

Reste à démontrer théoriquement l'existence de la quantification...

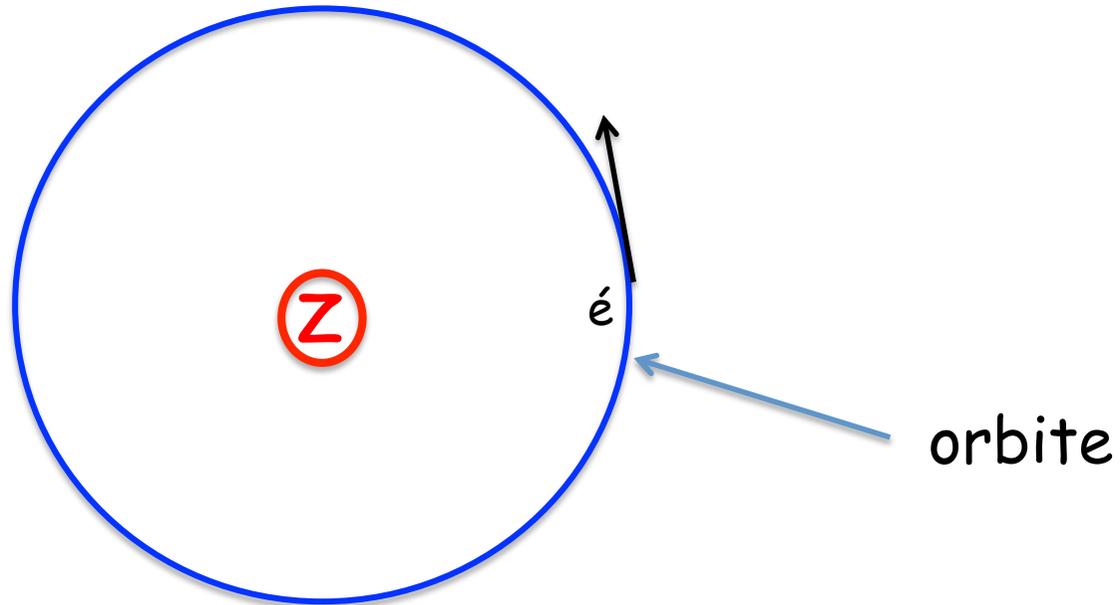


**Modèle de Bohr
(1913)**

Modèle de Bohr

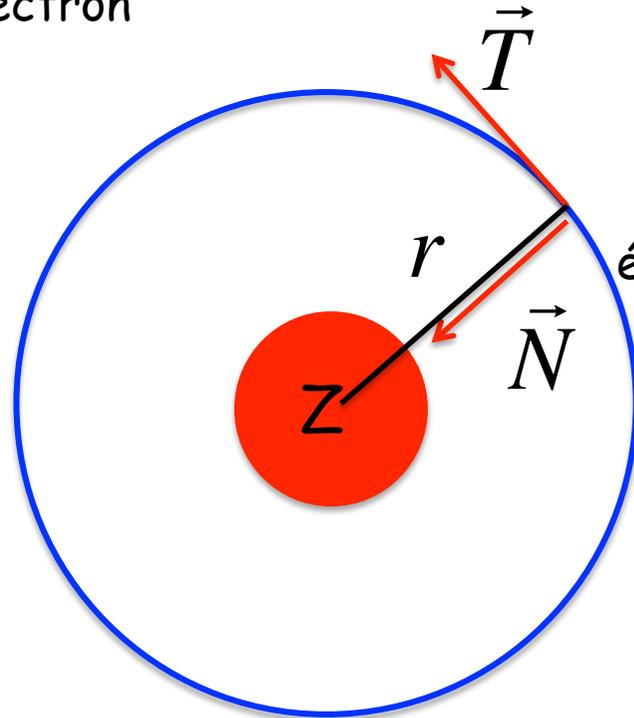
Modèle planétaire: l'électron décrit une trajectoire (orbite) circulaire autour du noyau de charge Z

Ingrédients



Modèle de Bohr

r est la distance Noyau-électron



Equation fondamentale de la dynamique: $\sum \vec{F} = m_e \vec{\gamma}$

$$\vec{\gamma} = \frac{dv}{dt} \vec{T} + \frac{v^2}{r} \vec{N}$$

Modèle de Bohr

Mouvement circulaire uniforme :

$$\frac{dv}{dt} = 0 \Rightarrow \vec{\gamma} = \frac{v^2}{r} \vec{N}$$

Forces en présence:

1-Attraction d'origine électrostatique é-Noyau

$$\vec{F}_{Coulomb} = \frac{Z|e|^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \vec{N}$$

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} = 8.99 \cdot 10^9 \text{ Nm}^2 / \text{C}^2$$

2-Attraction gravitationnelle é-Noyau

$$\vec{F}_G = G \frac{m_e M_N}{r^2} \vec{N}$$

$$\|\vec{F}_{Coulomb}\| \approx \frac{|1.602 \cdot 10^{-19}|^2}{10^{-20}} \cdot 8.99 \cdot 10^9 = 2.310^{-8} \text{ Newton}$$

$$G = 6,6742 \cdot 10^{-11} \text{ N} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{kg}^{-2}$$

AN:

$$\|\vec{F}_{Grav.}\| \approx 6.6742 \cdot 10^{-11} \frac{|1.673 \times 10^{-27} \cdot 9.1110^{-31}|}{10^{-20}} \approx 10^{-47} \text{ Newton}$$

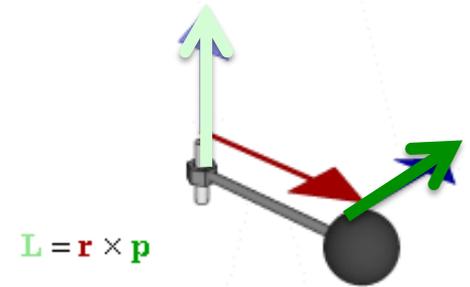
$$\|\vec{F}_{Coulomb}\| \gg \|\vec{F}_G\| \Rightarrow m_e \vec{\gamma} \approx \frac{Z|e|^2}{4\pi\epsilon_0 r} \vec{N} = m_e \frac{v^2}{r} \vec{N}$$

Modèle de Bohr

Hypothèse fondamentale de Bohr: Seules certaines orbites sont possibles le moment cinétique de l'électron est quantifiée.

$$\vec{J} = \vec{r} \wedge \vec{p} = m_e \vec{r} \wedge \vec{v} = n\hbar = n \frac{h}{2\pi}$$

$$[h] = \text{Js} = \text{KL}^2\text{T}^{-2} \cdot \text{T} \quad [J] = \text{L KLT}^{-1} = [h]$$



Pour une trajectoire circulaire, $\vec{r} \perp \vec{v} \Rightarrow \vec{r} \wedge \vec{v} = \|\vec{r}\| \|\vec{v}\|$

➔ $\frac{Z|e|^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} = m_e \frac{v^2}{r}$ avec $J = m_e r v = n\hbar$

Modèle de Bohr



$$v = \frac{n\hbar}{m_e r} \Rightarrow \frac{|e|^2 Z}{4\pi\epsilon_0 r^2} = m_e \frac{n^2 \hbar^2}{m_e^2 r^3}$$
$$\Rightarrow \frac{1}{r} = \frac{|e|^2 Z m_e}{4\pi\epsilon_0 n^2 \hbar^2}$$

Expression de l'énergie totale du système électron-Noyau (fixe)

$$E_{totale} = E_c^e + E_p = \frac{1}{2} m_e v^2 + E_p (?)$$

Modèle de Bohr

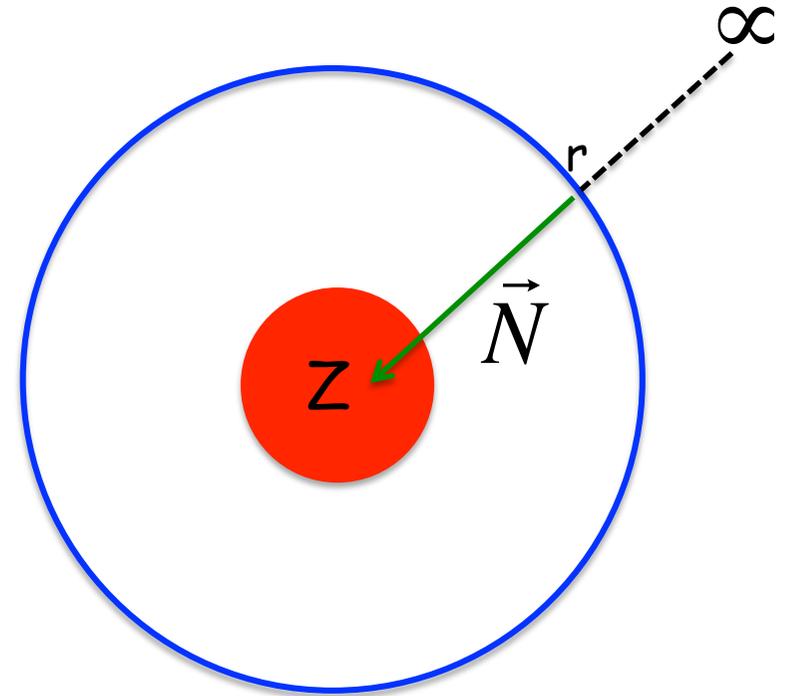
$$\text{Def : } \Delta E_p = E_p(\infty) - E_p(r) = - \int_r^\infty \delta W_{ext} = - \int_r^\infty \vec{F}_{ext} \cdot \vec{dr}$$

$$\vec{F}_{ext} = \vec{F}_{coulomb} = \frac{Z|e|^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \vec{N}, \quad \vec{dr} = -\vec{N} dr$$

$$\int_r^\infty \delta W_{ext} = \int_r^\infty \vec{F}_{ext} \cdot \vec{dr} = - \int_r^\infty \frac{Z|e|^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} dr = \frac{Z|e|^2}{4\pi\epsilon_0} \left[\frac{1}{r} \right]_r^\infty = - \frac{Z|e|^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

$$\Rightarrow \Delta E_p = E_p(\infty) - E_p(r) = \frac{Z|e|^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

$$\Rightarrow E_p(r) = - \frac{Z|e|^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$



