

L'équation de Schrödinger en une dimension

Introduction

Nous avons défini une fonction d'onde complexe $\Psi(x, t)$ pour une particule et l'avons interprétée de telle sorte que

$|\Psi(x, t)|^2 dx$ donne la probabilité que la particule se trouve à la position x (dans une région de longueur dx) à

temps t . Comment résoudre cette fonction d'onde ? On suppose qu'elle obéit à une sorte d'équation d'onde similaire à celle qui décrit les ondes classiques (ondes de tension, ondes de pression, ondes électromagnétiques). L'équation d'onde classique, qui est une équation différentielle, peut être résolue sous réserve des conditions imposées par le système étudié. Par exemple, l'équation décrivant les ondes générées par une corde de guitare pincée doit être résolue à condition que les extrémités de la corde soient fixes. Ces conditions sont appelées *conditions aux limites*, et les solutions de l'équation des ondes doivent être compatibles avec elles. Ces solutions donnent une description complète du comportement dynamique de la perturbation ondulatoire dans le milieu.

Pour une seule particule classique, on résout la deuxième loi de Newton $\vec{F} = m\vec{a}$ (qui est aussi une

La deuxième loi de Newton est résolue sous réserve de conditions aux limites (par exemple, la position et la vitesse initiales). La deuxième loi de Newton est résolue sous réserve de conditions aux limites (par exemple, la position et la vitesse initiales) et les solutions $x(t)$ et $v(t)$ (unidimensionnelles) donnent toutes les informations sur la dynamique de la particule à tout moment. Notre équation d'onde quantique jouera le même rôle en mécanique quantique que la deuxième loi de Newton en mécanique classique. Elle représentera l'équation fondamentale du mouvement d'une onde de matière qui, une fois résolue sous réserve de conditions aux limites, nous donnera la fonction d'onde

$\Psi(x, t)$. $\Psi(x, t)$ fournit une description statistique complète de la dynamique de la particule en termes de valeurs moyennes pour les grandeurs dynamiques telles que l'énergie, la quantité de mouvement et la position.¹

Tout comme la deuxième loi de Newton, notre équation d'onde quantique ne peut être dérivée. Elle doit être postulée, puis démontrée comme étant cohérente avec l'expérience. Quelles sont les propriétés que devrait avoir l'équation d'onde quantique ?

(1) Équation différentielle linéaire et homogène. Cela garantit que le principe de superposition est valide, c'est-à-dire que si Ψ_1 est une solution et que Ψ_2 est une solution, alors $\Psi_1 + \Psi_2$ est également une solution. Nous avons vu que nous pouvons construire un paquet d'ondes à partir d'une superposition d'ondes sinusoïdales pures. Si les ondes élémentaires sont des solutions de l'équation d'onde quantique, la superposition garantit que le paquet d'ondes sera également une solution.

(2) Elle doit être cohérente avec les relations de Broglie-Einstein. Ainsi, l'énergie totale $E = hf = \hbar\omega$.

Le moment p de la particule est donné par $p = h / \lambda = \hbar k$.

(3) Elle doit être cohérente avec la conservation de l'énergie, dont on s'attend à ce qu'elle reste valable en mécanique quantique. Ainsi, $K + U = E$, où K est l'énergie cinétique, U l'énergie potentielle et E l'énergie totale, qui se conserve.

¹ Faire l'organigramme : Equation du mouvement+B.C. $\rightarrow \langle p \rangle, \langle x \rangle, E \langle \Psi(x, t) \rightarrow$

Dans ce cours, nous traiterons exclusivement de particules non relativistes. Par conséquent, $K = p^2 / 2m$, et E représente l'énergie mécanique totale (c'est-à-dire la somme des énergies cinétique et potentielle, et *non* l'énergie de masse relativiste).

Obtention de l'équation d'onde de Schrodinger

Construisons maintenant notre équation d'onde par ingénierie inverse, c'est-à-dire que nous partons d'une solution de fonction d'onde et travaillons à rebours pour obtenir l'équation. Nous allons d'abord postuler la fonction d'onde pour le système le plus simple que l'on puisse concevoir : une particule libre. Nous avons vu qu'une onde sinusoïdale pure peut être représentée par

$$\Psi_1(x, t) = A \cos(kx - \omega t). \quad (7.1)$$

Cette onde a une seule valeur précise du nombre d'onde k (quantité de mouvement $\hbar k$) et une seule fréquence (énergie $\hbar \omega$). La quantité de mouvement et l'énergie ne changent pas avec le temps, ce qui est conforme au comportement d'une particule libre. Notez également que le principe d'incertitude d'Heisenberg nous dit que puisque $\Delta E = 0$, la particule a la même énergie précise à tout moment, et puisque $\Delta p = 0$, elle a la même énergie précise à tout moment, et puisque $\Delta p = 0$, elle a la même énergie précise à tout moment, la particule a la même énergie précise à tout moment.

momentum précis dans tout l'espace. [Nous savons que $\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 dx \rightarrow \infty$ mais nous ne nous attarderons pas sur ce détail

dans notre discussion ultérieure.² Toutes les autres propriétés de l'onde se comportent bien, et le mauvais comportement à l'infini n'affectera pas la construction de notre équation d'onde].

