L'interprétation corpusculaire permet d'écrire que $p = \hbar . k$ (relation de de Broglie)

Soit $v_g = \frac{p}{m} = \frac{m . v}{m} = v$.

Conclu :

$\boxed{\text{La vitesse de groupe du paquet d'ondes associé à une particule (aspect ondulatoire) s'identifie à la vitesse de cette particule (aspect corpusculaire) : } v_g = v.}$

d) Courant de probabilité

Ds le cas d'une particule libre, on peut établir (HP, voir exercice) :

Equation locale de conservation de la probabilité :

$$\mathrm{div}(\vec{J}) + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$$

avec :

$\rho = |\Psi|^2$: densité de probabilité

$\vec{J} = |\Psi|^2 . \frac{\hbar \vec{k}}{m}$: vecteur densité de courant de probabilité

savoir utiliser

Com : - interprétation : $\frac{\partial \rho}{\partial t} = - \mathrm{div}(\vec{J})$

si la densité de probabilité de présence ds un volume $d\tau$ diminue, c'est qu'elle "quitte" le volume $d\tau$ à travers la surface qui le délimite, via un flux de $\vec{J}$.

- analogie : équation locale de conservation de la charge électrique : $\text{div}(\vec{j}) + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$ avec $\vec{j} = \rho \vec{v}$.

En MQ, on peut écrire :

$$\vec{J} = |\psi|^2 \frac{\hbar \vec{k}}{m} = \rho \cdot \frac{\vec{p}}{m} = \rho \cdot \frac{m\vec{v}}{m}$$

$$\boxed{\vec{J} = \rho \cdot \vec{v}}$$

$\vec{v}$ → vitesse du corpuscule associé à l'onde

ρ → densité de probabilité.

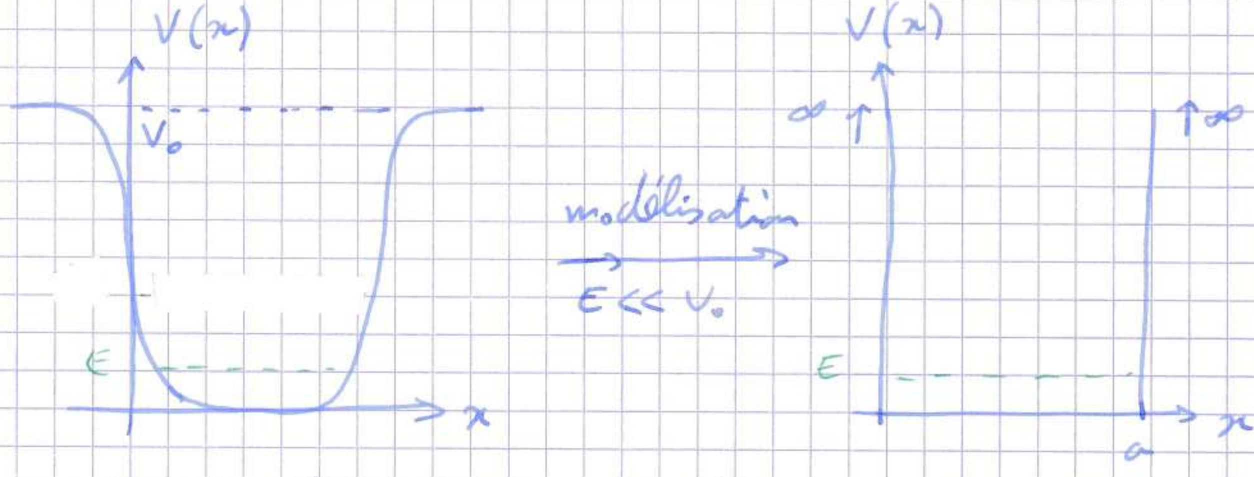
IV/ Particule dans un puits de potentiel

1) Puits infini

(a) Position du problème

Ex :

- électrons de conduction dans un morceau de métal de longueur a
- électron délocalisé dans une molécule (longueur a)
- toute particule quantique "confinée" se "déplaçant" librement dans un volume de l'espace sans pouvoir en sortir.



Soit $V(x) = \begin{cases} +\infty & \text{pour } x < 0 \text{ et } x > a \\ 0 & \text{pour } 0 \leq x \leq a \end{cases}$

Ds les zones où $V \to +\infty$, l'E.S.S. impose que $\varphi \to 0$ et on retiendra :

> Dans les zones de potentiel "infini" la probabilité de présence d'une particule quantique est nulle.

