

Fonction d'onde et états stationnaires

Sommaire

I	Introduction expérimentale : dualité onde-corpuscule	2
I.1	Expérience d'interférences avec une source à photon unique	3
I.2	Energie et quantité de mouvement de la lumière et de la matière	4
I.3	Effet photoélectrique	6
II	Fonction d'onde	7
II.1	Description de l'état d'un système quantique	7
II.2	Densité de probabilité de présence	7
II.3	Superposition d'états	8
III	Equation de Schrödinger	9
IV	Etats stationnaires	9
V	Exemple de résolution de l'équation de Schrödinger stationnaire : la particule libre	11
V.1	Résolution de l'équation de Schrödinger stationnaire	11
V.2	Relation de dispersion	12
V.3	Paquet d'ondes associé à une particule libre	13
V.4	Courant de probabilité associé à une particule libre	14
	Exercices	15

Questions de cours

- Fonction d'onde : présentation, densité de probabilité de présence.
- Superposition d'états quantiques $\psi = \lambda_A \psi_A + \lambda_B \psi_B$: densité de probabilité de présence, lien avec les expériences d'interférences.
- Etat stationnaire : définition, établir la forme $\psi(x,t) = \Phi(x) e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$ à partir de l'équation de Schrödinger fournie. Commenter.
- A partir de l'équation de Schrödinger fournie, déterminer la forme de la fonction d'onde d'un état stationnaire associé à une particule libre d'énergie $E > 0$. Commenter.
- Notion de paquet d'ondes associé à une particule libre et inégalité de Heisenberg.
- A partir de l'équation de Schrödinger fournie, déterminer la relation de dispersion associée à une particule libre. Vitesse de phase et vitesse de groupe. Présenter laquelle de ces deux vitesses est associée à une particule libre et commenter l'expression du courant de probabilité $j(x,t) = |\psi(x,t)|^2 v_g$.

Prise de notes : Histoire des sciences. Grossièrement, à l'issue de ces 2 années de prépa, on a abordé la plupart des domaines de la physique connus au XIX^{ème} siècle (manque : la méca analytique, la naissance de la phy stat...). Kelvin aurait déclaré à la fin du XIX^{ème} siècle : "Il n'y a plus rien à découvrir en physique aujourd'hui. Tout ce qui reste à faire, c'est d'améliorer la précision des mesures". Il aurait également mentionné deux "nuages" dans nos connaissances de la physique : l'éther (support supposé de la propagation de la lumière) toujours pas mis en évidence et le rayonnement du corps noir non expliqué.

- ★ Et pourtant, au début du XXI^{ème} siècle, 2 révolutions voient le jour en physique, justement à cause de ces 2 nuages ! Le rayonnement du corps noir pousse Planck en 1900 à introduire une constante h (la constante de Planck) pour quantifier l'énergie du champ EM, ce qui sera interprété en 1905 par Einstein comme la notion de photon. 1905 : considéré comme année de la naissance de la MQ. L'éther pousse Michelson à développer son interféromètre (expérience de Michelson et Morley en 1887) et mènera Einstein (à nouveau) à proposer en 1905 la théorie de la relativité restreinte. Donc, non, ne jamais penser que l'on a tout découvert en sciences : plus on améliore la précision des appareils de mesure, plus on montre des incohérences dans les théories physiques, poussant à créer de nouvelles théories toujours plus complètes.

Ce chapitre a trois objectifs principaux :

1. Introduire la fonction d'onde $\psi(x,t)$ et l'exploiter pour déterminer une probabilité de présence.
2. Déterminer la forme de la fonction d'onde pour un état stationnaire.
3. Relier onde progressive harmonique et description d'une particule libre quantique.

Cadre restreint de la mécanique quantique enseignée en PC :

Dans le cadre du programme de PC :

- nous nous restreignons à l'étude de la mécanique quantique dans la "représentation position", c'est-à-dire que nous n'étudierons que des situations pouvant être traitées avec une description purement spatiale et temporelle du problème. Pour des soucis de simplification, nous limiterons même l'étude à des problèmes unidimensionnels suivant une coordonnée cartésienne x .
- nous n'aborderons quasiment pas la théorie de la mesure en mécanique quantique.

Pour ces raisons, le formalisme utilisé dans cette partie du programme ne correspond pas au formalisme général de la mécanique quantique telle que formulée au début du XXI^{ème} siècle.

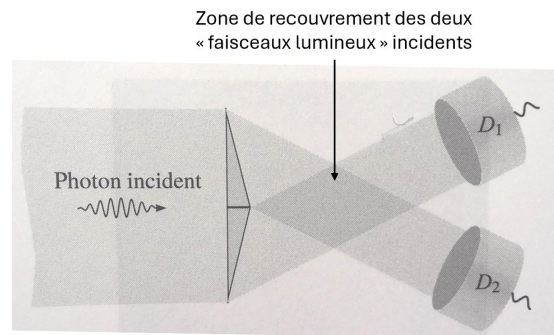
Notation : En mécanique quantique, on note i le nombre complexe de partie réelle nulle et de partie imaginaire égale à 1.

I Introduction expérimentale : dualité onde-corpuscule

I.1 Expérience d'interférences avec une source à photon unique

De nombreuses expériences ont été menées depuis le début du XXI^{ème} siècle pour justifier de la nécessité d'une interprétation quantique des résultats expérimentaux. Nous prenons ici l'exemple d'une expérience menée en 2007 au sein du Laboratoire de Photonique Quantique et Moléculaire (LPQM).

Cette expérience utilise un biprisme de Fresnel, qui est un dispositif interférentiel à division du front d'onde. En optique ondulatoire, on aurait dit que la source émet une onde plane incidente, séparée en deux faisceaux émergents d'ondes cohérentes entre elles. Dans la zone de recouvrement des faisceaux émergents (i.e. dans le champ d'interférences), on peut alors observer des interférences lumineuses.



La subtilité est que les expérimentateurs utilisent ici une source à photons uniques, c'est-à-dire une source pouvant être contrôlée pour n'émettre qu'un photon après un photon. Tous les photons sont envoyés par la source exactement dans le même état (on dit qu'ils sont tous préparés dans le même état).

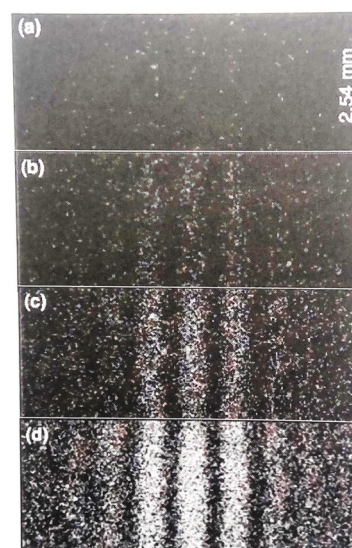
Photon

Un photon est une particule élémentaire composant la lumière, dont l'énergie et la quantité de mouvement sont indivisibles. On qualifie l'énergie d'un photon de **quantum d'énergie**, et de même sa quantité de mouvement de **quantum de quantité de mouvement**.

Un photon est alors parfois qualifié de "grain de lumière".

Les deux expériences qu'ils mènent sont les suivantes :

- ils placent deux détecteurs D_1 et D_2 capables de détecter un photon unique (on parle d'un "clac" sur le détecteur) hors de la zone de recouvrement des faisceaux. Ils observent que 1) les clics ne sont jamais obtenus en même temps sur les deux détecteurs et que 2) les clics sont détectés aléatoirement avec la même probabilité $1/2$ sur l'un ou l'autre des détecteurs.
- ils placent un capteur dans la zone de recouvrement des faisceaux et enregistrent les clics détectés sur ce capteur durant des durées de plus en plus longues. Ils obtiennent les figures ci-contre.



Interprétations de ces résultats :

- **Interprétation corpusculaire (ou granulaire) :** 1) Lors de la mesure, le photon ne peut être détecté qu'à un seul endroit, ce qui est en accord avec la vision corpusculaire. 2) Alors que tous les photons sont préparés dans le même état, la réalisation de la mesure donne des résultats différents (et on s'assure que ce n'est pas lié à des incertitudes de mesure). En mécanique quantique, on peut seulement prévoir des probabilités de détection en un lieu : *le résultat de la mesure a un caractère intrinsèquement probabiliste.*
- ★ **Interprétation ondulatoire :** Après de nombreux clics sur le capteur dans la zone de recouvrement, on constate que la probabilité de détection suit la même figure qu'une figure d'interférences d'optique ondulatoire. On ne peut pas dire que les photons ne suivent qu'une seule trajectoire optique.

Il faut renoncer à une description classique (onde ou particule) de la lumière : il y a nécessité de créer une nouvelle théorie physique capable de décrire de manière unique la lumière (et la matière) et donc d'expliquer tous ces résultats expérimentaux avec le même système physique.

