

Chapitre MQ2. Mécanique ondulatoire de Schrödinger



Erwin Schrödinger (1887-1961) est un ingénieur et physicien autrichien. Le paradoxe du chat de Schrödinger illustre le principe de superposition : Toute composition linéaire des solutions est solution : tous les états (chat vivant et chat mort) coexistent avant la mesure.



INTRO :

On appelle **quanton** un objet quantique : selon les expériences, il a un comportement corpusculaire ou un comportement ondulatoire.

Dans ce chapitre, on aborde la mécanique quantique sous l'angle de la **mécanique ondulatoire** : on étudie le mouvement d'une **particule matérielle** sous l'influence de forces dérivant d'une **énergie potentielle**.

L'**équation de Schrödinger** est l'équation d'onde régissant le comportement d'une telle particule.

Ce chapitre réinvestit donc des notions de physique des ondes : OPPM, paquet d'ondes, ondes incidente, réfléchi et transmise, modes propres. Une fois établis, les comportements quantiques sont comparés aux résultats de mécanique classique (trajectoire, positions et énergies accessibles).

Buts de ce chapitre : introduire la notion d'état stationnaire ; étudier les ondes de de Broglie ; déterminer le comportement d'une particule qui rencontre une marche ou une barrière de potentiel ou qui est confinée dans un puits de potentiel infini.

Prérequis :

1^e année : Mécanique classique et Superposition d'ondes.

2^e année : O1 Optique ondulatoire et superposition d'ondes lumineuses ; O2 Interférences lumineuses par division du front d'onde ; EM2 Magnétostatique ; EM5-6-7 Ondes EM dans le vide, dans un plasma et dans un milieu ohmique.

Plan du chapitre :

A) Description de la nature ondulatoire d'une particule : fonction d'onde et équation de Schrödinger.....	2
1) Fonction d'onde et densité de probabilité de présence (<i>rappel ChMQ1</i>).....	2
2) Equation de Schrödinger (<i>rappel ChMQ1</i>).....	2
3) Etats stationnaires de l'équation de Schrödinger.....	3
B) Etats stationnaires d'une particule libre.....	4
1) Fonction d'onde d'une particule libre non localisée	4
2) Normalisation – Paquet d'ondes – Inégalité de Heisenberg – Localisation	5
3) Densité de courant de probabilité associée à une particule libre.....	6
C) Etats stationnaires d'une particule dans des potentiels constants par morceaux.....	7
1) Marche de potentiel – Transmission – Onde évanescence	7
2) Barrière de potentiel et effet tunnel	10
3) Puits de potentiel infini – Quantification de l'énergie – Energie de confinement	12
D) Etats non stationnaires d'une particule.....	16

Cadre de l'étude (conformément au programme) : on s'intéresse à des **particules sans spin** qui évoluent selon un axe (problème **unidimensionnel** en coordonnées **cartésiennes**, ici l'axe (Ox)) et qui sont soumises à une **énergie potentielle indépendante du temps**.

A) Description de la nature ondulatoire d'une particule : fonction d'onde et équation de Schrödinger

1) Fonction d'onde et densité de probabilité de présence (rappel ChMQ1)

Pour décrire l'**onde de matière** associée à une particule sans spin, on définit une **FONCTION D'ONDE complexe** $\psi(M, t)$ au point M à l'instant t .

Dans un **cas unidimensionnel** : la particule ne peut se déplacer que selon l'axe (Ox) et son état est décrit par la fonction d'onde $\psi(x, t)$. La **probabilité que la particule soit présente entre x et $x + dx$ à t est** :

$$dP = |\psi(x, t)|^2 \cdot dx \quad \Leftrightarrow \quad |\psi(x, t)|^2 = \frac{dP}{dx}$$

$|\psi(x, t)|^2$ représente la **densité linéique de probabilité de présence** (USI : m^{-1}).

2) Equation de Schrödinger (rappel ChMQ1)

a) Enoncé

On considère le mouvement d'une particule quantique de masse m , dans un référentiel R .

La particule est en interaction avec d'autres systèmes physiques, ce qui se traduit par une énergie potentielle, notée $V(M, t)$, appelée par abus de langage **potentiel**.

L'équation de Schrödinger décrit l'évolution dans l'espace et dans le temps de la fonction d'onde d'une particule quantique :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(M, t) + V(M, t) \cdot \psi(M, t) = i\hbar \frac{\partial \psi(M, t)}{\partial t}$$

Dans le **cas unidimensionnel**, ici (Ox) , et où V ne dépend pas explicitement du temps t , **l'équation de Schrödinger** se simplifie sous la forme :

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

C'est une **équation différentielle linéaire**, par conséquent le **principe de superposition** s'applique et permet notamment d'interpréter la figure d'interférences obtenue avec les fentes d'Young pour des particules quantiques (cf ChMQ1).

3) Etats stationnaires de l'équation de Schrödinger

♦ DEFINITION :

On s'intéresse à une particule évoluant selon l'axe (Ox) dans un potentiel V ne dépendant pas explicitement du temps.

Une telle particule possède des états pour lesquels l'énergie E est constante : on les appelle **ETATS STATIONNAIRES**.

La fonction d'onde d'un **état stationnaire** s'écrit :

$$\psi(x, t) = f(t) \cdot \varphi(x)$$

Où $f(t)$ et $\varphi(x)$ sont des **fonctions à valeurs complexes**.

♦ Pour un état stationnaire d'énergie E fixée,

① on écrit la partie temporelle $f(t)$ sous la forme :

$$f(t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t} = e^{-i\omega t}$$

en reliant l'énergie E à la pulsation comme pour les photons (Planck-Einstein) : $E = \hbar\omega = h\nu$

② la partie spatiale $\varphi(x)$ vérifie :

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

Cette équation est nommée « **équation de Schrödinger indépendante du temps** ».

➔ **Démonstrations à connaître** : Etablir les résultats ① et ②.

Démarche : Pour un état stationnaire $\psi(x, t) = \varphi(x) \cdot f(t)$, montrer que l'équation de Schrödinger peut

s'écrire : $i\hbar \frac{df}{f(t)} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi}{\varphi(x)} + V(x)$. En déduire que chaque membre de cette équation est une constante, homogène à une énergie, qui correspond à l'énergie mécanique, notée E . Conclure sur l'expression de $f(t)$ et sur l'équation vérifiée par $\varphi(x)$.

☛ Il faut distinguer l'onde associée à un état stationnaire d'une particule quantique à une onde stationnaire définie en physique des ondes classiques. Dans ce dernier cas, le signal transporté par l'onde s'écrit comme le produit de deux fonctions $F(x)$ et $G(t)$ à valeurs réelles.