Maintenant, l'onde harmonique

$$\Psi_2(x, t) = B \sin(kx - \omega t). \quad (7.2)$$

est une aussi bonne représentation d'une particule libre que l'équation (7.1).³ Il en va de même pour la solution superposée

$$\Psi(x, t) = \Psi_1(x, t) + \Psi_2(x, t) = A \cos(kx - \omega t) + B \sin(kx - \omega t). \quad (7.3)$$

Aspect mathématique : Les nombres complexes

Il est maintenant utile d'introduire l'exponentielle complexe

$$e^{i\vartheta} = \cos \vartheta + i \sin \vartheta \quad (7.4)$$

qui est appelée formule d'Euler. L'équation (7.4) peut être prouvée en utilisant les développements en série de puissance pour

e^x , $\cos x$, et $\sin x$.

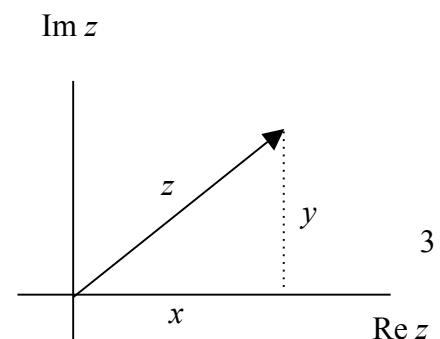
Preuve :

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

$$e^{i\vartheta} = 1 + i\vartheta + \frac{(i\vartheta)^2}{2!} + \frac{(i\vartheta)^3}{3!} + \dots = 1 + i\vartheta - \frac{\vartheta^2}{2!} - \frac{i\vartheta^3}{3!} + \dots$$

$$\cos \vartheta = 1 - \frac{\vartheta^2}{2!} + \frac{\vartheta^4}{4!} - \dots$$

$$\sin \vartheta = \vartheta - \frac{\vartheta^3}{3!} + \frac{\vartheta^5}{5!} - \dots$$



$$i \sin \vartheta = i \vartheta - \frac{1}{3!} i \vartheta^3 + \frac{1}{5!} i \vartheta^5 - \dots$$

$$\cos \vartheta + i \sin \vartheta = 1 + i \vartheta - \frac{1}{2!} \vartheta^2 - \frac{1}{3!} i \vartheta^3 + \dots = e^{i \vartheta}.$$

Considérons le nombre complexe $z = x + iy$

Plan complexe

² Nous pouvons toujours trouver des solutions appropriées par superposition.

³ Tracer avec *Mathematica*

Le *conjugué complexe* de z est $z^* = x - iy$. Le conjugué complexe de tout nombre complexe est obtenu en remplaçant i par $-i$ partout où il apparaît. Notez que $|z|^2 = x^2 + y^2 = z^*z$.

Nous avons soutenu que nous pouvons représenter notre particule libre par la superposition

$\Psi(x, t) = A \cos(kx \mp \omega t) + B \sin(kx \mp \omega t)$. Comme i est une constante, nous pouvons utiliser l'exponentielle complexe à la place de cette somme :

$$\Psi(x, t) = C e^{i(kx - \omega t)} \quad (\text{particule libre se déplaçant dans la direction } +x) \quad (7.5)$$

En outre,

$\Psi(x, t) = D e^{-i(kx + \omega t)}$. (Particule libre se déplaçant en $-x$ direction) (7.6)

Prenons un instantané de notre fonction d'onde, c'est-à-dire que nous fixons le temps, ce qui nous permet de nous concentrer sur la variation spatiale. Notre fonction d'onde Eq. (7.5) devient alors

$$\psi(x) = C e^{ikx}. \quad (7.7)$$

Maintenant, d'après la relation de Broglie, l'énergie cinétique $K = p^2 / 2m = \hbar^2 k^2 / 2m$. D'après l'équation (7.7),

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} = -k^2 C e^{ikx} = -k^2 \psi.$$

D'où,

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} = - \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right) \psi = -K \psi.$$

Or, pour une particule libre, $U = 0$, donc $E = K$. Si U n'est pas nul, alors $K = E - U$. En remplaçant l'équation ci-dessus, on obtient

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} = (E - U) \psi,$$

ou,

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + -U(x) \psi(x) = E \psi(x). \quad (7.8)$$

L'équation (7.8) est l'équation de Schrodinger indépendante du temps (TISE) en une dimension.

Rappelons que nous n'avons pas déduit la TISE, nous avons simplement construit une différentielle.

qui est cohérente avec la fonction d'onde des particules libres. D'autres équations auraient pu être construites, mais il s'est avéré que la TISE est la seule qui soit cohérente avec les résultats expérimentaux dans un grand nombre de systèmes physiques différents.

Nous avons supprimé la dépendance temporelle. Cela peut sembler, à première vue, être une limitation importante. En fait, la forme générale de l'équation de Schrodinger est connue sous le nom d'équation de Schrodinger dépendante du temps (TDSE) :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + U(x,t) \Psi(x,t) = i \hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t}. \quad (7.9)$$

Lorsque l'énergie potentielle est indépendante du temps (ce qui est le cas pour de nombreux systèmes intéressants), les fonctions d'onde satisfaisant au TDSE peuvent toujours être écrites comme suit (en 1 D)

$$\Psi(x, t) = \psi(x)e^{-i\omega t}, \quad (7.10)$$

où $\psi(x)$ satisfait la TISE et $\omega = E / \hbar$. Notez que la fonction d'onde de la particule libre tombe en cette catégorie ($U = 0$) : $\Psi(x, t) = C e^{i(kx - \omega t)} = C e^{i k x} e^{-i \omega t}$.

