

① Forme des solutions ; équation de Schrödinger indépendante du temps

On remplace $\Psi(x, t) = \psi(x) \cdot f(t)$ dans l'éq. de S.
à 1D avec $V = V(x)$:

$$\underbrace{i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}}_{\text{fonction de } t \text{ seulement}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V(x) \cdot \Psi$$

$$i\hbar \psi(x) \cdot \frac{df(t)}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} f(t) \cdot \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x) \cdot \psi(x) \cdot f(t)$$

$$\underbrace{i\hbar \frac{1}{f(t)} \cdot \frac{df(t)}{dt}}_{\text{fonction de } t \text{ seulement}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{1}{\psi(x)} \cdot \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)$$

} $\psi = f \cdot \psi$

} homogènes
à une énergie ($[V]$)

L'égalité n'est possible quel que soit t et x
que si les deux fonctions sont égales à une
même constante notée E :

$$\left\{ \begin{array}{l} -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{1}{\psi(x)} \cdot \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x) = E \\ i\hbar \frac{1}{f(t)} \cdot \frac{df(t)}{dt} = E \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} \textcircled{1} \\ \textcircled{2} \end{array}$$

Pour résoudre ①, il faut connaître l'expression de $V(x)$ dans la situation particulière considérée.

L'équation ② se réduit :

$$\frac{df(t)}{dt} = -i \frac{E}{\hbar} f(t) \Leftrightarrow \frac{df(t)}{dt} + i \frac{E}{\hbar} \cdot f(t) = 0$$

Les solutions s'écrivent :

$$f(t) = C \cdot e^{-\frac{iE}{\hbar}t} \quad \text{où } C \text{ est une constante.}$$

Com / rq :

- la relation de Planck - Einstein $E = h \cdot \nu$
 $= h \omega$ ($\omega = 2\pi \cdot \nu$) permet une réécriture
sous la forme familière $f(t) = C e^{-i\omega t}$!
- la constante C peut être "réjetée" de la
fonction Ψ , de manière à écrire la dépendance
temporelle de la fct d'onde Ψ de l'état sta-
tionnaire sous la forme simple $e^{\frac{-iE \cdot t}{\hbar}}$.

Bilan :

Un état stationnaire est caractérisé par
une énergie $E = \hbar \cdot \omega$ et une fonction d'
onde s'écrivant :

$$\Psi(n, t) = \Psi(x) \cdot e^{\frac{-iE \cdot t}{\hbar}}$$

où Ψ est solution de l'équation de
Schrödinger indépendante du temps :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + V(x) \cdot \Psi(x) = E \cdot \Psi(x)$$

(3) et savoir retrouver

- Com :
- * la notation du type $e^{i(kn - \omega t)} = e^{ikx} e^{-i\omega t}$ et
donc privilégiée en PQ
 - * $|\Psi(n, t)|^2 = |\Psi(x)|^2 \cdot |e^{\frac{-iE \cdot t}{\hbar}}|^2 = |\Psi(x)|^2$: pour
un état stationnaire, la densité de probabilité
de présence ne dépend pas du temps.
 - * la suite du cours se focalise sur les
états stationnaires. Le Pb de la dépendance (5)

temporelle de Ψ étant réglé, le but consiste donc, pour chaque situation / modélisation proposée à résoudre l'équation de Schrödinger indépendante du temps connaissant le profil du potentiel $V(x)$.

B) Conditions aux limites pour Ψ ; normalisation
 * Ψ est continue en x et $\frac{d\Psi}{dx}$ est continue en x où $V(x)$ est continue.
 on ne présente pas de discontinuité d'amplitude infinie.

III/ Evolution d'une particule libre

* $|\Psi$ est normalisé :
 $\int |\Psi(x)|^2 dx = 1$
 (dimo)

1) Définition et équation de Schrödinger associée

Déf: une particule est dite libre si son évolution s'effectue sans interactions avec le milieu extérieur.

Ex: particule de l'espace vide

Dans ce cas, où le potentiel est défini à une constante additive près, on peut prendre

$$V(x) = 0 \quad \forall x.$$

D'où : $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}$ (E.S.)
 pour

une particule libre.

2) États stationnaires d'une particule libre.

① Solutions de l'E.S. en O.P.P.H

état stationnaire : $\Psi_{PS}(x,t) = \Psi(x) e^{-i\frac{E}{\hbar}t} = \Psi(x) e^{i\omega t}$

$$\text{E.S. : } -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi}{dx^2} = E \Psi$$

s'écrit $\frac{d^2 \Psi}{dx^2} + \underbrace{\frac{2mE}{\hbar^2} \Psi}_{> 0} = 0$

$$\text{On pose } k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

s'it $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$, avec $[k] = \text{m}^{-1}$ d'après

$$\text{l'équa. diff: } \frac{d^2\varphi}{dx^2} + k^2 \varphi = 0$$

$$\text{Solution: } \varphi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$$

$$\text{D'où: } \varphi(x, t) = \underbrace{A e^{i(kx - \omega t)}}_{\text{OPPH}} + \underbrace{B e^{i(-kx - \omega t)}}_{\text{OPPH}}$$

sens $x \nearrow$ sens $x \searrow$

Conclu:

