

Dans le cas d'une particule libre pour laquelle $\psi(x, t) = Ae^{i(px/\hbar - \omega t)}$, le courant vaut

$$j = |A|^2 \frac{p}{m} ,$$

ce qui donne une forme assez explicite **courant** = **densité** \times **vitesse**, bien que dans le cas général, l'équation 2.4 soit assez peu intuitive.

Remarque : en présence d'un champ magnétique $\vec{j} = \frac{1}{m} \text{Re} \left(\psi^* \left[\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - q\vec{A} \right] \psi \right)$, avec \vec{A} le potentiel vecteur (on remplace \vec{p} dans \vec{j} par $\vec{p} - q\vec{A}$, comme dans le hamiltonien - voir Chapitre 3).

[Cohen Chap. 3 (p. 224-240) mais aussi : Le Bellac Chap. 9 (p. 273-303) et Chap. 11 et Basdevant Chap. 15 (p. 319)]

2.3 Exemples d'application de la mécanique ondulatoire

2.3.1 Particule dans un potentiel scalaire indépendant du temps

On plonge une particule dans un potentiel indépendant du temps $V(\vec{r})$. Lorsque le potentiel varie de manière appréciable sur des distances plus courtes que la longueur d'onde, des effets quantiques se produisent. On cherche s'il existe des solutions stationnaires

$$\psi(\vec{r}, t) = \phi(\vec{r})\chi(t) .$$

L'équation de Schrödinger devient

$$i\hbar\phi(\vec{r})\frac{\partial\chi(t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\chi(t)\Delta\phi(\vec{r}) + \chi(t)V(\vec{r})\phi(\vec{r}) ,$$

qui, en divisant par ψ , donne

$$i\hbar\frac{1}{\chi(t)}\frac{\partial\chi(t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\phi(\vec{r})}\Delta\phi(\vec{r}) + V(\vec{r}) . \quad (2.5)$$

Le membre de gauche ne contient que des fonctions de t et celui de droite de \vec{r} , donc ils doivent tous deux être égaux à une même constante qu'on appelle (au hasard) $\hbar\omega$. D'où

$$\chi(t) = Ae^{-i\omega t} ,$$

et ϕ est solution de

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\phi(\vec{r}) + V(\vec{r})\phi(\vec{r}) = \hbar\omega\phi(\vec{r}) . \quad (2.6)$$

Il ne nous reste plus qu'à déterminer $\phi(\vec{r})$ pour avoir une solution stationnaire de l'équation de Schrödinger

$$\psi(\vec{r}, t) = \phi(\vec{r})e^{-i\omega t} ,$$

(ici on choisit $A = 1$).

On voit qu'on a été amené à définir une pulsation ω pour cet état stationnaire, son énergie $E = \hbar\omega$ est donc bien définie et un état stationnaire est un état propre d'énergie. L'équation 2.6 se réécrit

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r}) \right] \phi(\vec{r}) = \mathcal{H}\phi(\vec{r}) = E\phi(\vec{r}) , \quad (2.7)$$

avec \mathcal{H} l'opérateur différentiel

$$\mathcal{H} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r}) \right] .$$

Les solutions du problème sont donc données par les "fonctions propres" de l'opérateur \mathcal{H} et leurs "valeurs propres" associées qui sont les "énergies propres" du système. La quantification de l'énergie provient du fait que seules certaines de ces solutions seront de carré sommable. [Cohen p.33]

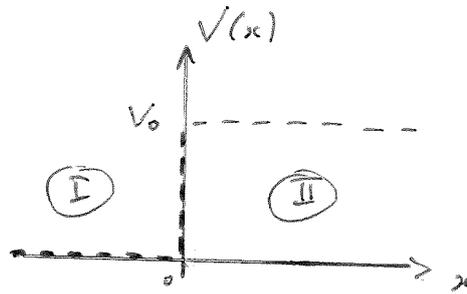


FIGURE 2.6 – Marche de potentiel.

2.3.2 Exemple de la marche de potentiel

On considère le potentiel unidimensionnel $V(x) = V_0\Theta(x)$, où $\Theta(x)$ est une fonction de Heaviside qui vaut $\Theta = 1$ pour $x > 0$ et 0 partout ailleurs (Fig. 2.6).

On sépare l'espace en deux régions :

— dans la région I la particule est libre. On a déjà résolu l'équation de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\phi(x) = E\phi(x) ,$$

dans ce cas et les solutions sont

$$\phi_I(x) = A_I e^{ik_I x} + B_I e^{-ik_I x}$$

avec $k_I > 0$ et A_I, B_I des constantes complexes. Ces fonctions sont associées aux valeurs propres $E = \hbar\omega = \frac{\hbar^2 k_I^2}{2m}$.

— Cas de la région II, $V(x) = V_0$. Dans un cas classique, seule une particule d'énergie $E > V_0$ peut exister dans cette région. Une analogie classique serait de dire qu'une particule provenant de I passe la barrière si $E > V_0$ et est réfléchié sinon. Mais ici on a un problème ondulatoire, une analogie plus correcte serait dans le domaine de l'optique.

