{2mi} \left[ \psi_{\text{trans}} * \frac{\partial \psi_{\text{trans}}}{\partial x} - \psi_{\text{trans}} \frac{\partial \psi_{\text{trans}}^*}{\partial x} \right]$$

$$\Psi_{\text{trans}} = A_2 e^{-\beta x} \quad \Psi_{\text{trans}}^* = A_2^* e^{-\beta x}$$

$$J_{\text{trans}} = \frac{\hbar}{2mi} \{ A_2^* e^{-\beta x} (-\beta e^{-\beta x}) - [A_2 e^{-\beta x} (-\beta e^{-\beta x})] \} = 0$$

Comme en mécanique classique la particule est réfléchié :  $R=1$

Toutefois, il existe une différence importante du fait de l'existence de l'onde évanescente  $\varphi_2 = A_2^* e^{-\beta x}$ , la particule a une probabilité de présence non nulle dans la région II qui, classiquement lui serait interdite. Cette probabilité décroît exponentiellement en fonction de  $x$  et devient négligeable lorsque  $x$  devient supérieur à la portée ( $\frac{1}{\beta}$ )

**Cette possibilité de présence dans la zone II où  $E < V_0$  est appelé effet tunnel**

Remarque :  $\frac{A_2}{A_1}$  est complexe, il apparaît lors de la réflexion un certain déphasage qui, physiquement, est dû au retard que prend la particule en pénétrant dans la région  $x > 0$ .

Lecture

- Ce déphasage est analogue à celui qui apparaît lors de la réflexion de la lumière sur un milieu métallique par contre il n'a pas d'analogue en mécanique classique : en mécanique classique la réflexion est instantanée.  
Cette possibilité qui est donnée à la particule de franchir une barrière d'énergie potentielle supérieure à son énergie est appelée effet tunnel inexplicable en mécanique classique. Il est appliqué dans les microscopes à effet tunnel, dans les diodes tunnels et explique entre autre l'émission d'une particule alpha par un noyau radioactif.  
L'effet tunnel explique aussi l'émission des électrons par un métal sous l'action d'un champ électrique intense et le passage du courant électrique entre deux métaux séparés par une couche d'oxyde.
- Comment expliquer que  $J$  est nul et que la probabilité de présence ne l'est pas  
Une partie du paquet d'onde pénètre dans la région II interdite classiquement puis fait demi-tour avant de repartir dans le sens négatif de l'axe  $x$  ( cette pénétration est dans la région II étant responsable du retard de réflexion .  
En régime stationnaire nous aurons dans la région II deux courants de probabilité : un courant positif qui correspond à la pénétration dans cette région d'une partie du paquet d'onde incident ; un courant négatif qui correspond au retour vers la région I de cette partie du paquet d'ondes .Ces deux courants se compensent exactement ; le résultat global obtenu est nul.  
Dans le cas d'un problème à une dimension, la structure du courant de probabilité l'onde évanescente est donc masquée par cette compensation entre deux courants opposés

**2<sup>e</sup> CAS:  $E > V_0$  ( mais  $E > 0$  )**

- Dans la zone I on obtient les mêmes équations que précédemment  
Soit

L'équation dans la région devient  $\frac{d^2 \phi}{dx^2} + k^2 \phi = 0$  les solutions :  $\phi_1 = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}$

La forme  $A_1 e^{ikx}$  est appelée onde incidente et  $B_1 e^{-ikx}$  : onde réfléchie par la barrière située à  $x=0$ . Dans la région on a la superposition d'une onde incidente et d'une onde réfléchie.

