

# LP.39 Notion de fonction d'onde

Maria Ubero Gonzalez

13 juin 2020

## Table des matières

<b>1 Aspect ondulatoire</b>	<b>2</b>
1.1 Relation de de Broglie . . . . .	2
1.2 Davisson et Germer (1927) . . . . .	3
1.3 Diffraction électrons graphite . . . . .	3
<b>2 Notion de fonction d'onde</b>	<b>3</b>
2.1 Fentes d'Young . . . . .	3
2.2 Fonction d'onde . . . . .	4
2.3 Equation de Schrodinger . . . . .	4
<b>3 Applications et conséquences</b>	<b>4</b>
3.1 Particule dans un puits infini . . . . .	4
3.2 Paquet d'ondes . . . . .	4
3.3 Inégalité d'Heisenberg . . . . .	8

# Introduction

1900 : Planck propose une formule en accord avec les expériences sur le spectre de rayonnement du corps noir (il obtient son résultat de forme empirique au début et après il déduit le point central de son argument grâce à la thermo statistique ) il introduit le quantum d'action  $h$ . Ce quanta de Planck était mystérieux mais le résultat étonnamment efficace.

1905 : Einstein effet photoélectrique. Quantum de rayonnement : appelé photon par Lewis (1926).  $E = h\nu$ . Effet photoélectrique découvert par Hertz (mais pas expliqué jusqu'à Einstein). Photon pourvu d'une impulsion  $p = \hbar k$ .  $k$  est le vecteur d'onde (prouvé par Compton en 1923 diffusion rayons X par électrons feuille mince alluminium). Einstein : dualité onde-corpuscule.

1912-1914 : Niels Bohr cherchait un modèle cohérent de la structure des atomes. Il effectue une synthèse combinaison des raies spectrales de Ritz, modèle atomique de Rutherford, quanta de Planck et Einstein. Il postule que les énergies des édifices atomiques et moléculaires n'adoptent que des valeurs discrètes, et que l'émission et absorption de lumière par ces édifices se fait que par certaines fréquences lumineuses bien précises.  $\nu_{if} = |E_i - E_f|/h$ . i : initial. f : final. Modèle de l'atome d'hydrogène. Emission et absorption pas expliqués par Bohr mais par Einstein plus tard. 1914 expérience de Franck et Hertz qui montre la quantification des énergies dans les atomes.

1923 : Louis de Broglie. De même que la lumière présentait un comportement corpusculaire, les particules comme l'électron peuvent présenter un aspect ondulatoire. A toute particule de vitesse  $v$  et impulsion  $p \rightarrow \lambda = h/p$ .

## 1 Aspect ondulatoire

### 1.1 Relation de de Broglie

Ppe de Fermat : 1657 et ppe variationnel méca fin 17ème je crois.

Mécanique quantique indispensable quand l'action est de l'ordre de  $h$ . Comparaison des actions : Action =  $p \cdot x, E \cdot t \dots$  Action $^2 = E \times m \times l^2$

Exemple : électron :  $m = 9,1 \times 10^{-31}$  kg,  $E_c \approx 10eV$ ,  $l \approx 10^{-10}$  m. On obtient : action  $S \approx h$ . Balle de tennis :  $m = 60$  g,  $v = 35$  m/s,  $l = 5$  cm. Action beaucoup plus grande que  $h$  donc méca classique.

Attention, les effets quantiques sont observables à notre échelle : corps noir, superfluidité, supraconductivité, condens de Bose Einstein, étoiles à neutrones.

Orbite stable : interférences constructives, sinon elle n'existerait pas.

$$2\pi r = n\lambda_{DB} \quad (1)$$

## 1.2 Davisson et Germer (1927)

Ils veulent tester l'hypothèse de de Broglie qui dit que les électrons sont aussi des ondes donc comme leur  $\lambda \approx 10$  Å, ils veulent faire diffracter les électrons de la même façon que Max Von Laue (prix Nobel 1914) a fait diffracter des rayons X par des cristaux (car  $\lambda$  des rayon X  $\approx 10^{-10}$  comme distance pas réseau cristalin).

## 1.3 Diffraction électrons graphite

# 2 Notion de fonction d'onde

## 2.1 Fentes d'Young

Dans la leçon de Pierre il parle de l'expérience en 1989 de Akira Tonomura et de l'expérience en 1992 par Shimizu (regarder pdf tp Etienne Thiberge).

