Titre : Equation de Schrödinger et applications

Présentée par : Julie Corjon **Rapport écrit par** : Julie et Rémy

Correcteur : Robin Zeigers **Date** : 24/03/20

Bibliographie de la leçon :			
Titre	**Auteurs**	**Éditeur**	**Année**
Tout-en-Un Physique PC/PC*	**M-N Sanz…**	**Dunod**	2016
Quantique : fondements et applications	Pérez	De Boeck	2013
Cours : L'équation de Schrödinger. Applications. http://lphe.epfl.ch/~mtran/phy_gen_III/Cours/PhysIII_chap-5.pdf	TRAN Minh Tâm		
Vidéos Youtube : Mécanique quantique –Puits infini https://www.youtube.com/watch?v=4jfT10FMTFQ Mécanique quantique –états liés d'un puits fini https://www.youtube.com/watch?v=Y3jxeo2nBiI&t=569s	E-learning Physique		

Plan détaillé

Intro :
La méca ondulatoire a pour origine les travaux de De Broglie, qui étudiait alors les ondes de matière. En l'occurrence, Erwin Schrödinger a ensuite développé cette théorie, notamment en introduisant le concept de fonction d'onde, afin d'étudier la propagation de ces ondes de matière.

I.A)
Postulat de l'équation de Schrödinger (Tout-en-un Dunod 2014) et justifications (cours de M. Tran). Analogie avec d'Alembert, relation de De Broglie pour faire sortir la relation :
hbar ω = hbar² k²/2m +V

I.B) Dunod p 1175
* linéaire
* en 3D
* solution de l'équation : états stationnaires -> analogie avec la corde de Melde

I.C)
Démo pour aboutir à l'ES indépendante du temps (cours Tran) -> à faire de façon concise

II.A)
Perez p 209 : exemple des électrons π délocalisés le long d'un polymère.
Dunod p 1234 : Modèle du puits infini, ES

II.B)
Dunod p 1234 : résolution pour E>0
Quantification de k
E-Learning Physique puits infini : condition de normalisation

II.C)
Dunod + E-learning Physique puits infini
Tracé des modes propres (sur Slide) + similitudes/ différences avec la corde de Melde

II.D)
Dunod p 1236 : niveau d'énergie fondamental
Ordre de grandeur : physique nucléaire (Perez p199), ballon de foot (exemple inventé : L~100m, m~1kg)

III.A)
Modèle du puits fini, états liés, états de diffusion, ES (Dunod p1241)
Continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée
Résolution graphique
Profondeur de pénétration

III.B)
Barrière de potentiel (Dunod p 1250)
Etude coefficient R et T, approximation barrière épaisse, effet tunnel

III.C)
principe du microscope à effet tunnel (Dunod p 1250)
intensité, courant tunnel
Utilisation en topographie et en spectroscopie

CCl : ES postulat fondamental de la MQ. Autres applications : radioactivité alpha, atome d'hydrogène…

Questions posées par l'enseignant

Début de la présentation : on part de l'équation de d'Alembert. Tu as dit que les solutions de cette équation étaient harmoniques, est-ce le cas ?
~~Non, ce sont des ondes stationnaires, la somme d'ondes progressives, éventuellement harmoniques.~~
La solution générale est de la forme f(x-ct) +g(x+ct) pour deux fonctions f et g quelconques. Les ondes planes, progressives et harmoniques sont bien sûr de cette forme et sont donc solutions, mais ce ne sont pas les seules. Elles constituent néanmoins une base de l'espace des solutions.
Quel était l'objectif du lien d'Alembert-Schrödinger ?
Justification de l'équation de Schrödinger à partir d'un cas connu, à savoir la corde de Melde. Tenter de faire l'analogie avec l'équation aux dérivées partielles.
Quel est le statut de l'équation de Schrödinger et quel est le lien avec l'énergie totale donnée ?
Quel est le statut de l'énergie totale pour une particule dans un potentiel V et quel est le lien avec l'équation de Schrödinger ?
Relation de dispersion… **Que représente-t-elle ? Comment l'obtient-on en général ?** En faisant sortir les ik et iw de l'équation de Schrödinger.
Cf commentaires
Relations de de Broglie : ont-elles été démontrées ?
Non, elles sont postulées. **Les deux ?** *De Broglie postule l'expression de la longueur d'onde. Relation de Planck Einstein vient du corps noir.*