Rq : Comme en mécanique classique, l'énergie potentielle est définie à une constante près. Si l'on pose $V'(x) = V(x) + V_0$ où V_0 est une constante réelle, alors c'est la fonction d'onde $\psi'(x, t) = \psi(x, t) \cdot e^{-i\frac{V_0}{\hbar}t}$ qui vérifie l'équation de Schrödinger écrite avec $V'(x)$. Les deux fonctions d'onde ψ et ψ' correspondent à la même probabilité de présence : $|\psi'(x, t)|^2 = |\psi(x, t)|^2$, la constante additive V_0 est donc sans conséquence.

Propriété :

La **densité de probabilité de présence d'un état stationnaire est indépendante du temps**, ce qui justifie le terme d'état « stationnaire ».

➔ **Démonstration à connaître** : Etablir cette propriété en utilisant l'expression de $\psi(x, t)$ et de $f(t)$.

Rq : On peut aussi établir cette propriété sans préciser l'expression de $f(t)$ en exploitant la condition de normalisation :

$$1 = \int_D |\psi(x, t)|^2 \cdot dx = \int_D |f(t) \cdot \varphi(x)|^2 \cdot dx = |f(t)|^2 \cdot \int_D |\varphi(x)|^2 \cdot dx$$

Cela implique que $|f(t)|$ est une constante indépendante du temps : $|f(t)| = C$.

Ainsi, la densité de probabilité de présence $\frac{dP}{dx} = |\psi(x, t)|^2 = |f(t) \cdot \varphi(x)|^2 = C^2 \cdot |\varphi(x)|^2$ est indépendante du temps.

Les § B et C consistent à résoudre l'équation de Schrödinger indépendante du temps i.e. l'EDL₂ vérifiée par $\varphi(x)$ pour différents potentiels $V(x)$. La résolution de cette équation fait intervenir des constantes d'intégration qui se déterminent à l'aide des conditions aux limites et de la condition de normalisation.

D'après l'interprétation probabiliste de la fonction d'onde, $\varphi(x)$, la partie spatiale d'un état stationnaire, doit vérifier les propriétés suivantes :

♦ $\varphi(x)$ **s'annule aux endroits où il est impossible que la particule se trouve.**

♦ **Conditions aux limites**

$\varphi(x)$ est une **fonction continue**.

$\frac{d\varphi}{dx}(x)$ est une **fonction continue** en tout point où le potentiel $V(x)$ **ne présente pas de discontinuité d'amplitude infinie.**

♦ **Condition de normalisation**

Avec D le domaine accessible à la particule :

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

B) Etats stationnaires d'une particule libre

1) Fonction d'onde d'une particule libre non localisée

♦ Position du problème :

On étudie une particule quantique **libre** i.e. qui évolue sans subir d'interaction.

La particule peut accéder à l'ensemble des positions $x \in] - \infty, +\infty[$.

Son mouvement est caractérisé par le potentiel :

$$\forall x \in] - \infty, +\infty[, V(x) = 0$$

On cherche la partie spatiale $\varphi(x)$ de l'état stationnaire d'une particule libre d'énergie $E = E_c$.

♦ Fonctions d'onde solutions - OPPM :

Soit une particule libre pouvant accéder à l'ensemble des positions $x \in] - \infty, +\infty[$.

La fonction d'onde d'un état stationnaire d'énergie E associé à cette particule s'écrit :

$$\psi(x, t) = e^{-i\omega t} \cdot (Ae^{ikx} + Be^{-ikx}) = Ae^{-i(\omega t - kx)} + Be^{-i(\omega t + kx)}$$

$$\text{Avec } \omega = \frac{E}{\hbar} \text{ et } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

On reconnaît la somme d'une OPPM se propageant selon $+\vec{u}_x$ et d'une OPPM se propageant selon $-\vec{u}_x$.

➔ **Démonstration à connaître** : Démontrer les expressions de k et de $\psi(x, t)$.

❄ **En mécanique quantique, la convention d'écriture de la phase d'une OPPM est $e^{-i(\omega t \pm kx)}$: cette convention est imposée par la résolution de l'équation de Schrödinger, cf § A.3.**

♦ Relation de dispersion – Onde de de Broglie

D'après la résolution de l'équation de Schrödinger, $E = \hbar\omega$ et $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$. Ainsi, la relation de dispersion s'écrit :

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

Par ailleurs, la particule étant libre, $E = E_c = \frac{p^2}{2m}$. On en déduit la relation de de Broglie :

$$p = \hbar k \Leftrightarrow p = \frac{h}{\lambda}$$

Les OPPM $\psi(x, t) = Ae^{-i(\omega t \pm kx)}$ sont nommées ondes de de Broglie qu'on peut aussi écrire sous la forme :

$$\psi(x, t) = Ae^{-\frac{i}{\hbar}(Et \pm px)}$$

⇒ Démonstrations à connaître : Démontrer les relations entre k et ω et entre k et la quantité de mouvement p .

☛ Pour une onde de de Broglie et pour un photon, on a : $E = \hbar\omega$ et $p = \frac{h}{\lambda}$.

Mais attention, la relation de dispersion $\omega = kc$ n'est valable que pour un photon dans le vide et pas pour une particule matérielle, par exemple, on a $\omega = \frac{\hbar}{2m} k^2$ pour une particule libre.

Ainsi, la relation $E = \frac{hc}{\lambda}$ n'est valable que pour un photon dans le vide et pas pour une particule matérielle !

2) Normalisation – Paquet d'ondes – Inégalité de Heisenberg – Localisation

⇒ Exercice classique : La particule libre s'étend sur les positions $x \in]-\infty, +\infty[$: on parle de particule « non localisée ». Que dire de la condition de normalisation de la fonction d'onde $\psi(x, t) = Ae^{-i(\omega t \pm kx)}$?

La fonction d'onde d'une onde de de Broglie n'est pas normalisable.

Comme les OPPM classiques, l'onde de de Broglie est un **modèle idéalisé** qui ne peut pas représenter correctement l'état d'une particule quantique libre réelle mais il s'agit d'un outil mathématique utile : par linéarité de l'équation de Schrödinger, l'onde de matière est la **superposition d'ondes de de Broglie**.

La fonction d'onde, normalisable, d'une particule quantique libre réelle est donc un **PAQUET D'ONDES**.

