

Chapitre : Approche ondulatoire de la mécanique quantique

Introduction : Interférences avec des ondes de matière

Nous avons vu en optique qu'on pouvait faire interférer des ondes électromagnétiques. En mécanique classique, la matière est constituée de particules matérielles, souvent considérées comme ponctuelles. Leur état est déterminé par la donnée des 3 coordonnées de position et des 3 composantes de la vitesse.

Des expériences avec des électrons, des atomes... ont été réalisées. On considère le dispositif de fentes d'Young présenté ci-dessous. Une source d'électrons uniques émet les électrons un par un. Lorsqu'un électron arrive sur l'écran, son impact est visible. La figure d'interférence se construit progressivement avec l'accumulation des impacts d'électrons sur l'écran.

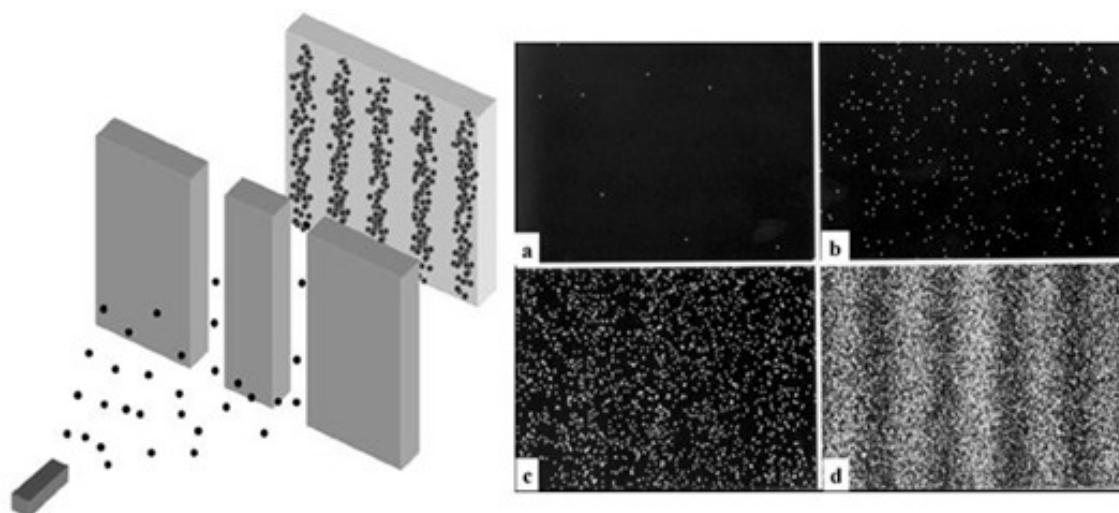


FIGURE 1 – Impacts des électrons sur le détecteur. (a) 8 électrons détectés ; (b) 270 ; (c) 2000 ; (d) 60000.

Cette expérience montre que les électrons ont à la fois un comportement corpusculaire et ondulatoire.

En 1923, Louis de Broglie étend la notion de dualité onde-particule à la matière.

Principe de complémentarité énoncé par Niels Bohr en 1927

La lumière et la matière ont un comportement ondulatoire ou corpusculaire selon l'expérience considérée. Il n'existe pas de description classique cohérente, en termes d'onde ou de particules, permettant d'interpréter tous les phénomènes observés.

I. Fonction d'onde - Équation de Schrödinger

1. Fonction d'onde

Afin d'étudier la propagation des ondes de matière, on introduit un champ scalaire à valeurs complexes $\Psi(M, t)$ appelée fonction d'onde.

Définition

On considère une particule de masse m , à l'instant t dans un référentiel $\mathcal{R}$. L'état dynamique de la particule quantique est donné par la fonction d'onde à valeurs complexes $\Psi(M, t)$.

Densité de probabilité de présence de la particule au point M , à l'instant t :

Probabilité de présence de la particule, à l'instant t , dans un volume $d\tau$ autour du point M :

Remarques :

La fonction d'onde est l'équivalent de la trajectoire en mécanique classique.

La fonction d'onde est définie à un facteur de phase près : $\Psi(M, t)$ et $\Psi(M, t)e^{i\varphi}$, où φ est une constante réelle, représente le même état physique de la particule quantique.

Nous ne traiterons dans ce chapitre que des problèmes unidimensionnels. Par conséquent, la fonction d'onde ne s'écrira qu'en fonction d'une seule coordonnée cartésienne, x par exemple : $\Psi(x, t)$.

Définitions

Densité de probabilité de présence de la particule au point M , à l'instant t :

Probabilité de présence de la particule, à l'instant t , dans l'intervalle $[x, x + dx]$:

Condition de normalisation :

2. Équation de Schrödinger

On considère une particule de masse m dans un référentiel R . Cette dernière est en interaction avec d'autres systèmes, ce qui se traduit par une énergie potentielle. En mécanique quantique, cette énergie potentielle est appelée potentiel et est notée $V(M, t)$.

L'équation décrivant l'évolution dans l'espace et dans le temps de la fonction d'onde est un postulat fondamental de la mécanique quantique proposé par E. Schrödinger. Sa légitimité lui vient de la validation des résultats théoriques par l'expérience.