Dans la zone II

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)\phi = 0 \quad \text{on pose } k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0) > 0$$

$\Phi_2 = A_2' e^{ik_2 x} + B_2' e^{-ik_2 x}$   $A_2' e^{ik_2 x}$  : onde transmise dans la zone II et  $B_2' e^{-ik_2 x}$  : onde réfléchie dans la zone II puisque un tel obstacle est supposé situé à l'infini on retiendra que dans la région II :  $\Phi_2 = A_2' e^{ik_2 x}$

Ainsi Zone I :  $\phi_1 = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}$  et Zone II :  $\phi_2 = A_2' e^{ik_2 x}$  on pose  $k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$

- Détermination des amplitudes

$$\phi_1(0) = \phi_2(0) \rightarrow A_1 + B_1 = A_2' \quad (2)'$$

$$\left. \frac{d\phi_1}{dx} \right|_{x=0} = \left. \frac{d\phi_2}{dx} \right|_{x=0} \rightarrow ik_1(A_1 - B_1) = ik_2 A_2' \quad (3)'$$

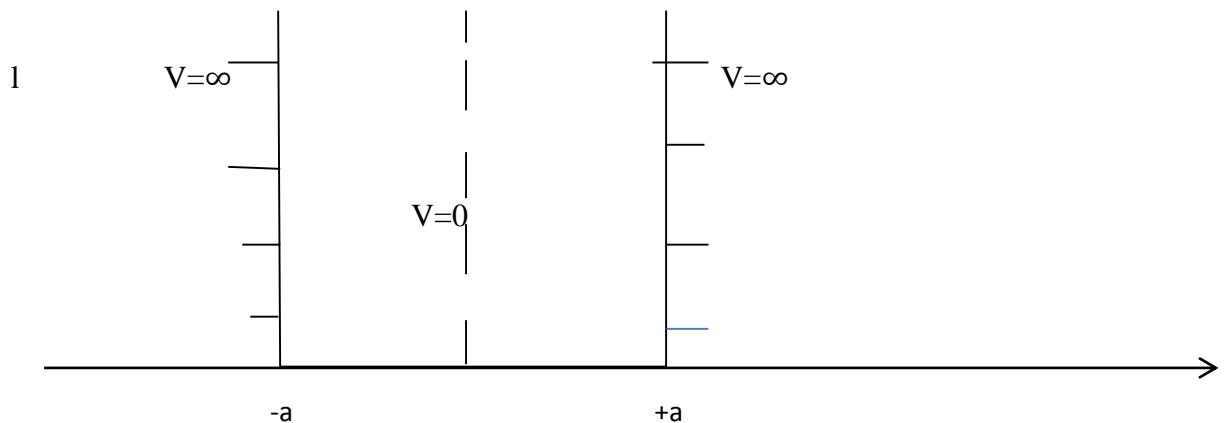
$$\text{de ces deux équations on tire } A_2' = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} A_1 \quad \text{et } B_1 = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} A_1$$

$$\text{on retrouve } R = \frac{j_{\text{Réfléchie}}}{j_{\text{inc}}} = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2} = \frac{[k_1 - k_2]^2}{[k_1 + k_2]^2}$$

$$T = \frac{k_2}{k_1} \frac{|A_2'|^2}{|A_1|^2} = \frac{k_2}{k_1} \frac{4[k_1]^2}{[k_1 + k_2]^2} = \frac{4k_1 k_2}{[k_1 + k_2]^2} \quad \text{et on vérifie que } R + T = 1$$

### 3-2 Particule liée dans un puits de potentiel infini : Puits carré infini

Soit une particule d'énergie  $E$  confinée dans un puits de potentiel à parois infinies



La largeur du puits  $l = 2a$

Le potentiel étant infini au niveau des parois ( $x = \pm a$ ) ; la particule reste confinée dans la boîte

1-Déterminer les fonctions d'onde et les valeurs de l'énergie correspondant aux états stationnaires

2-Montrer que les fonctions d'onde obtenues sont alternativement symétriques suivant la parité du nombre quantique caractérisant l'état.

3-Normer les fonctions d'onde.