Pour une onde de matière se propageant selon $+\vec{u}_x$, la fonction d'onde s'écrit :

$$\psi(x, t) = \int_{k=0}^{\infty} \underline{A}(k) \cdot e^{-i(\omega(k) \cdot t - k \cdot x)} \cdot dk$$

Avec $\omega(k) = \frac{\hbar}{2m} k^2$: relation de dispersion pour une particule libre

Rq : La relation de dispersion permet d'exprimer la vitesse de phase $v_\phi = \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2m}} = \sqrt{\frac{E}{2m}}$ et la vitesse de

groupe $v_g = \sqrt{\frac{2\hbar\omega}{m}} = \sqrt{\frac{2E}{m}}$. Puisque v_ϕ dépend de ω , il y a **dispersion** et donc **étalement du paquet d'ondes** (cf ChEM6). On identifie la vitesse de groupe à la vitesse moyenne de la particule.

♦ Inégalité de Heisenberg spatiale :

On considère un paquet d'ondes correspondant à la somme d'ondes de de Broglie de nombres d'onde angulaires proches de k_0 :

$$k \in \left[k_0 - \frac{\Delta k}{2}, k_0 + \frac{\Delta k}{2} \right]$$

avec Δk l'étalement spectral tel que $\Delta k \ll k_0$ pour un paquet d'ondes quasi-monochromatique.

Au ChEM6 et au ChO1, on a vu qu'un paquet d'ondes ou un train d'ondes est un signal ayant une durée limitée dans le temps, notée Δt , d'autant plus élevée que la largeur spectrale $\Delta \omega$ (ou Δf) est faible :

$$\Delta \omega \cdot \Delta t \approx 2\pi \quad (*)$$

De la même façon, le **paquet d'ondes de de Broglie** est un **signal d'extension spatiale limitée**, notée Δx , d'autant plus élevée que l'étalement spectral Δk est faible ; on a :

$$\Delta k \cdot \Delta x \approx 2\pi$$

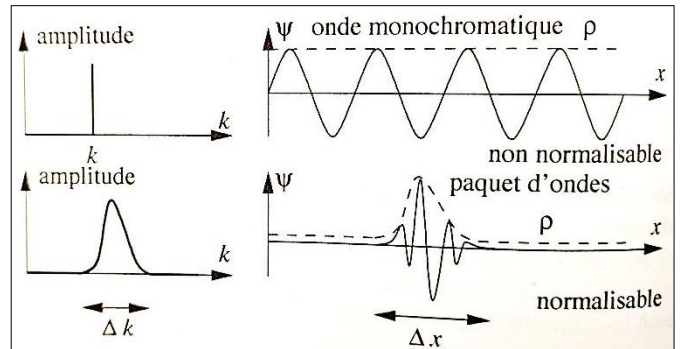
On retrouve le fait qu'une **onde de de Broglie** a une extension spatiale infinie puisque $\Delta k = 0$: elle correspond à une **particule non localisée**. A l'inverse, plus Δk est élevé, plus la **particule est localisée**.

Avec $p = \hbar k$, on a :

$$\Delta p \cdot \Delta x \approx h$$

Cette relation est cohérente avec l'inégalité de Heisenberg spatiale (cf ChMQ1) :

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$



(*) Rq : La relation $\Delta \omega \cdot \Delta t \approx 2\pi$ est cohérente avec l'inégalité de Heisenberg temporelle : $\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$

Avec ΔE l'indétermination sur l'énergie et Δt la durée caractéristique d'évolution du système.

Un état stationnaire est caractérisé par une densité de probabilité indépendante de t soit $\Delta t \rightarrow \infty$ donc $\Delta E \rightarrow 0$. On retrouve donc le fait que l'énergie associée à un état stationnaire est parfaitement définie.

3) Densité de courant de probabilité associée à une particule libre

On considère une particule matérielle représentée par une **OPPM** ou un **paquet d'ondes quasi-monochromatique** de vecteur d'onde moyen \vec{k} .

Par analogie avec le vecteur densité de courant électrique* $\vec{j} = \rho \cdot \vec{v}$, on construit un **vecteur densité de courant de probabilité de présence de la particule libre** :

$$\vec{j} = |\psi|^2 \cdot \vec{v}$$

Avec $\vec{p} = m\vec{v}$ et $\vec{p} = \hbar\vec{k}$, on a :

$$\vec{j} = |\psi|^2 \cdot \frac{\hbar\vec{k}}{m}$$

USI de $\|\vec{j}\|$: s^{-1}

* Rappel ChEM2 : on a introduit le vecteur densité de courant électrique $\vec{j} = \rho \cdot \vec{v}$ avec ρ la densité volumique de charges mobiles et \vec{v} leur vecteur vitesse moyen. On peut donc justifier l'expression du courant de probabilité sachant que $|\psi(x, t)|^2$ représente la **densité linéique de probabilité** (USI : m^{-1}).

C) Etats stationnaires d'une particule dans des potentiels constants par morceaux

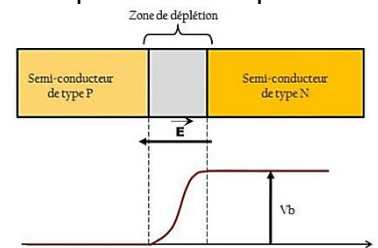
1) Marche de potentiel – Transmission – Onde évanescente

a) Description

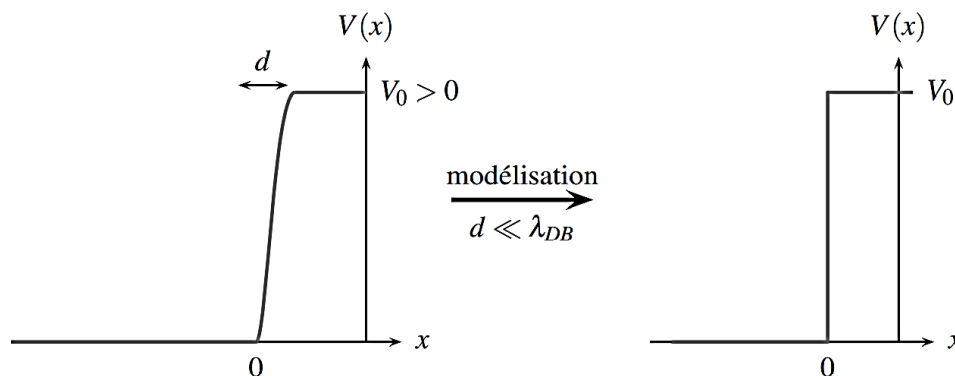
♦ Exemples

Une particule peut être soumise à une marche de potentiel dans les cas suivants :

- **Electron de conduction dans un métal près de sa surface** : on modélise un solide métallique par un réseau de cations à l'intérieur duquel les électrons de conduction se déplacent librement. Au voisinage de la surface, il existe une interaction qui s'oppose à la « sortie » des électrons du métal. Ceci est relié au travail d'extraction introduit lors de la description de l'effet photo-électrique.
- **Electron au niveau de la jonction PN entre deux semi-conducteurs**



♦ Position du problème - Modélisation :



On étudie la **marche de potentiel** suivante :

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

On considère une particule provenant de la zone I et se déplaçant selon $+\vec{u}_x$. Comment se comporte la particule lorsqu'elle rencontre la marche de potentiel ?