Équation de Schrödinger :

Cas unidimensionnel :

avec $\hbar$, la constante de Planck réduite :

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,05 \times 10^{-34} \text{ J s}^{-1}$$

II. Équation de Schrödinger pour une particule libre

1. Onde plane progressive harmonique

Définition

On appelle particule libre, une particule évoluant dans le vide et soumise à aucune force.

D'après le principe d'inertie, elle est en mouvement rectiligne uniforme de vecteur vitesse $\vec{v} = v\vec{u}_x$. Puisqu'elle n'est soumise à aucune force, son énergie potentielle est nulle et son énergie mécanique est égale à son énergie cinétique.

On associe à cette particule une onde progressive harmonique de fréquence ν , de longueur d'onde λ .

Relations

Relation de Planck-Einstein :

Relation de de Broglie :

On peut donc écrire :

où ω est la pulsation de l'onde associée à la particule.

Puisque la particule se déplace suivant $\vec{u}_x$, l'onde associée se propage aussi suivant cette direction. Elle s'écrit :

Le vecteur d'onde s'écrit :

Conclusion

L'onde associée à la particule est

La quantité de mouvement de la particule s'écrit

Équation de Schrödinger

L'équation de Schrödinger d'une particule libre s'écrit :

Cette équation n'est pas à retenir, elle sera fournie dans les énoncés.

2. Relation de dispersion

Pour obtenir la relation de dispersion, on procède de la même manière qu'en physique des ondes. On injecte l'onde associée à la particule dans l'équation de Schrödinger.

Relation de dispersion :

On peut retrouver cette relation de dispersion en combinant les expressions de l'énergie de la particule et de la quantité de mouvement.

3. Principe de superposition

L'équation de Schrödinger est linéaire. Par conséquent, toute combinaison linéaire de solutions est aussi solution de cette équation.

Revenons à l'expérience d'interférence avec les fentes d'Young. Les particules peuvent passer soit par la fente 1 soit par la fente 2. Il y a donc deux états possibles pour une particule. Soient $\Psi_1(M, t)$ et $\Psi_2(M, t)$ les deux fonctions d'onde décrivant ces états. Toute combinaison linéaire de ces fonctions décrit aussi un état de la particule. C'est le phénomène d'interférences.

On mesure $|\Psi|^2$, la densité de probabilité de présence.

4. Représentation d'une particule par un paquet d'onde

Soit une particule libre décrite par la fonction d'onde suivante :

La densité de probabilité de présence s'écrit :

Elle est uniforme.

Par conséquent, la fonction d'onde sous forme d'onde plane progressive harmonique ne peut pas satisfaire la condition de normalisation.

Conclusion

On considère que la fonction d'onde est une superposition d'OPPH de vecteurs d'onde et de pulsations proches de k_0 et ω_0 reliés par la relation de dispersion :

La fonction d'onde est donc un paquet d'ondes :

Les deux fonctions $\Psi(x, t)$ et $A(k)$ vérifient la relation de Fourier

où Δx est l'étendue spatiale de $\Psi(x, t)$ et Δk l'étendue de $A(k)$.

On multiplie cette relation par la constante de Planck réduite :

Inégalité d'Heisenberg pour le couple position - quantité de mouvement

Puisque les vecteurs d'onde et les pulsations composant le paquet d'ondes restent proches de k_0 et ω_0 , on peut faire un développement limité :

On reconnaît l'expression de la vitesse de groupe d'un paquet d'ondes :

Calcul de la vitesse de groupe

La relation de dispersion est :

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

La vitesse de groupe est donc :

$$v_g = \left(\frac{d\omega}{dk} \right)_{k_0} =$$

Écrivons la vitesse de la particule à l'aide de la relation de de Broglie :

Conclusion

Une particule ponctuelle est décrite, en mécanique quantique, par un paquet d'onde dont la vitesse de groupe s'identifie à la vitesse de la particule en mécanique classique.

Courant de probabilité

On considère une particule décrite par un paquet d'onde $\Psi(x, t)$ dont la vitesse de groupe est $\vec{v}_g = \frac{\hbar k_0}{m} \vec{u}_x$.

Définition

On appelle vecteur densité de courant de probabilité le vecteur :

La probabilité de présence de la particule entre les abscisses x et $x + dx$ est :

$$dP = |\Psi|^2 dx = dt$$

III. Équation de Schrödinger indépendante du temps

1. États stationnaires

Définition

On appelle état stationnaire un état décrit par une fonction d'onde s'écrivant sous la forme :

En mécanique quantique, un état stationnaire est caractérisé par une fonction d'onde complexe où les fonctions d'espace et de temps sont factorisées.

En mécanique classique, une onde stationnaire est caractérisée par des fonctions réelles de l'espace et du temps factorisées. Ceci n'est pas du tout équivalent à la mécanique quantique. Si l'onde stationnaire s'écrit $s(x, t) = f(x)g(t)$ alors sa représentation complexe ne s'écrit pas $\underline{s}(x, t) = \underline{f}(x)\underline{g}(t)$. La partie réelle d'un produit de fonction n'est pas égale au produit des parties réelles des fonctions.

Système : particule de masse m

Référentiel : $\mathcal{R}$

Cette particule possède une énergie potentielle $V(M, t)$ aussi appelée potentiel.

On se limite aux problèmes unidimensionnels où le potentiel est indépendant du temps.