Ψ_{fp}

$\psi(x)$

Ainsi, dans les cas où U n'est pas une fonction de t , on résout la TISE pour trouver la fonction appropriée $\Psi(x)$, puis on obtient les fonctions d'onde dépendantes du temps $\Psi(x, t)$ en ajoutant le facteur $e^{-i \omega t}$.

États stationnaires

Les solutions $\Psi(x, t)$ obtenues lorsque U n'est pas une fonction de t correspondent à des états qui ont une énergie E définie, qui reste constante dans le temps (conformément au HUP). Ces fonctions d'onde sont appelées *fonctions propres d'énergie* et les valeurs d'énergie correspondantes sont les *valeurs propres d'énergie*. Notez que la densité de probabilité pour une fonction propre d'énergie est indépendante du temps :

$$|\Psi(x, t)|^2 = \Psi^*(x, t) \Psi(x, t) = \psi^*(x) e^{i \omega t} \psi(x) e^{-i \omega t} = |\psi(x)|^2. \quad (7.11)$$

Ainsi, les fonctions propres énergétiques sont appelées *états stationnaires*. Notez qu'il est essentiel que la partie de la fonction d'onde qui dépend du temps soit un nombre complexe ; sinon, la dépendance temporelle ne disparaîtrait pas lorsque le carré du module de la fonction d'onde est calculé. Les fonctions propres de l'énergie jouent un rôle très important en mécanique quantique pour plusieurs raisons. D'une part, l'énergie est souvent mesurée dans les expériences et les valeurs propres de l'énergie sont donc accessibles expérimentalement. Une deuxième raison est que toutes les fonctions (bien conduites) peuvent être exprimées comme des combinaisons linéaires (c'est-à-dire une superposition) de fonctions propres d'énergie.

Caractéristiques de la fonction d'onde et conditions aux limites

Pour le reste du chapitre, nous nous concentrons sur le comportement des solutions $\psi(x)$ à l'équation de temps-

Équation de Schrodinger indépendante. Nous ne considérerons que les cas où l'énergie potentielle est indépendante du temps ; par conséquent, la solution de l'équation de Schrodinger dépendante du temps peut être la suivante

obtenu simplement en multipliant $\psi(x)$ par le facteur exponentiel dépendant du temps discuté ci-dessus.

Les solutions acceptables de l'EIT doivent être continues (bien conduites) partout, y compris aux frontières entre des régions d'énergies potentielles différentes. Cela garantit que la densité de probabilité $|\psi(x)|^2$ est continue. De même, la dérivée première de ψ doit être continue à la frontière entre les régions d'énergie potentielle.

à condition que les changements d'énergie potentielle soient finis.⁴ Enfin, ψ doit être nul à l'infini. Nous énumérons les conditions aux limites qui doivent être satisfaites par les fonctions propres de l'énergie :

- 1) ψ est continue à la frontière entre deux fonctions d'énergie potentielle.
- 2) $d\psi/dx$ est continue à travers une frontière où le changement d'énergie potentielle est fini.⁵
- 3) ψ doit être nulle à l'infini. Cela garantit que $\int_{\text{l'espace}} |\psi(x)|^2 dx$

dx est fini.

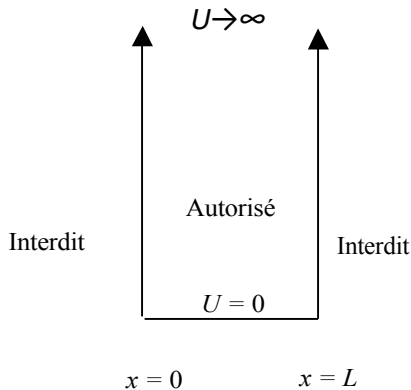
⁴ Les variations de ψ en fonction de la distance, c'est-à-dire la pente, doivent être continues.

⁵ En mécanique quantique, les fonctions d'énergie potentielle sont généralement appelées "potentiels".

Appliquons maintenant la TISE à un système simple - une particule dans un puits de potentiel infiniment profond.

Particule dans une boîte rigide unidimensionnelle (puits carré infini)

L'énergie potentielle est infiniment grande en dehors de la région $0 < x < L$, et nulle à l'intérieur de cette région. La particule est donc confinée à l'intérieur de la boîte. L'EITP de la particule à l'intérieur de la boîte est donnée par



$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} = E \psi(x), \quad (7.12)$$

puisque $U = 0$ à l'intérieur de la boîte. En réécrivant l'équation (7.12), on obtient

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi = 0. \quad (7.13)$$

Fixons

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad (7.14)$$

de sorte

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + k^2 \psi = 0. \quad (7.15)$$

La solution générale de l'équation (7.15) est la suivante

$$\psi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx} \quad (7.16)$$

Notez qu'il y a deux constantes inconnues parce que nous avons résolu une équation différentielle d'ordre 2nd en intégrant deux fois.⁶ Notez également que la solution générale est une combinaison linéaire

(superposition) des deux solutions $A e^{ikx}$ et $B e^{-ikx}$. Ces solutions ne devraient pas nous surprendre

car la particule est "libre" à l'intérieur de la boîte. À l'extérieur de la boîte, c'est-à-dire $x < 0$ et $x > L$, $\psi(x) = 0$, comme nous le verrons plus loin.