— Pour $E > V_0$, une onde lumineuse se propageant vers la barrière depuis I est dans un milieu d'indice $n_I = \frac{c}{\hbar\omega} \sqrt{2mE}$ arrive en $x = 0$ dans un milieu d'indice $n_{II} = \frac{c}{\hbar\omega} \sqrt{2m(E - V_0)}$. On calcule ensuite la proportion de lumière réfléchié et réfracté. En mécanique quantique, l'interprétation est la suivante : on calcule la *probabilité* de réflexion ou de passage d'une particule. L'équation de Schrödinger s'écrit dans la région II

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\phi(x) = (E - V_0)\phi(x) ,$$

ce qui mène à des solutions de la même forme que dans le cas libre

$$\phi_{II}(x) = A_{II} e^{ik_{II} x} + B_{II} e^{-ik_{II} x}$$

mais cette fois

$$E - V_0 = \frac{\hbar^2 k_{II}^2}{2m} .$$

— Pour $E < V_0$, l'indice n_{II} est imaginaire pur, il n'existe pas de solution propagative, seule une onde évanescence peut exister, les solutions étant de la forme

$$\phi_{II}(x) = A_{II} e^{k_{II} x} + B_{II} e^{-k_{II} x} ,$$

avec

$$V_0 - E = \frac{\hbar^2 k_{II}^2}{2m} .$$

Calculons maintenant la part d'onde réfléchi et transmise. Pour cela, il nous faut finir de résoudre notre problème : en effet, pour l'instant nous nous sommes contentés de donner les formes admises dans les différentes régions mais les amplitudes restent inconnues. Pour lever cet inconnu, nous utilisons les contraintes imposées sur les amplitudes par la continuité de la fonction d'onde (bien que le potentiel soit discontinu, ce qui est une modélisation simplifiée, la fonction d'onde reste continue, ainsi que sa dérivée par rapport à x , tant que le saut de potentiel est fini ; seule sa dérivée seconde est discontinue [Cohen Chap. 2 p.35 et Chap. 3 p.69, Basdevant p.68]). On pourrait dire que les conditions aux limites assurent la continuité de $\phi(x)$ et $\phi'(x)/\phi(x)$ (dérivée logarithmique de ϕ), c'est à dire de la fonction d'onde et du courant de probabilité. Considérons le cas d'une onde incidente dans I pouvant se réfléchir ou être transmise et utilisons les conditions

$$\begin{aligned}\phi_I(0) &= \phi_{II}(0) , \\ \phi'_I(0) &= \phi'_{II}(0) .\end{aligned}$$

Cas $E > V_0$, réflexion partielle : on a

$$\phi_I(x) = A_I e^{ik_I x} + B_I e^{-ik_I x} ,$$

et

$$\phi_{II}(x) = A_{II} e^{ik_{II} x} + B_{II} e^{-ik_{II} x} .$$

Nous n'avons pas assez d'équations pour déterminer la totalité des amplitudes, seulement deux conditions aux limites. Cela est normal, l'information physique étant contenu dans deux rapports parmi A_I/A_{II} , A_I/B_I et B_I/B_{II} que l'on va pouvoir déterminer. On se limite donc au cas d'une particule incidente depuis $x = -\infty$ en prenant $B_{II} = 0$. Les conditions aux limites imposent donc

$$\begin{aligned}A_I + B_I &= A_{II} , \\ ik_I(A_I - B_I) &= ik_{II}A_{II} ,\end{aligned}$$

d'où

$$\begin{aligned}\frac{B_I}{A_I} &= \frac{k_I - k_{II}}{k_I + k_{II}} , \\ \frac{A_I}{A_{II}} &= \frac{k_I + k_{II}}{2k_I} .\end{aligned}$$

ϕ_I représente la superposition entre particule incidente et réfléchi, le coefficient de réflexion est défini comme le rapport des courants de probabilité incident et réfléchi :

$$R = \left| \frac{B_I}{A_I} \right|^2 = 1 - \frac{4k_I k_{II}}{(k_I + k_{II})^2} ,$$

et de la même manière le coefficient de transmission est

$$T = \frac{k_{II}}{k_I} \left| \frac{A_{II}}{A_I} \right|^2 = 1 - R .$$

Si $E \gg V_0$ alors $T \approx 1$.

Cas $E < V_0$, réflexion totale : on a

$$\phi_I(x) = A_I e^{ik_I x} + B_I e^{-ik_I x} ,$$

et

$$\phi_{II}(x) = B_{II} e^{-k_{II} x} ,$$

en ne conservant que l'onde évanescence décroissante dans le sens des x croissants puisque l'autre terme est divergent. Les conditions aux limites donnent alors

$$\frac{B_I}{A_I} = \frac{k_I - ik_{II}}{k_I + ik_{II}} ,$$

$$\frac{A_I}{B_{II}} = \frac{k_I + ik_{II}}{2k_I} .$$

D'où

$$R = \left| \frac{B_I}{A_I} \right|^2 = 1 ,$$

on a une réflexion totale ! Toutefois, la particule pénètre dans la région II ce qui lui serait interdit en mécanique classique, mais sa probabilité de présence décroît exponentiellement. Cette décroissance se fait sur une longueur caractéristique $1/k_{II}$. Cela entraîne un retard à la réflexion qui se traduit par un déphasage (reconnaisable au caractère complexe de $\frac{B_I}{A_I}$). [Cohen p.73, Basdevant p.69]

2.3.3 Effet tunnel

Considérons maintenant que la marche de potentiel se termine en $x = \ell$ pour former une barrière de potentiel $V(x) = V_0\Pi_\ell(x)$, où $\Pi_\ell(x)$ est une fonction porte qui vaut $\Pi_\ell = 1$ pour $x \in [0 : \ell]$ et zéro partout ailleurs (Fig. 2.7a).

