MQ1/2 – Synthèse

- *Fonction d'onde et équation de Schrödinger*

Une particule massique est décrite par une fonction d'onde $\psi(x,t)$ qui est un champ complexe.

- ψ est normalisée : $\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi(x,t)|^2dx = 1$;
- $|\psi(x,t)|^2$ représente la densité linéique de probabilité de présence de la particule à l'instant t.

Pour une particule soumise à un potentiel $V(x)$, la fonction d'onde est solution de l'équation de Schrödinger :

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

La relation de dispersion des OPPH de matière est : $\hbar\omega = \frac{\hbar^2k^2}{2m} + V(x)$

- *Etats stationnaires*

On appelle état stationnaire un état quantique d'énergie constante E. La fonction d'onde d'un état stationnaire s'écrit : $\Psi(x,t) = \varphi(x)e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$. φ est appelée fonction d'onde spatiale et est solution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\varphi(x)}{\partial x^2} + V(x)\varphi(x) = E\ \varphi(x)$$

- *Particules libres* $(V(x) = 0)$

Une particule libre de quantité de mouvement p est décrite par une fonction d'onde plane progressive harmonique : $\psi(x,t) = \psi_0 e\ e^{\frac{i(\pm px - Et)}{\hbar}} = \psi_0\ e^{i(\pm kx - \omega t)}$

Une OPPH n'ayant pas de réalité physique, une particule libre réelle est décrite par un paquet d'ondes de matière. L'extension spatiale Δx du paquet d'ondes est liée à la largeur de son spectre en quantité de mouvement Δp par l'inégalité de Heisenberg :

$$\begin{cases}\Delta x = \sqrt{<x^2> - <x>^2} \\ \Delta p = \sqrt{<p^2> - <p>^2}\end{cases} \Rightarrow \Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

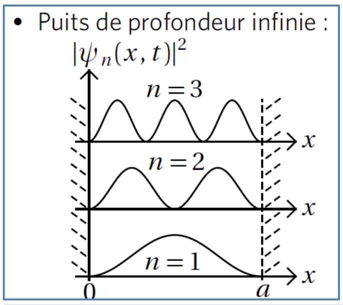
Δx et Δp sont respectivement appelées indéterminations quantiques sur x et sur p. L'enveloppe du paquet d'ondes se propage à la vitesse $v_g = \frac{p_0}{m} = \frac{\hbar k_0}{m}$ qui correspond à la vitesse classique de la particule.

Le vecteur densité de courant de probabilité de présence $\vec{j}$ est défini par :

$$\underbrace{\vec{j}(x,t)}_{s^{-1}} = \underbrace{\rho(x,t)}_{m^{-1}}\ \underbrace{\vec{v_g}}_{m\,s^{-1}} = |\psi(x,t)|^2\frac{\hbar\vec{k}}{m}$$

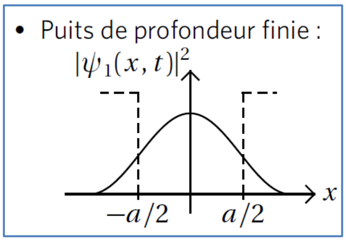
- *Puits de potentiel infini et quantification de l'énergie*

Le potentiel infini sur les bords du puits impose $\varphi(0) = \varphi(a) = 0$. Ce problème est analogue formellement à la corde fixée à ses deux extrémités. Les longueurs d'onde possibles pour l'onde de matière dans le puits sont quantifiées : $\lambda_n = \frac{2a}{n}$ avec $n \in \mathbb{N}^*$, ce qui impose que l'énergie de la particule dans le puits soit elle aussi quantifiée : $E_n = E_c = n^2\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$.



- *Puits de potentiel fini et quantification de l'énergie*

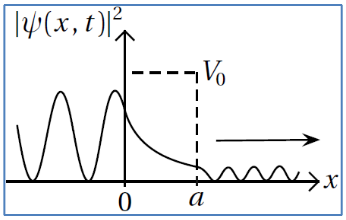
La fonction d'onde peut sortir du puits et pénétrer dans les zones de potentiel V_0.La localisation de la particule dans le puits est moins stricte que dans le puits de profondeur infinie, il s'ensuit une diminution des énergies des états stationnaires.