Remarque : Des expériences d'interférométrie atomique montrent des résultats similaires avec une source envoyant des particules matérielles (électrons, atomes ou mêmes molécules) dans un dispositif interférentiel.

I.2 Energie et quantité de mouvement de la lumière et de la matière

a Energie

i) Pour la lumière

Relation de Planck-Einstein (1905)

Le quantum d'énergie associé à un **faisceau lumineux** de fréquence ν et de longueur d'onde λ vaut :

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$$

où on a utilisé la relation de dispersion (dans le vide) $\nu = \frac{c}{\lambda}$.

La constante fondamentale h est la constante de Planck (1900) (à ne pas connaître par coeur) : $h = 6.63 \times 10^{-34}$ J.s.

Il s'agit donc de l'énergie d'un photon.

En utilisant le lien entre pulsation et fréquence $\omega = 2\pi\nu$, on peut ré-écrire la relation de Planck-Einstein :

$$E = h \frac{\omega}{2\pi} = \hbar\omega \quad \text{avec} \quad \hbar = \frac{h}{2\pi} \quad \text{la constante de Planck réduite}$$

ii) Pour la matière

Nous verrons dans la suite de ce chapitre qu'il est possible de représenter une particule matérielle par un paquet d'ondes de pulsation moyenne ω . On aura aussi la relation entre énergie moyenne de la particule et pulsation moyenne du paquet d'onde : $E = \hbar\omega$.

b Quantité de mouvement (= impulsion)

i) Pour la matière

Longueur d'onde de De Broglie (1923)

On associe à une particule de masse m , de vitesse \vec{v} et donc de quantité de mouvement $\vec{p} = m\vec{v}$ (norme p) la longueur d'onde de De Broglie λ_{DB} telle que

$$p\lambda_{DB} = h \Rightarrow p = \frac{h}{\lambda_{DB}} = \hbar k \quad \text{avec} \quad k = \frac{2\pi}{\lambda_{DB}}$$

La longueur d'onde de De Broglie (ou le vecteur d'onde associé) s'interprète comme la longueur d'onde de l'onde de matière associée à la particule.

On donne souvent un critère permettant de définir la limite de taille d'un dispositif à partir de laquelle une théorie classique (i.e. non quantique) suffit pour décrire les phénomènes physiques.

Limite de validité de la théorie classique

Dans un dispositif de taille L , les résultats classiques sont valables à condition que

$$L \gg \lambda_{DB}$$

Dans le cas contraire, seule une théorie quantique donnera une description satisfaisante des expériences réalisées.

ii) Pour la lumière

Par analogie avec la matière, on définit le quantum de quantité de mouvement pour la lumière de vecteur d'onde \vec{k} :

$$\vec{p} = \hbar \vec{k}$$

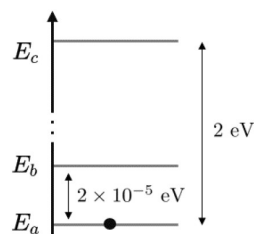
Il s'agit donc de la quantité de mouvement d'un photon. Cette définition est cohérente avec la théorie de la relativité.

Remarque : On retiendra également deux autres caractéristiques d'un photon : il se propage à la célérité c de la lumière dans le vide et il a une masse strictement nulle.

c Différence entre la description quantique de la matière et de la lumière

Il y a donc de très fortes analogies entre les descriptions quantiques de la lumière et de la matière. Mais, il ne faut pas oublier une différence majeure : la relation de dispersion (dans le vide) $k = \frac{\omega}{c}$ ne s'applique que pour les ondes électromagnétiques.

Exercice : On considère un atome de Rubidium 87, de masse $m = 1.5 \times 10^{-25}$ kg. L'énergie mécanique totale de l'atome, notée E , peut être décomposée en trois parties : l'énergie cinétique et l'énergie potentielle de l'atome, et l'énergie mécanique des électrons (ou énergie électronique). L'énergie mécanique des électrons peut valoir E_a , E_b ou E_c : on représente les états électroniques de l'atome sur la figure ci-contre. L'état a est l'état fondamental. On prendra l'énergie potentielle E_p de l'atome nulle dans ce qui suit.



Un atome, initialement au repos dans le référentiel d'étude et dans l'état a , absorbe un photon de quantité de mouvement $\hbar \vec{k}$ et d'énergie $\hbar \omega$ (la relation de dispersion est valable pour le photon : $k = \frac{\omega}{c}$), et effectue une transition vers l'état d'énergie E_i ($i = b$ ou $i = c$).

1. Usuellement, on néglige la variation d'énergie cinétique de l'atome lors de la transition. Quelle est alors l'énergie du photon nécessaire pour effectuer la transition ?
2. On prend désormais en compte la variation d'énergie cinétique de l'atome (aussi appelée énergie de recul). Donner les relations de conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement lors du processus d'absorption du photon, en notant \vec{v}_r la variation de vitesse de l'atome (appelée "vitesse de recul").
3. On fait l'hypothèse que l'énergie de recul est bien plus faible que l'énergie du photon. En déduire la variation de vitesse $v_r = \|\vec{v}_r\|$ subie par l'atome lors de la transition. Application numérique pour chacune des transitions $a \rightarrow b$ et $a \rightarrow c$. Conclure.

1. Par conservation de l'énergie : $\hbar\omega = E_i - E_a$
2. L'absorption du photon se modélise comme

photon + atome fondamental \rightarrow atome excité

Comme le système photon + atome est isolé, on a :

$$\text{Conservation de l'énergie} \quad \hbar\omega + E_a = \frac{1}{2}mv_r^2 + E_i$$

$$\text{Conservation de la quantité de mouvement} \quad \hbar\vec{k} + \vec{0} = m\vec{v}_r$$

- ★ 3. La conservation de l'énergie se ramène donc simplement à $\hbar\omega = E_i - E_a \Rightarrow k = \frac{\omega}{c} = \frac{E_i - E_a}{\hbar c}$. La conservation de la quantité de mouvement donne alors : $v_r = \frac{\hbar k}{m} = \frac{E_i - E_a}{mc}$. A.N. : Pour $a \rightarrow b$: $v_r = 7 \times 10^{-8} \text{ m s}^{-1}$ et pour $a \rightarrow c$: $v_r = 7 \times 10^{-3} \text{ m s}^{-1}$.

On vérifie a posteriori que pour $a \rightarrow c$: $\frac{1}{2}mv_r^2 = 2 \times 10^{-11} \text{ eV} \ll 2 \text{ eV}$ et pour

$a \rightarrow b$: $\frac{1}{2}mv_r^2 = 2 \times 10^{-21} \text{ eV} \ll 2 \times 10^{-5} \text{ eV}$. Hypothèse validée !

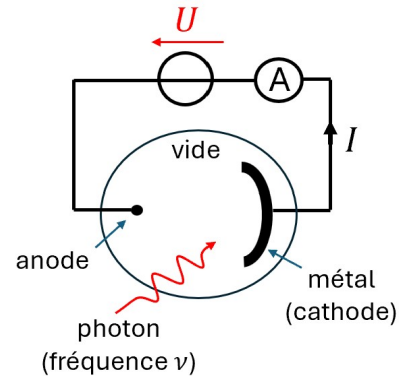
(La conclusion de cet exercice est qu'il est raisonnable de négliger la variation d'énergie cinétique d'un atome lors d'une transition électronique, mais pas de négliger la variation de sa quantité de mouvement.)

I.3 Effet photoélectrique

Historiquement, la première expérience qui a été analysée avec la notion de photon est l'effet photoélectrique. L'analyse a été proposée par Einstein en 1905 et Millikan a ensuite testé expérimentalement cette interprétation pour de nombreux métaux.

Effet photoélectrique : Extraction d'électrons appartenant à un métal sous un rayonnement électromagnétique.

On peut par exemple citer l'extraction d'électrons du zinc sous un rayonnement ultraviolet (ne marche pas avec un rayonnement visible).



Analyse de l'effet photoélectrique en utilisant la notion de photon :

On note $E_{c,i}$ l'énergie cinétique de l'électron juste après l'extraction.

Diagramme énergétique du métal : mettre un état fondamental d'énergie $E = -W$ avec W : le travail d'extraction du métal + un continuum d'énergies pour $E \geq 0$ en indiquant "électron libre". Représenter aussi le photon et le changement d'énergie de l'électron.