<http://www.quantum-physics.polytechnique.fr/young.php>

Il est important de dire que pour trouver ce qu'on montre avec la simulation de l'X, il faut faire une infinité de mesures (beaucoup). On fait passer des électrons par les fentes et en mesurant ce qu'il se passe c'est qu'on force l'électron à choisir une projection sur la base propre de l'observateur position. En fait dans le cas de la position il y a une infinité d'état propres (on peut le voir comme un continuum). On lesure donc il choisit un état propre, après on mesure **un autre** électron qui choisit un autre état propre etc etc et c'est comme ça qu'on arrive à trouver la densité de probabilité qui nous renseigne sur la probabilité de trouver l'électron sur les différentes positions.

## 2.2 Fonction d'onde

## 2.3 Equation de Schrodinger

# 3 Applications et conséquences

## 3.1 Particule dans un puits infini

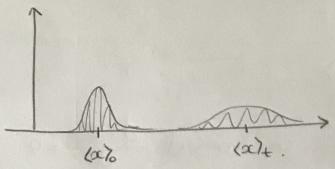
## 3.2 Paquet d'ondes

Je l'ai fait dans le domaine k et après dans le domaine de p. Il est mieux de le faire dans le domaine de p car j'ai bien démontré dans la partie "à savoir" grâce au théorème de Parseval l'expression qu'il faut utiliser et comme ça on reste cohérents car on présentait la transformée de Fourier entre le domaine de r et de p et pas de r et de k. Pour passer en k ce n'est pas un simple changement de variable. La transformée de Fourier n'est pas égale. Il n'y a pas de  $1/\sqrt{\hbar}$  qui multiplie devant. [Bas devant pag 440.](#)

$$f(\vec{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int g(\vec{r}) e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} d^n r \quad (2)$$

où n est la dimension. Si on prend que pour x alors on a n = 1.

Paquet d'ondes libre.



Il y a dispersion:

$$\text{car } \omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

$$\text{donc } v_p = \frac{\hbar k}{2m}$$

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x,t) \cdot x \cdot \psi(x,t) dx \\ &= i \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}^*(k,t) \frac{\partial \tilde{\psi}(k,t)}{\partial k} dk. \end{aligned}$$

$$\text{équation de schrödinger: } i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(\vec{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}(\vec{r},t)$$

$$p = i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad \text{donc} \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} = p^2$$

$$\text{donc: } i\hbar \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial t}(\vec{k},t) = \frac{p^2}{2m} \tilde{\psi}(\vec{k},t) \quad p = \hbar k$$

$$i\hbar \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial t}(\vec{k},t) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \tilde{\psi}(\vec{k},t)$$

$$\text{Donc: } \boxed{i \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial t} = \frac{\hbar k^2}{2m} \tilde{\psi}} \quad \text{et} \quad \boxed{-i \frac{\partial \tilde{\psi}^*}{\partial t} = \frac{\hbar k^2}{2m} \tilde{\psi}^*}$$

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = i \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial \tilde{\psi}^*}{\partial t} \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial k} dk + i \int \tilde{\psi}^* \frac{\partial^2 \tilde{\psi}}{\partial k^2} dk$$

$$= i \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{i\hbar k^2}{2m} \tilde{\psi}^* \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial k} dk + i \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}^* \frac{\partial}{\partial k} \cdot \frac{\hbar k^2}{2m} \tilde{\psi} dk.$$

$$= + \int_{-\infty}^{+\infty} -\frac{\hbar k^2}{2m} \tilde{\psi}^* \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial k} dk + \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\hbar k}{2m} \tilde{\psi}^* \frac{\partial (\tilde{\psi} k^2)}{\partial k} dk.$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\hbar}{2m} \tilde{\psi}^* \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial k} \cdot k^2 dk + \boxed{\left( \frac{\hbar}{2m} \tilde{\psi}^* \left[ \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial k} \cdot k^2 + 2k \cdot \tilde{\psi} \right] \right) dk.}$$

(2)

$$= \frac{\hbar}{m} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}^* \cdot \vec{k} \cdot \tilde{\psi} dk$$

$\langle \vec{k} \rangle.$

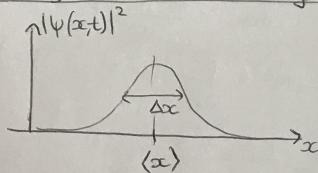
Donc  $\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \frac{\hbar \langle \vec{k} \rangle}{m} = \frac{\langle p \rangle}{m}$

si on fait un argument similaire on obtient  $\frac{d\langle \vec{p} \rangle}{dt} = 0$

En quantique les grandeurs physiques "position" et "impulsion" n'ont plus de sens par le dehors de systèmes (pasquet d'ordres)

$\langle \cdot \rangle \rightarrow$  pertinent  $\rightarrow$  coïncide avec point de vue classique.