Équation de Schrödinger :**Remarques**

- On retrouve le cas de la particule libre lorsque $V(x) = 0$
- Cette équation est linéaire, on peut appliquer le théorème de superposition.
- C'est une équation différentielle linéaire à coefficients non constants, on ne peut donc pas chercher la solution sous forme d'OPPM.

- On considérera des potentiels constants par morceaux et on cherchera des solutions locales dans chaque domaine. On raccordera ensuite ces solutions.

2. Solution de l'équation de Schrödinger

On cherche les solutions stationnaires de l'équation de Schrödinger. On remplace donc dans l'équation :

L'équation obtenue est homogène à une énergie.

La constante s'identifie avec l'énergie totale de la particule quantique.

Conclusion

Les états stationnaires sont des états d'énergie constante.
L'équation de Schrödinger indépendante du temps est :

Dépendance temporelle des solutions

La fonction temporelle doit vérifier l'équation suivante :

Conclusion

Un état stationnaire d'énergie E est représenté par la fonction d'onde suivante :

C'est une onde monochromatique de pulsation $\omega = \frac{E}{\hbar}$. L'énergie vérifie la relation de Planck-Einstein :

IV. Marche de potentiel

1. Description du problème

On considère une énergie potentielle unidimensionnelle $V(x)$ modélisée par la fonction suivante appelée marche de potentiel :

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < 0 \\ V_0 & \text{si } x > 0 \end{cases}$$

2. Cas où $E > V_0$: réflexion partielle

a. Solution pour une particule classique

On considère une particule classique de masse m et d'énergie E arrivant depuis $x \rightarrow -\infty$ sur une marche de potentiel avec $E > V_0$.

Le système de la particule classique est conservatif. Son énergie mécanique E est constante.

Conclusion

La particule subit une réduction de sa vitesse au passage de $x = 0$. C'est un choc mais poursuit sa route car son énergie mécanique initiale est suffisante.

b. État stationnaire quantique

La partie spatiale de la fonction d'onde doit vérifier l'équation de Schrödinger indépendante du temps :

On pose :

Solutions générales :

— **Domaine $x < 0$:**

Le terme $A_1 \exp(ik_1x)$ représente l'onde incidente qui progresse dans le sens des x croissants.

Le terme $B_1 \exp(-ik_1x)$ représente l'onde réfléchie qui progresse dans le sens des x décroissants.

— **Domaine $x > 0$:**

Le terme $A_2 \exp(ik_2x)$ représente l'onde transmise qui progresse dans le sens des x croissants.

Le terme $B_2 \exp(-ik_2x)$ représente l'onde réfléchie qui progresse dans le sens des x décroissants. En l'absence de source émettant des particules quantiques dans ce domaine de l'espace, on a $B_2 = 0$.

Conditions aux limites (admises)

Les fonctions φ et $\frac{d\varphi}{dx}$ sont continues.

Conditions aux limites :

Interprétation :

L'onde incidente est partiellement réfléchie et partiellement transmise en $x = 0$.

Vecteur densité de courant de probabilité correspondant aux différentes ondes

— Onde incidente :

— Onde réfléchie :

— Onde transmise :

Probabilité de réflexion

Probabilités de transmission

Conclusion

Il y a conservation de la probabilité de présence :

On retrouve la même relation qu'en électromagnétisme avec les coefficients de réflexion et transmission en puissance à la surface d'un plasma ou d'un conducteur.

Densité de probabilité de présence $|\Psi(x, t)|^2 : (0)$

Représentons cette densité de probabilité divisée par $|A_1|^2$:

Interprétation :

- La densité de probabilité de présence s'étend à l'infini. La particule quantique n'est pas confinée dans une zone de l'espace. On dit que la particule quantique est dans un état de diffusion.
- Il existe toujours une probabilité de trouver la particule quantique dans le domaine $x < 0$, contrairement au cas de la physique classique, avec une densité de probabilité de présence oscillant sinusoïdalement. Ce sont des interférences quantiques entre l'onde incidente et l'onde réfléchie. La distance séparant deux maxima successifs de la densité de probabilité de présence est $\lambda_1/2$ avec $\lambda_1 = \frac{h}{\sqrt{2mE}}$ la longueur d'onde de de Broglie de l'onde incidente.
- Lorsque $E \gg V_0$, k_2 tend par valeurs inférieures vers k_1 donc $t \rightarrow 1$ et $r \rightarrow 0$ et c'est le cas limite de transmission quasi-totale : la densité de probabilité de présence tend vers une valeur uniforme pour $x \in \mathbb{R}$, ce qui est logique puisque la particule quantique ne perçoit plus de changement d'énergie potentielle.
- Lorsque E est très proche de V_0 (par valeurs supérieures), k_2 tend vers zéro donc $r \rightarrow 1$ et $t \rightarrow 0$: c'est un cas très particulier où les oscillations dans la partie $x < 0$ donnent accès à des points de probabilité de présence nulle (espacés de π/k_1). C'est très déroutant.

3. Cas où $E < V_0$: réflexion totale

a. Solution pour une particule classique

On considère une particule classique de masse m et d'énergie E arrivant depuis $x \rightarrow -\infty$ sur une marche de potentiel avec $0 < E < V_0$.