Nous devons maintenant satisfaire les conditions aux limites. À $x = 0$ et $x = L$, $\psi(x)$ doit être nulle car

la particule ne peut pas s'échapper de la boîte (cela nécessiterait une quantité infinie d'énergie).⁷ $\psi(0) = 0$

implique que $A + B = 0$, d'après l'équation (7.16). Ainsi, $A = -B$, et nous pouvons écrire

$$\psi(x) = A(e^{ikx} - e^{-ikx}) \quad (7.17)$$

Mais...

$$\sin kx = \frac{e^{ikx} - e^{-ikx}}{2i}. \quad (7.18)$$

Nous pouvons donc réécrire notre fonction d'onde comme suit

$$\psi(x) = C \sin kx,$$

(7.19)

où $C = 2iA$.

⁶ Deux intégrations donnent deux constantes.

⁷ Nous avons invoqué la continuité de la fonction d'onde.

$$\begin{aligned} \psi(L) = 0 & \text{ implique } C \sin kL = 0, \\ & \text{c'est-à-dire } \sin kL = 0, \end{aligned} \quad (7.20)$$

puisque $C \neq 0$ (sinon il n'y aurait pas de fonction d'onde ni de particule). Cela signifie que les valeurs de k sont limitées :

$$\begin{aligned} kL &= n\pi, \text{ c'est-à-dire,} \\ k &= \frac{n\pi}{L}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \end{aligned} \quad (7.21)$$

Ainsi, k est quantifié. Notez que la longueur d'onde de Broglie $\lambda = 2\pi/k = 2L/n$. Il s'agit de la même longueur d'onde que la longueur d'onde de Broglie.

résultat obtenu pour des ondes stationnaires sur une corde de longueur L fixée aux deux extrémités. Ainsi, les fonctions d'onde pour une particule dans une boîte 1D sont des ondes stationnaires. [Remarque : $\sin kx = (e^{ikx} - e^{-ikx}) / 2i$ est la superposition de deux ondes progressives de moments égaux et opposés. (La dépendance temporelle est supprimée.)]

D'après l'équation (7.14), nous avons

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (7.22)$$

En remplaçant k , on obtient

$$E \equiv E_n = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (7.23)$$

Ainsi, l'énergie de la particule est *quantifiée*. Notez que la quantification découle de la satisfaction des conditions aux limites. L'énergie de l'état fondamental⁸ est donnée en fixant $n = 1$:

$$E = E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}. \quad (7.24)$$

Remarquez que cette énergie de l'état fondamental est juste l'énergie du point zéro pour ce système, puisque $U = 0$ à l'intérieur de la boîte. Notez également qu'elle est cohérente avec l'énergie du point zéro dérivée de l'analyse de l'énergie du point zéro.

Principe d'incertitude : $K_{\text{av}} \geq \hbar^2 / 2mL^2$.

Nous pouvons écrire l'expression générale de l'énergie en termes d'énergie de l'état fondamental :

$$E_n = n^2 E_1. \quad (7.25)$$

Remarquez que le changement d'énergie entre les niveaux consécutifs augmente à mesure que n augmente.⁹

⁸ État le moins énergétique.

⁹ Image : Rohlf, p. 198

Comme l'énergie totale E de la particule dans le puits est toujours inférieure à l'énergie potentielle partout à l'extérieur du puits ($U = \infty$), la particule est piégée ou *liée*. Ainsi, les énergies données ci-dessus sont les énergies de l'état lié¹⁰ pour une particule dans un puits carré infini à une dimension.

Pour compléter notre solution, nous devons évaluer la constante C dans la fonction d'onde. Pour ce faire, nous imposons la condition que la fonction d'onde soit *normalisée*, c'est-à-dire que la probabilité de trouver la particule n'importe où dans l'espace soit de 1. Cela signifie que

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n(x)|^2 dx = 1. \quad (7.26)$$

Puisque $\psi_n(x) = 0$ à l'extérieur de la boîte, la relation ci-dessus peut être réécrite comme suit

$$\int_0^L |\psi_n(x)|^2 dx = 1. \quad (7.27)$$

Or $\psi_n(x) = C \sin(n\pi x/L)$ donc en substituant pour $\psi_n(x)$ on obtient

$$C^2 \int_0^L \sin^2 \left(\frac{n\pi x}{L} \right) dx = 1, \quad (7.28)$$

ou $C^2 (L/2) = 1$, c'est-à-dire $C = \sqrt{2/L}$. Nous choisissons habituellement C comme étant réel, et nous trouvons donc

$$C = \sqrt{\frac{2}{L}}. \quad (7.29)$$

C est appelée la *constante de normalisation*. Ainsi, la fonction d'onde complète est

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L}. \quad (7.30)$$

Densités de probabilité [Afficher les graphiques]

Notez que les points où $\psi_n(x) = 0$, c'est-à-dire les *nœuds*, la densité de probabilité est toujours nulle. Ainsi, si une mesure de la position de la particule est effectuée, la particule ne sera jamais trouvée aux nœuds. Cependant, aux points situés à mi-chemin entre les nœuds, où l'amplitude de l'onde est de plus grande (*antinœuds*), la densité de probabilité est maximale, de sorte que la particule sera très probablement se trouvent à ces positions, lorsqu'une seule mesure de position est effectuée. Si plusieurs mesures sont effectuées sur une seule particule ou si des mesures uniques sont effectuées sur plusieurs particules identiques, la particule se trouvera le plus souvent aux antinodes.