♦ Cas d'une particule classique

On note $E = E_c + E_p$ l'énergie mécanique de la particule, on a deux cas de figure (cf 1^e année) :

- Si $E > V_0$, la particule poursuit son mouvement, elle passe dans la zone II avec une énergie cinétique réduite : il y a « **transmission** ».
- Si $E < V_0$, la particule ne peut pas accéder à la zone II, elle fait demi-tour en $x = 0$: il y a « **réflexion** ».

♦ Cas d'une particule quantique : on cherche les **solutions stationnaires** :

$$\psi(x, t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \cdot \varphi(x)$$

b) Cas $E > V_0$ – Fonction d'onde solution – Probabilité de transmission et de réflexion

La résolution de l'équation de Schrödinger et l'exploitation des conditions aux limites conduisent aux fonctions d'onde suivantes :

$$\psi(x, t) = \begin{cases} A_1 e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \left(e^{ik_1x} + \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} e^{-ik_1x} \right) & \text{si } x < 0 : \text{zone I} \\ A_1 e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \frac{2k_1}{k_1 + k_2} e^{ik_2x} & \text{si } x > 0 : \text{zone II} \end{cases}$$

Avec $k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ et $k_2 = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$

Analyse de la fonction d'onde :

Dans la **zone I**, la fonction d'onde est la **superposition d'une OPPM incidente et d'une OPPM réfléchie**.
Pour $E > V_0$, dans la **zone II**, il s'agit d'une **OPPM transmise**.

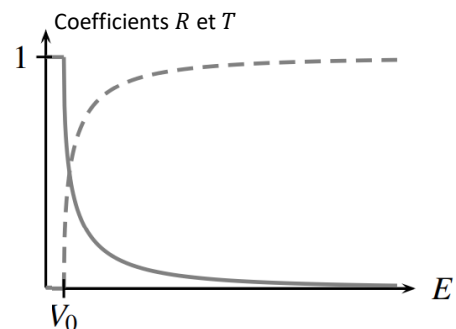
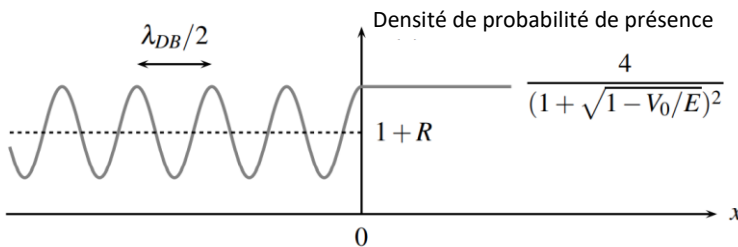
On définit les coefficients de réflexion R et de transmission T :

$$R = \frac{\|\vec{J}_r\|}{\|\vec{J}_i\|} \quad \text{et} \quad T = \frac{\|\vec{J}_t\|}{\|\vec{J}_i\|}$$

$$\text{Avec } \vec{J}_i = |A_1|^2 \cdot \frac{\hbar k_1}{m} \vec{u}_x; \vec{J}_r = - \left| A_1 \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right|^2 \cdot \frac{\hbar k_1}{m} \vec{u}_x; \vec{J}_t = \left| A_1 \frac{2k_1}{k_1 + k_2} \right|^2 \cdot \frac{\hbar k_2}{m} \vec{u}_x$$

Pour le cas étudié, on a :

$$R = \left(\frac{1 - \sqrt{1 - V_0/E}}{1 + \sqrt{1 - V_0/E}} \right)^2 \quad \text{et} \quad T = \frac{4\sqrt{1 - V_0/E}}{(1 + \sqrt{1 - V_0/E})^2}$$



➔ **Démonstrations à connaître** : Etablir les expressions de $\psi(x, t)$, des vecteurs densité de courant de probabilité et des coefficients R et T .

Analyse des résultats - Commentaires :

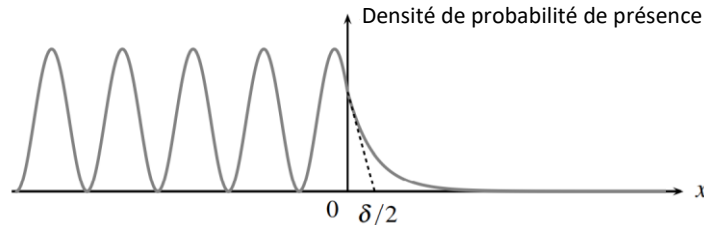
- i) $R + T = 1$: ce résultat exprime la **conservation de la probabilité de présence** : une particule quantique est **soit réfléchi** par la marche, **soit transmise**, sans autre possibilité.
- ii) $R \neq 0$: **effet quantique** (pour $E > V_0$, la mécanique classique ne prévoit pas de réflexion).
- iii) Dans la limite où $E \gg V_0$, on obtient $R \rightarrow 0$ et $T \rightarrow 1$: il s'agit de la limite classique : l'influence de la marche de potentiel est négligeable lorsque sa hauteur est faible devant l'énergie de la particule incidente.

c) Cas $0 < E < V_0$ – Fonction d'onde solution : onde évanescente

La résolution de l'équation de Schrödinger et l'exploitation des conditions aux limites conduisent aux fonctions d'onde suivantes :

$$\psi(x, t) = \begin{cases} A_1 e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \left(e^{ik_1x} + \frac{k_1 - iq}{k_1 + iq} e^{-ik_1x} \right) & \text{si } x < 0 : \text{zone I} \\ A_1 e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \frac{2k_1}{k_1 + iq} e^{-qx} & \text{si } x > 0 : \text{zone II} \end{cases}$$

$$\text{Avec } k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \text{ et } q = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$



Analyse de la fonction d'onde - Commentaires :

Dans la **zone I**, la fonction d'onde est la **superposition d'une OPPM incidente et d'une OPPM réfléchie**. Pour $E < V_0$, dans la **zone II**, il s'agit d'une **onde évanescente** et la **densité de probabilité de présence dans la zone II n'est donc pas rigoureusement nulle au-delà de la marche**. Cela signifie que, contrairement aux prévisions classiques, la probabilité de trouver la particule en $x > 0$ est non nulle.

