La physique quantique

(Tome II)

La connaissance est le patrimoine de l'humanité, donc chaque être humain peut l'utiliser librement mais il a aussi le devoir de le protéger, partager, améliorer.

Morphocode CODE

Copyright

Titre: La physique quantique (Tome II)

Auteur: Morphocode CODE

Site web: https://fan2cube.fr

Version: 18.9-22.12.20

ISBN : 979-8-4482-7662-0

Préface

Rien ne vaut qu'un veau qui ne vaut rien !

Morphocode

Ce livre est le Tome II du même livre “La physique quantique Tome I”

1 OBJET QUANTIQUE

Positiviste : Ce plat sur la table contient tous les ingrédients donc les ingrédients qui ne sont pas dans ce plat n'existent pas!
Réaliste : Ce n'est pas parce que ce plat n'utilise pas l'ingrédient ν que l'ingrédient ν n'existe pas !

En physique classique on classe les objets en deux catégories distinctes :

¤ Type corpusculaire

¤ Type ondulatoire

La physique quantique manipule les objets "quantiques".

¤ On dira un objet quantique OQ, c'est :

→ un objet qui possède des propriétés quantiques comme : le spin, polarisation, s'auto-interférer, ...

¤ un objet quantique élémentaire un OQE :

→ c'est un objet quantique qu'on ne peut pas le couper en deux.

→ un OQE est ponctuel ...

On dira un OQE=une particule-quantique=une particule (simplement).

par exemple : le photon, l'électron, le proton, l'atome, ... sont des particules quantiques.

Pour fixer les idées on se place dans 1D.

on pose :

$L^2(\mathbb{R}) = \{f: \mathbb{R} \times \mathbb{R}^+ \to \mathbb{C} \; ; \int_{-\infty}^{+\infty} |f(x,t)|^2 dx = 1\}$

ce sont des fonctions de carré sommables normées .

Ces fonctions f(x, t) vérifient :

1) Partout définies ,

2) De classe C^∞ ,

3) À support borné .

Note : parfois on note aussi f(x) au lieu de f(x, t) pour ne pas alourdir l'écriture.

exp:

a) $f(x) = Ne^{-|x|/a}$

b) $f(x) = Nxe^{-x^2/a}$

2 L'OBSERVABLE DE COORDONNÉE ET DE IMPULSION

2.1 L 'OBSERVABLE DE COORDONNÉE

En physique classique on sait étudier le mouvement d'une balle de tennis, il est tout à fait naturel de se demander quel est le mouvement d'une particule quantique comme, le photon, l' électron , ... ?

Mais en physique quantique, la situation change radicalement, il n'y a pas de concepts position, vitesse, trajectoire, ... mais à la place on a les concepts d'état (dynamique) , de niveau d'énergie, nuage de présence ...

2.2 GRANDEUR COORDONNÉE $\underline{X}$

Pour simplifier l'étude on se place en 1D.

Soit ξ une particule quantique (libre) dans $\mathbb{R}$, elle est caractérisée par les grandeurs coordonnée $\underline{X}$ et impulsion $\underline{P_x}$ (suivant x). La grandeur $\underline{X}$ peut prendre toutes les valeurs réelles $x \in \mathbb{R}$, de même la grandeur impulsion $\underline{P_x}$, elle aussi peut prendre toutes les valeurs réelles $p \in \mathbb{R}$.

À partir de $\underline{X}$ on associe un observable $\widehat{X}$ de la façon suivante:

$$\widehat{X}|x> = x|x>, \forall x \in \mathbb{R}$$

puis on forme tous les états |ψ> :

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

où $\psi(x) \in L^2(\mathbb{R})$.

L'ensemble des états |ψ> forme alors un espace de Hilbert de base $\{|x>\}_{x\in\mathbb{R}}$ de dimension infinie continue.

Il y a une grande différence entre |ψ> et ψ(x). |ψ> est un élément de $\mathcal{H}$ tandis que ψ(x) est un élément de $L^2(\mathbb{R})$, comme il y a une différence entre le vecteur $\vec{v}$

$\underset{v}{\rightarrow} \begin{pmatrix} 1 \\ 4 \\ 3 \end{pmatrix}$ et le composant 4

Remarque l'écriture :

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

ressemble beaucoup comme dans le cas discret

$$|\psi> = \sum_i \alpha_i\, |g_i>$$

On voit que ψ(x) est la "x-composante" de |ψ>

Une chose très importante, on veut absolument que :

$<x|\psi> = \psi(x)$

comme dans le cas discret

$<g_i|\psi> = \alpha_i$

donc

$$|\psi> = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(u)\,|u>\,du$$

$$<x\,|\,\psi> = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(u)<x\,|\,u>\ du$$

on veut donc que cette intégrale vaut

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi(u)\ <x|\,u>\ du\ = \psi(x)$$

→Si on définit $<x|u>$ comme la fonction $\mu_x(u)$ (u est la variable car on a "du" comme la variable d'intégration) :

$$<x|u>\ = \mu_x(u) = \begin{cases} 0 \text{ si } u \neq x \\ 1 \text{ si } u = x \end{cases}$$

comme le cas discret $<g_i|g_j> = \delta_{ij}$ l'intégrale diverge ! en effet

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi(u)\mu_x(u)du = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x)du = \psi(x)\int_{-\infty}^{+\infty} du = \ \infty$$

$<x|u>$ ne peut pas être une fonction, la solution est de prend $<x|u> = \delta(u - x)$ la distribution de Dirac en x, car cette distribution donne exactement ce qu'on veut :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi(u)\delta(u - x)du = \psi(x)$$

(on a vraiment de la chance !!)

→On pose donc par définition :

$<x|u> = \delta(u - x)$; δ → la variable en 1er

On dit que la base $\{|x>\}_{x\in\mathbb{R}}$ est une base orthonormée (au sens de Dirac) de $\mathcal{H}$.

Et pour un ket |x> on a:

$$|x> = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(u\text{-}x)|u>\, du$$

la "x-composante" de |x> est donc $\delta(u\text{-}x) \notin L^2(\mathbb{R})$.

<u>Le produit scalaire de $\mathcal{H}$</u>

$$|\psi> = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x)\ |x>\ dx$$

$$|\chi> = \int_{-\infty}^{+\infty} \chi(u)\ |u>\ du$$

$$<\psi|\chi> = < \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x)\ |x>\ \ dx\, |\int_{-\infty}^{+\infty} \chi(u)\ |u>\ \ du >$$

$$<\psi|\chi> = < \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x)<x|\ dx\, |\int_{-\infty}^{+\infty} \chi(u)\ |u>du >$$

$$<\psi|\chi> = \int_{-\infty}^{+\infty} [\psi^*(x) \ (\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x)\chi(u)<x|u>du)] \ dx$$

$$<\psi|\chi> = \int_{-\infty}^{+\infty} [\psi^*(x)(\int_{-\infty}^{+\infty} \chi(u)\delta(u-x)du)]dx$$

$$<\psi|\chi> = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x)\chi(x)dx$$

Voyons maintenant ce que fait l'opérateur $\widehat{X}$

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

$$\widehat{X}|\psi> = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) \, \widehat{X}|x> dx$$

$$\widehat{X}|\psi> = \int_{-\infty}^{+\infty} x\psi(x) \, |x> dx$$

d'où

$\widehat{X}|\psi> = |\psi'>$ avec $\psi'(x) = x\psi(x)$

ou encore en notation Dirac

$$\widehat{X}|\psi> = \int_{-\infty}^{+\infty} u\psi(u) \, |u> du$$

$$<x|\widehat{X}|\psi> = \int_{-\infty}^{+\infty} u\psi(u)<x|u>du$$

$$<x|\hat{X}|\psi> = \int_{-\infty}^{+\infty} u\psi(u)\delta(u-x)du$$

$$<x|\hat{X}|\psi> = x\psi(x)$$

$$<x|\hat{X}|\psi> = x < x|\psi >$$

$\hat{X}$ c'est la multiplication par x.

Pour 3D:

$$L^2(\mathbb{R}^3) = \{f: \mathbb{R}^3 x\mathbb{R}^+ \to \mathbb{C} ; \int_{\mathbb{R}^3} |f(r,t)|^2 dr = 1\}$$

$\psi(r, t) \in L^2(\mathbb{R}^3)$

$$r = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} ; \text{ r=vecteur}$$

dr = élément de volume, on note aussi

dr = dxdydz = d^3x = dτ (τ=volume)

notation

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\psi(r,t)|^2 dr = \int |\psi(r,t)|^2 dr = \iiint_{\mathbb{R}^3} |\psi(r,t)|^2 d\tau$$

$$= \iiint_{\mathbb{R}^3} |\psi(r,t)|^2 dxdydz$$

On voit que l'observable $\hat{X}$ a un spectre (les valeurs propres de $\hat{X}$) continu car x peut prendre toutes les valeurs de $\mathbb{R}$, en effet :

Cherchons une valeur propre u de $\hat{X}$, u vérifie l'équation suivante:

$\hat{X}|u > = u|u >$

Multiplions cette équation par le bra $<x|$, $x \in \mathbb{R}$

$<x|\hat{X}|u> = <x|u|u>$

à gauche vaut (car $<x|\hat{X}|\psi> = x<x|\psi>$)

$x <x|u> = u <x|u>$; car u est un scalaire

$(x - u) <x|u> = 0$

$(x - u)\ \delta(u - x) = 0$ (¤) , ceci pour tout $x \in \mathbb{R}$

C'est ici qu'on voit que le spectre de $\hat{X}$ est continue en effet on peut prendre u=x et comme $x \in \mathbb{R}$, u prend toutes les valeurs de $\mathbb{R}$, donc le spectre de $\hat{X}$ est continu (non dénombrable).

<u>Résumé</u> :

¤ Pour le ket $|\psi> \in \mathcal{H}$, la fonction Psi de $|\psi>$ est $\psi(x) \in L^2(\mathbb{R})$ (carré sommable normalisé)

¤ Pour le ket $|x> \in \mathcal{H}$, la fonction Psi de $|x>$ est $\delta(u-x)$ (distribution de Dirac en x).

Remarque si on fait le produit scalaire de $<\psi|x>$

$$<\psi|x> = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(u)\delta(u\text{-}x)du$$

$$<\psi|x> = \psi^*(x)$$

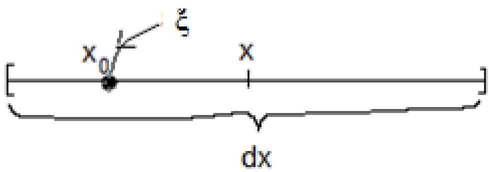
on retrouve bien

$$<x|\psi> = <\psi|x>^* = \psi^{**}(x) = \psi(x)$$

$$<x|\psi> = \psi(x)$$

Comme la x-composante (fonction Psi) de $|u>$ est $\delta(u - x)$ (distribution de Dirac en x), la particule n'a pas de position bien définie, il sera donc absurde de vouloir la localiser en un point bien précise x_0 !!, par contre on peut la localiser dans un élément de longueur dx contenant x_0 . La probabilité (élémentaire) de trouver ξ , à l'instant t, dans un dx contenant x_0 est

$$dprob(x) = |\psi(x,t)|^2dx \quad (¤1)$$



et la probabilité de trouver la particule dans l'intervalle [a,b] contenant x_0 est

$$prob([a,b]) = \int_a^b |\psi(x,t)|^2dx \quad (¤^2)$$

où

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

et l'état est normé $||\psi||=1$

Et immédiatement après la localisation (la mesure) ξ passe brusquement de l'état $|\psi\rangle$ à l'état $|\chi\rangle$ où :

$$\chi(x) = \begin{cases} 0 \ \text{ si } x<a \text{ ou } x>b \\ \psi(x) \ \text{ si } a \leq x \leq b \end{cases}$$

Il est vraiment étonnant que la fonction ψ(x) passe brusquement à χ(x).

<u>Remarque important</u> : La formule (¤[1]) ou (¤[2]) fait penser que la physique quantique n'est pas très précise, elle ne nous permet pas de localiser exactement la particule comme le fait la physique classique . Mais il faut que vous sachiez absolument une chose, vous n'êtes pas dans le monde M macroscopique où vous vivez avec les concepts et les lois de M. Mais vous êtes dans le monde Q quantique où vivent les particules .... donc les concepts et les lois ne sont pas forcément les même que M !!!

Dans le monde classique M, nous avons le concept position x(t), vitesse v(t), trajectoire, ...

Mais dans le monde quantique Q, une particule n'a pas de "position bien définie" !! à la place, on a "l' état" une sorte du comportement de la particule ! pas de vitesse, pas de trajectoire, mais de niveau d'énergie, de nuage de présence, ...

Dans le monde M on pose la question: quelle est la position de la particule ?

Mais dans le monde Q il faut poser la question: quel est l'état de la particule ? quel est son état ?

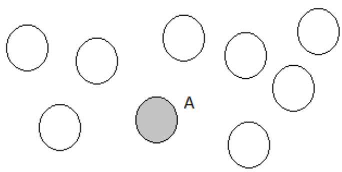
Suivez le scénario suivant:

On a une boule et des trous :
En physique classique la boule est toujours dans un trou, mais en physique quantique la boule n'est jamais dans un trou !!!

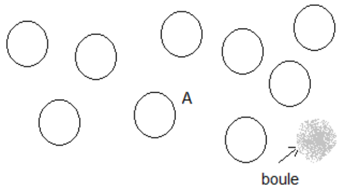
En physique classique la question: la boule est-elle dans le trou A ? on a une réponse "oui" ou "non"

Mais en physique quantique cette question n'a pas de sens, car de nature, la boule n'est jamais dans un trou !!! elle est toujours au tour d'un trou ! alors la question sera:

La boule est-elle au tour du trou A ?



physique classique



physique quantique

Commentaire

A. Quand on étudie la physique quantique tôt ou tard on pose la question suivante:

Pourquoi la fonction $\psi(x, t)$ doit être complexe et non réelle ?

On sait que $|\psi(x, t)|^2dx$ est la probabilité de présence de la particule, elle doit être la même pout tout le monde, il n'y a aucune raison que Bob a plus de chance de trouver la particule en x, qu' Alice !

Soit donc un référentiel inertiel $\mathcal{R}$ où se trouve Alice, dans ce référentiel Alice voit la particule se déplace à la vitesse v avec une impulsion $p = mv$ et une énergie $E=p^2/2m$.

Si $\psi(x, t)$ était réelle , on prend par exemple:

$\psi(x, t) = A \cos(\frac{px - Et}{\hbar})$;

où $A = C^{te}$

Calculons $\psi(x_1,t)$ au point $x_1 = x + L$

ψ(x+L, t) = A cos$(\frac{p(x+L)-Et}{\hbar})$;

ψ(x+L, t) = A cos$(\frac{px-Et}{\hbar}+\frac{pL}{\hbar})$;

si on prend

$$\frac{pL}{\hbar}=\pi$$

c'est-à-dire si on prend

$$L=\frac{\pi\hbar}{p}$$

Dans ce cas, si la probabilité de présence $|\psi(x, t)|^2dx$ est nulle en x, elle sera aussi nulle en x_1 en effet :

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

La probabilité de présence est nulle si

$|\psi(x, t)|^2 = 0 \Rightarrow A^2 \cos^2(\frac{px-Et}{\hbar}) = 0$

$\Rightarrow \cos(\frac{px-Et}{\hbar}) = 0 \Rightarrow \cos(\frac{px_1-Et}{\hbar}) = 0$

car on a cos $(\theta+\pi) = -\cos\theta$

Et les points x et x_1 sont séparés par $L=\frac{\pi\hbar}{2}$

Maintenant Bob, dans un autre référentiel $\mathcal{R}'$ ayant la vitesse V par rapport à $\mathcal{R}$ parallèle à celle de la particule Bob voit la particule se déplace à la vitesse

v' = v -V

une impulsion

$mv' = mv - mV$

$p' = p - mV$

et une énergie

$E' = p'^2/2m$

la fonction Psi s'écrit alors

$\psi'(x',t) = A' \cos(\frac{p'x'-E't}{\hbar})$;

donc aux points x' et x'_1 la probabilité de présence est nulle mais ils sont séparés par L'

$L'=\frac{\pi\hbar}{p'} \Rightarrow L'=\frac{\pi\hbar}{(p-mV)}$

qui est différent de L.

$L \neq L'$ ⇒ Cela signifie que pour Alice la probabilité de trouver la particule en x=L est nulle prob(x=L)=0, alors que pour Bob elle n'est pas nulle prob(x'=L)≠0 (elle est nulle pour x'=L', prob(x'=L')=0) ceci contredit la caractéristique de la probabilité de présence donc la fonction ψ ne peut pas être réelle! elle doit être complexe, et on peut mettre ψ sous la forme

$\psi(x,t) = A \exp[i(\frac{px-Et}{\hbar})]$;

(les nombres complexes peuvent s'écrire sous la forme $\rho e^{i\theta}$)

et $|\psi(x, t)|^2 = |A|^2$ est constante $\neq 0$, on a la même probabilité pour tout le monde !!

Ceci dit, il y a quand même quelque chose de curieuse ... la probabilité de trouver la particule est la même partout, ça signifie qu'on ne sait pas où elle est !!! car il n'y a aucun enseignement de plus, aucun endroit préférence ...

du coup on ne sait pas où se trouve la particule, elle paraît être partout !! ....

B. J'insiste encore sur la formule

$$\text{prob}([a, b]) = \int_a^b |\psi(x, t)|^2 dx$$

elle nous suggère la conclusion suivante : la physique quantique n'est pas précise, car elle donne la probabilité que la particule se trouve près de x_0 et non exactement en x_0 comme la physique classique. Mais c'est une conclusion fausse ! une conclusion erronée !!

En effet en physique quantique, on n'a pas le concept "position bien définie" , ce concept est remplacé par le concept "état" donc par conséquence une particule n'a pas de position bien définie , comme le concept de 'spin' n'existe pas en physique classique.

la question : "La particule se trouve-t-elle en x_0 ?" a un sens en physique classique et avoir une réponse "oui" ou "non" mais elle n'a pas de sens en physique quantique , la question devrait donc se transformer:

"Quel est l'état de la particule ?"

ou si vous tenez absolument savoir où se trouve la particule, vous devez posez la question suivant:

"Quelle est la probabilité que la particule se trouve dans l'intervalle [a,b], à l'instant t ?"

Quantique	Classique
état, niveau- énergie, nuage de présence	position, vitesse, trajectoire
$\psi(x, t)$	$x(t), v(t)$
$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = H\, \psi(x, t)$	$\frac{d^2x}{dt^2} = \frac{F}{m}$
$p = \frac{E}{c}$	$p = mv$

2.3 L'OPÉRATEUR IMPULSION

On fait la même chose avec la grandeur impulsion $\underline{P}_x$ (suivant x), on associe l'opérateur d'impulsion $\widehat{P}_x$ comme suite :

$\widehat{P}_x|p> = p|p>$; avec $p \in \mathbb{R}$

Là aussi on a un spectre continu, comme $\widehat{X}$

et on définit aussi $\{|p>\}_{p\in\mathbb{R}}$ comme une base orthonormée de $\mathcal{H}$ de la façon suivante:

$\forall$ p,q $\in\mathbb{R}$,

$<p|q> = \delta(q - p)$

Voyons l'opérateur $\widehat{P}_x$ dans la base |x>, par définition on pose

$$\widehat{P}_x|\psi> \overset{\text{def}}{=} \int_{-\infty}^{+\infty} -i\hbar \frac{d\psi}{dx} \;|x>dx$$

$$\widehat{P}_x|\psi> = |\psi'> \text{ avec } \psi'(x) = -i\hbar \frac{d\psi}{dx}$$

en notation Dirac

$$<x|\widehat{P}_x|\psi> \overset{\text{def}}{=} \int_{-\infty}^{+\infty} -i\hbar \frac{d\psi}{du} <x\,|u>du$$

$$<x|\widehat{P}_x|\psi> \overset{\text{def}}{=} \int_{-\infty}^{+\infty} -i\hbar \frac{d\psi}{du} \delta(u-x)du$$

$$<x\left|\widehat{P}_x\right|\psi> = -i\hbar \frac{d\psi}{dx} = -i\hbar \frac{d}{dx}\psi(x)$$

$$= -i\hbar \frac{d}{dx}<x|\psi>$$

$$<x\left|\widehat{P}_x\right|\psi> = -i\hbar \frac{d}{dx}<x|\psi>$$

L'opérateur $\widehat{P}_x$ est $-i\hbar\frac{d}{dx}$ (en base $\{|x>\}_{x\in\mathbb{R}}$)

En abrégeant :

$$<x|\widehat{P}_x>= -i\hbar \frac{d}{dx}$$

Un état |ψ> peut s'exprimer aussi dans la base $\{|p>\}_{p\in\mathbb{R}}$ d'impulsion

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}(p)|p\rangle dp$$

$\langle p|\psi\rangle = \tilde{\psi}(p)$ (le bra appliqué sur l'état donne la composante de l'état)

On voudrait savoir quelles sont les relations entre $\psi(x)$ et $\tilde{\psi}(p)$, eh bien $\tilde{\psi}(p)$ est la transformation de Fourier de $\psi(x)$, c'est-à-dire

$$\tilde{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}px}\ \psi(x)dx$$

inversement

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{i}{\hbar}px}\ \tilde{\psi}(p)dp$$

<u>En 3D</u>

$$\tilde{\psi}(p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} e^{-\frac{i}{\hbar}p.r}\ \psi(r)dr$$

inversement

$$\psi(r) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} e^{\frac{i}{\hbar}p.r}\ \tilde{\psi}(p)dp$$

$$p = \begin{pmatrix} p_x \\ p_y \\ p_z \end{pmatrix};\ \text{vecteur}$$

p_x, p_y, p_z ce sont des nombres réels

$r = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$; vecteur

p.r = $p_x x + p_y y + p_z z$ = produit scalaire de p, r dans $\mathbb{R}^3$

Le vecteur |p> dans la base $\{|x>\}_{x\in\mathbb{R}}$

$$|p> = \int_{-\infty}^{+\infty} p(x)\ |x>dx$$

<x|p> = p(x)

$$\widehat{P}_x|p> = p|p>$$

$$\widehat{P}_x|p> = \int_{-\infty}^{+\infty} -i\hbar\ \frac{dp}{dx}\ |x> dx = p\int_{-\infty}^{+\infty} p(x)\ |x> dx$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} -i\hbar\ \frac{dp}{dx}\ |x> dx = \int_{-\infty}^{+\infty} pp(x)\ |x> dx$$

d'où

$$-i\hbar\ \frac{dp}{dx} = p\ p(x)$$

$$\frac{dp}{dx} = \frac{i}{\hbar} p\ p(x)$$

ce qui donne comme solution

$$p(x) = \alpha e^{\frac{i}{\hbar}px}$$

on choisit $\alpha = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$ pour normaliser p(x)

$<x|p> = p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}px}$

$<p|x> = \tilde{x}(p) = <x|p>^*$

$$< p|x >= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{i}{\hbar}px}$$

la fonction Psi de |p> est

$$p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}px}$$

elle n'est pas dans $L^2(\mathbb{R})$.

p(x) est aussi une distribution qu'on nomme distribution de Fourier

<u>Un petit résumé sur ces écritures</u>

$\mathcal{H}$ = l'espace des états |ψ> de ξ

$\{|x>\}_{x\in\mathbb{R}}$ la base de coordonnée

$\{|p>\}_{p\in\mathbb{R}}$ la base d'impulsion

ψ(x) = composante de |ψ> dans la base $\{|x>\}_{x\in\mathbb{R}}$,
x-composante ou fonction Psi.

<x|ψ> = ψ(x) , fonction Psi de |ψ>

$<p|\psi> = \tilde{\psi}(p)$ = composante de |ψ> dans la base $\{|p>\}_{p\in\mathbb{R}}$,
p-composante

<x|p> = p(x) = composantes de |p> dans la base $\{|x>\}_{x\in\mathbb{R}}$

$p(x) = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}px}$

p(x) = fonction Psi de |p> c'est une distribution de Fourier

<p|x> = $\tilde{x}(p)$ = composantes de |x> dans la base $\{|p>\}_{p\in\mathbb{R}}$

$\tilde{x}(p) = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{i}{\hbar}px}$

|x> → δ(u - x) = composante de |x> dans la base $\{|x>\}_{x\in\mathbb{R}}$

, fonction Psi de |x>

$<x|\hat{X}|\psi> = x < x|\psi>$; l'opérateur $\hat{X}$ dans la base $\{|x>\}_{x\in\mathbb{R}}$

$<x\left|\hat{P}_x\right|\psi> = -i\hbar \ \frac{d}{dx}<x|\psi>$; l'opérateur $\hat{P}_x$ dans la base $\{|x>\}_{x\in\mathbb{R}}$

2.4 L'INÉGALITÉ DE HEISENBERG

Calculons le crochet $[\hat{X}, \hat{P}_x]$

$[\hat{X}, \hat{P}_x] = \hat{X}\hat{P}_x - \hat{P}_x\hat{X}$

en appliquant sur un état |ψ>, ça donne

$(\hat{X}\hat{P}_x - \hat{P}_x\hat{X})\left|\psi\right> = (\hat{X}\hat{P}_x)\left|\psi\right> - (\hat{P}_x\hat{X})|\psi>$

$= -i\hbar\, x\,\partial_x\psi + i\hbar\,\partial_x(x\psi) = -i\hbar\, x\,\partial_x\psi + i\hbar\psi + i\hbar x\,\partial_x\psi$

$= i\hbar\psi$

finalement

$[\hat{X}, \hat{P}_x] = i\hbar\hat{I}$

Appliquons l'inégalité des dispersions pour $\hat{X}$ et $\hat{P}_x$

$$\boxed{\Delta\hat{X}\,\Delta\hat{P}_x \geq \frac{\hbar}{2}}$$

c'est l'inégalité de Heisenberg.

<u>Commentaire important</u>

On trouve ce théorème dans beaucoup de livres de la physique quantique et dans des vulgarisations mais l'annonce est complètement contre sens !!

L'annonce :

Le principe d'incertitude d'Heisenberg ou Le principe d'indétermination d'Heisenberg :

" On ne peut pas connaître simultanément la position et la vitesse d'une particule aussi précises qu'on veut "

1. D'abord ce n'est pas un principe, c'est un théorème ! puisqu'il est démontré à partir d'autre théorèmes ou propriétés.

2. Dire qu'on ne peut pas connaître la position et la vitesse d'une particule signifie que la particule possède une position et une vitesse bien définies et que la "méchante" physique quantique nous empêche de les reconnaître !

Or c'est complètement faux ! une particule quantique n'ont pas de positions bien définies, ni de vitesses bien définies (pas d'impulsion bien définie) parce que le spectre d'observable coordonnée $\widehat{X}$, et d'impulsion $\widehat{P}_x$ sont continus.

ce qui faut faire c'est changer l'énoncé et son texte :

A. "Le principe d'incertitude d'Heisenberg ou Le principe d'indétermination d'Heisenberg"

⇒ "Théorème d'Heisenberg"

B. " On ne peut pas connaître simultanément la position et la vitesse d'une particule aussi précises qu'on veut "

⇒ "Le produit des dispersions des positions et des impulsions $\Delta\widehat{X}\,\Delta\widehat{P}_x$ sont toujours plus grand que $\hbar/2$"

ou bien

⇒ "Les observables $\widehat{X}$ et $\widehat{P}_x$ ne se commutent pas"

Pour passer en 3D, c'est facile, il suffit de faire la même chose pour chaque composante.

$$\widehat{R} = \begin{pmatrix} \widehat{X} \\ \widehat{Y} \\ \widehat{Z} \end{pmatrix},\ r = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

$$\widehat{R}|\psi> = \begin{pmatrix} \widehat{X}\psi_x \\ \widehat{Y}\psi_y \\ \widehat{Z}\psi_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x\psi_x \\ y\psi_y \\ z\psi_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \psi_x \\ \psi_y \\ \psi_z \end{pmatrix} = r\begin{pmatrix} \psi_x \\ \psi_y \\ \psi_z \end{pmatrix} = r|\psi>$$

$$\widehat{P} = \begin{pmatrix} \widehat{P}_x \\ \widehat{P}_y \\ \widehat{P}_z \end{pmatrix},$$

$$\widehat{P}|\psi>=\begin{pmatrix}\widehat{P}_x\psi_x\\\widehat{P}_y\psi_y\\\widehat{P}_z\psi_z\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-i\hbar\,\partial_x\psi_x\\-i\hbar\,\partial_y\psi_y\\-i\hbar\,\partial_z\psi_z\end{pmatrix}=-i\hbar\nabla\begin{pmatrix}\psi_x\\\psi_y\\\psi_z\end{pmatrix}$$

$$\nabla=\begin{pmatrix}\partial_x\\\partial_y\\\partial_z\end{pmatrix}$$

finalement

$\widehat{P}=-i\hbar\nabla\hat{I}$ et $\widehat{R}=r\hat{I}$

3 LES GÉNÉRATEURS

3.1 THÉORÈME DE STONE

Soit une famille d'opérateurs unitaires $\{\widehat{D}_\alpha\}_{\alpha\in\mathbb{R}}$ indexée par $\alpha\in\mathbb{R}$ telle que

$$\begin{cases} \widehat{D}_0 = \hat{I} \\ \widehat{D}_\alpha \widehat{D}_\beta = \widehat{D}_{\alpha+\beta} \end{cases}$$

alors il existe un observable (opérateur hermitien) $\widehat{A}$ tel que

$$\widehat{D}_\alpha = e^{-\frac{i\alpha}{\hbar}\widehat{A}}$$

$\widehat{A}$ se nomme le générateur des $\widehat{D}_\alpha$

Si $\alpha \ll 1$ est très petit devant 1 , alors on peut écrire

$$\widehat{D}_\alpha = \hat{I} - \frac{i\alpha}{\hbar}\widehat{A}$$

C'est le début du développement de

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \cdots$$

<u>Démonstration</u>

On a

$$\widehat{D}_{\alpha+\delta\alpha} = \widehat{D}_\alpha + \delta\alpha \frac{d\widehat{D}_\alpha}{d\alpha}$$; (développement limité 1er ordre)

or

$$\widehat{D}_{\alpha+\delta\alpha} = \widehat{D}_{\alpha}\widehat{D}_{\delta\alpha}$$

d'où

$$\widehat{D}_{\alpha}+\delta\alpha\frac{d\widehat{D}_{\alpha}}{d\alpha} = \widehat{D}_{\alpha}\widehat{D}_{\delta\alpha}$$

$$\delta\alpha\frac{d\widehat{D}_{\alpha}}{d\alpha} = \widehat{D}_{\alpha}\widehat{D}_{\delta\alpha} - \widehat{D}_{\alpha}$$

$$\frac{d\widehat{D}_{\alpha}}{d\alpha} = \frac{\widehat{D}_{\delta\alpha} - \hat{I}}{\delta\alpha}\widehat{D}_{\alpha}$$

on pose

$$\frac{\widehat{D}_{\delta\alpha} - \hat{I}}{\delta\alpha} = -\frac{i}{\hbar}\widehat{A} \quad (¤^{1})$$

$$\frac{d\widehat{D}_{\alpha}}{d\alpha} = -\frac{i}{\hbar}\widehat{A}\ \widehat{D}_{\alpha}$$

en intégrant, ça donne

$$\widehat{D}_{\alpha} = e^{-\frac{i\alpha}{\hbar}\widehat{A}}$$

car

$$\widehat{D}_{0} = \hat{I}$$

On voit que $\widehat{A}$ est hermitien, en effet

$$\frac{\widehat{D}_{\delta\alpha} - \hat{I}}{\delta\alpha} = -\frac{i}{\hbar}\widehat{A}$$

$$\widehat{D}_{\delta\alpha} = \hat{I} - \frac{i\delta\alpha}{\hbar}\widehat{A}$$

$$(\widehat{D}_{\delta\alpha})^{\dagger}\widehat{D}_{\delta\alpha} = (\hat{I} + \frac{i\delta\alpha}{\hbar}\widehat{A}^{\dagger})(\hat{I} - \frac{i\delta\alpha}{\hbar}\widehat{A})$$

$$(\widehat{D}_{\delta\alpha})^{\dagger}\widehat{D}_{\delta\alpha} = \hat{I} + \frac{i\delta\alpha}{\hbar}\widehat{A}^{\dagger} - \frac{i\delta\alpha}{\hbar}\widehat{A} - (\frac{i\delta\alpha}{\hbar})^{2}\widehat{A}^{\dagger}\widehat{A}$$

On vire le terme $-(\frac{i\delta\alpha}{\hbar})^{2}\widehat{A}^{\dagger}\widehat{A}$ car $(\delta\alpha)^{2}$ est trop petit, il nous reste

$$(\widehat{D}_{\delta\alpha})^{\dagger}\widehat{D}_{\delta\alpha} = \hat{I} + \frac{i\delta\alpha}{\hbar}\widehat{A}^{\dagger} - \frac{i\delta\alpha}{\hbar}\widehat{A}$$

$$\hat{I} = \hat{I} + \frac{i\delta\alpha}{\hbar}\widehat{A}^{\dagger} - \frac{i\delta\alpha}{\hbar}\widehat{A}$$

car les $\widehat{D}_{\alpha}$ sont unitaires, ça donne

$$\widehat{A}^{\dagger} = \widehat{A}$$

ce qui montre que $\widehat{A}$ est hermitien.