Equation de Schrödinger écrite pour  $-a < x < +a$

$$\frac{-\hbar^2 d^2 \phi}{2m dx^2} + V(x)\phi = E\phi \quad \text{avec } V(x) = 0 ; \text{ soit } \frac{d^2 \phi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \phi = 0 \quad \text{posons } k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

L'équation dans la région devient  $\frac{d^2 \phi}{dx^2} + k^2 \phi = 0$  les solutions :  $\phi = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$

$\phi$  doit pour être une solution physiquement acceptable satisfaire simultanément les conditions de continuité aux frontières  $x=a$  et  $x=-a$  limitée par la barrière de potentiel infini

$\phi(a) = A e^{ika} + B e^{-ika} = 0$  et  $\phi(a) = A e^{-ika} + B e^{ika} = 0$  car la probabilité de trouver la particule aux abscisses ( $x = \pm a$ ) doit être égale à 0.

Ces conditions ne sont réalisables simultanément que pour certaines valeurs bien déterminées de  $l=2a$

$$\text{Soit: } A \cos ka + i B \sin ka + B \cos ka - i B \sin ka = 0 \quad (A+B) \cos ka + i(A-B) \sin ka = 0$$

On peut avoir :  $A=B$  ou  $A=-B$

•  $A=B \rightarrow \phi = A (e^{ikx} + e^{-ikx}) = 2A \cos kx$  ; on dit que la solution est une fonction paire.

$$\Phi(a)=0 \rightarrow 2A \cos ka = 0 \quad \text{soit } ka = (2n+1) \frac{\pi}{2} : k = (2n+1) \frac{\pi}{2a} = (2n+1) \frac{\pi}{l}$$

$$\text{L'énergie } E = \frac{(2n+1)^2 \pi^2 \hbar^2}{2ml^2} = E_n \quad \text{et } \phi(x) = 2A \cos kx = 2A \cos \left[ (2n+1) \frac{\pi}{l} x \right]$$

•  $A=-B \rightarrow \phi = A (e^{ikx} - e^{-ikx}) = 2Ai \sin kx$  solution impaire

2-Normer les fonctions d'onde.

$$\Phi(a)=0 \rightarrow 2A \sin ka = 0 \quad \text{soit } ka = n\pi : k = n \frac{\pi}{a} = 2n \frac{\pi}{l}$$

$$E = \frac{(2n)^2 \pi^2 \hbar^2}{2ml^2} = E_n \quad \phi(x) = 2A \sin kx = 2A \sin \left[ 2n \frac{\pi}{l} x \right]$$

Conditions de normalisation conduisent

Solution paire  $\phi(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \cos \left[ (2n+1) \frac{\pi}{l} x \right]$  et la Solution impaire est

$$\phi(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \left[ (2n) \frac{\pi}{l} x \right]$$

## Annexe I

### I – Espace Vectoriel des fonctions d'onde

Un vecteur d'espace ordinaire est un segment de droite orienté.

Nous noterons  $|X\rangle$  le vecteur  $X$  correspondant au vecteur d'espace de l'espace vectoriel des fonctions d'onde. Cet espace est vectoriel car :

- la somme de deux vecteurs  $|X\rangle + |Y\rangle$  est un vecteur

L'addition est une loi de composition interne (loi de groupe) car elle :

- 1- Associative  $(|X\rangle + |Y\rangle) + |Z\rangle = |X\rangle + (|Y\rangle + |Z\rangle)$
- 2- Elle possède un élément neutre (vecteur nul)  
 $(|0\rangle + |X\rangle) = (|X\rangle + |0\rangle) = |X\rangle$
- 3- Chaque vecteur  $|X\rangle$  possède un vecteur opposé  $|-X\rangle$  tel  $|X\rangle + |-X\rangle = |0\rangle$   
De plus le groupe est commutatif (abélien) :  $|X\rangle + |Y\rangle = |Y\rangle + |X\rangle$

- le produit  $\lambda|X\rangle$ , d'un vecteur  $|X\rangle$  par un scalaire  $\lambda$  appartenant aux corps des réels est aussi un vecteur. La loi de multiplication possède les propriétés suivantes

- 1- Associativité

Soient  $\lambda_1$  et  $\lambda_2$  deux scalaires quelconques :  $\lambda_1(\lambda_2|X\rangle) = (\lambda_1\lambda_2)|X\rangle$