Modèle de Bohr

$$E_{\text{totale}} = E_c + E_p = \frac{1}{2} m_e v^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r}$$

$$\text{or } \frac{mv^2}{r} = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \Rightarrow E_c = \frac{1}{2} mv^2 = \frac{1}{2} \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{E_p}{2}$$

Modèle de Bohr

$$E_{\text{totale}} = E_c + E_p = \frac{E_p}{2} = -\frac{1}{2} \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{Ze^2}{2} \frac{|e|^2 Z m_e}{(4\pi\epsilon_0)^2 n^2 \hbar^2} = -\frac{1}{2} \left[\frac{Z^2 |e|^4 m_e}{(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} \right] \frac{1}{n^2}$$

$$E_{\text{totale}} = -\frac{1}{2} \left[\frac{m_e |e|^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} \right] \frac{Z^2}{n^2} \quad \rightarrow \quad E=f(n)$$

Les niveaux d'énergie sont quantifiés (nombre quantique principal n)

L'atome peut passer d'un état d'énergie E_i à un état d'énergie E_f par absorption ou émission d'un photon:

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

Dimension Termes entre crochets:

$$\left[\frac{m_e |e|^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} \right] = \frac{KC^4}{J^2 T^2 (C^2 N^{-1} L^{-2})^2} = \frac{KN^2 L^4}{J^2 T^2}$$

$$\left[E_c = \frac{1}{2} m v^2 \right] = [J] = KL^2 T^{-2}$$

$$[W \Leftrightarrow J] = [F.L] = N L \Rightarrow N = \frac{KL^2 T^{-2}}{L} = KLT^{-2}$$

$$\Rightarrow \frac{KN^2 L^4}{J^2 T^2} = \frac{K(K^2 L^2 T^{-4}) L^4}{(K^2 L^4 T^{-4}) T^2} = KL^2 T^{-2} = J$$

Dimension de ?? $\left[\frac{(4\pi\epsilon_0)\hbar^2}{m_e |e|^2} \right]$

$$\left[\frac{m_e |e|^2}{(4\pi\epsilon_0)\hbar^2} \right] = \frac{KC^2}{J^2 T^2 (C^2 N^{-1} L^{-2})} = \frac{KNL^2}{J^2 T^2}$$

$N = KLT^{-2}$ 

$$\Rightarrow \frac{KNL^2}{J^2 T^2} = \frac{K(KLT^{-2})L^2}{(K^2 L^4 T^{-4})T^2} = L^{-1}$$

$$\left[\frac{(4\pi\epsilon_0)\hbar^2}{m_e |e|^2} \right] = L = a_o \text{ (rayon de Bohr)}$$

Expression de E_{totale} en fonction du rayon de Bohr

$$E_{\text{totale}} = -\frac{1}{2} \left[\frac{m_e |e|^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} \right] \frac{Z^2}{n^2} = -\frac{1}{2} \frac{e'^2}{a_o} \frac{Z^2}{n^2}$$

(avec $e'^2 = \frac{|e|^2}{4\pi\epsilon_0}$ et $\left[\frac{(4\pi\epsilon_0)\hbar^2}{m_e |e|^2} \right] = a_o$ (rayon de Bohr))

$$E_{\text{totale}} = -\frac{1}{2} \left[\frac{m_e |e|^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} \right] \frac{Z^2}{n^2} = -\frac{1}{2} \frac{e'^2}{a_0} \frac{Z^2}{n^2}$$

$$\frac{e'^2}{a_0} = 27.2 \text{ eV}$$

Si $Z=1$ (atome H)

$$E_1 = -\frac{1}{2} * \frac{e'^2}{a_0} = -13.6 \text{ eV}$$

$$E_2 = -\frac{1}{2} * \frac{e'^2}{4a_0} = -3.4 \text{ eV}$$

$$E_3 = -\frac{1}{2} * \frac{e'^2}{9a_0} = -1.51 \text{ eV... etc}$$

$$\frac{1}{r} = \frac{|e|^2 Z m_e}{4\pi\epsilon_0 n^2 \hbar^2}$$

$$\Rightarrow r = \frac{4\pi\epsilon_0 n^2 \hbar^2}{|e|^2 Z m_e} = n^2 \frac{a_0}{Z}$$

Cours 1

-Quantification de l'énergie (Planck, $E=h\nu$)

-Quantification des niveaux d'énergie (Modèle de Bohr)

$$E_{totale} = -\frac{1}{2} \left[\frac{m_e |e|^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} \right] \frac{Z^2}{n^2} = -\frac{1}{2} \frac{e'^2}{a_0} \frac{Z^2}{n^2}$$

Cours 2/3

-Le Photon $E = h\nu, p = \hbar k = \frac{h}{\lambda}$

$$\Rightarrow r = \frac{n^2}{Z} \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{|e|^2 m_e} = \frac{n^2}{Z} a_0 \quad \left[\frac{(4\pi\epsilon_0) \hbar^2}{m_e |e|^2} \right] = a_0$$

-Dualité Onde-corpuscule (onde associée à toute particule, De Broglie) $E, p = \hbar k = \frac{h}{\lambda}$

-Equation de Schrödinger (équation d'onde d'une particule) $i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = H\Psi(\vec{r}, t)$

-Particule libre: fonction d'onde \Rightarrow onde plane \Rightarrow paquet d'onde \Rightarrow Relation d'incertitude d'Heisenberg

-Particule libre dans une boîte (de potentiel)

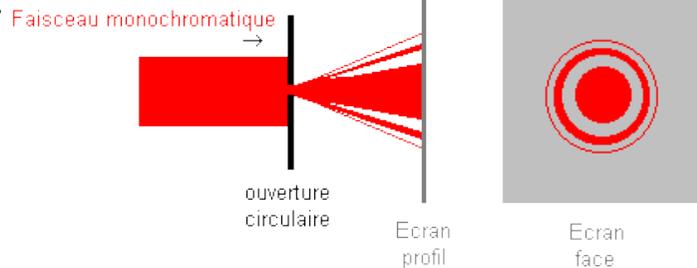
-Effet tunnel

Dualité Onde-corpuscule

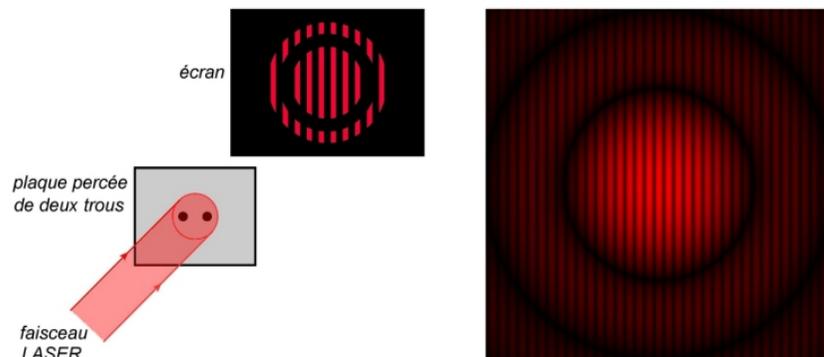
Onde

Diffraction

Lorsque un faisceau lumineux rencontre un obstacle ou une ouverture dont les dimensions sont voisines de sa longueur d'onde, la lumière ne se propage plus en ligne droite



Interférences lumineuses

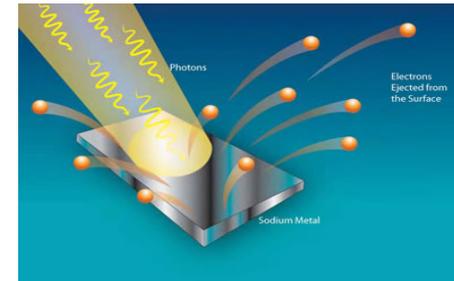


Expérience des trous de Young

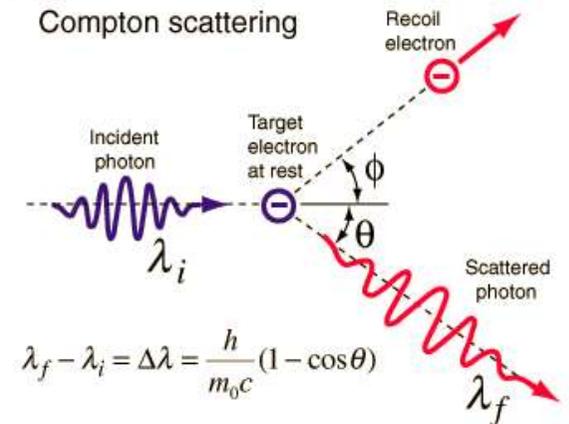
Corpuscule

Effet photoélectrique

En 1905, Albert Einstein : la lumière serait constituée de petits « grains d'énergie » qui transportent chacun une énergie



Effet Compton



Pour Einstein, le photon est une particule transportant l'énergie

$$E = h\nu$$

Mais la lumière (vide) se propage à la vitesse de la lumière: les photons sont relativistes

$$\vec{p} = \gamma m_0 \vec{v} \quad E = \gamma m_0 c^2 \quad \text{avec } \gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$$

ou

$$\vec{p} = E \frac{\vec{v}}{c^2} \quad E = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \quad m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$$

Puisque la vitesse du photon est égale à la vitesse de la lumière c , $v=c$

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \Rightarrow \infty \quad !!$$

L'énergie du photon $E = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$ serait donc indéterminée ??