Étant donné que la densité de probabilité, c'est-à-dire la probabilité *par unité de longueur* dans

une dimension, est $\psi(x)^2$,
la probabilité de trouver la particule entre les positions x_1 et x_2 est de

¹⁰ Il existe un nombre infini d'énergies d'état lié pour le puits infiniment profond.

$$P = \int_{x_1}^{x_2} |\psi(x)|^2 dx. \quad (7.31)$$

Valeurs attendues

La densité de probabilité nous indique la probabilité (par unité de longueur) pour la particule de se trouver à une certaine position lors d'une seule mesure ou, de manière équivalente, la fréquence à laquelle elle se trouvera à cette position lors de nombreuses mesures identiques (avec le système dans le même état). Si nous effectuons de nombreuses mesures de position, la valeur moyenne ou la *valeur d'espérance* de la position est calculée comme suit

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 x dx. \quad (7.32)$$

L'équation (7.32) n'est strictement correcte que si $\psi(x)$ est normalisée. La valeur espérée définie dans l'équation (7.32) est cohérente avec notre notion de moyenne : nous prenons chaque valeur de x , la pondérons par sa fréquence d'apparition, additionnons les valeurs pondérées de x , puis divisons par le nombre total de mesures. Notez que la fréquence divisée par le nombre total de mesures est simplement la probabilité d'occurrence de cette valeur particulière de x .

Notez également que la densité de probabilité pour chaque état du puits carré infini est symétrique autour du point médian du puits. Il s'ensuit que $\langle x \rangle = L/2$ pour tous les états (nous le prouvons ci-dessous).

Exemple : [Krane 1st ed. p. 127-128]

Un électron est piégé dans une région unidimensionnelle de longueur $1,0 \times 10^{-10}$ m (diamètre atomique typique). (a) Quelle quantité d'énergie doit être fournie pour exciter l'électron de l'état fondamental au premier état excité ? (b) Dans l'état fondamental, quelle est la probabilité de trouver l'électron dans la région comprise entre $x = 0,090 \times 10^{-10}$ m et $0,110 \times 10^{-10}$ m ? c) Dans le premier état excité, quelle est la probabilité de trouver l'électron entre $x = 0$ et $x = 0,250 \times 10^{-10}$ m ? d) Montrez que la valeur moyenne de x est $L/2$ indépendamment de l'état quantique.

Solution

$$(a) E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} = \frac{(1,05 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s})^2}{2(9,11 \times 10^{-31} \text{ kg})(1,0 \times 10^{-10} \text{ m})^2} = 6,0 \times 10^{-18} \text{ J} = 37 \text{ eV}.$$

Dans l'état fondamental, l'énergie est de E_1 . Dans le premier état excité, l'énergie est de $4E_1$. La différence, qui est l'énergie à fournir, est de $3E_1$ ou 111 eV.

(b) D'après l'Eq.

$$(7.31), \quad \text{probabilité} = \int_{x_1}^{x_2} |\psi(x)|^2 dx = \frac{2}{L} \int_{0,090}^{0,110} \sin^2\left(\frac{\pi x}{L}\right) dx = \left[-\frac{x}{L} + \frac{1}{2\pi} \sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right) \right]_{0,090}^{0,110} = 0,0038 = 0,38\%.$$

(c) Probabilité = $\int_0^L \psi_2(x)^2 dx = \frac{2}{L} \int_0^L \sin^2\left(\frac{2\pi x}{L}\right) dx = \left[-\frac{x}{L} + \frac{1}{4\pi} \sin\left(\frac{4\pi x}{L}\right) \right]_0^L = 0.25$.

Puits carré fini

Bien arrondi

(Ce résultat est bien sûr ce que nous attendons en inspectant le graphique de $\psi_2(x)$. L'intervalle de $x = 0$ à $x = L/4$ contient 25 pour cent de l'aire totale sous la courbe.)

(d) Nous utilisons l'équation (7.32). Puisque $\psi_n(x)$ sauf pour $0 \leq x \leq L$, nous utilisons 0 et L comme limites de l'intégration.

$$\langle x \rangle = \int_0^L |\psi_n(x)|^2 x dx = \frac{2}{L} \int_0^L \sin^2(n\pi x/L) x dx.$$

Ce résultat peut être intégré par parties ou trouvé dans les tableaux d'intégrales ; le résultat est le suivant

$$\langle x \rangle = \frac{L}{2}$$

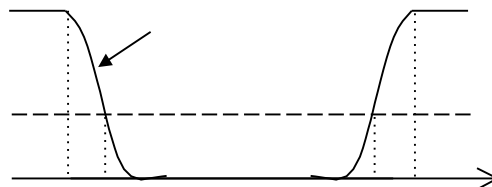
Notons que, comme nous l'avons soutenu plus haut, ce résultat est indépendant de n . Ainsi, la connaissance de la position moyenne de la particule ne donne aucune information sur son état quantique.

Plus l'énergie d'un état est élevée, plus la fonction d'onde correspondante comporte de nœuds. L'état fondamental n'a pas de nœuds, le premier état excité en a un, et ainsi de suite. Ceci est cohérent avec les relations de Broglie-Einstein, car plus il y a de nœuds, plus la longueur d'onde est courte, et une longueur d'onde courte signifie une plus grande quantité de mouvement, qui à son tour implique une plus grande énergie cinétique. [Voir www.falstad.com pour les simulations].

Particule dans une boîte non rigide (puits fini)

[Il s'agit d'un puits circulaire fini].

Très peu de problèmes intéressants en mécanique quantique peuvent être résolus analytiquement, c'est-à-dire en donnant des solutions qui sont des fonctions standard. Pour résoudre des problèmes réalistes, la TISE doit être résolue numériquement. Avant d'aborder la méthode numérique de résolution, examinons quelques propriétés générales des solutions de la TISE pour un puits de potentiel fini.



