

CH MQ 2 : Exemples de résolution de l'équation de Schrödinger
Méthode générale :

Hypothèses : Système conservatif

Les énergies potentielles $V(x)$ sont constantes par morceaux et indépendantes du temps.

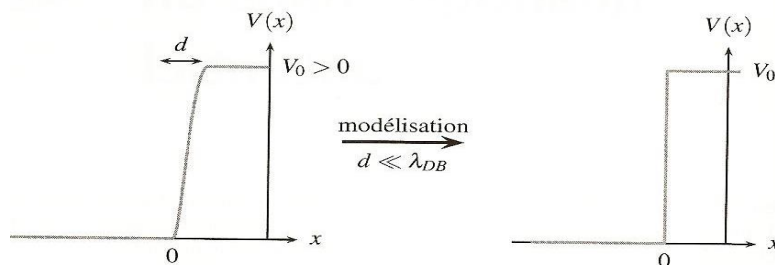
La particule est non relativiste et de masse m non nulle et on ne tient pas compte de son spin.

Démarche :

- On décrira d'abord le comportement d'une particule classique.
- On recherche des états stationnaires quantiques (d'énergie fixée E) donc il s'agit de résoudre l'équation de Schrödinger indépendante du temps : $-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \varphi(M) + V(M) \varphi(M) = E \varphi(M)$
- Le potentiel constant par morceaux traduit les conditions aux limites appliquées à la particule.
- On résout et on interprète les probabilités de présence trouvées.
- On sommera éventuellement ces états stationnaires pour observer le comportement temporel d'un paquet d'ondes (pouvant modéliser une particule réelle localisée).

I. Marche de potentiel
1) Exemples et modélisation
a) Description de la marche

Modélisation et sens physique :



La force à laquelle est soumise la particule est :

Pour $x < 0$ et $x > d$, $\vec{F} =$

Pour $0 < x < d$, $\vec{F} =$

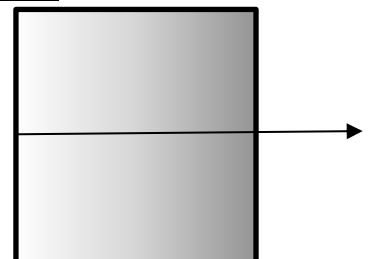
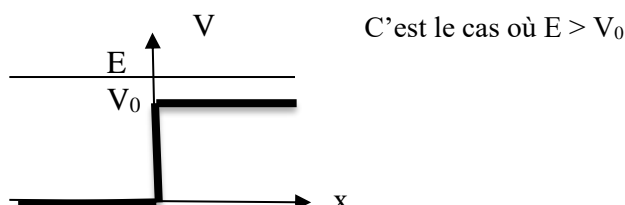
Modélisation par une marche si d est très petite devant la longueur d'onde de de Broglie de la particule.

$V(x) = 0$ si $x < 0$ et $V(x) = V_0$ si $x > 0$

b) Exemple d'un électron de conduction dans un métal près de sa surface

CE : Citer des exemples physiques illustrant cette problématique.

Dans un métal, on peut considérer en première approximation que les électrons de conduction constituent un gaz de particules qui se déplacent librement (sans interaction) sauf au voisinage de sa surface située au niveau de $x = 0$ où règne une action limitant leur sortie (vers le vide $x > 0$) si leur énergie cinétique est insuffisante.


2) Cas où l'énergie de la particule est supérieure à la marche : réflexion partielle


a) En mécanique classique

Une particule classique de masse m et d'énergie E arrive depuis $x \rightarrow -\infty$ sur une marche de hauteur $V_0 < E$.

Par conservation de l'énergie, $E =$

Si $x < 0$, $v =$

si $x > 0$, $v =$

La particule subit

b) Recherche des états stationnaires quantiques

CE : Établir la solution dans le cas d'une particule incidente sur une marche de potentiel.

Exploiter les conditions de continuité (admisses) relatives à la fonction d'onde.