On introduit la **profondeur de pénétration** :

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

La densité de probabilité de présence est non nulle sur l'intervalle $x \in [0, 2\delta]$.

δ est d'autant plus élevée que :

- la **hauteur ($V_0 - E$) de la marche** de potentiel « vue » par la particule quantique est **faible** ;
- que la **masse m** de la particule quantique est **faible** : *les effets quantiques sont toujours plus marqués pour les particules de faible masse.*

Cf <https://phet.colorado.edu/fr/simulations/quantum-tunneling>

➔ **Démonstrations à connaître** : Etablir les expressions de $\psi(x, t)$, vérifier que δ est homogène à une distance et justifier l'allure de la courbe de densité de probabilité de présence.

- Rq :**
- *Onde évanescente aussi rencontrée au ChEM6 : onde EM dans un plasma pour $\omega < \omega_p$.*
 - *Pour $E < V_0$, le coefficient de réflexion vaut $R = 1$ (situation de réflexion totale).*
 - *Pour $V_0 \rightarrow \infty$, $q \rightarrow \infty \Rightarrow \delta \rightarrow 0$ et $B_1 = \frac{k_1 - iq}{k_1 + iq} A_1 \sim -A_1$: la portée de l'onde évanescente tend vers 0 et la réflexion en $x = 0$ s'accompagne d'un déphasage de π .*

➔ **Application directe** : Un électron de conduction dans un métal « voit » à la surface du métal une marche de potentiel : cette énergie correspond au travail d'extraction.

Pour le Zinc, $W_{ext} = V_0 - E = 4,3 \text{ eV}$, en déduire l'ordre de grandeur de l'extension de la fonction d'onde électronique au-delà de la surface du métal.

2) Barrière de potentiel et effet tunnel

a) Description

L'étude de la **marche de potentiel** a mis en évidence la **pénétration de la fonction d'onde**, sous forme d'onde évanescente, **dans des régions inaccessibles au sens de la mécanique classique**.

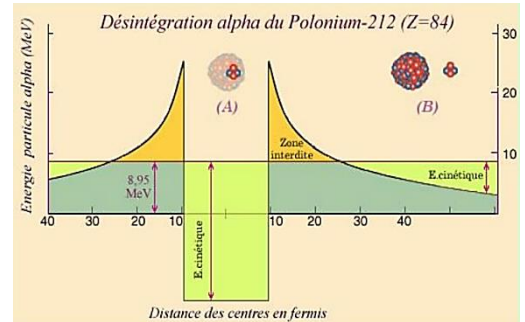
On étudie ici le cas d'une barrière de potentiel i.e. une **marche de potentiel d'extension limitée**. Si la distance δ caractéristique de la décroissance de la fonction d'onde dans la barrière de potentiel est suffisamment élevée, on peut s'attendre à ce que la probabilité de présence soit non nulle de l'autre côté de la barrière : c'est **l'effet tunnel**.

♦ Exemples

Une particule peut être soumise à une barrière de potentiel dans les cas suivants (cf TD) :

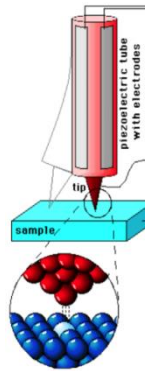
- Particule alpha dans un noyau → **radioactivité alpha**.

Un noyau instable est susceptible de libérer un noyau d'Hélium (= particule alpha). Pour se libérer cette particule doit vaincre les forces de cohésion du noyau, donc l'énergie potentielle associée forme un barrière de potentiel. Par effet tunnel, la probabilité de libération est donc celle de traversée de la barrière. On explique ainsi le caractère probabiliste de la désintégration radioactive.

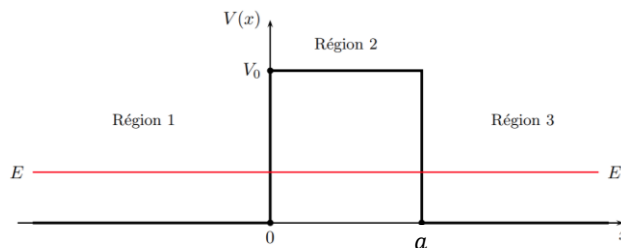


- Electron d'un **microscope à effet tunnel**

L'espace vide entre la pointe conductrice et la surface du conducteur à sonder est assimilée à une barrière de potentiel. Les électrons à la surface la franchissent par effet tunnel, ce qui fait apparaître un courant d'intensité I_{tunnel} dont la mesure permet de cartographier la surface du conducteur, cf <https://toutestquantique.fr/effet-tunnel/>.



♦ Position du problème - Modélisation :



On étudie la **barrière de potentiel** suivante :

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < 0 : \text{zone I} \\ V_0 > 0 & \text{si } x \in]0, a[: \text{zone II} \\ 0 & \text{si } x > a : \text{zone III} \end{cases}$$

On considère une particule provenant de la zone I et se déplaçant selon $+\vec{u}_x$. Comment se comporte la particule lorsqu'elle rencontre la barrière de potentiel ?

♦ Cas d'une particule classique

On note E l'énergie mécanique de la particule, on a deux cas de figure (cf 1^e année) :

- Si $E > V_0$, la particule poursuit son chemin et accède donc aux zones II et III.
- Si $E < V_0$, la particule reste dans la zone I.

♦ Cas d'une particule quantique représentée par un état stationnaire d'énergie $E \in]0, V_0[$

D'après le § C.1.c, la probabilité de présence de la particule n'est pas nulle dans la zone II, la particule a donc une probabilité non nulle d'accéder à la zone III.