- 2-Distributivité par rapport à l'addition de deux nombres réels

$$(\lambda_1 + \lambda_2)|X\rangle = \lambda_1|X\rangle + \lambda_2|X\rangle$$

- 3-Distributivité par rapport à l'addition de deux vecteurs

$$\lambda(|X\rangle + |Y\rangle) = \lambda|X\rangle + \lambda|Y\rangle$$

- 4- Existence d'un élément neutre ; il s'agit de  $\lambda=1$

$$\text{Car : } 1|X\rangle = |X\rangle$$

Les vecteurs  $|X_1\rangle; |X_2\rangle; |X_3\rangle; |X_4\rangle \dots\dots\dots|X_n\rangle$  sont dits dépendants si seulement si on peut trouver un ensemble de réels  $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3 \dots\dots\dots\lambda_n$  qui ne sont pas tous nuls tels que :

$$\lambda_1 |X_1\rangle + \lambda_2 |X_2\rangle + \lambda_3 |X_3\rangle + \lambda_4 |X_4\rangle \dots\dots\dots\lambda_n |X_n\rangle = 0$$

Si quel que soit  $i$   $\lambda_i = 0$  est la seule solution, ces vecteurs sont indépendants. Le nombre maximum de vecteurs indépendants est égal à la dimension de l'espace.

Un ensemble de vecteurs indépendants dont le nombre est égal à la dimension de l'espace s'appelle base.

## II- Produit Scalaire dans l'espace vectoriel des fonctions d'onde

### A-Espace des fonctions d'onde d'une particule

Introduction : Au concept classique de trajectoire ; il faut le substituer à celui d'état dépendant du temps. L'état quantique  $\psi_1(\vec{r}, t)$  d'un corpuscule tel que l'électron est caractérisé par une fonction d'onde

$\psi(\vec{r}, t)$  qui contient toutes les informations qu'il est possible d'obtenir sur la particule.  $\psi(\vec{r}, t)$  est une solution de l'équation différentielle régissant le mouvement de la particule.

$\int d^3r |\psi(\vec{r}, t)|^2 = 1$  et  $|\psi(\vec{r}, t)|^2 =$  densité de probabilité

1- Structure de l'espace des fonctions d'onde ( rappel )

a)-F est un espace vectoriel : si  $\psi_1(\vec{r}, t) \in F$  et  $\psi_2(\vec{r}, t) \in F$  ;  $\psi_2(\vec{r}, t) \in F$

et  $\lambda_1 \psi_1(\vec{r}, t) + \lambda_2 \psi_2(\vec{r}, t) \in F$

b)-Produit scalaire

A tout couple :  $\varphi(\vec{r})$  et  $\psi(\vec{r})$  pris dans cet ordre on associe un nombre complexe noté  $(\varphi(\vec{r}), \psi(\vec{r})) = \int d^3r \varphi^*(\vec{r})\psi(\vec{r}) =$  produit scalaire de  $\psi(\vec{r})$  par  $\varphi(\vec{r})$  . Cette intégrale converge si  $\varphi(\vec{r})$  et  $\psi(\vec{r}) \in F$

Propriétés

- $(\varphi(\vec{r}), \psi(\vec{r})) = (\psi(\vec{r}), \varphi(\vec{r}))^*$
- $(\varphi(\vec{r}), \lambda_1 \psi_1(\vec{r}) + \lambda_2 \psi_2(\vec{r})) = \lambda_1 (\varphi(\vec{r}), \psi_1(\vec{r})) + \lambda_2 (\varphi(\vec{r}), \psi_2(\vec{r}))$
- $(\lambda_1 \varphi_1(\vec{r}) + \lambda_2 \varphi_2(\vec{r}), \psi(\vec{r})) = \lambda_1^* (\varphi_1, \psi(\vec{r})) + \lambda_2^* (\varphi_2, \psi(\vec{r}))$
- Si  $(\varphi(\vec{r}), \psi(\vec{r})) = 0$  on dit que  $\varphi(\vec{r})$  et  $\psi(\vec{r})$  sont orthogonales
- $(\psi(\vec{r}), \psi(\vec{r})) = \int d^3r \psi^*(\vec{r})\psi(\vec{r}) =$  un nombre positif et  $\sqrt{(\psi(\vec{r}), \psi(\vec{r}))} = \|\psi(\vec{r})\|$   
=norme

- Cas d'une fonction à une variable :

a- une fonction  $f(x)$  non négative sur l'intervalle  $(a,b)$  est dite sommable sur cet intervalle si  $\int_a^b f(x)dx$  est finie.