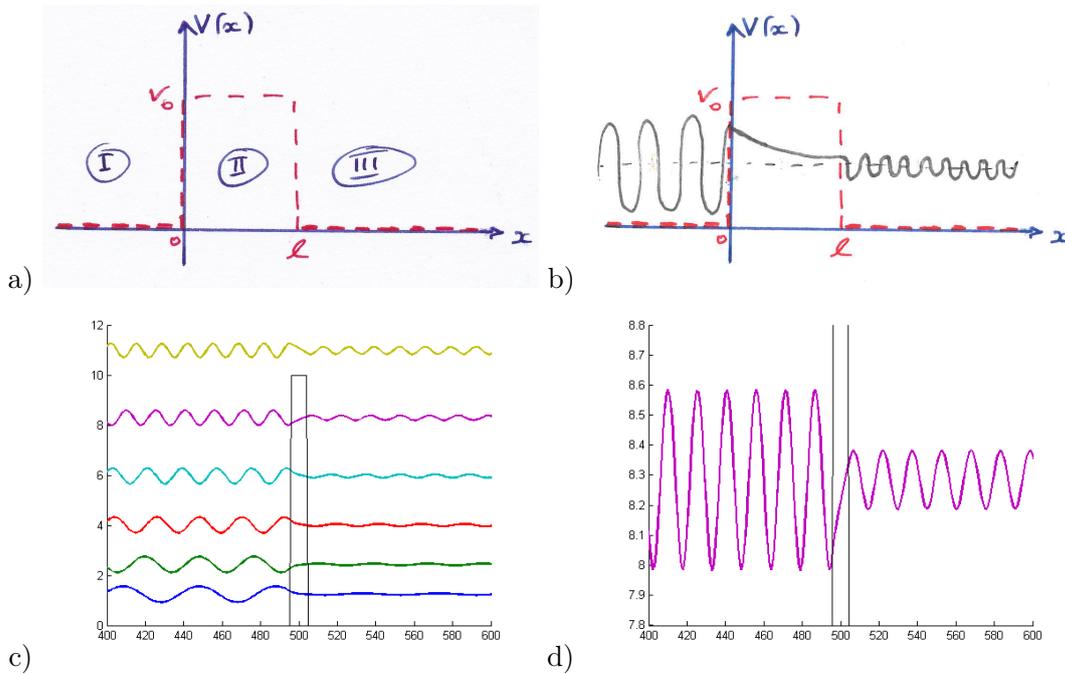


FIGURE 2.7 – a) Forme du potentiel pour l'étude simple de l'effet tunnel. b) Passage par effet tunnel. c,d) Résultats numériques.

On sépare cette fois l'espace en trois régions et dans III les solutions sont les mêmes que dans I : des ondes planes. Nous nous contenterons ici d'une description qualitative.

— Pour $E > V_0$, une particule classique passerait la barrière mais pour une onde lumineuse cela correspondrait au cas d'une lame d'épaisseur ℓ et d'indice $n_{II} = \frac{c}{\hbar\omega} \sqrt{2m(E - V_0)}$ séparant deux milieux d'indice $n_I = n_{III} = \frac{c}{\hbar\omega} \sqrt{2mE}$. Cette analogie nous permet tout de suite de conclure qu'une particule quantique dans ce cas aura une probabilité d'être réfléchi non nulle et de même une probabilité non nulle d'être transmise.

— Pour $E < V_0$, l'indice n_{II} est imaginaire pur, et il n'existe toujours pas de solution propagative, seule une onde évanescente peut exister. Toutefois, les ondes évanescentes ont une valeur non nulle partout dans II (sauf si la seule solution acceptable était $A_{II} = B_{II} = 0$, mais ça n'est pas le cas) ce qui veut dire que la probabilité de passage à travers la barrière est non nulle (Fig. 2.7b). Voilà un résultat impossible dans le cas d'une particule classique mais autorisé par le caractère ondulatoire des particules quantiques.

[Cohen p.35 et 73 et 69]

Approximation de barrière épaisse : dans le cas où $\ell \gg 1/\kappa$, c'est à dire où la largeur ℓ de la marche de potentiel est grande devant la longueur typique $1/\kappa$ sur laquelle la fonction d'onde décroît dans le région II , le coefficient de transmission prend une forme simple $T \propto \exp(-2\kappa\ell)$ dont la validité dépend de la valeur de $E - V_0$ et de ℓ [Le Bellac Chap. 9].