(¤1) <u>Note</u> : On peut se demander pourquoi $\widehat{A}$ ne dépend pas de $\delta\alpha$? $\widehat{A}$ ne dépend pas de $\delta\alpha$ parce que $\delta\alpha$ tend vers zéro $\delta\alpha \to 0$ ($\delta\alpha$ très petit) en fait on a:

$$\lim_{\delta\alpha\to 0}\frac{\widehat{D}_{\delta\alpha} - \hat{I}}{\delta\alpha} = \lim_{\delta\alpha\to 0}\frac{\widehat{D}_{\delta\alpha} - \widehat{D}_{0}}{\delta\alpha - 0} = \widehat{D}_{0}' = \widehat{D}'(0)$$

Donc $\widehat{A}$ ne dépend pas de $\delta\alpha$

Et n'oubliez pas qu'on est des physiciens, pas des mathématiciens, pour nous "≈" c'est "=" .

si α=3,141592653589

on dira que c'est π

$\alpha = \pi$ et non $\alpha \approx \pi$! la raison est simple: on vit dans un monde fini et que si on doit couper une tige d'une longueur π , tôt ou tard il faut le faire et on prend α=3,141592653589 et on coupe c'est tout !

<u>Remarque</u> : On peut se demander à quoi ça sert le i dans

$$\widehat{D}_\alpha = \hat{I} - \frac{i\alpha}{\hbar}\widehat{A}$$

Le nombre complexe i est là pour imposer que $\widehat{A}$ soit hermitien, en effet reprenons le calcul .

$\widehat{D} = \hat{I} - \alpha\widehat{A}$ où α = a+ib

On a $\widehat{D}$ unitaire et on cherche α pour que $\widehat{A}$ soit hermitien, allons y

$$\widehat{D}^\dagger\widehat{D} = (\hat{I} - \alpha^*\widehat{A}^\dagger)(\hat{I} - \alpha\widehat{A})$$

$$= \left(\hat{I} - \alpha\widehat{A}\right) - \alpha^*\widehat{A}^\dagger + \alpha^*\alpha\widehat{A}^\dagger\widehat{A}$$

On vire le terme $\alpha^*\alpha$ (trop petit)

$$\widehat{D}^\dagger\widehat{D} = \left(\hat{I} - \alpha\widehat{A}\right) - \alpha^*\widehat{A}^\dagger$$

$$\hat{I} = \left(\hat{I} - \alpha\widehat{A}\right) - \alpha^*\widehat{A}^\dagger$$

$$\alpha\widehat{A} = -\alpha^*\widehat{A}^\dagger$$

Pour avoir $\widehat{A} = \widehat{A}^\dagger$ il faut que

$\alpha = -\alpha^* \Rightarrow \alpha = ib$, on peut prendre b=1 $\Rightarrow \alpha=i$

3.2 L'OPÉRATEUR D'ÉVOLUTION

À chaque instant $t\in\mathbb{R}^+$ on associe un opérateur unitaire $\widehat{U}_t$ tel que

$$\begin{cases} \widehat{U}_0 = \hat{I} \\ \widehat{U}_t\widehat{D}_\tau = \widehat{D}_{t+\tau} \end{cases}$$

L'opérateur $\widehat{U}_t$ s'applle opérateur d'évolution, il fait passer le système d'état initial $|\psi(0)>$ à l'état $|\psi(t)>$ donné par

$$|\psi(t)> \stackrel{\text{def}}{=} \widehat{U}_t|\psi(0)>$$

donc pour passer de l'état $|\psi(t)>$ à l'état $|\psi(t')>$ (t' >t) par :

$$|\psi(t')> = \widehat{U}_{t'-t}\,|\psi(t)>$$

en effet

$$\begin{cases} |\psi(t) > = \widehat{U}_t|\psi(0) > \\ |\psi(t') > = \widehat{U}_{t'}\,|\psi(0) > \end{cases}$$

$$|\psi(t') > = \widehat{U}_{t'}\,\widehat{U}_t^{\;-1}|\psi(t) >$$

$$|\psi(t') > = \widehat{U}_{t'}\,\widehat{U}_{-t}\,|\psi(t) >$$

$$|\psi\left(t'\right)> = \widehat{U}_{t'-t}\,|\psi(t) > (¤2)$$

L'évolution du système est donc pilotée par la famille $\{\widehat{U}_t\}_{t\in\mathbb{R}^+}$

La relation (¤2) montre que l'opérateur $\hat{U}_t$ est invariant par translation du temps t, c'est-à-dire en Δt durée comment le système a évolué ? autrement dit

si Δt = τ' - τ = t - t'

alors

|ψ(t')> = |ψ(τ')>

le même expérience réalisé à 10h ou à 15h donne les même résultats.

Conservation du produit scalaire.

$<\psi(t')|\chi(t')> = <\hat{U}_{t'-t}\,\psi(t)|\hat{U}_{t'-t}\,\chi(t)>$

on pose t'-t=τ

$<\psi(t')|\chi(t')> = <\psi(t)|\hat{U}_\tau^\dagger \hat{U}_\tau\,\chi(t)>$

comme $\hat{U}_\tau^\dagger \hat{U}_\tau = \hat{I}$

ça donne

$<\psi(t')|\chi(t')> = <\psi(t)|\chi(t)>$

En particulier deux états orthonormés restent orthonormés après l'évolution

D'après le théorème de Stone , il existe un observable $\hat{H}$ (hamiltonien) tel que

$$\hat{U}_t = e^{-\frac{it}{\hbar}\hat{H}}$$

Et on peut mettre $\widehat{U}_t$ sous la forme

$$\widehat{U}_t = \hat{I} - \frac{it}{\hbar}\widehat{H} \ ,$$

lorsque t ≪ 1 (t très petit devant 1, infinitésimal)

3.3 L'ÉQUATION DE SCHRODINGER

On a un système Γ donc l'opérateur d'évolution est $\widehat{U}_t$ et on passe de l'état |ψ(t)> à l'état |ψ(t')> par :

$$|\psi(t')> \ = \ \widehat{U}_{t'-t}\,|\psi(t)>$$

en posant t' = t + δt avec δt ≪ 1 (δt=infinitésimal)

d'où

$$|\psi(t+\delta t)> \ = \ \widehat{U}_{\delta t}\,|\psi(t)>$$

$$|\psi(t+\delta t)> \ = (\hat{I} - \frac{i\delta t}{\hbar}\widehat{H})|\psi(t)>$$

$$|\psi(t+\delta t)> \ = |\psi(t)> - \frac{i\delta t}{\hbar}\widehat{H}|\psi(t)>$$

$$|\psi(t+\delta t)> - |\psi(t)> \ = - \frac{i\delta t}{\hbar}\widehat{H}|\psi(t)>$$

$$\frac{|\psi(t+\delta t)> - |\psi(t)>}{\delta t} = \ -\frac{i}{\hbar}\widehat{H}|\psi(t)>$$

quand δt tend vers zéro : δt → 0 on a,

$$\frac{d|\psi(t)>}{dt} = -\frac{i}{\hbar}\widehat{H}|\psi(t)>$$

$$i\hbar \frac{d|\psi(t)>}{dt} = \hat{H}|\psi(t)>$$

L'état du système (sans action de mesure) vérifie l'équation de Schrodinger (Axiome 2)

Si on tient compte la variable coordonnée x , $|\psi(x,t)>$ on utilisera la dérivée partielle ∂, et l'équation devient

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial|\psi(x,t)>}{\partial t} = \hat{H}\ |\psi(x,t)>} \text{ dans } \mathcal{H}$$

où $\hat{H}$ est l'hamiltonien du système.

ou en passant par la fonction Psi, c'est-à-dire dans la base $\{|x>\}_{x\in\mathbb{R}}$

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = H\ \psi(x,t)} \text{ dans } L^2(\mathbb{R})$$

¤ Quand l'hamiltonien $\hat{H}$ ne dépend pas du temps t (que nous supposons toujours), on dit que le système est isolé.

¤ Pour un dipôle électrique D dans placé un champ électrique E :

$$\hat{H} = -\hat{D}\,.\,E$$

¤ Pour un dipôle magnétique μ placé dans un champ électrique B :

$$\hat{H} = -\hat{\mu}\,.\,B$$

¤ Pour une particule de masse m≠0, d'impulsion p, plongée dans un potentiel V(x), l'hamiltonien $\widehat{H}$ vaut :

$$\widehat{H}= \frac{\widehat{P}^2}{2m} + \widehat{V}(x)$$

comme $\widehat{P}$ dans la base $\{|x>\}_{x\in\mathbb{R}}$ vaut

$$<x|\widehat{P}>= -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \;\Rightarrow\; <x|\frac{\widehat{P}^2}{2m}>=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

d'où

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)$$

Dans ce cas l'équation de Schrodinger (dans $L^2(\mathbb{R})$) devient :

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = H\ \psi(x,t)$$

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

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

en 3D

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

<u>Rappel</u> : La fonction $\psi(x,t)$ est une fonction complexe, c'est-à-dire

$\psi: \mathbb{R} \times \mathbb{R}^{+} \to \mathbb{C}$

$(x,t) \to \psi(x,t)$

et que $\hat{H}$ est l'hamiltonien du système (observable d'énergie)

<u>NOTE</u> : 1) Ici on peut voir que la fonction $\psi(x,t)$ est complexe, en effet si $\psi(x,t)$ est réelle dans l'équation Schrodinger

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = H\, \psi(x,t)$$

le membre de gauche est complexe et le membre de droite est réel (H est réel) donc ça implique que $\psi(x,t) = 0$ est identiquement nul, ce qui est absurde, donc $\psi(x,t)$ doit être nécessairement complexe.

2) Certains auteurs appellent l'équation de Schrodinger l'équation d'onde , c'est une très mauvaise appellation , en effet l'équation d'onde est de la forme:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = 0$$

où v est la vitesse de propagation de l'onde.
L'équation de Schrodinger n'est pas relativiste elle est valable que pour des vitesses v très petites devant c , $v \ll c$, si non il faut utiliser l'équation de Dirac :
$(i\gamma^{\mu}\partial_{\mu} - m)\psi = 0$; $\mu = 0,1,2,3$

$$[(i(\gamma^0\,\partial_0 + \gamma^1\,\partial_1 + \gamma^2\,\partial_2 + \gamma^3\,\partial_3) - m)]\psi = 0$$

$$[\big(i(\gamma^0\,\partial_t + \gamma^1\,\partial_x + \gamma^2\,\partial_y + \gamma^3\,\partial_z) - m\big)]\psi = 0$$

avec

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} ;\ \gamma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\gamma^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} ;\ \gamma^3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_0 \\ \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \end{pmatrix}$$

Les matrices γ^μ (4x4) s'appellent les matrices de Dirac.

3.4 LE COURANT DE PRÉSENCE

On pose

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

c'est la densité de présence

et

$$j_x = \frac{i\hbar}{2m}\begin{vmatrix} \psi & \frac{\partial\psi}{\partial x} \\ \psi^* & \frac{\partial\psi^*}{\partial x} \end{vmatrix} = \frac{i\hbar}{2m}\left(\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x} - \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)$$

$$j_x = \frac{i\hbar}{2m}\left(\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x} - \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)$$

le courant de présence

exemple

$\psi(x) = Ae^{ikx} \Rightarrow \psi^*(x) = A^*e^{-ikx}$

$$j_x = \frac{i\hbar}{2m}\left(-ikAe^{ikx}A^*e^{-ikx} - ik\,A^*e^{-ikx}Ae^{ikx}\right)$$

$$j_x = \frac{\hbar k}{m}|A|^2$$

calculons $\frac{\partial\rho}{\partial t}$

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = \frac{\partial\psi^*}{\partial t}\psi + \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t}$$

or l'équation de Schrodinger donne

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

et sa conjuguée

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

d'où

$$i\hbar\psi^* \frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\psi^* + V(x)\,\psi^*\psi \ (1)$$

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

$$(1)\text{-}(2) \Rightarrow i\hbar\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t} + i\hbar\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}\psi - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\psi^*$$

$$\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t} + \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} + \frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}\psi - \frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\psi^* = 0$$

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{i\hbar}{2m}\left(\psi\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2} - \psi^*\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\right) = 0$$

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{\partial^2 j_x}{\partial x^2} = 0$$

d'où

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \operatorname{div} j = 0$$

<u>Note</u> : en 3D les définitions seront:

$\rho(r,t) = |\psi(r,t)|^2$

$$j = \frac{i\hbar}{2m}(\psi\nabla\psi^* - \psi^*\nabla\psi)$$

$$j_x = \frac{i\hbar}{2m}\left(\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x} - \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)$$

$$j_y = \frac{i\hbar}{2m}\left(\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial y} - \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial y}\right)$$

$$j_z = \frac{i\hbar}{2m}\left(\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial z} - \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial z}\right)$$

$$r = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}, \nabla = \begin{pmatrix} \partial_x \\ \partial_y \\ \partial_z \end{pmatrix}, \text{div } j = \nabla . j = \partial_x j_x + \partial_y j_y + \partial_z j_z$$

3.5 L'ÉVOLUTION DU SYSTÈME

Supposons qu'on part d'un état initial $|\psi(x,0)>$ comment va évoluer le système dans le temps ? c'est-à-dire que vaut $|\psi(x,t)>$??

Eh bien l'évolution du système est régie par l'équation de Schrodinger , on va donc exploiter cette équation

<u>Rappel</u> : l'équation de Schrodinger (1D)

$$i\hbar\frac{\partial|\psi(x,t)>}{\partial t} = \hat{H}|\psi(x,t)>$$

Cherchons une solution particulière $|\psi_n(x,t)>$ de l'équation de Schrodinger telle que

$$\hat{H}|\psi_n(x,t)> = E_n|\psi_n(x,t)>$$

c'est-à-dire $|\psi_n(x,t)>$ est un vecteur propre de $\hat{H}$, associé à la valeur propre E_n .

$$i\hbar \frac{\partial|\psi_n(x,t)>}{\partial t} = \hat{H}|\psi_n(x,t)>$$

$$i\hbar \frac{\partial|\psi_n(x,t)>}{\partial t} = E_n|\psi_n(x,t)>$$

$$\frac{\partial|\psi_n(x,t)>}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} E_n|\psi_n(x,t)>$$

$$|\psi_n(x,t)> = e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\,|\chi_n(x)>$$

$\chi_n(x)$ désigne la constante d'intégration elle dépend de x.

Par définition les états $|\psi_n(x,t)>$ sont appelés états stationnaires.

On peut remarquer que les états $|\chi_n(x)>$ sont aussi les vecteurs propres de $\hat{H}$ associé à la valeur propre E_n, en effet

$$\hat{H}|\psi_n(x,t)> = E_n|\psi_n(x,t)>$$

$$\hat{H}(e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\,|\chi_n(x)>) = E_n(e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\,|\chi_n(x)>)$$

comme $\hat{H}$ ne dépend pas du temps t on peut sortir $e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}$

$$e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\hat{H}\,|\chi_n(x)> = E_n\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\,|\chi_n(x)>$$

$$\hat{H}\,|\chi_n(x)> = E_n\,|\chi_n(x)>$$

Les $|\chi_n(x)>$ forment donc une base de $\mathcal{H}$.

Considérons maintenant l'état $|\psi(x,0)>$, on a

$$|\psi(x,0)> = \sum_n \alpha_n \; |\chi_n(x)>$$

puisque les états propres $|\chi_n(x)>$ forment une base de $\mathcal{H}$, et comme

$$|\psi_n(x,t)> = \; e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} \; |\chi_n(x)>$$

$$|\psi_n(x,0)> = \; |\chi_n(x)>$$

d'où

$$|\psi(x,0)> = \sum_n \alpha_n \; |\psi_n(x,0)>$$

comme l'évolution est linéaire on passe de $|\psi(x,0)>$ à $|\psi(x,t)>$ linéairement

$$|\psi(x,t)> = \sum_n \alpha_n \; |\psi_n(x,t)>$$

$$|\psi(x,t)> = \sum_n \alpha_n \; e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} \; |\chi_n(x)>$$

Finalement tout se passe par l'opérateur $\widehat{H}$, si on connait l'hamiltonien du système $\widehat{H}$, on connaît les états stationnaires et on connaîtra l'évolution de $|\psi(x,t)>$.

<u>Remarque</u> : individuellement l'état

$$|\psi_n(x,t)> = \; e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} \; |\chi_n(x)>$$

ne change pas physiquement, c'est le même état physique que $|\chi_n(x)>$ c'est pourquoi on appelle $|\psi_n(x,t)>$ état stationnaire.

3.6 THÉORÈME D'EHRENFEST

On va calculer l'évolution au cours du temps la valeur moyenne $<\hat{A}>$ d'une grandeur A.

Soit donc une grandeur physique A et $<\hat{A}>$ sa valeur moyenne

$$<\hat{A}>=<\psi|\hat{A}|\psi>$$

$$\frac{d}{dt}<\hat{A}>= (\frac{d}{dt}<\psi|)\ \hat{A}|\psi> + <\psi|\ (\frac{d}{dt}\hat{A})\ |\psi> +(<\psi|\hat{A})\ \frac{d}{dt}|\psi>$$

En utilisant l'équation de Schrodinger et sa conjuguée,

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi>= \hat{H}|\psi>$$

$$-i\hbar\frac{d}{dt}|\psi>^*= \hat{H}|\psi>^* \Rightarrow -i\hbar\frac{d}{dt}<\psi| = <\psi|\hat{H}$$

$$\frac{d}{dt}<\hat{A}>=(i\frac{1}{\hbar}<\psi|\hat{H})\hat{A}|\psi> + <\psi|\ (\frac{d}{dt}\hat{A})\ |\psi> +(<\psi|\hat{A})\ (-i\frac{1}{\hbar}\hat{H}\ |\psi>)$$

$$\frac{d}{dt}<\hat{A}>= \frac{i}{\hbar}(<\psi|\hat{H}\hat{A}-\hat{A}\hat{H}|\psi>) + <\psi|\ (\frac{d}{dt}\hat{A})\ |\psi>$$

$$\frac{d}{dt}<\hat{A}>= \frac{i}{\hbar}(<\psi|[\hat{H},\hat{A}]|\psi>) + <\psi|\ (\frac{d}{dt}\hat{A})\ |\psi>$$

$$\frac{d}{dt}<\hat{A}>= \frac{i}{\hbar}(<[\hat{H},\hat{A}]>) + <(\frac{d}{dt}\hat{A})>$$

Si $\hat{A}$ ne dépend pas du temps t, alors on a

$$\frac{d}{dt} < \hat{A} >= \frac{i}{\hbar} < [\hat{H}, \hat{A}] >= \frac{1}{i\hbar} < [\hat{A}, \hat{H}] >$$

<u>NOTE</u> : Bien que $\hat{A}$ ne dépend pas du temps, sa valeur moyenne <$\hat{A}$>(t) dépend du temps !!!

On prend $\hat{A} = \hat{R}$ et $\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \hat{V}(x)$ (une particule de masse m plongée dans un potentiel V(x)) et $\hat{R}$ ne dépend pas du temps (pour nous les opérateurs ne dépendent pas du temps c'est l'état qui dépend du temps |ψ(t)> !! c'est du point de vue de Schrodinger) d'où

$$\frac{d}{dt} < \hat{R} >= \frac{1}{i\hbar} < [\hat{R}, \hat{H}] >$$

$$\frac{d}{dt} < \hat{R} >= \frac{1}{i\hbar} < \left[\hat{R}, \frac{\hat{P}^2}{2m} + \hat{V}\right] >$$

or

$$\left[\hat{R}, \frac{\hat{P}^2}{2m} + \hat{V}\right] = \hat{R}\left(\frac{\hat{P}^2}{2m} + \hat{V}\right) - \left(\frac{\hat{P}^2}{2m} + \hat{V}\right)\hat{R}$$

$$= \left(\frac{\hat{R}\,\hat{P}^2}{2m} + \hat{R}\hat{V}\right) - \left(\frac{\hat{P}^2\hat{R}}{2m} + \hat{V}\hat{R}\right) = \frac{1}{2m}\left(\hat{R}\,\hat{P}^2 - \hat{P}^2\hat{R}\right)$$

$$= \frac{1}{2m}[\hat{R}, \hat{P}^2]$$

$$= \frac{1}{2m}[\hat{R}, \hat{P}^2] = \frac{1}{2m}\left(\hat{P}[\hat{R}, \hat{P}] + [\hat{R}, \hat{P}]\hat{P}\right) = \frac{2i\hbar}{2m}\hat{P}$$

$$\frac{d}{dt} < \hat{R} >= \frac{1}{i\hbar} < \frac{2i\hbar}{2m}\hat{P} >$$

$$\frac{d}{dt} < \hat{R} >= \frac{< \hat{P} >}{m}$$

Qui correspond en physique classique p = m$\dot{x}$ = mv

De même si on prend $\hat{A} = \hat{P}$ et $\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \hat{V}(x)$, comme toutes les opérateurs , l'opérateur d'impulsion $\hat{P}$ ne dépend pas du temps, on a

$$\frac{d}{dt} < \hat{P} >= \frac{1}{i\hbar} < [\hat{P}, \hat{H}] >$$

$$\frac{d}{dt} < \hat{P} >= \frac{1}{i\hbar} < \left[\hat{P}, \frac{\hat{P}^2}{2m} + \hat{V}(x)\right] >$$

$$\left[\hat{P}, \frac{\hat{P}^2}{2m} + \hat{V}(x)\right] = \hat{P}\left(\frac{\hat{P}^2}{2m} + \hat{V}(x)\right) - \left(\frac{\hat{P}^2}{2m} + \hat{V}(x)\right)\hat{P}$$

$$= \left(\frac{\hat{P}^3}{2m} + \hat{P}\hat{V}(x)\right) - \left(\frac{\hat{P}^3}{2m} + \hat{V}(x)\hat{P}\right) = \hat{P}\hat{V}(x) - \hat{V}(x)\hat{P}$$

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}V + i\hbar V\frac{\partial}{\partial x} = -i\hbar(\frac{\partial}{\partial x}V - V\frac{\partial}{\partial x})$$

en appliquant sur ψ

$$\left(\frac{\partial}{\partial x}V - V\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi = \frac{\partial}{\partial x}(V\psi) - V\frac{\partial\psi}{\partial x} = \frac{\partial V}{\partial x}\psi + V\frac{\partial\psi}{\partial x} - V\frac{\partial\psi}{\partial x}$$

$$= \frac{\partial V}{\partial x} \psi$$

autrement dit

$$\left(\frac{\partial}{\partial x} V - V \frac{\partial}{\partial x}\right) = \frac{\partial V}{\partial x}$$

$$\frac{d}{dt} < \hat{P} >= \frac{-i\hbar}{i\hbar} < \frac{\partial V}{\partial x} >$$

$$\frac{d}{dt} < \hat{P} >= -< \nabla \hat{V} >$$

$$\frac{d}{dt} < \hat{P} >=< \hat{F} >$$

Qui correspond en physique classique $\dot{p} = m\ddot{x} = -\nabla V = f$ c'est à dire

$f = m\gamma$

Ceci montre que la physique quantique contient la physique classique, pour retrouver la physique classique il suffit de prendre un grand nombre de particules et prend la valeur moyenne.

Comme la relativité restreinte contient la physique classique , il suffit de prendre v très petit devant c.

Autrement dit la physique quantique a une certaine cohérence car on retrouve la physique classique à partir de la physique quantique.

4 LES AXIOMES DE LA PHYSIQUE QUANTIQUE

Axiome 1 : L'espace de Hilbert.

Soit Ω un système quantique, à chaque instance le système a un état et l'ensemble de ces états forme un espace de Hilbert $\mathcal{H}$ complet, séparable et ayant une base finie ou dénombrable ou continue.

Complet : Toute suite de Cauchy converge.

Séparable: Il existe une suite a_n de $\mathcal{H}$ telle que

$\forall u \in \mathcal{H} \ \ \forall \varepsilon > 0$, $\exists a_k$ tel que $||u-a_k||<\varepsilon$

Le système Ω peut être caractérisé par plusieurs grandeurs physiques, qui fournissent alors les différentes bases.

Axiome 2 : La correspondance

À une grandeur physique G qui peut prendre des valeurs réelles $\{g_1, g_2, ..., g_i, ...\}$ fini ou dénombrable ou continue , on associe un observable (opérateur autoadjoint) $\widehat{G}$ tels que:

$\widehat{G}|g_i> = g_i|g_i>$; $g_i \in \{1,2, ..., n\}$ ou $\mathbb{N}$ ou $\mathbb{R}$

- les g_i sont des valeurs propres de $\widehat{G}$

- les vecteurs propres $|g_i>$ forment une base orthonormée.

Axiome 3 : de la mesure.

Soit G une grandeur qui peut prendre des valeurs réelles $\{g_1, g_2, ..., g_i, ...\}$. Les vecteurs propres $|g_i>$ de $\widehat{G}$ forment une base, d'où

$\forall\ |\psi> \in \mathcal{H}$

$$|\psi> = \sum_i \alpha_i\,|g_i>$$

Si on mesure G quand le système Ω est en état $|\psi>$, alors la probabilité d'avoir le résultat g_i est

$$\text{prob}(g_i) = \frac{|\alpha_i|^2}{\sum_k |\alpha_k|^2}$$

immédiatement après la mesure le système passe de l'état $|\psi>$ à l'état $|g_i>$ (si le résultat de la mesure est g_i).

Et si on refait une 2ème fois la mesure immédiatement après la 1er mesure on trouve évidemment encore g_i et le système est toujours dans l'état $|g_i>$.

Axiome 4 : L'évolution de la fonction Psi

L'évolution de la fonction Psi suit l'équation de Schrodinger, c'est-à-dire

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

5 SOLUTION DE L'ÉQUATION DE SCHRODINGER

5.1 PARTICULE LIBRE

Pour une particule libre ξ de masse $m \neq 0$ d'impulsion p, son hamiltonien $\widehat{H}$:

$$\widehat{H} = \frac{\widehat{P}^2}{2m}$$

$\widehat{H}$ = observable , c'est une application linéaire dans $\mathcal{H}$

et

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

H = est un opérateur, c'est une application linéaire dans $L^2(\mathbb{R})$

On passe de $\widehat{H}$ à H en fixant la base $\{|x>\}_{x\in\mathbb{R}}$, on est exactement dans la situation:

Soient E un $\mathbb{R}$-espace vectoriel de dimension 2, et $\vec{i}=(1,0)$, $\vec{j}=(0,1)$ la base canonique de E on a par ex :

$\vec{u}=3\vec{i}+2\vec{j} \in E \Rightarrow (3,2)\in\mathbb{R}^2$

E	$\mathcal{H}$
$\{\vec{i},\vec{j}\}$ base canonique	$\{\|x>\}_{x\in\mathbb{R}}$ base de coordonnée
$\vec{u}=3\vec{i}+2\vec{j}$	$\|\psi> = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x)\|x > dx$
$(3,2)\in\mathbb{R}^2$	$\psi(x)\in L^2(\mathbb{R})$
A opérateur (appli linéaire)	$\widehat{P}_x$
$\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 5 & 3 \end{pmatrix}$; matricede A	$P_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$

On se place dans la base $\{|x>\}_{x\in\mathbb{R}}$ et nous voulons savoir quelle est l'équation de Schrodinger, et la fonction Psi $\psi(x,t)$ de ξ ??

Cherchons alors un état stationnaire $\chi(x)$ de ξ avec $E = \frac{p^2}{2m}$ comme l'énergie associée, car une fois trouvé l'état stationnaire $\chi(x)$, la fonction Psi de ξ est donnée par:

$$\psi(x,t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\chi(x)$$

L'équation stationnaire de ξ est

$$H\chi = E\chi$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\chi}{\partial x^2} = E\chi$$

$$\frac{\partial^2\chi}{\partial x^2} + \frac{p^2}{\hbar^2}\chi = 0$$

La solution est de la forme:

$$\chi(x) = Ae^{\frac{i}{\hbar}px} + Be^{-\frac{i}{\hbar}px} \quad ; \text{A,B constantes complexes}$$

donc finalement les solutions de l'équation de Schrodinger pour une particule libre sont :

$\psi(x,t) = \chi(x)e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$

$$\psi(x,t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)} + Be^{-\frac{i}{\hbar}(px+Et)} \text{ ; } A,B \in \mathbb{C}$$

On peut prendre B=0, donc la fonction Psi de la particule libre ξ est

$$\psi(x,t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)} \text{ ; } A \in \mathbb{C}$$

En 3D ça donne

$$\psi(r,t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}(p.r-Et)} + Be^{-\frac{i}{\hbar}(p.r+Et)} \text{ ; } A,B \in \mathbb{C}$$

$p.r = p_x x + p_y y + p_z z$; produit scalaire de $\mathbb{R}^3$

pour B=0 on a:

$$\psi(r,t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}(p.r-Et)} \text{ ; } A \in \mathbb{C}$$

<u>Remarque</u> :

$\chi(x) = Ae^{\frac{i}{\hbar}px} + Be^{-\frac{i}{\hbar}px}$, si on prend $A=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$ et B=0

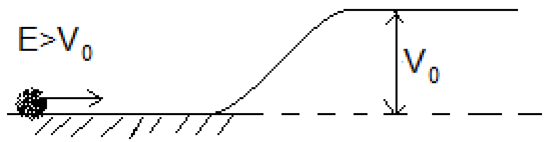
$\chi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{i}{\hbar}px} = p(x) = \langle x,p \rangle$

C'est la fonction Psi du ket |p>.

5.2 LA MARCHE DE POTENTIEL

Commençons par voir ce qui se passe en physique classique.

Considérons une simple déclivité d'une certaine hauteur, formant ainsi une marche de potentiel $V_0>0$.



On fait rouler une bille de gauche à droite ayant une énergie E>0.

→Si $E>V_0$, la bille va monter la marche de potentiel, au cours de sa montée elle ralentit, après avoir passé la marche de potentiel elle perd son énergie $E - V_0$.

Toutes les billes qui seront ainsi envoyées sur la marche de potentiel (avec $E>V_0$) passeront au-delà sans qu'aucune reviennent en arrière, on dit qu'elle traversent la marche de potentiel.

→Si $E<V_0$, la bille va être arrêtée par la marche de potentiel en un point, puis le mouvement s'inverse, on dit qu'elle rebondit ou réfléchit sur la marche de potentiel. Aucune bille d'énergie $E<V_0$ affranchit la marche de potentiel.

Voyons maintenant pour une particule quantique, mais d'abord rappelons

Rappel :

$\rightarrow$ $y'' + k^2y = 0$, k=constante réelle

Solution : $y = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$, A,B constantes complexes

En utilisant les formules

$e^{i\theta} = \cos\theta + i \sin\theta$

$\cos(-\theta) = \cos\theta$, $\sin(-\theta) = -\sin\theta$

On peut mettre aussi la solution sous la forme trigonométrique

Solution : $y = A \cos(kx) + B \sin(kx)$, A,B constantes complexes

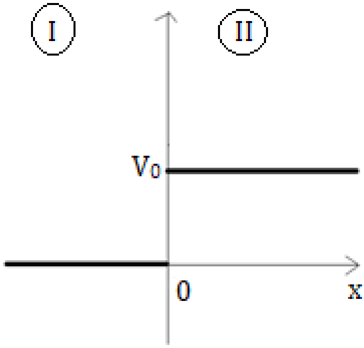
$\rightarrow$ $y'' - k^2y = 0$, k=constante réelle,

Solution : $y = Ae^{kx} + Be^{-kx}$, A,B constantes complexes

On va placer dans le scénario suivant : Une particule ξ de masse $m\neq 0$, d'énergie $E>0$ venant de gauche ($x=-\infty$) vers la droite (x croissant) et aucune particule venant de droite.