Or d'après Planck et Einstein, l'énergie du photon possède une valeur finie,

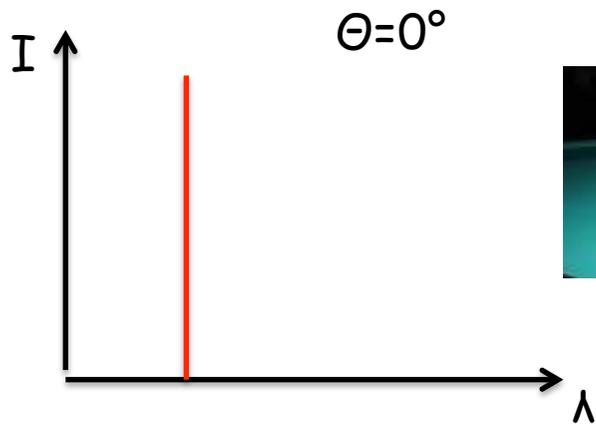
$$E = h\nu$$

La contradiction ne peut être levée que si l'on considère que la masse du photon est nulle ($m_0=0$) et $E=h\nu$ est la valeur limite $E=mc^2$, lorsque $v \rightarrow c$

$$\lim_{v \rightarrow c} E^{mc^2} \Rightarrow h\nu$$

Le photon ne peut-être considéré que comme une particule de masse nulle et de vitesse limite c

Effet Compton



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

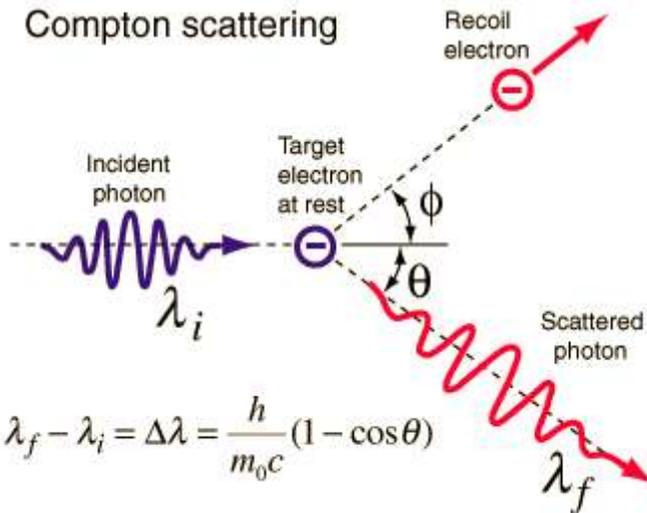
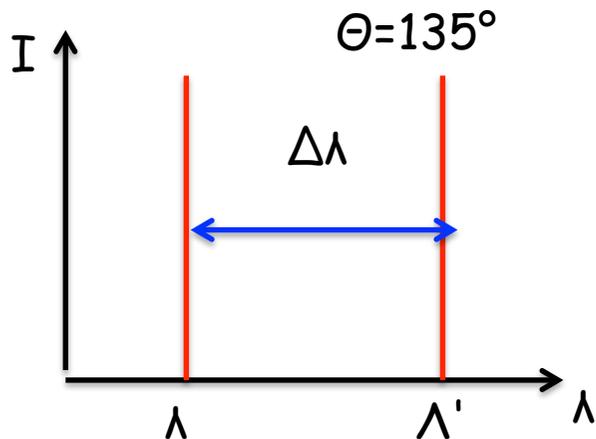
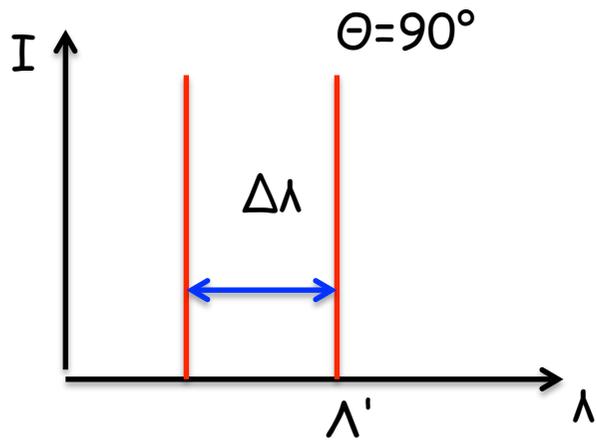
$$h\nu + m_0 c^2$$

Conservation de la quantité de mvt

Conservation de l'énergie

$$\vec{p} = \vec{p}_e + \vec{p}'$$

$$h\nu + m_0 c^2 = E_e + h\nu'$$



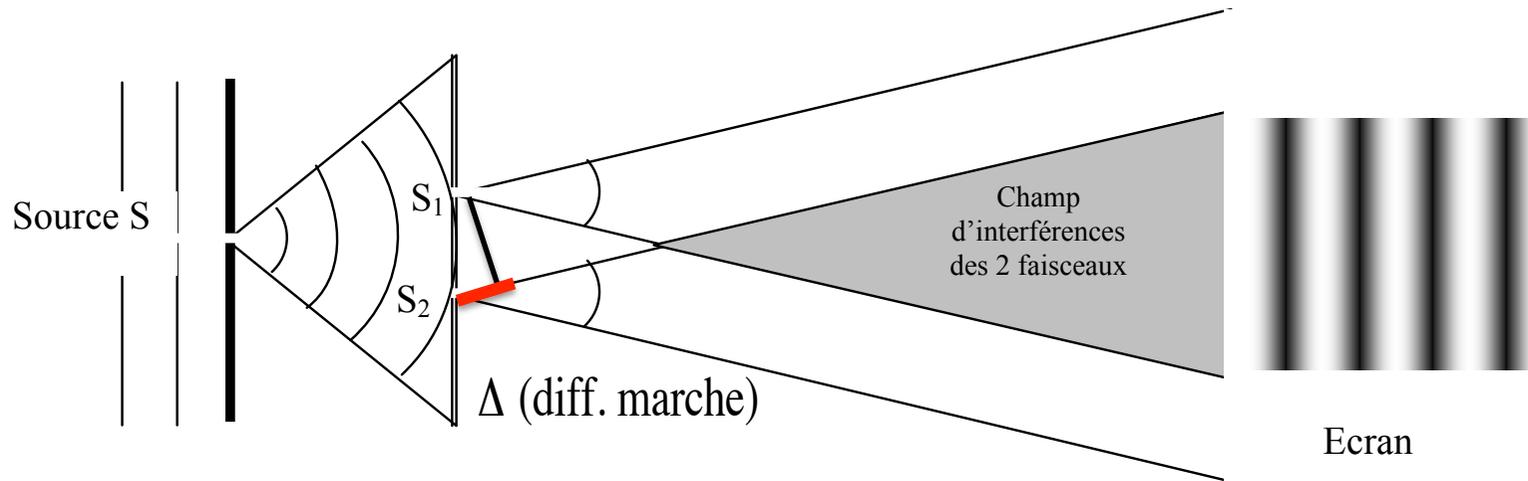
Loi

$$\lambda_f - \lambda_i = \Delta\lambda = \frac{h}{m_0 c} (1 - \cos\theta)$$

Dualité Onde-corpuscule

Fonction d'onde

Retour sur l'expérience des fentes d'Young: Constat=> Figure d'interférences:



-S'explique **difficilement d'un point de vue corpusculaire**:

Trajectoires particulières pour les photons ou bien interaction photon-photon ??

-S 'explique **aisément** par un aspect purement ondulatoire

$$I(x) = |E(x)|^2 = |E_1(x) + E_2(x)|^2 = |E_1(x)|^2 + |E_2(x)|^2 + 2|E_1(x)||E_2(x)|\cos\phi$$

$$\Delta \Rightarrow \text{diff. phase} \Rightarrow \phi = \frac{2\pi\Delta}{\lambda} \quad \text{si } \Delta = k\lambda \Rightarrow \cos\frac{2\pi\Delta}{\lambda} = 1 \Rightarrow I(x) \neq 0 \text{ (interférences constructives)}$$

$$\text{si } \Delta = \frac{(2k+1)}{2}\lambda \Rightarrow \cos\frac{2\pi\Delta}{\lambda} = -1 \Rightarrow I(x) = 0 \text{ (interférences destructives)}$$

Mais plusieurs faits troublants:

-Si on diminue l'intensité lumineuse (photon passe 1/1) => Cliquetis sur la plaque preuve d'un impact d'un « corpuscule » sur l'écran

La figure d'interf. est pourtant reconstituée après passage (1x1) d'un grand nombre de photons !!