② Solutions de type état stationnaire

E.S.S. : $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi}{dx^2} + V(x).\varphi = E\varphi$

Dans le puits, $V(x) = 0$, donc :

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} + \underbrace{\frac{2mE}{\hbar^2}}_{>0}\varphi = 0$$

du type $\varphi''(x) + k^2\varphi(x) = 0$ avec $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$

(⟺ "oscillateur harmonique" mais ⚠, dépendance spatiale de φ !)

Solution : $\varphi(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx)$

(plus facile que exp pour exprimer les C.L.)

C.L. :

* continuité de φ en $x = 0$:

$\varphi(0^-) = \varphi(0^+)$

$0 = 0 + B \rightarrow \boxed{B = 0}$

* continuité de φ en $x = a$

$\varphi(a^-) = \varphi(a^+)$

$A \sin(ka) = 0$

On prend $A \neq 0$ ($A = 0$ est solution triviale)

D'où $ka = n\pi \quad , n \in \mathbb{N}^*$

($n = 0$ donne $k = 0$ incompatible avec inégalité de Heisenberg spatiale)

D'où $\boxed{k_n = \frac{n\pi}{a}} \iff (\ldots) \boxed{E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}}$

ou bien $\frac{2\pi}{\lambda_n} = \frac{n\pi}{a}$ soit $\boxed{\lambda_n = \frac{2a}{n}}$

D'où : $\boxed{\varphi(x) = A_n \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right)}$

Rq : la situation est tout à fait analogue aux modes propres quantifiés d'une corde vibrante fixée à ses deux extrémités.

Normalisation

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x,t)|^2 dx = \int_0^a |\varphi(x)|^2 dx$$

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

$\sin^2(y) = \frac{1 - \cos(2y)}{2}$

$$= |A_n|^2 \int_0^a \frac{1}{2}\left(1 - \cos\left(\frac{2n\pi}{a} x\right)\right) dx$$

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

$$= \frac{|A_n|^2}{2} \cdot a = 1$$

$\uparrow$ normalisation.

D'où $|A_n| = \sqrt{\frac{2}{a}}$

On prend par exemple $A_n = \sqrt{\frac{2}{a}}$

<u>Rmq</u> : $A_n = -\sqrt{\frac{2}{a}} = e^{i\pi}\sqrt{\frac{2}{a}}$ ne change pas $|\Psi|^2$ qui contient l'interprétation physique.

Résumé : états stationnaires d'une particule quantique confinée ds un puits infini (largeur a)

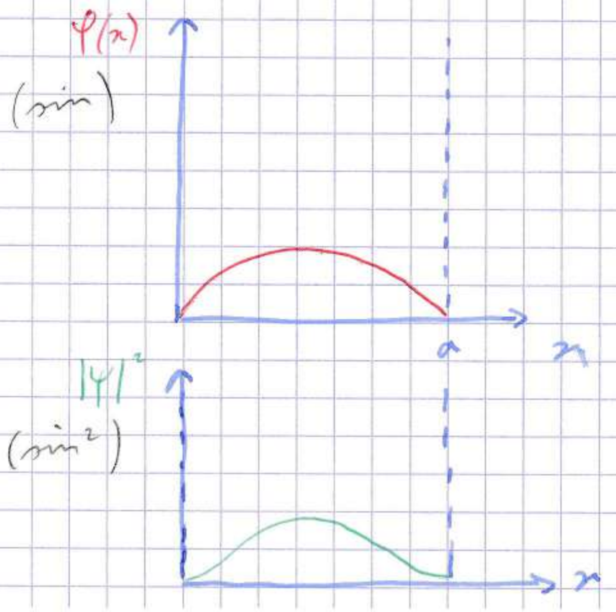
* fonctions d'onde :

$$\Psi(x,t) = \underbrace{\sqrt{\frac{2}{a}} \cdot \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)}_{\varphi(x)} \times \underbrace{e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}}_{f(t)}$$

* énergies quantifiées (dû au confinement)