- Solutions de l'équation de Schrödinger indépendante du temps : $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi}{dx^2}(x) + V(x)\varphi(x) = E \varphi(x)$

$$\text{Si } x < 0, \quad \frac{d^2 \varphi}{dx^2}(x) + \frac{2m}{\hbar^2} E \varphi(x) = 0$$

$$\varphi(x) =$$

$$\text{Si } x > 0, \quad \frac{d^2 \varphi}{dx^2}(x) + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V_0] \varphi(x) = 0$$

$$\varphi(x) =$$

Interprétation des solutions en termes d'ondes progressives avec sens de propagation :

$$\text{Si } x < 0, \psi(x,t) =$$

- CAL : continuité de φ et de la dérivée première en $x=0$:

La particule vient de $-\infty$ donc on prend

Introduction et calcul des coefficients de réflexion et de transmission r et t :

Définition des coefficients de réflexion et de transmission en amplitude $r =$ et $t =$

$$\text{Si } x \leq 0, \varphi(x) = A_1 e^{ik_1 x} + r A_1 e^{-ik_1 x} \quad \text{et si } x \geq 0, \varphi(x) = t A_1 e^{ik_2 x}$$

Les relations de continuité donnent

$$\text{D'où } r = \quad \text{et } t =$$

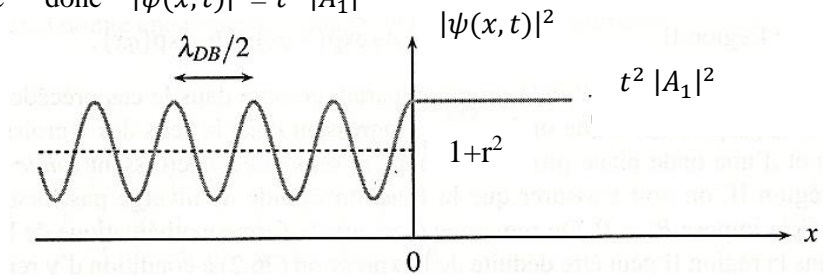
Rem : r et t sont ici réels et $r+t = 1$

La constante A_1 sera fixée par les conditions initiales et la normalisation dans l'écriture du paquet d'ondes complet.

- Tracé de la densité de probabilité de présence :

Si $x \leq 0$, $\varphi(x) = A_1[e^{ik_1x} + re^{-ik_1x}]$ donc $|\psi(x, t)|^2 = |A_1|^2(1+r^2+2r\cos(2k_1x))$

et si $x \geq 0$, $\varphi(x) = A_1te^{ik_2x}$ donc $|\psi(x, t)|^2 = t^2 |A_1|^2$



- Interprétation : CE : Expliquer les différences de comportement par rapport à une particule classique

L'onde incidente (la particule quantique) est

Interprétation probabiliste : si on effectue une mesure de la position, on peut trouver la particule avant la marche ou après la marche.

Interprétation statistique : pour un flux de particules identiques et indépendantes, un certain nombre de particules sont transmises et un certain nombre sont réfléchies.

Dans le domaine $x < 0$ on observe des

(oscillations sinusoïdales de la densité de probabilité de présence) d'interfrange $\lambda_1/2$ où λ_1 est la longueur d'onde de de Broglie de la particule incidente.

Ces résultats sont très éloignés de la mécanique classique mais sont analogues à la réflexion partielle et transmission partielle d'une OEM qui arrive sur la surface de séparation entre deux diélectriques d'indices n_1 et n_2 .

c) Densités de courant de probabilité et coefficients de probabilité de réflexion et de transmission

CE : Déterminer les coefficients de transmission et de réflexion en utilisant les courants de probabilités.

c1) Définition des coefficients de probabilité de réflexion et transmission R et T

Au Ch MQ1 on a défini, par analogie au vecteur densité de courant, un **vecteur densité de courant de probabilité \vec{j}** .

Et on a admis son expression pour un état stationnaire d'impulsion $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ fixée d'une particule libre non localisée et non relativiste de masse m et de vitesse \vec{v}

donc pour une onde de de Broglie de la forme $\Psi(x, t) = \varphi(x) e^{-i E t / \hbar} = \varphi_0 e^{i(px/\hbar - Et/\hbar)}$:

$$\vec{j} =$$

Attention, cette expression n'est pas valable pour une autre forme d'onde ni pour un paquet d'ondes.

L'interprétation statistique, pour un flux de particules identiques, a permis de montrer que la probabilité pour qu'une particule traverse l'abscisse x entre t et $t+dt$ dans le sens de \vec{u}_x est $dP(x, t) =$

On peut écrire ces courants et ces probabilités pour les ondes incidentes réfléchies et transmises.