« Les solutions de l'ES sont un ensemble d'états stationnaires » ?
~~Le mot « ensemble » est mal choisi. Une solution de l'ES est une onde stationnaire. (ou plutôt un état stationnaire)~~
Les solutions de l'équation de Schrödinger indépendante du temps constituent une base de vecteurs propres du hamiltonien sur laquelle on décompose toute solution de l'équation de Schrödinger dépendant du temps. Analogie avec la corde de Melde dont les modes propres de vibration fournissent une base sur laquelle développer une solution quelconque.
C'est quoi un état stationnaire ?
~~On peut découpler le temps et l'espace dans la fonction d'onde (séparation des variables). On ne peut pas parler d'onde stationnaire car il s'agit de la propagation d'une fonction d'onde et non pas d'une onde.~~
Un état en MQ est la fonction d'onde à une phase globale près (qui ne joue aucun rôle). Un état dont la dépendance temporelle n'intervient qu'à travers un changement de phase globale est un état stationnaire (l'état n'évolue pas dans le temps).

Prendre un potentiel indépendant du temps, est-ce crucial ? Que se passe-t-il dans le cas d'un potentiel dépendant du temps ?
Hors programme de CPGE, mais l'équation de Schrödinger reste identique avec V(x,t) au lieu de V(x).
Aurait-on tout de même une E.S ?
Oui mais la résolution serait plus complexe.
Quel concept de mécanique classique pourrait-on rapprocher du pb considérant une énergie potentielle indépendante du temps ?
~~Analogue à un problème à accélération constante~~
- ➔ On parle de système conservatif

Comment pourrait-on voir la conservation de l'énergie dans le cadre quantique ?
~~Peut-être à partir de la condition de normalisation…~~
On commence par mesurer l'énergie du système, ce qui le projette dans un état propre du hamiltonien. Toute mesure ultérieure de l'énergie fournit alors la même valeur et l'énergie est bien conservée.
Que serait un état non stationnaire ?
Par exemple, somme de deux états d'énergies différentes : : dépendance en temps QUI NE PEUT ÊTRE REDUITE A UN CHANGEMENT DE PHASE GLOBALE.

Que répondre à un étudiant qui vous dirait : « Quand V = 0, l'ES c'est une équation de diffusion! » ?
La fonction d'onde est complexe à priori donc différent du cas de la diffusion.
Est-ce que c'est tout ?
Ordre des dérivées partielles ressemble mais il y a un i dans l'ES (l'équation aussi est complexe, pas seulement la fonction d'onde, donc totalement différent)
*Très bien, tu n'es pas tombée dans le piège ^^*
L'ES ressemble à une équation de diffusion irréversible, faut-il en conclure que l'ES est également irréversible ?
L'ES est réversible.
Comment le voir ? Que se passe-t-il pour un changement de t en -t (pour un potentiel indépendant du temps) ? Que dois-je également changer dans l'équation ?
Il faut prendre le complexe conjugué de l'ES (donc i en -i) et complexe conjuguée de Psi
Pour le calcul des valeurs moyennes d'observable, il n'y aura pas de changement. L'ES est donc réversible.

Peut-on en conclure que tout est réversible en MQ ? Source fondamentale d'irréversibilité ?
Même principe que la diffusion, j'ai dit que le passage d'une particule à travers une barrière de potentiel n'était pas réversible (ceci est faux car il s'agit d'équations indépendantes du temps). Le débordement est un état stationnaire donc indépendant du temps, donc on ne peut pas parler de réversibilité.)
L'ES donne l'évolution temporelle du système quantique.
De ce point de vue-là il n'y a pas d'irréversibilité.
Postulat de la mesure est fondamentalement irréversible. C'est le seul endroit où on introduit une irréversibilité. Donc, tant qu'il n'y a pas de mesures, tout est réversible.