2.3.4 L'effet tunnel : un effet ondulatoire classique

Expérience : L'effet tunnel est un effet ondulatoire, pas purement quantique. On peut obtenir une onde évanescente dans le domaine des micro-ondes avec un prisme de paraffine [P089-004] (Fig. 2.8a). En choisissant un angle d'incidence tel que la réflexion à l'intérieur du prisme est totale, on obtient en sortie du prisme une onde réfléchie mais pas d'onde réfractée : seule une onde évanescente est produite à la sortie du dioptre sur lequel s'effectue la réflexion totale. Par contre, si l'on approche un autre prisme de paraffine, l'onde évanescente peut générer une onde propagative dans celui-ci, et l'on détecte une onde à la sortie du second prisme (Fig. 2.8b). C'est l'effet tunnel électromagnétique.

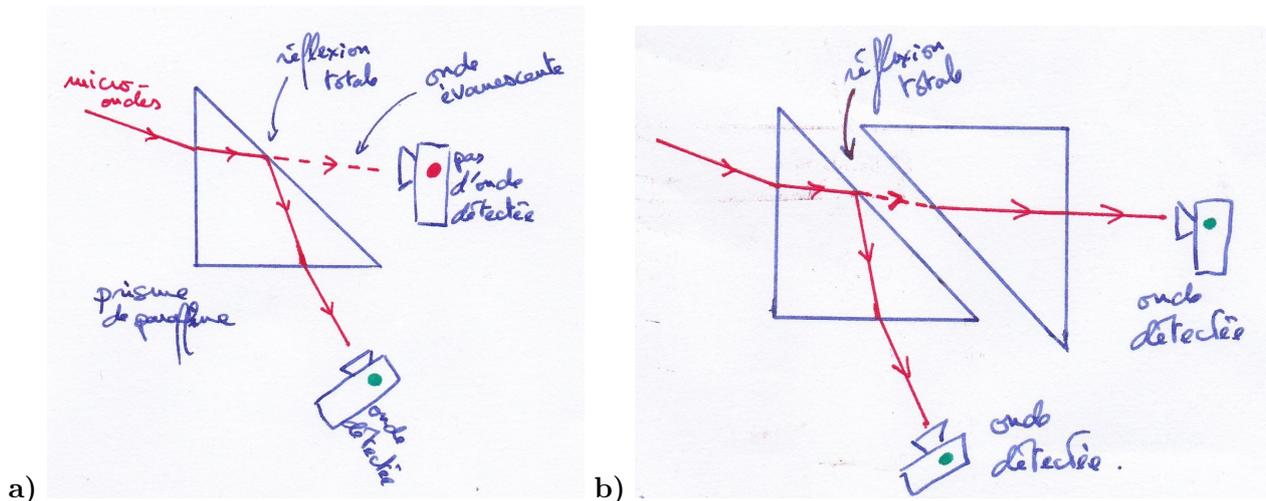


FIGURE 2.8 – Effet tunnel électromagnétique à l'aide de source et récepteurs micro-ondes et de prismes de paraffine. (Voir encadré décrivant l'expérience).

2.3.5 Applications de l'effet tunnel

Cas d'un potentiel de forme quelconque : la réflexion et transmission sur une barrière/un puits de forme quelconque peut être abordée [Cohen Complément M_{III}] mais les solutions analytiques sont évidemment difficiles à obtenir. Une approximation fréquemment utilisée consiste à décomposer le potentiel en une succession de marches finies de potentiel de largeur Δx , Fig.2.9. En se plaçant dans le cas d'une particule incidente d'énergie $E < \max(V(x))$ et en utilisant le résultat pour l'effet tunnel dans le cas d'une barrière épaisse, on peut calculer le facteur de transmission dans l'intervalle $[x_i, x_i + \Delta x]$

$$T(x_i) \approx \exp(-2\kappa(x_i)\Delta x),$$

avec

$$\kappa(x_i) = \sqrt{\frac{2m(V(x_i) - E)}{\hbar^2}}.$$

Le facteur de transmission total est alors

$$T \approx \prod_i \exp(-2\kappa(x_i)\Delta x) = \exp\left(-2\Delta x \sum_i \kappa(x_i)\right) \xrightarrow{\Delta x \rightarrow 0} \exp\left(-2 \int_{x_1}^{x_2} \kappa(x) dx\right),$$

avec $V(x_1) = E$ et $V(x_2) = E$ définissant x_1 et x_2 . Une première remarque est que l'exponentielle dans ce résultat rend T très sensible à l'énergie E de la particule et la hauteur du potentiel $V(x)$. [Le Bellac Chap. 9] Il faut s'assurer que les approximations que nous avons faites, notamment celle de barrière épaisse, restent valide lors d'un tel raisonnement. Cette approximation n'est valable que si la barrière varie sur une distance grande devant la longueur d'onde de l'état de diffusion (i.e. qui traverse par effet tunnel) considéré (ce qui assure que le nombre d'onde $\kappa(x)$ ne varie pas trop vite, i.e. que $|\mathrm{d}\kappa/\mathrm{d}x| \ll [\kappa(x)]^2$ - cela est impossible s'il existe des points intermédiaires où $\kappa(x) = 0$ i.e. $V(x) = E$). De plus, il faudrait dans cette approche prendre en compte les ondes réfléchies et transmises à travers chaque barrière infinitésimale : l'approximation consiste à ne garder que le terme sans aucune réflexion [pour plus de détails voir : *The W.K.B. Approximation as the First Term of a Geometric-Optical Series*, H. Bremmer, Comm. Pure Appl. Math. 4 (1) p. 105 (1951)]. De tels détails sur la question sont déjà assez poussés et la complexité du problème augmente vite si la creuse...