Quelle est l'influence de la hauteur V_0 et de la largeur a de la barrière de potentiel sur le coefficient de transmission dans la zone III pour une particule d'énergie $E \in]0, V_0[$?

b) Fonction d'onde solution – Probabilité de transmission – Effet tunnel

♦ Pour une particule d'énergie $E \in]0, V_0[$, la résolution de l'équation de Schrödinger et l'exploitation des conditions aux limites conduisent aux fonctions d'onde suivantes :

$$\varphi(x) = \begin{cases} A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx} & \text{zone I} \\ A_2 e^{qx} + B_2 e^{-qx} & \text{zone II} \\ A_3 e^{ikx} & \text{zone III} \end{cases}$$

Avec $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ et $q = \frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}$

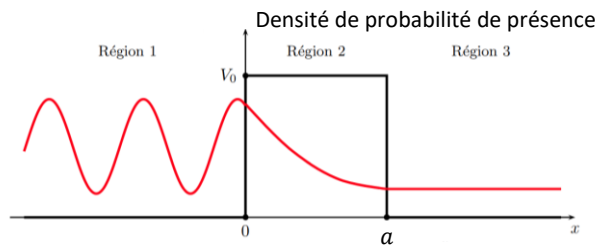
⇒ Justifier ces expressions en précisant la nature des ondes dans chaque zone.

Rq : dans la zone II, on peut aussi chercher des solutions de la forme $A_2 ch(qx) + B_2 sh(qx)$.

On introduit le coefficient de transmission dans la zone III et on peut montrer que :

$$T = \frac{\|\vec{J}_t\|}{\|\vec{J}_i\|} = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2} = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \operatorname{sh}^2\left(\frac{a}{\delta}\right)}$$

Avec $\delta = \frac{1}{q} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0-E)}}$ la profondeur de pénétration dans la barrière



Pour la zone III, la densité de probabilité de présence est constante, égale à $T \cdot |A_1|^2$.

La probabilité de transmission T n'est pas nulle : une particule quantique a donc la possibilité de traverser la barrière de potentiel. Cet effet, inexplicable par les lois de la mécanique classique, est purement quantique : c'est l'**EFFET TUNNEL**. Il est dû à l'existence **d'ondes évanescentes** dans la barrière de potentiel.

♦ Dans le cas d'une barrière de potentiel « épaisse » i.e. $a \gg \delta \Leftrightarrow aq \gg 1$, l'expression du coefficient de transmission se simplifie sous la forme :

$$T \approx \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-2\frac{a}{\delta}}$$

⇒ Exercice classique : Etablir ce résultat.

D'après la dépendance de T en $e^{-2\frac{a}{\delta}}$, la probabilité de transmission varie sensiblement avec :

- la masse m des particules quantiques,
- la largeur a de la barrière de potentiel,
- la hauteur $(V_0 - E)$ de la barrière de potentiel « vue » par la particule quantique.

Pour $E = \frac{V_0}{2}$, on a les ODG suivants :

Particule	m (kg)	V_0 (eV)	a (nm)	δ (nm)	T
Électron	10^{-30}	4	0,3	0,1	10^{-2}
Électron	10^{-30}	40	0,3	4×10^{-2}	10^{-6}
Électron	10^{-30}	4	3	0,1	10^{-20}
Proton	10^{-27}	4	0,3	4×10^{-3}	10^{-63}
Proton	10^{-27}	4	3	2×10^{-3}	10^{-628}

Cf <https://phet.colorado.edu/fr/simulations/quantum-tunneling>

3) Puits de potentiel infini – Quantification de l'énergie – Energie de confinement

a) Exemples

Une particule peut être piégée dans un volume restreint :

- **Electron** au sein d'un **atome** ou électron d'une liaison covalente au sein d'une **molécule**.
- **Electron** dans une couche de GaAs (arséniure de gallium) en « **sandwich** » entre deux couches de GaAlAs (arséniure de gallium-aluminium), cf figure ci-dessous et TD.

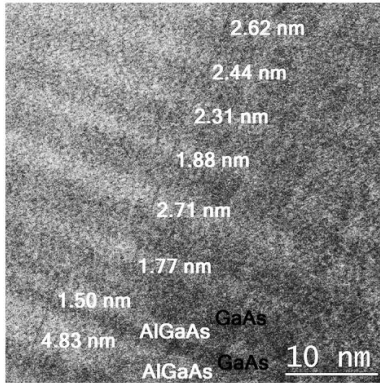
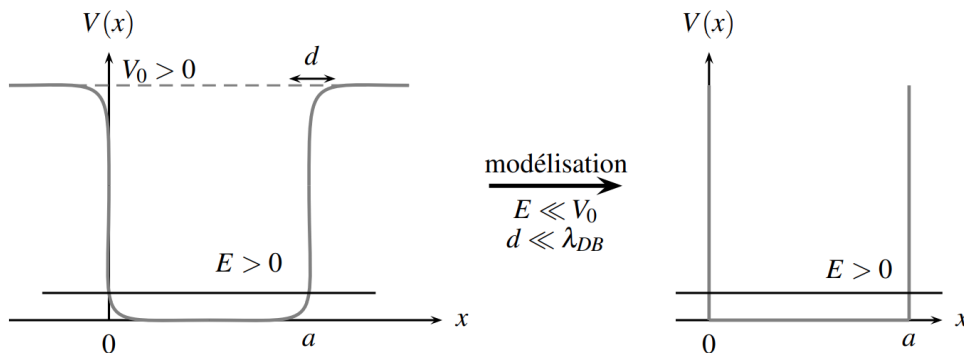


Image obtenue avec un microscope électronique

b) Position du problème - Modélisation :

Afin d'étudier théoriquement de tels systèmes, on considère une situation modèle : le puits de potentiel unidimensionnel, infiniment profond. La particule quantique est supposée soumise à un champ de force qui dérive du potentiel ayant l'allure ci-dessous. La région comprise entre 0 et a est appelée puits de potentiel.



On étudie donc le **puits de potentiel infini** suivant :

$$V(x) = \begin{cases} +\infty & \text{si } x < 0 : \text{zone I} \\ 0 & \text{si } x \in]0, a[: \text{zone II} \\ +\infty & \text{si } x > a : \text{zone III} \end{cases}$$

On considère une particule confinée (état lié) dans le puits de potentiel. *Comment se comporte-t-elle dans la zone II ?*

c) Equation de Schrödinger : expression de la fonction d'onde – quantification de l'énergie

Par la résolution de l'équation de Schrödinger avec un potentiel infini ou par l'interprétation probabiliste de la fonction d'onde, on justifie que **la fonction d'onde est nulle dans les zones I et III.**

* la particule étant confinée dans le puits, sa probabilité d'existence en dehors du puits est nulle.