Conservation de la densité de probabilité à partir de l'ES ? Comment le démontrer (par le calcul) ?
On peut le montrer en effectuant psi^*x(ES) - psi x(ES)^* et en intégrant par parties les laplaciens pour obtenir une divergence.
Cf polycopié de Jean Hare p.26
Discussion de l'interprétation des ondes planes et courant (pour écrire les coefficients de réflexion et transmission en fonction des densités de courant)
Comment expliquer le résultat classique qu'on obtient dans ce cas-là ?
Analogie hydrodynamique (cf Dunod p 1207 et suivantes)
Quel serait l'écriture du vecteur densité de courant en utilisant l'analogie dans le cas d'une onde plane ?
Flux = masse vol(ρ)*v et on peut lier la vitesse à l'impulsion qui vaut hbar k.
Quelle est l'analogue de la masse volumique en MQ ?
La densité de probabilité.
Quelle est la densité de probabilité à partir d'une fonction d'onde quelconque en général ?
Module de la fonction d'onde au carré.
Conservation locale de la densité de probabilité ? Réflexion à partir du théorème de Noether, une symétrie est associée à la conservation. Avez-vous une idée de quelle symétrie est responsable de ça ?
Un déphasage global ne change pas l'état : cette symétrie est responsable de la conservation de la probabilité

- ➔ *Que se passe-t-il pour une particule chargée ?*

  Ajout d'un qV et on change l'impulsion en p-qA dans l'expression du hamiltonien
- ➔ *ES dépend explicitement des potentiels, qui dépendent de la jauge. Est-ce un pb ?*

  Une transformation de jauge laisse invariante ES en multipliant la fonction d'onde par un facteur de phase.

Résolution pour le puits infini. Détermination des solutions. Que peut-on dire dans le cas où E<0. Que peut-on dire de l'énergie des états dans le cas d'un potentiel borné par en bas ?
Ces énergies sont toujours supérieures au minimum du potentiel
Il est impossible que son énergie soit inférieure au minium du potentiel
Avez-vous une idée physique de comment montrer ce résultat ?
En MQ, énergie du fondamental non nulle
Quelle est l'origine de cette énergie ?
Il s'agit de l'énergie cinétique
Que peut-on en dire ? Pourquoi cette énergie cinétique ne peut pas être nulle ?
À cause du confinement
Les états liés ont une énergie strictement supérieure au minium car la moyenne de l'énergie cinétique sur n'importe quel état lié est strictement positive. Si celle-ci est nulle alors l'énergie de l'état est au moins le minimum de l'énergie potentielle. Justification par des arguments simples : à partir des inégalités d'Heisenberg.

Avons-nous vraiment résolu l'ES ?
Non, on l'a résolu uniquement pour le cas E>0
Que resterait-il à faire ?
Il faudrait résoudre l'équation d'évolution (ES dépendante du temps).
Quelle serait la résolution générale ?
En multipliant par le terme en exp(-iwt)
Où passe le n, car il y a plusieurs phi_n ? Comment obtenir la solution dépendante du temps ?
Comment évolue chaque phi_n dans le temps ?
Le facteur d'évolution temporel est-il le même pour chaque phi_n ?
Quelle est la solution la plus générale pour la corde de Melde, une fois connu chaque mode propre ?
La résolution donne une base des solutions. La solution générale est donc une combinaison linéaire de chacun de ces phi_n pondéré chacun par l'exp dépendant du temps. Cela dépend des CI.

Application sur l'effet tunnel : mention d'onde évanescente. Comment faire comprendre intuitivement l'effet d'onde évanescente à des étudiantes ?
L'amplitude de la fonction d'onde à tendance à décroitre en dehors de la barrière.
Quel cas classique permettrait de faire une analogie (en optique) ? Dans quelle situation a-t-on qqch de très proche d'un point de vue formel ?
Lame semi-transparente
Réflexion totale : visibilité expérimentale de la décroissance exponentielle, voire réflexion totale frustrée (en mettant un second dioptre) : transmission à travers la barrière
Microscope à effet tunnel fonctionnement?
Deux modes de fonctionnement :

- Mode topographique : on impose un courant constant et la pointe se déplace qu'on peut mesurer