Par conservation de l'énergie du système isolé {électron + photon}, on a :

★

$$h\nu - W = 0 + E_{c,i} \Rightarrow h\nu = W + E_{c,i}$$

La fréquence minimale pour avoir effet photoélectrique est obtenue si $E_{c,i} = 0$: $\nu_{min} = W/h$. **Expérimentalement, l'effet photoélectrique n'est possible que si $\nu > \nu_{min}$, ce qui tend à valider le modèle du photon.**

Remarque : En appliquant le théorème de l'énergie mécanique à l'électron, dans le référentiel du laboratoire galiléen, entre l'instant juste après l'extraction et l'arrivée à l'anode, on a :

$$\Delta E_m = 0 = E_{c,f} - E_{c,i} - e(V_a - V_c) = E_{c,f} - E_{c,i} - eU$$

On montre expérimentalement qu'il existe une tension U_0 sous laquelle le courant détecté devient nul : c'est la tension limite pour laquelle un électron parvient à l'anode. On a alors $E_{c,f} = 0$. On en déduit :

$$U_0 = -\frac{h\nu - W}{e}$$

Remarque : On sait aujourd'hui qu'on peut interpréter l'effet photoélectrique sans faire intervenir la notion de photon (cf. interprétation de Lamb et Scully, 1969). Il ne s'agit donc pas rigoureusement d'une expérience démontrant la nécessité de la notion de photon...

II Fonction d'onde

II.1 Description de l'état d'un système quantique

Dans l'interprétation standard de la mécanique quantique, l'état du système quantique est entièrement déterminé par la connaissance d'une **fonction d'onde** $\psi(x,t)$ à valeurs complexes. Cette fonction d'onde doit être normalisée (cf. sous-partie suivante).

II.2 Densité de probabilité de présence

Probabilité de présence

La probabilité de détecter la présence de la particule à l'instant t entre x et $x + dx$ est donnée par :

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

Pour cette raison, la **densité de probabilité de présence** est donnée par $\rho(x,t) = |\psi(x,t)|^2$ et on qualifie parfois la fonction d'onde $\psi(x,t)$ d'**amplitude de probabilité**.

Remarque : Ce calcul de la probabilité est un cas particulier de la règle de Born, qui est l'un des postulats de la mécanique quantique.

Soit I l'intervalle de l'espace correspondant aux positions accessibles par la particule. La plupart du temps, nous prendrons $I = \mathbb{R}$.

- ★ Si la taille de I n'est pas nulle, on dit que la particule est **délocalisée** : elle peut être détectée à différents endroits, avec une certaine probabilité de présence.
- ★ La somme de toutes les probabilités de présence dans tout l'espace doit nécessairement faire 1, ce qui donne la **condition de normalisation** :

Condition de normalisation

★

$$\int_I |\psi(x,t)|^2 dx = 1$$

Toute fonction d'onde doit nécessairement être normalisée !

Remarque : La fonction d'onde est dite de carré sommable sur I .

Définition de la fonction d'onde à une phase près :

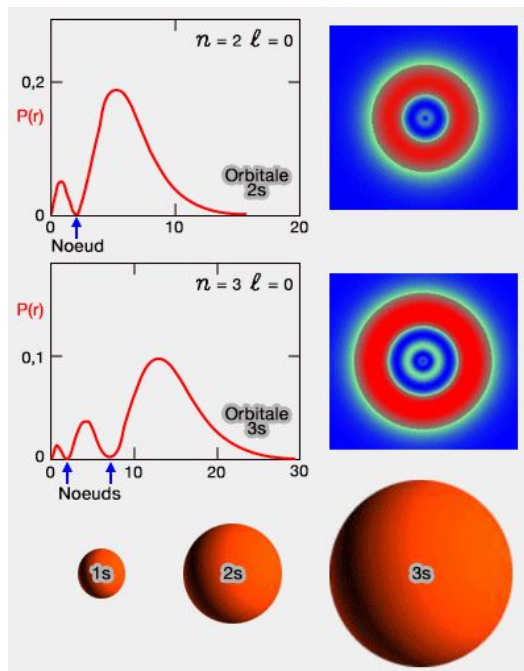
Lors d'une mesure expérimentale, seule la densité de probabilité de présence a un intérêt : il est alors absolument équivalent de décrire le système par une fonction d'onde $\psi(x,t)$ ou par la fonction d'onde $\psi(x,t) \times e^{i\theta}$ (θ est réel). Dans un problème, **on pourra donc arbitrairement multiplier la fonction d'onde par le complexe $e^{i\theta}$** sans changer le sens physique donné à la fonction d'onde.

On dit que la fonction d'onde est définie à une phase près.

Lien avec les orbitales atomiques et moléculaires de chimie :

On définit une orbitale comme la fonction d'onde décrivant un électron dans l'entité (atome ou molécule) étudiée.

Concernant les orbitales moléculaires, dans le cadre de l'approximation orbitale, on les détermine en étudiant le recouvrement des orbitales atomiques pour les électrons de valence. Cette étude du recouvrement peut se faire, qualitativement, en représentant dans l'espace la densité de probabilité de présence des électrons. C'est la représentation usuelle des chimistes : on représente les surfaces à l'intérieur desquelles la probabilité de détecter un électron est supérieur à un certain seuil (disons 95% pour fixer les idées) :



II.3 Superposition d'états

L'équation de Schrödinger (cf. partie suivante) étant linéaire, si $\psi_A(x,t)$ et $\psi_B(x,t)$ sont des fonctions d'onde solutions du problème, alors toute combinaison linéaire $\psi(x,t) = \lambda_A\psi_A(x,t) + \lambda_B\psi_B(x,t)$ est également une fonction d'onde solution du problème (à condition que cette fonction d'onde $\psi(x,t)$ soit normalisée !). On parle alors de **superposition d'états quantiques**.

La superposition d'états permet d'expliquer un grand nombre d'expériences. En guise d'exemple, considérons une expérience d'interférométrie où la particule quantique peut passer par la fente A ou la fente B avant d'arriver dans le champ d'interférences.



On décrit l'état de la particule dans la zone de recouvrement par une superposition d'états :

$$\psi(x,t) = \lambda_A\psi_A(x,t) + \lambda_B\psi_B(x,t)$$

où $\psi_A(x,t)$ est la fonction d'onde de la particule étant passée par la fente A , $\psi_B(x,t)$ celle de la particule étant passée par la fente B et λ_A et λ_B caractérisent (par exemple) des coefficients de transmission associés à chacune des fentes.

La densité de probabilité est alors :

$$\begin{aligned} |\psi(x,t)|^2 &= |\lambda_A\psi_A(x,t) + \lambda_B\psi_B(x,t)|^2 = (\lambda_A\psi_A(x,t) + \lambda_B\psi_B(x,t)) \times (\lambda_A\psi_A(x,t) + \lambda_B\psi_B(x,t))^* \\ &= |\lambda_A|^2 |\psi_A(x,t)|^2 + |\lambda_B|^2 |\psi_B(x,t)|^2 + \lambda_A\psi_A(x,t)\lambda_B^*\psi_B^*(x,t) + c.c. \\ &= |\lambda_A|^2 |\psi_A(x,t)|^2 + |\lambda_B|^2 |\psi_B(x,t)|^2 + 2\text{Re}(\lambda_A\psi_A(x,t)\lambda_B^*\psi_B^*(x,t)) \end{aligned}$$

où le dernier terme est le terme d'interférences.

On prendra garde au fait que la probabilité de détecter l'électron dans la zone de recouvrement

à t entre x et $x + dx$ n'est pas égale à $|\lambda_A|^2 |\psi_A(x,t)|^2 + |\lambda_B|^2 |\psi_B(x,t)|^2$.

- ★ Commenter : proba que l'électron passe par la fente A multipliée par le coeff de transmission + idem fente B.

Les expériences de physique quantique s'expliquent souvent par des particules dans des superpositions d'états quantiques. Il faut donc **sommer les amplitudes de probabilité** associés aux différents états possibles, et non les probabilités associées à chaque état.

Dans toute la suite de ce chapitre, on se limite à l'étude de particules matérielles, i.e. avec une masse m (pas d'étude de photon).

III Equation de Schrödinger

On étudie une particule matérielle de masse m pouvant se déplacer le long d'un axe (Ox) et soumise à une énergie potentielle $V(x)$ dans un référentiel. Dans la représentation position de la mécanique quantique, l'équation de Schrödinger (1925) s'écrit (elle doit vous être fournie) :

Equation de Schrödinger

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

Cette équation est un postulat de la mécanique quantique.

Remarques :

- L'équation de Schrödinger est linéaire, ce qui valide l'application du principe de superposition.
- Il s'agit d'une équation aux dérivées partielles, d'ordre 1 par rapport à la variable temporelle. Cela implique que si l'on connaît $\psi(x,t = 0)$ pour tout x , alors l'équation de Schrödinger permet d'en déduire $\psi(x,t)$ pour tout x et tout instant t . De ce fait, l'équation de Schrödinger est appelée postulat d'évolution de la mécanique quantique.
- L'équation de Schrödinger est l'équation d'onde de la mécanique quantique.
- Par abus de la langage, en mécanique quantique, on appellera souvent **potentiel** la fonction énergie potentielle $V(x)$.