Le système de la particule classique est conservatif. Son énergie mécanique E est constante.

$$E = cte = V(x) + \frac{1}{2}mv(x)^2$$

$E < V_0 \Rightarrow$ la particule ne peut pas être présente dans la partie $x > 0$. La particule subit une réflexion totale due au choc en $x = 0$ car son énergie mécanique n'est pas suffisante pour qu'elle franchisse la marche.

b. État stationnaire quantique

La partie spatiale de la fonction d'onde doit vérifier l'équation de Schrödinger indépendante du temps :

On pose :

Solutions générales :

— **Domaine** $x < 0$:

Le terme $A_1 \exp(ik_1x)$ représente l'onde incidente qui progresse dans le sens des x croissants.

Le terme $B_1 \exp(-ik_1x)$ représente l'onde réfléchie qui progresse dans le sens des x décroissants.

— **Domaine** $x > 0$:

La fonction d'onde ne peut diverger lorsque $x \rightarrow +\infty$. Par conséquent, on a $B_2 = 0$.

On a une onde évanescence.

Conditions aux limites :

On remarque que les coefficients de réflexion et transmission sont complexes.

Fonction d'onde de la particule :

On remarque que

On peut donc écrire :

Vecteur densité de courant de probabilité correspondant aux différentes ondes :

— Onde incidente :

— Onde réfléchie :

On ne peut pas calculer de vecteur densité de courant de probabilité pour l'onde transmise car l'expression que nous avons n'est valable que pour un paquet d'onde monochromatique ou une onde progressive. Nous ne sommes dans aucun des deux cas.

Probabilité de réflexion :

On admet que la relation $R + T = 1$ est toujours vraie. On a alors une probabilité de transmission :

$$T = 1 - R = 0$$

Densité de probabilité de présence $|\Psi(x, t)|^2$:

Représentons cette densité de probabilité divisée par $|A_1|^2$.

Interprétation

Cela explique que l'on parle dans ce cas d'une situation de réflexion totale, cette réflexion se faisant avec un certain déphasage θ non nul pour l'onde réfléchie : il y a une probabilité certaine qu'une particule quantique incidente soit réfléchie par la marche de potentiel.

Toutefois, cela ne signifie pas pour autant que la situation est analogue au cas classique de la première question dans le domaine $x < 0$. On observe des interférences quantiques d'interfrange $\pi/k = \lambda/2$ (λ longueur d'onde de Broglie de l'onde incidente).

On constate que l'onde incidente donne naissance dans le domaine $x > 0$ à une onde évanescente $A_1 t \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) \exp(-qx)$ (déjà définie en physique des ondes : c'est une onde stationnaire atténuée). C'est encore la traduction d'un phénomène quantique, celui-ci étendant l'espace accessible de la particule quantique par rapport au cas classique où celui-ci n'est que l'espace $x < 0$. On peut même introduire une distance caractéristique de pénétration par évanescence sous la marche :

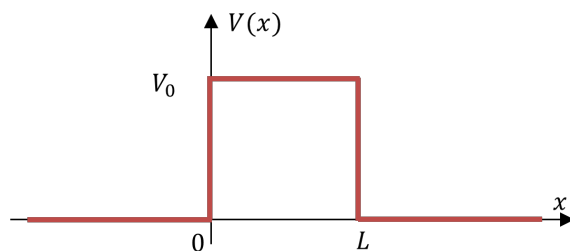
$$\delta = \frac{1}{q} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}$$

V. Effet tunnel

1. Description du problème

On considère la barrière de potentiel suivante :

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < 0 \quad \text{domaine (1)} \\ V_0 & \text{si } x \in [0, L] \quad \text{domaine (2)} \\ 0 & \text{si } x > L \quad \text{domaine (3)} \end{cases} \quad \text{avec } V_0 > 0$$



On considère une particule incidente arrivant sur cette barrière avec une énergie E inférieure à V_0 . La mécanique classique interdit à la particule de franchir la barrière de potentiel car elle ne possède pas assez d'énergie. Elle va se réfléchir en $x = 0$ et repartir en sens inverse.

On se place dans le cadre de la mécanique quantique et on cherche les états stationnaires d'énergie E .

2. Solutions de l'équation de Schrödinger

— **Domaine (1) :** $x < 0$

Équation de Schrödinger indépendante du temps :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi_1}{dx^2} = E \varphi_1 \quad \Rightarrow \quad \frac{d^2 \varphi_1}{dx^2} + k^2 \varphi_1 = 0 \text{ avec } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

La solution générale est de la forme :

— **Domaine (3) :** $x > L$

Équation de Schrödinger indépendante du temps :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi_3}{dx^2} = E \varphi_3 \quad \Rightarrow \quad \frac{d^2 \varphi_3}{dx^2} + k^2 \varphi_3 = 0 \text{ avec } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

La solution générale est de la forme :

— **Domaine (2) :** $x \in [0, L]$

Equation de Schrödinger indépendante du temps :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi_2}{dx^2} + V_0 \varphi_2 = E \varphi_2 \quad \Rightarrow \quad \frac{d^2 \varphi_2}{dx^2} - \alpha^2 \varphi_2 = 0 \quad \text{avec} \quad \alpha = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$$

La solution générale est de la forme :