Les OPPH constituent une base de solutions pour décrire une particule quantique libre dans un état stationnaire

(1) Relation de dispersion

⚠ avec les notations de MQ, pour une OPPH n^P

$$\frac{\partial}{\partial t} \leftrightarrow -i\omega \quad \text{et} \quad \frac{\partial}{\partial x} \leftrightarrow ik$$

On injecte $\varphi(x, t) = A e^{i(kx - \omega t)}$ ds (E.S.) :

$$i\hbar \times (-i\omega) \varphi = -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot (ik)^2 \varphi$$

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

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$\boxed{\omega = \frac{\hbar k^2}{2m} \quad \begin{matrix} \text{relation} \\ \text{de dispersion} \end{matrix}}$$

⚠ voir notes

On, classiquement, pour une particule libre

$$\text{on a } E = E_c = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m} \quad (\text{avec } p = m.v)$$

⑥

$$D'apr\acute{e}s \frac{P^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

s'ilt $p = \hbar k$ (sous le \rightarrow)

On introduit la longueur d'onde associée à l'OPPH telle que $k = \frac{2\pi}{\lambda}$:

$$p = \frac{\hbar}{2\pi} \cdot \frac{2\pi}{\lambda} \text{ s'ilt : } \boxed{p = \frac{\hbar}{\lambda}},$$

la relation de de Broglie !

\Rightarrow cohérence de la dualité onde (OPPH quantique)

- particule (classique) pour la particule libre.

② Vitesse de phase

Pour une OPPH : $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$

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

La vitesse de phase d'une OPPH associée à une particule libre (état stationnaire) s'ilt

$$\boxed{v_p = \frac{\hbar k}{2m}}$$

On note que v_p dépend de k , donc pour la particule libre, le vise est disparu !

3) Paquet d'ondes - vitesse de groupe

a) Les OPPH ne sont pas normalisables

Considérons $\Psi(x,t) = A e^{i(kx - \omega t)}$

$$|\Psi(x,t)|^2 = A^2, \text{ donc } \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,t)|^2 \rightarrow +\infty$$

et ne peut pas valoir 1 !

Conclu : une OPPH (seule) ne peut pas représenter correctement une particule quantique.

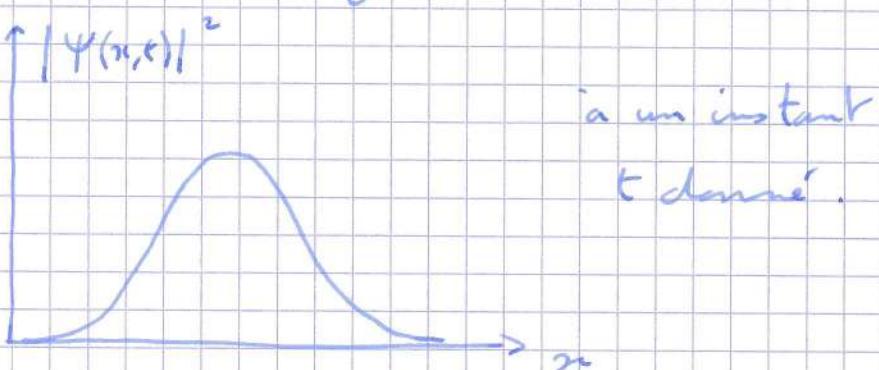
① Paquet d'ondes et liaison avec l'inégalité de Heisenberg spatiale

Cette difficulté est levée en formant un paquets d'onde normalisable par superposition d'OPPH (l'E.S. est linéaire !), du type :

$$\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} A(k) e^{i(kx - \omega t)} \cdot dk$$

La somme portant sur le vecteur d'onde k .

Cela permet de "localiser" la particule quantique dans une zone de l'espace :



De plus, l'analyse de Fourier affirme que

- si Δx est la largeur du paquet d'onde dans l'espace des positions

- si Δk est la largeur du paquet d'onde dans l'espace des vecteurs d'onde (\Leftrightarrow largeur

⑦

"spectrale")

alors $\Delta x \cdot \Delta k \geq \frac{1}{2}$

Or $p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k$ car $k = \frac{2\pi}{\lambda}$

D'où $\Delta x \cdot \Delta \left(\frac{p}{\hbar} \right) \geq \frac{1}{2}$

$$\Delta x \cdot \frac{1}{\hbar} \Delta p \geq \frac{1}{2}$$

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

(inégalité de Heisenberg spatiale)

(cf cours PCSI)

(commentaires...)

→ Il est impossible de connaître simultanément, avec une précision aussi grande que l'on veut, la position et la quantité de mouvement d'une particule quantique.

⑤ Vitesse de groupe et vitesse de la particule

Le rapport d'onde progresse à la vitesse de groupe $v_g = \frac{d\omega}{dk}$ (cf chap. 0d 4)

D'après la relation de dispersion : $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$

On différencie :

$$d\omega = \frac{\hbar k}{m} dk$$

D'où
$$\boxed{v_g = \frac{\hbar k}{m}}$$
 relativement