Nous considérons une particule unique se déplaçant de telle sorte qu'elle possède une énergie potentielle, donnée par l'une des fonctions indiquées ci-dessus.¹¹ Pour des raisons de spécificité, nous nous concentrerons sur le puits arrondi. Maintenant, $E = K + U(x)$. Classiquement, si $E < U_0$, alors la particule est *liée*. Elle peut se déplacer entre les points tournants x_1 et x_2 où $E = U(x)$ c'est-à-dire $K = 0$. Il est interdit à la particule d'entrer dans les régions où $E < U(x)$. Si $E > U_0$, le mouvement est non borné.

Examinons la situation en mécanique quantique. La TISE est

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (U(x) - E) \psi(x) = 0. \quad (7.33)$$

Dans la région à l'intérieur du puits où $U(x) = 0$, les solutions acceptables devraient être très similaires aux solutions d'ondes stationnaires obtenues pour le puits infini. Cependant, les conditions aux limites dans

dans ce cas sont différentes. Puisque $U(x)$ est fini, $\psi(x)$ n'est pas nul à la frontière. Pour comprendre pourquoi, nous allons

examinons la forme des solutions à l'extérieur du puits, c'est-à-dire dans la région classiquement interdite. Dans cette région, $U(x) > E$. Supposons pour l'instant que le puits est presque carré, de sorte que $U(x) \approx U_0$.

Après quelques réarrangements, le TISE devient

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E) \psi(x) = 0 \quad (7.34)$$

Pour une valeur fixe de E , $\frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E)$ est une constante positive. Fixons

$$\alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E). \quad (7.35)$$

L'équation (7.34) devient

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} - \alpha^2 \psi(x) = 0. \quad (7.36)$$

Les solutions sont des exponentielles *réelles* :

$$\psi(x) = Ae^{\alpha x} + Be^{-\alpha x}. \quad (7.37)$$

Or, lorsque $x \rightarrow +\infty$, $e^{\alpha x}$ explose. Ainsi, pour une fonction d'onde acceptable, $A = 0$. D'où, $\psi(x) = Be^{-\alpha x}$ ($x > L$). De même, lorsque $x \rightarrow -\infty$, $e^{-\alpha x}$ explose, nous devons donc fixer $B = 0$.

Ainsi,

$\psi(x) = Ae^{\alpha x}$ ($x < 0$). Notons que $\psi(x) \neq 0$ dans la région classiquement interdite. Cependant, l'onde

décroît exponentiellement avec x .

Les solutions à l'intérieur et à l'extérieur du puits doivent correspondre à la frontière pour que la fonction d'onde soit continue. De même, la dérivée première de ψ doit être continue. La

satisfaction de toutes les conditions aux limites sélectionnera les valeurs correctes de E , c'est-à-dire que les conditions aux limites ne seront satisfaites que pour certaines valeurs *quantifiées* de E .¹² Examinons de plus près la façon dont les conditions aux limites sont satisfaites. et la quantification de E sont liées.

¹¹ Photo : p 100 Six idées

¹² Pour une solution *physiquement acceptable*.

$$\psi \quad \frac{d\psi}{dx^2} > 0$$

$$\psi \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} < 0$$

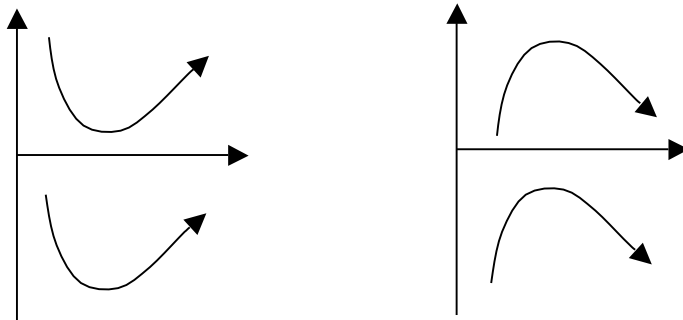
Comment la courbe des fonctions propres de l'énergie évolue-t-elle ?

On constate que la dérivée seconde d'une fonction donne une indication de la *courbure* de la courbe.

$d\psi/dx$ est la pente et $(d\psi/dx)_{dx} = d^2\psi/dx^2$ est la pente de la pente, c'est-à-dire le taux de croissance de la fonction.

changement de la pente. Si $d^2\psi/dx^2 > 0$, la pente augmente et la fonction se courbe vers le haut. Si d

$d^2\psi/dx^2 < 0$, alors la pente diminue et la fonction s'incurve vers le bas.



L'équation de Schrödinger peut être écrite sous la forme $d^2\psi(x)/dx^2 + (2m/\hbar^2)[U(x) - E]\psi(x) = 0$, c'est-à-dire $d^2\psi(x)/dx^2 = f(x)\psi(x)$, où $f(x) \equiv (2m/\hbar^2)[U(x) - E]$. Maintenant, dans l'hypothèse classiquement admise

région, $f(x)$ est négative, puisque $E > U(x)$. Par conséquent, le signe de $d^2\psi/dx^2$ est toujours opposé à celui de

$\psi(x)$. Ainsi, si $\psi(x) > 0$, $d^2\psi/dx^2 < 0$ et la fonction s'infléchit vers l'axe des x (vers le bas).

De plus, lorsque $\psi(x) < 0$, $d^2\psi/dx^2 > 0$, $\psi(x)$ se courbe vers le haut, c'est-à-dire vers l'axe des x . Cela signifie que

$\psi(x)$ sera oscillatoire.¹³ Si $f(x)$ est de grande amplitude (grande énergie cinétique¹⁴), $\psi(x)$ oscille rapidement (nombreux nœuds).