- *Barrière de potentiel*

Pour un saut de potentiel de hauteur finie, on admet que la fonction d'onde $\varphi(x)$ ainsi que sa dérivée spatiale $\frac{d\varphi(x)}{dx}$ sont continues. Ces conditions aux limites associées à l'équation de Schrödinger permettent de connaître l'expression de la fonction d'onde ψ en présence d'un potentiel $V(x\ )$ constant par morceaux.

L'onde de matière associée à une particule d'énergie $E < V_0$ pénètre à l'intérieur de la barrière de potentiel sous forme d'onde évanescente. L'amplitude de l'onde décroît exponentiellement dans la barrière de potentiel sur une distance caractéristique $\delta = \frac{1}{K} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}$. L'onde de matière en sortie de la barrière est non nulle, il existe une onde transmise au travers de la barrière, on parle d'effet tunnel. L'effet tunnel joue un rôle important en microscopie à effet tunnel et dans la compréhension de la radioactivité α.



MQ1/2 – SVF

a) Démontrer que la fonction d'onde dans le cas des états stationnaires s'écrit :

$$\Psi(x,\mathrm{t}) = \varphi(x)e^{-i\omega t} = \varphi(x)e^{-\frac{iE}{\hbar}t}$$

b) Retrouver l'expression de la fonction d'onde et les niveaux d'énergie dans le cas du puits infini.

c) Retrouver l'expression de l'énergie de confinement quantique.

d) Dans le cas du puits fini, à partir d'une représentation graphique, donner qualitativement les valeurs des niveaux d'énergie. Comparer les au puits fini.

e) Effet tunnel : écrire les conditions aux limites puis donner l'expression du coefficient de transmission dans le cas d'une barrière épaisse à partir du résultat général suivant :

$$T = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)}sh^2(qa)}$$

Exercices classiques : (les sujets d'annales surtout)

- MQ26 – Radioactivité alpha
- MQ24 – Enclos quantique

a) Démontrer que la fonction d'onde dans le cas des états stationnaires s'écrit : $\Psi(x,t) = \varphi(x)e^{-i\omega t} = \varphi(x)e^{-\frac{iE}{\hbar}t}$.

Ecrivons la condition de normalisation de la fonction d'onde sur la fonction $f(t)\,\varphi(x)$:

$$\int_D |\Psi(x,\mathrm{t})|^2 dx = 1 \Leftrightarrow |f(t)|^2 \int_D |\varphi(x)|^2 dx = 1 \Rightarrow |f(t)| = cste$$

On peut tout à fait choisir $|f(t)| = 1$ et faire « rentrer » la constante dans $\varphi(x)$. Cela impose à la fonction $\varphi(x)$ d'être normalisée comme suit :

$$\int_D |\varphi(x)|^2 dx = 1$$

On peut donc écrire la fonction d'onde sous la forme suivante :

$$\Psi(x,\mathrm{t}) = \varphi(x)e^{i\alpha(t)}$$

où $\alpha(t)$ est une fonction du temps, indéterminée pour le moment.

On injecte la fonction d'onde obtenue dans l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar\frac{\partial(\varphi(x)e^{i\alpha(t)})}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2(\varphi(x)e^{i\alpha(t)})}{\partial x^2} + V(x)\varphi(x)e^{i\alpha(t)}$$

$$\Leftrightarrow -\hbar\varphi(x)\frac{\partial\alpha(t)}{\partial t}e^{i\alpha(t)} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\varphi(x)}{\partial x^2}e^{i\alpha(t)} + V(x)\varphi(x)e^{i\alpha(t)}$$

$$\Leftrightarrow -\hbar\frac{\partial\alpha(t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\varphi(x)}{\varphi(x)\,\partial x^2} + V(x)\ car\ \varphi(x)e^{i\alpha(t)} \neq 0$$

$$\Leftrightarrow -\hbar\dot{\alpha}(t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\ddot{\varphi}(x)}{\varphi(x)} + \underbrace{V(x)}_{énergie}$$

Posons $\dot{\alpha}(t) = -\omega$. Le produit $\hbar\dot{\alpha}$ est homogène à une énergie donc on pose $\dot{\alpha}(t) = -\omega\ et\ E = \hbar\omega$.