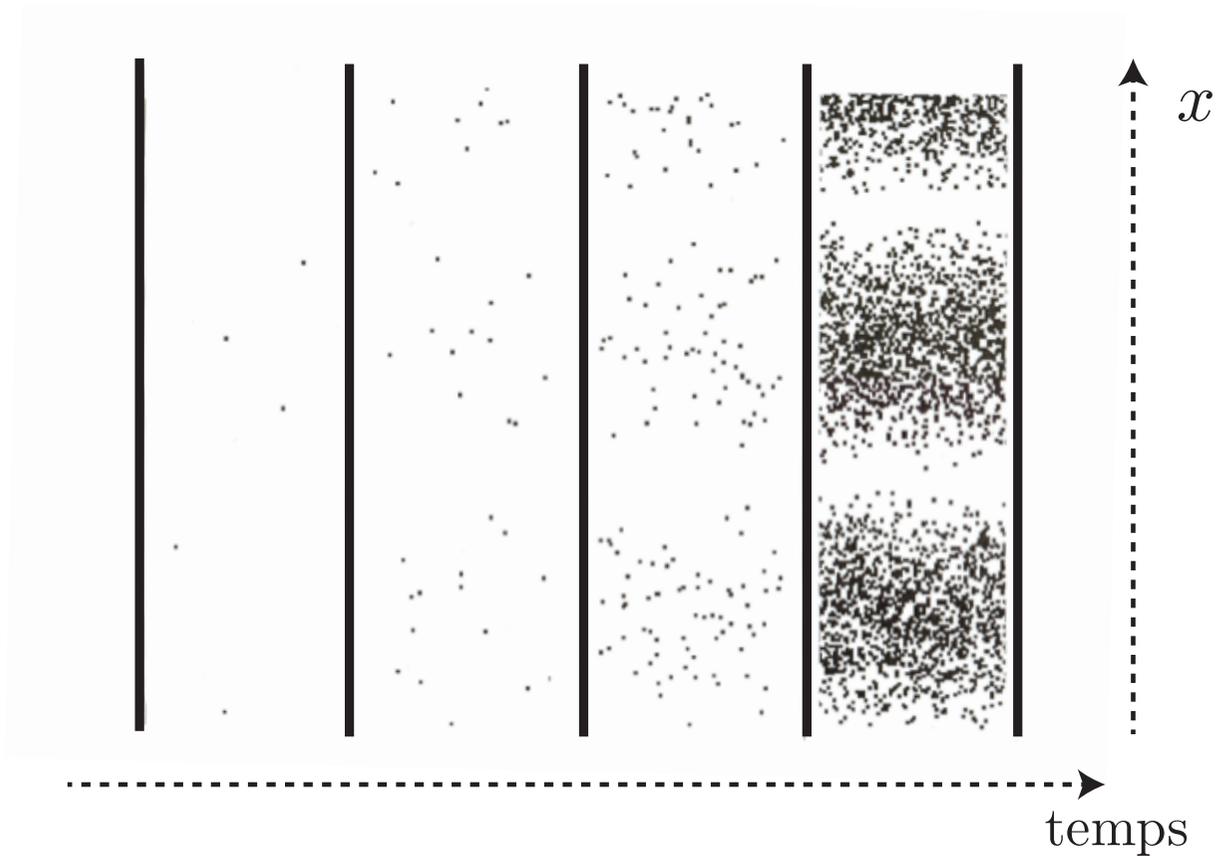
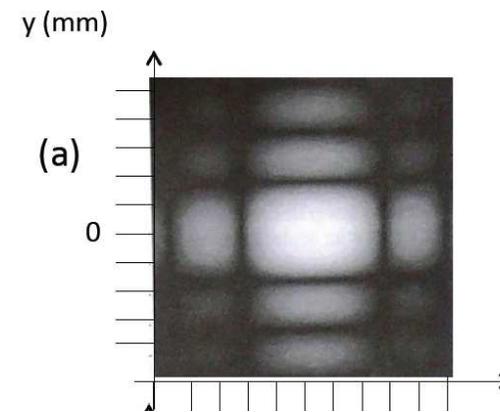
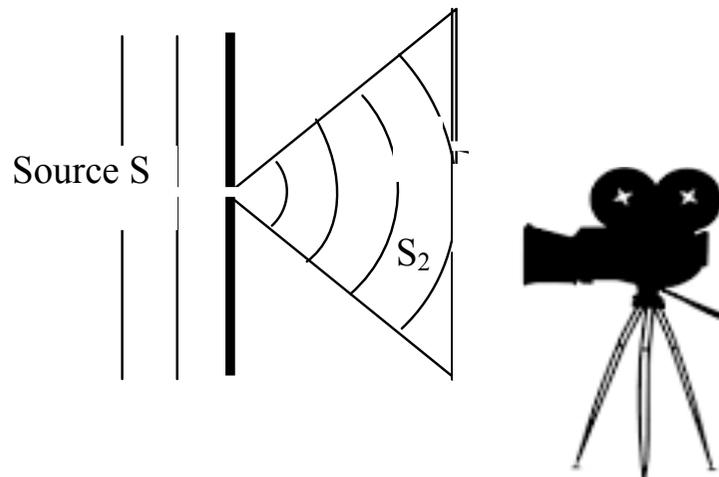
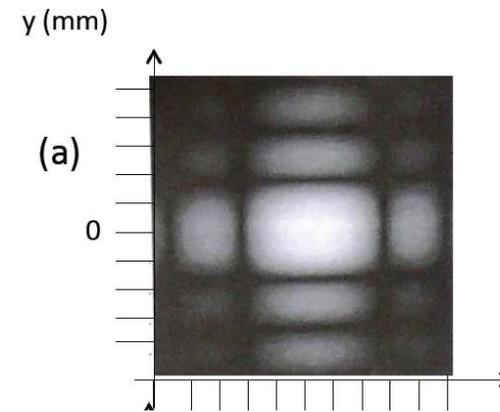
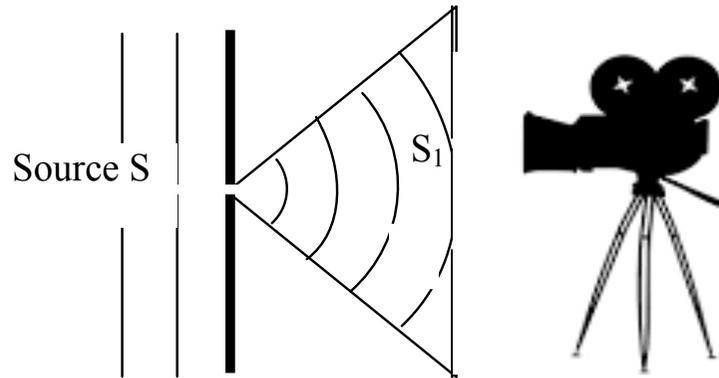


FIGURE 2 – Images prises à la caméra CCD après 5, 38, 140 et 1080 impacts de photons (de gauche à droite).

-Si l'on cherche à savoir par où est passé le photon (S_1 ou S_2): 50% / 50%
Mais on détruit la figure d'Interférences !!! => figure de diffraction d'une fente rect.)



Conclusions:

1-On ne peut connaître précisément la trajectoire associée à une particule quantique (le photon est-il passé par S1 ou S2 ??) sans détruire la figure d'interférence

=> La mesure perturbe le système

On doit dès lors considérer que la figure d'interférence résulte de la combinaison des amplitudes de probabilité de savoir par où (S1 ou S2) est passé le photon

Les aspects ondulatoire et corpusculaire du photon (lumière) sont intimement liés

C'est la dualité Onde-Corpuscule

Cours 1

-Quantification de l'énergie (Planck, $E=h\nu$)

-Quantification des niveaux d'énergie (Modèle de Bohr)

$$E_{totale} = -\frac{1}{2} \left[\frac{m_e |e|^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} \right] \frac{Z^2}{n^2} = -\frac{1}{2} \frac{e'^2}{a_0} \frac{Z^2}{n^2}$$

Cours 2/3

-Le Photon $E = h\nu, p = \hbar k = \frac{h}{\lambda}$

$$\Rightarrow r = \frac{n^2}{Z} \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{|e|^2 m_e} = \frac{n^2}{Z} a_0 \quad \left[\frac{(4\pi\epsilon_0) \hbar^2}{m_e |e|^2} \right] = a_0$$

-Dualité Onde-corpuscule (onde associée à toute particule, De Broglie) $E, p = \hbar k = \frac{h}{\lambda}$

-Equation de Schrödinger (équation d'onde d'une particule) $i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = H\Psi(\vec{r}, t)$

-Particule libre: fonction d'onde \Rightarrow onde plane \Rightarrow paquet d'onde \Rightarrow Relation d'incertitude d'Heisenberg

-Particule libre dans une boîte (de potentiel)

-Effet tunnel

Relation de Louis de Broglie

Dualité Onde-Corpuscule

A toute particule, on associe un aspect corpusculaire et ondulatoire

Photon

$$E = h\nu$$

$$\vec{p} = \hbar\vec{k}, \quad \lambda = \frac{h}{p}$$

Corpuscule

$$E$$

$$\vec{p} = \hbar\vec{k}, \quad \lambda = \frac{h}{p}$$

Exemple 1: Grain de poussière

$$\begin{aligned}\varnothing &= 1 \mu\text{m}, \\ m &= 10^{-15} \text{ kg} \\ v &= 1 \text{ mm/s}\end{aligned}$$

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{6.62 \cdot 10^{-34}}{m v} = \frac{6.62 \cdot 10^{-34}}{10^{-15} \cdot 10^{-3}} \approx 6.6 \cdot 10^{-16} \text{ m}!!$$

Une telle longueur d'onde est négligeable / taille du grain de poussière $\mu\text{m} \Rightarrow 10^{-6} \text{ m}!!$

Exemple 2: Neutron $m_n = 1.67 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$

$$\frac{1}{2} m_n v^2 = \frac{p^2}{2m_n} = \frac{3}{2} kT \quad (k = k_B = 1.38 \cdot 10^{-23} \text{ JK}^{-1})$$

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{6.62 \cdot 10^{-34}}{\sqrt{3m_n kT}}$$

A $T = 300 \text{ K}$ $\lambda \approx 1.4 \cdot 10^{-10} \text{ m}$ (distance entre atomes au sein d'un réseau cristallin: diffraction, interférences)