Cela permet de définir (on peut aussi faire l'analogie avec les coefficients de réflexion énergétiques rencontrés en électromagnétisme) des **coefficients de probabilité de réflexion R et de transmission T** par :

$$R =$$

et $T =$

c2) Cas de la marche de potentiel

On vérifie que les ondes incidentes, réfléchies et transmises sont bien des ondes de De Broglie :

$$\psi_i(x,t) =$$

$$\psi_r(x,t) =$$

$$\psi_t(x,t) =$$

On en déduit les vecteurs densité de courant de probabilité :

$$\vec{J}_i =$$

$$\vec{J}_r =$$

$$\vec{J}_t =$$

On calcule alors R et T :

$$R =$$

$$\text{et } T =$$

On constate que $R + T =$

Interprétation :

Cas particuliers :

Si $E \gg V_0$,

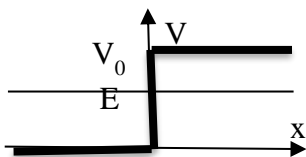
Lorsque E tend vers V_0 ,

d) Réflexion et transmission d'un paquet d'ondes sur une marche de potentiel

Animation : phet.colorado.edu/en/simulation/quantum-tunneling

On observe :

3) Cas où l'énergie de la particule est inférieure à la marche : réflexion totale et évanescence



C'est le cas où $E < V_0$.

a) En mécanique classique

Une particule classique de masse m et d'énergie E arrive depuis $x \rightarrow -\infty$ sur une marche de hauteur $V_0 > E$

Par conservation de l'énergie, $E = V(x) + \frac{1}{2}mv^2$ est constante.

L'énergie cinétique ne peut pas être négative donc la particule ne peut être présente que

b) Recherche des états stationnaires quantiques

- Solutions de l'équation de Schrödinger indépendante du temps : $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi}{dx^2}(x) + V(x)\varphi(x) = E \varphi(x)$
CE : Établir la solution dans le cas d'une particule incidente sur une marche de potentiel.
Si $x < 0$, $\frac{d^2\varphi}{dx^2}(x) + \frac{2m}{\hbar^2}E\varphi(x) = 0$

$$\varphi(x) =$$

$$\text{Si } x > 0, \frac{d^2\varphi}{dx^2}(x) + \frac{2m}{\hbar^2}[E-V_0]\varphi(x) = 0 \quad \text{avec } E-V_0 < 0$$

$$\varphi(x) =$$

- CAL : CE : Exploiter les conditions de continuité (admisses) relatives à la fonction d'onde.
Continuité de φ et de la dérivée première en $x=0$:

On prend $B_2 = 0$ pour avoir une fonction d'onde bornée lorsque $x \rightarrow +\infty$.

Calcul des coefficients de réflexion et de transmission r et t :

Définition des coefficients de réflexion et de transmission en amplitude $r =$ et $t =$

Les relations de continuité donnent

$$\text{D'où } r = \quad \text{et } t =$$

La constante A_1 sera fixée par les conditions initiales et la normalisation dans l'écriture du paquet d'ondes complet.

- Description des ondes incidente, réfléchie et transmise
CE : Reconnaître l'existence d'une onde évanescente et la caractériser.

On observe dans la région $x < 0$

On observe dans la région $x > 0$

Distance caractéristique de pénétration par l'onde évanescente sous la marche : $\delta \approx$

- Calcul de R et T et interprétation :
CE : Déterminer les coefficients de transmission et de réflexion en utilisant les courants de probabilité.

Seules les ondes incidentes et réfléchies sont des ondes de De Broglie, pas l'onde transmise. Donc on ne peut pas calculer T à l'aide des courants de probabilité.

$$\vec{J}_i =$$

$$\vec{J}_r =$$

$$\text{D'où } R =$$

$$\text{Puis } T =$$

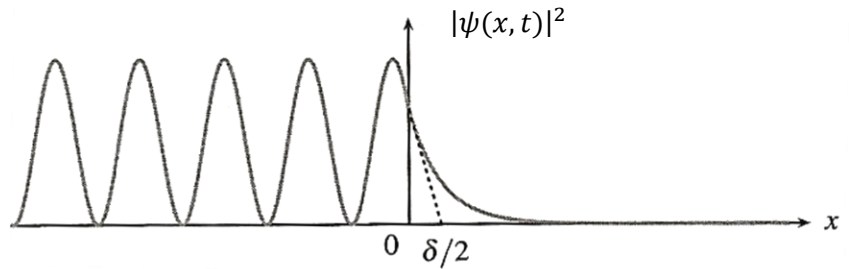
- Tracé de la densité de probabilité de présence :

Si $x \leq 0$, $|\psi(x, t)|^2 = 2|A_1|^2(1 + \cos(2k_1x - \theta))$

et si $x \geq 0$, $|\psi(x, t)|^2 = |t|^2 |A_1|^2 e^{-2x/\delta}$

avec $k_1 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E}$ et $\delta = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}$

$\theta = -2 \operatorname{Arctan} \frac{1}{\delta k_1}$



CE : Expliquer les différences de comportement par rapport à une particule classique.