$\Rightarrow \alpha = -\omega t + \alpha(0)$. La constante peut être mise dans $\varphi(x)$ d'où :

$$\Rightarrow \Psi(x,\mathrm{t}) = \varphi(x)e^{-i\omega t} = \varphi(x)e^{-\frac{iE}{\hbar}t}$$

b) Retrouver l'expression de la fonction d'onde et les niveaux d'énergie dans le cas du puits infini.

- En dehors du puits

L'équation d'onde de Schrödinger indépendante du temps s'écrit :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\varphi(x)}{\partial x^2} + V(x)\varphi(x) = E\,\varphi(x)$$

Or $V(x) \to \infty$ donc nécessairement $\varphi(x) \to 0$

- Dans le puits

L'équation d'onde de Schrödinger indépendante du temps s'écrit :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\varphi(x)}{\partial x^2} = E\,\varphi(x) \Leftrightarrow \frac{\partial^2\varphi(x)}{\partial x^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\varphi(x) = 0$$

1^er cas $E < 0$: On pose $k = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}$ et la solution s'écrit : $\varphi(x) = Ae^{kx} + Be^{-kx}$

Or :

$$\varphi(0)=\varphi(a)=0\Rightarrow\begin{cases}A+B=0\\ Ae^{ka}-Ae^{-ka}=0\end{cases}$$
$$\Rightarrow\begin{cases}A=-B\\ 2A\,sh(ka)=0\end{cases}\Rightarrow\begin{cases}A=0\\ ou\ ka=0\ (impossible)\end{cases}$$

Par conséquent : $\varphi(x)=0$.

2ème cas E=0 : l'équation de Schrödinger s'écrit : $\frac{\partial^2\varphi(x)}{\partial x^2}=0\Rightarrow\varphi(x)=Ax+B$

Or :

$$\varphi(0)=\varphi(a)=0\Rightarrow\varphi(x)=0\ ce\ qui\ n'est\ pas\ une\ solution\ acceptable$$

3ème cas $E>0$ *:* On pose $k=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ et la solution s'écrit :

$$\varphi(x)=Asin(kx)+Bcos(kx)$$

Or :

$$\varphi(0)=\varphi(a)=0\Rightarrow\begin{cases}B=0\\ Asin(ka)=0\end{cases}$$
$$\Rightarrow\begin{cases}A=0\ (inintéressant)\\ ou\ \sin(ka)=0\end{cases}$$

Afin d'éviter la solution A = B = 0, on impose $\sin(ka)=0$. Les seules valeurs permises pour le vecteur d'onde sont les valeurs :

$$k_n=\frac{n\pi}{a}\ \text{où}\ n\in\mathbb{N}^*$$
$$\Rightarrow\varphi_n(x)=A_n sin(k_n x)=A_n sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

La constante A_n doit être déterminée par la condition de normalisation :

$$\int_0^a|\varphi_n(x)|^2dx=1$$
$$\Leftrightarrow\int_0^a A_n^2\sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)dx=1$$
$$\Leftrightarrow A_n^2\int_0^a\sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)dx=1$$
$$\Leftrightarrow A_n^2\times\frac{a}{2}=1$$
$$\Leftrightarrow A_n=\sqrt{\frac{2}{a}}$$
$$\Rightarrow\varphi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

À partir de la relation $k=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$, on obtient les valeurs possibles de l'énergie de la particule quantique :

$$E_n=\frac{\hbar^2k^2}{2m}=\frac{\hbar^2}{2m}\frac{n^2\pi^2}{a^2}$$
$$\Rightarrow E_n=n^2\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$$

On remarque que la baisse de « hauteur » du puits entraîne une baisse des niveaux d'énergie.

c) Retrouver l'expression de l'énergie de confinement quantique.