En revanche, si $f(x)$ est positive¹⁵, alors $d^2\psi/dx^2$ et $\psi(x)$ ont toujours le même signe et donc $\psi(x)$ s'éloigne toujours de l'axe des x . Les solutions exponentielles $e^{\pm\alpha x}$ trouvées précédemment ont

cette propriété. Par conséquent, pour obtenir une solution à la TISE qui soit physiquement acceptable pour un état lié, la fonction d'onde et sa pente à la frontière doivent être telles que la solution ondulatoire à l'intérieur du puits corresponde à une exponentielle décroissante à l'extérieur du puits. Cela ne se produit que pour des valeurs particulières de l'énergie E . Pour d'autres valeurs de l'énergie, même légèrement différentes des valeurs E autorisées, la correspondance aux limites sera satisfaite pour les exponentielles qui s'éloignent complètement de l'axe des x , c'est-à-dire que la fonction d'onde explose à $-\infty$ ou $+\infty$. Notez que les fonctions d'onde qui explosent à l'infini sont des solutions acceptables d'un point de vue mathématique, mais pas d'un point de vue physique. Même pour les solutions physiquement acceptables, il

existe une probabilité finie que la particule se trouve dans la région classiquement interdite.¹⁶

¹³ ou ondulatoire

¹⁴ $E - U = K$

¹⁵ Région classiquement interdite

¹⁶ Images : Fig. 8.15-17, 8.19 T&Z, p. 215 Six idées

Résumé des règles d'esquisse des fonctions d'onde

D'après : "Six idées qui ont façonné la physique" par Thomas Moore.

1. Les solutions de l'équation de Schrodinger s'orientent vers l'axe des x dans les régions classiquement autorisées et s'éloignent de l'axe des x dans les régions classiquement interdites. Implication : Les solutions sont ondulatoires dans les régions autorisées et exponentielles dans les régions interdites.

2. La courbure des solutions augmente avec $|E - U(x)|$. Notez que $|E - U(x)|$ correspond à la distance entre la ligne d'énergie et la courbe d'énergie potentielle sur un graphique d'énergie potentielle. Implications :

- Dans les régions classiquement autorisées, la *longueur d'onde locale* de la partie ondulatoire de la solution se raccourcit (c'est-à-dire qu'il y a plus de nœuds) à mesure que $|E - U(x)|$ augmente.
- Dans les régions classiquement interdites, la longueur de toute queue de type exponentiel devient plus courte lorsque l'augmentation de $E - U(x)$ augmente.

3. L'amplitude locale de la partie ondulatoire d'une solution diminue lorsque la valeur de $|E - U(x)|$ augmente. La raison en est que $|E - U(x)|$ est l'énergie cinétique des solutions ondulatoires. Où

Si la valeur de l'indice $E - U(x)$ est plus grande, la particule se déplace plus rapidement et a donc moins de chances d'être trouvée que dans un indice $E - U(x)$.
où $|E - U(x)|$ est plus petit. Ainsi, l'amplitude de $\psi(x)$ diminue.

4. Les solutions sont toujours continues et lisses (pas de coudes) tant que les sauts discontinus dans les $U(x)$ sont finies.

5. Les fonctions d'onde physiquement raisonnables restent finies lorsque $|x| \rightarrow \infty$.

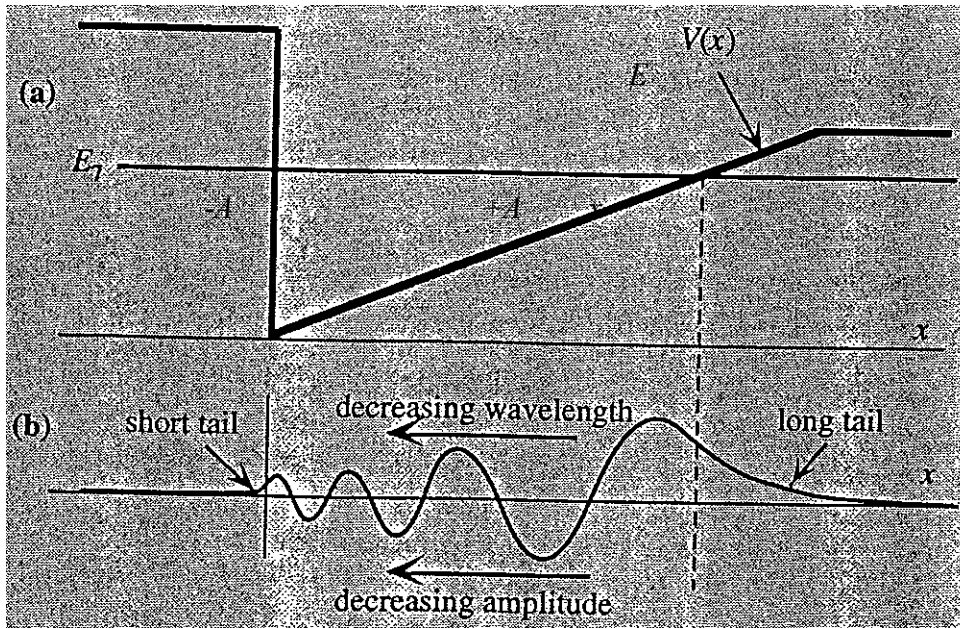
- Les parties exponentielles des solutions physiquement raisonnables pour les particules quantiques *liées* doivent en fait diminuer jusqu'à zéro lorsque $|x| \rightarrow \infty$ dans les régions classiquement interdites qui flanquent la région centrale autorisée.
- Seules certaines valeurs quantifiées de l'énergie E_n donnent lieu à des solutions physiquement raisonnables (c'est-à-dire des fonctions propres de l'énergie) pour les particules quantiques liées.