On observe :

Du côté $x > 0$,

Du côté $x < 0$,

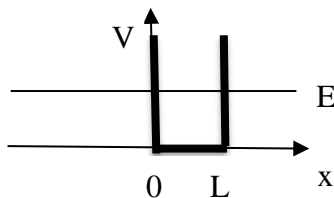
Quand on augmente la masse m , ou quand on augmente la hauteur de la marche ($V_0 - E$), on retrouve le cas classique :

c) Réflexion d'un paquet d'ondes sur une marche de potentiel

Animation : phet.colorado.edu/en/simulation/quantum-tunneling

On observe :

II. Puits de potentiel ; quantification de l'énergie



Puits de potentiel infini

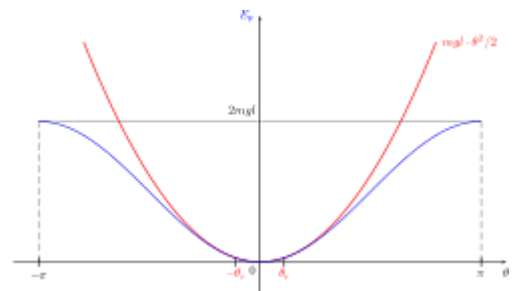
$V = 0$ si $x > 0$ ou $x < L$

V est infini ailleurs

1) Exemples de puits de potentiels

- Electron dans un atome, nucléon dans un noyau
Plutôt modélisé autour de la position d'équilibre par un modèle moins grossier :

le potentiel harmonique $V(x) = \frac{1}{2} m \omega_0^2 x^2$



- Electrons dans des boîtes quantiques (par exemple un « sandwich » de semi-conducteurs AlGaAs-GaAs-AlGaAs)

2) Etats stationnaires liés du puits de potentiel infini

On dit que des états sont liés car

a) En mécanique classique

C'est une bille entre deux murs. Elle se déplace

b) Recherche des états stationnaires quantiques

CE : Etablir les solutions et les niveaux d'énergie de la particule confinée.

- Solutions de l'équation de Schrödinger indépendante du temps :

En dehors de l'intervalle $[0, L]$, V est infini donc cet espace n'est pas accessible donc la fonction d'onde est nulle. L'espace accessible est donc $x \in [0, L]$ et dans cet espace le potentiel est nul donc il faut résoudre :

$$\text{Avec } E = \frac{p^2}{2m} \geq 0$$

* Cas $E = 0$:

Les états stationnaires possibles ont donc une énergie strictement positive (même supérieure à l'énergie minimale de confinement, voir 4). Alors que les particules classiques peuvent rester immobiles dans le puits et avoir une énergie nulle.

* Cas $E > 0$:

$$\varphi(x) =$$

CAL :

Donc les CAL imposent la quantification de la pulsation spatiale k et donc de l'énergie E :

$$\mathbf{k_n = \quad \quad \quad \text{et} \quad \quad \mathbf{E_n = \quad \quad \quad \text{avec } n \text{ un entier non nul positif}}$$

$$\varphi_n(x) = \quad \quad \quad \text{on peut choisir } A_n \text{ réel positif car on ne s'intéresse qu'à son module au carré}$$

Cette fonction d'onde est normalisable car l'espace accessible est borné :

$$\int_0^L |\Psi(x, t)|^2 dx = 1 =$$

$$\text{D'où } \varphi_n(x) = \quad \quad \quad \text{est le seul état stationnaire lié d'énergie } E_n$$

Il n'y a pas dégénérescence du niveau d'énergie.

$$\Psi_n(x, t) =$$

- Tracé des densités de probabilité :