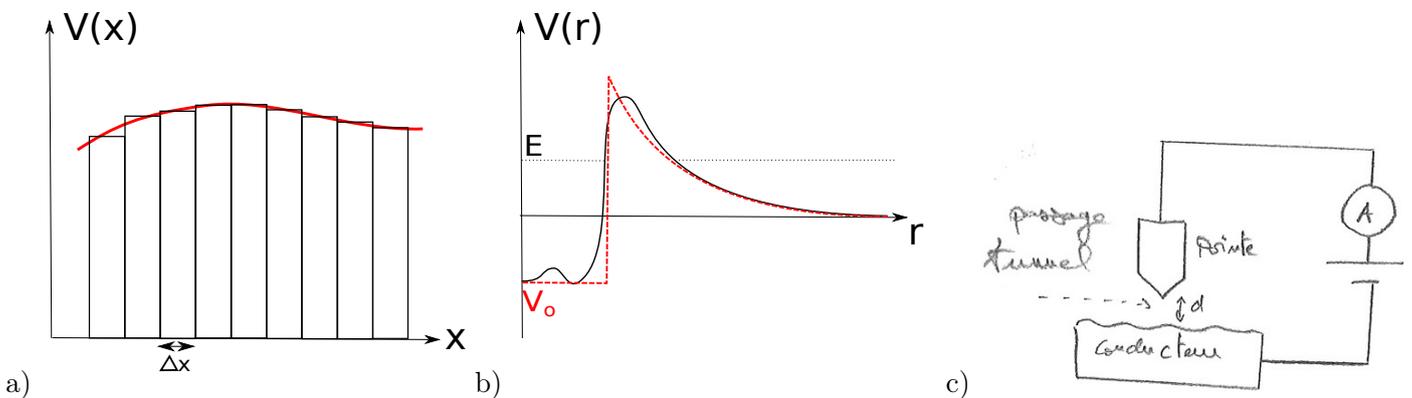
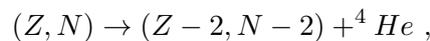


FIGURE 2.9 – a) Décomposition d'un potentiel quelconque en marches de potentiel. b) Schéma d'une barrière de potentiel pour la radioactivité α (noir) et approximation du potentiel dans l'approche de Gamow (rouge). c) Principe du microscope à effet tunnel.

Radioactivité α , théorie de Gamow : dans toute approche théorique, il faut à un moment une approche heuristique de modélisation. On peut par exemple utiliser un calcul de probabilité de passage par effet tunnel pour comprendre la désintégration nucléaire : les constituants d'un noyau atomique sont piégés dans celui-ci par une barrière de potentiel qu'ils ne peuvent franchir que par effet tunnel. Par exemple, la radioactivité α est la désintégration d'un noyau avec émission d'un particule α , c'est à dire un noyau d'hélium ${}^4\text{He}$



avec Z et N le nombre de protons et neutrons dans le noyau initial. En supposant la distribution de charges à symétrie sphérique, on peut se ramener à un problème unidimensionnel qui peut être approximé de la sorte : la particule α ressent le piégeage par le potentiel nucléaire attractif et une répulsion coulombienne avec le noyau final de charge $(Z - 2)$ (le noyau d'hélium portant une charge 2), Fig.2.9b). Gamow (en avance sur son temps, puisque la question de savoir si la mécanique quantique pouvait être appliquée à des édifices atomiques et moléculaires était encore ouverte alors et de nombreux éléments de physique nucléaire restaient à découvrir, comme le neutron [Chadwick, 1932]) proposa en 1928 une approximation du problème en considérant un puit de potentiel rectangulaire pour $r < R$ et une répulsion coulombienne pour $r > R$

$$V_{Cb} = \frac{2(Z - 2)e^2}{r} ,$$

voir Fig.2.9b). Dans cette approximation, la résolution du problème ondulatoire est tractable et se conclue par un bon accord avec la loi expérimentale de Geiger-Nuttall reliant le temps de demi-vie d'isotopes radioactifs avec l'énergie E de la particule α émise

$$\ln(\tau_{1/2}) = AE^{-1/2} + B .$$

La résolution de ce problème implique de prendre en compte non seulement la possibilité d'émission d'une particule α mais aussi la capture d'une telle particule par un noyau. Ce processus inverse intervient aussi dans les réactions de fusion nucléaire.