3. Conditions aux limites

Les fonctions φ et $\frac{d\varphi}{dx}$ sont continues en $x = 0$:

Les fonctions φ et $\frac{d\varphi}{dx}$ sont continues en $x = L$:

On pose :

$$r = \frac{B_1}{A_1} \quad \text{et} \quad t = \frac{A_3}{A_1}$$

On obtient les équations suivantes :

$$\begin{cases} 1 + r = \frac{A_2}{A_1} \\ \frac{ik}{\alpha}(1 - r) = \frac{B_2}{A_1} \\ (1 + r) \cosh(\alpha L) + \frac{ik}{\alpha}(1 - r) \sinh(\alpha L) = t \exp(ikL) \\ \alpha(1 + r) \sinh(\alpha L) + ik(1 - r) \cosh(\alpha L) = ikt \exp(ikL) \end{cases}$$

$ik(1) - (2) :$

$$r \left[2ik \cosh(\alpha L) + \left(\frac{k^2}{\alpha} - \alpha \right) \sinh(\alpha L) \right] = \left(\frac{k^2}{\alpha} + \alpha \right) \sinh(\alpha L)$$

$$\Rightarrow r = \frac{\left(\frac{k^2}{\alpha} + \alpha \right) \sinh(\alpha L)}{2ik \cosh(\alpha L) + \left(\frac{k^2}{\alpha} - \alpha \right) \sinh(\alpha L)}$$

On reporte dans (1) :

$$t \exp(ikL) = \cosh(\alpha L) + \frac{ik}{\alpha} \sinh(\alpha L) + \frac{\left(\frac{k^2}{\alpha} + \alpha \right) \sinh(\alpha L)}{2ik \cosh(\alpha L) + \left(\frac{k^2}{\alpha} - \alpha \right) \sinh(\alpha L)} \left[\cosh(\alpha L) - \frac{ik}{\alpha} \sinh(\alpha L) \right]$$

$$t \exp(ikL) = \frac{1}{2ik \cosh(\alpha L) + \left(\frac{k^2}{\alpha} - \alpha \right) \sinh(\alpha L)} \times$$

$$\left[\left(\cosh(\alpha L) + \frac{ik}{\alpha} \sinh(\alpha L) \right) \left(2ik \cosh(\alpha L) + \left(\frac{k^2}{\alpha} - \alpha \right) \sinh(\alpha L) \right) \right.$$

$$\left. + \left(\frac{k^2}{\alpha} + \alpha \right) \sinh(\alpha L) \left(\cosh(\alpha L) - \frac{ik}{\alpha} \sinh(\alpha L) \right) \right]$$

$$t \exp(ikL) = \frac{1}{2ik \cosh(\alpha L) + \left(\frac{k^2}{\alpha} - \alpha \right) \sinh(\alpha L)} \times$$

$$\left[2ik \cosh^2(\alpha L) + \cosh(\alpha L) \sinh(\alpha L) \overbrace{\left(\left(\frac{k^2}{\alpha} - \alpha \right) - 2\frac{k^2}{\alpha} + \left(\frac{k^2}{\alpha} + \alpha \right) \right)}^0 \right.$$

$$\left. + \sinh^2(\alpha L) \overbrace{\left(\frac{ik}{\alpha} \left(\frac{k^2}{\alpha} - \alpha \right) - \frac{ik}{\alpha} \left(\frac{k^2}{\alpha} + \alpha \right) \right)}^{-2ik} \right]$$

$$\Rightarrow t = \frac{2ik \exp(-ikL)}{2ik \cosh(\alpha L) + \left(\frac{k^2}{\alpha} - \alpha \right) \sinh(\alpha L)}$$

On peut donc réécrire les ondes incidente et réfléchie avant la barrière et l'onde transmise après, en posant $\omega = \frac{E}{\hbar}$:

- Onde incidente :
- Onde réfléchie :
- Onde transmise :

Vecteurs densité de courant de probabilité :

- Onde incidente :

- Onde réfléchie :

- Onde transmise :

Probabilité de réflexion et de transmission

Probabilité de réflexion :

$$R = \frac{\|\vec{j}_r\|}{\|\vec{j}_i\|} = |r|^2 = \left| \frac{\left(\frac{k^2}{\alpha} + \alpha\right) \sinh(\alpha L)}{2ik \cosh(\alpha L) + \left(\frac{k^2}{\alpha} - \alpha\right) \sinh(\alpha L)} \right|^2$$

$$R = \frac{\left(\frac{k^2}{\alpha} + \alpha\right)^2 \sinh^2(\alpha L)}{4k^2 \underbrace{\cosh^2(\alpha L)}_{1+\sinh^2(\alpha L)} + \left(\frac{k^2}{\alpha} - \alpha\right)^2 \sinh^2(\alpha L)}$$

$$R = \frac{\left(\frac{k^2}{\alpha} + \alpha\right)^2 \sinh^2(\alpha L)}{4k^2 + \left(\frac{k^2}{\alpha} + \alpha\right)^2 \sinh^2(\alpha L)}$$

avec $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ et $\alpha = \sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}}$:

$$\left(\frac{k^2}{\alpha} + \alpha\right)^2 = \frac{\left(\frac{2mV_0}{\hbar^2}\right)^2}{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}} = \frac{2mV_0^2}{\hbar^2(V_0-E)}$$

$$R = \frac{\frac{2mV_0^2}{\hbar^2(V_0-E)} \sinh^2(\alpha L)}{4 \cdot \frac{2mE}{\hbar^2} + \frac{2mV_0^2}{\hbar^2(V_0-E)} \sinh^2(\alpha L)}$$

$$R = \frac{\frac{V_0^2}{4E(V_0-E)} \sinh^2(\alpha L)}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0-E)} \sinh^2(\alpha L)}$$