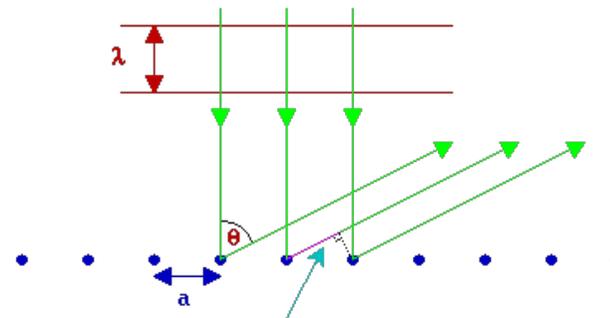
Exemple 3: Accélération d'un électron dans un accélérateur de particules

$$E = |e|V$$

$$\text{Pour } V = 1 \text{ Volt} \Rightarrow E = 1.602 \cdot 10^{-19} \text{ J} \Rightarrow E = 1 \text{ eV}$$

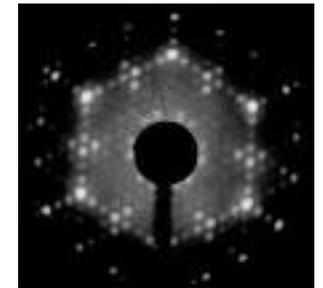
$$E = \frac{1}{2} m_e v^2 = \frac{p^2}{2m_e} \Rightarrow p = \sqrt{2m_e E} = \sqrt{2m_e |e|V}$$

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m_e |e|V}} = \frac{12.3}{\sqrt{V}} \text{ \AA}$$



$$d = a \sin \theta$$

$d = n\lambda \Rightarrow$ interférences constructives



Pour des accélérations de plusieurs centaines d'électron-volt, on obtient des longueurs de de Broglie de l'ordre des distances interatomiques \Rightarrow interférences

Relation de Louis De Broglie

Exemple 4: Accélération d'un électron dans un accélérateur de particules relativistes

$$E = \sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4}$$

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

Si particule très relativiste: $E \approx pc \Rightarrow \lambda = \frac{h}{p} = \frac{hc}{E}$

$$\text{Si } E = 1 \text{ GeV} = 10^9 \text{ eV} \Rightarrow \lambda = \frac{hc}{E} = \frac{6.62 \cdot 10^{-34} \cdot 3 \cdot 10^8}{10^9 \cdot 1.602 \cdot 10^{-19}} \approx 1.2 \cdot 10^{-15} \text{ m}$$

$\Rightarrow 1.2 \text{ Fermi } (\approx 10^{-15} \text{ m})$

\Rightarrow On peut explorer la structure du noyau atomiques à l'aide d'électrons relativistes

Rappel: Equation d'onde pour les ondes

Eq. d'onde (1 dim)

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2}$$

Nombre d'onde
pulsation

$$\Psi(x, t) = A \cos(kx - \omega t) \text{ avec } k = \frac{2\pi}{\lambda}, \omega = 2\pi\nu = \frac{2\pi c}{\lambda}$$

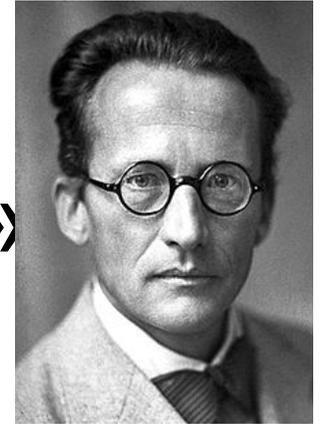
$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \Psi(x, t) = A\omega \frac{\partial}{\partial t} \sin(kx - \omega t) = -A\omega^2 \cos(kx - \omega t)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) = -Ak \frac{\partial}{\partial t} \sin(kx - \omega t) = -Ak^2 \cos(kx - \omega t)$$

$$\Rightarrow -\frac{1}{c^2} \omega^2 \Psi(x, t) = -k^2 \Psi(x, t) \Rightarrow k = \frac{\omega}{c} = \frac{2\pi c}{\lambda c} = \frac{2\pi}{\lambda}$$

Equation de Schrödinger

« l'équation d'onde des corpuscules »



$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = H \Psi(\vec{r}, t)$$

Hamiltonien ou opérateur H

Fonction d'onde
du système

Eq de Schrödinger pour une particule de masse m dans un champ de potentiel $V(r,t)$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \left[\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta}_{\text{Opérateur énergie cinétique}} + \underbrace{V(\vec{r}, t)}_{\text{Opérateur Énergie potentielle}} \right] \Psi(\vec{r}, t)$$

Opérateur Laplacien

Equation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta \Psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t)$$

Plusieurs cas :

I-V est indépendant du temps et est nul: $V = \text{cte} = 0$  « Particule libre »

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta \Psi(\vec{r}, t)$$

Equation de Schrödinger

Soit $\Psi(\vec{r}, t) = f(t) g(\vec{r})$

$$i\hbar g(\vec{r}) \frac{\partial f(t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} f(t) \Delta g(\vec{r})$$

Divisons par $\Psi(\vec{r}, t) = f(t) g(\vec{r})$

$$i\hbar \frac{1}{f(t)} \frac{\partial f(t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{1}{g(\vec{r})} \Delta g(\vec{r})$$

Pour que l'égalité soit vérifiée, il faut $i\hbar \frac{1}{f(t)} \frac{\partial f(t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{1}{g(\vec{r})} \Delta g(\vec{r}) = Cte$

Equation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{1}{f(t)} \frac{\partial f(t)}{\partial t} = Cte \Rightarrow f(t) = e^{-iCt/\hbar}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta g(\vec{r}) = Cg(\vec{r})$$

Equation Schrödinger indépendante du temps
Equation aux valeurs propres



« la mesure est C, la particule restant dans l'état propre $g(r)$ »

« je fais la mesure de l'énergie cinétique de ma Particule libre dans l'état propre $g(r)$ »

Equation de Schrödinger

Dimension de la constante ? C  Energie (E)

Proof $\left[\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta \right] = \frac{J^2 T^2}{K L^2} = \frac{K^2 L^4 T^{-4} T^2}{K L^2} = K L^2 T^{-2} = J(\text{joule})$

Pour une particule « libre » $E = E_{\text{cinétique}} \Rightarrow E = E_c = \frac{\vec{p}^2}{2m_e}$

Or d'après L. De broglie $p = \hbar k \Rightarrow E_c = \frac{p^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta \right] g(\vec{r}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} g(\vec{r}) \Rightarrow \Delta g(\vec{r}) = -k^2 g(\vec{r}) \quad \text{orange arrow} \quad g(\vec{r}) \text{ de la forme } e^{i\vec{k}\vec{r}}$$



$$\Psi(r, t) = f(t)g(r) = Ae^{i(\vec{k}\vec{r} - Et/\hbar)}$$

Analogie avec une onde plane

$$OP(\vec{r}, t) = Ae^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)} \Leftrightarrow \Psi(\vec{r}, t) = Ae^{i(\vec{k}\vec{r} - Et/\hbar)}$$

$$\Rightarrow E = \hbar\omega \text{ (énergie particule libre)}$$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} \Rightarrow \omega = \frac{\hbar k^2}{2m_e} \quad (\text{rappel photon: } \hbar\omega = h\nu \Rightarrow \omega = \frac{2\pi c}{\lambda})$$

Rmq : onde plane dans le vide: $v_\varphi = \frac{\omega}{k} = c$ (milieu non dispersif)

$$\text{particule: } v_\varphi = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar k}{2m_e} \text{ (milieu dispersif)}$$

Expression de l'opérateur \hat{p}

$$\Psi(x, t) = Ae^{i(k_x x - \omega t)} \text{ fonction propre de } \hat{p} \Leftrightarrow \hat{p}\Psi(x, t) = \hbar k \Psi(x, t)$$

$$\hat{p}_x \Psi(x, t) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t) \Rightarrow \hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

$$\vec{p} = -i\hbar \left[\overrightarrow{\text{grad}} \right] \Rightarrow \hat{p}^2 = -\hbar^2 \Delta \quad \text{On retombe sur nos pieds} \quad i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \frac{\hat{p}^2}{2m_e} \Psi(\vec{r}, t)$$

Relation d'incertitude Heisenberg

$$\Psi(\vec{r}, t) = f(t)g(\vec{r}) = Ae^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)}$$

Onde plane

Définition: la densité de probabilité (proba/unité de volume) de trouver la particule en r à l'instant t est donnée par:

$$|\Psi(\vec{r}, t)|^2 = |A|^2 \left[e^{i(\vec{k}\vec{r} - Et/\hbar)} \right]^* e^{i(\vec{k}\vec{r} - Et/\hbar)} = |A|^2$$

La probabilité de trouver une particule libre avec une onde plane associée est uniforme dans tout l'espace !!

Autrement dit la probabilité de trouver la particule est la même partout !!