Une fonction  $f(x)$  de signe arbitraire est sommable sur  $(a,b)$  si seulement s'il en est de même de la fonction  $|f(x)|dx$  est finie.

Dans la suite nous aurons affaire à l'intervalle fondamental  $I=(a, b)$

**b-Espace  $L^2(a,b)$  :** On dit qu'une fonction  $f(x)$  est de carré intégrable sur  $(a, b)$  si l'intégrale :  $\int_a^b f^2(x)dx$  existe ( est finie). L'ensemble de toutes les fonctions de carré intégrable sur  $(a,b)$  sera noté  $L^2(a,b)$  ou  $L^2$  tout court

- **Propriétés des fonctions de  $L^2$** 
  - a- **Le produit de deux fonctions de carré intégrable est une fonction intégrable**
  - b- **La somme de deux fonctions de  $L^2$  est une fonction de  $L^2$**
  - c- **Si  $f(x)$  appartient à  $L^2$  et si  $\lambda$  est un nombre réel quelconque , alors :  $\lambda \cdot f(x) \in L^2$   
 $L^2$  est un espace Vectoriel appelé Espace Hilbert**
  - d- **Si  $f(x) \in L^2$  et  $g(x) \in L^2$ , on a l'inégalité de Schwarz**  
$$\left[ \int_a^b f(x) \cdot g(x) dx \right]^2 \leq \int_a^b f^2(x) dx \cdot \int_a^b g^2(x) dx$$

**Le produit scalaire de deux fonctions  $f(x) \in L^2$  et  $g(x) \in L^2$  est le nombre :**  $\langle f(x), g(x) \rangle = \int_a^b f(x) \cdot g(x) dx$

**On appelle d'une fonction  $f(x)$  de  $L^2$ , le nombre non négatif**

$$\|f(x)\| = \sqrt{\langle f(x), f(x) \rangle} = \sqrt{\int_a^b f^2(x) dx}$$

- e- **Si  $f(x) \in L^2$  et  $g(x) \in L^2$   $\|f(x) + g(x)\| \leq \|f(x)\| + \|g(x)\|$**
- f- **Soient  $f(x)$ ,  $f_1(x)$ ,  $f_2(x)$ ,..... $f_n(x)$  de fonctions de carré sommable ( intégrable) sur  $(a,b)$ . Si  $\lim_{n \rightarrow \infty} \int_a^b [f_n(x) - f(x)]^2 dx = 0$ , on dit que la suite  $f_1(x)$ ,  $f_2(x)$ ,..... $f_n(x)$  converge en moyenne quadratique vers  $f(x)$**

**Si une suite  $\{f_n(x)\}$  de fonctions de  $L^2$  converge uniformément vers  $f(x)$  alors  $f(x) \in L^2$**

2-bases orthonormée discrètes dans  $F = \{u_i(\vec{r})\}$

L'ensemble  $\{u_i(\vec{r})\}$  est orthonormé si :  $(u_i, u_j) = \delta_{ij} = 0$  si  $i \neq j$  et  $= 1$  si  $i=j$

Cet ensemble constitue une base si toute fonction  $\psi(\vec{r}) \in F$  peut se développer d'une façon et d'une seule :  $\psi(\vec{r}) = \sum_i c_i u_i(\vec{r})$

$$(u_j, \psi(\vec{r})) = (u_j, \sum_i c_i u_i(\vec{r})) = c_j$$

Si la base est continue  $c_j = (u_j, \psi(\vec{r})) = \int d^3r u_j^*(\vec{r}) \psi(\vec{r})$