On va résoudre l'équation de Schrodinger indépendant du temps (équation stationnaire) quand le potentiel $V(x) = V_0 > 0$ une constante strictement positive.

$$V(x) = \begin{cases} 0 \text{ si } x < 0 \\ V_0 \text{ si } x \geq 0 \text{ avec } V_0 > 0 \end{cases}$$



Les données sont m≠0, E>0, $\widehat{H}$:

$$\widehat{H} = \frac{\widehat{P}^2}{2m} + \widehat{V}_0$$

Cherchons un état stationnaire χ , ayant E comme énergie. Alors χ vérifie l'équation

$$\widehat{H}|\chi> = E|\chi>$$

$$(\frac{\widehat{P}^2}{2m} + \widehat{V}_0)|\chi> = E|\chi>$$

plaçons nous dans la base $\{|x>\}_{x\in\mathbb{R}}$ ça donne

$$< x|(\frac{\widehat{P}^2}{2m} + \widehat{V}_0)|\chi> = < x|E|\chi>$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_0\right)<x|\chi> = E<x|\chi>$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_0\right)\chi(x) = E\chi(x)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\chi(x)}{\partial x^2}\right) + V_0\chi(x) = E\,\chi(x)$$

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\chi(x)}{\partial x^2}\right) + E\,\chi(x) - V_0\chi(x) = 0$$

$$\frac{\partial^2\chi(x)}{\partial x^2} + \frac{2m(E\ - V_0)}{\hbar^2}\chi(x) = 0$$

Voyons les deux cas:

¤ $E > V_0 \rightarrow E - V_0 > 0$

→Zone I

$$\frac{\partial^2\chi(x)}{\partial x^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\chi(x) = 0$$

on pose

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$\frac{\partial^2\chi(x)}{\partial x^2} + k^2\chi(x) = 0$$

la solution est donc

$$\chi_I(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad , A, B \ \in \mathbb{C}$$

→Zone II

$$\frac{\partial^2\chi(x)}{\partial x^2}+\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}\chi(x)=0$$

on pose

$$k'=\frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$$

$$\frac{\partial^2\chi(x)}{\partial x^2}+k'^2\chi(x)=0$$

la solution est donc

$$\chi_{II}(x)=Ce^{ik'x}+De^{-ik'x}\quad ,C,D\ \in\mathbb{C}$$

<u>Réflexion, transmission, élasticité</u> :

Avant de continuer définissons les trois coefficients suivants : réflexion R, transmission T et d'élasticité T' de la marche de potentiel, qui nous serviront plus tard.

$$\begin{cases} Ae^{ikx}+Be^{-ikx} \\ Ce^{ik'x}+De^{-ik'x} \end{cases}$$

$$R=\left|\frac{B}{A}\right|$$

$$T=\sqrt{1-R^2}$$

$$T'=\left|\frac{D}{A}\right|$$

Comme on considère que la particule venant de gauche vers la droite, et aucune particule venant de droite vers la gauche donc D=0 d'où

$\chi_{II}(x) = Ce^{ik'x}$, $C \in \mathbb{C}$

$$\chi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx}+Be^{-ikx} \text{ si } x<0 \text{ ; Zone I} \\ Ce^{ik'x} \text{ si } x \geq 0 \text{ ; Zone II} \end{cases}$$

Pour trouver les constantes A, B, C on utilise le fait que χ est de classe C^1 (χ et χ' sont continus)

$\chi_I(0) = \chi_{II}(0) \Rightarrow A+B = C$

$\chi'_I(x) = ikAe^{ikx} - ikBe^{-ikx}$

$\chi'_{II}(x) = ik'Ce^{ik'x}$

$\chi'_I(0) = \chi'_{II}(0) \Rightarrow ik(A - B) = ik'C$

$$\begin{cases} A + B = C \\ k(A - B) = k'C \end{cases}$$

$$\begin{cases} 1 + \frac{B}{A} = \frac{C}{A} \\ k(1 - \frac{B}{A}) = k'\frac{C}{A} \end{cases}$$

$$k(1 - \frac{B}{A}) = k'(1 + \frac{B}{A})$$

$$k - k\frac{B}{A} = k' + k'\frac{B}{A}$$

$$k - k' = (k + k')\frac{B}{A}$$

$$\frac{B}{A} = \frac{k - k'}{k + k'}$$

$$\frac{C}{A} = \frac{2k}{k + k'}$$

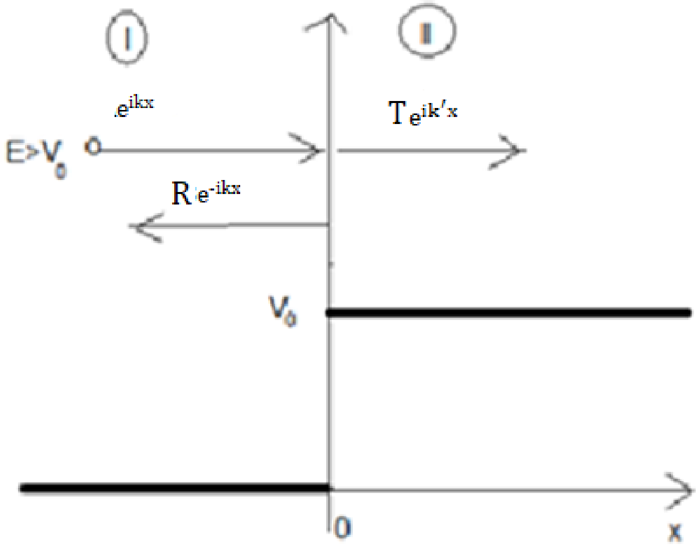
Ici on peut choisir A=1 (normalisé) et on trouve ainsi les coefficients B et C

et les coefficients R, T, T'

$$R = \left|\frac{B}{A}\right| = \frac{k - k'}{k + k'}$$

$$T = \sqrt{1 - R^2} = \frac{2\sqrt{kk'}}{k + k'}$$

$$T' = \left|\frac{D}{A}\right| = 0 \text{ car } D = 0$$



Ainsi la particule ξ d'énergie $E>V_0$ venant de gauche vers la droite en état $|e^{ikx}>$ touche la marche de potentiel en x=0 qui modifie l'état de la particule en

$R|e^{-ikx}> + T|e^{ik'x}>$

Après la rencontre, on trouve :

→Soit $|e^{-ikx}>$ un rebondissement avec la probabilité R^2

→Soit $|e^{ik'x}>$ une traversée avec la probabilité T^2

Il n'y a pas de transmission total car la probabilité de réflexion n'est pas nulle $R^2 \neq 0$.

¤ $E < V_0 \rightarrow E - V_0 < 0$

→Zone I

On trouve la même chose

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$\chi_I(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$, $A, B \in \mathbb{C}$

→Zone II

$$\frac{\partial^2\chi(x)}{\partial x^2} - \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}\chi(x) = 0$$

on pose

$$k' = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

$$\frac{\partial^2\chi(x)}{\partial x^2} - k'^2\chi(x) = 0$$

la solution est donc

$\chi_{II}(x) = Ce^{k'x} + De^{-k'x}$, $C, D \in \mathbb{C}$

<u>Réflexion, transmission, élasticité</u> :

Comme tout à heure définissons les trois coefficients suivants : réflexion R, transmission T et d'élasticité T' de la marche de potentiel

$$\begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \\ Ce^{k'x} + De^{-k'x} \end{cases}$$

$$R = \left|\frac{B}{A}\right|$$

$$T = \sqrt{1 - R^2}$$

$$T' = \left|\frac{D}{A}\right|$$

La fonction χ_{II} doit être borné (comme toute fonction Psi) donc C=0 d'où

$$\chi_{II}(x) = De^{-k'x} \ , D \in \mathbb{C}$$

$$\chi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx}+Be^{-ikx} \text{ si } x<0 \text{ ; Zone I} \\ \quad De^{-k'x} \text{ si } x \geq 0 \text{ ; Zone II} \end{cases}$$

Pour trouver les constantes A, B, D on utilise le fait que χ est de classe C^1 (χ et χ' sont continus)

$\chi_I(0) = \chi_{II}(0) \Rightarrow A+B = D$

$$\chi'_I(x) = ikAe^{ikx} - ikBe^{-ikx}$$

$$\chi'_{II}(x) = -k'De^{-k'x}$$

$\chi'_I(0) = \chi'_{II}(0) \Rightarrow ik(A - B) = -k'D$

$$\begin{cases} A + B = D \\ ik(A - B) = -k'D \end{cases}$$

$$\begin{cases} \quad 1+\dfrac{B}{A} = \dfrac{D}{A} \\ ik\left(1 - \dfrac{B}{A}\right) = -k'\dfrac{D}{A} \end{cases}$$

$$ik\left(1 - \frac{B}{A}\right) = -k'(1+\frac{B}{A})$$

$$ik - ik\,\frac{B}{A} = -k' - k'\,\frac{B}{A}$$

$$ik + k' = (ik - k')\,\frac{B}{A}$$

$$\frac{B}{A} = \frac{ik + k'}{ik - k'}$$

$$\frac{D}{A} = 1 + \frac{B}{A} = \frac{2ik}{ik - k'}$$

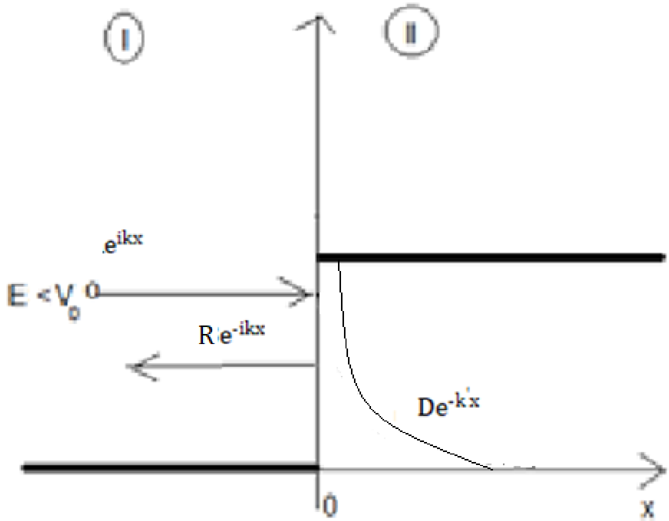
Ainsi on peut choisir A=1 , et on trouve B et D.

et les coefficients R, T, T'

$$R = \left|\frac{B}{A}\right| = \left|\frac{ik + k'}{ik - k'}\right| = 1$$

$$T = 0$$

$$T' = \left|\frac{D}{A}\right| = \left|\frac{2ik}{ik - k'}\right|$$



Ainsi la particule ξ d'énergie $E<V_0$ venant de gauche vers la droite en état $|e^{ikx}>$ touche la marche de potentiel en x=0 qui modifie l'état de la particule en

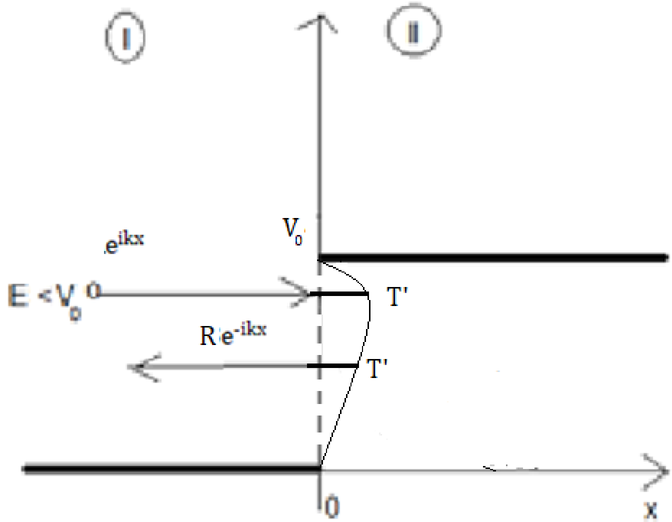
$R|e^{-ikx}>$

Après la rencontre on trouve l'état $|e^{-ikx}>$ (un rebondissement) avec la probabilité $|R|^2=1$

Mais l'existence de terme $De^{-k'x}$ montre que la probabilité de présence en Zone II n'est pas nulle $|D|^2\neq 0$.

Ceci est assez bizarre et ça semble qu'il y a une contraction car d'un côté on a un rebondissement total avec une probabilité $|R|^2=1$ et de l'autre côté la probabilité de présence de la particule ξ en zone II n'est pas nulle !!

Ma explication est suivante, on peut dire que la marche de potentiel est élastique avec un coefficient d'élasticité T', certaine particule pousse la barrière donc traversée, elle se trouve alors dans la Zone II, puis rebondit vers la Zone I par T' , voir fig



Ainsi la particule rebondit, mais de temps en temps elle pénètre dans la Zone II sur un tout petit distance (ça se voit par la fonction $e^{-k'x}$) puis repart vers la Zone I.

On peut voir tout cela avec le courant de présence j_x .

On a

$$j_x = \frac{i\hbar}{2m}\begin{vmatrix} \psi & \psi' \\ \psi^* & \psi^{*\prime} \end{vmatrix}$$

$$j_x = \frac{i\hbar}{2m}(\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x} - \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x})$$

pour

$\psi = \chi_I$

ça donne

$$j_{x,I} = \frac{i\hbar}{2m}(\chi_I\frac{\partial\chi_I^*}{\partial x} - \chi_I^*\frac{\partial\chi_I}{\partial x})$$

$$\begin{vmatrix} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & ikAe^{ikx} - ikBe^{-ikx} \\ A^*e^{-ikx} + B^*e^{ikx} & -ikA^*e^{-ikx} + ikB^*e^{ikx} \end{vmatrix} =$$

$$= -ik|A|^2 + ikB^*Ae^{2ikx} - ikA^*Be^{-2ikx} + ik|B|^2$$

$$-ik|A|^2 + ikA^*Be^{-2ikx} - ikB^*Ae^{2ikx} + ik|B|^2$$

$$= -2ik|A|^2 + 2ik|B|^2$$

$$j_{x,I} = \frac{\hbar k}{m}|A|^2 - \frac{\hbar k}{m}|B|^2 = 0$$

il y a donc un réflexion total

de même pour $j_{x,II}$

$$j_{x,II} = \frac{i\hbar}{2m}(\chi_{II}\frac{\partial\chi_{II}^*}{\partial x} - \chi_{II}^*\frac{\partial\chi_{II}}{\partial x})$$

$$\begin{vmatrix} De^{-k'x} & -k'De^{-k'x} \\ D^*e^{-k'x} & -k'D^*e^{-k'x} \end{vmatrix} = -k'|D|^2e^{-2k'x} + k'|D|^{2e^{-2k'x}} = 0$$

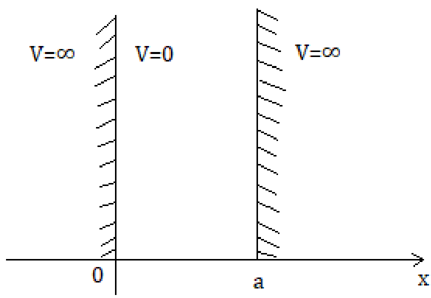
$$j_{x,II} = 0$$

Il n'y a pas de transmission, ça confirme donc ce que nous avons dit.

5.3 UN PUITS DE POTENTIEL INFINI

Ici on va étudier le comportement d'une particule quantique ξ=(m,E) dans un puits de potentiel infini, autrement dit on a un potentiel V(x) de la forme:

$$V(x)=\begin{cases}\infty \text{ si } x<0 \text{ ou } x>a\ ;a>0\\ 0 \text{ si } 0\leq x\leq a\end{cases}$$



Cherchons les états stationnaires χ d'énergie E de ξ.

À l'extérieur de [0,a] la fonction propre χ(x) = 0

et à l'intérieur de [0,a] elle vérifie l'équation

$$\frac{\partial^2\chi(x)}{\partial x^2}+k^2\chi(x) = 0$$

avec

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Ici, il est plus pratique de prend la solution sous la forme trigo que la forme d'exponentielle

$$\chi(x) = A\cos kx + B\sin kx \quad , A, B \ \in \mathbb{C}$$

La continuité de χ(x) en zéro x=0 impose que A=0

χ(0) = 0 = A cos 0 + B sin 0 ⇒ A = 0

il nous reste

$$\chi(x) = B\sin kx \quad , B \neq 0 \ \in \mathbb{C}$$

et la continuité en x=a de χ(x) donne

χ(a) = 0 = B sin ka ⇒ sin ka = 0 ⇒ ka = nπ

comme la fonction nulle n'est pas acceptée et que sin(-kx) = sin kx donc n ne prend que des valeurs >0

ka = nπ avec n=1,2,3, ...

soit

$$k = \frac{n\pi}{a}$$

d'où

$$\chi(x) = B\sin\frac{n\pi}{a}x$$

Pour trouver B on utilise la normalisation

$$\int_0^a |\chi(x)|^2 dx = 1$$

$$\int_0^a |\chi(x)|^2 dx = 1 \Rightarrow |B|^2 \int_0^a \left|\sin\frac{n\pi}{a}x\right|^2 dx = 1$$

$$\Rightarrow |B|^2 \int_0^a \sin^2(\frac{n\pi}{a}x)\, dx = 1$$

on a la formule

$$\sin^2\theta = \frac{1-\cos 2\theta}{2}$$

$$= \int_0^a \sin^2(\frac{n\pi}{a}x)\, dx = \int_0^a \frac{1-\cos 2\frac{n\pi}{a}x}{2} dx$$

$$= \frac{1}{2}(\left[x - \frac{a}{2n\pi}\sin 2\frac{n\pi x}{a}\right]_0^a)$$

$$= \frac{1}{2}(\left[x - \frac{a}{2n\pi}\sin 2\frac{n\pi x}{a}\right]_0^a) = \frac{1}{2}a$$

$$\frac{1}{2}a|B|^2 = 1 \Rightarrow B = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

finalement

$$\chi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\ \sin\frac{n\pi}{a}x \quad , n = 1,2,3, \ldots.$$

La relation

$$k = \frac{n\pi}{a}$$

montre k est quantifié donc l'énergie aussi, autrement dit si on donne E une valeur quelconque on trouvera pas χ , χ n'existe que pour une certaine valeur de E plus précisément l'énergie E vaut :

$$k = \frac{n\pi}{a}$$

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

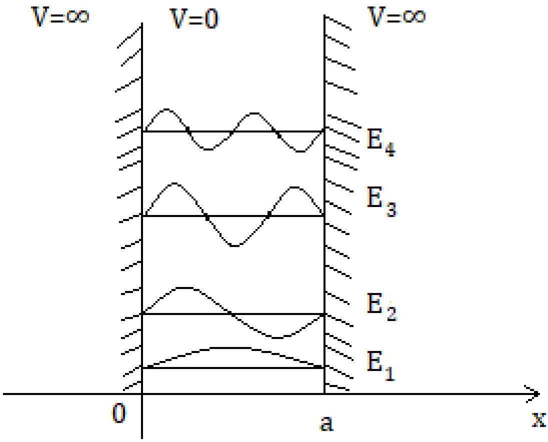
$$\frac{n\pi}{a} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \Rightarrow \frac{n^2\pi^2}{a^2} = \frac{2mE}{\hbar^2} \Rightarrow E = \frac{n^2\pi^2}{a^2}\frac{\hbar^2}{2m}$$

$$E_n = \frac{n^2\pi^2}{a^2}\frac{\hbar^2}{2m}$$

si on pose

$$E_1 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$$

$E_n = n^2E_1$



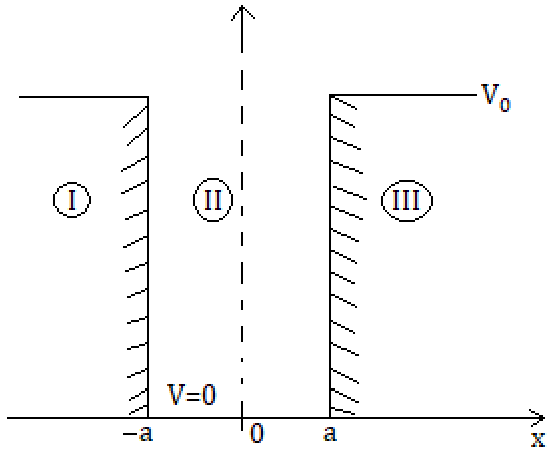
L'énergie E_n est quantifiée,

5.4 UN PUITS DE POTENTIEL FINI

Maintenant on va étudier le comportement d'une particule quantique dans un puits de potentiel, autrement dit on a un potentiel V(x) de la forme:

$$V(x)=\begin{cases} V_0 \text{ si } x<-a \text{ ou } x>a \text{ ; } a>0,\ V_0 > 0 \\ 0 \text{ si } 0\leq x\leq a \end{cases}$$

On regarde seulement dans le cas $0 < E < V_0$



→Dans la Zone I, la fonction propre $\chi(x)$ vérifie

$$\frac{\partial^2\chi(x)}{\partial x^2} - k'^2\chi(x) = 0$$

avec

$$k' = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

la solution est donc

$$\chi_I(x) = Ae^{k'x} + Be^{-k'x} \; , A, B \in \mathbb{C}$$

mais on élimine la solution $Be^{-k'x}$ car x<0 et la fonction n'est pas bornée, c'es-à-dire B=0.

$$\chi_I(x) = Ae^{k'x} \, , A \in \mathbb{C}$$

→Dans la Zone II, elle vérifie l'équation

$$\frac{\partial^2\chi(x)}{\partial x^2} + k^2\chi(x) = 0$$

avec

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

la solution est donc

$$\chi_{II}(x) = C\cos kx + D\sin kx \quad , C, D \ \in \mathbb{C}$$

→Dans la Zone III, la fonction propre $\chi(x)$ vérifie

$$\frac{\partial^2\chi(x)}{\partial x^2} - k'^2\chi(x) = 0$$

la solution est donc

$$\chi_{III}(x) = Fe^{k'x} + Ge^{-k'x} \quad , F, G \ \in \mathbb{C}$$

mais on élimine la solution $Fe^{k'x}$ car x>0 et la fonction n'est pas bornée, c'es-à-dire F=0.

$$\chi_{III}(x) = Ge^{-k'x} \ , G \ \in \mathbb{C}$$

soit

$$\chi(x) = \begin{cases} \chi_I(x) = Ae^{k'x} \ , x < -a \\ \chi_{II}(x) = C\cos kx + D\sin kx \ , -a \leq x \leq a \\ \chi_{III}(x) = Ge^{-k'x}, x > a \end{cases}$$

Pour trouver les coefficients A,C,D,G on utilise la continuité de χ(x) et χ'(x) en x=a et x=-a

$$\chi^{'}(x) = \begin{cases} \chi'_{I}(x) = k^{'}Ae^{k^{'}x}\ , x < -a \\ \chi'_{II}(x) = -kC\sin kx + kD\cos kx\ , -a \leq x \leq a \\ \chi'_{III}(x) = -k'Ge^{-k^{'}x}, x > a \end{cases}$$

$\chi_I(-a) = \chi_{II}(-a)$, $\chi_{II}(a) = \chi_{III}(a)$

$$Ae^{-k^{'}a} = C\cos ka - D\sin ka$$

$$Ge^{-k^{'}a} = C\cos ka + D\sin ka$$

$\chi'_I(-a) = \chi'_{II}(-a)$, $\chi'_{II}(a) = \chi'_{III}(a)$

$$k'Ae^{-k^{'}a} = kC\sin ka + kD\cos ka$$

$$-k^{'}Ge^{-k^{'}a} = -kC\sin ka + kD\cos ka$$

$$\begin{cases} Ae^{-k^{'}a} = C\cos ka - D\sin ka\ (1) \\ Ge^{-k^{'}a} = C\cos ka + D\sin ka\ \ (2) \\ k'Ae^{-k^{'}a} = kC\sin ka + kD\cos ka\ (3) \\ -k^{'}Ge^{-k^{'}a} = -kC\sin ka + kD\cos ka\ (4) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \dfrac{A}{G} = \dfrac{C - D\text{tg}\, ka}{C + D\text{tg}\, ka} \\ -\dfrac{A}{G} = \dfrac{C\text{tg}\, ka + D}{-C\text{tg}\, ka + D} \end{cases}$$

$$\frac{C - D\text{tg}\, ka}{C + D\text{tg}\, ka} = -\frac{C\text{tg}\, ka + D}{-C\text{tg}\, ka + D}$$

$(C - D\text{tg}\, ka)(C\text{tg}\, ka - D) = (C + D\text{tg}\, ka)(C\text{tg}\, ka + D)$

C^2tg ka - CD - DCtg^2 ka +D^2tg ka - C^2tg ka -CD -DCtg^2 ka - D^2tg ka = 0

DC + DCtg^2 ka = 0

(1 + tg^2 ka)DC = 0

→Soit D=0 ⇒ G = A d'où solution paire

$$\chi(x) = \begin{cases} \chi_I(x) = Ae^{k'x}, x < -a \\ \chi_{II}(x) = C\cos kx \\ \chi_{III}(x) = Ae^{-k'x}, x > a \end{cases}$$

Ici on peut prendre C=1, et on trouvera $A = e^{k'a}\cos ka$

Cherchons l'énergie associée à χ

(3)/(1) ⇒ k' = k tg(ka)

on a

$$a^2k^2 + a^2k'^2 = \frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}$$

posons

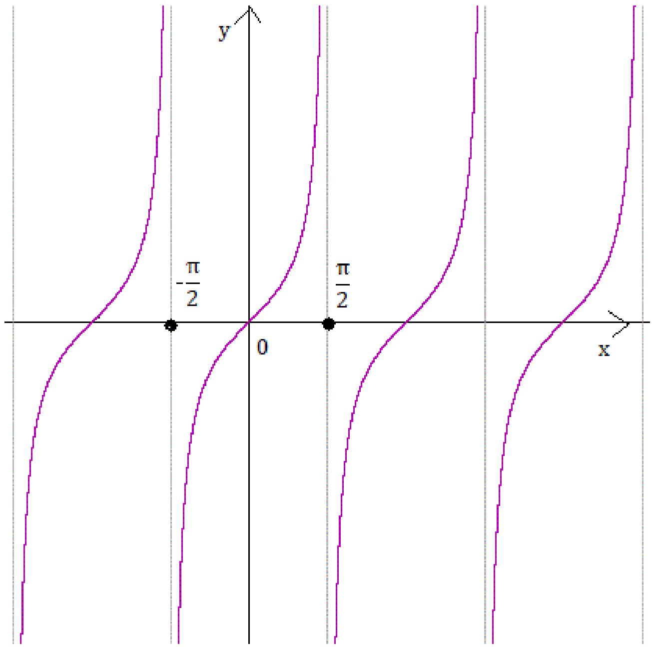
X=ka

Y=k'a

$$R = \frac{a\sqrt{2mV_0}}{\hbar}$$

$X^2 + Y^2 = R^2$

$k'a = ka\ tg(ka) \Rightarrow Y = X\ tg\ X$



$Y = X\ tg\ X$

Il s'agit de trouver les intersections entre le cercle
$X^2 + Y^2 = R^2$ avec la courbe $Y = X\ tg\ X$ dans le 1er quart

On trouve donc X, donc k donc E, on voit que k est quantifié (un nombre fini de points d'intersection) donc E est quantifié , mais on a pas de formule E_n comme dans le cas du puits infini.

→Soit C=0 ⇒ G = -A d'où solution impaire

$$\chi(x) = \begin{cases} \chi_I(x) = Ae^{k'x}, x < -a \\ \chi_{II}(x) = D \sin kx \\ \chi_{III}(x) = -Ae^{-k'x}, x > a \end{cases}$$

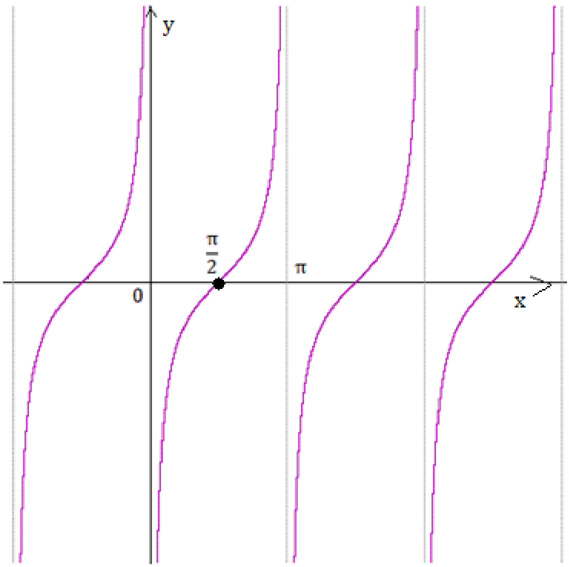
Ici on peut prendre D=1, et on trouvera $A = -e^{k'a} \sin ka$

Cherchons l'énergie associée à χ

(4)/(2) ⇒ -k' = k cotg(ka)

posons

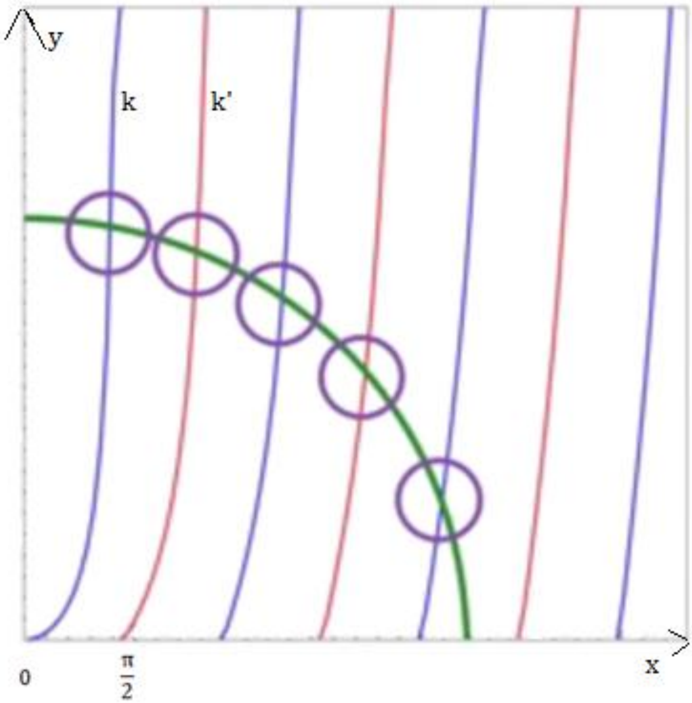
k'a = -ka cotg(ka) ⇒ Y = -X cotg X



Y = - X cotg X

Là s'agit aussi de trouver les intersections entre le cercle $X^2 + Y^2 = R^2$ avec la courbe $Y = -X \cot g X$ dans la 1er quart.

On trouve donc X, donc k' donc E, on voit que k' est quantifié (un nombre fini de points d'intersection) donc E est quantifié , mais on a pas de formule E_n comme dans le cas du puits infini.

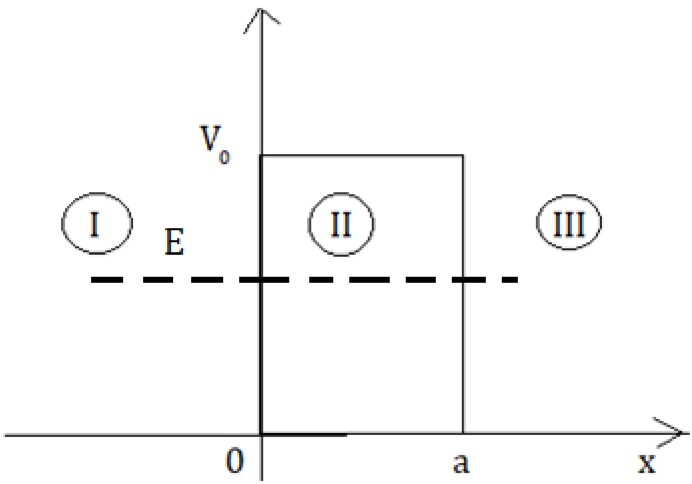


Note on peut voit que si $R < \frac{\pi}{2}$ on aura seulement une seul intersection.