Probabilité de transmission :

$$T = \frac{\|\vec{j}_t\|}{\|\vec{j}_i\|} = |t|^2 = \left| \frac{2ik \exp(-ikL)}{2ik \cosh(\alpha L) + \left(\frac{k^2}{\alpha} - \alpha\right) \sinh(\alpha L)} \right|^2$$

$$T = \frac{1}{\underbrace{\cosh^2(\alpha L)}_{1+\sinh^2(\alpha L)} + \frac{1}{4k^2} \left(\frac{k^2}{\alpha} - \alpha \right)^2 \sinh^2(\alpha L)}$$

$$T = \frac{1}{1 + \left[\frac{1}{4k^2} \left(\frac{k^2}{\alpha} - \alpha \right)^2 + 1 \right] \sinh^2(\alpha L)}$$

$$\frac{1}{4k^2} \left(\frac{k^2}{\alpha} - \alpha \right)^2 + 1 = \frac{k^4 + \alpha^2 - 2k^2\alpha^2 + 4k^2\alpha^2}{4k^2\alpha^2} = \frac{(k^2 + \alpha^2)^2}{4k^2\alpha^2} = \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)}$$

$$\Rightarrow T = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \sinh^2(\alpha L)}$$

Pour une barrière épaisse, on a $\alpha L \gg 1$. La probabilité de transmission s'écrit alors :

Avec $\delta = \frac{1}{\alpha} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}$, on a :

$$T = f\left(\frac{E}{V_0}\right) \exp\left(-\frac{2L}{\delta}\right)$$

Le coefficient de probabilité de transmission T à travers la barrière évolue en exponentielle décroissante avec la largeur de barrière pour L supérieur à quelques δ .

Conclusion :

La probabilité de transmission n'est pas nulle. La particule quantique traverse la barrière de potentiel alors qu'une particule classique ne le peut pas. La particule quantique traverse la barrière grâce aux ondes évanescentes dans la barrière.

On retrouve la conservation de la probabilité de présence :

$$R + T = 1$$

La particule quantique peut soit être réfléchiée par la barrière soit être transmise.

Densité de probabilité de présence $|\Psi(x, t)|^2$:

— **Domaine (1) :** $x < 0$

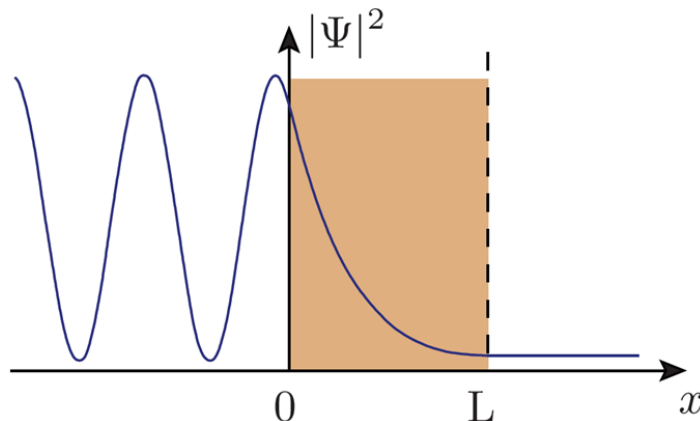
$$|\Psi(x < 0, t)|^2 = |A_1|^2 (1 + R + 2\sqrt{R} \cos(2kx + \theta))$$

— **Domaine (2) :** $x \in [0, L]$ C'est l'onde évanescence. La densité de probabilité de présence décroît exponentiellement à l'intérieur de la barrière de potentiel avec une distance caractéristique de décroissance :

$$\delta = \frac{1}{\alpha} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}$$

A la sortie de la barrière, la densité de probabilité de présence est non nulle.

- **Domaine (3) :** $x > L$ La densité de probabilité de présence est constante et égale à $T |A_1|^2$.



4. Microscope à effet tunnel

Les microscopes dits «à champ proche» ont acquis une grande importance, notamment dans la caractérisation des matériaux. Ce succès est tout d'abord dû à leur capacité d'imager des propriétés de ceux-ci à des échelles moléculaires ou atomiques.