6. Les fonctions propres d'énergie pour les particules quantiques liées ont un nombre entier de nœuds dans la région centrale classiquement autorisée : plus il y a de nœuds, plus l'énergie correspondante est grande. La fonction propre d'énergie correspondant à l'énergie la plus basse possible de la particule quantique E_1 n'a pas de nœuds dans sa partie ondulatoire. La fonction propre correspondant à l'énergie la plus basse de la particule quantique E_2 a un nœud, et ainsi de suite.

Exemple :

Esquissez la fonction propre d'énergie correspondant à la septième énergie la plus basse possible pour une particule quantique dont l'énergie potentielle en fonction de x est représentée ci-dessous.

$$U(x)$$



[Extrait de "Six idées qui ont façonné la physique"]

L'oscillateur harmonique

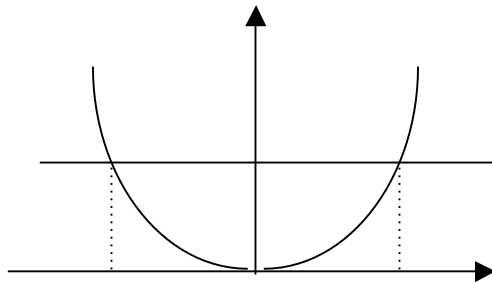
Un oscillateur harmonique est un système qui exécute un mouvement harmonique simple (SHM). Il existe de nombreux exemples de tels systèmes en physique classique, par exemple le pendule simple pour de petites amplitudes vibratoires¹⁷, et un système masse-ressort.

Dans un système ressort-masse, rappelons que la force exercée par le ressort sur la masse est donnée par la loi de Hooke :

$$F = -kx, \quad (7.38)$$

où k est la constante du ressort. L'énergie potentielle de la masse est donnée par

$$U = \frac{1}{2} k x^2. \quad (7.39)$$



¹⁷ Dans ce système et dans beaucoup d'autres, le mouvement est approximatif. SHM

Classiquement, l'oscillateur a des points de retournement à $x = \pm A$, où $E = U$. (Voir la figure ci-dessus.) En mécanique quantique, nous nous attendons à des fonctions d'onde qualitativement similaires à celles du puits carré fini, avec des valeurs non nulles en décroissance exponentielle dans la région classiquement interdite où $E < U$. Des résultats quantitatifs peuvent être obtenus en résolvant la TISE :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2} kx^2 \psi(x) = E \psi(x). \quad (7.40)$$

Classiquement, l'oscillateur a une seule fréquence angulaire donnée par $\sqrt{k/m}$, d'où l'on obtient $k = m\omega^2$. La réécriture de l'équation (7.40) en termes de ω donne

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \psi(x) = E \psi(x). \quad (7.41)$$

Il n'est pas simple d'obtenir la solution de l'équation (7.41), nous nous contenterons donc d'énoncer les résultats (la solution est discutée plus en détail dans un cours plus avancé). (L'énergie E , comme prévu, est quantifiée en raison des conditions aux limites ($\psi(x) \rightarrow 0$ lorsque $x \rightarrow \infty$). Le résultat est

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (7.42)$$

Notes : (1) L'énergie de l'état fondamental $E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega$, qui est l'énergie du point zéro. Dans les solides, les atomes exécutent (approximativement) le SHM. Ainsi, même à $T = 0$ K, les atomes ont de l'énergie en raison de l'énergie du point zéro. Pour l'hélium, l'énergie du point zéro est suffisamment importante pour l'empêcher de geler à des pressions ordinaires, même à $T = 0$ K !

(2) L'espacement entre les niveaux d'énergie successifs est constant.

Propriétés des fonctions d'onde des oscillateurs harmoniques

- Oscillatoire dans la région classiquement autorisée
- Décroissance exponentielle dans les régions classiquement interdites
- Les solutions analytiques sont des fonctions d'Hermite

La grande utilité de l'oscillateur harmonique en physique réside dans le fait que de nombreux systèmes physiques sont oscillants et que, pour les oscillations de faible amplitude, l'oscillateur harmonique est une excellente approximation. ¹⁸

Application de la mécanique quantique : Le microscope à effet tunnel

Si l'énergie totale d'une particule quantique est inférieure à l'énergie potentielle d'une barrière de largeur finie, il existe une probabilité non nulle que la particule puisse traverser la barrière même si $E < U$ dans la région de la barrière. Ce processus est appelé "*effet tunnel*". Il n'existe pas d'analogue classique. Le phénomène d'effet tunnel quantique est à la base du fonctionnement du

¹⁸ Images : p. 105 Six idées ; p. 133 Krane ; tableau 8.1 p. 211 TZ&D

microscope à effet tunnel (STM). Le STM permet d'obtenir des images de surfaces conductrices avec une résolution à l'échelle atomique. Le STM permet d'imager des atomes uniques de manière routinière. Ses inventeurs, G. Binnig et H. Rohrer, ont reçu le prix Nobel en 1986.

¹⁸ Images : p. 105 Six idées ; p. 133 Krane ; tableau 8.1 p. 211
TZ&D