Nous avons montré ci-dessus que la fonction d'onde pouvait s'écrire comme la somme de deux ondes harmoniques planes progressant dans des sens opposés, caractérisées par des vecteurs d'onde :

$$\overrightarrow{k_n}=\pm k_n\overrightarrow{u_x}\Rightarrow\overrightarrow{p_n}=\pm p_n\overrightarrow{u_x}$$

On conclut que la quantité de mouvement moyenne de la particule quantique est nulle, quel que soit le niveau d'énergie considéré :

$$\langle p_x\rangle=0$$
$$\Rightarrow\Delta p_x=\sqrt{\langle p_x^2\rangle-\langle p_x\rangle^2}=\sqrt{\langle p_x^2\rangle}$$

Or dans le puits :

$$\begin{cases}\Delta x\leq a\\ \Delta p_x\Delta x\geq\frac{\hbar}{2}\end{cases}$$
$$\Rightarrow\Delta p_x\geq\frac{\hbar}{2a}\Rightarrow\langle p_x^2\rangle\geq\frac{\hbar^2}{4a^2}$$

Dans ce même puits :

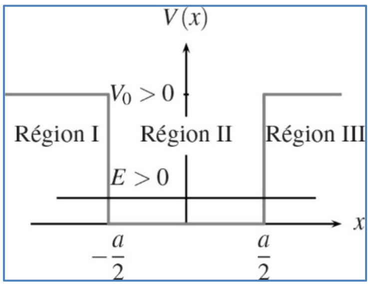
$$\begin{cases} V(x) = 0 \\ E = E_c = \dfrac{p_x^2}{2m} \end{cases}$$

On en déduit que l'énergie cinétique de la particule quantique confinée dans le puits est bornée par une valeur minimale :

$$E_c \geq \frac{\hbar^2}{4a^2} \times \frac{1}{2m}$$

$$\Rightarrow E \geq E_{c,min} = \frac{\hbar^2}{8ma^2}$$

d) *Dans le cas du puits fini, à partir d'une représentation graphique, donner qualitativement les valeurs des niveaux d'énergie. Comparer les au puits fini.*



Supposons que l'on connaisse une fonction d'onde propre $\varphi(x)$ solution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps, et correspondant à une valeur E de l'énergie :

$$\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\big(E - V(x)\big)\varphi(x) = 0$$

Lorsqu'on transforme x en -x, cette équation se transforme comme suit :

$$\frac{d^2\varphi(-x)}{d(-x)^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\big(E - V(-x)\big)\varphi(-x) = 0 \Rightarrow \frac{d^2\varphi(-x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\big(E - V(x)\big)\varphi(-x) = 0$$

On constate que $\varphi(x)$ et $\varphi(-x)$ sont toutes deux des fonctions d'onde propres associées à la même valeur de l'énergie E. On peut alors construire, deux nouvelles fonctions d'onde propres :

$$\begin{cases} \varphi_s(x) = \gamma\big(\varphi(x) + \varphi(-x)\big) \\ \varphi_a(x) = \gamma\big(\varphi(x) - \varphi(-x)\big) \end{cases}$$

$\varphi_s(x)$ est une fonction paire de x (fonction d'onde propre symétrique)

$\varphi_a(x)$ est impaire (fonction d'onde propre antisymétrique).

Les états liés de la particule quantique correspondent à $0 \leq E \leq V_0$. Les fonctions d'ondes doivent vérifier :

$$\begin{cases} Région\ II : \dfrac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + \dfrac{2m}{\hbar^2}E\varphi(x) = 0 \\ Région\ I\ et\ III : \dfrac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + \dfrac{2m}{\hbar^2}\underbrace{(E - V_0)}_{<0}\varphi(x) = 0 \end{cases}$$

Posons :

$$\begin{cases} k = \sqrt{\dfrac{2m}{\hbar^2}E} \\ q = \sqrt{-\dfrac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} Région\ II : \dfrac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + k^2\varphi(x) = 0 \\ Région\ I\ et\ III : \dfrac{d^2\varphi(x)}{dx^2} - q^2\varphi(x) = 0 \end{cases}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} Région\ I : \varphi_s(x) = A_1e^{qx} + B_1e^{-qx} \\ et\ \varphi_a(x) = C_1e^{qx} + D_1e^{-qx} \\ Région\ III : \varphi_s(x) = A_1e^{-qx} + B_1e^{qx} \\ et\ \varphi_a(x) = -C_1e^{-qx} - D_1e^{qx} \\ Région\ II : \varphi_s(x) = A_2\cos(kx) = \varphi_s(-x) \\ et\ \varphi_a(x) = C_2\sin(kx) = -\varphi_a(-x) \end{cases}$$