Cette fonction n'est pas de carré sommable

$$\int |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d\tau \neq 1$$

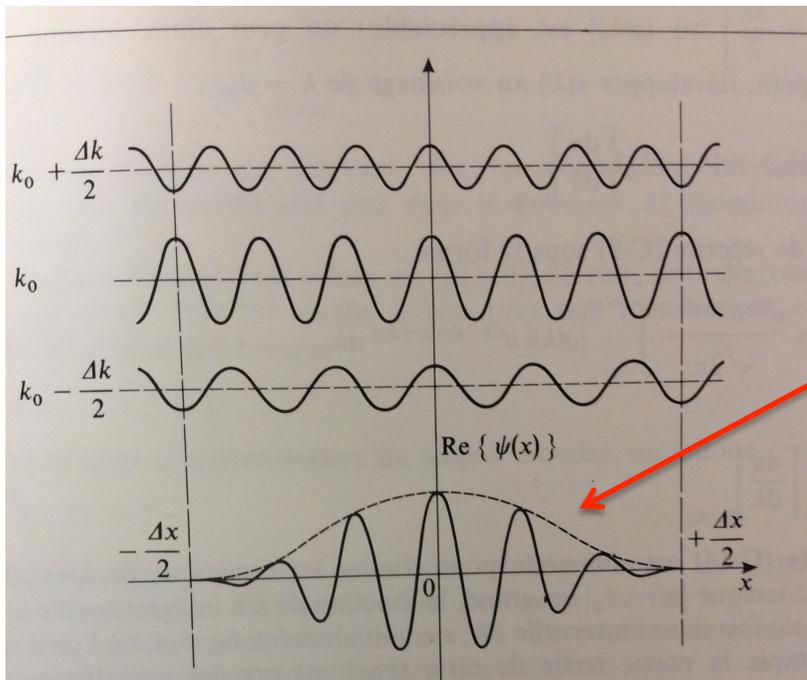
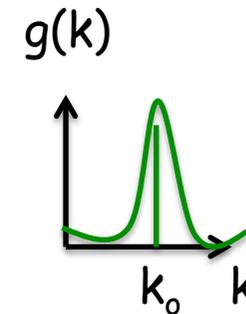
Pas physique

Question: comment rendre à la fonction d'onde cette propriété de carré sommable tout en vérifiant la forme en $\exp[i(kx-\omega t)]$??? :

Prix à payer: Incertitude (distribution) sur les k !!

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) e^{i(kx-\omega t)} dk$$

Paquet d'onde associé à la particule est de carré sommable



$\Psi^*(x)\Psi(x)dx$: probabilité de trouver la particule entre x et x+dx

Incertitude sur la position de la particule

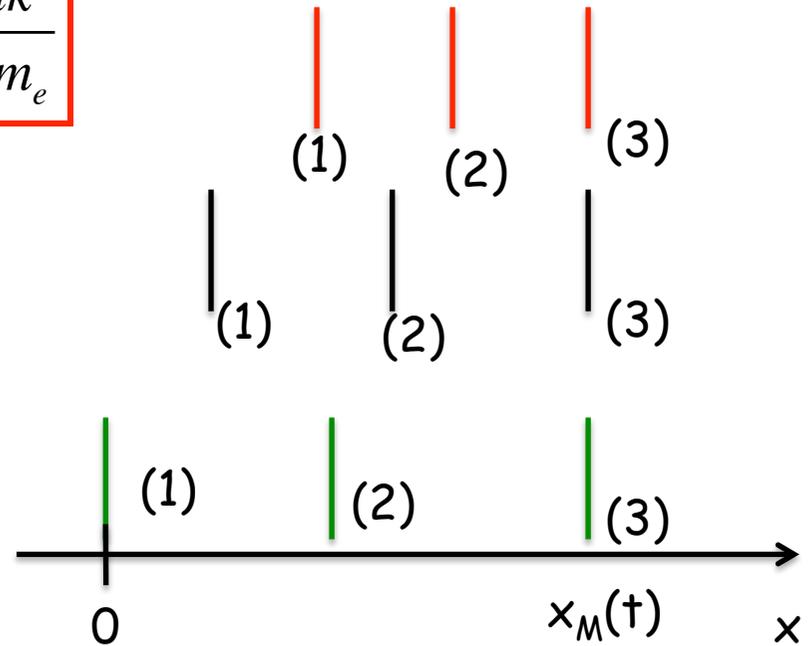
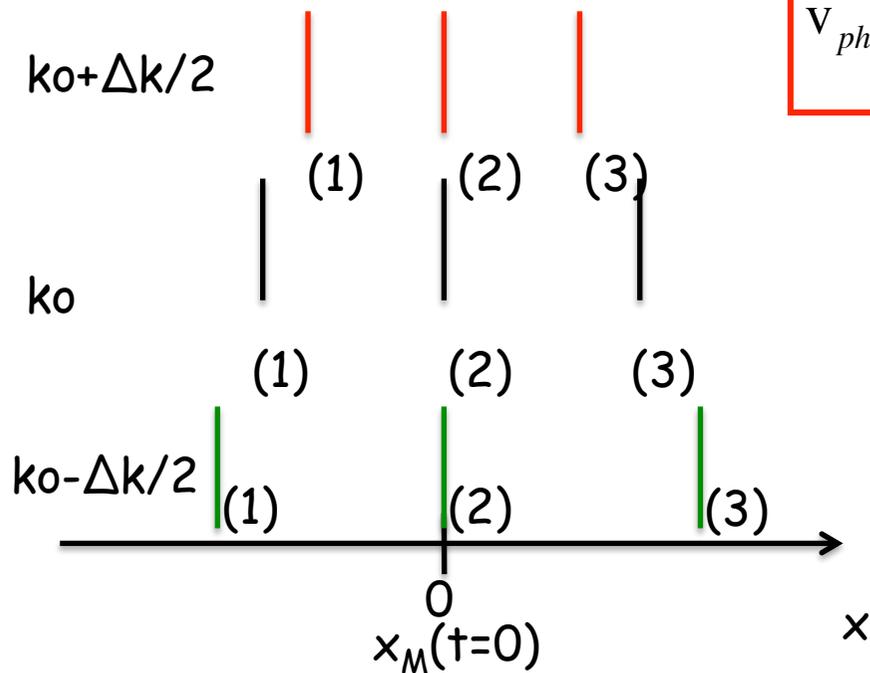


Remarque: pour une onde plane, $v_{phase}(k) = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar k}{2m_e}$ Milieu dispersif

Remarque: pour un paquet d'onde, $v = v_{Groupe} = \frac{d\omega}{dk}$

$$v = v_{Groupe} = \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k=k_0} = \frac{\hbar k_0}{m_e} = 2v_{phase}(k_0)$$

$$v_{phase}(k) = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar k}{2m_e}$$



A $t = 0$: la position du centre du paquet d'onde est $x_M(0) = 0$. Les 3 maxima (2) sont alignés.

A t , les 3 ondes se sont déplacées avec des vitesses de phase $v(k)$ différentes. Le maximum du paquet d'onde est situé alors en $x = x_M(t)$.

$$t = \frac{x_M(t)}{v_{groupe}}$$

La vitesse du paquet d'onde est différente des vitesses de phase des 3 ondes.

Conséquence: la fonction d'onde d'une particule est une superposition d'ondes planes pour lesquelles on associe à chacune un vecteur d'onde k et $\omega=f(k)$.
La connaissance précise de la fonction d'onde en x signifie que l'incertitude en k est totale

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

Relation d'incertitude d'Heisenberg

Exemple:

Grain de poussière de masse 1 micron-mètre et de masse 10^{-6} kg et de vitesse 1mm/s

$$p = mv \approx 10^{-6} 10^{-3} \text{ kgms}^{-1}$$

Si j'ai une incertitude sur la position de la particule à 0.01 micron près

$$\Delta p \approx \frac{\hbar}{\Delta x} \approx \frac{10^{-34}}{10^{-8}} = 10^{-26} \text{ kgms}^{-1} \Rightarrow p = (10^{-9} \pm 10^{-26}) \text{ kgms}^{-1}$$

L'incertitude quantique est très inférieure à la sensibilité de mesure de l'appareil:
Cette incertitude ne peut être détectée et n'a donc pas d'incidence sur la mesure

la particule a un comportement dit « classique »

Parler d'un comportement classique consiste à imposer simultanément que :

$$\Delta x \ll x$$

$$\Delta p \ll p$$

$$\Delta x \Delta p \ll x p \Rightarrow \frac{\Delta x \Delta p}{x \cdot p} \ll 1$$

Verif sur l'athlète le + rapide du monde !!

$$\Delta x \approx 10^{-3} \text{ m} \Rightarrow \Delta p \approx \frac{6.62 \cdot 10^{-34}}{2\pi \cdot 10^{-3}} \approx 10^{-31} \text{ kgms}^{-1}$$

$$\text{or } \bar{v}^{bolt} = \frac{100}{9.58} = 10.44 \text{ ms}^{-1} \Rightarrow \Delta v \approx \frac{\bar{v} \Delta t}{t} \approx \frac{10.44 \cdot 10^{-2}}{9.58} \approx 10^{-2} \text{ ms}^{-1} \text{ avec chrono au } 1/100^{\text{ème}}$$

$$\Delta p = \Delta m \bar{v} + m \Delta \bar{v} = (10^{-3} \times 10.44) + (90 \times 10^{-2}) \Rightarrow \Delta p \approx 1 \text{ kg m s}^{-1}$$

L'incertitude quantique est (encore 1 x) très inférieure à la sensibilité de mesure de l'appareil !!



