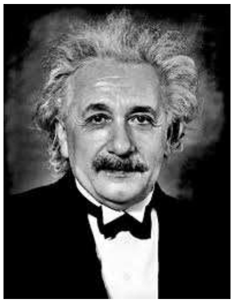
Mécanique quantique

I. **Nature ondulatoire ou corpusculaire**

1. *Historique : mise en évidence du caractère ondulatoire des particules*

En 1905 Einstein montre que la lumière décrite comme une onde par les équations de Maxwell, se comporte aussi comme une corpuscule : le photon.



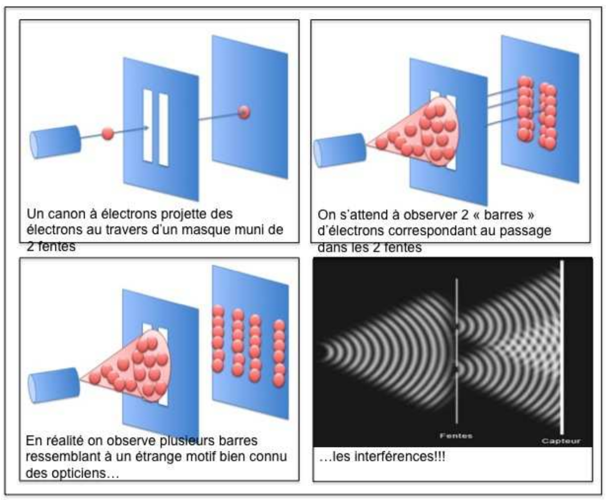
- de masse
- de vitesse (dans le vide)
- d'énergie

- de quantité de mouvement est $p = \dfrac{E}{c}$

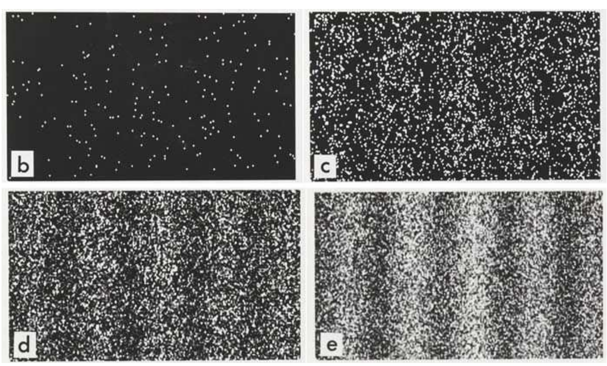
avec $h = 6,6.10^{-34}$ $J.s$ constante de Planck

La question qui en découle est alors : puisque la lumière qui est une onde se comporte également comme une corpuscule, les particules de matière ont-elles un comportement ondulatoire?

Pour répondre à cette question, les physiciens ont réalisé avec des électrons une expérience analogue à celle des fentes d'Young en optique :



Les résultats expérimentaux sont les suivants : b: au bout de quelques secondes, e: au bout de 30 minutes (environ 18 000 impacts).



- **La nature corpusculaire des électrons** est mise en évidence par

- **L'absence de déterminisme** est mise en évidence par

- La nature ondulatoire des électrons est mise en évidence par

2. *Longueur d'onde de De Broglie*

En 1924, Louis de Broglie donne la relation entre la longueur d'onde associée à une particule et son impulsion p (aussi appelée quantité de mouvement):

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

où en mécanique classique $p = m.v$ avec m la masse de la particule et v sa vitesse (inférieure à $0,1c$: hypothèse non relativiste) et $h = 6,6.10^{-34}\ J.s$ est la constante de Planck

Utilisation de la longueur d'onde de De Broglie: Lorsque la longueur d'onde de De Broglie d'une particule est de l'ordre de grandeur de la taille du système, la nature ondulatoire de la particule peut se manifester.

Ordres de grandeur: distance entre deux atomes:.................. taille du noyau:....................

Analogie avec l'optique: la lumière est un phénomène ondulatoire

On note λ:

On note d:

Cas où $\lambda << d$

.

C'est l'approximation de l'optique géométrique pour laquelle la nature ondulatoire de la lumière ne se manifeste pas.