### [Inégalité de Heisenberg]



dispersion:  $\Delta x$ .

$$\Delta x^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$$

$$\Delta x \cdot \Delta p \leq \frac{\hbar}{2} \quad \rightarrow \text{pour les 3 coordonnées}$$

differant avec:  $\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$ : le temps n'est pas une observable

$$\langle \hat{x} \rangle = i\hbar \int \Psi^*(\vec{p}) \frac{\partial \Psi}{\partial p} \cdot d\vec{p}$$

Eq de Schrödinger: à 1D:

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

$$\hat{p} = i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

$$\text{donc } \hat{p}^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

$$\text{en } \hat{p}: i\hbar \frac{\partial \tilde{\Psi}(\vec{p},t)}{\partial t} = +\frac{\hbar^2}{2m} \tilde{\Psi}(\vec{p},t) \quad \text{et } -i\hbar \frac{\partial \tilde{\Psi}^*(\vec{p},t)}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m} \tilde{\Psi}^*(\vec{p},t)$$

$$\begin{aligned} \frac{d\langle \hat{x} \rangle}{dt} &= i\hbar \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial \tilde{\Psi}^*(\vec{p})}{\partial t} \frac{\partial \tilde{\Psi}}{\partial p} \cdot d\vec{p} + \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\Psi}^*(\vec{p},t) \frac{\partial \tilde{\Psi}}{\partial p \partial t} \cdot d\vec{p} \right] \\ &= i\hbar \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{i\hbar^2}{2m\hbar} \tilde{\Psi}^*(\vec{p},t) \frac{\partial \tilde{\Psi}}{\partial p} \cdot d\vec{p} + \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\Psi}^*(\vec{p},t) \underbrace{\frac{\partial}{\partial p} \left[ \frac{\hbar^2}{2m\hbar} \tilde{\Psi}(\vec{p},t) \right]}_{\frac{2p}{2m\hbar} \tilde{\Psi} + \frac{\partial \tilde{\Psi}}{\partial p} \frac{\hbar^2}{2m\hbar}} \cdot d\vec{p} \right] \end{aligned}$$

$$= i\hbar \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\Psi}^*(\vec{p},t) \cdot \frac{2p}{2m\hbar} \tilde{\Psi} \cdot d\vec{p} \right] = \frac{1}{m} \int_{-\infty}^{+\infty} \vec{p} \tilde{\Psi}^*(\vec{p},t) \cdot \tilde{\Psi} \cdot d\vec{p}$$

$$\text{Donc } \frac{d\langle \hat{x} \rangle}{dt} = \frac{\langle \hat{p} \rangle}{m}.$$

$$\langle \hat{p} \rangle = \frac{\langle \hat{p} \rangle}{m}$$

### 3.3 Inégalité d'Heisenberg

Pour l'inégalité on peut juste montrer que plus un signal est large dans le temps plus elle est étroite dans le domaine des fréquences (électronique). Et comme ça montrer directement après l'inégalité (pas de démo, très technique... je ne l'ai pas faite.)

## Stabilité matière

Stabilité de la matière: Atome d'hydrogène

pot. coulombien:  $V(r) = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r}$

(PFD):  $\frac{m_e v^2}{R} = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}$

$$E_{\text{TOT}} = \frac{p^2}{2m_e} + V(r) = \frac{p^2}{2m_e} - \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

$$E_{\text{TOT}} = \frac{m_e v^2}{2m_e} - \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r} = \frac{q^2 R}{8\pi\epsilon_0 r^2} - \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r} = \frac{-1 q^2}{24\pi\epsilon_0 r}$$

Cette énergie n'est pas bornée inférieurement. Décaissement de l'énergie due au rayonnement de l'électron (car il est accéléré) selon la mécanique classique → emmènerait de l'e<sup>-</sup> sur le rayon.

Les relations d'incertitude de Heisenberg: stabilité, pas d'inférieurité.