La fonction d'onde propre ne peut pas diverger :

En $x \to -\infty$, dans la région I

En $x \to +\infty$, dans la région III

D'où :

$$\begin{cases} Région\ I : \varphi_s(x) = A_1e^{qx}\ et\ \varphi_a(x) = C_1e^{qx} \\ Région\ III : \varphi_s(x) = A_1e^{-qx}\ et\ \varphi_a(x) = -C_1e^{-qx} \\ Région\ II : \varphi_s(x) = A_2\cos(kx)\ et\ \varphi_a(x) = C_2\sin(kx) \end{cases}$$

On admet la continuité de $\varphi\ et\ \frac{d\varphi}{dx}$ aux limites qui provient de l'équation de Schrödinger d'où :

$$\begin{cases} \varphi_s\left(-\dfrac{a}{2}\right) = A_1e^{-\frac{qa}{2}} = A_2\cos\left(\dfrac{ka}{2}\right) \\ \left.\dfrac{d\varphi_s}{dx}\right|_{-\frac{a}{2}} = qA_1e^{-\frac{qa}{2}} = -kA_2\sin\left(-\dfrac{ka}{2}\right) \end{cases} \Rightarrow q = k\tan\left(\frac{ka}{2}\right)$$

Avec $\varphi_a(x)$ on obtient :

$$\begin{cases} \varphi_a\left(-\frac{a}{2}\right) = C_1 e^{-\frac{qa}{2}} = C_2 \sin\left(-\frac{ka}{2}\right) \\ \left.\frac{d\varphi_a}{dx}\right|_{-\frac{a}{2}} = qC_1 e^{-\frac{qa}{2}} = kA_2 \cos\left(-\frac{ka}{2}\right) \end{cases} \Rightarrow q = -k \cot\left(\frac{ka}{2}\right)$$

Posons :

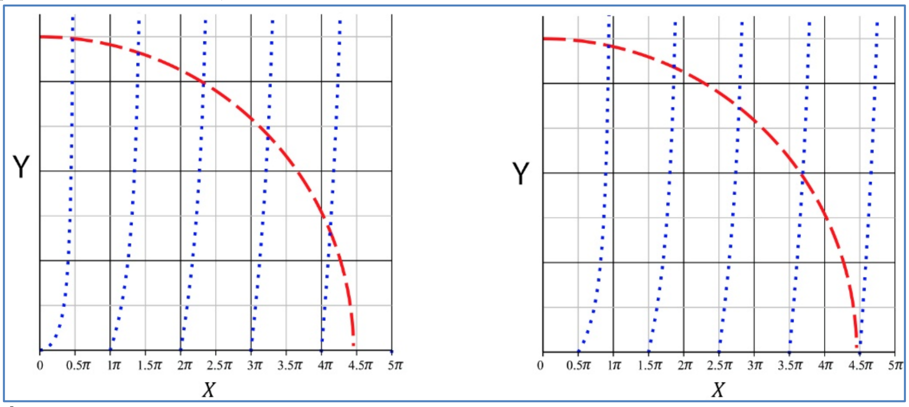
$$\begin{cases} X = \frac{ka}{2} \\ Y = \frac{qa}{2} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} Y = X \tan(X) \\ Y = -X \cot(X) \end{cases}$$

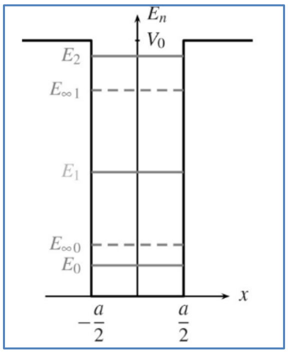
De plus :

$$k^2 + q^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}$$
$$\Rightarrow X^2 + Y^2 = R^2 = \frac{ma^2V_0}{2\hbar^2}$$

Il s'agit donc de trouver les intersections de ce cercle d'équation $X^2 + Y^2 = R^2$ avec les courbes d'équation $Y = X\tan(X)\ et\ Y = -X\cot(X)$

Pour une largeur du puits « a » donnée, ces intersections sont en nombre fini.