IV Etats stationnaires

Définition : Etat stationnaire

Etat pouvant être décrit par une fonction d'onde découplant les variables spatiale et temporelle (on parle de fonction d'onde séparable) :

$$\psi(x,t) = \Phi(x)\chi(t)$$

Remarque : Comme $\psi(x,t)$ est complexe, $\Phi(x)$ et $\chi(t)$ sont a priori également complexes.

On peut alors injecter cette forme de la fonction d'onde dans l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar\Phi(x)\frac{d\chi}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Phi}{dx^2}\chi(t)+V(x)\Phi(x)\chi(t) \Rightarrow i\hbar\frac{1}{\chi(t)}\frac{d\chi}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\Phi(x)}\frac{d^2\Phi}{dx^2}+V(x) \quad \forall x, \forall t$$

★ On retrouve l'égalité d'une fonction ne dépendant que du temps avec une fonction ne dépendant que de x : les deux fonctions sont égales à une constante E homogène à une énergie.

$$\begin{cases} i\hbar\frac{1}{\chi(t)}\frac{d\chi}{dt} = E \Rightarrow \frac{d\chi}{dt} = -i\frac{E}{\hbar}\chi(t) \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\Phi(x)}\frac{d^2\Phi}{dx^2} + V(x) = E \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Phi}{dx^2} + V(x)\Phi(x) = E\Phi(x) \end{cases}$$

La seconde équation est appelée **équation de Schrödinger stationnaire**.

La constante E introduite correspond, en fait, à l'énergie de la particule. Cette interprétation de la constante mathématique introduite apparaîtra clairement lors de la partie suivante sur les particules libres. Pour cette raison, on retiendra qu'**un état stationnaire correspond à un état d'énergie déterminée et accessible pour la particule**.

Remarque : Comme on cherchera très souvent les énergies E accessibles pour une particule, on sera souvent amené à résoudre l'équation de Schrödinger stationnaire.

Résolution de l'équation sur $\chi(t)$:

Il s'agit d'une équation différentielle ordinaire d'ordre 1 :

$$\chi(t) = \text{cste} \times e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$$

La constante peut être mise directement dans la fonction $\Phi(x)$, si bien qu'un état stationnaire s'écrit sous la forme :

Fonction d'onde d'un état stationnaire

La fonction d'onde d'un état stationnaire s'écrit :

$$\psi(x,t) = \Phi(x) e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$$

avec E l'énergie de la particule et $\Phi(x)$ solution de l'équation de Schrödinger stationnaire :

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

Vocabulaire : Φ est appelée **partie spatiale de la fonction d'onde** ou **fonction d'onde propre**.

Interprétations et conséquences :

• .

★ **Probabilité de présence :** La densité de probabilité est $\rho(x,t) = |\psi(x,t)|^2 = |\Phi(x)|^2$. Donc, la probabilité de présence d'une particule dans un état stationnaire est indépendante du temps. Ce constat est à distinguer du reste de la physique des ondes dans laquelle on a constamment des oscillations spatio-temporelles.

Fondamentalement, ceci provient du fait que la fonction $\chi(t)$ est complexe. En physique classique, une onde stationnaire se décrit aussi par une fonction d'onde produit d'une fonction ne dépendant que de x et d'une fonction ne dépendant que de t , mais ces deux fonctions sont alors réelles.

• .

Condition de normalisation : La condition de normalisation devient donc :

★

$$\int_I |\Phi(x)|^2 dx = 1$$

- En posant $\omega = \frac{E}{\hbar}$, la fonction d'onde d'un état stationnaire s'écrit sous la forme usuelle $\psi(x,t) = \Phi(x) e^{-i\omega t}$. ω s'interprète donc comme la pulsation de "l'onde" décrivant la particule : on retrouve ainsi la relation similaire à la relation de Planck-Einstein.

V Exemple de résolution de l'équation de Schrödinger stationnaire : la particule libre

Définition : Particule libre

Une particule est qualifiée de libre si elle n'est soumise à aucune action extérieure (force nulle). Le potentiel est alors constant : $V(x) = \text{cste}$. On choisit souvent par commodité $V(x) = 0$ (choix fait dans la suite). La particule peut alors se déplacer entre $-\infty$ et $+\infty$.

V.1 Résolution de l'équation de Schrödinger stationnaire

L'équation de Schrödinger stationnaire devient donc, pour une particule libre :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Phi}{dx^2} = E\Phi(x) \Rightarrow \frac{d^2\Phi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\Phi(x) = 0$$

Cas 1 : $E < 0$

L'équation caractéristique $r^2 + \frac{2mE}{\hbar^2} = 0$ mène à $r_{\pm} = \pm\sqrt{\frac{-2mE}{\hbar^2}}$. Les solutions de l'équation de Schrödinger stationnaire sont donc :

★

$$\Phi(x) = A e^{r_+x} + B e^{r_-x} \quad \text{avec } (A,B) \in \mathbb{C}^2$$

De plus, la condition de normalisation impose que $\int_{-\infty}^{+\infty} |\Phi(x)|^2 dx = 1$. Or, $|\Phi(x)| \rightarrow +\infty$ si x tend vers $\pm\infty$: il est impossible de respecter la condition de normalisation. Conclusion : le cas $E < 0$ est impossible.

Remarque : Cette conclusion est cohérente avec le choix d'origine pour l'énergie potentielle : on a imposé $V(x) = 0$ et on retrouve le fait que l'énergie totale de la particule $E \geq V(x)$.

Cas 2 : $E = 0$

L'équation de Schrödinger stationnaire devient $\frac{d^2\Phi}{dx^2} = 0$ menant à $\Phi(x) = Ax + B$ avec A et B des constantes complexes. A nouveau, la partie spatiale de la fonction d'onde doit respecter la condition de normalisation

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

Nécessairement, pour éviter une divergence de $|\Phi(x)|$, on a $A = 0$. Mais alors, avec $\Phi(x) = B$, on ne peut pas réussir à satisfaire la condition de normalisation. Conclusion : le cas $E = 0$ est impossible.

Cas 3 : $E > 0$

On pose alors $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} > 0$. L'équation caractéristique devient $r^2 + k^2 = 0$ dont les solutions sont $r = \pm ik$. Ainsi :

$$\Phi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx} \quad \text{avec } (A, B) \in \mathbb{C}^2$$

★ La fonction d'onde complète s'écrit donc :

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

avec $E = \hbar\omega$. On reconnaît une combinaison linéaire d'**ondes progressives harmoniques complexes** se propageant dans le sens des x croissants et dans le sens des x décroissants !

Base de solutions de l'équation de Schrödinger

L'ensemble des ondes progressives harmoniques de la forme $A e^{-i(\omega t \pm kx)}$ forme une base de solutions stationnaires de l'équation de Schrödinger. Cette base de solutions est particulièrement adaptée dans le cas d'une particule libre.



En mécanique quantique, la convention d'écriture des ondes progressives harmoniques est $A e^{-i(\omega t \pm kx)}$: ceci est directement lié à l'écriture de l'équation de Schrödinger.



En mécanique quantique, la fonction d'onde $A e^{-i(\omega t \pm kx)}$ décrit un état stationnaire (produit de deux fonctions découplées à valeurs dans \mathbb{C}).

Interprétations :

- Ne pas oublier qu'en mécanique quantique, $\psi(x, t) \in \mathbb{C}$: il ne faut jamais écrire les OPH décrivant une particule en "écriture réelle".
- La résolution n'a pas fait apparaître de contrainte sur les énergies $E > 0$ accessibles : toutes les énergies $E > 0$ peuvent donc être prises par la particule libre (et par conséquent toutes les pulsations $\omega > 0$ sont possibles). On dit que l'énergie n'est pas quantifiée.
- **Retour sur la longueur d'onde de De Broglie** : Comme on vient de déterminer une fonction d'onde associée à une particule matérielle, on identifie $k = \frac{2\pi}{\lambda_{DB}}$.
- En mécanique classique, si l'énergie potentielle est nulle, on dit que l'énergie (mécanique) E de la particule est égale à son énergie cinétique. Retrouve-t-on cette interprétation en mécanique quantique ?

En mécanique quantique, l'énergie E de la particule libre s'écrit :

$$\star \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2} m v^2$$

d'après la relation de De Broglie

Donc, en mécanique quantique aussi, l'énergie de la particule libre s'identifie avec son énergie cinétique.

V.2 Relation de dispersion

Considérons une onde progressive harmonique se propageant dans le sens des x croissants et solution de l'équation de Schrödinger. On cherche à obtenir la relation de dispersion associée à cette onde.

On procède exactement pareil qu'en physique des ondes.

