Résumé du cours de mécanique quantique : séance 2

Clément Mazzocchi
d'après le cours donné par Éric Cances
École des Ponts ParisTech

2023-2024

Table des matières

Dans ce second résumé, on commence par rappeller les points essentiels de la séance précédente. On étudie ensuite l'étalement du paquet d'ondes d'une particule quantique. Puis, on s'intéresse à différents confinements d'une particule quantique sous l'effet d'un potentiel stationnaire ainsi qu'à l'accélération de cette particule par un champ électrique uniforme.

1 Rappels

On rappelle que l'état d'une particule quantique de masse m sous l'effet d'un potentiel V est contenu dans sa fonction d'onde ψ à valeurs complexes, avec la condition de normalisation

$$\int_{\mathbb{R}^d} |\psi\left(\mathbf{x},t\right)|^2 \mathrm{d}\mathbf{x} = 1$$

$|\psi\left(\mathbf{x},t\right)|^2$ représente alors la probabilité de trouver la particule à l'instant t au point $\mathbf{x}$. Sa dynamique est gouvernée par l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}\left(\mathbf{x},t\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\mathbf{x}}\psi\left(\mathbf{x},t\right) + V\left(\mathbf{x},t\right)\psi\left(\mathbf{x},t\right)$$

Le cadre mathématique adapté à l'étude d'une particule quantique repose sur la théorie des opérateurs linéaires. Les états quantiques de la particule sont des éléments d'un espace de Hilbert séparable $\mathcal{H}$. On considèrera désormais l'application Ψ qui à chaque instant t associe une fonction $\Psi\left(t\right)$ élément de $L^2\left(\mathbb{R}^d,\mathbb{C}\right)$. Les deux points de vue sont liés par la relation

$$\Psi\left(t\right)\left(\mathbf{x}\right) = \psi\left(\mathbf{x},t\right)$$

À chaque quantité physique mesurable A, on associe un observable $\hat{A} : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$. On a alors

$$< A > (t) = \int_{\mathbb{R}^d} \left(\hat{A}\psi\right)\left(\mathbf{x},t\right)\overline{\psi}\left(\mathbf{x},t\right)\mathrm{d}\mathbf{x}$$

où l'on a noté $\left(\hat{A}\psi\right)\left(\mathbf{x},t\right) = \left(\hat{A}\Psi\right)\left(t\right)\left(\mathbf{x}\right)$. Le hamiltonien quantique $\hat{H}$ est l'observable associé à l'énergie E de la particule.

2 Étude du paquet d'ondes

La vitesse de groupe du paquet d'ondes est la grandeur

$$\frac{\mathrm{d} < \mathbf{x} >}{\mathrm{d}t}(t) = \frac{< \mathbf{p} > (t)}{m}$$

On a aussi l'égalité

$$\frac{\mathrm{d} < \mathbf{p} >}{\mathrm{d}t}(t) = - < \nabla V > (t)$$

Si V est nul, $\dfrac{\mathrm{d} < \mathbf{p} >}{\mathrm{d}t}(t) = 0$ donc $< \mathbf{p} > (t) = \mathbf{p_0}$. Ainsi,

$$< \mathbf{x} > (t) = \frac{\mathbf{p_0}}{m} t + < \mathbf{x} > (0)$$

Or,

$$\mathbf{p_0} = < \mathbf{p} > (0) = \int_{\mathbb{R}^d} \left(-i\hbar \frac{\mathrm{d}\psi_0}{\mathrm{d}\mathbf{x}}(\mathbf{x}) \right) \overline{\psi_0}(\mathbf{x})\, \mathrm{d}\mathbf{x}$$

Pour une fonction d'onde à valeurs réelles, $\mathbf{p_0} = 0$ donc $< \mathbf{x} > (t) = < \mathbf{x} > (0)$: la particule ne bouge pas en moyenne ; le paquet d'ondes se disperse.

Pour faire bouger le paquet d'ondes en moyenne, il suffit d'ajouter une phase locale de la forme $e^{i \frac{\mathbf{p_0} \cdot \mathbf{x}}{\hbar}}$. On aura alors $< \mathbf{p} > (0) = \mathbf{p_0}$.

3 Confinement d'une particule quantique

On étudiera dans la suite de manière unidimensionnelle une particule quantique évoluant dans un potentiel stationnaire :

$$V : x \mapsto V(x)$$

3.1 Barrière de potentiel

L'application d'une barrière de potentiel conduit au phénomène de l'effet tunnel.

On considère un potentiel stationnaire de la forme :

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < -\frac{L}{2} \\ V_0 & -\frac{L}{2} < x < \frac{L}{2} \\ 0 & \frac{L}{2} < x \end{cases}$$

On suppose que la particule possède une énergie $E < V_0$. Il existe alors des constantes $\alpha, \beta, \gamma, \delta, k, K \in \mathbb{R}$ telles que

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{iKx} + \alpha e^{-iKx} & x < -\frac{L}{2} \\ \gamma e^{kx} + \delta e^{-kx} & -\frac{L}{2} < x < \frac{L}{2} \\ \beta e^{iKx} & \frac{L}{2} < x \end{cases}$$

$|\alpha|^2$ et $|\beta|^2$ sont alors respectivement les coefficients de réflexion et de transmission de la particule sur la barrière. À noter que l'on a $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$.

On constate que contrairement à une particule classique, une particule quantique a une probabilité non-nulle de traverser la barrière même si son énergie est inférieure au potentiel imposé.

3.2 Oscillateur harmonique

On considère ici un potentiel de confinement

$$V(x) = \frac{1}{2} k x^2$$

où $k > 0$.

Alors comme $\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}(x) = kx$, on a :

$$\left\langle \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}(x) \right\rangle (t) = \int_{\mathbb{R}} kx|\psi(x,t)|^2 \mathrm{d}x = k < x > (t)$$

Or, $\frac{\mathrm{d} < p >}{\mathrm{d}t}(t) = -\left\langle \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x} \right\rangle (t)$ d'où

$$\frac{\mathrm{d} < p >}{\mathrm{d}t}(t) = -k < x > (t)$$

L'état stationnaire fondamental d'une particule soumise à ce potentiel est

$$\psi_0(x) = e^{-\frac{x^2}{2}}$$

C'est une valeur propre de l'hamiltonien.

3.3 Puits de potentiel carré

Ici, le potentiel est de la forme :

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & x < -\frac{L}{2} \\ 0 & -\frac{L}{2} < x < \frac{L}{2} \\ V_0 & \frac{L}{2} < x \end{cases}$$

La particule possède des états liés pour des niveaux d'énergie inférieurs à V_0, et des états de diffusion pour des énergies supérieures. L'énergie n'est quantifiée que pour les états liés.

4 Accélération d'une particule quantique

En appliquant un champ électrique uniforme dérivant du potentiel V, où

$$V(x) = -\mathcal{E}x$$

on obtient

$$\frac{\mathrm{d} < p >}{\mathrm{d}t} = q\mathcal{E}$$

c'est-à-dire une accélération uniforme de la particule.