Le niveau d'énergie le plus bas est appelé le

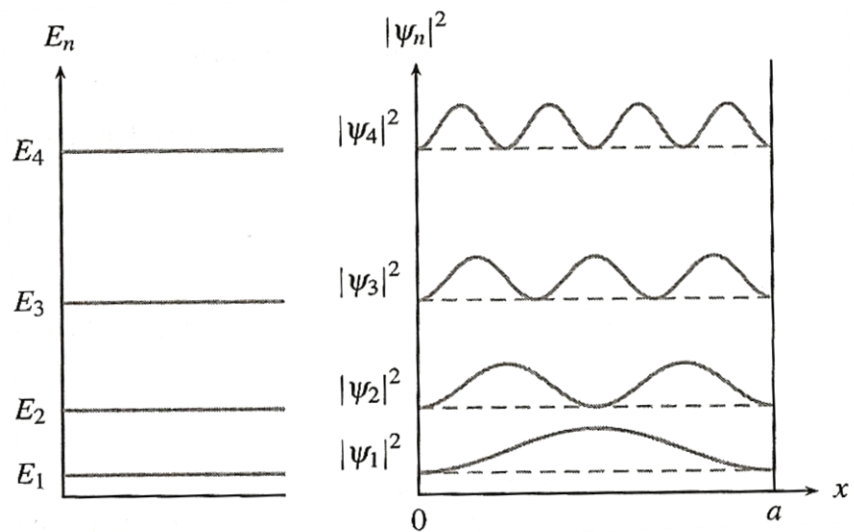
Les autres sont les

Différence avec le comportement classique :

On observe

, ce qui n'est pas du tout le cas pour une particule classique.

Du point de vue classique, la densité de probabilité de présence est



Limite classique : Pour des énergies élevées, donc des grands nombres quantiques n , les niveaux d'énergie se rapprochent et la fonction d'onde spatiale oscille très vite. On retrouve les résultats classiques (énergie variant continument et probabilité de présence uniforme), conformément au principe de correspondance de Bohr.

c) Analogie avec d'autres domaines de la physique

CE : Identifier des analogies avec d'autres domaines de la physique

Puits quantique 1D infini

Cavité électromagnétique

Différences : Mais les équations de propagation ne sont pas les mêmes, la relation de dispersion n'est pas la même, pas d'analogie pour les pulsations...

Cette analogie permet de retrouver rapidement les énergies du puits infini :

3) Quantification de l'énergie des états liés et continuum d'énergie des états non liés

Généralisons quelques résultats obtenus au paragraphe précédent :

Un état stationnaire est dit lié si l'espace accessible est fini (donc si la fonction d'onde spatiale correspondante est normalisable). Dans le cas contraire, on parle d'état non lié ou libre ou de diffusion.

Le spectre des énergies des états stationnaires liés est forcément discret alors que celui des états libres forme un continuum. Cette quantification de l'énergie vient des CAL, on l'a vu dans le cas du potentiel infini. Et on a vu au I que les états stationnaires de la marche de potentiel sont des états non liés et que leur énergie peut varier continument.

| état libre (ou état de diffusion) | état lié |
|-----------------------------------|-----------------------------|
| espace accessible | espace accessible |
| continuum d'énergie | quantification de l'énergie |
| spectre | spectre |

4) Energie minimale d'une particule confinée : énergie de confinement

CE : Estimer l'énergie d'une particule confinée dans son état fondamental pour un puits non rectangulaire. Associer l'analyse à l'inégalité d'Heisenberg.

Une particule confinée ne peut qu'admettre une énergie cinétique minimale non nulle appelée énergie minimale de confinement.

Ceci se démontre par la relation d'indétermination d'Heisenberg :

On peut vérifier que l'énergie de l'état fondamental dans le puits unidimensionnel infini est compatible avec cette relation :

Rem : L'énergie de confinement diminue lorsque m augmente, on tend vers la limite classique.

AN :

- Electron dans un atome :

$M =$ et $L =$ donne $E_{c,min} =$

On retrouve l'ordre de grandeur des énergies mises en jeu dans les transformations chimiques.

- Nucléon dans un noyau :

$M =$ et $L =$ donne $E_{c,min} =$

Les énergies de liaison par nucléon dans un noyau sont de l'ordre de

Conclusion : la physique de l'infiniment petit est la physique des hautes énergies.

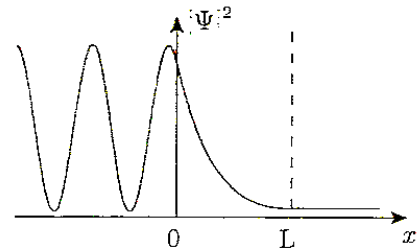
4) Etude quantique pour $E < V_0$: effet tunnel

a) Description des états stationnaires non liés

On obtient des solutions progressives dans les régions I et III, et une superposition d'ondes évanescentes dans la région II (dans la barrière).