Remarque : anticipons sur le cours traitant du spin des particules. Le spin de la particule α est en principe important : d'après les symétries du problème, une solution à l'équation de Schrödinger peut se mettre sous la forme $\psi(r, \theta, \phi) = \frac{u(r)}{r} P_\ell^m(\cos(\theta)) e^{im\phi}$ avec P_ℓ^m des solutions de l'équation de Legendre. On se ramène alors à un problème sur $u(r)$

$$\frac{d^2u}{dr^2} + \left[\frac{2m_\alpha}{\hbar^2} (E - V(r)) - \frac{\ell(\ell + 1)}{r^2} \right] u = 0 ,$$

dont on trouve la plupart du temps une résolution dans le cas d'une particule de spin $\ell = 0$ pour laquelle le spin n'intervient pas.

[BUP vol. 85 (mai 1991) *L'effet tunnel quelques applications*; Le Bellac Chap. 9; D. Park, *Introduction to Quantum Physics*, 3rd ed., McGraw-Hill, Inc., 1992]

Microscope à effet tunnel : une application importante de l'effet tunnel a été trouvée dans le domaine de la microscopie. Des électrons peuvent passer par effet tunnel à travers la couche d'air/de vide séparant un échantillon conducteur et la pointe d'un microscope, Fig.2.9c). La dépendance exponentielle de la probabilité de passage par effet tunnel avec l'épaisseur de la barrière de potentiel rend le courant résultant extrêmement sensible à la distance pointe/échantillon et permet d'atteindre une grande résolution ($\sim 0.01\text{nm}$). Un microscope à effet tunnel (STM pour "Scanning Tunneling Microscope") peut également être utilisé pour manipuler et déplacer des atomes individuels à la surface d'un substrat.

[L. Aigouy, Y. De Wilde, C. Fretigny, *Les nouvelles microscopies : à la découverte du nanomonde*; BUP vol. 85 (mai 1991) *L'effet tunnel quelques applications*; BUP n°699 *Le microscope à effet tunnel*; Le Bellac Chap. 9; Basdevant Chap. 4; épreuve A 2015]

Cas d'un potentiel périodique : théorème de Bloch. Le passage d'électrons par effet tunnel à travers un réseau périodique de barrières de potentiel peut être étudié par application du théorème de Bloch : les états stationnaires dans un potentiel périodique

$$V(x) = V(x + \ell) ,$$

sont de la forme

$$\phi_q(x) = e^{iqx} u_{sq}(x) ,$$

avec

$$u_{sq}(x) = u_{sq}(x + \ell) .$$

Cela mène assez simplement à l'explication de l'apparition de bandes d'énergies dans l'étude de la conduction électronique.

[BUP vol. 85 (mai 1991) *L'effet tunnel quelques applications*; Le Bellac Chap. 9; Cohen Complément O_{III}]

2.4 Particule confinée.

On a discuté le fait que plusieurs problèmes posés par la mécanique classique étaient résolus par la MQ comme la stabilité des atomes ou la quantification des niveaux d'énergie. Cette quantification apparaît naturellement en mécanique ondulatoire.

2.4.1 Incertitude de Heisenberg et stabilité de l'atome

Les relations d'incertitude lèvent le problème de la stabilité de la matière en mécanique classique. Dans le cas d'un atome d'hydrogène, un électron est placé dans un potentiel coulombien dû au proton

$$V(\vec{r}) = -\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r} .$$

Supposons pour simplifier une orbite circulaire de rayon r . La condition d'équilibre mécanique est

$$m_e \frac{v^2}{r} = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} ,$$

et l'énergie de l'électron est

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(r) = -\frac{q^2}{8\pi\epsilon_0 r} .$$

Il n'existe pas de borne inférieure à cette énergie, or, comme l'électron est chargé et accéléré, il doit rayonner et donc perdre de l'énergie. La matière devrait donc s'effondrer sur elle-même en l'absence de borne inférieure à l'énergie.

Utilisons maintenant la relation d'incertitude pour faire un raisonnement en ordre de grandeur. Soit $\langle r \rangle$ la distance moyenne de l'électron au noyau : elle donne un OG de l'incertitude sur la position de l'électron et une énergie coulombienne typique $\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 \langle r \rangle}$. Cela permet d'obtenir un OG de l'énergie cinétique puisqu'au mieux

$$\langle p \rangle \langle r \rangle \gtrsim \hbar ,$$

$$E \gtrsim \frac{\hbar^2}{2m_e \langle r \rangle^2} - \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 \langle r \rangle} ,$$

l'expression de droite admettant une borne inférieure! (youpi!) $E_{min} = -\frac{m_e}{2\hbar^2} \left(\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2$. Ceci n'est pas une démonstration mais la même borne E_{min} peut être obtenue rigoureusement et vaut $-13,6$ eV. [Basdevant p.49]

2.4.2 États liés et états de diffusion

Considérons le cas d'une particule dans un potentiel indépendant du temps $V(\vec{r})$, voir figure 2.10. On peut