5.5 BARRIÈRE DE POTENTIEL ET EFFET TUNNEL

Considérons maintenant une barrière de potentiel de hauteur $V_0 > 0$ et de largeur $a > 0$

$$V(x)=\begin{cases} 0 \text{ si } x<0 \text{ ;Zone I} \\ V_0>0 \text{ si } 0\leq x\leq a \text{ ;Zone II} \\ 0 \text{ si } x>a \text{ ;Zone III} \end{cases}$$



On suppose que la particule venant de gauche vers la droite avec une énergie $E<V_0$

→Dans la Zone I, la fonction propre $\chi(x)$ vérifie

$$\frac{\partial^2\chi(x)}{\partial x^2}+k^2\chi(x)=0$$

avec

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

la solution est donc

$$\chi_I(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad , A, B \in \mathbb{C}$$

→Dans la Zone II :

$$\frac{\partial^2 \chi(x)}{\partial x^2} - k'^2 \chi(x) = 0$$

avec

$$k' = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

la solution est donc

$$\chi_{II}(x) = Ce^{k'x} + De^{-k'x} \quad , C, D \in \mathbb{C}$$

→Dans la Zone III :

$$\frac{\partial^2 \chi(x)}{\partial x^2} + k^2 \chi(x) = 0$$

avec

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

la solution est donc

$\chi_{III}(x) = Fe^{ikx} + Ge^{-ikx}$, $F, G \in \mathbb{C}$

Comme il n'y a pas de particule venant de droite vers la gauche on a G=0

$\chi_{III}(x) = Fe^{ikx}$, $F \in \mathbb{C}$

La continuité en x=0 et en x=a de χ et χ' donne

$\chi_{I}(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$; $\chi_{II}(x) = Ce^{k'x} + De^{-k'x}$

$\chi_{I}'(x) = ikAe^{ikx} - ikBe^{-ikx}$; $\chi_{II}'(x) = k'Ce^{k'x} - k'De^{-k'x}$

$\chi_{II}(x) = Ce^{k'x} + De^{-k'x}$; $\chi_{III}(x) = Fe^{ikx}$

$\chi_{II}'(x) = k'Ce^{k'x} - k'De^{-k'x}$; $\chi_{III}'(x) = ikFe^{ikx}$

$A + B = C + D$

$ik(A - B) = k'(C - D)$

$Ce^{k'a} + De^{-k'a} = Fe^{ika}$

$k'(Ce^{k'a} - De^{-k'a}) = ikFe^{ika}$

Calculons A et B

$$\begin{cases} A + B = C + D \\ ikA - ikB = k'C - k'D \end{cases}$$

$$A = \frac{\begin{vmatrix} C + D & 1 \\ k'C - k'D & -ik \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 1 & 1 \\ ik & -ik \end{vmatrix}} = \frac{-ikC - ikD - k'C + k'D}{-ik - ik}$$

$$A = \frac{(ik + k')C + (ik - k')D}{2ik}$$

$$2ikA = (ik + k')C + (ik - k')D$$

$$B = \frac{\begin{vmatrix} 1 & C + D \\ ik & k'C - k'D \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 1 & 1 \\ ik & -ik \end{vmatrix}} = \frac{-ikC - ikD + k'C - k'D}{-ik - ik}$$

$$B = \frac{ikC + ikD - k'C + k'D}{2ik}$$

$$2ikB = (ik - k')C + (ik + k')D$$

Cherchons maintenant C et D

$$\begin{cases} e^{k'a}C + e^{-k'a}D = Fe^{ika} \\ k'e^{k'a}C - k'e^{-k'a}D = ikFe^{ika} \end{cases}$$

$$C = \frac{\begin{vmatrix} Fe^{ika} & e^{-k'a} \\ ikFe^{ika} & -k'e^{-k'a} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} e^{k'a} & e^{-k'a} \\ k'e^{k'a} & -k'e^{-k'a} \end{vmatrix}} = \frac{-k'Fe^{ika-k'a} - ikFe^{ika-k'a}}{-2k'}$$

$$2k'C = (k' + ik)Fe^{ika-k'a}$$

$$D = \frac{\begin{vmatrix} e^{k'a} & Fe^{ika} \\ k'e^{k'a} & ikFe^{ika} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} e^{k'a} & e^{-k'a} \\ k'e^{k'a} & -k'e^{-k'a} \end{vmatrix}} = \frac{-k'Fe^{ika+k'a} + ikFe^{ika+k'a}}{-2k'}$$

$$2k'D = (k' - ik)Fe^{ika+k'a}$$

remplaçons maintenant C,D dans A et B

$$2ikA = (ik + k')C + (ik - k')D$$

$$4ikk'A = (ik + k')2k'C + (ik - k')2k'D$$

$$4ikk'A = (ik + k')(k' + ik)Fe^{ika - k'a} + (ik - k')(k' - ik)Fe^{ika + k'a}$$

$$4ikk'e^{-ika}A = [(k' + ik)^2 e^{-k'a} - (k' - ik)^2 e^{k'a}]F$$

de même pour B

$$2ikB = (ik - k')C + (ik + k')D$$

$$4ikk'B = (ik - k')2k'C + (ik + k')2k'D$$

$$4ikk'B = (ik - k')(k' + ik)Fe^{ika - k'a} + (ik + k')(k' - ik)Fe^{ika + k'a}$$

$$4ikk'B = -(k' - ik)(k' + ik)Fe^{ika - k'a} + (k' + ik)(k' - ik)Fe^{ika + k'a}$$

finalement

$$4ikk'e^{-ika}B = (k'^2 + k^2)(e^{k'a} - e^{-k'a})F$$

$$4ikk'e^{-ika}C = 2ik(k' + ik)Fe^{-k'a}$$

$$4ikk'e^{-ika}D = 2ik(k' - ik)Fe^{k'a}$$

$$4ikk'e^{-ika}A = [(k' + ik)^2 e^{-k'a} - (k' - ik)^2 e^{k'a}]F$$

posons

$$u = (k' + ik)^2 e^{-k'a} - (k' - ik)^2 e^{k'a}$$

$$\frac{B}{A} = \frac{1}{u}(k'^2 + k^2)(e^{k'a} - e^{-k'a})$$

$$\frac{C}{A} = \frac{1}{u}2ik(k' + ik)e^{-k'a}$$

$$\frac{D}{A} = \frac{1}{u}2ik(k' - ik)e^{k'a}$$

$$\frac{F}{A} = \frac{1}{u}4ikk'e^{-ika}$$

Le coefficient de réflexion $R = \left|\frac{B}{A}\right|$

Le coefficient de transmission $T = \sqrt{1 - R^2}$ n'est pas nul donc il y a un effet qu'on appelle effet de tunnel, la particule traverse la barrière de potentiel !!

voyons si $T=\left|\frac{F}{A}\right|$, et la valeur exacte de T^2, pour ça commençons par l'expression

$$4ikk'e^{-ika}A = [(k' + ik)^2e^{-k'a} - (k' - ik)^2e^{k'a}]F$$

$$(k' + ik)^2 = k'^2 - k^2 + 2kk'i$$

$$(k' + ik)^2e^{-k'a} = (k'^2 - k^2)(e^{-k'a}) + 2kk'ie^{-k'a}$$

$$(k' - ik)^2 = k'^2 - k^2 - 2kk'i$$

$$-(k' - ik)^2e^{k'a} = -(k'^2 - k^2)e^{k'a} + 2kk'ie^{k'a}$$

$$\frac{A}{F}4ikk'e^{-ika} = (k^2 - k'^2)\left(e^{k'a} - e^{-k'a}\right) + 2kk'i(e^{k'a} + e^{-k'a})$$

$$\frac{A}{F}ie^{-ika} = \frac{1}{2kk'}(k^2 - k'^2)\frac{e^{k'a} - e^{-k'a}}{2} + i\frac{e^{k'a} + e^{-k'a}}{2}$$

$$\frac{A}{F}ie^{-ika} = \frac{1}{2kk'}(k^2 - k'^2)\sinh(k'a) + i\cosh(k'a)$$

$$\frac{A}{F}ie^{-ika} = \frac{1}{2}\left(\frac{k}{k'} - \frac{k'}{k}\right)\sinh(k'a) + i\cosh(k'a)$$

$$\left|\frac{A}{F}\right|^2 = \frac{1}{4}\left(\frac{k}{k'} - \frac{k'}{k}\right)^2 \sinh^2(k'a) + \cosh^2(k'a)$$

$$\left|\frac{A}{F}\right|^2 = \frac{1}{4}\left(\frac{k}{k'} - \frac{k'}{k}\right)^2 \sinh^{2(k'a)} + 1 + \sinh^2(k'a)$$

$$\left|\frac{A}{F}\right|^2 = \left(\frac{1}{4}\left(\frac{k}{k'} - \frac{k'}{k}\right)^2 + 1\right)\sinh^2(k'a) + 1$$

$$\frac{k}{k'} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}} = \sqrt{\frac{E}{V_0 - E}}$$

$$\frac{k'}{k} = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}\frac{\hbar}{\sqrt{2mE}} = \sqrt{\frac{V_0 - E}{E}}$$

$$\left(\frac{k}{k'} - \frac{k'}{k}\right)^2 = \frac{E}{V_0 - E} + \frac{V_0 - E}{E} - 2 = \frac{4E^2 + V_0^2 - 4V_0E}{E(V_0 - E)}$$

$$\frac{1}{4}\left(\frac{k}{k'} - \frac{k'}{k}\right)^2 + 1 = \frac{4E^2 + V_0^2 - 4V_0E + 4EV_0 - 4E^2}{4E(V_0 - E)}$$

$$\frac{1}{4}\left(\frac{k}{k'}-\frac{k'}{k}\right)^2+1=\frac{V_0^2}{4E(V_0-E)}$$

$$\left|\frac{A}{F}\right|^2=\left(\frac{V_0^2}{4E(V_0-E)}\right)\sinh^2(k'a)+1$$

$$T^2=\left|\frac{F}{A}\right|^2=\frac{1}{1+\left(\frac{V_0^2}{4E(V_0-E)}\right)\sinh^2(k'a)}$$

<u>Remarque</u> qu'on a bien $R^2 + T^2 = 1$

$$|u|^2\left|\frac{B}{A}\right|^2=(k'^2+k^2)^2(e^{k'a}-e^{-k'a})^2$$

$$|u|^2\left|\frac{F}{A}\right|^2=16k^2k'^2$$

$$|u|^2\left(\left|\frac{B}{A}\right|^2+\left|\frac{F}{A}\right|^2\right)=(k'^2+k^2)^2\left(e^{k'a}-e^{-k'a}\right)^2+16k^2k'^2$$

$$|u|^2\left(\left|\frac{B}{A}\right|^2+\left|\frac{F}{A}\right|^2\right)=4(k'^2+k^2)^2\sinh^2(k'a)+16k^2k'^2$$

on déjà calculé u

$$u=(k^2-k'^2)\left(e^{k'a}-e^{-k'a}\right)+2kk'(e^{k'a}+e^{-k'a})i$$

$$u=2(k^2-k'^2)\sinh(k'a)+4kk'\cosh(k'a)i$$

$$|u|^2=4(k^2-k'^2)^2\sinh^2(k'a)+16k^2k'^2\cosh^2(k'a)$$

$$|u|^2=4(k^2-k'^2)^2\sinh^2(k'a)+16k^2k'^2(1+\sinh^2(k'a))$$

$$|u|^2 = [4(k^2 - k'^2)^2 + 16k^2k'^2]\sinh^2(k'a) + 16k^2k'^2$$

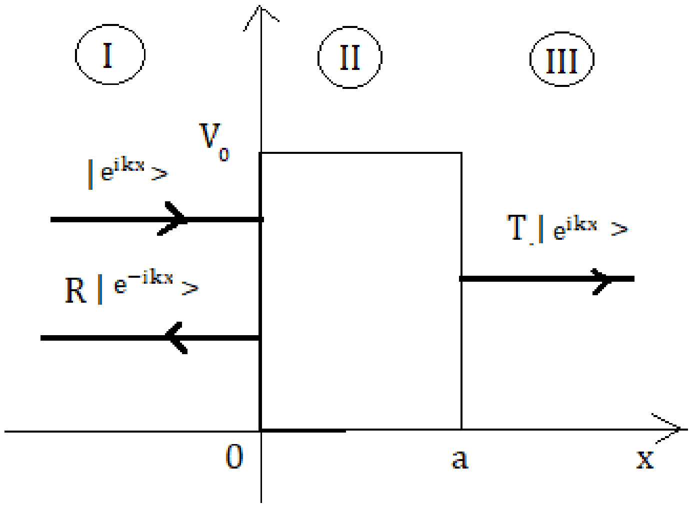
$$|u|^2 = [4[(k^2 - k'^2)^2 + 4k^2k'^2]]\sinh^2(k'a) + 16k^2k'^2$$

$$|u|^2 = [4[(k^4 + k'^4) + 2k^2k'^2]]\sinh^2(k'a) + 16k^2k'^2$$

$$|u|^2 = 4(k^2 + k'^2)^2\sinh^2(k'a) + 16k^2k'^2$$

d'où

$$\left|\frac{B}{A}\right|^2 + \left|\frac{F}{A}\right|^2 = 1$$



Ainsi la particule ξ d'énergie $E<V_0$ venant de gauche vers la droite en état $|e^{ikx}>$ touche la barrière de potentiel en x=0 qui modifie l'état de la particule en

$R|e^{-ikx} > + T|e^{ik'x} >$

Après la rencontre, on trouve :

→Soit $|e^{-ikx} >$ un rebondissement avec la probabilité R^2

→Soit $|e^{ik'x} >$ une traversée avec la probabilité T^2

En physique classique la particule ne traverse pas la barrière de potentiel quand $E<V_0$, l'effet tunnel est typiquement un effet quantique.

<u>Remarque sur le coefficient T</u>

Soit ξ une particule venant de gauche (x=-∞) vers la droite (x=+∞) en état incidence $A|e^{ikx}>$ puis (après avoir touché la barrière de potentiel) en état de rebondissement $B|e^{-ikx}>$ et de transmission $C|e^{kx}>$, la définition de R est :

$$R = \left|\frac{B}{A}\right|$$

Il y a deux façons "logique" de définir T.

I) Comme R^2 représente la probabilité de réflexion, on définit T par

$$T = \sqrt{1 - R^2}$$

pour avoir la relation $R^2+T^2=1$

T^2 représente la probabilité de transmission.

Et la question se pose : est ce qu'on a:

$$T = \left|\frac{C}{A}\right| \ ??$$

Eh bien non pas toujours !!

II) Où bien on définit T par

$$T = \left|\frac{C}{A}\right|$$

comme R (logiquement) .

Et alors la question se pose : est ce qu'on a:

$T^2 + R^2 = 1$???

Eh bien non, pas toujours !! dans ce cas il faut donc "bricoler" T pour avoir $T^2+R^2=1$

il faut définir

$$T = \alpha \left|\frac{C}{A}\right|$$

avec un α tel que $R^2+T^2=1$

ce qui n'est pas très logique avec la définition

$$R = \left|\frac{B}{A}\right|$$

Finalement il faut choisir l'une de ces deux définitions , on a choisi la première définition

$T = \sqrt{1 - R^2}$

5.6 OSCILLATEUR HARMONIQUE

Le potentiel qu'on va étudier est:

$$V(x) = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \quad , \omega = \text{pulsation de l'oscillateur}$$

et l'hamiltonien vaut

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{X}^2$$

L'équation propre est donc

$$\hat{H}|\chi> = E|\chi>$$

On cherche donc pour quelle valeur de E on a un χ. Il y a deux méthodes de s'en sortir algébrique ou analytique, on va d'aborde utiliser la méthode d'algébrique.

<u>Méthode algébrique</u>

L'idée de cette méthode est de trouver un opérateur $\hat{N}$ qui commute avec $\hat{H}$, donc il a les même valeurs propres et vecteurs propres que $\hat{H}$, si on trouve les valeurs propres de $\hat{N}$ on trouve les énergie E puisque ce sont les même.

On va donc "bricoler" un peu $\hat{H}$

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2} \left(\frac{m\omega}{\hbar} \hat{X}^2 + \frac{1}{m\hbar\omega} \hat{P}^2\right)$$

$$\hat{u} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{X}$$

$$\hat{v} = \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}}\hat{P}$$

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2}(\hat{u}^2 + \hat{v}^2)$$

$$[\hat{u}, \hat{v}] = \left[\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{X}, \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}}\hat{P}\right] = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}}\left[\hat{X}, \hat{P}\right] = \frac{1}{\hbar}i\hbar\hat{I}$$

$$[\hat{u}, \hat{v}] == i\hat{I}$$

$$(\hat{u} - i\hat{v})(\hat{u} + i\hat{v}) = \hat{u}^2 + i\hat{u}\hat{v} - i\hat{v}\hat{u} + \hat{v}^2$$

$$(\hat{u} - i\hat{v})(\hat{u} + i\hat{v}) = \hat{u}^2 - 1 + \hat{v}^2$$

<u>Attention</u> !! il faut respecter l'ordre !!!

<u>Opérateur création et annihilation</u>

posons

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{u} + i\hat{v})$$

$$\hat{a}^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{u} - i\hat{v})$$

$$\hat{a}^{\dagger}\hat{a} = \hat{N}$$

$\hat{a}$ = l'annihilation, $\hat{a}^{\dagger}$ = création, $\hat{N}$ = nombre

$$2\hat{a}^{\dagger}\hat{a} + 1 = \hat{u}^2 + \hat{v}^2$$

d'où

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2}(\hat{u}^2 + \hat{v}^2) = \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right) = \hbar\omega\left(\hat{N} + \frac{1}{2}\right)$$

<u>Quelques relations</u>

$$(\hat{u} + i\hat{v})(\hat{u} - i\hat{v}) = \hat{u}^2 - i\hat{u}\hat{v} + i\hat{v}\hat{u} + \hat{v}^2$$

$$(\hat{u} + i\hat{v})(\hat{u} - i\hat{v}) = \hat{u}^2 - i[\hat{u}, \hat{v}] + \hat{v}^2$$

$$2\hat{a}\hat{a}^\dagger = \hat{u}^2 + \hat{v}^2 + 1$$

$$2\left[\hat{a}, \hat{a}^\dagger\right] = 2\hat{a}\hat{a}^\dagger - 2\hat{a}^\dagger\hat{a} = (\hat{u}^2 + \hat{v}^2 + 1) - (\hat{u}^2 + \hat{v}^2 - 1)$$

$$\left[\hat{a}, \hat{a}^\dagger\right] = 1$$

$$\left[\hat{a}^\dagger, \hat{a}\right] = -1$$

$$\left[\hat{N}, \hat{a}\right] = \left[\hat{a}^\dagger\hat{a}, \hat{a}\right] = \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a} - \hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a} = (\hat{a}^\dagger\hat{a} - \hat{a}\hat{a}^\dagger)\hat{a} = \left[\hat{a}^\dagger, \hat{a}\right]\hat{a}$$

$$\left[\hat{N}, \hat{a}\right] = \left[\hat{a}^\dagger, \hat{a}\right]\hat{a} = -\hat{a}$$

$$\begin{aligned}\left[\hat{N}, \hat{a}^\dagger\right] = \left[\hat{a}^\dagger\hat{a}, \hat{a}^\dagger\right] &= \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\hat{a} = \hat{a}^\dagger(\hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a}) \\ &= \hat{a}^\dagger\left[\hat{a}, \hat{a}^\dagger\right]\end{aligned}$$

$$\left[\hat{N}, \hat{a}^\dagger\right] = \hat{a}^\dagger$$

$$\left[\hat{a}, \hat{a}^\dagger\right] = 1 \Rightarrow \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a} = 1 \;\Rightarrow \hat{a}\hat{a}^\dagger = \hat{N} + 1$$

<u>Les valeurs propres de $\hat{N}$</u>

$\hat{N}|\mu\rangle = \mu|\mu\rangle \quad , \mu \in \mathbb{R}$

<u>Théorème 1</u> : Les valeurs propres μ de $\hat{N}$ sont positives ou nulles.

<u>Démonstration</u>

$||\hat{a}|\mu>||^2 = <\mu|\hat{a}^\dagger\hat{a}|\mu> = <\mu|\hat{N}\ |\mu>=\mu<\mu|\mu>=\mu\ ||\ |\mu>\ ||^2$

ceci montre que $\mu\geq 0$ et ($\hat{a}|\mu>=0 \Leftrightarrow \mu=0$)

<u>Théorème 2</u> : $\hat{a}|\mu>$ est un vecteur propre de $\hat{N}$ avec la valeur propre (μ-1) ou bien le vecteur nul.

<u>Démonstration</u>

$[\hat{N},\hat{a}] = \hat{N}\hat{a} - \hat{a}\hat{N} = -\hat{a} \Rightarrow \hat{N}\hat{a} = \hat{a}\hat{N} - \hat{a}$

$\hat{N}(\hat{a}|\mu>)=(\hat{N}\hat{a})|\mu>=(\hat{a}\hat{N}-\hat{a})|\mu>=(\hat{a}\hat{N})|\mu>-\hat{a}|\mu>$

$= \hat{a}(\hat{N}|\mu>)-\hat{a}|\mu>=n\ \hat{a}|\mu>-\hat{a}|\mu>=(\mu-1)\ \hat{a}|\mu>$

ça signifie que $\hat{a}|\mu>$ est un vecteur propre de $\hat{N}$ avec la valeur propre (μ-1) ou $\hat{a}|\mu>$ est simplement le vecteur nul.

<u>Théorème 3</u> : $\hat{a}^\dagger|\mu>$ est un vecteur propre de $\hat{N}$ avec la valeur propre (μ+1) et il est non nul.

<u>Démonstration</u>

$[\hat{N},\hat{a}^\dagger] = \hat{N}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{N} = \hat{a}^\dagger \Rightarrow \hat{N}\hat{a}^\dagger = \hat{a}^\dagger\hat{N} + \hat{a}^\dagger$

$\hat{N}(\hat{a}^\dagger|\mu>)=(\hat{N}\hat{a}^\dagger)|\mu>=(\hat{a}^\dagger\hat{N} + \hat{a}^\dagger)|\mu>=(\hat{a}^\dagger\hat{N})|\mu>+\hat{a}^\dagger|\mu>$

$= \hat{a}^\dagger(\hat{N}|\mu>)+\hat{a}^\dagger|\mu>=\mu\ \hat{a}^\dagger|\mu>+\hat{a}^\dagger|\mu>=(\mu+1)\ \hat{a}^\dagger|\mu>$

$\hat{N}(\hat{a}^\dagger|\mu>) = (\mu+1)\ \hat{a}^\dagger|\mu>$

ça signifie que $\hat{a}^\dagger|\mu>$ est un vecteur propre de $\hat{N}$ avec la valeur propre (n+1) .

Et $\hat{a}^{\dagger}|\mu>$ ne peut pas être le vecteur nul en effet sa norme est strictement positif

$$||\hat{a}^{\dagger}|\mu>||^2=<\mu|\hat{a}\hat{a}^{\dagger}|\mu>=<\mu|\hat{N}+1|\mu> =(\mu+1)<\mu|\mu>$$

$$||\hat{a}^{\dagger}|\mu>||^2=(\mu+1)<\mu|\mu>=(\mu+1)|||\mu>||^2 >0 \text{ car } \mu\geq 0$$

<u>Théorème 4</u> : Les valeurs propres de $\hat{N}$ sont des entiers n=0,1,2,3, ...

<u>Démonstration</u>

Soient μ une valeur propre de $\hat{N}$ et $|\mu>$ le vecteur propre associé .

Appliquer $\hat{a}$ sur $|\mu>$ plusieurs fois .... on forme ainsi une suite décroissante μ, $(\mu-1)$, $(\mu-2)$, $(\mu-3)$, ... de valeurs propres de $\hat{N}$, puisque les valeurs propres de $\hat{N}$ sont positives donc la suite va s'arrêter un jour !!

Soit donc ν la plus petite valeur propre et $|\nu>$ le vecteur propre associé , on a :

$\hat{a}|\nu> = 0$ sinon $(\nu-1)$ sera une valeur propre de $\hat{N}$ ce n'est pas possible car ν est la plus petite.

d'autre part on a

$$||\hat{a}|\nu> ||^2 = \nu \quad || \, |\nu> ||^2 \quad \text{(th1)}$$

tout cela implique que $\nu=0$ c'est-à-dire on a démarré avec un μ entier, puisqu'on descend d'un pas de 1 autrement dit $\mu=n\in\mathbb{N}$ est un entier.

Nous avions

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{N} + \frac{1}{2}\right)$$

Les valeurs propres de $\hat{N}$ sont n=0,1,2,3,.....

donc les valeurs propres de $\hat{H}$ sont

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \text{ ; avec } n = 0,1,2,3, \ldots$$

<u>états propres</u>

L'état fondamentale : n=0 , |0> on notera $|\chi_0>$, $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$

$$\hat{a}|\chi_0> = 0$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{u}+i\hat{v})|\chi_0> = 0$$

$$\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{X} + \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}}i\hat{P}\right)|\chi_0> = 0$$

en se plaçant dans la base $\{|x>\}_{x\in\mathbb{R}}$ ça donne

$$\left(\frac{\sqrt{m\omega}}{\sqrt{\hbar}}x + \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}}i(-i\hbar)\frac{d}{dx}\right)\chi_0(x) = 0$$

$$\left(\frac{m\omega}{\hbar}x + \frac{d}{dx}\right)\chi_0(x) = 0$$

la solution est

$$\chi_0(x) = Ae^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

pour trouver A on passe à la normalisation

rappel

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2}\, dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

$$\psi_0(x,t) = \chi_0(x) e^{-\frac{i}{\hbar}Et} = A e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

Et on a

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_0(x,t)|^2\, dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |\chi_0(x)|^2\, dx = 1$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |A e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}|^2\, dx = A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2}\, dx = A^2 \sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}}$$

$$A^2 \sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}} = 1 \Rightarrow A = (\frac{m\omega}{\pi\hbar})^{\frac{1}{4}}$$

$$\chi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

On constate que le niveau fondamental est non dégénéré (une valeur propre pour un vecteur propre : E_0 pour un χ_0)

on va montrer par récurrence sur n que les énergies sont non dégénérés.

Supposons que le niveau n est non dégénéré, il s'agit de montrer que le niveau (n+1) est encore non dégénéré.

Soit donc $|\varphi>$ le vecteur propre correspondant à la valeur propre n. Soit $|\chi>$ un vecteur propre de $\widehat{N}$ avec la valeur propre (n+1)

$$\widehat{N}|\chi> = (n+1)|\chi>$$

On sait que $\hat{a}|\chi>$ est un vecteur propre de $\widehat{N}$ avec la valeur propre n, comme par HC le niveau n est non dégénéré , ça signifie que les vecteurs $\hat{a}|\chi>$ et $|\varphi>$ sont colinéaires donc

$$\hat{a}|\chi> = \alpha|\varphi>$$

$$\hat{a}^{\dagger}\,\hat{a}|\chi> = \hat{a}^{\dagger}\,\alpha|\varphi>$$

$$\widehat{N}|\chi> = \alpha\ \hat{a}^{\dagger}|\varphi>$$

$$(n+1)|\chi> = \alpha\ \hat{a}^{\dagger}|\varphi>$$

$$|\chi> = \frac{\alpha}{n+1}\hat{a}^{\dagger}|\varphi>$$

ce qui prouve que $|\chi>$ est unique pour la valeur propre (n+1) donc le niveau (n+1) n'est pas dégénéré.

Quand on applique $\hat{a}$ à $|n>$ on passe de l'énergie

$$\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega \text{ à } \left(n-1+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega - \hbar\omega$$

on annihile un quantum $\hbar\omega$ c'est pourquoi $\hat{a}$ s'appelle opérateur annilation

De même quand on applique $\hat{a}^{\dagger}$ à $|n>$ on passe de l'énergie

$$\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega \text{ à } \left(n+1+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega + \hbar\omega$$

on crée un quantum $\hbar\omega$ c'est pourquoi â s'appelle opérateur création.

Supposons maintenant que tous les vecteurs propres |n> sont normés. Et on sait que $\hat{a}^\dagger$|n> est le vecteur propre de $\hat{N}$ avec la valeur propre (n+1), ça signifie que

$\hat{a}^\dagger|n\rangle = \alpha\,|n+1\rangle$, on peut toujours supposer $\alpha>0$

$$||\hat{a}^\dagger|n\rangle\,|| = \alpha\,||\,|n+1\rangle\,|| = \alpha$$

or

$$||\,\hat{a}^\dagger|n\rangle\,||^2 = \langle n|\hat{a}\hat{a}^\dagger|n\rangle = \langle n|\hat{N}+1|n\rangle = (n+1)\langle n|n\rangle =$$
$$=(n+1)\;\;||\,|n\rangle\,||^2 = n+1$$

$$||\hat{a}^\dagger|n\rangle\,|| = \sqrt{n+1}$$

d'où

$$\alpha = \sqrt{n+1}$$

soit

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle$$

On peut obtenir l'état |n> à partir de l'état fondamental |0> en appliquant $\hat{a}^\dagger$, en effet on a:

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle$$

$$|n+1\rangle = \frac{1}{\sqrt{n+1}}\;\hat{a}^\dagger|n\rangle$$

$$|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{0+1}}\;\hat{a}^\dagger|0\rangle$$

$|2> = \frac{1}{\sqrt{1+1}}\ \hat{a}^\dagger|1> = \frac{1}{\sqrt{1+1}}\ \frac{1}{\sqrt{0+1}}\hat{a}^\dagger\ \hat{a}^\dagger|0>$

$|3> = \frac{1}{\sqrt{2+1}}\ \hat{a}^\dagger|2> = \frac{1}{\sqrt{2+1}}\frac{1}{\sqrt{1+1}}\ \frac{1}{\sqrt{0+1}}\ \hat{a}^\dagger\ \hat{a}^\dagger\ \hat{a}^\dagger|0>$

$|4> = \frac{1}{\sqrt{3+1}}\ \hat{a}^\dagger|3> = \frac{1}{\sqrt{3+1}}\frac{1}{\sqrt{2+1}}\frac{1}{\sqrt{1+1}}\ \frac{1}{\sqrt{0+1}}\ \hat{a}^\dagger\ \hat{a}^\dagger\ \hat{a}^\dagger\ \hat{a}^\dagger|0>$

....

$|n> = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^\dagger)^n\ |0>$

et la fonction Psi correspondant

$|n> = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^\dagger)^n\ |0>$

$|n> = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{u} - i\hat{v}))^n\ |0>$

$<x|n> = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{u} - i\hat{v}))^n\ <x|0>$

$<x|\chi_n> = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{u} - i\hat{v}))^n\ <x|\chi_0>$

$$\chi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}}\frac{1}{\sqrt{2^n}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x - i\frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}}(-i\hbar)\frac{d}{dx}\right)^n\ \chi_0(x)$$

$$\chi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!\,2^n}}\ \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x - \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\frac{d}{dx}\right)^n\ \chi_0(x)$$

or

$$\chi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}\ e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

d'où

$$\chi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!\ 2^n}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x - \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\frac{d}{dx}\right)^n \left(e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}\right)$$

Changement de variable x en y, autrement dit on pose :

$$y = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$$

$$\frac{d}{dx} = \frac{dy}{dx}\frac{d}{dy} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\frac{d}{dy}$$

$$\chi_n(y) = \frac{1}{\sqrt{n!\ 2^n}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \left(y - \frac{d}{dy}\right)^n \left(e^{-\frac{y^2}{2}}\right)$$

On peut récrire $\chi_n(y)$ en utilisant la formule

$$\left(y - \frac{d}{dy}\right)^n f(y) = (-1)^n\ e^{\frac{y^2}{2}} \frac{d^n}{dy^n}\left(e^{-\frac{y^2}{2}} f(y)\right)$$

avec

$$f(y) = e^{-\frac{y^2}{2}}$$

d'où

$$\chi_n(y) = \frac{1}{\sqrt{n!\ 2^n}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} (-1)^n\ e^{\frac{y^2}{2}} \frac{d^n}{dy^n}\left(e^{-\frac{y^2}{2}} e^{-\frac{y^2}{2}}\right)$$

$$\chi_n(y) = \frac{1}{\sqrt{n!\ 2^n}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} (-1)^n\ e^{\frac{y^2}{2}} \frac{d^n}{dy^n}\left(e^{-y^2}\right)$$

$$\chi_n(y) = \frac{1}{\sqrt{n!\ 2^n}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{y^2}{2}} H_n(y)$$

avec $H_n(y)$ polynôme d'Hermite

$$H_n(y) = (-1)^n e^{y^2} \frac{d^n}{dx^n}\left(e^{-y^2}\right)$$

et si on repasse en variable x, ça donne

$$\chi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!\ 2^n}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right)$$

$$\chi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!\ 2^n}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{\frac{m\omega}{\hbar}\frac{x^2}{2}} (-1)^n \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{-\frac{n}{2}} \frac{d^n}{dx^n}\left(e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2}\right)$$

<u>Méthode analytique</u>

L'équation stationnaire est

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)\chi = E\chi$$

ou encore

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}x^2\right)\chi + \frac{2mE}{\hbar^2}\chi = 0$$

$$\chi'' - \left(\frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}x^2\right)\chi + \frac{2mE}{\hbar^2}\chi = 0$$

on pose

$$y = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$$

$$\chi(x) = \varphi(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x)$$

d'où

$$\chi'(x) = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\varphi'(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x)$$

$$\chi''(x) = \frac{m\omega}{\hbar}\varphi''(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x)$$

soit

$$\frac{m\omega}{\hbar}\varphi''\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right) - \left(\frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}x^2\right)\varphi\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right) + \frac{2mE}{\hbar^2}\varphi\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right) = 0$$

$$\varphi''\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right) - \left(\frac{m\omega}{\hbar}x^2\right)\varphi\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right) + \frac{2E}{\hbar\omega}\varphi\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right) = 0$$

$$\varphi''(y) + (\frac{2E}{\hbar\omega} - y^2)\varphi(y) = 0$$

Changement d'inconnu φ en H.

$$\varphi(y) = cH(y)e^{-\frac{y^2}{2}}, \text{où } c = \text{constante}$$

$$\varphi' = cH'e^{-\frac{y^2}{2}} - cyHe^{-\frac{y^2}{2}}$$

$$\varphi'' = cH''e^{-\frac{y^2}{2}} - cyH'e^{-\frac{y^2}{2}} - cHe^{-\frac{y^2}{2}} - cyH'e^{-\frac{y^2}{2}} + cy^2He^{-\frac{y^2}{2}}$$

$$cH''e^{-\frac{y^2}{2}} - cyH'e^{-\frac{y^2}{2}} - cHe^{-\frac{y^2}{2}} - cyH'e^{-\frac{y^2}{2}} + cy^2He^{-\frac{y^2}{2}} + c\frac{2E}{\hbar\omega}He^{-\frac{y^2}{2}} - cy^2He^{-\frac{y^2}{2}} = 0$$

$$H'' - 2yH' + (\frac{2E}{\hbar\omega} - 1)H = 0$$

Si on pose

$$\left(\frac{2E}{\hbar\omega} - 1\right) = 2n$$

L'équation devient

$$H'' - 2yH' + 2nH = 0$$

On a la solution

$$H_n(y) = (-1)^n \; e^{y^2} \; \frac{d^n}{dx^n}\left(e^{-y^2}\right)$$

d'où

$$\varphi_n(y) = c_n H_n(y) e^{-\frac{y^2}{2}}$$

et

$$\chi_n(x) = \varphi_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right)$$