1. On pose la fonction d'onde de l'onde progressive harmonique : $\psi(x, t) = A e^{-i(\omega t - kx)}$

★

2. On injecte dans l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \Rightarrow \hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Rightarrow \omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

On peut alors vérifier que $k \in \mathbb{R}$: il n'y a pas d'atténuation de l'onde progressive harmonique associée à une particule libre.

On déduit de la relation de dispersion :

- la vitesse de phase : $v_\varphi = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar k}{2m}$ qui dépend de k : la propagation est dispersive.
- la vitesse de groupe : en différentiant la relation de dispersion : $d\omega = \frac{\hbar 2k dk}{2m} \Rightarrow v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k}{m} = 2v_\varphi$

V.3 Paquet d'ondes associé à une particule libre

a Problème associé à une seule onde progressive harmonique

Les ondes progressives harmoniques forment une base pratique pour décrire la fonction d'onde d'une particule. Mais décrire une particule libre par une seule onde progressive harmonique $\psi(x,t) = A e^{-i(\omega t - kx)}$ n'a pas de sens physique.

La densité de probabilité de présence de la particule décrite par une OPH serait : $|\psi(x,t)|^2 = |A|^2 = \text{cste}$. La densité de probabilité de présence serait alors uniforme : on a autant de chances de mesurer la particule à tout endroit de l'espace. Il est donc impossible de normaliser une OPH : elle ne peut pas physiquement décrire une particule libre...

★

Pour décrire convenablement une particule libre, il faut considérer une infinité d'OPH : une particule libre est décrite par un **paquet d'ondes**.

Ainsi, la fonction d'onde d'une particule libre se déplaçant dans le sens des x croissants sera décrite par le paquet d'ondes :

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

où $\omega(k)$ et k sont reliés par la relation de dispersion associée à l'équation de Schrödinger. $A(k)$ ne prendra des valeurs non nulles que sur un intervalle de largeur caractéristique Δk vérifiant $\Delta k \ll k_0$ avec k_0 le vecteur d'onde central associé à la particule libre.

Remarque : Chacune des ondes constituant le paquet d'ondes a une énergie $E = \hbar\omega(k)$ différente. Ainsi, lorsque l'on cherchera à mesurer l'énergie de la particule libre, on ne sera pas certain du résultat que l'on va obtenir : la particule libre réelle n'est plus décrite par un état stationnaire (qui serait un état d'énergie bien déterminée).

b Inégalité de Heisenberg

Inégalité de Heisenberg

On peut relier la largeur spectrale en vecteur d'onde Δk_x du paquet d'onde décrivant une particule (libre ou non) avec la longueur Δx sur laquelle il est le plus probable de détecter la présence de la particule :

$$\Delta x \Delta k_x \geq \frac{1}{2}$$

D'après la relation de De Broglie, on peut ré-écrire cette relation comme :

$$\Delta x \Delta p_x = \Delta x \hbar \Delta k_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

Cette dernière inégalité est appelée **inégalité de Heisenberg** (ou relation d'incertitude spatiale) (1927).

★

A gauche : spectre du paquet d'onde (faire un spectre gaussien et indiquer Δk et k_0) et à droite : représentation de la densité de probabilité de présence de la particule pour différents instants en indiquant Δx , \vec{v}_g et en représentant l'étalement du paquet d'ondes.

Conséquences :

- Plus la particule sera localisée en une zone de l'espace restreinte, plus l'étalement spectral du paquet d'ondes sera important (et inversement).

- L'inégalité de Heisenberg interdit la mesure avec une précision infinie de la position x et de l'impulsion p d'une même particule. Si on mesurait l'impulsion avec une précision infinie $\Delta p_x = 0$, alors $\Delta x \rightarrow +\infty$ et la particule serait totalement délocalisée entre $-\infty$ et $+\infty$ (ce cas est le cas d'une onde progressive harmonique).

Remarque : L'inégalité de Heisenberg est l'équivalent "spatial" de la relation $\Delta t \Delta f \sim 1$ de la théorie de Fourier.

c Vitesse d'une particule libre

- ★ Faisons le lien avec la description particulaire : le maximum de la densité de probabilité de présence de la particule se déplace à la vitesse de groupe du paquet d'onde. On associe alors la "**vitesse**" de la **particule** avec la vitesse de groupe du paquet d'onde la décrivant.

Ce résultat se retrouve quantitativement. D'après la relation de De Broglie, la quantité de mouvement moyenne \vec{p} associée à la particule est reliée au vecteur d'onde moyen \vec{k}_0 du paquet d'ondes : $\vec{p} = \hbar \vec{k}_0$. Or, on a déterminé l'expression de la vitesse de groupe d'une particule libre $v_g = \frac{\hbar k}{m}$. Donc : $\vec{p} = m \vec{v}_g$. Ainsi, la "vitesse moyenne" associée à la particule est bien la vitesse de groupe du paquet d'ondes la décrivant.

V.4 Courant de probabilité associé à une particule libre

Pour finir, cherchons à exprimer la probabilité dP qu'une particule libre se propageant selon $+\vec{e}_x$ traverse l'abscisse x pendant dt .

- ★ Schéma.

Si la particule traverse l'abscisse x pendant dt , c'est qu'elle était auparavant située dans l'intervalle $[x - v_g dt, x]$. Or, la probabilité qu'elle soit située dans cet intervalle est :

$$dP = |\psi(x,t)|^2 v_g dt = |\psi(x,t)|^2 \frac{\hbar k}{m} dt$$

On reconnaît (comme toujours avec l'expression d'un débit) que l'on peut introduire un courant de probabilité tel que :

$$\frac{dP}{dt} = j(x,t) \quad \text{avec} \quad j(x,t) = |\psi(x,t)|^2 \frac{\hbar k}{m}$$

Courant de probabilité

La probabilité dP que la particule libre traverse l'abscisse x durant dt est reliée au courant de probabilité :

$$j(x,t) = \frac{dP}{dt} = |\psi(x,t)|^2 v_g = |\psi(x,t)|^2 \frac{\hbar k}{m}$$

Interprétation

- ★ On reconnaît la forme usuelle des vecteurs densités de courant. Ici, on a obtenu un vecteur densité de courant de probabilité $\vec{j} = \rho \vec{v}_g$ où ρ est la densité de probabilité et \vec{v}_g est la vitesse de la particule libre.

Remarque : Cette expression du courant de probabilité n'est valable que pour une particule libre.

Exercices

Ex. 1 (Écrit CCINP MP 2024) Dualité onde-corpuscule pour la lumière

Données
Constante de Planck $h = 6,63 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$
Constante de Planck réduite $\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,05 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$
Vitesse de la lumière dans le vide $c = 3,00 \cdot 10^8 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$
Constante de Boltzmann $k_B = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J} \cdot \text{K}^{-1}$
Masse de l'électron $m = 9,11 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$
Charge élémentaire $e = 1,6 \cdot 10^{-9} \text{ C}$
Constante des gaz parfaits $R = 8,31 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$
Constante d'Avogadro $N_A = 6,02 \cdot 10^{23} \cdot \text{mol}^{-1}$

Vous remarquerez l'erreur de sujet sur la valeur de la charge élémentaire...

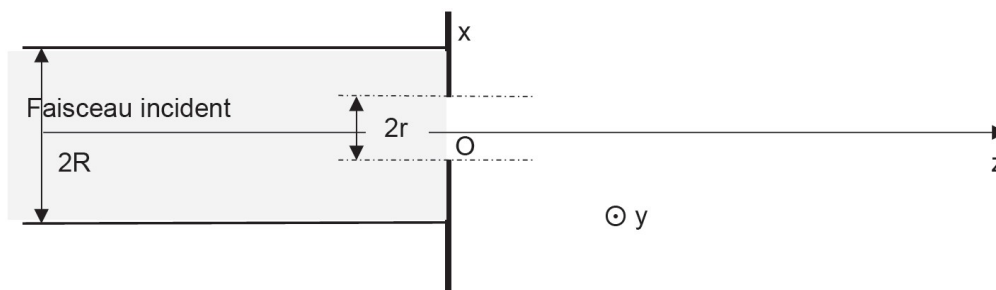


Figure 1 - Géométrie du dispositif à un trou

- Q1. a)** On considère un faisceau parallèle de photons associés à une onde électromagnétique, de longueur d'onde λ , se propageant dans l'air assimilé au vide dans la direction Oz de vecteur unitaire \vec{e}_z (**figure 1**).
Rappeler ce que vaut leur énergie E en fonction de λ , c et de h et leur quantité de mouvement \vec{p} en fonction de λ , h et de \vec{e}_z .
- b)** Calculer l'énergie en eV d'un photon de lumière bleue de longueur d'onde 475 nm.
- Q2.** Ce faisceau parallèle cylindrique de rayon R arrive face à un écran, perpendiculaire à l'axe du faisceau, percé d'un trou circulaire T_1 de centre O et de rayon r (inférieur à R) (**figure 1**).