- Expression du produit scalaire dans une base discrète

Soient :  $\varphi(\vec{r}) = \sum_i b_i u_i(\vec{r})$  et  $\psi(\vec{r}) = \sum_j c_j u_j(\vec{r})$

$$(\varphi(\vec{r}), \psi(\vec{r})) = (\sum_i b_i u_i(\vec{r}), \sum_j c_j u_j(\vec{r})) = \sum_i b_i^* \cdot \sum_j c_j u_j(\vec{r}) = \sum_{ii} b_i^* c_i$$

En particulier  $(\psi(\vec{r}), \psi(\vec{r})) = \sum_i |c_i|^2$

Soient  $\vec{V}$  et  $\vec{W}$  vecteur physiques dans une base à trois dimensions

$$\vec{V} = \sum_i v_i \vec{e}_i \text{ et } \vec{W} = \sum_i w_i \vec{e}_i \quad \text{on a } \vec{V} \cdot \vec{W} = \sum_{i=1}^3 v_i w_i$$

B-Espace des états .Notation de Dirac

1- Une fonction  $\psi(\vec{r})$  peut être représentée par plusieurs ensembles distincts de composantes, correspondant chacun au choix d'une base

Exemple  $E_i$  base  $u_i(\vec{r})$  composantes  $c_i$ ;  $i=1,2,3,\dots,n$

La situation des fonctions d'onde est analogue à celle des vecteurs physiques dans  $(R^3)$  :

La position d'un point de l'espace peut être repérée par un ensemble de trois nombres qui sont les coordonnées par rapport à un système d'axes définis à l'avance.

Si on change de repère, au même point correspondra un autre ensemble de coordonnées.

La notion de vecteur et de calcul vectoriel permettent de s'affranchir de la référence à un système d'axes. C'est cette démarche qu'on utilise sur les fonctions d'onde

**Tout état quantique d'une particule sera caractérisé par un vecteur d'état  $\epsilon$**  à un espace abstrait E appelé espace d'état d'une particule.

Le fait que  $F \in L^2$  entraîne que E est un sous-espace de l'espace Hilbert.

En réalité l'introduction des vecteurs et de l'espace des états n'apporte pas seulement une simplification de formalisme; elle permet aussi sa généralisation. **En effet il existe des systèmes physiques dont la description quantique ne peut se faire avec une fonction d'onde** : exemple l'état de spin de l'électron.

Un des postulats fondamentaux aussi de la Mécanique quantique : l'état d'un système physique quelconque est caractérisé par un vecteur d'état appartenant à un espace E qui est l'espace des états.

2- Vecteurs « *kets* » et vecteurs « *bras* »

• Un élément quelconque ou vecteur de l'espace E est appelé vecteur « *ket* » ou plus simplement on le note  $|\psi\rangle$ , en mettant un signe distinctif. Exemple  $|\psi\rangle$  :  $|\psi\rangle \in E$

• produit scalaire

A tout couple  $(\varphi, \psi)$  ou  $(|\varphi\rangle, |\psi\rangle)$  pris dans cet ordre on associe un nombre complexe

$$(\varphi, \psi) = (|\varphi\rangle, |\psi\rangle) = \int \varphi^* \psi d^3r = \langle \varphi | \psi \rangle$$

$$\langle \varphi | : \text{bra de } \varphi \text{ et le bra associé à } \lambda_1 |\varphi_1\rangle + \lambda_2 |\varphi_2\rangle \text{ est } \lambda_1^* \langle \varphi_1 | + \lambda_2^* \langle \varphi_2 |$$

$$\text{Le bra de } \lambda |\psi\rangle \text{ (ou } |\lambda\psi\rangle) = \langle \lambda\psi | = \lambda^* \langle \psi |$$