Pour trouver la constante c_n on utilise la normalisation

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_n|^2 dx = 1$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_n|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} c_n^2 H_n^2\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right) e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2} dx$$

$$y = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} c_n^2 H_n^2(y) e^{-y^2} \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{-\frac{1}{2}} dy$$

or

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} H_n^2\, dx = \sqrt{\pi}\, n!\ 2^n$$

d'où

$$c_n^2 \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{-\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-y^2} H_n^2\, dy = c_n^2 \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{-\frac{1}{2}} \sqrt{\pi}\, n!\ 2^n$$

$$c_n^2 \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{-\frac{1}{2}} \sqrt{\pi}\, n!\ 2^n = 1$$

$$c_n = \frac{1}{\sqrt{n!\ 2^n}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}$$

$$\chi_n(y) = \frac{1}{\sqrt{n!\ 2^n}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{y^2}{2}} H_n(y)$$

6 MOMENT CINÉTIQUE

6.1 RELATION DE COMMUTATION

Soit $\hat{J}$ un vecteur observable (vecteur matrice), on dit que $\hat{J}$ vérifie la relation de commutation si

$$[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = i\hbar \hat{J}_z$$

$$[\hat{J}_y, \hat{J}_z] = i\hbar \hat{J}_x$$

$$[\hat{J}_z, \hat{J}_x] = i\hbar \hat{J}_y$$

c'est-à-dire

$$\hat{J} \wedge \hat{J} = i\hbar \hat{J}$$

On pose alors

$$\hat{J}^2 = \hat{J}_x{}^2 + \hat{J}_y{}^2 + \hat{J}_z{}^2$$

comme

$$[\hat{J}^2, \hat{J}_z] = 0$$

ça montre que $\hat{J}^2, \hat{J}_z$ sont simultanément diagonalisables , autrement dit il existe une base de vecteurs propres communs {|u>} telle que

$$\hat{J}^2|u\rangle = a\hbar^2|u\rangle$$

$$\hat{J}_z|u\rangle = b\hbar|u\rangle$$

<u>Théorème</u> : Les valeurs propres de $\hat{J}^2$ et $\hat{J}_z$ sont de la forme :

$\hat{J}^2|u\rangle = j(j+1)\hbar^2|u\rangle$; où j est un entier, ou demi-entier

$\hat{J}_z|u\rangle = m\hbar|u\rangle$; où m est un entier, ou demi-entier

$$j = \begin{cases} 0,1,2,3,\ldots \quad \text{entier} \\ \qquad\qquad \text{ou} \\ \frac{1}{2},\frac{3}{2},\frac{5}{2},\frac{7}{2},\ldots \quad \text{demi}-\text{entier} \end{cases}$$

→Si j est entier alors m est entier

→Si j est demi-entier alors m est demi-entier

et m prend les valeurs suivantes

m = j, j-1, j-2, ... , -j

<u>Note</u> $j \geq 0$ car la norme de $\|\hat{J}^2|u\rangle\| \geq 0$

<u>Démonstration</u> :

Montrons d'abord : $-j \leq m \leq j$

Introduisons les opérateurs suivants:

$\hat{J}_+ = \hat{J}_x + i\hat{J}_y$

$\hat{J}_- = \hat{J}_x - i\hat{J}_y$

<u>Les propriétés de</u> $\hat{J}_+$, $\hat{J}_-$:

a) $\hat{J}_+^\dagger = \hat{J}_-$; $\hat{J}_-^\dagger = \hat{J}_+$

b) $\hat{J}_{-}\hat{J}_{+} = (\hat{J}_x - i\hat{J}_y)(\hat{J}_x + i\hat{J}_y)$

$= \hat{J}_x\hat{J}_x + i\hat{J}_x\hat{J}_y - i\hat{J}_y\hat{J}_x - i^2\hat{J}_y\hat{J}_y$

$= \hat{J}_x{}^2 + \hat{J}_y{}^2 + i[\hat{J}_x, \hat{J}_y]$

$= \hat{J}_x{}^2 + \hat{J}_y{}^2 - \hbar\hat{J}_z$

$\hat{J}_{-}\hat{J}_{+} = \hat{J}^2 - \hat{J}_z{}^2 - \hbar\hat{J}_z$

et

$\hat{J}_{+}\hat{J}_{-} = (\hat{J}_x + i\hat{J}_y)(\hat{J}_x - i\hat{J}_y)$

$= \hat{J}_x\hat{J}_x - i\hat{J}_x\hat{J}_y + i\hat{J}_y\hat{J}_x - i^2\hat{J}_y\hat{J}_y$

$= \hat{J}_x{}^2 + \hat{J}_y{}^2 - i[\hat{J}_x, \hat{J}_y]$

$= \hat{J}_x{}^2 + \hat{J}_y{}^2 + \hbar\hat{J}_z$

$\hat{J}_{+}\hat{J}_{-} = \hat{J}^2 - \hat{J}_z{}^2 + \hbar\hat{J}_z$

c) Calculons maintenant la norme de $\|\hat{J}_{+}|u>\|^2$

Le bra du ket $\hat{J}_{+}|u>$ est

$< u|\hat{J}_{+}^{\dagger} = <u|\hat{J}_{-}$

$\|\hat{J}_{+}|u>\|^2 =< u|\hat{J}_{-}\hat{J}_{+}|u>$

$\|\hat{J}_{+}|u>\|^2 =< u|\hat{J}^2 - \hat{J}_z{}^2 - \hbar\hat{J}_z|u>$

$= j(j+1)\hbar^2 - m^2\hbar^2 - m\hbar^2 = j(j+1)\hbar^2 - m(m+1)\hbar^2$

Comme la norme est positive ou nulle on a:

$-m^2 -m + j(j+1) \geq 0$

l'équation (m=inconu, j=donné)

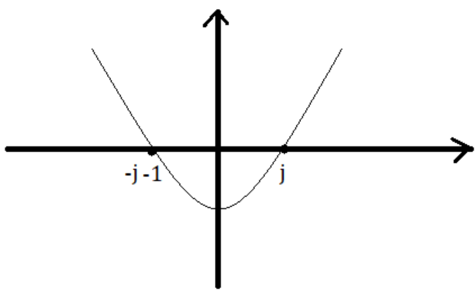
$-m^2 -m + j(j+1) = 0$

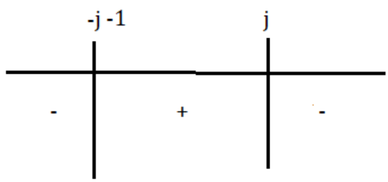
possède 2 racines

$m = j$

ou

$m = -j-1$





$-m^2-m+j(j+1) \geq 0 \Rightarrow -j-1 \leq m \leq j$ (l'extérieur des racines c'est le signe de a (sig(a) =- , am^2+bm+c)

de même

Le bra du ket $\hat{J}_{-}|u>$ est

$< u|\hat{J}_{-}^{\dagger} = <u|\hat{J}_{+}$

$\left\| \hat{J}_{-}|u> \right\|^2 =< u|\hat{J}_{+}\hat{J}_{-}|u>$

$\left\| \hat{J}_{-}|u> \right\|^2 =< u|\hat{J}^2 - \hat{J}_z{}^2 + \hbar\hat{J}_z|u>$

$= j(j+1)\hbar^2 - m^2\hbar^2 + m\hbar^2 = j(j+1)\hbar^2 - m(m-1)\hbar^2$

Comme la norme est positive ou nulle on a:

$-m^2+m+j(j+1) \geq 0$

l'équation (m=inconnu, j=donné)

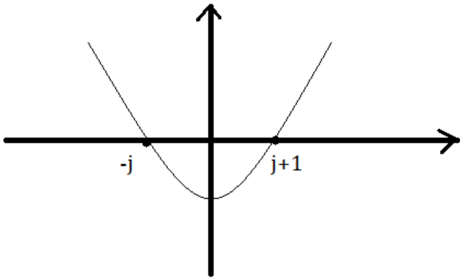
$-m^2+m+j(j+1) = 0$

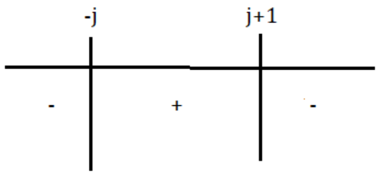
possède 2 racines

$m = - j$

ou

$m = j+1$





$-m^2+m+j(j+1) \geq 0 \Rightarrow -j \leq m \leq j+1$

d'où

$$\left.\begin{array}{l} -j-1 \ \leq \ m \ \leq \ j \\ -j \ \leq \ m \ \leq \ j+1 \end{array}\right\} \Rightarrow \ -j \leq m \leq j$$

<u>Démonstration</u> :

m = j, j-1, j-2, ... , -j

on a:

$$[\hat{J}_z, \hat{J}_+] = \hat{J}_z(\hat{J}_x + i\hat{J}_y) - (\hat{J}_x + i\hat{J}_y)\hat{J}_z$$

$$[\hat{J}_z, \hat{J}_+] = \hat{J}_z\hat{J}_x + i\hat{J}_z\hat{J}_y - (\hat{J}_x\hat{J}_z + i\hat{J}_y\hat{J}_z)$$

$$[\hat{J}_z, \hat{J}_+] = [\hat{J}_z, \hat{J}_x] + i[\hat{J}_z, \hat{J}_y]$$

$[\hat{J}_z, \hat{J}_+] = i\hbar\hat{J}_y + i(-i\hbar\hat{J}_x)$

$[\hat{J}_z, \hat{J}_+] = \hbar\hat{J}_+$

de même pour

$[\hat{J}_z, \hat{J}_-] = \hat{J}_z(\hat{J}_x - i\hat{J}_y) - (\hat{J}_x - i\hat{J}_y)\hat{J}_z$

$[\hat{J}_z, \hat{J}_-] = \hat{J}_z\hat{J}_x - i\hat{J}_z\hat{J}_y - (\hat{J}_x\hat{J}_z - i\hat{J}_y\hat{J}_z)$

$[\hat{J}_z, \hat{J}_-] = [\hat{J}_z, \hat{J}_x] - i[\hat{J}_z, \hat{J}_y]$

$[\hat{J}_z, \hat{J}_-] = i\hbar\hat{J}_y + i(i\hbar\hat{J}_x)$

$[\hat{J}_z, \hat{J}_-] = -\hbar\hat{J}_-$

Calculons $\hat{J}_z\hat{J}_+$, et $\hat{J}_z\hat{J}_-$

$\hat{J}_z\hat{J}_+ = [\hat{J}_z, \hat{J}_+] + \hat{J}_+\hat{J}_z$

$\hat{J}_z\hat{J}_+ = \hbar\hat{J}_+ + \hat{J}_+\hat{J}_z$

$\hat{J}_z\hat{J}_+|u >= (\hbar\hat{J}_+ + \hat{J}_+\hat{J}_z)|u >$

$\hat{J}_z\hat{J}_+|u >= (\hbar\hat{J}_+ + m\hbar\hat{J}_+)|u >$

$\hat{J}_z\hat{J}_+|u >= (m + 1)\hbar\, \hat{J}_+|u >$

Autrement dit avec $\hat{J}_+$ on passe de la valeur propre m de $\hat{J}_z$ à (m+1) de $\hat{J}_z$.

$m \xrightarrow{\hat{J}_+} (m + 1) \xrightarrow{\hat{J}_+} (m + 2) \xrightarrow{\hat{J}_+} (m + 3) \xrightarrow{\hat{J}_+} \ldots$

Les valeurs propre de $\hat{J}_z$ est du type α+1

Comme $m \leq j$ d'où $\exists k \in \mathbb{N}$ tel que

$m + k = j$

en effet , lorsqu'on ajoute des entiers (1+1+1+...) à un certain moment on dépasse le nombre j fixé , donc

si $m+k \geq j$ mais ce n'est pas possible car m+k est de la forme $\alpha+1$ et c'est une valeur propre de $\hat{J}_z$ donc $\alpha+1 \leq j$

finalement on a bien

$m+k=j$

On fait la même chose avec $\hat{J}_z\hat{J}_-$

$$\hat{J}_z\hat{J}_- = [\hat{J}_z, \hat{J}_-] + \hat{J}_-\hat{J}_z$$

$$\hat{J}_z\hat{J}_- = -\hbar\hat{J}_- + \hat{J}_-\hat{J}_z$$

$$\hat{J}_z\hat{J}_-|u> = (-\hbar\hat{J}_- + \hat{J}_-\hat{J}_z)|u>$$

$$\hat{J}_z\hat{J}_-|u> = (-\hbar\hat{J}_- + m\hbar\hat{J}_-)|u>$$

$$\hat{J}_z\hat{J}_-|u> = (m-1)\hbar\,\hat{J}_-|u>$$

Autrement dit avec $\hat{J}_-$ on passe de la valeur propre m de $\hat{J}_z$ à (m-1) de $\hat{J}_z$.

$$m \xrightarrow{\hat{J}_-} (m-1) \xrightarrow{\hat{J}_-} (m-2) \xrightarrow{\hat{J}_-} (m-3) \xrightarrow{\hat{J}_-} \ldots$$

Comme $-j \leq m$ d'où $\exists k' \in \mathbb{N}$ tel que

$m - k' = -j$

finalement

$$\left.\begin{array}{r} m+k=j \\ m-k' = -j \end{array}\right\} \Rightarrow j = \frac{k+k'}{2}$$

k=2t pair, k'=2t' pair ⇒ j=entier

k=2t pair, k'=2t'+1 impair ⇒ j= demi-entier

k=2t+1 impair, k'=2t' pair ⇒ j=demi-entier

k=2t+1 impair, k'=2t'+1 impair ⇒ j= entier

j est donc entier ou demi-entier .

On a :

m + k = j ⇒ m = j - k ; avec k entier

donc

→si j est entier ⇒ m entier

→si j est demi-entier $j=\frac{2s+1}{2}$, m est aussi demi-entier en effet

$m=\frac{2s+1}{2} - k = \frac{2u+1}{2}$

Pour un j donné, on a:

$-j \leq m \leq j$

ça montre que le nombre de valeurs propres de $\hat{J}_z$ (le spectre de $\hat{J}_z$) est fini, renommez les valeurs propres de $\hat{J}_z$ et ordonnez en ordre croissant:

$a_1, a_2, a_3, ..., a_n$

et on a

$a_{i+1} = a_i + 1$ ou $a_{i-1} = a_i - 1$

deux valeurs propres consécutives diffèrent de 1

¤ si $a_n < j$ on aura (a_n+1) comme une valeur propre de $\hat{J}_z$
ce n'est pas possible car a_n est la plus grande, donc $a_n=j$

¤ si $-j < a_1$ on aura (a_1-1) comme une valeur propre de $\hat{J}_z$
ce n'est pas possible car a_1 est la plus petite, donc $a_1=-j$

on a donc ainsi

$m = j, (j-1), (j-2), (j-3), ..., -j$

Si j est entier , il y a j termes entre 1 et j, par symétrie il y a aussi j termes entre -1 et -j et le zéro 0 donc en tout il y a 2j+1 termes pour m

5, 4, 3, 2, 1, 0, -1, -2, -3, -4, -5

Si j est demi-entier $j=s+\frac{1}{2} = \frac{2s+1}{2}$, il y a (s+1) termes entre $\frac{1}{2}$ et j, par symétrie il y a aussi (s+1) termes entre $-\frac{1}{2}$ et -j donc il y a 2(s+1) termes pour m.

Or

$j=s+\frac{1}{2}$,

$j+1=(s+1)+\frac{1}{2}$,

2(j+1)=2(s+1)+1,

2j+1=2(s+1)

donc en tout il y a 2j+1 termes pour m

$\frac{5}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}, -\frac{5}{2}$

6.2 CAS PARTICULIER LE MOMENT CINÉTIQUE ORBITAL $\hat{L}$

Le moment cinétique orbital $\hat{L}$ d'une particule en $\hat{R}$ d'impulsion $\hat{P}$ est défini par

$\hat{L} = \hat{R} \wedge \hat{P}$

$\hat{L}_x = \hat{Y}\hat{P}_z - \hat{Z}\hat{P}_y = -i\hbar(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y})\hat{I}$

$\hat{L}_y = \hat{Z}\hat{P}_x - \hat{X}\hat{P}_z = -i\hbar(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z})\hat{I}$

$\hat{L}_z = \hat{X}\hat{P}_y - \hat{Y}\hat{P}_x = -i\hbar(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x})\hat{I}$

un simple calcul donne

$\hat{L} \wedge \hat{L} = i\hbar\, \hat{L}$

donc $\hat{L}$ est un moment cinétique, et on a:

$\hat{L}^2|u\rangle = l(l+1)\hbar^2|u\rangle$; où l est un entier, ou demi-entier

$\hat{L}_z|u\rangle = m\hbar|u\rangle$; où m est un entier, ou demi-entier

En fait pour le moment cinétique orbitale $\hat{L}$, m est un entier donc l est aussi un entier.

l = 0,1,2,3, ... ; le nombre quantique orbital

m = l, l-1, l-2, ... , -l ; le nombre quantique magnétique

<u>Démonstration</u> :

$\hat{L}_z|u\rangle = m\hbar|u\rangle$

On se place dans la base $\{|x\rangle\}_{x\in\mathbb{R}}$, la x-représentation

$\langle r|u\rangle = u(r) = u(x,y,z)$

$$\langle x|\hat{L}_z \rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}$$

on va passer en coordonnées sphériques (x,z,y)→(r,θ,φ) la fonction u(x,y,z) devient u(r,θ,φ) et on montre qu'on peut séparer la variable r et (θ,φ) autrement dit on a

$u(r,\theta,\varphi) = R(r)\, Y(\theta,\varphi)$

$$\langle x|\hat{L}_z \rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

$\hat{L}_z|u\rangle = m\hbar|u\rangle$

$\langle x|\hat{L}_z|u\rangle = m\hbar\langle x|u\rangle$

$$-i\hbar\frac{\partial u}{\partial\varphi} = m\hbar u$$

$$\frac{\partial Y}{\partial \varphi} = imY$$

$$Y(\theta, \varphi) = e^{im\varphi} g(\theta)$$

comme

$$Y(\theta, \varphi + 2\pi) = Y(\theta, \varphi)$$

$$e^{im(\varphi+2\pi)} g(\theta) = e^{im\varphi} g(\theta)$$

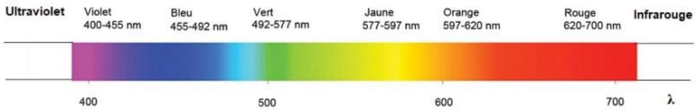
$$e^{im\varphi+2\pi mi} = e^{im\varphi}$$

$e^{2\pi mi} = 1 \Rightarrow$ m=entier

donc l est entier aussi

7 L'ATOME D'HYDROGÈNE

Voyons d'abord le spectre de la lumière



L'atome d'hydrogène est l'atome le plus simple, il comporte un proton (le noyau) et un électron. L'électron bouge autour du proton (on ne sait pas comment l'électron bouge, mais on sait qu'il bouge !)

Lorsqu'on excite l'atome d'hydrogène il rayonne (onde électromagnétique=lumière) donnant 4 raies visibles de longueurs d'onde bien précises (en Å=10^{-10}m) :

λ_α=6563 (rouge), λ_β=4861(bleue), λ_γ=4340 (indigo), λ_δ=4102 (violette) .

La question se pose naturellement :

- Pourquoi 4 raies pas 5, 6,7, ...?

- Et pourquoi précisément ces longueurs d'onde ???

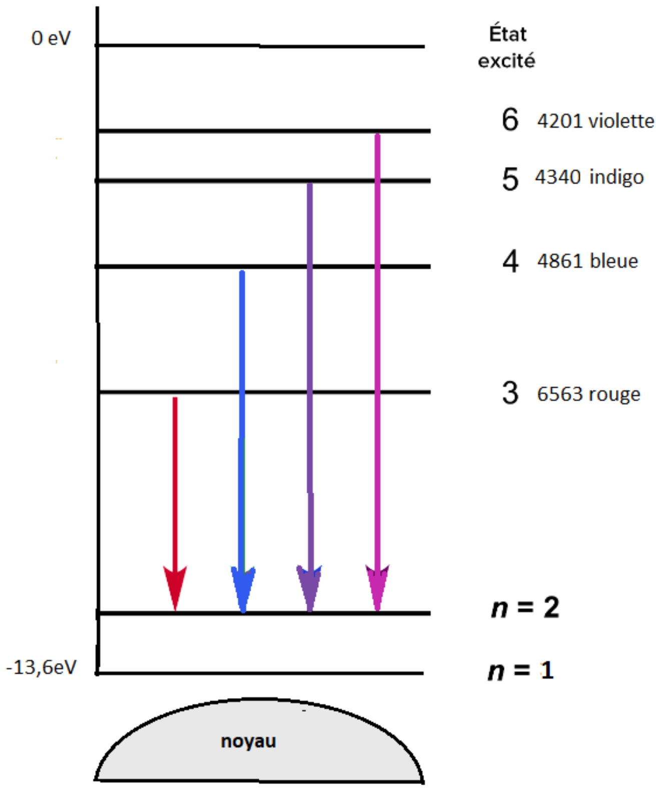
En 1885, Balmer établit une formule empirique donnant les différentes longueurs d'onde du spectre de l'atome d'hydrogène à partir des valeurs expérimentales des raies connues.

$$\frac{1}{\lambda_n} = R_\lambda\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right) \quad , n = 3,4,5,6$$

où

$$R_\lambda = \frac{1}{(4\pi\varepsilon_0)^2}\,\frac{mq^4}{4\pi\hbar^3 c}$$

est la constante de Rydberg.



En 1908, elle fût généralisée par Ritz, cette formule, elle aussi empirique, donc aucune démonstration, aucune explication logique ....

$$\frac{1}{\lambda_{kn}} = R_\lambda \left(\frac{1}{k^2} - \frac{1}{n^2}\right) \text{, } k = 1,2,3,4,5 \text{ et } k<n$$

Puis en 1913 Bohr donne une démonstration de cette formule, mais malheureusement certaine de ses hypothèses est fausse donc ce n'est pas une démonstration mais simplement un stratagème qui permet de retrouver la formule!!

Une des grandes succès de la physique quantique c'est qu'elle permet de démontrer justement la formule de Ritz!!

Ce n'est pas simple , c'est vraie mais c'est une démonstration !!

7.1 EQUATION PROPRE D'HYDROGÈNE

Dans ce chapitre nous avons fixé la base de coordonnée $\{|x>\}_{x\in\mathbb{R}}$ une fois pour tout, autrement dit on travaille dans l'espace $L^2(\mathbb{R}^3)$, et $r = ||\vec{r}||$

L'électron de l'hydrogène subit un potentiel

$$V(r) = -\frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

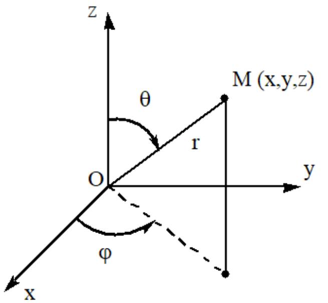
d'où l'équation propre donne

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r)\right)\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z)$$

On va passer en coordonnées sphériques,

$$\begin{cases} x = r\sin\theta\cos\varphi \\ y = r\sin\theta\sin\varphi \\ \quad z = r\sin\theta \end{cases}$$

$r \geq 0$, $0 \leq \theta \leq \pi$, $0 \leq \varphi < 2\pi$



$\psi(x,y,z) \rightarrow \psi(r,\theta,\varphi)$

et Δ vaut donc :

$$\Delta = \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r + \frac{1}{r^2}\left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\mathrm{tg}\theta}\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}\right)$$

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\mathrm{tg}\theta}\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}\right)$$

$$L_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial \varphi}$$

$$L^2 = -\hbar^2 (\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{1}{tg\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2})$$

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r^2}(\frac{L^2}{\hbar^2})$$

L'hamiltonien H est

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

$$H = \left(\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{\hbar^2}{mr}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{L^2}{2mr^2}\right) + V(r)\right)$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{\hbar^2}{mr}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{L^2}{2mr^2} + V(r)\right)\psi(r,\theta,\varphi) = E\psi(r,\theta,\varphi)$$

Comme H commute avec L, on peut séparer les variables r avec (θ,φ) on cherche donc les solutions de la forme

$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)\ Y(\theta,\varphi)$

En remplaçant dans l'équation précédente ça donne

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{\hbar^2}{mr}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{L^2}{2mr^2} + V(r)\right)RY = ERY$$

or

$L^2\ Y = l(l+1)\hbar^2 Y$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial r^2}-\frac{\hbar^2}{mr}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}+V(r)\right)R=ER$$

I) <u>Recherche de R(r) 1er méthode</u>

¤ α) <u>Premier changement de fonction</u> : R(r)→u(r) en posant

u(r) = r R(r)

$$\frac{d^2u}{dr^2}+\left(\frac{2m}{\hbar^2}(E-V(r))-\frac{l(l+1)}{r^2}\right)u=0$$

c'est l'équation radiale d'hydrogène elle n'est pas de la forme:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+k^2u=0$$

à cause du terme $\frac{1}{r^2}$ mais c'est une équation qu'on sait résoudre !! c'est compliqué mais on sait le faire.

$$\frac{d^2u}{dr^2}+\left(\frac{2mE}{\hbar^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0 r}-\frac{l(l+1)}{r^2}\right)u=0$$

C'est ici que la valeur de E intervient, on veut étudier les cas liés c'est-à-dire E < 0 et pour alléger l'écriture , on pose donc

$$-A=\frac{2mE}{\hbar^2}\ (A>0)\ ,B=\frac{2mq^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}\ ,C=l(l+1)$$

$$\frac{d^2u}{dr^2}+\left(-A+\frac{B}{r}-\frac{C}{r^2}\right)u=0$$

¤ β) <u>On va faire un changement de variable</u> : r→ρ

$$a_0 = 4\pi\varepsilon_0 \frac{\hbar^2}{mq^2}$$

a_0 = rayon de Bohr

$$\rho = \frac{2r}{na_0} \ , n = 1,2,3 \ \ldots$$

$$\frac{du}{dr} = \frac{du}{d\rho}\frac{d\rho}{dr} = \frac{2}{na_0}\frac{du}{d\rho}$$

$$\frac{d^2u}{dr^2} = \frac{2}{na_0}\frac{2}{na_0}\frac{d^2u}{d\rho^2}$$

d'où

$$\frac{d^2u}{d\rho^2} + \left(-A + \frac{Bna_0}{2\rho} - \frac{C}{\rho^2}\right)u = 0$$

$$\frac{d^2u}{d\rho^2} + \left(-a + \frac{n}{\rho} - \frac{C}{\rho^2}\right)u = 0$$

avec

$$a = \frac{(na_0)^2 A}{4} > 0$$

Voyons la forme de u, pour ça on regarde quand ρ→+∞ et quand ρ→0

¤ ρ →+∞

$$\frac{d^2u}{dr^2} - a\mathrm{u} = 0$$

la solution

$u = \alpha e^{\sqrt{a}\rho} + \beta e^{-\sqrt{a}\rho}$

la solution, $\alpha e^{\sqrt{a}\rho}$ est rejetée car la fonction Psi doit être normalisable, donc on ne garde que

$u = \beta e^{-\sqrt{a}\rho}$

¤ $\rho \to 0$

$$\frac{d^2u}{d\rho^2} + \left(-a + \frac{n}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right)u = 0$$

$\frac{1}{\rho^2}$ va beaucoup plus vite que les autres donc il est dominant, l'équation devient

$$\frac{d^2u}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}u = 0$$

On voit que $u=\alpha\rho^{l+1}$ est une solution, en effet

$u' = \alpha(l+1)\rho^{l}$

$u'' = \alpha l(l+1)\rho^{l-1}$

d'où

$u'' - \alpha l(l+1)\rho^{l-1} = 0$

$u'' - \alpha l(l+1)\rho^{l-1}\frac{\rho^{l+1}}{\rho^{l+1}} = 0$

$u'' - \frac{l(l+1)}{\rho^2} u = 0$

¤ γ) <u>Deuxième de changement de fonction</u> : u(ρ)→χ(ρ) , on va changer de fonction en posant

$$u(\rho) = \mathcal{C}e^{-\sqrt{a}\rho}\rho^{l+1}\chi(\rho)$$

où $\mathcal{C}$ est la constante de la normalisation, mais pour l'instant on peut l'ignorer car elle n'intervient pas dans les calculs , on pose donc

$$u(\rho) = e^{-\sqrt{a}\rho}\rho^{l+1}\chi(\rho)$$

dérivons tout ça ....

$$u' = -\sqrt{a}\, e^{-\sqrt{a}\rho}\rho^{l+1}\chi + (l+1)e^{-\sqrt{a}\rho}\rho^{l}\chi + e^{-\sqrt{a}\rho}\rho^{l+1}\chi'$$

$$u'' = -\sqrt{a}\left(-\sqrt{a}\, e^{-\sqrt{a}\rho}\rho^{l+1}\chi + (l+1)e^{-\sqrt{a}\rho}\rho^{l}\chi + e^{-\sqrt{a}\rho}\rho^{l+1}\chi'\right)$$

$$+(l+1)(-\sqrt{a}\, e^{-\sqrt{a}\rho}\rho^{l}\chi + le^{-\sqrt{a}\rho}\rho^{l-1}\chi + e^{-\sqrt{a}\rho}\rho^{l}\chi')$$

$$+(-\sqrt{a}\, e^{-\sqrt{a}\rho}\rho^{l+1}\chi' + (l+1)e^{-\sqrt{a}\rho}\rho^{l}\chi' + e^{-\sqrt{a}\rho}\rho^{l+1}\chi'')$$

d'où

$$\left(a\, e^{-\sqrt{a}\rho}\rho^{l+1}\chi - (l+1)\sqrt{a}e^{-\sqrt{a}\rho}\rho^{l}\chi - \sqrt{a}e^{-\sqrt{a}\rho}\rho^{l+1}\chi'\right)$$

$$+(-(l+1)\sqrt{a}\, e^{-\sqrt{a}\rho}\rho^{l}\chi + l(l+1)e^{-\sqrt{a}\rho}\rho^{l-1}\chi + (l+1)e^{-\sqrt{a}\rho}\rho^{l}\chi')$$

$$+(-\sqrt{a}\, e^{-\sqrt{a}\rho}\rho^{l+1}\chi' + (l+1)e^{-\sqrt{a}\rho}\rho^{l}\chi' + e^{-\sqrt{a}\rho}\rho^{l+1}\chi'')$$

$-a e^{-\sqrt{a}\rho} \rho^{l+1} \chi$

$+n e^{-\sqrt{a}\rho} \rho^{l} \chi$

$-l(l+1) e^{-\sqrt{a}\rho} \rho^{l-1} \chi = 0$

après un longe calcul ....

$\rho\chi'' + \left(2(l+1) - 2\sqrt{a}\rho\right)\chi' + \left(-2(l+1)\sqrt{a} + n\right)\chi = 0$

On voit que si on prend

$2\sqrt{a} = 1$

on aura

$\rho\chi'' + (2l+1+1-\rho)\chi' + (n-l-1)\chi = 0$

c'est-à-dire

$\chi(\rho) = L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)$

et

$u(\rho) = e^{-\frac{\rho}{2}} \rho^{l+1} L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)$

d'autre part

$u(r) = r\,R(r)$

$u(\rho) = \rho\,R(\rho)$ (†) (ρ c'est $\rho(r)$)

$\rho R(\rho) = e^{-\frac{\rho}{2}} \rho^{l+1} L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)$

$$R(\rho) = e^{-\frac{\rho}{2}}\ \rho^{l}\ L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)$$

(†)<u>Remarque</u> : Si remplaçant ρ par r dans

$$u(\rho) = e^{-\frac{\rho}{2}}\,\rho^{l+1} L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)$$

ça donne

$$u(r) = e^{-\frac{r}{2}}\,r^{l+1} L_{n-l-1}^{2l+1}(r)$$

et d'autre part

u(r) = r R(r)

$$rR(r) = e^{-\frac{r}{2}}\,r^{l+1} L_{n-l-1}^{2l+1}(r) \ \Rightarrow \text{erreur ici}$$

$$u\big(r(\rho)\big) = e^{-\frac{r(\rho)}{2}}\,r(\rho)^{l+1} L_{n-l-1}^{2l+1}(r(\rho))$$

u(r(ρ)) ≠ u(r) = rR(r)

en fait ce sont des abuses des écritures : u(r(ρ)) on écrit u(r) ......