Cas où $\lambda \approx d$

Deux ondes cohérentes qui se rencontrent conduisent au phénomène

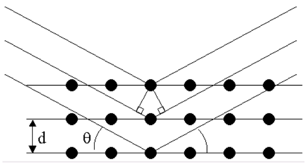
Une onde qui traverse un diaphragme conduit au phénomène

Ces deux phénomènes sont la manifestation de la nature ondulatoire de la lumière

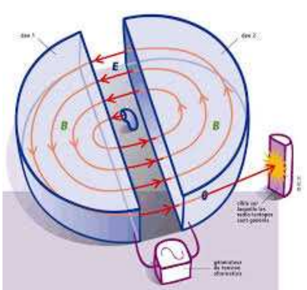
Pour les exemples suivants, calculer la longueur d'onde de De Broglie et commenter le résultat numérique.

Exemple 1 : Balle de ping-pong de masse 3 g et de vitesse 5 m/s.

Exemple 2: Les neutrons thermiques ($m_n = 1,7.10^{-27}\ kg$) de température $T = 300\ K$ servent à sonder les structures cristallines par diffraction (constante de Boltzmann $k_B = 1,4.10^{-23}\ SI$).



Exemple 3 : Dans un cyclotron, des protons ($m_p = 1,7.10^{-27}\ kg$) sont accélérés sous une tension de $3MV$. Ces protons servent, en bombardant la matière, à fabriquer des isotopes radioactifs.



Conclusion: on note d:

et λ:

Cas où $\lambda << d$: on applique les lois de la mécanique classique

On donne les conditions initiales (soit vitesse et position de la particule)

La nature ondulatoire de la particule ne se manifeste pas.

Cas où $\lambda \approx d$: on applique les lois de la mécanique quantique

On parle d'absence de déterminisme :

On parle de probabilité de présence:

Les énergies, vitesse... sont quantifiées et la nature ondulatoire de la corpuscule se manifeste

II. **Fonction d'onde d'une particule**

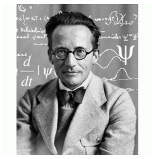
La particule est entièrement caractérisée par une onde caractérisée par la fonction complexe $\underline{\psi}(x,t)$ appelée fonction d'onde (cette fonction est un nombre complexe dépendant du temps et de l'espace).

Sens physique de la fonction d'onde:

Cette fonction d'onde est liée à la probabilité de présence de la particule à l'instant t par:

On en déduit l'unité de $\underline{\psi}(x,t)$:

Equation vérifiée par la fonction d'onde:



Cette fonction d'onde vérifie l'équation de Schrödinger conçue en 1925, équation qui traduit la conservation de l'énergie:

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

m est

$\hbar = 10^{-34}\ J.S$ est

$U(x)$ est

L'équation de Shrödinger traduit la conservation de l'énergie mécanique:

On trouve la fonction d'onde en résolvant l'équation de Schrödinger. L'équation de Schrödinger est une équation différentielle du second ordre en x, la solution de cette équation fait donc intervenir des constantes d'intégration que l'on trouve en utilisant *les conditions aux limites* et la *condition de normalisation* suivantes:

- La fonction d'onde est normalisée:

- Soit un point x_0 qui présente une discontinuité de potentiel (soit $U(x = x_0^-) \neq U(x = x_0^-)$):

Dans le cas où, le potentiel est fini en x_0^+ et en x_0^-, la fonction d'onde $\underline{\psi}(x,t)$ est continue et sa dérivée partielle par rapport à x, $\frac{\partial \underline{\psi}}{\partial x}(x,t)$ est continue, on écrira donc:

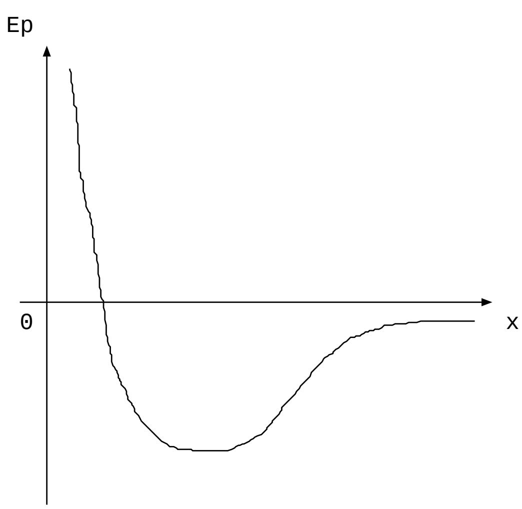
Dans le cas où le potentiel diverge en x_0^+ ou en x_0^-, la fonction d'onde $\underline{\psi}(x,t)$ est continue mais sa dérivée partielle par rapport à x, $\frac{\partial \underline{\psi}}{\partial x}(x,t)$, ne l'est pas, on écrira:

- Dans une zone où le potentiel est infini, la particule a une probabilité de présence nulle: la fonction d'onde est nulle.

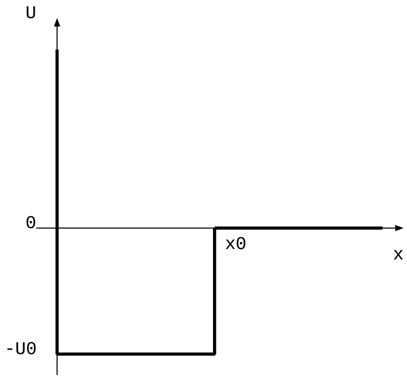
Illustration: prenons l'exemple de l'électron dans l'atome d'hydrogène. On suppose le noyau de charge $+e$ immobile en $x = 0$ et l'électron de charge $-e$ se déplace sur l'axe Ox, on repère sa position par l'abscisse $x > 0$.

Bilan des forces exercées sur l'électron:

Du point de vue de la mécanique classique:



Modélisation de ce potentiel (celle-ce sera donnée dans l'énoncé des exercices):



Exemple : on donne la fonction d'onde d'un électron soumis au potentiel constant U et confiné dans le demi-espace $x > 0$: $\underline{\psi}(x,t) = Ae^{-x/a_0}e^{-\frac{iE_0t}{\hbar}}$.

- Normaliser cette fonction d'onde et en déduire l'expression de A:

- Exprimer la probabilité pour que l'électron se trouve entre $x = 0$ et $x = \dfrac{a_0}{2}$.

1. *Conséquence 1 : théorème de superposition lié à la linéarité de l'équation de Schrödinger*

Retour à l'analogue de l'expérience des fentes d'Young réalisée avec des électrons:

$\underline{\psi}_1(x,t)$:

$\underline{\psi}_2(x,t)$:

$\underline{\psi}(x,t)$:

On a d'après la linéarité de l'équation de Schrödinger: $\underline{\psi}(x,t) =$

.

2. *Conséquence 2 : le déterminisme*

En mécanique classique, on donne les forces qui agissent sur un point matériel et les conditions initiales de ce point matériel, on en déduit

On parle de problème déterministe car pour des conditions initiales données on peut prévoir la trajectoire du point matériel.

En mécanique quantique, on ne connaît pas la position et la vitesse d'une particule à tout instant, on ne peut connaître que la probabilité de présence à un instant. Le problème n'est pas déterministe car pour des conditions initiales identiques, la particule peut suivre des trajectoires différentes.

III. **Etats stationnaires (sur feuille)**

IV. **Vecteur densité de courant de probabilité**

Il peut se faire que la probabilité de présence d'une particule ne soit pas nulle dans une région de l'espace et que malgré cela, la particule ne puisse pas aller dans cette région. Pour comprendre ce phénomène, on introduit une grandeur vectorielle appelée vecteur densité de courant de probabilité noté $\overrightarrow{J}(x,t)$.

Définition :

Son expression est donnée par l'énoncé:

Expression générale : $\overrightarrow{J}(x,t) = \dfrac{i\hbar}{2m}(\underline{\psi}(x,t)\dfrac{\partial\underline{\psi}^*}{\partial x}(x,t) - \underline{\psi}^*(x,t)\dfrac{\partial\underline{\psi}}{\partial x}(x,t))\overrightarrow{e_x}$.