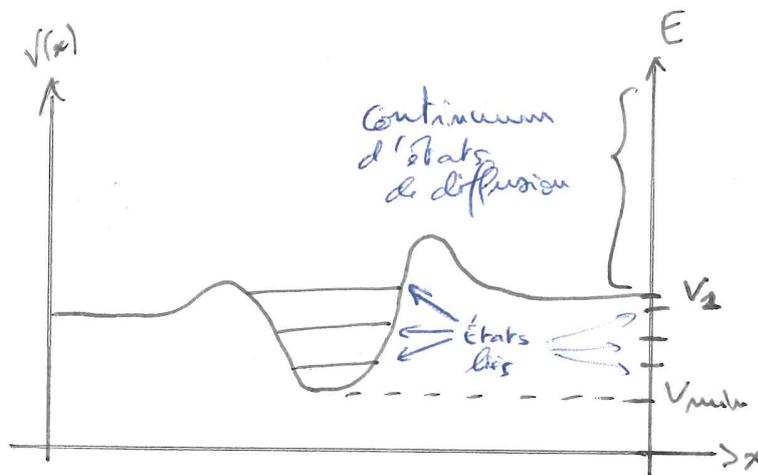


FIGURE 2.10 – États liés et états de diffusion. (Schéma librement inspiré d'une figure de [Basdevant].)

distinguer deux types de solutions

- les états liés : c'est à dire les solutions de carré sommable $\int |\psi_n(\vec{r})|^2 d^3\vec{r} = 1$, ce qui ne se produit que pour des valeurs discrètes d'énergie E_n avec $V_{min} < E_n < V_1$. Cela correspond au cas classique de trajectoires confinées dans une région de l'espace. Ces états étant normalisables, ils peuvent représenter un état physique.
- les états de diffusion : solutions pour un ensemble continu d'énergies, asymptotiquement des ondes planes (par exemple, les solutions dans l'exemple de la barrière de potentiel ci-dessus), donc correspondant à des particules asymptotiquement libres diffusées par le potentiel V . Ils ne correspondent pas à une solution physique mais servent de base à la construction d'un paquet d'onde de carré sommable (qui évolue dans le temps).

Particule confinée 1D : puits infini

Considérons le cas simple d'un puits de potentiel carré. Malgré sa simplicité, un tel potentiel peut servir à décrire un problème dans le cas de force à courtes portées, comme le cas de neutrons et protons confinés dans un noyau, ou un potentiel ressenti par un électron dans des ensembles de semi-conducteurs. En figure 2.11a)

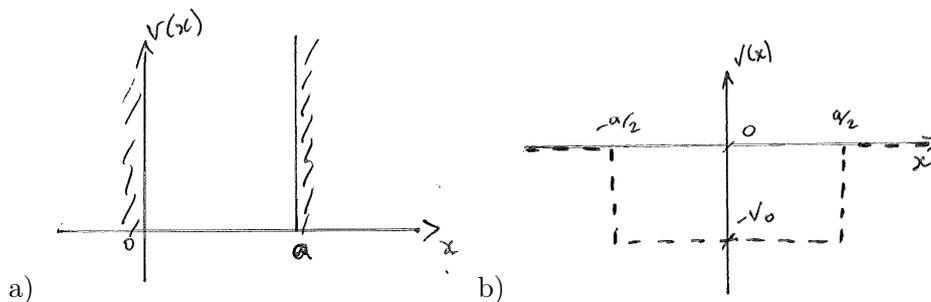


FIGURE 2.11 – Puits de potentiel carrés.

on représente un puits carré de profondeur infinie, c'est à dire qu'on limite l'espace accessible à une particule à $x \in [0, a]$ avec $V(x) = 0$ dans cette région et $V(x) = +\infty$ autre part. On a simplement à résoudre

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\phi(x)}{dx^2} = E\phi(x) ,$$

avec les CL

$$\phi(0) = \phi(a) = 0 .$$

Rq : ici le saut de potentiel est infini et la continuité de la dérivée n'est plus requise [Le Bellac p.276]. En plaçant un mur en $x = 0$, la condition $\phi(0) = 0$ assure qu'on réduit les solutions ϕ à la forme

$$\phi(x) = A \sin(kx) ,$$

avec toujours la relation de dispersion

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

La condition $\phi(a) = 0$ sélectionne des valeurs quantifiées de k autorisées

$$k = k_n = \frac{\pi(n+1)}{a} , n = 0, 1, 2, 3 \dots$$

ce qui entraîne la quantification des niveaux d'énergie. Correctement normalisée, la fonction d'onde correspondant à

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{a}\right)^2 (n+1)^2 ,$$

est

$$\phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi(n+1)x}{a}\right) .$$

Les valeurs négatives de n ne sont pas intéressantes car elles correspondent aux mêmes états physiques que $n \geq 0$, entraînant un simple changement de phase associé au changement $k \rightarrow -k$. La quantification des niveaux d'énergie et du vecteur d'onde apparaît comme une conséquence des conditions aux limites imposées à la fonction d'onde par le confinement de même que la quantification des modes propres d'une corde vibrante est due aux conditions aux limites.

[Le Bellac p.283]

Particule confinée 1D : puits fini

En figure 2.11b) on représente un puits carré de profondeur finie. On cherche à nouveau à résoudre l'équation aux valeurs propres

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\phi(x)}{dx^2} = (E - V(x))\phi(x) .$$

Nous ne reprendrons pas les discussions sur la forme des solutions dans les différentes régions de l'espace puisqu'elles sont presque identiques au cas de la barrière de potentiel (section 2.3.3).