Finalement , avec le paramètre ρ

$$R(\rho) = e^{-\frac{\rho}{2}}\ \rho^{l}\ L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)$$

ou avec le paramètre r

$$R(r) = e^{-\frac{r}{na_0}} \left(\frac{2r}{na_0}\right)^{l} L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right)$$

il faut encore ajouter la constante $\mathcal{C}$ de la normalisation donc :

→Soit on utilise le paramètre ρ alors la fonction radiale vaut:

$$R(\rho) = \mathcal{C}\ e^{-\frac{\rho}{2}}\ \rho^{l}\ L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)$$

→Soit on utilise le paramètre r alors la fonction radiale vaut :

$$R(r) = \mathcal{C}\ e^{-\frac{r}{na_0}}\ \left(\frac{2r}{na_0}\right)^{l} L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right)$$

il est important de bien noté que la partie radiale, c'est-à-dire la fonction radiale de l'atome d'hydrogène possède des expressions différentes suivant qu'on utilise la paramètre ρ ou r :

$$\begin{cases} R(\rho) = \mathcal{C}\ e^{-\frac{\rho}{2}}\ \rho^{l}\ L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho) \\ R(r) = \mathcal{C}\ e^{-\frac{r}{na_0}}\ \left(\frac{2r}{na_0}\right)^{l} L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right) \end{cases}$$

<u>Remarque</u>

On a n =1,2,3, ...

et le polynôme de Laguerre $L_{n-1-1}^{2l+1}(x)$ est de degré d=n-l-1≥0

donc

$0 \leq n - l - 1$

$l \leq n - 1$

donc pour une valeur n donnée, l varie: $l = 0,1,2,3, ..., (n-1)$

7.2 FORMULE DE RITZ

rappelle on a:

$$2\sqrt{a} = 1 \Rightarrow 4a = 1$$

$$a = \frac{(na_0)^2 A}{4}$$

$$A = \frac{1}{(na_0)^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$E = -\frac{\hbar^2}{2(na_0)^2 m} = -\frac{\hbar^2}{2n^2 m}\frac{m^2 q^4}{(4\pi\varepsilon_0)^2 \hbar^4}$$

$$E_n = -\frac{1}{(4\pi\varepsilon_0)^2}\frac{mq^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}$$

Pour trouver la formule de Ritz on utilise la relation $E=h\nu$

Le rayonnement de fréquence ν est donné par

$h\nu = E_n - E_k$

d'où

$$\nu_{kn} = \frac{1}{(4\pi\varepsilon_0)^2}\frac{mq^4}{4\pi\hbar^3}\left(\frac{1}{k^2} - \frac{1}{n^2}\right)$$

$$\frac{c}{\lambda_{kn}} = \frac{1}{(4\pi\varepsilon_0)^2}\ \frac{mq^4}{4\pi\hbar^3}(\frac{1}{k^2} - \frac{1}{n^2})$$

$$\frac{1}{\lambda_{kn}} = \frac{1}{(4\pi\varepsilon_0)^2}\ \frac{mq^4}{4\pi\hbar^3 c}(\frac{1}{k^2} - \frac{1}{n^2})$$

en posant

$$R_\lambda = \frac{1}{(4\pi\varepsilon_0)^2}\ \frac{mq^4}{4\pi\hbar^3 c}$$

on retrouve la formule de Ritz

$$\frac{1}{\lambda_{kn}} = R_\lambda(\frac{1}{k^2} - \frac{1}{n^2})$$

<u>Application numérique</u> :

k=2, $\frac{4}{R_\lambda} = 3646$

$$\lambda_n = 3646\frac{n^2}{n^2 - 4}\ \text{avec}\ n = 3,4,5,6$$

on retrouve ces 4 longueurs d'onde λ_α , λ_β , λ_γ , λ_δ .

II) <u>Recherche de R(r) 2ème méthode</u>

La partie (α) est la même on commence donc par l'équation

$$\frac{d^2u}{dr^2} + \left(-A + \frac{B}{r} - \frac{C}{r^2}\right)u = 0$$

avec

$$-A = \frac{2mE}{\hbar^2}\ (A > 0), B = \frac{2mq^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}\ , C = l(l+1), E < 0$$

¤ β) <u>Deuxième de changement de fonction</u> : u(r)→χ(r)

Voyons la forme de u, pour ça on regarde quand r→+∞ et quand r→0

¤ r →+∞

$$\frac{d^2u}{dr^2} - Au = 0$$

la solution

$u = \alpha e^{\sqrt{A}r} + \beta e^{-\sqrt{A}r}$

la solution, $\alpha e^{\sqrt{A}r}$ est rejetée car la fonction Psi doit être normalisable, donc on ne garde que

$u=\beta e^{-\sqrt{A}r}$

¤ r → 0

$$\frac{d^2u}{dr^2} + \left(-A + \frac{B}{r} - \frac{C}{r^2}\right) u = 0$$

$\frac{1}{r^2}$ va beaucoup plus vite que les autres donc il est dominant, l'équation devient

$$\frac{d^2u}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} u = 0$$

On voit que $u=\alpha r^{l+1}$ est une solution, en effet

$u' = \alpha(l+1)r^l$

$u'' = \alpha l(l+1)r^{l-1}$

d'où

$u'' - \alpha l(l+1)r^{l-1} = 0$

$u'' - \alpha l(l+1)r^{l-1}\frac{r^{l+1}}{r^{l+1}} = 0$

$u'' - \frac{l(l+1)}{r^2}\,u = 0$

On va changer de fonction en posant

$$u(r) = \mathcal{V}e^{-\sqrt{A}r}r^{l+1}\chi(r)$$

où $\mathcal{V}$ joue le rôle de la constante de la normalisation, mais pour l'instant on peut l'ignorer car elle n'intervient pas dans les calculs , on pose donc

$$u(r) = e^{-\sqrt{A}r}r^{l+1}\chi(r)$$

dérivons tout ça ....

$$u' = -\sqrt{A}\,e^{-\sqrt{A}r}r^{l+1}\chi + (l+1)e^{-\sqrt{A}r}r^{l}\chi + e^{-\sqrt{A}r}r^{l+1}\chi'$$

$$u'' = -\sqrt{A}\,\Big(-\sqrt{A}\,e^{-\sqrt{A}r}r^{l+1}\chi + (l+1)e^{-\sqrt{A}r}r^{l}\chi + e^{-\sqrt{A}r}r^{l+1}\chi'\Big)$$

$$+(l+1)(-\sqrt{A}\,e^{-\sqrt{A}r}r^{l}\chi + l e^{-\sqrt{A}r}r^{l-1}\chi + e^{-\sqrt{A}r}r^{l}\chi')$$

$$+(-\sqrt{A}\,e^{-\sqrt{A}r}r^{l+1}\chi' + (l+1)e^{-\sqrt{A}r}r^{l}\chi' + e^{-\sqrt{A}r}r^{l+1}\chi'')$$

d'où

$$A\, e^{-\sqrt{A}r} r^{l+1}\chi - (l+1)\sqrt{A}e^{-\sqrt{A}r} r^{l}\chi - \sqrt{A}e^{-\sqrt{A}r} r^{l+1}\chi'$$

$$-(l+1)\sqrt{A}\, e^{-\sqrt{A}r} r^{l}\chi + l(l+1)\, e^{-\sqrt{A}r} r^{l-1}\chi$$
$$+ (l+1)e^{-\sqrt{A}r} r^{l}\chi'$$

$$-\sqrt{A}\, e^{-\sqrt{A}r} r^{l+1}\chi' + (l+1)e^{-\sqrt{A}r} r^{l}\chi' + e^{-\sqrt{A}r} r^{l+1}\chi''$$

$$-Ae^{-\sqrt{A}r} r^{l+1}\chi$$

$$Be^{-\sqrt{A}r} r^{l}\chi$$

$$-l(l+1)e^{-\sqrt{A}r} r^{l-1}\chi$$

tout calcul fait

$$-(l+1)\sqrt{A}\chi - \sqrt{A}r\chi'$$

$$-(l+1)\sqrt{A}\,\chi + (l+1)\chi'$$

$$-\sqrt{A}\, r\chi' + (l+1)\chi' + r\chi'' + B\chi = 0$$

soit

$$r\chi'' + (2(l+1) - 2\sqrt{A}\, r)\chi' + (B - 2(l+1)\sqrt{A})\chi = 0$$

Cherchons une solution en série entière

$$\chi = \sum_{k=0} c_k r^k \,, \chi' = \sum_{k=1} kc_k r^{k-1} \,, \chi'' = \sum_{k=2} k(k-1)c_k r^{k-2}$$

d'où

$$r\chi'' = \sum_{k=2} k(k-1)c_k r^{k-1}$$

$$2(l+1)\chi' = \sum_{k=1} 2(l+1)kc_k r^{k-1}$$

$$-2\sqrt{A}\, r\, \chi' = \sum_{k=1} -2\sqrt{A}\, kc_k r^k$$

$$(B - 2(l+1)\sqrt{A})\chi = \sum_{k=0} (B - 2(l+1)\sqrt{A})c_k r^k$$

en changeant des indices k-1→h puis h→k

$$r\chi'' = \sum_{k=1} k(k+1)c_{k+1} r^k$$

$$2(l+1)\chi' = \sum_{k=0} 2(l+1)(k+1)c_{k+1} r^k$$

$$-2\sqrt{A}\, r\, \chi' = \sum_{k=1} -2\sqrt{A}\, kc_k r^k$$

$$(B - 2(l+1)\sqrt{A})\chi = \sum_{k=0} (B - 2(l+1)\sqrt{A})c_k r^k$$

la somme donne

$$2(l+1)c_1 + (B - 2(l+1)\sqrt{A})c_0$$

$$+\sum_{k=1} [k(k+1)c_{k+1} + 2(l+1)(k+1)c_{k+1} - 2\sqrt{A}\, kc_k + (B - 2(l+1)\sqrt{A})c_k] r^k = 0$$

soit

$$2(l+1)c_1 + (B - 2(l+1)\sqrt{A})c_0$$
$$+\sum_{k=1}[(k+2l+2)(k+1)c_{k+1} - (2\sqrt{A}\,(k+l+1) - B)c_k]r^k = 0$$

soit

$$(2l+2)c_1 - \left(2\sqrt{A}(l+1) - B\right)c_0 = 0$$

$$(k+2l+2)(k+1)c_{k+1} - \left(2\sqrt{A}\,(k+l+1) - B\right)c_k = 0$$

$$c_{k+1} = \frac{2\sqrt{A}\,(k+l+1) - B}{(k+2l+2)(k+1)}c_k$$

χ doit être un polynôme sinon la fonction Psi ψ ne sera pas normalisable. Donc il existe un d entier ≥0 , le degré de χ, tel que

$c_k = 0\ \forall k \geq d+1$

d'où

$c_{d+1} = 0$

$$2\sqrt{A}\,(d+l+1) - B = 0$$

$$2\sqrt{A} = \frac{B}{(d+l+1)}$$

on pose n = d + l + 1 et comme d,l ≥0 ⇒ n≥1

$$\sqrt{A} = \frac{B}{2n}$$

$$A = \frac{B^2}{4n^2}$$

$$-\frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{1}{4n^2}\,\frac{4m^2q^4}{(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^4}$$

$$E_n = -\frac{1}{(4\pi\varepsilon_0)^2}\,\frac{mq^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}$$

Et on retrouve la formule de Ritz

$$\frac{1}{\lambda_{kn}} = R_\lambda\left(\frac{1}{k^2} - \frac{1}{n^2}\right)$$

<u>Remarque</u>

$n = d + l + 1$, comme $d \geq 0$ d'où

$0 \leq n - l - 1$

$l \leq n - 1$

donc pour une valeur n donnée, l varie: $l = 0,1,2,3, \ldots, (n-1)$

<u>Rappel</u> :

$$a_0 = 4\pi\varepsilon_0\frac{\hbar^2}{mq^2}\ , B = \frac{2mq^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}\ , \sqrt{A} = \frac{B}{2n}$$

d'où

$$\sqrt{A} = \frac{1}{na_0}$$

$\chi(r)$ est donc un polynôme de degré d = n - l - 1 , et comme

$$u(r) = e^{-\frac{r}{na_0}} r^{l+1} \chi(r)$$

et d'autre part

u(r) = r R(r)

soit

$$R(r) = \mathcal{V}\, e^{-\frac{r}{na_0}} r^{l} \chi(r)$$

où $\mathcal{V}$ est la constante de la normalisation, et χ un polynôme de degré d= n - l - 1

$$\chi = \sum_{k=0}^{n-l-1} c_k r^k$$

et la relation de récurrence sur c_k

$$c_{k+1} = \frac{2\sqrt{A}\,(k+l+1) - B}{(k+2l+2)(k+1)} c_k$$

$$c_{k+1} = \frac{2}{na_0} \frac{(k+l+1) - n}{(k+2l+2)(k+1)} c_k$$

Avec des petites valeurs de n,l on peut retrouver R(r) mais avec des grandes valeurs de n,l cette méthode est impraticable, car il faut calculer $\mathcal{V}$ et c_k "à la main" la meilleur solution c'est 'utiliser les polynômes de Laguerre.

¤ γ) <u>L'équation de Laguerre</u>

L'équation :

$r\chi'' + (2(l+1) - 2\sqrt{A}\,r)\chi' + (B - 2(l+1)\sqrt{A})\chi = 0$

est en fait c'est l'équation de Laguerre :

$xy'' + (k + 1 - x)y' + py = 0$

dont la solution est

$L_p^k(x)$ = polynôme de Laguerre

pour voir , il suffit de poser

$2\sqrt{A}r = \rho$

car on veut la variable ρ à côté de χ' :

$(\dots -\rho)\chi'$ comme $(\dots -x)y'$

$$\frac{d\chi}{dr} = \frac{d\chi}{d\rho}\frac{d\rho}{dr} = 2\sqrt{A}\frac{d\chi}{d\rho}$$

$$\frac{d^2\chi}{dr^2} = 2\sqrt{A}\,2\sqrt{A}\frac{d^2\chi}{d\rho^2}$$

l'équation devient

$$\rho\frac{d^2\chi}{d\rho^2} + (2l + 2 - \rho)\frac{d\chi}{d\rho} + \left(\frac{B}{2\sqrt{A}} - l - 1\right)\chi = 0$$

or

$$\sqrt{A} = \frac{B}{2n}$$

$$\frac{B}{2\sqrt{A}} = \frac{2Bn}{2B} = n$$

$$\rho\frac{d^2\chi}{d\rho^2} + \ (2l + 1 + 1 - \rho)\frac{d\chi}{d\rho} + (n - l - 1)\chi = 0$$

c'est l'équation de Laguerre avec k=2l+1 et p=n-l-1

donc

$$\chi(\rho) = L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)$$

C'est ici on voit que $\mathcal{V}$=$\mathcal{C}$

Formons l'expression

$$\mathcal{C}\ e^{-\frac{r}{na_0}}\left(\frac{2r}{na_0}\right)^l\ \chi\left(\frac{2r}{na_0}\right)$$

$$= \mathcal{C}\ e^{-\frac{\rho}{2}}\,\rho^l\ \chi(\rho) = \mathcal{C}\ e^{-\frac{\rho}{2}}\,\rho^l\ L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)$$

autrement dit on retrouve les même expressions de R

$$\begin{cases} R(\rho) = \mathcal{C}\ e^{-\frac{\rho}{2}}\ \rho^l\ L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho) \\ R(r) = \mathcal{C}\ e^{-\frac{r}{na_0}}\left(\frac{2r}{na_0}\right)^l L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right) \end{cases}$$

résumons on a plusieurs expressions de R

$$\begin{cases} R(\rho) = \mathcal{C}\, e^{-\frac{\rho}{2}}\ \rho^l\ L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho) \\ R(r) = \mathcal{C}\, e^{-\frac{r}{na_0}} \left(\frac{2r}{na_0}\right)^l L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right) \\ R(r) = \mathcal{C}\, e^{-\frac{r}{na_0}}\, r^l\, \chi(r)\, , \mathcal{V} = \mathcal{C} \end{cases}$$

$$\chi = \sum_{k=0}^{n-l-1} c_k r^k$$

avec la relation de récurrence sur c_k

$$c_{k+1} = \frac{2}{na_0} \frac{(k+l+1)-n}{(k+2l+2)(k+1)} c_k$$

<u>Un petit résumé</u> :

→le nombre quantique n lié avec le degré d du polynôme $\chi(r)$: n = d+l+1, n = 1, 2, 3, ...

→le nombre quantique l provient des valeurs propres de L^2:

$L^2Y = l(l+1)\hbar^2Y$, l = 0, 1, 2,...,(n-1)

→le nombre quantique m provient des valeurs propres de L_z :

$L_zY = m\hbar Y$, m = -l, -l+1, -l+2, ..., l

7.3 FONCTION RADIALE R(R) DE L'HYDROGÈNE

On a plusieurs expressions de R:

$$\begin{cases} 1)\ R(r) = \mathcal{C}\, e^{-\frac{r}{na_0}}\, r^l\, \chi(r) \\ 2)\ R(r) = \mathcal{C}\, e^{-\frac{r}{na_0}} \left(\frac{2r}{na_0}\right)^l L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right) \\ 3)\ R(\rho) = \mathcal{C}\, e^{-\frac{\rho}{2}}\, \rho^l\, L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho) \end{cases}$$

$$\rho = \frac{2r}{na_0}$$

Pour l'expression (1) il faut calculer $\mathcal{V}$ et le polynôme $\chi(r)$ à la main, alors pour les expressions (2) et (3) on a des formules pour $\mathcal{C}$ et $L_p^k(x)$.

On utilise donc les expressions (2) ou (3) pour R, il nous reste maintenant à déterminer la constante $\mathcal{C}$

Pour calculer la constante $\mathcal{C}_{nl}$ on utilise la propriété suivante

$$\iiint |\psi|^2 d^3x = 1$$

$$\int_{r=0}^{+\infty} \int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\varphi=0}^{2\pi} R^2(r) Y^2(\theta,\varphi) r^2 \sin\theta\, dr d\theta d\varphi = 1$$

$$\left(\int_{r=0}^{+\infty} R^2(r)r^2\,dr\right)\left(\int_{\theta=0}^{\pi}\int_{\varphi=0}^{2\pi} Y^2(\theta,\varphi)\sin\theta\,d\theta d\varphi\right) = 1$$

d'où

$$\int_{r=0}^{+\infty} R^2(r)r^2\,dr = 1$$

et

$$\int_{\theta=0}^{\pi}\int_{\varphi=0}^{2\pi} Y^2(\theta,\varphi)\sin\theta\,d\theta d\varphi = 1$$

On peut objecter ceci en disant que peut-être

$$\int_{r=0}^{+\infty} R^2(r)r^2\,dr = \frac{3}{2}$$

et que

$$\int_{\theta=0}^{\pi}\int_{\varphi=0}^{2\pi} Y^2(\theta,\varphi)\sin\theta\,d\theta d\varphi = \frac{2}{3}$$

mais ce n'est pas possible car

$R^2(r)r^2$ et $Y^2(\theta,\varphi)\sin\theta$ sont des densités de probabilité de présence donc quand on intègre sur tout "espace" on trouve 1 !!!

on a donc

$$\int_0^{+\infty} R^2(r)r^2 dr = 1$$

or

$$\int_0^{+\infty} R^2(\rho)\rho^2 d\rho = \int_0^{+\infty} (\mathcal{C}^2\ e^{-\rho}\ \ \rho^{2l}[\ L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)]^2)\rho^2 d\rho$$

$$\mathcal{C}^2 \int_0^{+\infty} [\ L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)]^2\ \rho^{2l+2} e^{-\rho} d\rho = \mathcal{C}^2 \frac{2n(n+l)!}{(n-l-1)!}$$

$$\int_0^{+\infty} R^2(\rho)\rho^2 d\rho = \int_0^{+\infty} R^2(r)\left(\frac{2r}{na_0}\right)^2 \left(\frac{2}{na_0}\right) dr =$$

$$\left(\frac{2}{na_0}\right)^3 \int_0^{+\infty} R^2(r)r^2 dr = \mathcal{C}^2 \frac{2n(n+l)!}{(n-l-1)!}$$

$$\left(\frac{2}{na_0}\right)^3 = \mathcal{C}^2 \frac{2n(n+l)!}{(n-l-1)!}$$

$$\mathcal{C}^2 = \left(\frac{2}{na_0}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}$$

$$\mathcal{C}^2 = \frac{4}{n^4} \frac{(n-l-1)!}{(n+l)!} \left(\frac{1}{a_0}\right)^3$$

Et hup là ....

$$\mathcal{C} = \frac{2}{n^2} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{(n+l)!}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}$$

d'où

$$R(r) = \frac{2}{n^2}\sqrt{\frac{(n-l-1)!}{(n+l)!}}\;\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\; e^{-\frac{r}{na_0}}\;\left(\frac{2r}{na_0}\right)^{l}\; L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right)$$

<u>Rappel</u>:

$$\rho = \frac{2r}{na_0}$$

$$L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho) = \sum_{q=0}^{n-l-1} (-1)^q\; \frac{(n+l)!}{(n-l-1-q)!\,(2l+1+q)!\,q!}\;\rho^q$$

Voici quelques expressions de $R(\rho)$ en ρ, ici on met les indices pour bien voir les fonctions $R(\rho)=R_{nl}(\rho)$

$$R_{nl}(\rho) = \frac{2}{n^2}\sqrt{\frac{(n-l-1)!}{(n+l)!}}\;\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\; e^{-\frac{\rho}{2}}\;\rho^l\; L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)$$

$$R_{10}(\rho) = 2\left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} e^{-\rho/2}$$

$$R_{20}(\rho) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{1}{2}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\rho}{2}}\,(2-\rho)$$

$$R_{21}(\rho) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{1}{6}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\rho}{2}}\,\rho$$

$$R_{30}(\rho) = \frac{2}{9}\sqrt{\frac{1}{3}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\rho}{2}}\left(3 - 3\rho + \frac{1}{2}\rho^2\right)$$

$$R_{31}(\rho) = \frac{1}{9}\sqrt{\frac{1}{6}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\rho}{2}}\rho\,(4 - \rho)$$

$$R_{32}(\rho) = \frac{1}{9}\sqrt{\frac{1}{30}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\rho}{2}}\rho^2$$

7.4 FONCTION ANGULAIRE $Y_{L,M}(\Theta,\Phi)$ DE L'ATOME HYDROGÈNE

Rappel , la fonction Psi de l'hydrogène :

$$\psi_{n,l,m}(r,\theta,\varphi) = R_{n,l}(r)Y_{l,m}(\theta,\varphi)$$

et par définition même de $Y_{l,m}(\theta,\varphi)$

$$L^2Y_{l,m}(\theta,\varphi) = l(l+1)\hbar^2Y_{l,m}(\theta,\varphi)$$

$$L_zY_{l,m}(\theta,\varphi) = m\hbar Y_{l,m}(\theta,\varphi)$$

Les $Y_{l,m}(\theta,\varphi)$ sont donc des fonctions propres communes à des opérateurs L^2 et L_z pour les valeurs propres associées $l(l+1)\hbar^2$ et $m\hbar$.

Dans cette partie on va déterminer la partie angulaire ou la partie orbitale de l'atome hydrogène $Y_{l,m}(\theta,\varphi)$.

Mais avant de commencer on va rappeler quelques formules qu'on aura besoin.

Les opérateurs moments cinétiques orbitaux

$$L_{-} = \hbar e^{-i\varphi}\left(-\frac{\partial}{\partial\theta} + i\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$

$$L_{+} = \hbar e^{i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} + i\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$

$$L_{-}Y_{l,m}(\theta,\varphi) = \hbar\sqrt{(l+m)(l-m+1)}Y_{l,m-1}$$

L'intégrale de Wallis

$$W_n = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \sin^n x\, dx = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \cos^n x\, dx$$

$$\text{n impair : } W_{2l+1} = \frac{2^{2l}(l!)^2}{(2l+1)!}$$

$$\text{n pair : } W_{2l} = \frac{(2l)!}{2^{2l}(l!)^2}\frac{\pi}{2}$$

L'idée de trouver $Y_{l,m}(\theta,\varphi)$ est suivante:

On applique L_- sur $Y_{l,l}(\theta,\varphi)$, (l-m) fois pour trouver $Y_{l,m}(\theta,\varphi)$, on part de l et on descend l-1, l-2, ... jusqu'à m.

On peut séparer les variables θ et φ de $Y_{l,m}(\theta,\varphi)$ autrement dit on chercher les $Y_{l,m}(\theta,\varphi)$ sous la forme suivante

$$Y_{l,m}(\theta,\varphi) = f_{l,m}(\theta)e^{i(m\varphi + l\pi)}$$

donc pour $Y_{l,l}(\theta,\varphi)$ on aura

$$Y_{l,l}(\theta,\varphi) = f_{l,l}(\theta)e^{i(l\varphi+l\pi)}$$

On sait que

$$L_+Y_{l,l}(\theta,\varphi) = 0$$

d'où

$$\hbar e^{i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} + i\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\left(f_{l,l}(\theta)e^{i(l\varphi+l\pi)}\right) = 0$$

$$= f'_{l,l}(\theta)e^{i(l\varphi+l\pi)} + i\frac{\cos\theta}{\sin\theta}f_{l,l}(\theta)ile^{i(l\varphi+l\pi)} = 0$$

$$f'_{l,l}(\theta) - \frac{\cos\theta}{\sin\theta}f_{l,l}(\theta)l = 0$$

$$\frac{f'_{l,l}(\theta)}{f_{l,l}(\theta)} = -l\frac{\cos\theta}{\sin\theta} = -l\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\sin^{l-1}\theta}{\sin^{l-1}\theta} = \frac{(\sin^l\theta)'}{\sin^l\theta}$$

$$\ln\left(f_{l,l}(\theta)\right) = \ln(\sin^l\theta)$$

$$f_{l,l}(\theta)) = \mathcal{V}_l\sin^l\theta$$

où $\mathcal{V}_l$ est la constante de la normalisation

$$Y_{l,l}(\theta,\varphi) = \mathcal{V}_l\ \sin^l\theta\ \ e^{i(l\varphi+l\pi)}$$

Nous allons maintenant trouver la constante de la normalisation $\mathcal{V}_l$

$$\int_{\text{espace}} \left|Y_{l,l}(\theta,\varphi)\right|^2 d\tau = 1$$

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \left|\mathcal{V}_l \sin^l\theta \;\; e^{i(l\varphi + l\pi)}\right|^2 \sin\theta d\theta = 1$$

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \mathcal{V}_l^2 \sin^{2l}\theta \quad \sin\theta d\theta = 1$$

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \mathcal{V}_l^2 \sin^{2l+1}\theta \;\; d\theta = 1$$

$$\mathcal{V}_l^2 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin^{2l+1}\theta \;\; d\theta = 1$$

$$2\pi\mathcal{V}_l^2 I = 1$$

où

$$I = \int_0^{\pi} \sin^{2l+1}\theta \;\; d\theta$$

on reconnaît I est 2 x intégrale de Wallis

$$\int_0^{\pi} \sin^{2l+1}\theta \;\; d\theta = 2\,\frac{2^{2l}(l!)^2}{(2l+1)!}$$

$$4\pi\mathcal{V}_l^2 \frac{2^{2l}(l!)^2}{(2l+1)!} = 1$$

$$\mathcal{V}_l^2 = \frac{(2l+1)!}{4\pi 2^{2l}(l!)^2}$$

soit

$$\mathcal{V}_l = \frac{1}{2^l\, l!}\sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}}$$

$$Y_{l,l}(\theta,\varphi) = \frac{1}{2^l\, l!}\sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}}\ \sin^l\theta\ \ e^{i(l\varphi + l\pi)}$$

On va appliquer L- (l-m) fois sur $Y_{l,l}(\theta,\varphi)$ pour retrouver $Y_{l,m}(\theta,\varphi)$, on a

$$L_- Y_{l,m}(\theta,\varphi) = \hbar\sqrt{(l+m)(l-m+1)}\ Y_{l,m-1}$$

$$L_- Y_{l,l} = \hbar\sqrt{(2l)(1)}\ Y_{l,l-1}$$

$$L_-^2 Y_{l,l} = \hbar^2\sqrt{(2l)(1)(2l-1)(2)}\ Y_{l,l-2}$$

$$L_-^3 Y_{l,l} = \hbar^3\sqrt{(2l)(1)(2l-1)(2)(2l-2)(3)}\ Y_{l,l-3}$$

....

$$L_-^{l-m} Y_{l,l} =$$
$$= \hbar^{l-m}\sqrt{(2l)(1)(2l-1)(2)\ldots(l+m+1)(l-m)}\ Y_{l,m}$$

or

$$(2l)(2l-1)\ldots(l+m+1)$$

est presque (2l)!, il manque un morceau , il manque (l+m)(l+m-1)(l+m-2)...1 c'est-à-dire (l+m)!

donc

$$\frac{(2l)(2l-1)\ldots(l+m+1)(l+m)!\,(1)(2)(l-m)}{(l+m)!}$$
$$=\frac{(2l)!\,(l-m)!}{(l+m)!}$$

$$L_{-}^{l-m}Y_{l,l} == \hbar^{l-m}\sqrt{\frac{(2l)!\,(l-m)!}{(l+m)!}}\ Y_{l,m}$$

ou encore

$$Y_{l,m} = \frac{1}{\hbar^{l-m}}\sqrt{\frac{(l+m)!}{(2l)!\,(l-m)!}}\,L_{-}^{l-m}Y_{l,l}$$

d'un autre côté on a:

$$L_{-}Y_{l,l} = \hbar e^{-i\varphi}\left(-\frac{\partial}{\partial\theta}+i\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)(\mathcal{V}_l\ \sin^l\theta\ \ e^{i(l\varphi+l\pi)})$$

$$-\frac{\partial Y_{l,l}}{\partial\theta} = -\mathcal{V}_l l\cos\theta\ \sin^{l-1}\theta\ \ e^{i(l\varphi+l\pi)}$$

$$i\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial Y_{l,l}}{\partial\varphi} = i\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\mathcal{V}_l \sin^l\theta\ il\ e^{i(l\varphi+l\pi)}$$
$$= -\mathcal{V}_l\cos\theta\ \sin^{l-1}\theta\ l\ e^{i(l\varphi+l\pi)}$$

$$L_{-}Y_{l,l} = -\mathcal{V}_l\hbar e^{i(-\varphi+l\varphi+l\pi)}\left(2l\cos\theta\ \sin^{l-1}\theta\ \right)$$

$$L_{-}Y_{l,l} = -\mathcal{V}_l e^{il\pi}\ \hbar e^{i(l-1)\varphi}\left(2l\cos\theta\ \sin^{l-1}\theta\ \right)$$

$$2l\cos\theta\ \sin^{l-1}\theta = 2l\cos\theta\ \sin^{l-1}\theta\frac{\sin^l\theta}{\sin^l\theta} = \frac{(\sin^{2l}\theta)'}{\sin^l\theta}$$

$$L_{-}Y_{l,l} = -\mathcal{V}_l e^{il\pi}\ \hbar e^{i(l-1)\varphi}\ \frac{(\sin^{2l}\theta)'}{\sin^l\theta}$$

si on pose u=cosθ , d'où

$$\frac{df}{d\theta} = \frac{df}{du}\frac{du}{d\theta} = \frac{df}{du}(-\sin\theta)$$

$$L_{-}Y_{l,l} = \mathcal{V}_l e^{il\pi}\ \hbar e^{i(l-1)\varphi}\ \frac{\sin\theta}{\sin^l\theta}\frac{d}{d(\cos\theta)}(\sin^{2l}\theta)$$

$$L_{-}Y_{l,l} = \mathcal{V}_l e^{il\pi}\ \hbar e^{i(l-1)\varphi}\ \sin^{1-l}\theta\ \frac{d}{d(\cos\theta)}(1-\cos^2\theta)^l$$

en répétant k fois , ça donne

$$L_{-}^{k}Y_{l,l} = \mathcal{V}_l e^{il\pi}\ \hbar^k e^{i(l-k)\varphi}\ \sin^{k-l}\theta\ \frac{d^k}{d(\cos\theta)^k}(1-\cos^2\theta)^l$$

pour k=l-m ça donne

$$L_{-}^{l-m}Y_{l,l} = \mathcal{V}_l e^{il\pi}\ \hbar^{l-m} e^{im\varphi}\ \sin^{-m}\theta\ \frac{d^{l-m}}{d(\cos\theta)^{l-m}}(1-\cos^2\theta)^l$$

$$Y_{l,m}(\theta,\varphi) = \frac{1}{\hbar^{l-m}}\sqrt{\frac{(l+m)!}{(2l)!\,(l-m)!}}\ \frac{1}{2^l\ l!}\sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}}$$

$$e^{il\pi}\hbar^{l-m}\ e^{im\varphi}\ (\sin\theta)^{-m}\ \frac{d^{l-m}}{d(\cos\theta)^{l-m}}(1-\cos^2\theta)^l$$

$$Y_{l,m}(\theta,\varphi) = \frac{e^{i\pi l}}{2^l\ l!}\sqrt{\frac{(2l+1)}{4\pi}\frac{(l+m)!}{(l-m)!}}$$

$$e^{im\varphi}\,(\sin\theta)^{-m}\,\frac{d^{l-m}}{d(\cos\theta)^{l-m}}(1-\cos^2\theta)^l$$

ouuuffff !!!

On pourra aussi bien de calculer $Y_{l,m}(\theta,\varphi)$ à partir de $Y_{l,-l}(\theta,\varphi)$ en appliquant (l+m) fois l'opérateur L_+, on trouvera bien sûr une expression différente mais équivalente.

$$Y_{l,m}(\theta,\varphi) = \frac{e^{i\pi l}}{2^l\, l!}\sqrt{\frac{(2l+1)}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}$$

$$e^{im\varphi}\,(-\sin\theta)^{m}\,\frac{d^{l+m}}{d(\cos\theta)^{l+m}}(1-\cos^2\theta)^l$$

et voici quelques valeurs de $Y_{l,m}(\theta,\varphi)$

$$Y_{0,0}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$$

$$Y_{1,1}(\theta,\varphi) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}e^{i\varphi}\sin\theta\ ;\ Y_{1,-1}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}e^{-i\varphi}\sin\theta$$

$$Y_{1,0}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta$$

$$Y_{2,2}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\, e^{2i\varphi} \sin^2\theta \;;\; Y_{2,-2}(\theta,\varphi)$$
$$= \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\, e^{-2i\varphi} \sin^2\theta$$

$$Y_{2,1}(\theta,\varphi) = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\, e^{i\varphi} \sin\theta \cos\theta;\; Y_{2,-1}(\theta,\varphi)$$
$$= \sqrt{\frac{15}{8\pi}}\, e^{-i\varphi} \sin\theta \cos\theta$$

$$Y_{2,0}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{5}{4\pi}}\, \frac{3\cos^2\theta - 1}{2}$$

Finalement la fonction Psi de l'hydrogène $\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)$ est bien compliquée

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r) Y_{l,m}(\theta,\varphi)$$

ça donne un truc énorme !!!