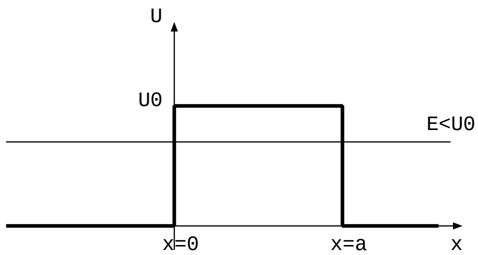
Application : exprimer le vecteur densité de courant pour $\underline{\psi}(x,t) = \underline{A}e^{kx}e^{-iEt/\hbar}$.

Application : exprimer le vecteur densité de courant pour $\underline{\psi}(x,t) = \underline{A}e^{i(kx-Et/\hbar)}$.

V. **Effet tunnel**

1. *Qu'appelle-t-on une barrière de potentiel?*

Modélisation:



Exemple : molécule NH_3 (on note x la distance moyenne entre le doublet non liant et l'azote)

2. *Deux types de fonction d'onde*

Les fonctions d'onde des états stationnaires sont de la forme:

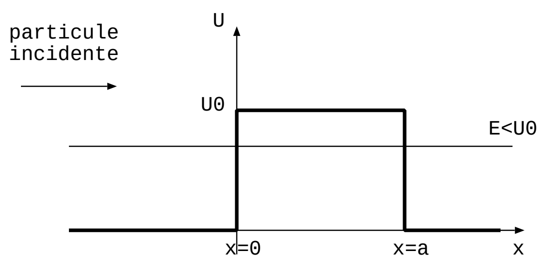
Elles vérifient l'équation de Schrödinger : $-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\partial^2}{\partial x^2}\underline{\psi}(x,t) + U\underline{\psi}(x,t) = i\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}\underline{\psi}(x,t)$

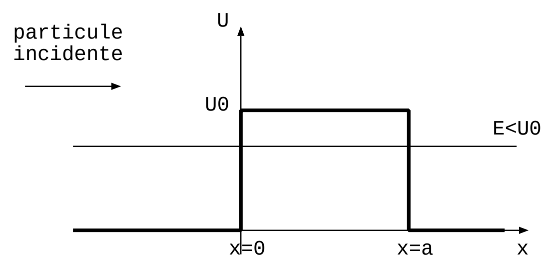
Ce qui conduit à l'équation différentielle vérifiée par $\phi(x)$:

Pour $E > U$:

Pour $E < U$:

3. *Application à barrière de potentiel*





.

La probabilité que la particule soit transmise est d'autant plus grande que:

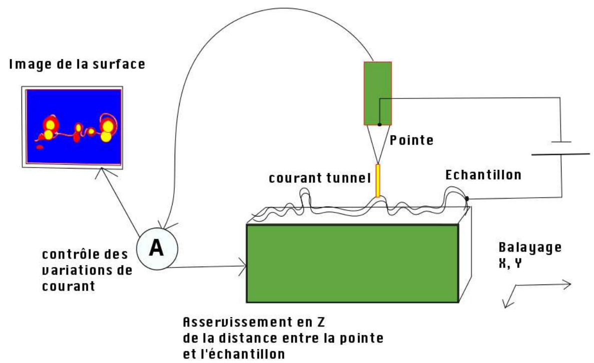
-

-

Conclusion : l'effet tunnel désigne la propriété que possède un objet quantique de franchir une barrière de potentiel même si son énergie est inférieure à l'énergie minimale requise, franchissement impossible selon la mécanique classique. Généralement, la fonction d'onde d'une particule (dont le carré du module représente la densité de probabilité de présence) ne s'annule pas au niveau de la barrière, mais s'atténue à l'intérieur de la barrière de façon exponentielle. Si, à la sortie de la barrière de potentiel, la particule possède une probabilité de présence non nulle, elle peut traverser cette barrière. C'est une conséquence directe de la nature probabiliste de l'onde associée à l'évolution d'une particule quantique.