Soit une **particule libre confinée dans un puits de potentiel infini 1D de largeur a .**

Un état stationnaire d'énergie E associé à cette particule a les propriétés suivantes :

♦ La partie spatiale de la fonction d'onde est quantifiée :

les nombres d'onde angulaires k_n possibles sont tels que

$$k_n = \frac{n\pi}{a} \text{ pour } n \in \mathbb{N}^*$$

$$\varphi_n(x) = A_n \sin(k_n x)$$

♦ Les **énergies sont quantifiées** :

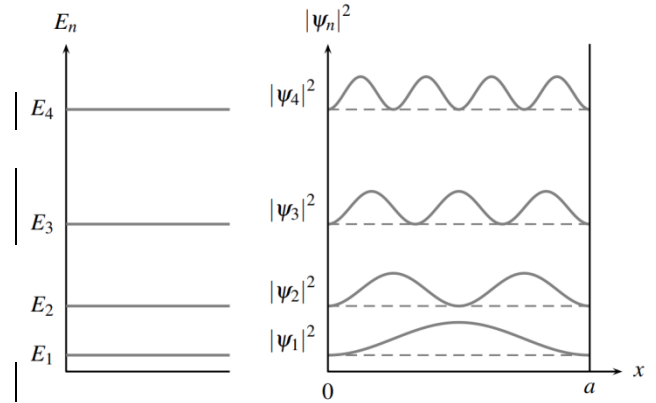
$$E_n = n^2 \cdot \frac{\hbar^2}{8ma^2} = n^2 \cdot \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} = n^2 \cdot E_1$$

E_1 est l'énergie du niveau **fondamental** et $E_{n>1}$ sont les énergies des niveaux **excités**.

♦ Les fonctions d'onde propres s'écrivent donc :

$$\psi_n(x, t) = A_n \sin(k_n x) \cdot e^{-i\omega_n t}$$

$$\text{Avec } \omega_n = \frac{E_n}{\hbar} = n^2 \cdot \frac{\pi^2 \hbar}{2ma^2}$$



➔ **Démonstration à connaître** : Par résolution de l'équation de Schrödinger et l'exploitation des conditions aux limites, établir les expressions de k_n et de $\varphi_n(x)$. En déduire les expressions de E_n et de ω_n .


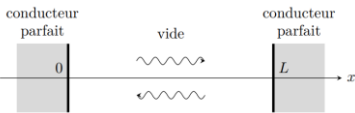
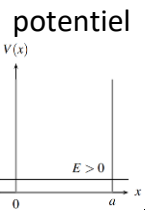


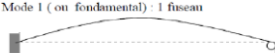
NB : - On obtient $|A_n| = \sqrt{\frac{2}{a}}$ en exploitant la condition de normalisation :

$$\int_0^a |A_n \sin(k_n x)|^2 \cdot dx = 1$$

- Pour des énergies élevées, donc pour n élevé, la fonction d'onde spatiale oscille très vite. Pour n élevé, on a $\lambda_n = \frac{2\pi}{k_n} = \frac{2a}{n} \ll a$, ainsi les effets quantiques sont négligeables et on retrouve les résultats classiques : probabilité de présence approximativement uniforme.

- Si $a \rightarrow \infty$, l'écart entre les énergies accessibles tend vers 0 i.e. qu'en l'absence de confinement, on a un **continuum** d'énergie (absence de quantification de l'énergie).

d) Modes propres : Analogies avec la corde vibrante (MPSI) / les cavités EM (ChEM7)

<p>Problème étudié</p>	<p>Onde le long d'une corde fixée en ses 2 extrémités (MPSI)</p> 	<p>Onde EM dans une cavité (ChEM7)</p> 	<p>Particule quantique libre confinée dans un puits de potentiel</p> 
<p>Milieu de propagation de l'onde = $[0, a]$ Milieu limité spatialement</p>	<p>Onde mécanique ne peut se propager que sur $x \in [0, a]$. Réflexion sans perte aux extrémités de la corde.</p>	<p>Champ EM nul dans le conducteur parfait. Réflexion sans perte sur les parois de la cavité.</p>	<p>Particule est confinée sur $x \in]0, a[$. Réflexion sans perte sur les « parois » du puits.</p>
<p>Ondes incidente et réfléchie de même amplitude et qui se superposent.</p>			
<p>Conditions aux limites</p>	<p>Corde fixée en ses 2 extrémités : $\forall t, y(0, t) = 0 = y(a, t)$</p>	<p>Relations de passage en incidence normale \Rightarrow $\forall t, \vec{E}(0, t) = \vec{0} = \vec{E}(a, t)$</p>	<p>Continuité de la fonction d'onde \Rightarrow $\forall t, \psi(0, t) = 0 = \psi(a, t)$</p>
<p>Les signaux associés aux ondes sont quantifiés : $k_n = \frac{n\pi}{a}$ avec $n \in \mathbb{N}^*$</p>			
<p>Modes propres</p>	<p>$y_n(x, t) = \varphi_n(x) \cdot F_n(t)$ avec : $\varphi_n(x) = A_n \sin(k_n x)$ $F_n(t) = \sin(\omega_n t + \varphi_n)$ $\omega_n = k_n c = \frac{n\pi c}{a}$</p>	<p>$\vec{E}_n(x, t) = \varphi_n(x) \cdot F_n(t) \vec{e}_z$ avec : $\varphi_n(x) = A_n \sin(k_n x)$ $F_n(t) = \sin(\omega_n t + \varphi_n)$ $\omega_n = k_n c = \frac{n\pi c}{a}$</p>	<p>$\psi_n(x, t) = \varphi_n(x) \cdot f_n(t)$ avec : $\varphi_n(x) = A_n \sin(k_n x)$ $f_n(t) = e^{-i\omega_n t}$ $\omega_n = \frac{\hbar}{2m} k_n^2 = n^2 \cdot \frac{\pi^2 \hbar}{2ma^2}$</p>
<p>Allure de $\varphi_n(x)$</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Mode 3 : 3 fuseaux  4 nœuds • Mode 2 : 2 fuseaux  3 nœuds • Mode 1 (ou fondamental) : 1 fuseau  2 nœuds 		

➔ **Exercice classique** : En s'appuyant sur l'analogie avec la corde vibrante, déterminer les niveaux d'énergie d'une particule libre confinée dans un puits de potentiel infini 1D.

Démarche :

i) D'après l'allure des modes propres et l'expression de la distance entre deux nœuds, retrouver les longueurs d'onde λ_n associées aux différents modes propres $n \in \mathbb{N}^*$.

ii) Dédire des longueurs d'onde λ_n de l'onde de matière l'expression des quantités de mouvement p_n puis retrouver les énergies mécaniques E_n des modes propres de la particule quantique.

e) Généralisation – Effets quantiques : quantification et énergie de confinement

◆ La **mécanique classique** prévoit que l'énergie mécanique $E_m = E_c + V$ d'une particule piégée dans le puits est une grandeur dont les valeurs appartiennent à l'**intervalle continu** $[V, \infty[= [0, \infty[$.