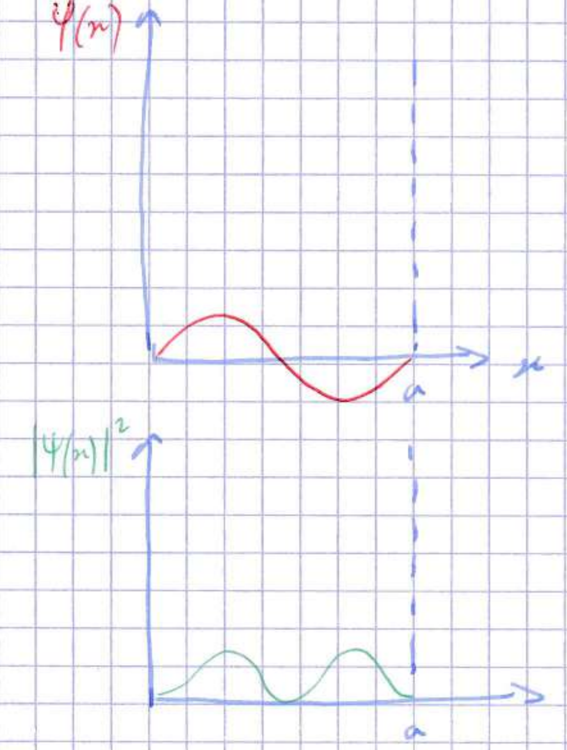
$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}, \quad n \in \mathbb{N}^*$$

Savoir retrouver



$n = 1$

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



$n = 2$

$$E_2 = \frac{2^2 \cdot \pi^2 \hbar^2}{2 m a^2}$$

cour probabilité de présence

© Energie minimale ; ODG

A.N. proton confiné ds un noyau ($a \sim 1.10^{-15}$ m)

$$E_1 = \frac{\pi^2 \left(\frac{h}{2\pi}\right)^2}{2 m a^2} = \frac{h^2}{8 m a^2}$$

$m = 1{,}67 \cdot 10^{-27}$ kg

$E_1 \sim 3 \cdot 10^{-11}$ J

$E_1 \sim 2 \cdot 10^2$ MeV.

On peut retrouver en ODG cette énergie minimale grâce à l'inégalité de Heisenberg spatiale (cf cours PCSI)

$$\underbrace{\Delta x}_{\sim a} \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

soit $\Delta p_x \geq \dfrac{\hbar}{2a}$

On $p_x \sim \langle p_x \rangle + \Delta p_x$

Mais en moyenne $\langle p_x \rangle = 0$ dans la zone de confinement. Donc $p_x \sim \Delta p_x$

De plus $E_c = \frac{1}{2} m v_x^2 = \frac{p_x^2}{2m} \sim \frac{\Delta p_x^2}{2m}$

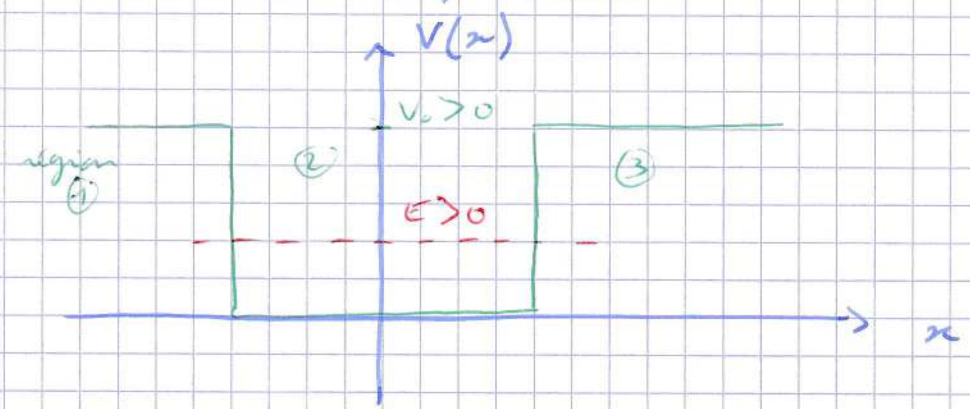
On en déduit :

$$2m E_c \gtrsim \frac{\hbar^2}{a^2} \quad \text{soit} \quad E_c \gtrsim \underbrace{\frac{\hbar^2}{2ma^2}}_{E_{c,min}}$$

Conclu : une particule confinée spatialement possède une énergie cinétique minimale (donc une énergie totale minimale). On note que plus on cherche à confiner la particule, plus son énergie cinétique minimale est grande.

2) Puits fini

a) Position du problème



Deux cas possibles :

* $E > V_0$: état de diffusion de la particule (voir exercice). On montre dans ce cas que son énergie n'est pas quantifiée.