~~Etant donné que l'incertitude de position (mesure incertitude sur la position) n'est pas considérée fixe.~~

$$\langle E_C \rangle = \frac{1}{2m} \langle p^2 \rangle = \frac{1}{2m} [\Delta p^2 + \langle p \rangle^2] = \frac{1}{2m} \Delta p^2 \quad \langle p \rangle = 0. \text{ car invariance par rotation.}$$

$$\langle E_P \rangle = \left\langle -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right\rangle \approx -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R} = r_0$$

$$\langle E_{\text{TOT}} \rangle = \frac{\Delta p^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R} = r_0$$

$$\Delta p r_0 \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$E_C \geq \frac{\Delta p^2}{2m} \geq \frac{\hbar^2}{2m_e \langle r \rangle^2}$$

$$E_{\text{TOT}} \geq \frac{\hbar^2}{2m_e \langle r \rangle^2} - \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 \langle r \rangle}$$

Fonction bornée inférieurement minimum:  $\langle r \rangle = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e q^2} \approx 0,5 \times 10^{-10} \text{ m.}$

$$E_{\text{min}} = -\frac{m}{2\hbar^2} \left( \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 = -13,6 \text{ eV}$$

(3)

## A savoir

### TF

Transformation de Fourier.

Deux fonctions  $g(\vec{p})$  et  $f(\vec{r})$  sont transformées l'une de l'autre par :

$$f(\vec{r}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \int e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} \cdot g(\vec{p}) d^3 p \quad (1)$$

la TF inverse :

$$g(\vec{p}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \int e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} f(\vec{r}) d^3 r \quad (2)$$

Le produit  $\vec{p} \cdot \vec{r}$  a la dimension d'une action, ce qui explique la présence du facteur  $\hbar$  dans ces expressions.

On différencie (1) par rapport à  $x_j = x, y$  ou  $z$  :

$$\frac{\partial f}{\partial x_j} = (2\pi\hbar)^{-3/2} \int e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} \cdot \frac{i p_j}{\hbar} g(\vec{p}) d^3 p.$$

Pour conséquent, la TF de  $\frac{\partial f(\vec{r})}{\partial x_j}$  est  $\frac{i p_j g(\vec{p})}{\hbar}$  / je l'obtiens avec un circuit / j'aurais que ce soit j'ai tout de suite deviné / je suppose que ça dépend de l'ordre dans lequel je fais les TF /

Et à l'inverse :

$$\frac{\partial g(\vec{p})}{\partial p_i} \xrightarrow{\text{TF}^{-1}} \frac{i x_i}{\hbar} f(\vec{r}) \quad (R)$$

je suppose que ça dépend de l'ordre dans lequel je fais les TF /

→ théorème de Parseval - Planckien :

$$\int f_1^*(\vec{r}) \cdot f_2(\vec{r}) d^3 r = \int g_1^*(\vec{p}) \cdot g_2(\vec{p}) d^3 p$$

ou \* → complexe.  
et  $g_1(\vec{p})$  et  $g_2(\vec{p})$  sont aussi de Fourier  
de  $f_1(\vec{r})$  et  $f_2(\vec{r})$

→ moyenne :

$$\langle p_x \rangle = \int p_x |g(\vec{p})|^2 d^3 p \quad | \quad \Delta p_x^2 = \langle p_x^2 \rangle - \langle p_x \rangle^2 \quad |$$

→ probabilité :  $\int p_x g(\vec{p}) \cdot g^*(\vec{p}) d^3 p$

(1)

→ Probabilité.

$$d^3 P(\vec{P}) = |\psi(\vec{P})|^2 d^3 p.$$

densité de probabilité  $\int |\psi(\vec{P})|^2 d^3 p = 1$ .

$$\langle \vec{P} \rangle = \int \vec{P} |\psi(\vec{P})|^2 d^3 p. \quad \text{définition.}$$

si on applique le théorème de Poisson - Planckien au couple de TF:  $f_1(\vec{P}) = \psi(\vec{P}) \xrightarrow{\text{TF}} g_1(\vec{P}) = \psi(\vec{P})$ .

$$f_2(\vec{P}) = -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x} \xrightarrow{\text{TF}} g_2(\vec{P}) = p_x \psi(\vec{P})$$

(ce que j'ai obtenu avant !)

théorème:  $\int f_1^* f_2 d^3 r = \int g_1^* g_2 d^3 p.$

$$\boxed{-i\hbar \int \psi^*(\vec{r}) \frac{\partial \psi}{\partial x} d^3 r = \int \psi^*(\vec{P}) \cdot p_x \psi(\vec{P}) d^3 p}$$

qui je veux  $\langle x \rangle$ :

si:  $\begin{cases} f_1(x) = \psi(x) \\ f_2(x) = x \psi(x) \end{cases} \rightarrow \text{TF} \rightarrow \psi(\vec{P})$

$$\boxed{\int \psi^*(x) \cdot x \psi(x) = i\hbar \int \psi^*(\vec{P}) \cdot \frac{\partial \psi}{\partial p} d^3 p} \quad R =$$