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)$$
$$= \frac{2}{n^2}\sqrt{\frac{(n-l-1)!}{(n+l)!}}\;\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\; e^{-\frac{r}{na_0}}\;\left(\frac{2r}{na_0}\right)^{l}\; L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right)$$

$$\frac{e^{i\pi l}}{2^l\, l!}\sqrt{\frac{(2l+1)}{4\pi}\frac{(l+m)!}{(l-m)!}}$$

$$e^{im\varphi}\,(\sin\theta)^{-m}\,\frac{d^{l-m}}{d(\cos\theta)^{l-m}}(1-\cos^2\theta)^l$$

avec

n=1, 2, 3, ...

l=0, 1, 2, ... , (n-1)

m = -l, -l+1, -l+2, -l+3, ..., l

8 LES ATOMES

8.1 CONFIGURATION ÉLECTRONIQUE DE L'ATOME

Nous savons tous, un atome comporte des :

- électrons

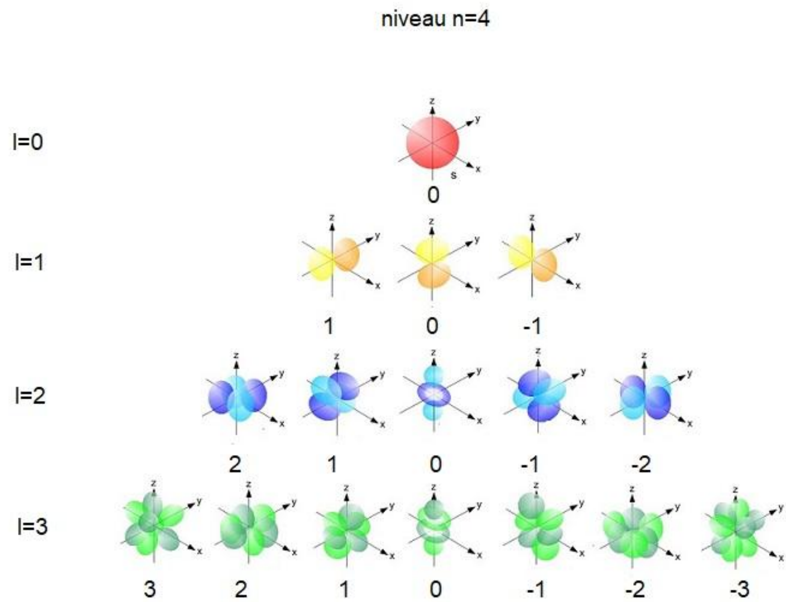
-protons

-neutrons

Et son noyau est composé de protons et de neutrons, quant aux électrons, ils bougent autour du noyau.

Nous s'intéressons seulement aux électrons, on peut donc ignorer les protons et les neutrons.

Les électrons se placent suivant les niveaux d'énergies n, et dans chaque niveau ils se trouvent dans des différents orbitales (couches) l nommés : s(l=0), p(l=1), d(l=2), f(l=3) (pour se souvenir on retient la phrase "simple physicien de France")



La forme des orbitales s,p,d,f

et dans chaque orbitale se trouvent des cases quantiques ;

s=1 case (2 électrons)

p=3 cases (6 électrons)

d=5 cases (10 électrons)

f=7 cases (14 électrons)

une case quantique ne peut contenir que 2 électrons de spin opposé.

$\boxed{\uparrow}$ ou $\boxed{\uparrow\downarrow}$

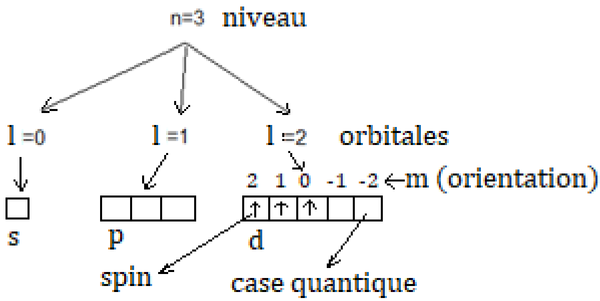
Pour remplir les électrons dans les couches, on utilise certains nombres et règles:

n = 1,2,3, ... ; niveau d'énergie

l = 0,1,2, ... (n-1) ; couches (orbitales)

m = l, l-1, l-2, ... , -l ; cases quantiques (orientations)

$s = +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$; spin



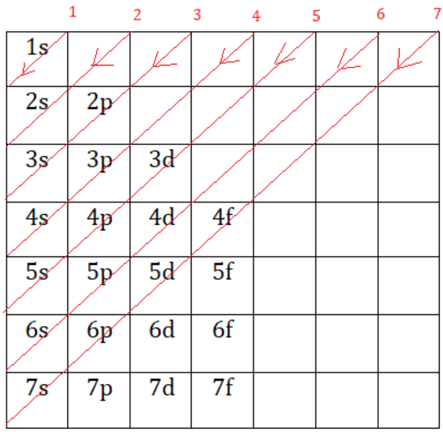
<u>Note</u> les couches s, p, d, f peuvent contenir aux maximum :

s = 2 électrons $\boxed{\uparrow\downarrow}$

p = 6 électrons $\boxed{\uparrow\downarrow | \uparrow\downarrow | \uparrow\downarrow}$

d = 10 électrons $\boxed{\uparrow\downarrow | \uparrow\downarrow | \uparrow\downarrow | \uparrow\downarrow | \uparrow\downarrow}$

f = 14 électrons $\boxed{\uparrow\downarrow | \uparrow\downarrow | \uparrow\downarrow | \uparrow\downarrow | \uparrow\downarrow | \uparrow\downarrow | \uparrow\downarrow}$



le remplissage suivant la flèche rouge, ainsi

1s 2s 2p3s 3p4s 3d4p5s 4d5p6s 4f5d6p7s .....

on écrit nx^k pour dire :

niveau n, couche x, k=électrons, par exemple

$3d^8 \rightarrow$ niveau 3, couche d, 8 électrons

On remplit les couches par ↑ $(s=+\frac{1}{2})$ dans l'odre <u>décroissant</u> de m, puis ↓$(s=-\frac{1}{2})$, ex:

$3d^8$; d → l=2 donc

m	2	1	0	-1	-2
s	↑↓	↑↓	↑↓	↑	↑

exemple

Chlore = 17 électrons

$_{17}Cl = 1s^2\ 2s^2\ 2p^6 3s^2\ 3p^5$

on pose

$1s^2\ 2s^2\ 2p^6 = [Ne]$

d'où

Chlore : $_{17}Cl = [Ne]3s^2 3p^5$

Étain : $_{50}Sn = [Kr]\ 5s^2\ 4d^{10}\ 5p^2$

Plomb : $_{82}Pb = [Xe]\ 6s^2\ 4f^{14}\ 5d^{10}\ 6p^2$

Chrome : $_{24}Cr = [Ar]\ 4s^1\ 3d^5$ (exception)

Argent : $_{47}Ag = [Kr]\ 5s^1\ 4d^{10}$ (exception)

Aluminium : $_{13}Al = [Ne]\ 3s^2\ 3p^1$

Hélium : $_2He = 1s^2$

Nickel : $_{28}Ni = [Ar]\ 4s^2\ 3d^8$

Titane : $_{22}Ti = [Ar]\ 4s^2\ 3d^2$

Silicium : $_{14}Si = [Ne]\ 3s^2\ 3p^2$

Sodium : $_{11}Na = 1s^2\ 2s^2\ 2p^6 3s^1$

8.2 NOMBRE DE TACHES

Dans l'expérience de Stern et Gerlach on a utilisé l'atome d'argent qui donne 2 taches et permet ainsi de découvrir l'existence de spin. Il est intéressant de se demander si on prend un autre atome à la place de l'atome d'argent le Chrome par exemple, combien de taches va-t-on observer?

Autrement dit, on fait passer un atome $_{Z}X$ à Z électrons dans l'appareil SG_z combien de tache observe-t-on ? et comment calculer ce nombre taches ?

On va définir les trois nombres ℓ, $\mathcal{g}$, j suivantes:

$$\ell = \sum m \quad ; \quad \mathcal{g} = \sum s$$

pour j :

* remplie < la-moitié j = $|\ell - \mathcal{g}|$

* remplie = la-moitié j = $\mathcal{g}$

* remplie > la-moitié j = $\ell + \mathcal{g}$

À partir de la configuration d'électronique de l'atome on veut retrouver ℓ, $\mathcal{g}$, et j puis calculer le nombre de taches défini par : $\tau = 2j+1$

Voici la règle:

1) On remplit les couches par ↑ (s=+$\frac{1}{2}$) dans l'ordre décroissant de m, puis ↓(s=−$\frac{1}{2}$) toujours dans l'ordre décroissant de m.

exemple pour la couche d (l=2)

a)

m	2	1	0	-1	-2
s	↑	↑	↑		

b)

m	2	1	0	-1	-2
s	↑↓	↑↓	↑	↑	↑

2) Calculer ℓ et $\mathscr{s}$

exemple a)

$$\ell = \sum m \quad ; \quad \mathscr{s} = \sum s$$

$$\ell = \sum m = 2 + 1 + 0 = 3$$

$$\mathscr{s} = \sum s = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = \frac{3}{2}$$

exemple b)

$$\ell = \sum m \quad ; \quad \mathscr{s} = \sum s$$

$$\ell = \sum m = 2 + 1 + 0 - 1 - 2 + 2 + 1 = 3$$

$$\mathcal{g} = \sum s = 0 + 0 + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = \frac{3}{2}$$

3) Calculer j

* remplie<la-moitié $j = |\ell - \mathcal{g}|$

* remplie=la-moitié $j = \mathcal{g}$

* remplie>la-moitié $j = \ell + \mathcal{g}$

4) $j = \sum_i j_i$

Les couches pleines ℓ=0, $\mathcal{g}$=0 (ℓ et $\mathcal{g}$ ne contribuent pas pour le calcul de j)

exemple

¤ Argent : ${}_{47}Ag$ = [Kr] $5s^1$ $4d^{10}$

$5s^1$ non plein → l=0

m	0
s	↑

⇒

$$\ell = \sum m = 0$$

$$\mathcal{g} = \sum s = \frac{1}{2}$$

ici on a: remplie=la-moitié ⇒ j=$\mathcal{g}$ ⇒ τ=2$\frac{1}{2}$+1=2 taches

¤ Chrome : $_{24}Cr$ = [Ar] $4s^1$ $3d^5$

→$4s^1$ ⇒ l=0 ⇒ m=0 ⇒ ℓ=0, $\mathcal{g}$=1/2 ⇒ j=$\mathcal{g}$=1/2 (remplie=la-moitié),

→$3d^5$ ⇒ l=2

m	2	1	0	-1	-2
s	↑	↑	↑	↑	↑

$$\ell = \sum m = 2 + 1 + 0 - 1 - 2 = 0$$

ℓ=0, $\mathcal{g}$=$\sum s$ = 5/2 ⇒ j=$\mathcal{g}$=5/2 (remplie=la-moitié)

j = $\frac{1}{2} + \frac{5}{2}$ = 3 ⇒ τ = 2j+1 = 7 taches

¤ Plomb : $_{82}Pb$ = [Xe] $6s^2$ $4f^{14}$ $5d^{10}$ $6p^2$

$6p^2$ ⇒ l = 1

m	1	0	-1
s	↑	↑	

ℓ = 1+0 = 1

$\mathcal{g}$ =$\frac{1}{2} + \frac{1}{2}$=1, ⇒ j = |$\ell$-$\mathcal{g}$| (remplie<la-moitié)

j=|1-1|=0 ⇒ τ = 1 une tache au centre.

¤ Nickel : $_{28}Ni$ = [Ar] $4s^2$ $3d^8$

$3d^8$ → l=2

m	2	1	0	-1	-2
s	↑↓	↑↓	↑↓	↑	↑

ℓ =2+1+0-1-2+2+1+0=3

$\mathcal{g}$=0+0+0+$\frac{1}{2}+\frac{1}{2}=1$

j = ℓ+$\mathcal{g}$ = 3+1=4 (remplie>la-moitié)

τ = 2j+1 = 9 taches

¤ Titane : $_{22}Ti$ = [Ar] $4s^2$ $3d^2$

$3d^2$ → l=2

m	2	1	0	-1	-2
s	↑	↑			

ℓ=2+1=3

$\mathcal{g}$=$\frac{1}{2}+\frac{1}{2}$ =1

j = |3-1| = 2 (remplie<la-moitié)

τ = 2j+1 = 5 taches

¤ Aluminium : $_{13}Al$ = [Ne] $3s^2$ $3p^1$

$3p^1$ → l=1

m	1	0	-1
s	↑		

ℓ=1 , $\mathcal{g}$=$\frac{1}{2}$

$j=|1-\frac{1}{2}|=\frac{1}{2}$

$\tau=2\frac{1}{2}+1=2$ taches

On remarque que la somme des spins $\mathcal{g}=\sum s$ n'est pas nulle , il y a toujours une contribution de spin, par contre il peut arriver que la somme des moments cinétiques orbitales $\mathcal{g}=\sum m$ est nulle, donc avec l'expérience de Stern-Gerlach on ne peut pas prouver la quantification L du moment cinétique orbital comme suggéraient Bohr et Sommerfeld. Pour démontrer la quantification du moment cinétique orbital L il faut passer par l'équation de Schrodinger.

Pour repérer un électron dans l'atome on a besoin 4 nombres quantiques (n,l,m,s) qui s'expliquent très bien par le formalisme quantique :

$n \rightarrow E_n$ valeur propre de $\hat{H}$; $\hat{H}|u\rangle = E_n|u\rangle$

$l \rightarrow l(l+1)\hbar^2$ valeur propre de $\hat{L}^2$; $\hat{L}^2|u\rangle = l(l+1)\hbar^2|u\rangle$

$m \rightarrow m\hbar$ valeur propre de $\hat{L}_z$; $\hat{L}_z|u\rangle = m\hbar|u\rangle$

$s \rightarrow m_s = \frac{\hbar}{2}, -\frac{\hbar}{2}$;

$\hat{S}^2|u\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|u\rangle$; $\frac{3}{4} = \frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1)$

$\hat{S}_z|u\rangle = m_s\hbar|u\rangle$

9 À L'AUBE DE LA PHYSIQUE QUANTIQUE

9.1 LA PHYSIQUE CLASSIQUE

Vers la fin du XIX siècle, on pense que la construction de la physique est terminée. Elle est composée de trois piliers:

- La mécanique newtonienne

- L'électromagnétique

- La thermodynamique

Tous les phénomènes sont expliqués par ces trois piliers, on pense donc il n'y a rien à ajouter dans la physique.

Il y a quand même deux petits problèmes qui tracassent les physiciens du XIX siècle car ils ne peuvent pas expliquer par la physique classique.

- Le premier problème est l'expérience de Michelson et Morley :

Alice se place devant la gare voit une voiture se déplace à la vitesse v.

Bob assied dans un train roulant (dans la même direction que la voiture) à la vitesse V (par rapport à Alice) voit la voiture se déplace à la vitesse v' moins vite qu'Alice, c'est-à-dire v' < v, plus précisément

$v' = v - V$

Remplaçons maintenant la voiture par la lumière dont la vitesse par rapport à Alice est c, mais Bob trouve

$c' = c$!!

et non

$c' = c - V$!!

La physique classique ne peut pas expliquer ce résultat.

-Le deuxième problème est le rayonnement du corps noir.

9.2 LE RAYONNEMENT DU CORPS NOIR

Commençons par se demander ce que c'est un corps noir.

Beaucoup de livres et d'articles donnent une définition aberrante, absurde, contradiction en elle-même ... du 'corps noir' parce que ces gens là n'ont pas compris ce que c'est un corps noir ou c'est du copie/collé pur et dur d'un texte bidon déjà erroné ....

On voit par exemple la définition délirante suivante:

"Un corps noir c'est un corps qui absorbe tout et qui ne rayonne pas"

Mais alors pourquoi parle-t-on le rayonnement du corps noir ?

Et parfois on voit le dessin ci-dessous et l'explication qui va avec:

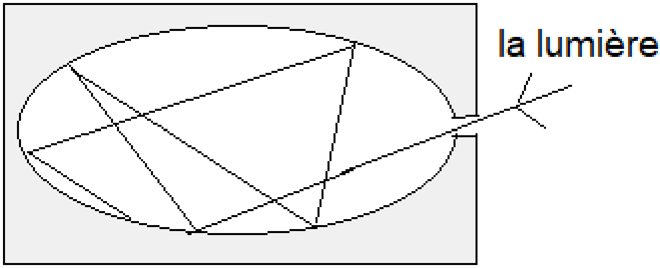


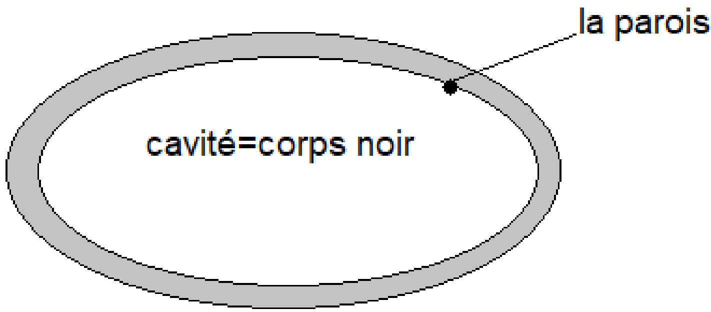
image erronée

il explique que la lumière entre par le trou et qu'elle n'a pas de chance de sortir d'après les réflexions c'est pour quoi le corps est noir. C'est n'importe quoi comme explication ! le trou, son rôle n'est pas de laisser entrer la lumière !!.... Bref on trouve pleine d' erreurs , n'importe quoi sur la définition du corps noir, sur le net, dans les bas vulgarisations !

Le problème est suivant :

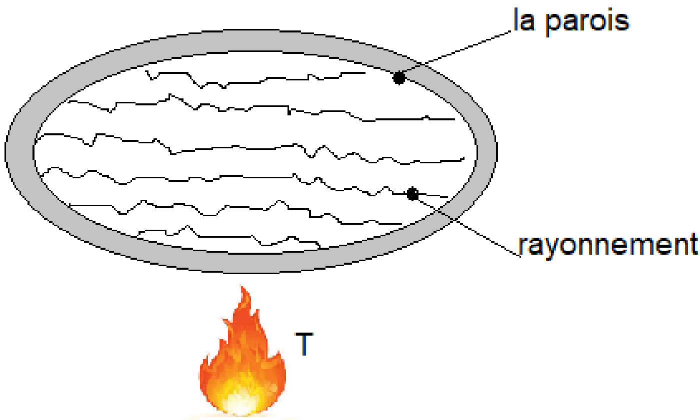
Lorsqu'on chauffe (on apporte de la température) un corps il change de couleur, par ex quand on chauffe une barre de fer, elle devient rouge , puis jaune, puis blanche ..., on dit qu'elle rayonne . On voudrait étudier l'énergie de ce rayonnement, pour la barre de fer une partie de ce rayonnement est perdue dans l'espace, c'est pourquoi on veut chauffer quelque chose dont le rayonnement ne se perd pas, cette chose là c'est ce qu'on appelle un corps noir.

En pratique un corps noir est une cavité hermétique (une enceinte fermée) comme ceci, c'est tout !!



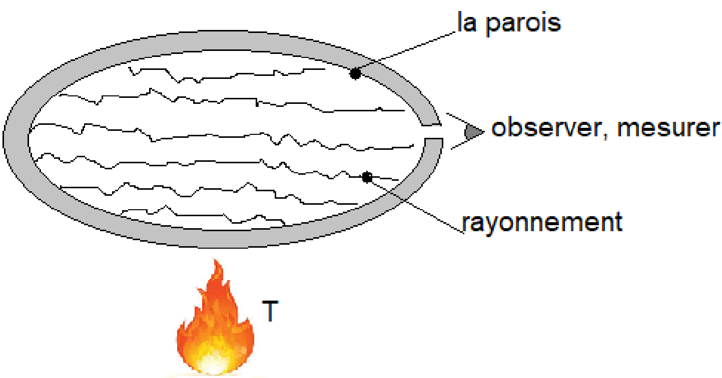
corps noir

et quand on chauffe cette cavité il produit un rayonnement électromagnétique de toutes les fréquences ν dans la cavité.



corps noir apporté à la température T

Pour étudier ce rayonnement, on peut faire un tout petit trou pour observer, mesurer etc ...



On étudie ce corps noir en perçant un petit trou

Donc un corps noir est simplement une : cavité fermée c'est tout !!!

L'énergie E(T) que produit par le rayonnement dépend de la température T, cette énergie est distribuée sur toutes les fréquences ν, chaque fréquence ν reçoit une certaine quantité d'énergie, soit ρ(ν,T) la densité de cette énergie, le but c'est trouver cette fonction ρ(ν,T) et on a donc par définition :

$$E(T) = \int_0^{+\infty} \rho(\nu, T)d\nu$$

En 1859, Kirchhoff établit que ρ(ν,T) ne dépend pas de la forme de la cavité, ni de la matière que compose la cavité, mais seulement de ν et T (loi de Kirchhoff 1859), donc l'énergie E(T) ne dépend que la température comme nous avons dit.

Il n'est pas évidant de trouver ρ(ν,T) .

1*) En 1879 Stefan propose de façon empirique la relation:

$E(T) = \sigma T^4$; $\sigma = 7{,}56 . 10^{-16}$

et en 1884 Boltzmann grâce à la thermodynamique il a pu démontrer cette relation :

$E(T) = \sigma T^4$

Voyons voir

Il commence à montrer que la pression P(T) vaut

$$P(T) = \frac{E(T)}{3}$$

et l'énergie interne U vaut donc

$U = EV$

Le premier principe de la thermodynamique donne

$dU = \delta Q + \delta W$

où

$\delta W = -PdV = -\ \frac{E}{3} dV$

or

$dU = d(EV) = dE\ V + EdV = dE\ V \frac{dT}{dT} + EdV$

$dU - \delta W = dE\ V \frac{dT}{dT} + EdV + \frac{E}{3} dV = \delta Q$

$\delta Q = \ \frac{dE\ \ V\ dT}{dT} + \frac{4E}{3} dV$

Or le deuxième principe de la thermodynamique donne

$dS = \frac{\delta Q}{T}$

d'où

$$dS = \frac{dE\ V}{TdT} dT + \ \frac{4E}{3T} dV$$

Comme dS est une différentielle totale on a:

$$\left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T = \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_V$$

c'est-à-dire

$$\frac{d}{dV}\left(\frac{dE\ V}{TdT}\right) = \frac{d}{dT}\left(\frac{4E}{3T}\right)$$

$$\frac{dE}{TdT} = \frac{4}{3}\frac{\frac{dE}{dT}T - E}{T^2}$$

$$\frac{dE}{dT} = \frac{4}{3}\frac{\frac{dE}{dT}T - E}{T}$$

$$3\frac{dE}{dT} = 4\frac{dE}{dT} - 4\frac{E}{T}$$

$$\frac{dE}{E} = 4\frac{dT}{T}$$

$\ln(E) = \ln(T^4) + \ln(\sigma)$

$\ln(E) = \ln(\sigma T^4)$

d'où

$E(T) = \sigma T^4$ (loi Stefan-Boltzmann, $\sigma = 7{,}56\ .\ 10^{-16}$)

2*) En suite, beaucoup plus tard on a pu montrer que $\rho(\nu,T)$ est de la forme :

$$\rho(\nu, T) = a\nu^3\ f(\frac{\nu}{T})$$

a = constante, f(x) = fonction à une seule variable.

Allons-y,

D'abord on montre que

$$d(\rho V) = \frac{\nu}{3}\frac{\partial\rho}{\partial\nu}dV$$

d'où

$$d\rho\, V + \rho dV = \frac{\nu}{3}\frac{\partial\rho}{\partial\nu}dV$$

$$d\rho = (\frac{\nu}{3}\frac{\partial\rho}{\partial\nu} - \rho)\frac{dV}{V}$$

d'autre part

$dU = \delta Q + \delta W$

mais $\delta Q = 0$ (transformation adiabatique)

$dU = \delta W = -PdV = -\frac{E}{3}dV$

$dU = d(EV) = d(\sigma T^4 V) = 4\sigma T^3 V\, dT + \sigma T^4\, dV$

$$-\frac{E}{3}dV = 4\sigma T^3 V\, dT + \sigma T^4\, dV$$

$$-\frac{E}{3}dV = 4\sigma T^4 V\frac{dT}{T} + \sigma T^4\, dV$$

$$-\frac{E}{3}dV = 4EV\frac{dT}{T} + E\, dV$$

$$-\frac{1}{3}dV = V\frac{dT}{T}$$

$$dT = -\frac{T}{3}\frac{dV}{V}$$

comme

$$d\rho = (\frac{\nu}{3}\frac{\partial\rho}{\partial\nu} - \rho)\frac{dV}{V}$$

et

$$d\rho = \frac{d\rho}{dT}dT$$

$$\left(\frac{\nu}{3}\frac{\partial\rho}{\partial\nu} - \rho\right)\frac{dV}{V} = \frac{d\rho}{dT}dT$$

$$\left(\frac{\nu}{3}\frac{\partial\rho}{\partial\nu} - \rho\right)\frac{dV}{V} = \frac{d\rho}{dT}\left(-\frac{T}{3}\frac{dV}{V}\right)$$

$$\left(\frac{\nu}{3}\frac{\partial\rho}{\partial\nu} - \rho\right) = \frac{d\rho}{dT}\left(-\frac{T}{3}\right)$$

$$\nu\frac{\partial\rho}{\partial\nu} + T\frac{\partial\rho}{\partial T} = 3\rho$$

on va chercher les solutions de la forme:

$$\rho(\nu, T) = g(\nu)f\left(\frac{\nu}{T}\right)$$

$$\nu\frac{\partial\rho}{\partial\nu} = \nu g'(\nu)f\left(\frac{\nu}{T}\right) + g(\nu)\frac{\nu}{T}f'\left(\frac{\nu}{T}\right)$$

$$T\frac{\partial\rho}{\partial T} = -g(\nu)\frac{\nu}{T}f'\left(\frac{\nu}{T}\right)$$

d'où

$$\nu\frac{\partial\rho}{\partial\nu} + T\frac{\partial\rho}{\partial T} = \nu g'(\nu) f\left(\frac{\nu}{T}\right) = 3g(\nu) f\left(\frac{\nu}{T}\right)$$

$$\nu g'(\nu) = 3g(\nu)$$

$$\frac{g'}{g} = \frac{3}{\nu}$$

$\ln(g) = \ln(\nu^3) + \ln(a)$

$g(\nu) = a\nu^3$

finalement $\rho(\nu,T)$ est de la forme

$$\rho(\nu, T) = a\nu^3 f\left(\frac{\nu}{T}\right)$$

c'est tout ce qu'on sait sur $\rho(\nu,T)$!!

3*) En 1896 Wien propose empiriquement la formule

$$\rho(\nu, T) = a\nu^3 e^{-b\frac{\nu}{T}}$$

où a, b sont des constantes

ça marche pour les hautes fréquences ν, mais fausse pour les basses fréquences

4*) Il faut attendre jusqu'en 1900 pour que Rayleigh reprenne le problème ...

Lorsqu'on chauffe un corps noir, il rayonne et la cavité contient des ondes stationnaires qui se comportent comme des oscillateurs harmoniques, on les nomme les modes. Soit N(ν) la densité de modes (par unité de volume), il vaut par définition:

$$N(\nu) = \frac{1}{V}\frac{dK}{d\nu}$$

K(ν) = le nombre de vecteurs d'onde associés à la fréquence ν, V=volume du corps noir.

Autrement dit N(ν)dν = le nombre de modes ayant la fréquence entre ν et ν+dν.

Pour simplifier, on suppose que la cavité du corps noir est cubique $V=a^3$ (la forme de la cavité est peu importe d'après la loi de Kirchhoff)

Voyons sur 1D :

Soit [0,κ] un segment, on divise [0,κ] en K parties égales $\frac{2\pi}{a}$, et chaque vecteur d'onde occupe $\frac{2\pi}{a}$, donc il y a K vecteurs d'onde dans [0,κ]

$$K = \frac{\kappa}{\left(\frac{2\pi}{a}\right)}$$

Mais chaque onde possède 2 polarisations (gauche, droit), donc le nombre de vecteurs d'onde est en réalité vaut :

$$K = 2\frac{\kappa}{\left(\frac{2\pi}{a}\right)}$$

passons en 3D:

Chaque vecteur d'onde occupe le volume $\left(\frac{2\pi}{a}\right)^3$, donc il y a K vecteurs d'onde dans le volume $\frac{4}{3}\pi\kappa^3$

$$K = \frac{\frac{4}{3}\pi\kappa^3}{\left(\frac{2\pi}{a}\right)^3}$$

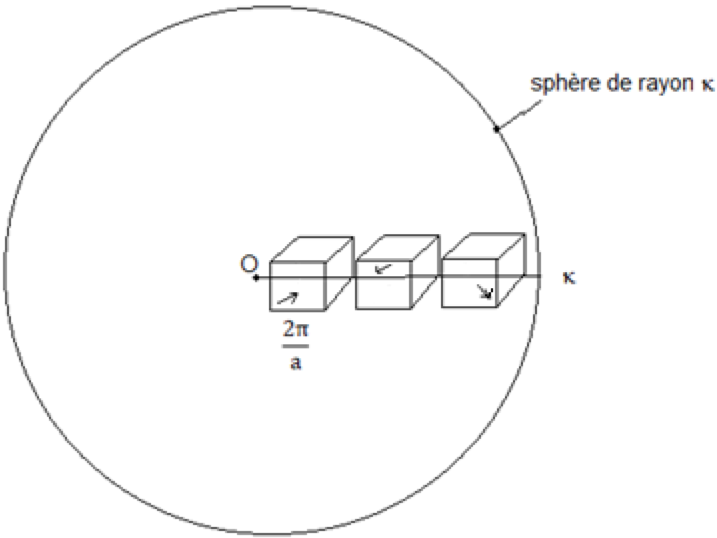
Comme l'onde a 2 polarisations (gauche, droite) , le nombre de vecteurs d'onde K(ν) associé à la fréquence ν est donné par :

$$K(\nu) = 2\frac{\left(\frac{4}{3}\pi\kappa^3\right)}{\left(\frac{2\pi}{a}\right)^3}$$

¤2 → l'onde a 2 polarisations (gauche, droite)

¤ $\frac{4}{3}\pi\kappa^3$ → volume du sphère de rayon κ

¤ $\left(\frac{2\pi}{a}\right)^3$ → volume du réseau



nombre de vecteurs d'onde

comme

$$\kappa = \frac{2\pi\nu}{c}$$

ça donne

$$K(\nu) = 2\frac{\left(\frac{4}{3}\pi\kappa^3\right)}{\left(\frac{2\pi}{a}\right)^3} = 2a^3\frac{\left(\frac{4}{3}\pi\right)}{(2\pi)^3}\left(\frac{2\pi\nu}{c}\right)^3$$

$$K(\nu) = 2\ a^3\ \frac{4}{3}\pi\left(\frac{\nu}{c}\right)^3$$

¤2 → l'onde a 2 polarisations (gauche, droite)

¤$a^3 \rightarrow$ volume du corps noir

¤$\frac{4}{3}\pi\left(\frac{\nu}{c}\right)^3 \rightarrow$ volume du sphère de rayon $\frac{\nu}{c}$

Soit

$$N(\nu) = \frac{1}{V}\frac{dK}{d\nu} = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}$$

d'autre part si L(ν) l'énergie que reçoit la fréquence ν, d'après la thermodynamique L(ν) vaut:

$$L(\nu) = \frac{\int_0^{+\infty} xe^{-\frac{x}{kT}}dx}{\int_0^{+\infty} e^{-\frac{x}{kT}}dx}$$; (k=constante de Boltzmann)

Pour le haut, on va faire une intégration par partie

$$\begin{cases} u = x \rightarrow u' = 1 \\ v = e^{-\frac{x}{kT}} \rightarrow V = -kTe^{-\frac{x}{kT}} \end{cases}$$

$$\int_0^{+\infty} xe^{-\frac{x}{kT}}dx = \left[-xkTe^{-\frac{x}{kT}}\right]_0^{+\infty} + kT\int_0^{+\infty} e^{-\frac{x}{kT}}dx$$

$$\int_0^{+\infty} xe^{-\frac{x}{kT}}dx = kT\int_0^{+\infty} e^{-\frac{x}{kT}}dx$$

d'où

L(ν) = kT

on a donc

$\rho(\nu,T) = N(\nu)L(\nu)$

d'où la formule de Rayleigh-Jeans

$$\rho(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} kT$$

ça marche pour des petites fréquences, elle est fausse pour des hautes fréquences, mais cette formule pose un énorme problème car

$$E(T) = \int_0^{+\infty} \frac{8\pi\nu^2}{c^3} kT \, d\nu = +\infty$$

on a une énergie infinie dans la cavité ce qui est absurde ! en effet ça signifie que nos fours: four à micro-onde , four à pain, four à pizza, four à verre seront tous explosés !!! ce qu'on appelle la "catastrophe ultraviolette".