- a) Établir, à partir de l'inégalité d'Heisenberg spatiale, qu'il y a forcément ouverture angulaire du faisceau.
 b) Donner un ordre de grandeur de cette ouverture angulaire supposée petite. Commenter. Comment appelle-t-on ce phénomène ?

Q3. Citer une expérience qui met en évidence l'aspect corpusculaire de la lumière.

Q4. Un électron est expulsé d'un métal sous l'effet d'une radiation s'il absorbe une énergie au moins égale à W_e , énergie appelée travail " d'extraction ".

Le tableau ci-dessous indique les valeurs du travail " d'extraction " pour différents métaux :

Métal	Cs	Na	K	Ti	Fe
We en eV	1,15	2,11	2,22	4,33	4,67

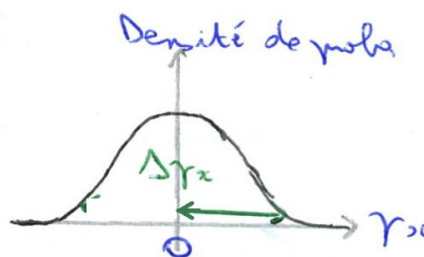
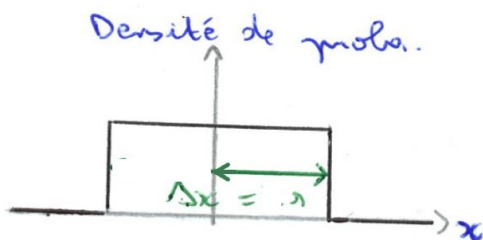
Avec quels métaux cités dans le tableau, la lumière bleue du Q1.b permet-elle d'obtenir un effet photoélectrique ? Justifier.

Quelle sera la vitesse maximale des électrons émis ? Commenter.

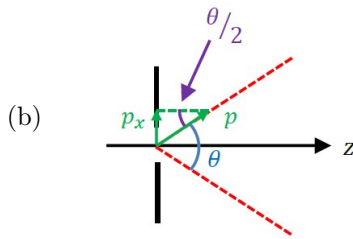
- Q5. a) On utilise une source optique de puissance 1 mW : évaluer l'ordre de grandeur du nombre de photons qui sortent de la source par unité de temps en supposant le faisceau rigoureusement monochromatique de longueur d'onde $\lambda = 632,8$ nm.
 b) À quel niveau de puissance faudrait-il descendre, pour une source, pour que la lumière qu'elle émet soit détectée photon par photon ? On admet que les détecteurs photoniques ont un temps de réponse de l'ordre de la picoseconde (le préfixe pico correspond à 10^{-12}).
 c) Décrire l'évolution des observations sur le détecteur en fonction de la durée d'observation dans la situation des interférences, par deux fentes d'Young éclairées par la source du Q5.b, modélisée par une source à photons uniques.
 d) Traduire ces observations en termes d'amplitude de probabilité pour un photon, détecté en un point M. Le principe de superposition s'applique-t-il aux probabilités ou aux amplitudes de probabilités ?

Correction de l'exercice 1

1. (a) D'après la relation de Planck-Einstein et la relation de dispersion pour la lumière : $E = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$. La quantité de mouvement d'un photon est $\vec{p} = \hbar\vec{k} = \frac{h}{\lambda}\vec{e}_z$.
 (b) A.N. : $E = 2.6$ eV
 2. (a) Lorsque l'on mesure la position selon l'axe (Ox) du photon, il y a une indétermination de $\Delta x = r$. D'après l'inégalité de Heisenberg, il en résulte une indétermination sur la mesure de la quantité de mouvement p_x selon (Ox) du photon de $\Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2\Delta x} = \frac{\hbar}{2r}$.



La valeur la plus probable de p_x est donc $p_x = 0$, mais on pourra mesurer $p_x \neq 0$ avec une probabilité non nulle : il y a forcément ouverture angulaire du faisceau.



En ordre de grandeur, on suppose que $\Delta p_x \sim \frac{\hbar}{2r}$: il en résulte que la valeur maximale de p_x mesurable est $p_x \sim \frac{\hbar}{2r}$.
On peut relier cette valeur de p_x avec l'ouverture angulaire θ :

$$\sin(\theta/2) \simeq \frac{\theta}{2} = \frac{p_x}{p} \sim \frac{\hbar\lambda}{2r\hbar 2\pi} = \frac{\lambda}{4\pi r} \Rightarrow \theta \sim \frac{\lambda}{\pi(2r)}$$

On retrouve une formule similaire à la formule de diffraction des ondes lumineuses.

- Plusieurs expériences peuvent être citées : l'effet photoélectrique (libération d'un électron d'un métal sous l'effet d'un photon), les expériences d'interférences à photons uniques (fentes d'Young ou biprisme de Fresnel par exemple).
- Un électron sera éjecté du métal si l'énergie du photon $E = 2.6 \text{ eV} \geq W_e$: l'effet photoélectrique est visible avec le césium, le sodium et le potassium.

En utilisant la conservation de l'énergie du système isolé {photon + électron} et en notant v la vitesse de l'électron extrait du métal :

$$E - W_e = 0 + E_e = \frac{1}{2}mv^2 \Rightarrow v = \sqrt{\frac{2(E - W_e)}{m}}$$

avec E l'énergie du photon. Cette vitesse peut être qualifiée de vitesse maximale, car il est possible que le transfert d'énergie effectué du photon à l'électron soit aussi redistribué en énergie fourni au réseau métallique (chauffage) Donc :

Métal	Cs	Na	K
Vitesse maximale	$7.18 \times 10^5 \text{ m/s}$	$4.22 \times 10^5 \text{ m/s}$	3.73 m/s

On a $v \ll c$: les électrons ne sont pas relativistes, ce qui valide la forme classique de l'énergie cinétique utilisée.

- (a) Soit une source de puissance $P = 1 \text{ mW}$. L'énergie traversant une section droite du faisceau durant dt est donc liée au nombre δN de photons traversant cette section durant dt :

$$\delta E = Pdt = \delta N \frac{hc}{\lambda} \Rightarrow \frac{\delta N}{dt} = \frac{P\lambda}{hc} = 3 \times 10^{15} \text{ photons/s}$$

- (b) On cherche P telle que $\delta N = 1$ durant la durée $\tau = 10^{-12} \text{ s}$:

$$P = \frac{\delta N hc}{\tau \lambda} = 3 \times 10^{-7} \text{ W}$$

ce qui est très faible !

- (c) Dans le cas décrit, les photons arrivent un par un sur l'écran, on voit alors se dessiner point par point une figure d'interférences discrétisée qui va tendre vers la figure d'interférence habituelle des fentes d'Young pour un grand nombre de photons.
- (d) L'**amplitude de probabilité** d'un photon arrivant en un point M est la superposition d'amplitudes de probabilités correspondant au passage par l'une ou l'autre des fentes. Les observations précédentes se traduisent alors en considérant la **probabilité de détecter un photon** dans cette superposition d'états en un point M : plus la probabilité est élevée, plus on observera une zone sur le détecteur correspondant à une frange brillante, et plus la probabilité est faible, plus la figure sur le détecteur donnera une frange sombre.

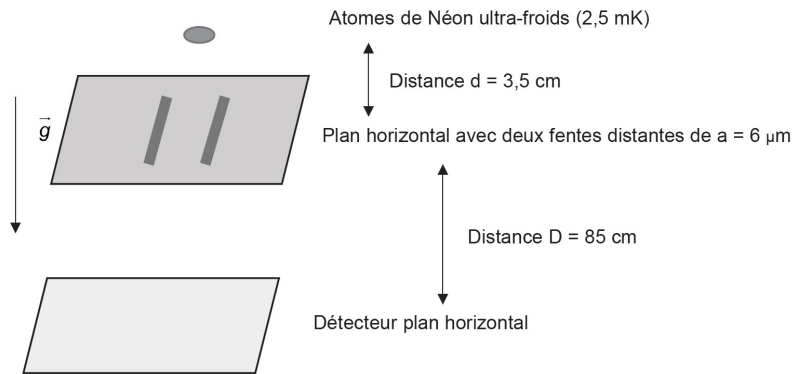
Ex. 2 (D'après écrit CCINP MP 2024) Ondes de matière

- On considère une particule de masse m et d'énergie cinétique E_c . Déterminer l'expression de la longueur d'onde associée à cette particule.
- (a) Etablir la longueur d'onde associée à un faisceau d'électrons accélérés par une différence de potentiels égale à $U = 100 \text{ V}$.
(b) Pourquoi un microscope électronique a-t-il un meilleur pouvoir de résolution qu'un microscope optique conventionnel ?