4. *Application 1 : le microscope à effet tunnel*

Le microscope à effet tunnel, inventé en 1981, sert à déterminer la morphologie de surfaces conductrices ou semi-conductrices avec une résolution spatiale inférieure à la taille des atomes. Une pointe conductrice est placée en face de la surface à étudier. Elle permet le passage d'un courant résultant du passage d'électrons par effet tunnel depuis la surface jusqu'à la pointe. Ce courant très faible (de l'ordre du nA ou du pA) nécessite un dispositif d'amplification. L'intensité de ce courant dépend de la distance entre la surface et la pointe. On utilise un système d'asservissement qui positionne la pointe de façon à ce que le courant garde toujours la même valeur, ce qui correspond à une distance surface-pointe constante. On peut alors reconstituer le profil de la surface analysée. Ce microscope nécessite une surface conductrice, pour un matériau isolant on utilise un microscope à force atomique.

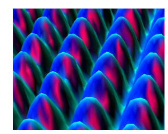


Ordres de grandeur :

distance pointe-échantillon : 1 nm

intensité du courant électrique : 1 nA

tension appliquée : 100 mV



5. *Application 2 : la radioactivité alpha*

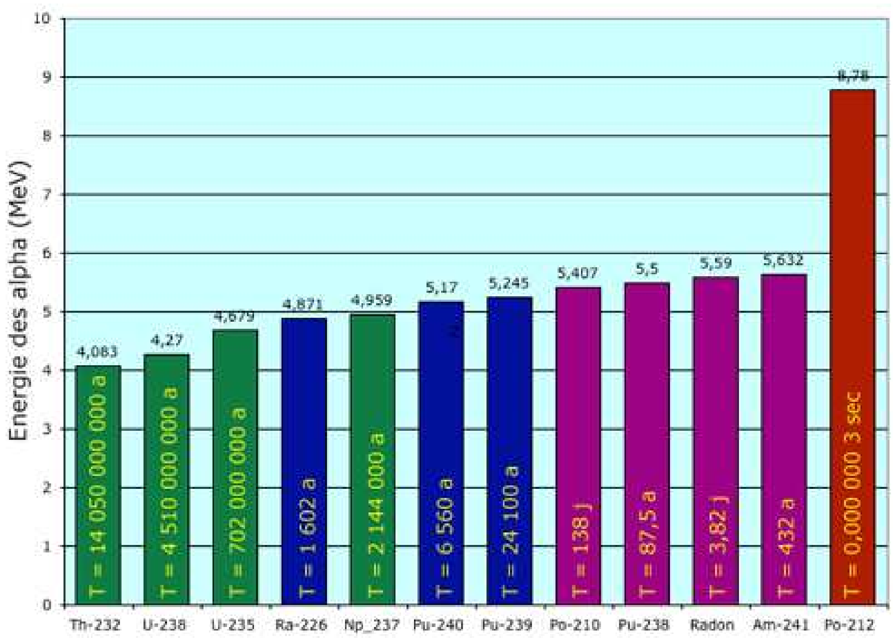
La radioactivité α correspond à la désintégration d'un noyau lourd en un noyau plus léger avec émission d'une particule α : He_2^4.

La réaction nucléaire s'écrit: $X_Z^A->$

où A est le nombre de masse :

où Z est le numéro atomique :

L'énergie libérée par cette réaction nucléaire est sous forme d'**énergie cinétique** pour la particule α (le noyau prend une partie très infime de cette énergie cinétique). L'énergie de la particule α est unique pour une désintégration donnée. On donne l'énergie libérée et les périodes radioactives de différents noyaux:

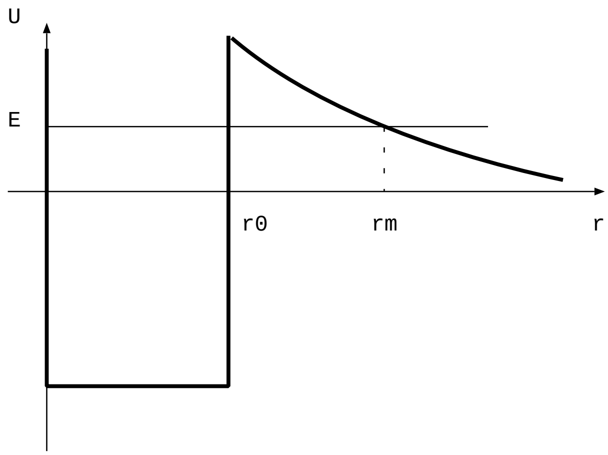


La particule α a pour masse $m = 6,6.10^{-27}\ kg$, justifier par un calcul que la radioactivité α peut s'expliquer par un traitement quantique.