États de diffusion : une particule d'énergie $E > 0$ est libre de se propager dans tout l'espace. Toutefois, de même qu'une particule quantique est diffusée par une barrière de potentiel même si $E > 0$ (alors qu'une particule classique ne verrait pas la barrière), elle est également diffusée par un puits (on s'en convainc facilement en utilisant l'analogie optique de la section 2.3.2). Dans ce cas, les solutions de l'équation aux valeurs propres sont des sinusoides.

États liés : une particule d'énergie $E < 0$ n'est pas libre de se propager hors du puits de potentiel puisque dans les régions I et III seules des ondes évanescentes existent. On a

1. $\phi_I(x) = A_I e^{k_I x}$,
2. $\phi_{II}(x) = A_{II} \cos(k_{II}x) + B_{II} \sin(k_{II}x)$,
3. $\phi_{III}(x) = B_{III} e^{-k_{III}x}$.

Les conditions aux limites imposent deux types de solutions :

- paires : $B_{II} = 0$, $A_I = B_{III}$ et $k_{II} \tan(k_{II}a/2) = k_I = k_{III} = \kappa$,
- impaires : $A_{II} = 0$, $A_I = -B_{III}$ et $k_{II} \cotan(k_{II}a/2) = -k_I = -k_{III} = -\kappa$.

Les conditions sur le vecteur d'onde k_{II} et la longueur caractéristique κ entraîne une quantification de l'énergie. Puisque $\kappa = \sqrt{-2mE/\hbar^2}$ et $k_{II} = \sqrt{2m(V_0 + E)/\hbar^2}$

$$\kappa^2(a/2)^2 + k_{II}^2(a/2)^2 = \frac{2m(a/2)^2 V_0}{\hbar^2} = \text{cste} .$$

cette relation permettant de déterminer graphiquement les valeurs acceptables de k_{II} et κ : dans le plan d'axes $\kappa a/2$ et $k_{II}a/2$ ce sont les points d'intersection entre le cercle de rayon $\sqrt{\frac{2m(a/2)^2 V_0}{\hbar^2}}$ avec les courbes $k_{II}(a/2) \tan(k_{II}a/2) = (a/2)\kappa$ et $k_{II}(a/2) \cotan(k_{II}a/2) = -(a/2)\kappa$ (Fig. 2.12).

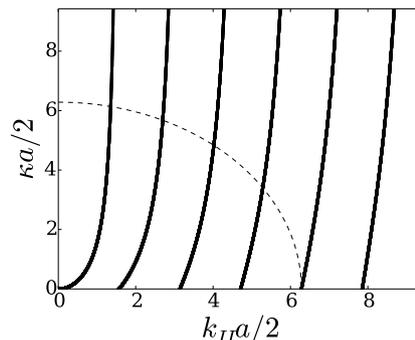


FIGURE 2.12 – Solution graphique pour les états liés du puits de potentiel carré fini

On remarque que le nombre de valeurs pour lesquelles cette relation est vérifiée croît avec V_0 et a et que l'énergie d'une particule est d'autant plus faible que a est grand, donc qu'elle est moins confinée (se voit déjà sur le puits infini). De plus, graphiquement on remarque que pour l'état fondamental k_f du puits fini, on a forcément

$$k_f(a/2) < \pi/2 ,$$

puisque

$$\lim_{(a/2)k_f \rightarrow \pi/2} \tan(k_f(a/2)) = +\infty .$$

Donc l'énergie du mode fondamental

$$E_f = \frac{\hbar^2 k_f^2}{2m} < \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} = E_f^\infty ,$$

est inférieure à l'énergie fondamentale E_f^∞ d'un puits infini de largeur a également. Cela est dû au fait qu'un puits fini autorise des amplitudes non nulles d'ondes évanescentes : la particule quantique a donc une fonction d'onde plus étendue, moins confinée, dans ce cas que dans celui d'un potentiel de hauteur infinie.

[Basdevant Chapitre 4]

Oscillateur harmonique (OH) quantique à 1D

On connaît bien le potentiel harmonique $V(x) = \frac{1}{2}Kx^2$. Le problème classique nous permet d'anticiper l'existence d'une pulsation caractéristique $\omega = \sqrt{K/m}$ et donc on écrit

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 .$$

C'est un potentiel qui permet de décrire de nombreuses situations physiques puisqu'il est une approximation simple d'un potentiel confinant. On a déjà mentionné le corps noir comme application de l'OH mais on peut aussi mentionner la physique moléculaire (vibrations d'une molécule diatomique par exemple) ou la dépendance en température de la capacité calorifique d'un solide...

L'équation aux valeurs propres est

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\phi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \phi(x) = E\phi(x) .$$

On peut adimensionner le problème

$$\epsilon = \frac{E}{\hbar\omega} ,$$

$$y = \frac{x}{\sqrt{\hbar/(m\omega)}} ,$$

réécrivant l'équation aux valeurs propres

$$\frac{1}{2} \left(-\frac{d^2}{dy^2} + y^2 \right) \phi(y) = \epsilon \phi(y) .$$

On verra la résolution complète dans le chapitre suivant et/ou en TD.

[Basdevant p.81] et lien avec opérateurs création/annihilation [Basdevant p.164].