Tracé des densités de probabilité de présence :

On observe :



Phénomène d'effet tunnel quantique :

C'est la possibilité de transmission de particules quantiques à travers une barrière de potentiel, pour une énergie de la particule inférieure à la barrière. Ce qui n'est pas possible dans le cas d'une particule classique.

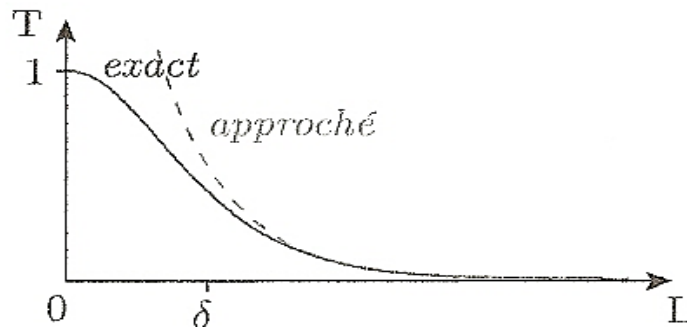
b) Caractéristiques de l'effet tunnel quantique :

CE : Exploiter un coefficient de transmission fourni. $T = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \sinh^2\left(\frac{L}{\delta}\right)}$

CE : Décrire qualitativement l'influence de la hauteur ou de la largeur de la barrière sur le coefficient de transmission.

Tracé de T en fonction de L :

$$T = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \sinh^2\left(\frac{L}{\delta}\right)}$$



Pour une barrière épaisse : $L \gg \delta$

$$T(L) \approx$$

où L est l'épaisseur de la barrière et δ est la distance caractéristique de pénétration de l'onde évanescente dans la barrière (valeur trouvée pour la marche de potentiel) :

Ordres de grandeur : pour $E = V_0/2$:

| Particule | m (kg) | V_0 (eV) | L (nm) | δ (nm) | T |
|-----------|------------|------------|--------|-------------------|------------|
| Electron | 10^{-30} | 4 | 0,3 | 0,1 | 10^{-2} |
| Electron | 10^{-30} | 40 | 0,3 | $4 \cdot 10^{-2}$ | 10^{-6} |
| Electron | 10^{-30} | 4 | 3 | 0,1 | 10^{-20} |
| Proton | 10^{-27} | 4 | 0,3 | $4 \cdot 10^{-3}$ | 10^{-63} |

T augmente si :

T tend vers 0 si :

Retenir quelques caractéristiques de l'effet tunnel quantique :

- condition sur l'énergie :
- densité de probabilité de présence non nulle après la barrière
- distance caractéristique d'évanescence : *Savoir retrouver rapidement la valeur de δ en écrivant Schrödinger dans la région II, Savoir qu'il y a des ondes évanescentes dans la barrière (région II)*

- diminution du coefficient de transmission T avec la largeur de la barrière :
 $T \approx$
- diminution du coefficient de transmission T avec la hauteur de la barrière

Voir les animations du site : phet.colorado.edu/en/simulation/quantum-tunneling

IV. Etats non stationnaires d'une particule quantique

1) Superposition de deux états stationnaires

CE : Expliquer qu'une superposition de deux états stationnaires engendre une évolution au cours du temps de l'état de la particule. Etablir l'expression de la densité de probabilité de présence de la particule dans le cas d'une superposition de deux états stationnaires ; interpréter le résultat.

Déjà traité au Ch MQ1 II 5. Rappels :

Pour une combinaison linéaire de deux états d'énergie E_1 et E_2 dans un puits de potentiel infini la densité de probabilité de présence oscille périodiquement dans le temps à la fréquence $\nu = \frac{E_2 - E_1}{h}$

La période d'évolution peut-être prise comme temps caractéristique : $\tau = h/(E_2 - E_1)$ donc $\tau (E_2 - E_1) = h > \hbar/2$

Inégalité d'Heisenberg temps-énergie (Hors Programme) : Un état dont l'énergie présente une indétermination ΔE admet un temps caractéristique d'évolution τ tel que $\tau \Delta E \geq \hbar/2$

2) Evolution d'une particule confinée dans un puits

Voir les animations du site : phet.colorado.edu/en/simulation/bound-states

Observer la différence entre le puits infini et le puits de hauteur finie :

Observer les états stationnaires dans des puits infinis non rectangulaires (harmoniques, coulombien, dissymétrique...).

Symétrie et parité :

Evolution temporelle d'une particule confinée dans un double puits de potentiel :

On superpose les 2 premiers états d'énergie. On fait varier la distance entre les deux puits.

Observations :