Solutions pour $X = \frac{ka}{2}$ et $Y = \frac{qa}{2}$ dans le cas des solutions symétriques à gauche et antisymétriques à droite. Sur notre exemple on a :

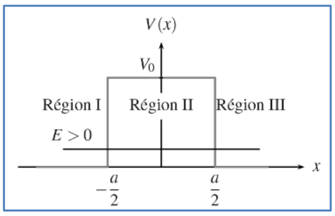
$$X_n = \{0{,}49\pi\,;0{,}95\pi\,;1{,}4\pi\,;\ldots;4{,}1\pi\}\ soit\ neuf\ valeurs.$$

Les solutions obtenues sont en nombre fini et alternent entre solutions symétriques et antisymétriques. Aux solutions discrètes obtenues pour X, correspondent des valeurs quantifiées de k donc de l'énergie.

En repérant par un indice n les solutions obtenues pour X (avec *n* pair pour les solutions symétriques et n impair pour les solutions antisymétriques), on obtient :

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{2\hbar^2}{ma^2} X_n^2$$

e) Effet tunnel : écrire les conditions aux limites puis donner l'expression du coefficient de transmission dans le cas d'une barrière épaisse à partir du résultat général suivant : $T = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} sh^2(qa)}$



On se limite aux états liés de la particule quantique correspondent à $0 \leq E \leq V_0$. Les fonctions d'ondes doivent vérifier :

$$\begin{cases} Région\ I\ et\ III : \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E\varphi(x) = 0 \\ Région\ II : \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \underbrace{(E - V_0)}_{<0} \varphi(x) = 0 \end{cases}$$

Posons :

$$\begin{cases} k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E} \\ q = \sqrt{-\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} Région\ I\ et\ III : \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + k^2\varphi(x) = 0 \\ Région\ II : \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} - q^2\varphi(x) = 0 \end{cases}$$

D'où les solutions :

$$\Rightarrow \begin{cases} Région\ I: \ \varphi(x) = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx} \\ Région\ III: \ \varphi(x) = A_3 e^{ikx} + B_3 e^{-ikx} \\ Région\ II: \ \varphi(x) = A_2 e^{qx} + B_2 e^{-qx} \end{cases}$$

Dans la région III, on a superposition d'une OPPH se propageant dans le sens des x croissants et d'une OPPH se propageant dans le sens des x décroissants. Mais, physiquement, dans la région III, il ne peut pas y avoir de particules venant de la droite puisqu'il n'y a pas de sources à $+\infty$ donc donc $B_3 = 0$.
Exploitons les continuités de $\varphi(x)\ et\ \varphi'(x)$ aux limites.

Soit :

$$\begin{cases} \varphi\left(-\frac{a}{2}\right) = A_1 e^{-\frac{ika}{2}} + B_1 e^{\frac{ika}{2}} = A_2 e^{-\frac{qa}{2}} + B_2 e^{\frac{qa}{2}} \\ \varphi\left(\frac{a}{2}\right) = A_3 e^{\frac{ika}{2}} = A_2 e^{\frac{qa}{2}} + B_2 e^{-\frac{qa}{2}} \\ \varphi'\left(-\frac{a}{2}\right) = ik\left(A_1 e^{-\frac{ika}{2}} - B_1 e^{\frac{ika}{2}}\right) = q\left(A_2 e^{-\frac{qa}{2}} - B_2 e^{\frac{qa}{2}}\right) \\ \varphi'\left(\frac{a}{2}\right) = ikA_3 e^{\frac{ika}{2}} = q\left(A_2 e^{\frac{qa}{2}} - B_2 e^{-\frac{qa}{2}}\right) \end{cases}$$

Après calculs on obtient (cf cours) :

$$T = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} sh^2(qa)}$$

Supposons le cas d'une barrière épaisse tel que : $qa \gg 1$, alors $sh^2(qa) \sim \frac{e^{2qa}}{4} \gg 1$.

D'où :

$$\Rightarrow T \sim \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-\frac{2a}{\delta}} \text{ où } \delta = \frac{1}{q} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}$$