Après la réalisation d'interférences avec des électrons et des neutrons, des expériences "historiques" d'interférences avec des atomes ont été réalisées en 1991 avec de l'Hélium par Carnel et Mlynek à Constance et en 1992 avec du Néon par Shimizu et Takuma à Tokyo. On s'intéresse ici à la description de cette dernière expérience.

- Etablir l'expression de la vitesse quadratique moyenne u d'un atome de masse m à la température T . On donne la masse molaire du néon $M = 20 \text{ g mol}^{-1}$. Déterminer la vitesse u des atomes de néon à la température $T = 2.5 \text{ mK}$.

L'expérience de 1992 est un dispositif interférentiel de fentes d'Young, dans lequel on utilise le champ de pesanteur pour accélérer les atomes de Néon. On rappelle que, pour des fentes d'Young distantes de a et placées à une distance D d'un écran, l'interfrange est $i = \frac{\lambda D}{a}$.



4. Les atomes de Néon, supposés indépendants les uns des autres, sont lâchés sans vitesse initiale et tombent dans le champ de pesanteur $g = 9.8 \text{ m s}^{-2}$.
- On mesure un interfrange de 1,1 mm : que vaut la longueur d'onde associée ? Quelle valeur de la vitesse en déduisez-vous au niveau du détecteur ?
 - En appliquant les lois de la mécanique classique, évaluer la vitesse des particules en chute libre au niveau des fentes. Que vaut-elle au niveau du détecteur ? Commenter.
 - Pourquoi a-t-on utilisé des atomes ultra-froids ?

Données numériques :

- Constante de Planck : $h = 6.63 \times 10^{-34} \text{ J s}$
- Constante de Boltzmann : $k_B = 1.38 \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$
- Constante d'Avogadro : $\mathcal{N}_A = 6.02 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$
- Masse de l'électron : $m = 9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}$
- Charge élémentaire : $e = 1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$

Correction de l'exercice 2

1. Pour une particule matérielle, on a

$$E_c = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m}$$

En utilisant la relation de De Broglie :

$$E_c = \frac{(\hbar k)^2}{2m} = \frac{h^2}{2m\lambda_{DB}^2} \Rightarrow \lambda_{DB} = \frac{h}{\sqrt{2mE_c}}$$

2. (a) • Système : {électron}
 • Référentiel du laboratoire galiléen
 Théorème de l'énergie mécanique entre l'état initial et l'état final :

$$\Delta E_c + \Delta E_p = \Delta E_c - eU = 0 \Rightarrow E_{c,finale} = eU$$

En appliquant le résultat de la Q.1 :

$$\lambda_{DB} = \frac{h}{\sqrt{2meU}}$$

A.N. : $\lambda_{DB} = 1.2 \times 10^{-10} \text{ m}$

- (b) Le pouvoir de résolution d'un microscope est limité par la diffraction, c'est-à-dire qu'on ne pourra pas distinguer des points plus proches qu'une distance de l'ordre de 100λ . Pour un microscope électronique $\lambda_{DB} < \lambda_{visible}$, ainsi le pouvoir de résolution sera meilleur qu'avec un microscope optique.
3. Pour une vapeur d'atomes de néon, on a

$$\frac{1}{2}mu^2 = \frac{3}{2}k_B T \Rightarrow u = \sqrt{\frac{3k_B T}{m}}$$

On a donc :

$$u = \sqrt{\frac{3k_B T N_A}{M}}$$

A.N. : $u = 1.8 \text{ m s}^{-1}$

4. (a) En appliquant la formule de l'interfrange pour les fentes d'Young :

$$\lambda_{DB} = \frac{ia}{D}$$

A.N. : $\lambda_{DB} = 7.8 \times 10^{-9} \text{ m}$.

En appliquant la formule de De Broglie, on en déduit :

$$v = \frac{h}{m\lambda_{DB}} = \frac{hN_A}{M\lambda_{DB}}$$

A.N. : $v = 2.6 \text{ m s}^{-1}$

- (b) • Système : {atome de néon}
• Référentiel du laboratoire galiléen

Théorème de l'énergie mécanique :

$$\frac{1}{2}mv^2 - 0 = mgd \Rightarrow v = \sqrt{2gd}$$

A.N. : Au niveau des fentes : $v = 0.83 \text{ m s}^{-1}$ Au niveau du détecteur : $v = 4.2 \text{ m s}^{-1}$

On ne retrouve pas le même résultat qu'à la sous-question précédente. Dans cette expérience, la vitesse n'est pas constante, et donc la longueur d'onde de De Broglie non plus. La formule de l'interfrange issue des interférences optiques ne s'applique donc pas vraiment.

- (c) Si on utilisait des atomes émis avec une température plus élevée, leur vitesse d'agitation thermique serait plus élevée. Ceci aurait pour effet d'avoir des atomes de néon qui arrivent sur le détecteur avec une loi de distribution des vitesses plus large. Du point de vue ondulatoire, le spectre associé au faisceau d'électrons serait donc plus étendu, diminuant la cohérence temporelle du faisceau d'électrons. Il pourrait y avoir brouillage de la figure d'interférences.

Ex. 3 (Inspiré de Centrale PC 2022) Etat stationnaire d'une particule libre

Pour un problème à une dimension, l'équation de Schrödinger vérifiée par la fonction d'onde $\psi(x,t)$ d'une particule de masse m évoluant dans un potentiel d'énergie $V(x)$ s'écrit

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

1. Pour quel type de potentiel $V(x)$ une onde plane sinusoïdale $\psi(x,t) = \psi_0 e^{-i(\omega t - kx)}$ est-elle solution de cette équation ?
2. Qu'appelle-t-on une particule libre ?

Dans toute la suite, on prendra $V(x) = 0$.

3. Etablir la relation de dispersion de l'onde précédente.
4. Interpréter les résultats de la question précédente en relation avec l'expression de l'énergie en mécanique classique et les relations de De Broglie et de Planck-Einstein.
5. Déterminer la densité de probabilité. Pourquoi parle-t-on d'état stationnaire ?
6. La fonction d'onde proposée est-elle normalisable ? Qu'est ce que cela implique ?

Correction de l'exercice 3

1. En injectant la fonction d'onde proposée dans l'équation de Schrödinger, on trouve

$$i\hbar(-i\omega)\psi_0 e^{-i(\omega t - kx)} = -\frac{\hbar^2(ik)^2}{2m}\psi_0 e^{-i(\omega t - kx)} + V(x)\psi_0 e^{-i(\omega t - kx)} \Rightarrow \hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V(x)$$

car $\psi_0 \neq 0$ pour ne pas avoir de solution triviale. Le seul moyen que ceci soit vérifié $\forall x$ est que $V(x) = \text{cste}$: il faut que le potentiel soit uniforme pour qu'une OPH soit solution de l'équation de Schrödinger.

2. Une particule libre est une particule qui n'est soumise à aucun potentiel extérieur, i.e. aucune action extérieure.

3. La relation de dispersion a été obtenue en Q.1 :

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

4. Pour une particule libre, l'énergie classique de la particule correspond à l'énergie cinétique $E = \frac{1}{2}mv^2$. On retrouve cette interprétation en mécanique quantique, avec la relation de Planck-Einstein et la relation de De Broglie :

$$E = \hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2}mv^2 = E_c$$

5. La densité de probabilité pour une OPH est : $|\psi(x,t)|^2 = |\psi_0|^2$. Cette densité de probabilité est constante : on parle alors d'état stationnaire.
6. Néanmoins, il est alors impossible de normaliser une fonction d'onde sous forme d'OPH : on ne peut pas imposer $\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x,t)|^2 dx = 1$. Cela implique qu'une véritable particule ne peut pas être décrite par une unique OPH : il faut alors considérer un paquet d'ondes.

Ex. 4 (Ecrit CCINP PC 2022) Cellule de Bragg

Une cellule de Bragg (**figure 11**) est constituée d'une céramique piézoélectrique qui émet des ondes planes acoustiques de fréquence $f_S = 40$ MHz, se propageant à la célérité $c_S = 4\,130$ m·s⁻¹ dans un cristal de phosphure de gallium GaP. La périodicité de l'onde acoustique forme un réseau de pas Λ , longueur d'onde de l'onde acoustique, sur lequel le faisceau laser peut venir se diffracter par un effet acousto-optique.