Le produit scalaire  $(\varphi, \psi) = \langle \varphi | \psi \rangle = \langle \psi | \varphi \rangle^*$

$$(\varphi, \lambda_1 |\psi_1\rangle + \lambda_2 |\psi_2\rangle) = \lambda_1 \langle \varphi | \psi_1 \rangle + \lambda_2 \langle \varphi | \psi_2 \rangle$$

$$(\lambda_1 |\varphi_1\rangle + \lambda_2 |\varphi_2\rangle, \psi) = \lambda_1^* \langle \varphi_1 | \psi \rangle + \lambda_2^* \langle \varphi_2 | \psi \rangle$$

$(\psi, \psi) = \langle \psi | \psi \rangle$  est un réel positif ou nul si  $|\psi\rangle \neq 0$

### III- Calcul de quelques types d'intégrales

1- Calcul de  $I = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2} dx$

$$I^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2} dx \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ay^2} dy = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-a(x^2+y^2)} dx dy$$

En passant en coordonnées polaires dans le plan

$$r^2 = x^2 + y^2 ; dx dy = r dr d\theta \quad r \text{ varie de } 0 \text{ à } +\infty \text{ et } \theta \text{ varie de } 0 \text{ à } 2\pi$$

$$\text{Ainsi : } I^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ar^2} r dr \int_0^{2\pi} d\theta = 2\pi \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ar^2} r dr$$

En faisant un changement de variable en posant  $z = ar^2$  soit  $dz = 2ar dr$

$$\text{On obtient : } I^2 = \frac{2\pi}{2a} \int_0^{+\infty} e^{-z} dz = \frac{\pi}{a} \quad \text{et } I = \left(\frac{\pi}{a}\right)^{\frac{1}{2}} \quad \text{pour } a=1 \text{ on a : } I = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} dx = \pi^{\frac{1}{2}}$$

2- Autres intégrales

$$J = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-ax^2} dx = -\frac{dI}{da} = \frac{1}{2} \left(\frac{\pi}{a^3}\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$\text{Et } \int_{-\infty}^{+\infty} x^4 e^{-ax^2} dx = \frac{d^2 I}{da^2} = \frac{1}{2} \frac{3}{2} \left(\frac{\pi}{a^5}\right)^{\frac{1}{2}} ; \int_{-\infty}^{+\infty} x^{2n} e^{-ax^2} dx = \frac{d^{2n} I}{da^{2n}} = \frac{1}{2} \frac{3}{2} \left(\frac{\pi}{a^5}\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$K = \int_0^{+\infty} x e^{-ax^2} dx ; \text{ en posant } u = ax^2 \quad ; \quad x dx = \frac{du}{2a}$$

$$\text{Soit } K = \frac{1}{2a} \int_0^{+\infty} e^{-u} du = \frac{1}{2a}$$

$$L = \int_0^{+\infty} x^3 e^{-ax^2} dx = -\frac{dL}{da} = -\frac{d\left(\frac{1}{2a}\right)}{da} = \frac{1}{2a^2}$$

$$M = \int_0^{+\infty} e^{-ax} dx = \left( a > 0 \right) = \frac{1}{a} \quad \text{et } \int_0^{+\infty} x e^{-ax} dx = -\frac{d\left(\frac{1}{a}\right)}{da} = \frac{1}{a^2}$$

## Annexe II

### Introduction

La physique s'intéresse aux grandeurs telles que : longueur, masse, énergie, température vitesse, force, etc. Ces grandeurs sont appelées grandeurs physiques. Une grandeur physique est tout ce qui est susceptible de variation et qui peut être calculée, mesurée ou repérée. Une grandeur physique est mesurable (directement ou indirectement) ou repérable

#### I-1 grandeurs et unités fondamentales

Grandeur	Symbole de la grandeur	Unité	Symbole de l'unité
Longueur	L	mètre	m
Masse	M	kilogramme	kg
Temps	T	seconde	s
Intensité du courant électrique	I	ampère	A
Température thermodynamique	$\Theta$	kelvin	K
Quantité de matière		mole	mol
intensité		candela	cd

Deux unités supplémentaires s'y ajoutent : le radian (rad) pour l'angle et le stéradian (sr) pour l'angle solide.