◆ D'après l'étude du **puits de potentiel infini**, on remarque que :

- les énergies de la particule confinée dans le puits sont quantifiées ;
- $E_n = n^2 \cdot E_1 \geq E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} > 0$: l'énergie de la particule quantique ne peut pas être inférieure à E_1 .

GENERALISATION* :

Soit une particule **confinée** dans un puits de largeur a et de forme quelconque

- La particule quantique a son **énergie quantifiée**.
- Son énergie minimale (= énergie fondamentale) est d'autant plus élevée que la largeur du puits est faible. On appelle cette énergie minimale **énergie de confinement** dont l'ODG s'obtient avec l'expression approchée :

$$E_{min} \approx \frac{\hbar^2}{2ma^2}$$

⇒ **Démonstration à connaître** : En exploitant l'inégalité de Heisenberg spatiale, retrouver l'expression approchée de l'énergie de confinement i.e. du niveau fondamental E_1 .

* La simulation numérique ci-dessous permet de vérifier l'influence de la largeur d'un puits quelconque (rectangulaire et harmonique) sur l'énergie de confinement :

<https://phet.colorado.edu/en/simulations/bound-states>

⇒ **Application directe** :

- Soit un électron dans un atome. Déterminer l'ODG des énergies mises en jeu en chimie à partir de l'énergie de confinement.
- Soit un proton dans un noyau. Déterminer l'ODG des énergies mises en jeu en physique nucléaire à partir de l'énergie de confinement.

◆ Cas d'un **puits de hauteur finie** et de largeur a .

Qualitativement :

La fonction d'onde n'est pas rigoureusement nulle dans les domaines $x < 0$ et $x > a$: il s'agit d'ondes évanescentes. La largeur effective a' du puits est donc supérieure à a .

Ainsi, l'énergie de confinement $E_{min} \approx \frac{\hbar^2}{2ma'^2}$ et les énergies des niveaux excités du puits de hauteur finie sont moins élevées que celles du puits de hauteur infinie.

Etude quantitative : cf TD.

D) Etats non stationnaires d'une particule

Rappel § A.3 : Un état stationnaire est un état indépendant du temps : la densité de probabilité de présence relative à un état stationnaire est indépendante du temps.

On considère une particule libre confinée dans un puits de potentiel infini.

D'après le § C.3.c, les fonctions d'onde propres sont :

$$\psi_n(x, t) = \varphi_n(x) \cdot e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}}$$

$$\text{Avec } \varphi_n(x) = A_n \sin(k_n x) \text{ et } E_n = n^2 \cdot \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

Soient deux états stationnaires d'énergie E_r et E_s d'une particule représentés par les fonctions d'onde $\psi_r(x, t)$ et $\psi_s(x, t)$.

On exploite le principe de superposition (§ A.2.a) et on considère l'état de la particule représenté par :

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_r(x, t) + \psi_s(x, t))$$

La densité de probabilité de présence associée s'écrit :

$$\frac{dP}{dx} = \frac{1}{2} \left(\varphi_r(x)^2 + \varphi_s(x)^2 + 2\varphi_r(x)\varphi_s(x) \cos\left(\frac{E_s - E_r}{\hbar} t\right) \right)$$

On remarque que la densité de probabilité de présence $\frac{dP}{dx}$ dépend explicitement du temps : l'état de la particule n'est donc pas stationnaire, il évolue au cours du temps.

➔ **Démonstration à connaître** : Démontrer l'expression de la densité de probabilité de présence.

GENERALISATION* :

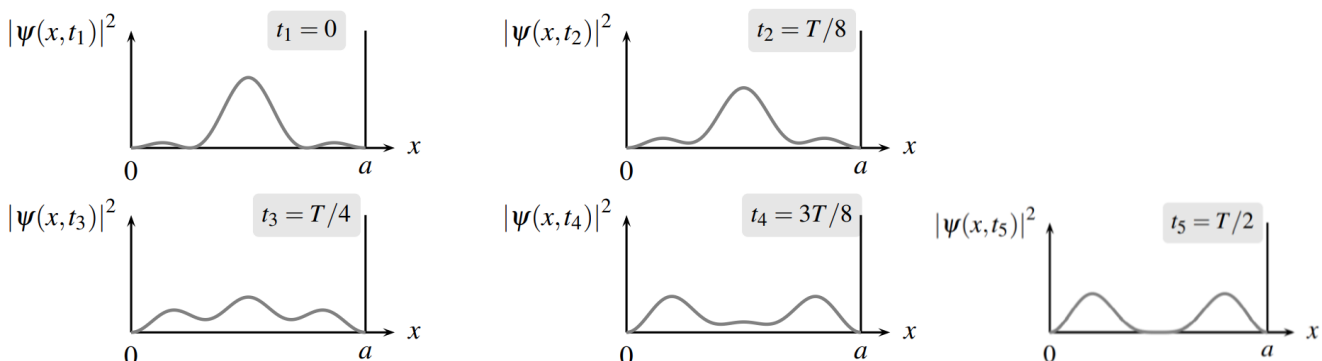
On considère une particule dont l'état est décrit par la **superposition de deux états stationnaires** d'énergie E_r et E_s . **L'état de la particule évolue au cours du temps** : la **probabilité de présence** varie temporellement, elle **oscille sinusoïdalement** à la pulsation $\omega_{rs} = \frac{|E_s - E_r|}{\hbar}$ i.e. à la fréquence $\nu_{rs} = \frac{|E_s - E_r|}{h}$.

Cette relation permet d'interpréter **l'interaction lumière-matière** : une **particule** à 2 niveaux d'énergie E_r et E_s peut **émettre ou absorber un photon** de pulsation ω_{rs} .

* La simulation numérique ci-dessous permet d'observer l'évolution temporelle d'une particule confinée dont l'état est décrit par la superposition de 2 états stationnaires :

<https://phet.colorado.edu/en/simulations/bound-states>

Exemple de résultats :



Représentations graphiques d'une évolution non stationnaire pour $t = 0$ à $T/2$. De $t = T/2$ à T , on repasse, à l'envers, par les mêmes étapes. À l'instant T , on retrouve la fonction d'onde initiale.

La fonction d'onde initiale représente une particule quantique plutôt localisée au centre du puits de potentiel. Ensuite, la fonction d'onde s'étale sur toute la largeur du puits, et suite aux réflexions sur les deux bords, elle vient reprendre sa forme initiale au centre du puits.