Modèle de Bohr $J = m_e r v = n \hbar \rightarrow v = \frac{n \hbar}{m_e r}$ avec $r_n = n^2 \frac{a_o}{Z}$

1° orbite de bohr de H $r = a_o \quad v = \frac{\hbar}{m_e a_o} \Rightarrow p = \frac{\hbar}{a_o}$

Supposons que p soit connue avec une grande précision $\Delta p = 10^{-3} p$

$$\Delta r \geq \frac{\hbar}{2 \Delta p} = \frac{\hbar}{2} \frac{10^3 a_o}{\hbar} = 500 a_o !!$$

Supposons que p soit connue avec une mauvaise précision $\Delta p = p$

$$\Delta r \geq \frac{\hbar}{2 \Delta p} = \frac{\hbar}{2} \frac{a_o}{\hbar} = \frac{a_o}{2} !!$$

La Relation d'incertitude d'Heisenberg joue un rôle majeur pour les objets quantiques

Résumé(cours 1 et 2)

Cours 1

- 1-Quanta d'énergie (quantification de Planck)
- 2-Quantification des niveaux d'énergie (Modèle de Bohr)

$$E_{totale} = -\frac{1}{2} \left[\frac{m_e |e|^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} \right] \frac{Z^2}{n^2}, \quad r = \frac{n}{Z} a_0$$

$$\Rightarrow r = \frac{n^2}{Z} \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{|e|^2 m_e} = \frac{n^2}{Z} a_0 \quad \left[\frac{(4\pi\epsilon_0) \hbar^2}{m_e |e|^2} \right] = a_0$$

Cours 2

3-Photon (médiateur des transitions électroniques, absorption, émission) $E = h\nu, p = \hbar k = \frac{h}{\lambda}$

4-Dualité Onde-corpuscule (onde associée à toute particule, De Broglie) $E, p = \hbar k = \frac{h}{\lambda}$

-Equation de Schrödinger (équation d'onde d'une particule) $i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = H\Psi(\vec{r}, t)$

-Particule libre: $H = \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta \Rightarrow E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, p = \hbar k$ fonction d'onde \Rightarrow onde plane $Ae^{i(\vec{k}\vec{r} - Et/\hbar)}$

paquet d'onde
(1 dim) \Rightarrow

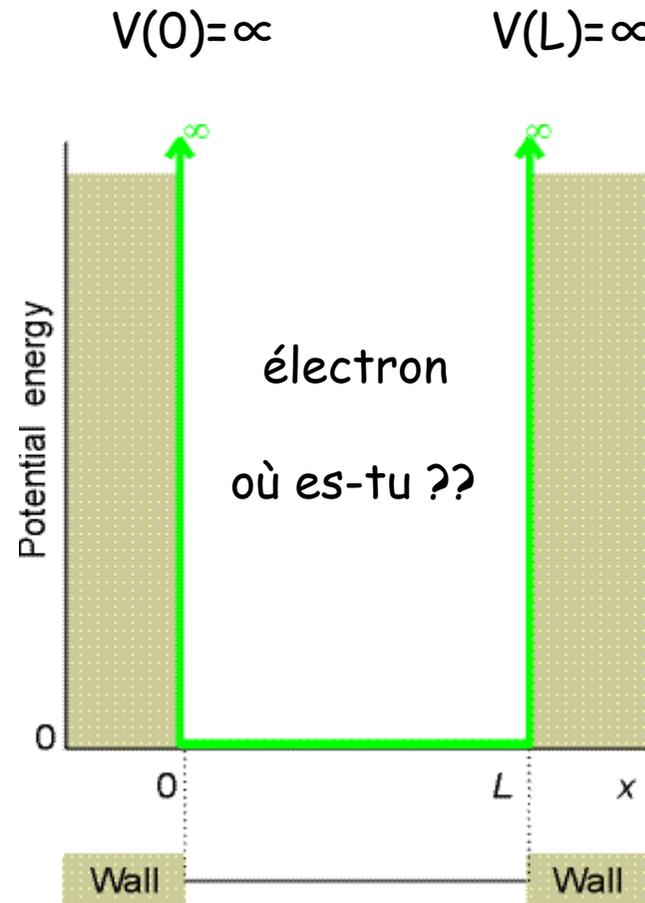
$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) e^{i(kx - Et/\hbar)} dk$$

\Rightarrow Relation d'incertitude d'Heisenberg

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

Particule « libre (pas tout à fait)» piégée dans une boîte 1D

Cas des électrons libres dans un métal ou les électrons dans les polyènes π conjugués



Particule libre

En Mécanique classique

- Énergie potentielle $V(x)=0$
- Force $\Sigma F=0 \Rightarrow v=\text{cte}$ ou $v=0$
- Mouvement de **translation uniforme 1D**

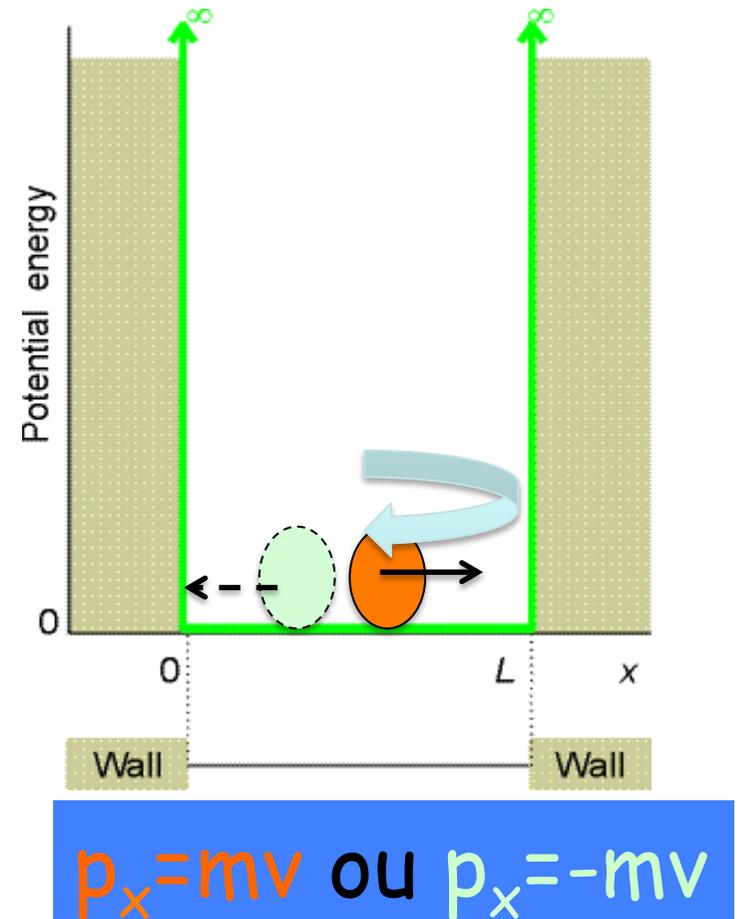
Classiquement:

$$x(t) = x_0 + v_0 t$$

$$E = \frac{1}{2} m v_0^2$$

$$E_{\text{totale}} = E_{\text{cin}}$$

Énergie cinétique pure



Particule « libre » piégée dans une boîte 1D

Cas des électrons libres dans un métal ou les électrons dans les polyènes π conjugués

Mécanique quantique

$$H\psi(x) = \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \right) \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x)$$

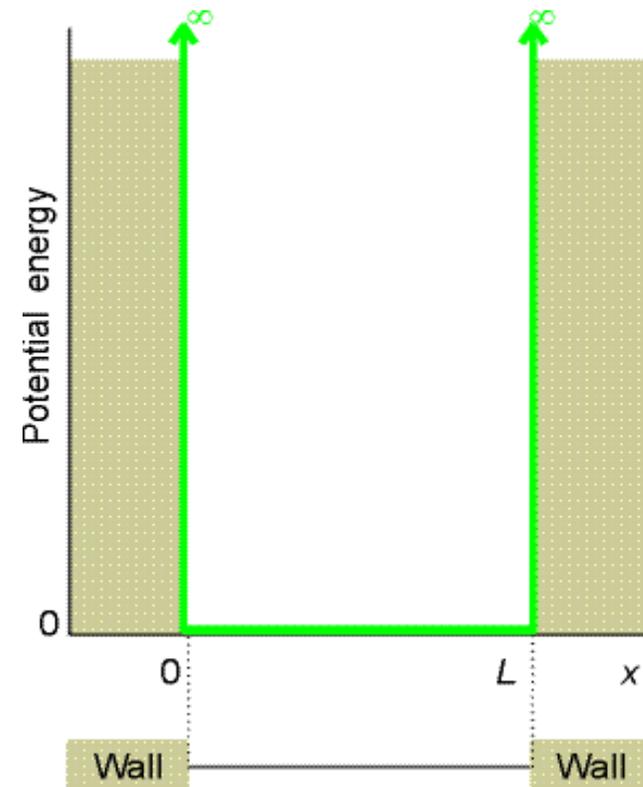
Opérateur
énergie
cinétique

Comme pour la particule libre ???

Non !!:

conditions aux bornes en raison de la
cavité

$$\psi(0) = 0 \quad \psi(L) = 0$$



Considérons que les solutions sont du type: $\Psi(x) = A\cos(kx) + B\sin(kx)$

$$H\psi(x) = \left(\frac{-\hbar^2}{2m}\right) \frac{d^2}{dx^2} [A\cos(kx) + B\sin(kx)] = E [A\cos(kx) + B\sin(kx)]$$

$$\psi(x=0)=0 \Rightarrow A = 0$$

$$\psi(x=L)=0 \Rightarrow kL = \pi n \quad (n=1,2,..)$$

$$\Rightarrow \psi(x) = B\sin\left(\frac{\pi n}{L}x\right)$$

remarquons que $n = 0$ ne convient pas car alors $\psi=0$ en tout point, correspondant au cas où la particule n'est pas dans la boîte !!