Que mesure-t-on ? et qu'en tirons-nous ?
Barrière entre deux conducteurs (à cause du vide)
On mesure l'intensité (en exponentielle décroissante de …) évanescente
Physiquement, qu'attend-t-on ?
Quand les deux conducteurs sont très éloignés, courant quasi nul et quand ils sont proches un fort courant
Comment maintenir le courant constant en pratique ?
Réalisation d'un asservissement sur le courant tunnel : déplacement verticale de la pointe (par des piézoélectriques) au fur et à mesure de son déplacement latéral sur la surface de l'échantillon afin de maintenir le courant tunnel constant.
Résolution verticale avec ce genre d'appareil ?
Ordre de l'atome (0.01 nm) : résolution verticale
Très bonne résolution car dépendance exponentielle exp{-2a/\delta} où a : distance entre la pointe et l'échantillon et \delta une constante. Ainsi, une petite variation de a engendre une grande variation du courant.
Résolution latérale ? Qu'est-ce qui la détermine ?
Contrôlée par la taille de l'extrémité de la sonde.
Comment scanner des surfaces non conductrices ?

- ➔ *Microscopes à forces atomiques (fonctionnement totalement différent)*
- ➔ *Métallisation de certains échantillons*

À quoi ressemble réellement le potentiel dans le cas du microscope à effet tunnel ?
Cf figure 34.12 Dunod PC
Les sauts correspondent au travail d'extraction des électrons du conducteur vers le vide
Descente : différence de potentiel entre la pointe et la surface de l'échantillon
Calcul du coefficient de transmission (traitement préalable de la marche de potentiel cf commentaires). Être de capable de justifier de passer du vrai potentiel à la barrière rectangulaire.

Commentaires donnés par l'enseignant

Il faut mieux gérer son temps. Il faut passer plus vite sur la démonstration de l'ES indépendante du temps, mais qui reste toutefois importante.
Ne pas forcément parler du puits infini, mais éventuellement montrer les différences entre puits fini et infini (niveaux d'énergie).
Autre applications auxquelles on peut penser :
- radioactivité α
- double puits (modèle des liaisons chimiques)
- retournement de la molécule d'ammoniac
-MASER
-séparation isotopique
- tamisage quantique (application de l'effet tunnel)
- fusion

Partie réservée au correcteur

Avis général sur la leçon (plan, contenu, etc.)

La structure de la leçon est clairement imposée par le titre. Une première section de présentation de l'équation de Schrödinger et une seconde sur les applications (comme l'a fait Julie). Il faut clairement « motiver » l'équation de Schrödinger par la discussion de la relation de dispersion et de son lien, modulo les relations de de Broglie et de Planck-Einstein qui sont à mettre en pré-requis (programme de 1ère année), avec la relation entre énergie mécanique et impulsion en mécanique classique. L'obtention de l'équation de Schrödinger indépendante du temp par séparation des variables doit être traitée de manière plus efficace afin de ne pas y consacrer trop de temps. La notion de courant de probabilité doit également être introduite et « motivée » au moins dans le cas des ondes planes par une analogie classique (hydrodynamique, électrodynamique…)

Le choix des applications est extrêmement vaste. Les programmes de CPGE mentionnent explicitement la microscopie à effet tunnel et la radioactivité alpha, mais rien n'impose de se restreindre à ces applications.

Cette leçon se prête parfaitement à l'utilisation de codes numériques pour calculer la fonction d'onde (états stationnaires mais aussi évolution temporelle) dans les différentes situations étudiées et rendre l'ensemble plus visuel.

Notions fondamentales à aborder, secondaires, délicates

Equation de Schrödinger dépendant du temps.

Equation de Schrödinger indépendante du temps.

Conservation de la probabilité. Densité volumique de courant de probabilité (pour discuter les coefficients de transmission/réflection dans les applications)

Conditions aux bords pour la fonction d'onde et ses dérivées (et justification)

Effet tunnel.

Transmission résonnante.

Quantification des niveaux d'énergie.

Expériences possibles (en particulier pour l'agrégation docteur)

Réflexion totale/Réflexion totale frustrée qui peuvent servir d'analogie pour passer de la marche de potentiel à l'effet tunnel à travers une barrière de potentiel. Mais on peut aussi bien les évoquer sans monter l'expérience.

Bibliographie conseillée