Tout ça signifie qu'il y a quelque chose qui ne va pas dans la physique classique !

→La résolution du 1er problème (par Einstein en 1905) conduit à la relativité restreinte puis la relativité générale (1915).

→Quant-à la résolution du 2ème problème (par Planck en 1900) conduit à la naissance de la physique quantique !

<u>NOTE</u> : Il y a une différence entre $\rho(\nu,T)$ et $\rho(\nu,T)d\nu$

$\rho(\nu,T)$ = densité (d'énergie)

$\rho(\nu,T)d\nu$ = l'énergie (par unité de volume, dans 1 cm^3 par ex) formée par les modes (dans 1 cm^3) ayant la fréquence entre ν et $\nu+d\nu$, on dira simplement l'énergie "dans $d\nu$"

de même pour $N(\nu)$ et $N(\nu)d\nu$

$N(\nu)$ = densité (de modes)

$N(\nu)d\nu$ = le nombre de modes (dans 1 cm^3) ayant la fréquence entre ν et $\nu+d\nu$, on dira simplement le nombre de modes "dans $d\nu$".

Voyons comment Planck résout le 2ème problème.

Planck suppose que les échanges de l'énergie entre le rayonnement ν et la matière (les atomes de la parois de la cavité) ne sont pas continues mais discrètes par parquets de :

$E_n = nh\nu$ (h=constante de Planck, n=entiers ≥ 0)

d'autre part, la thermodynamique nous dit que le nombre de photons qui ont cette énergie E_n est

$$\alpha_n = e^{-E_n u}$$

où $u = \frac{1}{kT}$

Alors la fréquence ν reçoit la quantité d'énergie

$$L(\nu) = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n E_n}{\sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n}$$

comme

$$\frac{d(e^{-E_n u})}{du} = -E_n e^{-E_n u}$$

$$L(\nu) = \frac{-\sum_{n=0}^{\infty}\left(e^{-E_n u}\right)'}{\sum_{n=0}^{\infty}\alpha_n} = -\frac{\left(\sum_{n=0}^{\infty} e^{-nh\nu u}\right)'}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-nh\nu u}}$$

en posant

$$Z(u) = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-nh\nu u}$$

$$L(\nu) = -\frac{Z'}{Z} = -\frac{d}{du}(\mathrm{Ln}\, Z) = \frac{d}{du}\left(\mathrm{Ln}\,\frac{1}{Z}\right)$$

or

$$Z(u) = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-nh\nu u} = \sum_{n=0}^{\infty}(e^{-h\nu u})^n = \frac{1}{1-e^{-h\nu u}}$$

d'où

$$L(\nu) = \frac{d}{du}\left(\mathrm{Ln}\left(1-e^{-h\nu u}\right)\right) = \frac{h\nu\, e^{-h\nu u}}{1-e^{-h\nu u}}$$

$$L(\nu) = \frac{h\nu}{e^{h\nu u}-1} = \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}}-1}$$

comme

ρ(ν,T) = N(ν)L(ν)

finalement on a la formule de Planck

$$\rho(\nu,T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}\frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}$$

<u>Remarque important</u> :

A) Dans la formule

$$\rho(\nu,T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}\frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}$$

si on veut utiliser la longueur d'onde λ au lieu de la fréquence ν , il ne suffit pas de remplacer ν par $\frac{c}{\lambda}$ dans ρ(ν,T), il faut remplacer aussi les bornes d'intégration ainsi que la différentielle dν !

En effet l'énergie E(T) est définie à partir d'une intégrale, autrement dit on fait un changement de variable dans

$$E(T) = \int_0^{+\infty} \rho(\nu,T)\, d\nu$$

et ça devient

$$E(T) = \int_0^{+\infty} \mu(\lambda,T)\, d\lambda$$

on a

$$\nu = \frac{c}{\lambda}$$

$\Rightarrow d\nu = -\frac{c}{\lambda^2}d\lambda$

et qd $\nu \to 0$, $\lambda \to +\infty$; qd $\nu \to +\infty$, $\lambda \to 0$

$$\int_0^{+\infty} \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} \, d\nu = -\int_{+\infty}^{0} \frac{8\pi}{c^3} \frac{c^2}{\lambda^2} \frac{c}{\lambda} \frac{h}{e^{\frac{hc}{\lambda kT}} - 1} \frac{c}{\lambda^2} d\lambda$$

$$= \int_0^{+\infty} \frac{8\pi}{\lambda^5} \frac{hc}{e^{\frac{hc}{\lambda kT}} - 1} d\lambda$$

d'où la fonction $\mu(\lambda,T)$

$$\mu(\lambda, T) = \frac{8\pi}{\lambda^5} \frac{hc}{e^{\frac{hc}{\lambda kT}} - 1}$$

Autrement dit

→ si on utilise la fréquence ν comme variable , la fonction ρ est:

$$\rho(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}$$

→ si on utilise la longueur d'onde λ comme variable, la fonction ρ est:

$$\rho(\lambda, T) = \frac{8\pi}{\lambda^5} \frac{hc}{e^{\frac{hc}{\lambda kT}} - 1}$$

B) C'est la première fois qu'on introduit le concept "quantification" c'est-à-dire une grandeur physique varie discrètement alors que classiquement toutes les grandeurs varient de façon continue.

Ici c'est l'énergie que est quantifiée : $E_n = nh\nu$.

C) À partir de la loi de Planck on peut retrouver la lois de Rayleigh-Jeans et la loi de Wien

$$\frac{8\pi\nu^2}{c^3}\frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}}-1} = \begin{cases} \dfrac{8\pi\nu^2}{c^3}kT \text{ si } h\nu \ll kT \\ \dfrac{8\pi h}{c^3}\ \nu^3 e^{-\frac{h}{k}\frac{\nu}{T}} \text{ si } h\nu \gg kT \end{cases}$$

<u>Note</u> : toutes ces fonctions sont bien de la forme

$a\nu^3 f(\frac{\nu}{T})$

$$\rightarrow \frac{8\pi\nu^2}{c^3}\frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}}-1} = \frac{8\pi h}{c^3}\ \nu^3 \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{kT}}-1}$$

$$\rightarrow \frac{8\pi\nu^2}{c^3}kT = \frac{8\pi k}{c^3}\ \nu^3 \frac{1}{\frac{\nu}{T}}$$

¤ <u>Loi de Stefan-Boltzmann (1880)</u>

on a

$$\rho(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}\frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}}-1}$$

$$E(T) = \frac{8\pi h}{c^3}\int_0^{+\infty} \frac{\nu^3}{e^{\frac{h\nu}{kT}}-1}d\nu$$

on pose

$x = \frac{h\nu}{kT} \Rightarrow dx = \frac{h}{kT}d\nu$

et qd $\nu \to 0$, $x \to 0$; qd $\nu \to +\infty$, $x \to +\infty$

$$\int_0^{+\infty} \frac{\nu^3}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} d\nu = \int_0^{+\infty} \left(\frac{kT}{h}\right)^3 \frac{x^3}{e^x - 1} \frac{kT}{h} dx$$

$$= \left(\frac{kT}{h}\right)^4 \int_0^{+\infty} \frac{x^3}{e^x - 1} dx$$

comme

$$\int_0^{+\infty} \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \frac{\pi^4}{15}$$

d'où

$$= \left(\frac{kT}{h}\right)^4 \int_0^{+\infty} \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \left(\frac{kT}{h}\right)^4 \frac{\pi^4}{15}$$

$$E(T) = \frac{8\pi h}{c^3} \left(\frac{kT}{h}\right)^4 \frac{\pi^4}{15} = \frac{8\pi^5 k^4}{15 c^3 h^3} T^4$$

$$E(T) = \sigma T^4$$

où

$$\sigma = \frac{8\pi^5 k^4}{15 c^3 h^3} = 7{,}56 \, . \, 10^{-16}$$

¤ <u>Loi de Wien (1893)</u>

$$\rho(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}$$

si on pose

$$x = \frac{h\nu}{kT}$$

$$\rho(\nu, T) = \frac{8\pi h}{c^3}\left(\frac{kT}{h}\right)^3 \frac{x^3}{e^x - 1}$$

$$f(x) = \frac{x^3}{e^x - 1}$$

trouver un maximum de ρ revient à trouver un maximum de f.

$$f'(x) = \frac{3x^2(e^x - 1) - x^3e^x}{(e^x - 1)^2}$$

$$f'(x) = 0$$

$$3x^2(e^x - 1) - x^3e^x = 0$$

$$3(e^x - 1) - xe^x = 0$$

$$3e^x - 3 - xe^x = 0$$

$$e^x(3 - x) - 3 = 0$$

qui donne 2 solutions

x=0

x≈2,82144 (solution numérique donnée par https://www.dcode.fr/solveur-equation)

comme

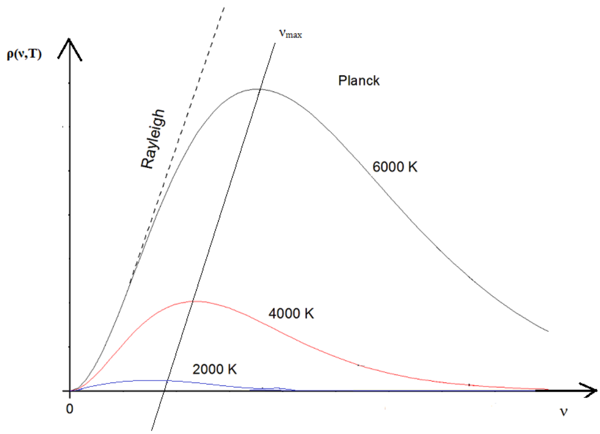
$$x = \frac{h\nu}{kT}$$

d'où

$$\nu_{max} = 2{,}82144\frac{kT}{h}$$

ν_{max} = CT (C=constante)

On voit que les ν_{max} se trouvent sur une droite de pente positive, et que cette loi permet de connaître la température (T) du four en fonction de la couleur (ν) des flammes.



Loi de Wien en ν

De même pour la longueur d'onde λ

$$\mu(\lambda, T) = \frac{8\pi}{\lambda^5}\frac{hc}{e^{\frac{hc}{\lambda kT}} - 1}$$

posons

$$x = \frac{hc}{\lambda kT}$$

$$\mu(\lambda, T) = \frac{8\pi}{\lambda^5} \frac{hc}{e^{\frac{hc}{\lambda kT}} - 1} = 8\pi hc \left(\frac{kT}{hc}\right)^5 \frac{x^5}{e^x - 1}$$

$$g(x) = \frac{x^5}{e^x - 1}$$

trouver un maximum de μ revient à trouver un maximum de g.

$$g'(x) = \frac{5x^4(e^x - 1) - x^5 e^x}{(e^x - 1)^2}$$

$$g'(x) = 0$$

$$e^x(5 - x) - 5 = 0$$

qui donne la solution positive >0

x≈4,96511 (solution numérique donnée par https://www.dcode.fr/solveur-equation)

comme

$$x = \frac{hc}{\lambda kT}$$

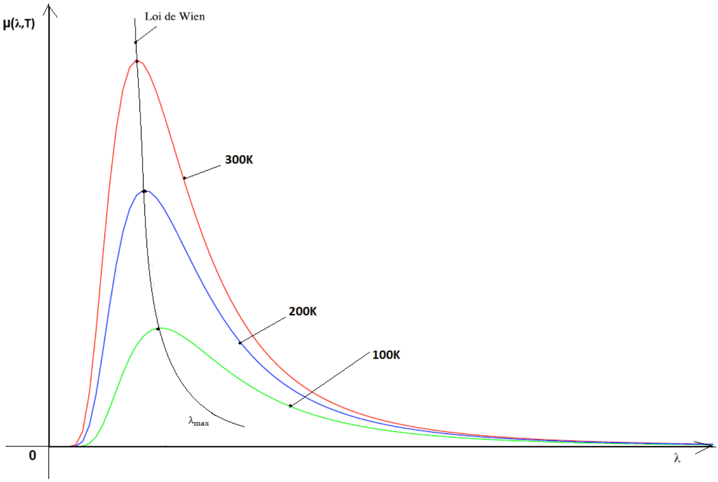
d'où

$$\lambda_{max} = \frac{hc}{4{,}96511kT}$$

$$\lambda_{max}\,T = C^{te} = 2{,}898\,.\,10^{-3}$$

$$\lambda_{max} = \frac{C}{T}\ ; C = \text{constante}$$

On voit que les λ_{max} se trouvent sur une hyperbole, et que cette loi permet de connaître la température (T) du four en fonction de la couleur (λ) des flammes.



Loi de Wien en λ

<u>Notes utiles</u> :

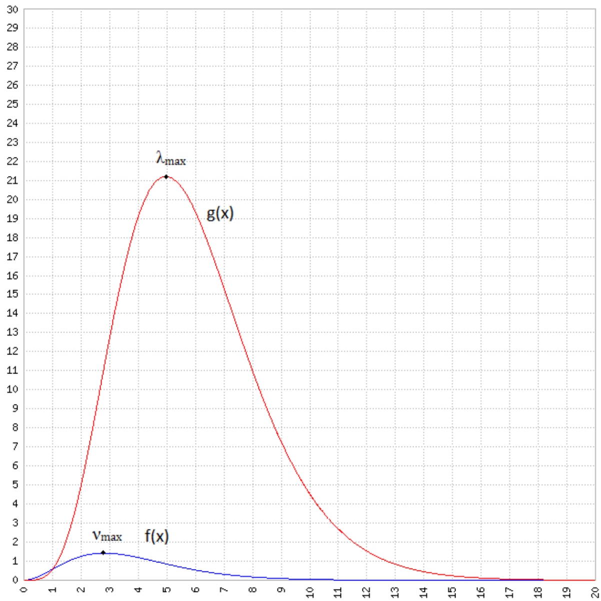
Il est utile de voir comment sont les courbes $\rho(\nu,T)$ et $\mu(\lambda,T)$. Il suffit de voit $f(x)$ pour ρ et $g(x)$ pour μ

$$f(x) = \frac{x^3}{e^x - 1}$$

$$g(x) = \frac{x^5}{e^x - 1}$$

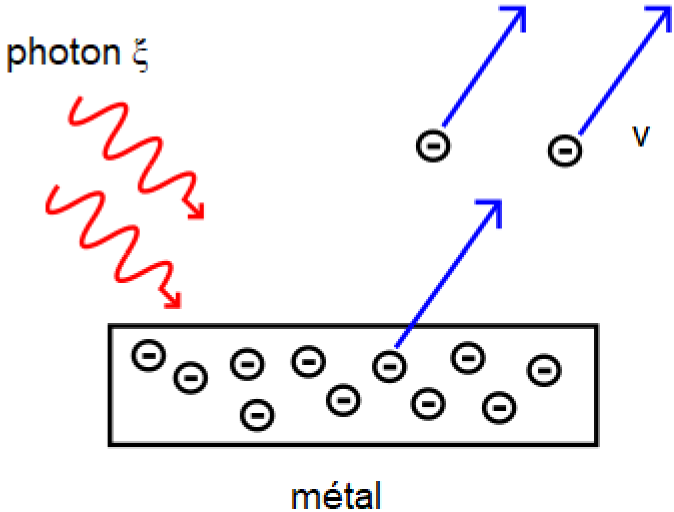
On trace ces courbes grâce au site

https://www.mathe-fa.de/fr



9.3 L'EFFET PHOTOÉLECTRIQUE

Lors qu'on expose un métal sous la lumière il peut arriver que les électrons du métal sortent du métal !! C'est ce qu'on appelle l'effet photoélectrique.



C'est en 1887 que Hertz a découvert l'effet photoélectrique. Il se rendit compte que la lumière incidente doit avoir une certaine fréquence $\nu > \nu_0$ où ν_0 est la fréquence seuil qui dépend du métal.

Il fallait attendre jusqu'à 1905 pour que Einstein explique ce phénomène.

Le photon incident possède une énergie

$E = h\nu$

E doit être plus grande que $E_0 = h\nu_0$ pour arracher les électrons du métal.

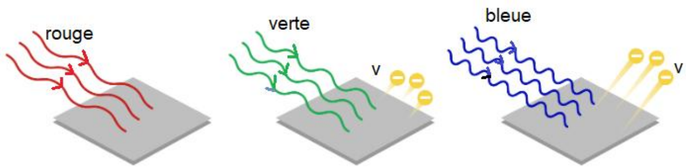
$E > E_0$

plus précisément

$E = E_0 + \frac{1}{2}mv^2$

autrement dit plus ν est grand, plus on arrache les électrons plus facilement et plus les électrons sorties ont une vitesse plus grande.

Si $\nu < \nu_0$ il n'y a pas d'électrons-arrachées même si on augmente l'intensité de la lumière.



rouge<ν_0 , ν_0<verte , ν_0<bleue

C'est ici qu'Einstein introduit la concept de "photon" une particule (corpusculaire) ayant un certain nombre de propriétés:

→ énergie $E=h\nu$

→masse $m=0$

→impulsion $p = \frac{h\nu}{c} u$ (u=vecteur unitaire dans la direction de propagation)

<u>Remarque</u> : la vraie formule $E=mc^2$ est

$E^2 = m^2c^4 + p^2c^2$

Ici on retrouve la quantification de l'énergie du photon $E=h\nu$

9.4 L'ATOME DE BOHR

Depuis longtemps on a trouvé la formule de Ritz de façon empirique c'est-à-dire par des expériences

en longueur d'onde

$$\frac{1}{\lambda_{kn}} = R_\lambda \left(\frac{1}{k^2} - \frac{1}{n^2}\right) \quad ; k = 1,2,3,4,5 \text{ et } k<n$$

ou en fréquence

$$\nu_{kn} = R_\nu \left(\frac{1}{k^2} - \frac{1}{n^2}\right) \quad ; k = 1,2,3,4,5 \text{ et } k<n$$

Il n'y a pas d'explication, pas de démonstration ...

En 1913, Bohr donne une démonstration, ou plutôt un stratagème pour retrouver cette formule, bien que ce n'est pas une démonstration mais Bohr a introduit un concept très important : la quantification du moment cinétique orbital de l'électron.

Voyons voir:

Bohr suppose que l'électron tourne autour du noyau et décrit un cercle de rayon r, et que l'électron est plongée dans le potentiel

$$V_p = -\frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0 r} = -\frac{\kappa^2}{r}$$

avec

$$\kappa^2 = \frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0}$$

et l'accélération vaut

$$\gamma = -\frac{v^2}{r} u_r$$

et la dynamique nous donne

f = mγ

$$f = -\mathrm{grad}V_p = -\frac{\partial V_p}{\partial r} u_r = -m\frac{v^2}{r} u_r$$

$$\frac{\partial V_p}{\partial r} = m\frac{v^2}{r}$$

$$\frac{\kappa^2}{r^2} = m\frac{v^2}{r}$$

$$v^2 = \frac{\kappa^2}{mr}$$

d'autre part Bohr suppose que le moment cinétique orbital $L_z = mvr$ est quantifié

$L_z = n\hbar$

donc

$mvr = n\hbar$

d'où

$m^2v^2r^2=n^2\hbar^2$

$$m^2 \frac{\kappa^2}{mr} r^2 = n^2\hbar^2$$

$$r = \frac{n^2\hbar^2}{m\kappa^2}$$

et l'énergie vaut

$E = E_c + V_p$

$$E = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{\kappa^2}{r}$$

$$E = \frac{1}{2}\frac{\kappa^2}{r} - \frac{\kappa^2}{r} = -\frac{1}{2}\frac{\kappa^2}{r}$$

d'où

$$E_n = -\frac{m\kappa^4}{2n^2\hbar^2}$$

$$E_n = -\frac{1}{(4\pi\varepsilon_0)^2}\frac{mq^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}$$

Pour trouver la formule de Ritz, en fréquence, on utilise la relation $E=h\nu$

Le rayonnement de fréquence ν est donné par

$h\nu = E_n - E_k$; $k<n$

d'où

$$\nu_{kn} = \frac{1}{(4\pi\varepsilon_0)^2}\,\frac{mq^4}{4\pi\hbar^3}\left(\frac{1}{k^2}-\frac{1}{n^2}\right)$$

si on pose

$$R_\nu = \frac{1}{(4\pi\varepsilon_0)^2}\,\frac{mq^4}{4\pi\hbar^3}$$

$$\nu_{kn} = R_\nu\left(\frac{1}{k^2}-\frac{1}{n^2}\right) ;\, k < n$$

Aujourd'hui on sait que l'électron ne tourne pas autour du noyau en décrivant un cercle, pas de position donc pas de vitesse ...

L'explication correcte se trouve dans la physique quantique : la solution de l'équation de Schrodinger permet de calculer l'énergie E_n
On pourrait résumer ainsi : La physique quantique a débuté avec le concept "quantification"

→ Planck (1900) : quantification d'énergie
→ Einstein (1905) : quantification de la lumière, le photon
→ Bohr (1913) : quantification du moment cinétique orbital.

10 DISCUTION SUR LA PHYSIQUE QUANTIQUE

10.1 PRINCIPE DE SUPERPOSITION

J'ai lu beaucoup de livres et des articles sur la physique quantique, mais aucun de ces livres et ces articles me satisfait !!!

En effet souvent ils utilisent des mots, des phrases, des expressions qui sont en contradiction avec eux-mêmes !!!

à mon avis la clé pour comprendre la physique quantique c'est le concept l'état de superposition !!!

La superposition de 2 états comment peut-on la représenter ? pour bien comprend on va suivre le scénario suivant:

Solotop est soit à Paris soit à Lyon, on écrit donc

Soit : |Solotop> = |Paris>

Soit : |Solotop> = |Lyon>

Mais la physique quantique dit que Solotop peut être en état

|Paris> + |Lyon>

Et voilà le big problème ... puisque Solotop est une personne vivant, et on ne peut pas le couper en deux !!!!

La grande difficulté est donc comment représenter l'état (|Paris> + |Lyon>) dans notre monde physique 3D ...

Si vous allez à Paris et que votre ami va à Lyon

et si vous avez de la chance vous rencontrez Solotop à Paris, dans ce cas votre ami ne rencontre pas Solotop à Lyon, et inversement , ce qui est normal.

Mais avant d'arriver à Paris , où est Solotop ??

Voici ce que je fais pour s'en sortir.

On associe 'Paris' par la couleur rouge, 'Lyon' par la couleur vert.

Un disque est peint 1/2 rouge et 1/2 vert, et un pointeur. Si le pointeur pointe sur le rouge ça signifie que Solotop est à Paris, sur vert Solotop est à Lyon.

eh bien ! l'état de superposition |Paris> + |Lyon> est représenté par le disque qui tourne !

Quand le disque tourne, on ne peut pas dire que le disque a à la fois la couleur rouge et vert (traduction on ne peut pas dire que Solotop est à la fois à Paris et à Lyon ! ce qui est une bonne chose, si non il y a une contradiction dans le langage)

Quand on s'arrête le disque, le pointeur pointe sur le rouge ou le vert et si on tombe sur le rouge, ça signifie que Solotop est à Paris, sur le vert Solotop à Lyon.

Tant que le disque ne s'arrête pas , on ne peut rien dire !!

On dit simplement que Solotop est en état de superposition des état |Paris> et |Lyon> mais surtout ne pas dire que Solotop est à la fois à Paris et à Lyon !

... Il est plus facile de représenter l'état |Paris>+|Lyon> par un disque qui tourne et ayant 2 couleurs que par la représentation en localisation avec des km.

Autrement dit:

|rouge> = disque arrêté et rouge

|vert> = disque arrêté et vert

|rouge> + |vert> = (par définition) disque tourne.

Dans la représentation 'Paris', 'Lyon' on voit qu'il y une séparation spéciale entre 'Paris et 'Lyon' ce qui fait qu'il est difficile de représenter l'état de superposition |Paris>+|Lyon>. Par contre dans la représentation 'rouge' et 'vert' on ne voit pas la séparation spéciale donc l'état de superposition |rouge>+|vert> est plus facile à imaginer, à représenter ....

Bref ... le but est représenter quelque chose qui ne soit pas en contradiction en langage elle-même

¤ dualité "corpusculaire-ondulatoire" → contradiction

¤ "l'électron traverse en même temps A et B" → contradiction

¤ fonction "d'onde" → "onde" mot mal adapté.

¤ principe d'incertitude → mauvais vocabulaire ⇒ donne l'impression que la PQ n'est pas précise.

.....

10.2 CHOIX RETARDÉ DE WHEELER

Malgré des efforts que nous avons faits pour que l'exposé soit le plus clair possible et qu'il n'y a pas de contradiction dans le langage. Nous avons éviter d'utiliser des vocabulaires mal adoptés (onde), contre-sens (dualité corpusculaire-onde) ... en introduisant de nouveaux vocabulaire comme grandeur "état" , fonction "Psi", de nouveau concepts comme "l'ombre" d'une particule, s'auto-interférer etc....

Il y a quand même des phénomènes qu'on ne peut pas les expliquer ! même si mathématiquement on sait faire des calculs, trouver des résultats correspondent avec des expériences en laboratoires, mais on ne sait pas expliquer que se passe-t-il réellement dans notre monde physique 3D !

Voici un exemple : Le choix retardé de Wheeler.

Dans l'expérience MZ1, on sait que le photon va 50% en D1 et 50% en D2 .

Dans l'expérience MZ2, on sait que le photon va systématiquement en D1, c'est-à-dire 100% en D1 et 0% en D2

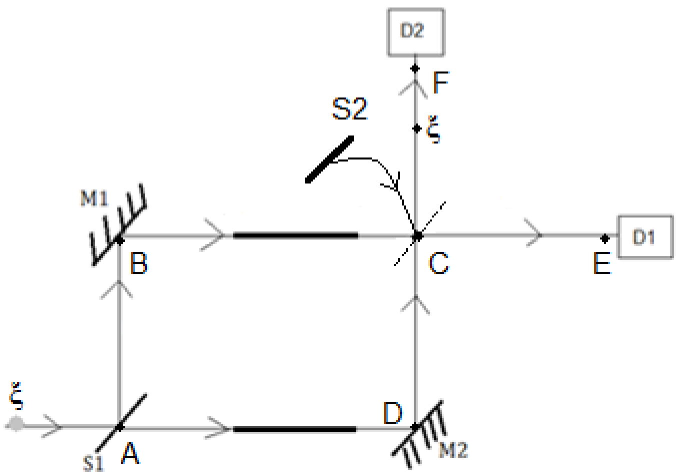
L'idée de Wheeler est suivante:

On laisse le photon traverser le point A et on met aléatoirement le deuxième séparateur S_2 en C.

Le résultat de l'expérience est suivant:

- Quand il y a S_2 le photon va 100% en D1 et 0% en D2.

- Quand il n'y a pas S_2 le photon va 50% en D1 et 50% en D2



→Lorsque le photon arrive en C, c'est facile, il s'auto-interfère (il interfère avec son ombre) et le résultat de cette auto-interférence donne:

- Quand il y a S_2 le photon va systématiquement en D1.

- Quand il n'y a pas S_2 le photon va 50% en D1 et 50% en D2.

→Quand le photon est entre C et E, il va évidemment en D1 qu'il y ait ou non S_2 en C.

Comme le placement de S_2 est aléatoire la situation suivante peut arriver :

Supposons que le photon prend le chemin ADC et il traverse C (pas de S_2 en C), c'est-à-dire il est entre C et F , en ce moment là on met le séparateur S_2 en C. ===> résultat : le détecteur D1 détecte le photon.

Question: Comment le photon qui se trouve dans [CF] sait en C qu'il y a le séparateur S_2 pour "sauter" dans [CE] pour arriver à D1 ?

11 VOCABULAIRE

La matière : Bon on sait ce que c'est, tout le monde sait ce que c'est la matière, on n'a pas besoin de l'expliquer. C'est un concept primitif : on comprend, on le sens on le sait ... etc ...

Le rayonnement : C'est la lumière, une série de fréquences, une série de couleurs, des ondes électromagnétiques, une émission des particules ... etc ....

L'interaction : agir, intervenir, ...

Il y a plusieurs types d'interactions (échange de l'énergie) entre la matière et le rayonnement:

- L'interaction entre la matière et la lumière : c'est la réaction de certains corps lorsqu'ils sont soumis à un rayonnement électromagnétique.

→ La fluorescence : Capacité de certains minéraux à émettre de la lumière à fréquence différente de celle reçue.

Une lumière de fréquence ν arrive sur un certain corps est absorbée et le corps émet une autre lumière de fréquence $\nu' < \nu$ différente de ν.

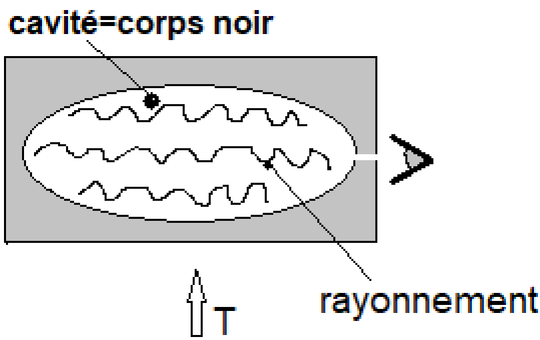
→ La photoélectrique :

Une certaine lumière $\nu > \nu_0$ (ν_0= fréquence seuil du corps) arrive sur un corps et le corps émet des électrons.

- Le rayonnement d'un corps : La possibilité d'un corps d'émettre de la lumière quand on le "chauffe" (on lui apporte de la température) .

→ La barre de fer devient rouge puis blanche lorsqu'elle chauffée.

→ Le corps noir (une cavité fermée) , chauffé il émet des rayonnements (lumières) dans sa cavité (on peut percer un petit trou pour voir , observer, mesurer, étudier ...)



<u>Particule quantique</u> : C'est un objet élémentaire quantique qui est corpusculaire, mais possède des propriétés quantique : s'auto-interférer, spin, polarisation, état, ...

11.1 NOTATION

$\underline{X}$ = grandeur physique (coordonné)

x = valeur (nombre réel) que peut prendre $\underline{X}$

$\hat{X}$ = observable associé à $\underline{X}$ ($\hat{X}$ opérateur de $\mathcal{H}$)

X = opérateur dans $L^2(\mathbb{R})$

$\underline{P_x}$ = grandeur impulsion suivant x

p = valeur (nombre réel) que peut prendre $\underline{P_x}$

$\hat{P}_x$ = observable associé à $\underline{P_x}$ ($\hat{P}_x$ dans $\mathcal{H}$, l'espace Hilbert des états)

$P_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ = opérateur dans $L^2(\mathbb{R})$

$\underline{R} = \begin{pmatrix} \underline{X} \\ \underline{Y} \\ \underline{Z} \end{pmatrix}$ grandeur coordonnée (vectoriel, pour 3D)

$\hat{R} = \begin{pmatrix} \hat{X} \\ \hat{Y} \\ \hat{Z} \end{pmatrix}$ observable vectoriel associé à $\underline{R}$

$r = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$ vecteur coordonné (pour 3D ; x,y,z réels)

11.2 LES CONSTANTES

Constante de Planck $h = 6{,}62.10^{-34}$Js ; $\hbar = h/2\pi$

Charge élémentaire $q = 1{,}60.10^{-19}$C

Masse de l'électron $m_e = 9{,}10.10^{-31}$kg

Masse du proton $m_p = 1{,}67.10^{-27}$kg

Masse du neutron $m_n = 1{,}68.10^{-27}$kg

TABLE DES MATIÈRES

Du même auteur

¤*1 La conjecture de Fermat*

C'est un livre qui démontre la conjecture de Fermat, (appelé souvent "le dernier théorème de Fermat") en s'appuyant sur deux théorèmes: le théorème de Ribet et le théorème de Wiles. Un document rare et exceptionnel.

¤*2 La Relativité Générale*

Tout sur la Relativité Générale et on trouve une démonstration de l'équation tensorielle d'Einstein à partir du principe moindre action, ce qui est très rare.

¤*3 Le Groupe du Rubik's Cube (Tome I, II)*

Le Rubik's Cube possède un groupe très riche en propriétés et si la partie mathématique du puzzle vous intéresse alors ce livre est pour vous.

¤*4 La Relativité Restreinte*

La Relativité Restreinte est une théorie physique proposée par Einstein pour remplacer la mécanique newtonienne quand la vitesse des objets est proche à celle de la lumière c.

¤*5 Les nombres transcendants*

Les nombres transcendants sont très mystérieux, ils sont partout, beaucoup plus nombreux que les nombres algébriques et pour tant on connaît très peu de ces nombres, le premier est e, puis π, cos(1) , ...

¤*6 Les twists et les maths*

Pour comprendre les propriétés des twists il faut passer par les mathématiques, à chaque twist on associe un groupe et ce sont des propriétés de ce groupe qui expliquent les propriétés du twist.

¤*7 La physique quantique (Tome I, II)*

Si vous voulez savoir ce que c'est la physique quantique , ce livre est pour vous.