Le microscope à effet tunnel (« Scanning Tunneling Microscope» ou STM) fait partie de cette famille. Il a été mis au point par deux chercheurs d'IBM, Binnig et Rohrer, en 1981 (prix Nobel 1986) et repose sur un phénomène quantique découvert en 1928 : l'effet tunnel. Si l'on approche une pointe métallique à une distance suffisamment faible d'un échantillon conducteur ou semi-conducteur et si on applique une différence de potentiel entre cette pointe (anode) et cet échantillon (cathode), un courant électronique d'intensité mesurable peut transiter entre eux par effet tunnel. On peut démontrer, par un modèle simplifié, que l'intensité tunnel mesurée est :

$$I_t = I_0 e^{-2kz} \quad \text{avec } k = \frac{\sqrt{2m_e \Phi}}{\hbar}$$

où z est la distance pointe-échantillon (quelques angströms), V_t est la différence de potentiel appliquée (quelques millivolts à quelques volts) et Φ est le travail d'extraction d'un électron de masse m_e ($\Phi \sim 4\text{eV}$ pour un bon conducteur). La variation exponentielle avec z est la raison de l'extrême sensibilité verticale d'un STM, tandis que la résolution latérale dépend essentiellement de la forme de la pointe (90% du courant tunnel circule entre l'atome à l'extrémité de la pointe et celui de l'échantillon le plus proche : c'est même 99% en tenant compte seulement des premiers voisins...).

Le schéma plus général du STM est présenté sur la figure ci-contre. Un dispositif mécanique (non représenté) permet une première approche de la pointe vers la surface à étudier (« coarse approach »). Ensuite, des céramiques piézoélectriques permettent de réaliser un balayage de la surface de l'échantillon avec précision (de l'ordre du picomètre, voire mieux !). Un système électronique et informatique permet l'amplification des faibles signaux (intensités de quelques nanoampères, voire picoampères!), le pilotage avec asservissement, le traitement et la visualisation des données.

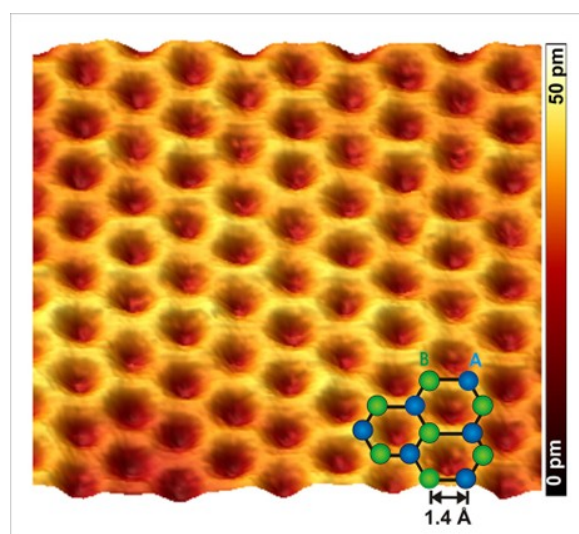
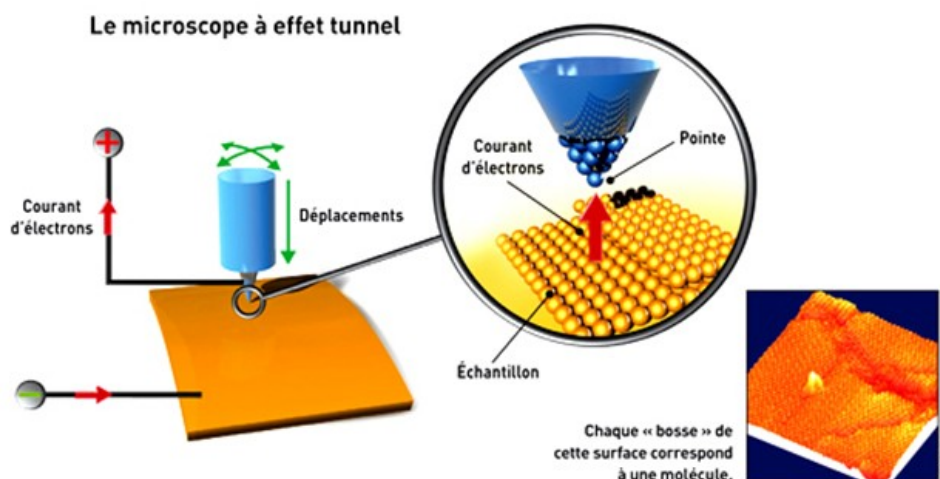
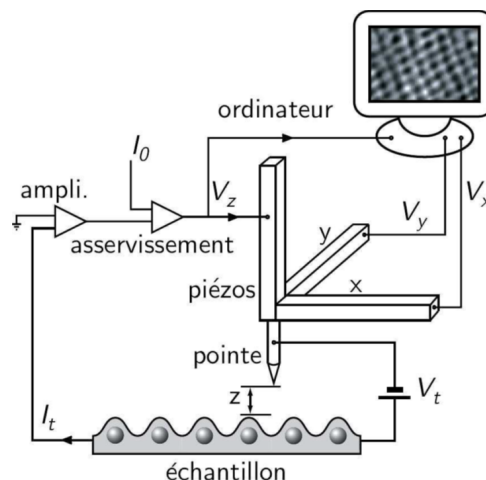


FIGURE 2 – Imagerie STM d'une feuille de graphène (couche monoatomique d'atomes de carbone)

La pointe du STM peut être utilisée pour déplacer des atomes et construire des structures atomiques particulières comme le montrent les images suivantes.