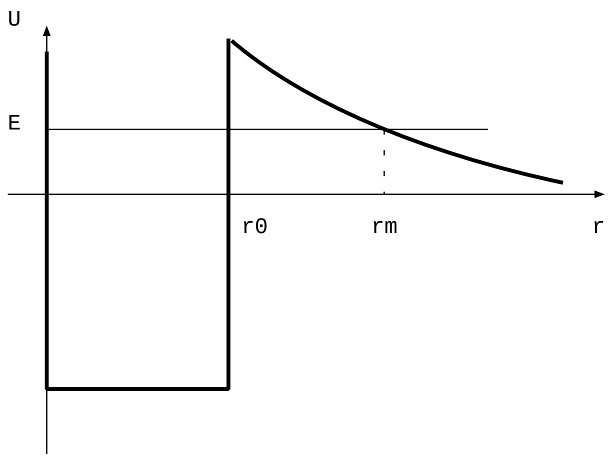
On considère le système particule α et noyau fils Y_{Z-2}^{A-4}. On modélise son énergie potentielle par la fonction suivante. On note r la distance entre la particule α et le noyau fixe immobile en O (le noyau fixe est supposé immobile car

Les forces exercées sur la particule α sont:

Commenter ce modèle et préciser ce que prévoit la mécanique classique.



Que prévoit la physique quantique? En quoi ce modèle permet d'interpréter le fait que la durée de vie d'un noyau radioactif est une fonction décroissante de l'énergie de la particule α libérée?



VI. **Etude d'une particule libre**

Soit une particule libre de masse m, de vitesse v, d'énergie E et d'énergie potentielle nulle. Cette particule se déplace sur l'axe Ox. On note $k = \dfrac{2\pi}{\lambda_{DB}}$, le vecteur d'onde associé à la particule.

Exprimer sa quantité de mouvement en fonction de $\hbar$ et k.

Exprimer son énergie E en fonction de $\hbar$, m et k.

On cherche la fonction d'onde sous la forme d'une OPPH: $\underline{\psi}(x,t) = Ce^{i(kx-\omega t)}$.

Vérifier qu'il s'agit bien d'un état stationnaire.

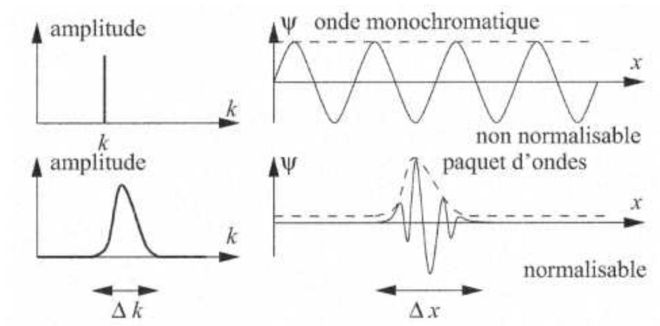
On donne l'équation de Schrödinger: $-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\partial^2}{\partial x^2}\underline{\psi}(x,t) + U(x)\underline{\psi}(x,t) = i\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}\underline{\psi}(x,t)$.

Exprimer $\hbar\omega$ en fonction de $\hbar$, m et k. En déduire ce que représente $\hbar\omega$. Commenter.

En déduire la relation de dispersion puis la vitesse de phase puis la vitesse de groupe en fonction de la vitesse de la particule. Conclure.

Ecrire la normalisation de la particule. Conclure.

Une particule libre est donc mieux représenté par un paquet d'onde soit:



On retient l'inégalité d'Heisenberg aussi appelée relation d'indétermination:

Comment évolue le paquet d'onde au cours du temps?