Les quatre premières unités de base sont valables en mécanique et en électricité ; on appelle souvent ce système d'unités "M.K.S.A " pour cette raison.

Les autres unités se déduisent par des relations de définition de la forme :

$$G=A^{\alpha}B^{\beta}C^{\gamma}D^{\delta} \text{ appelée aussi équation aux dimensions}$$

Où G, A, B, C, D sont des grandeurs et  $\alpha, \beta, \gamma, \delta$  des nombres . Dans le système international toutes les grandeurs A, B, C, D sont des grandeurs fondamentales et les exposants  $\alpha, \beta, \gamma, \delta$  des entiers .

#### I-2 Equations aux dimensions et homogénéité

Les équations aux dimensions sont des relations entre rapports d'unités identiques aux relations de définition. Exemple la vitesse est obtenue en divisant la longueur par le temps

$$V = l/t \quad [V] = [l]/[t]=L.T^{-1}=m.s^{-1} \text{ . Les dimensions de base par commodité sont M,L,T ,Q}$$

$$F=ma \quad ; [f] = [m][a]=MLT^{-2}=kgm.s^{-2} \text{ ou N (newton)}$$

## Annexe III

Lettres grecques utilisées couramment en Physique      Signes Mathématiques et Symboles

Nom	Minuscule	Majuscule	Symbole	signification
<b>Alpha</b>	$\alpha$		=	<b>Egal</b>
<b>Bêta</b>	$\beta$		$\approx$	<b>Egal approximativement</b>
<b>Gamma</b>	$\gamma$	$\Gamma$	$\neq$	<b>Différent de</b>
<b>Delta</b>	$\delta$	$\Delta$	$\geq$	<b>Plus grand ou égal</b>
<b>Epsilon</b>	$\epsilon$		$\leq$	<b>Plus petit ou égal</b>
<b>Zêta</b>	$\zeta$		$>$	<b>Plus grand</b>
<b>Eta</b>	$\eta$		$<$	<b>Plus petit</b>
<b>Thêta</b>	$\theta$	$\Theta$	$\gg$	<b>Très grand par rapport à</b>
<b>Kappa</b>	$\kappa$		$\ll$	<b>Très petit par rapport à</b>
<b>Lambda</b>	$\lambda$	$\Lambda$	$\Sigma$	<b>Sommation sur</b>
<b>Mu</b>	$\mu$		$\Pi$	<b>Produit sur</b>
<b>Nu</b>	$\nu$		$\bar{x}$	<b>Valeur moyenne</b>
<b>Ksi</b>	$\xi$		$\sim$	<b>Equivalence</b>
<b>Pi</b>	$\pi$	$\Pi$	$ x $	<b>Valeur absolue de x</b>
<b>Rhô</b>	$\rho$		$\  \quad \ $	<b>Norme</b>
<b>Sigma</b>	$\sigma$	$\Sigma$		
<b>Tau</b>	$\tau$			
<b>Phi</b>	$\varphi$	$\Phi$		
<b>Khi</b>	$\chi$			
<b>Psi</b>	$\psi$	$\Psi$		
<b>Oméga</b>	$\omega$	$\Omega$		

## Annexe IV

**Multiples et Sous-multiples de l'unité**

	<b>Multiples</b>	<b>symboles</b>	<b>sous multiples</b>	<b>symboles</b>
Déca	(10)	da	déci (10 <sup>-1</sup> )	d
Hector	(10 <sup>2</sup> )	h	centi (10 <sup>-2</sup> )	c
Kilo	(10 <sup>3</sup> )	k	milli (10 <sup>-3</sup> )	m
Méga	(10 <sup>6</sup> )	M	micro (10 <sup>-6</sup> )	μ
Giga	(10 <sup>9</sup> )	G	nano (10 <sup>-9</sup> )	n
Téra	(10 <sup>12</sup> )	T	pico (10 <sup>-12</sup> )	p
Péta	(10 <sup>15</sup> )	P	fento (10 <sup>-15</sup> )	f
Exa	(10 <sup>18</sup> )	E	atto (10 <sup>-18</sup> )	a