Normalisation de la fonction d'onde :

Probabilité égale à 1 de trouver la particule dans la boîte

$$\int_0^L \psi^*(x)\psi(x)dx = B^2 \int_0^L \sin^2\left(\frac{\pi n}{L}x\right) dx = 1$$

$$\int_0^L \psi^*(x)\psi(x)dx = B^2 \int_0^L \sin^2\left(\frac{\pi n}{L}x\right) dx = 1$$

$$\cos^2 x + \sin^2 x = 1$$

$$\cos 2x = \cos^2 x - \sin^2 x \Rightarrow \sin^2 x = (1 - \cos 2x) - \cos 2x$$

$$\sin^2 x = \frac{(1 - \cos 2x)}{2}$$

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

$$= \frac{B^2}{2} \int_0^L dx - \frac{B^2}{2} \int_0^L \cos\left(\frac{2\pi n}{L}x\right) dx = 1$$

$$\frac{B^2}{2} \int_0^L dx - \frac{B^2}{2} \int_0^L \cos\left(\frac{2\pi n}{L} x\right) dx = 1$$

$$\frac{B^2}{2} L - \underbrace{\frac{B^2}{2} \left(\frac{L}{2\pi n}\right) \sin\left[\frac{2\pi n}{L} x\right]_0^L}_{=0} = \frac{B^2}{2} L = 1$$

$$\Rightarrow B = \pm \sqrt{\frac{2}{L}}$$

Solutions de la particule
dans une boîte

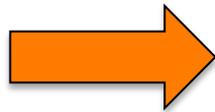
$$\Rightarrow \psi(x) = \pm \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi n}{L} x\right)$$

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\right) \frac{d^2}{dx^2} [\Psi(x)] = E[\Psi(x)] \Rightarrow \left(\frac{-\hbar^2}{2m}\right) \frac{d^2}{dx^2} \left[\sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \right] = E \left[\sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \right]$$

Dérivons la partie gauche:

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\right) \frac{d^2}{dx^2} \left[\sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \right] = \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right) \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 \left[\sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \right]$$

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right) \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 \left[\sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \right] = E \left[\sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \right]$$



$$\frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2 = E_n = f(n^2)$$

Particule dans une boîte 1D

Résumé

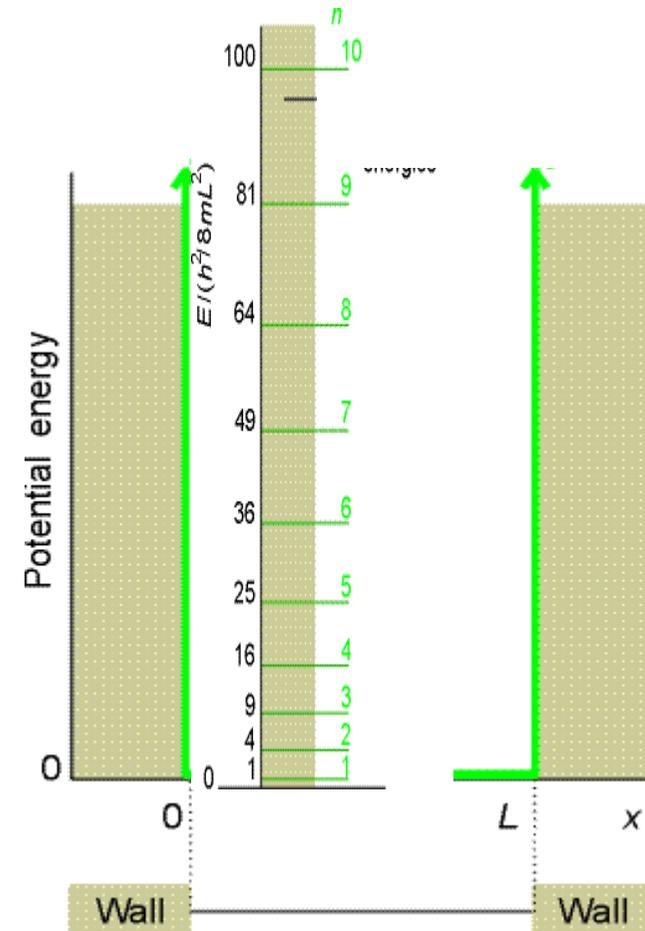
Solutions

avec conditions aux bornes

$$\psi(0) = 0 \quad \psi(L) = 0$$

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

$$E_n = \left(\frac{n^2 h^2}{8m L^2}\right) \quad n \in \mathbb{N}^* \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$



Conclusions: l'écart entre 2 niveaux d'énergie consécutifs varie en $2n+1$
La position d'un niveau d'énergie n diminue quand m augmente
La position d'un niveau d'énergie n diminue (augmente)
avec une augmentation (diminution) de la longueur de la boîte

Particule dans une boîte 1D

- Propriétés des solutions

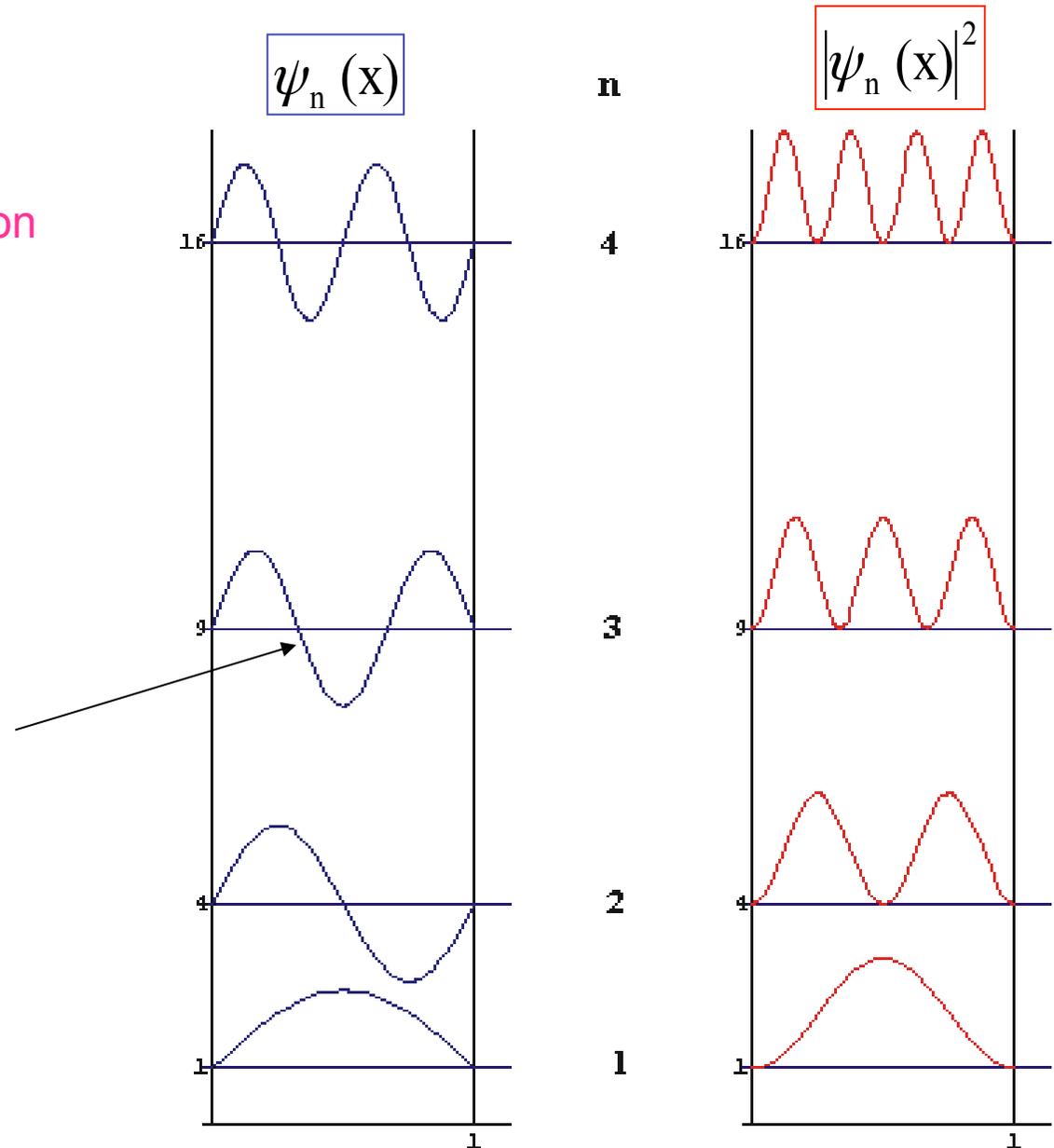
- Énergie discrète:

confinement \rightarrow quantification

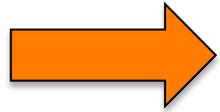
$$E_n = \left(\frac{n^2 h^2}{8m L^2} \right)$$

$\psi_n(x)$ Propriétés des solutions \Rightarrow (n-1 nœuds)

Incertitude croissante sur la position de la particule avec n



Remarque: Les fonction d'onde sont paires (n=1,3,5..) ou impaires (n=2,4,6)...



Caractéristique du potentiel (symétrique) dans lequel se déplace la particule

Ici, le potentiel est pair $V_p(x) = V_p(-x) = 0$

Eq. de Schrödinger
$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x) + V_p(x) \Psi(x) = E \Psi(x)$$

Changeons x en -x
$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\partial^2}{\partial (-x)^2} \Psi(-x) + V_p(-x) \Psi(-x) = E \Psi(-x)$$

ou
$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(-x) + V_p(x) \Psi(-x) = E \Psi(-x)$$

$\Psi(x)$ et $\Psi(-x)$ obéissent à la même équation
 $\Rightarrow \Psi(x)$ et $\Psi(-x)$ sont proportionnelles

$$\Psi(-x) = \lambda \Psi(x)$$

$\Psi(-x) = \lambda\Psi(x)$ ou si on change x en $-x$: $\Psi(x) = \lambda\Psi(-x)$

$$\Rightarrow \Psi(-x) = \lambda\Psi(x) = \lambda^2\Psi(-x) \Rightarrow \lambda^2 = 1$$

Donc $\lambda = \pm 1$

Si $\lambda = +1 \Rightarrow \Psi(-x) = \Psi(x) \Rightarrow \Psi$ est une fonction paire

Si $\lambda = -1 \Rightarrow \Psi(-x) = -\Psi(x) \Rightarrow \Psi$ est une fonction impaire