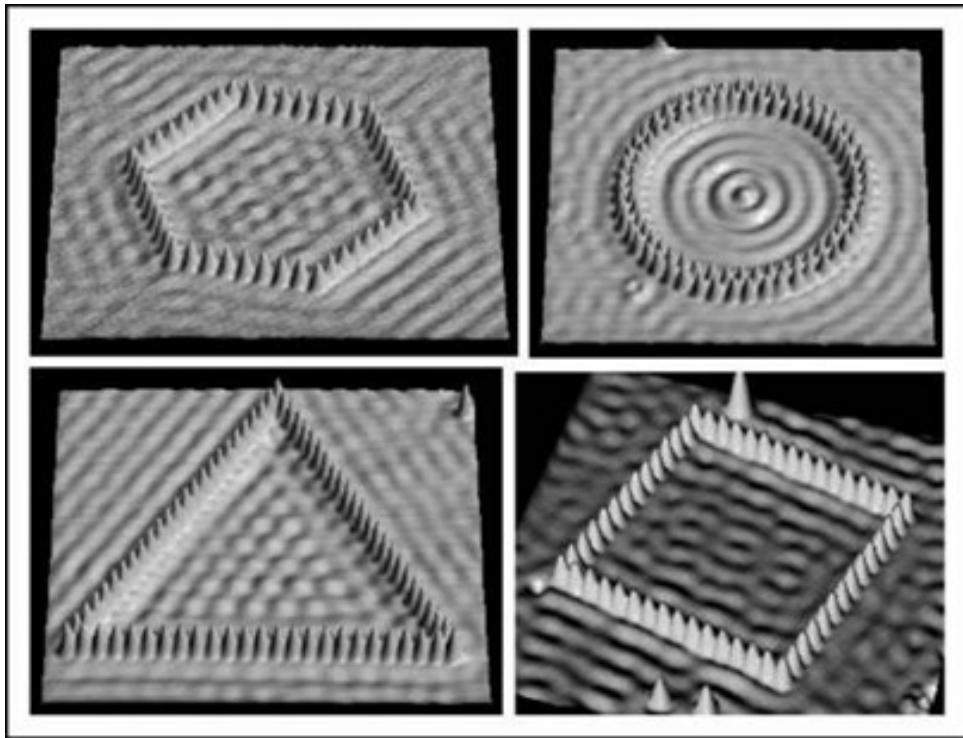


FIGURE 3 – Atome de fer déposé sur une surface de cobalt par des chercheurs d'IBM. Crédit : M.F. Crommie, C.P. Lutz, D.M. Eigler, E.J. Heller

VI. Particule dans un puits de potentiel infini

1. Description du problème

Dans ce paragraphe, on modélise une particule piégée dans un volume délimité de l'espace.

Modèle

Une particule est confinée entre deux plans d'équation $x = 0$ et $x = L$. On modélise le potentiel par un puits infiniment profond :

$$V(x) = \begin{cases} +\infty & \text{si } x < 0 \\ 0 & \text{si } x \in [0, L] \\ +\infty & \text{si } x > L \end{cases}$$

L'équation de Schrödinger impose que, pour un potentiel infini, la fonction d'onde tende vers 0.

Conclusion

Par conséquent, la fonction d'onde en dehors du puits est nulle.

Conditions aux limites

On cherche les états stationnaires :

$$\Psi(x, t) = \varphi(x) \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right)$$

Les conditions aux limites imposent :

$$\begin{cases} \Psi(x = 0, t) = 0 = \varphi(x = 0) \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) \\ \Psi(x = L, t) = 0 = \varphi(x = L) \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) \end{cases} \quad \forall t$$

2. Solutions de l'équation de Schrödinger

La partie spatiale de la fonction d'onde doit vérifier l'équation de Schrödinger indépendante du temps :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi}{dx^2} = E\varphi \quad \text{pour } x \in [0, L]$$

— Cas où $E \leq 0$:

La solution générale est de la forme :

Les conditions aux limites donnent :

— **Cas où $E > 0$:**

La solution générale est de la forme :

Les conditions aux limites donnent :

Conclusion :

Les états stationnaires se caractérisent par :

On retrouve la même condition que celle obtenue lors de la recherche des modes propres d'une corde attachée à ses deux extrémités.

3. Quantification des niveaux d'énergie

Conclusion

L'énergie d'une particule confinée est quantifiée :

Conclusion

Les fonctions d'onde correspondant aux états stationnaires d'une particule dans un puits infini sont :

Le niveau de plus basse énergie est appelé niveau fondamental.

État d'énergie minimale

Pour $n = 0$, on trouve une fonction d'onde identiquement nulle. Par conséquent, l'état fondamental de la particule ne correspond pas à une énergie nulle. La mécanique classique permet à une particule classique piégée dans un puits de potentiel d'avoir une énergie nulle.

La particule est confinée dans un puits de largeur L donc l'indétermination sur la position est $\Delta x \leq L$. L'onde stationnaire est la superposition de deux ondes planes progressives harmoniques de sens contraire et de même amplitude. Elles correspondent à des ondes de quantité de mouvement opposées. Par conséquent, la valeur moyenne de la quantité de mouvement est nulle :

$$\langle p \rangle = 0$$

L'indétermination sur la quantité de mouvement est :

L'inégalité de Heisenberg nous dit que :

L'énergie cinétique minimale de la particule confinée est :

On retrouve à un facteur numérique l'énergie du niveau fondamental.

Conclusion

À cause de l'inégalité d'Heisenberg, le confinement de la particule lui impose une énergie cinétique minimale appelée énergie de confinement.