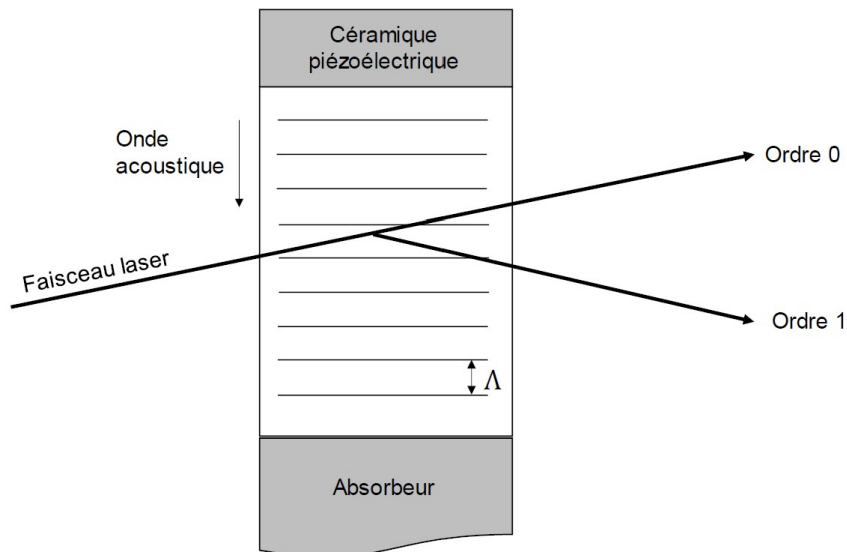


Figure 11 - Cellule de Bragg

Le laser incident a pour fréquence f_L et a pour longueur d'onde dans le vide $\lambda_0 = 514.5$ nm.

Pour modéliser la diffraction du faisceau laser par l'onde acoustique, on considère que les plans d'ondes de l'onde acoustique se comportent comme des miroirs semi-réfléchissants. On assimile le faisceau laser à un ensemble de rayons parallèles se réfléchissant sur ces plans, en négligeant les réflexions multiples (**figure 12**).

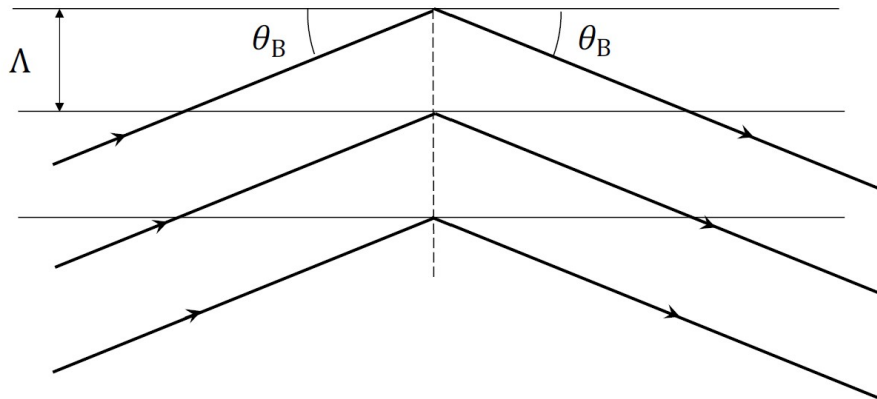


Figure 12 - Réflexion sur le réseau acoustique

- Q36.** L'indice optique du phosphure de gallium GaP est $n_{\text{GaP}} = 3,32$. Calculer la longueur d'onde λ du laser dans le phosphure de gallium en fonction de λ_0 .
- Q37.** L'ordre 1 du réseau correspond à un angle d'incidence θ_B , appelé angle de Bragg, tel que deux rayons se réfléchissant sur des plans successifs ont une différence de marche égale à une longueur d'onde dans le vide λ_0 . Déterminer l'expression de l'angle de Bragg en fonction de λ , c_S et f_S . Faire l'application numérique.

La propriété remarquable d'une cellule de Bragg est qu'elle modifie la fréquence de l'onde laser lors de sa réflexion sur le réseau acoustique. Cet effet s'interprète en introduisant la notion de phonon, qui est une particule associée à l'onde acoustique, au même titre que le photon est une particule associée à une onde lumineuse. Les expressions de l'énergie et de la quantité de mouvement d'un phonon en fonction de la fréquence et de la longueur d'onde de l'onde acoustique ont la même forme que celles du photon.

La réflexion du laser sur le réseau à l'angle de Bragg s'envisage alors de la façon suivante : un photon du laser d'énergie E_L et de quantité de mouvement \vec{p}_L absorbe un phonon de l'onde acoustique, d'énergie E_S et de quantité de mouvement \vec{p}_S : après absorption, le photon du laser a acquis une énergie E'_L et une quantité de mouvement \vec{p}'_L (**figure 13**).

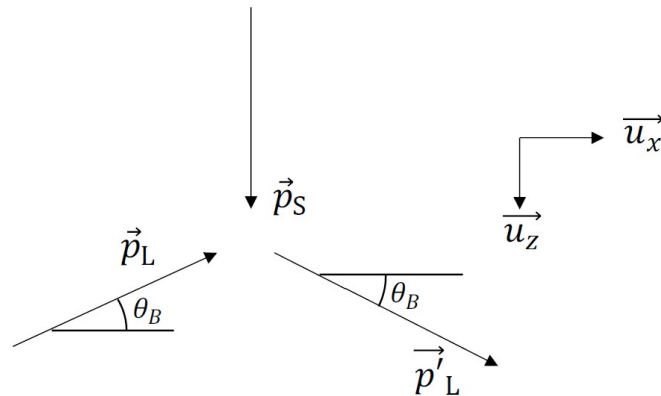


Figure 13 - Absorption d'un phonon par un photon

- Q38.** En traduisant la conservation de l'énergie lors de l'absorption du phonon par le photon du laser, montrer que la fréquence f'_L du laser après réflexion est égale à $f_L + f_S$.
- Q39.** En traduisant la conservation du vecteur quantité de mouvement lors de l'absorption du phonon, montrer qu'on peut retrouver l'expression de l'angle de Bragg établie à la question **Q37**. Comme $f_S \ll f_L$, on négligera la variation de longueur d'onde du photon avant et après absorption du phonon.

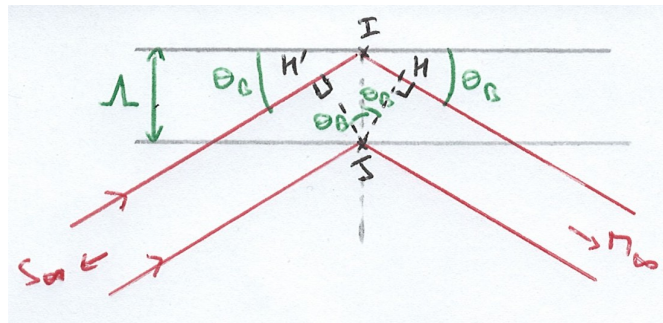
Correction de l'exercice 4

36. Dans un milieu diélectrique linéaire homogène isotrope et transparent, la relation de dispersion est :

$$k = n_{GaP} \frac{\omega}{c} = n_{GaP} k_0 \Rightarrow \lambda = \frac{\lambda_0}{n_{GaP}}$$

A.N. : $\lambda = 155 \text{ nm}$

37. On définit la différence de marche $\delta(M) = (SIM) - (SJM)$. Les ondes sont cohérentes entre elles.



D'après le théorème de Malus, les points H' et J appartiennent à la même surface d'onde relative à S : $(SJ) = (SH')$. D'après le théorème de Malus et le principe de retour inverse de la lumière, les points H et J appartiennent à la même surface d'onde relative à M : $(JM) = (HM)$.
Donc, $\delta(M) = (H'I) + (IH) = n_{GaP}(H'I + IH) = 2n_{GaP}\lambda \sin(\theta_B)$

A l'angle de Bragg, on a d'après l'énoncé, $\delta(M) = \lambda_0 \Rightarrow 2n_{GaP}\Lambda \sin(\theta_B) = \lambda_0 \Rightarrow \theta_B = \arcsin\left(\frac{\lambda}{2\Lambda}\right) = \arcsin\left(\frac{\lambda f_S}{2c_S}\right)$ en utilisant la définition de la vitesse de phase de l'onde acoustique. A.N. : $\theta_B = 4.3 \times 10^{-2^\circ}$

38. Conservation de l'énergie du système isolé {photon + phonon} :

$$E_L + E_S = E'_L \Rightarrow h(f_L + f_S) = hf'_L \Rightarrow f'_L = f_L + f_S$$

39. Comme $f_S = 40 \text{ MHz} \ll f_L \sim 10^{14} \text{ Hz}$, on considère que $f'_L = f_L$, i.e. la longueur d'onde du laser λ se conserve en utilisant la relation de dispersion dans le cristal.

Conservation de la quantité de mouvement du système {photon + phonon} en projection sur \vec{u}_z :

$$-p_L \sin(\theta_B) + p_S = p_L \sin(\theta_B) \Rightarrow \frac{h}{\Lambda} = 2\frac{h}{\lambda} \sin(\theta_B) \Rightarrow \theta_B = \arcsin\left(\frac{\lambda}{2\Lambda}\right) = \arcsin\left(\frac{\lambda f_S}{2c_S}\right)$$

On retrouve bien le même résultat qu'avec le modèle d'optique ondulatoire.