

Mécanique quantique

Chapitre 2 - Cas d'un potentiel constant par morceaux

On considère dans ce chapitre une particule non relativiste de masse m , d'énergie E se déplaçant dans une zone où le potentiel V est constant par morceaux. L'équation de Schrödinger indépendante du temps s'écrit :

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

La fonction d'onde $\psi(x, t)$ étant donnée par :

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

— Dans le cas où l'énergie $E > V_o$, on a :

$$\varphi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_o)\varphi(x) = 0$$

On pose :

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_o) \quad \rightarrow \quad E = \underbrace{\frac{\hbar^2 k^2}{2m}}_{\frac{p^2}{2m}} + V_o$$

et on peut vérifier :

$$E = E_c + V_o$$

— Dans le cas où l'énergie $E < V_o$:

$$\varphi''(x) - \frac{2m}{\hbar^2}(V_o - E)\varphi(x) = 0$$

$\varphi(x)$ sera une solution en exponentielles réelles, qui ne doit pas diverger ($\varphi(x)$ de carré sommable). La grandeur :

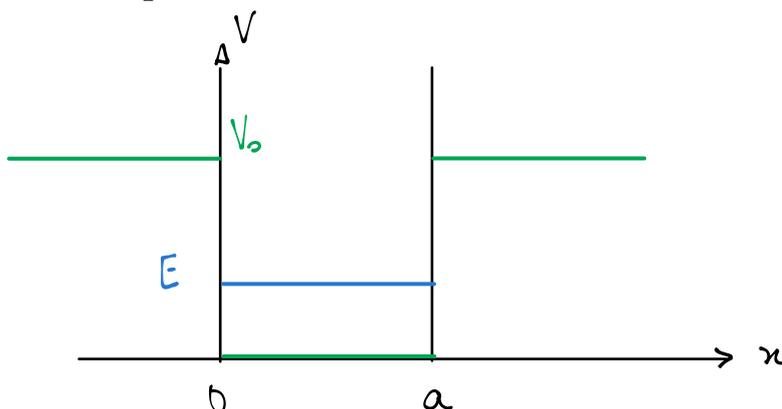
$$\delta = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_o - E)}}$$

donne alors un ordre de grandeur de la longueur caractéristique d'atténuation de φ .

Les conditions aux limites, aux abscisses où le potentiel présente des discontinuités, sont :

- Continuité de $\varphi(x)$ et $\varphi'(x)$ dans le cas d'une discontinuité finie de $V(x)$. (ψ/m doit être solution de l'équation de Schr.)
 - Annulation de $\varphi(x)$ lorsque $V(x)$ présente une discontinuité infinie.
- $\downarrow \delta \rightarrow 0$ pour $V_o \rightarrow \infty$

I. Puits de potentiel



1. Puits de profondeur infinie

On considère dans un premier temps que $V_0 \gg E$, on a alors $\delta \rightarrow 0$: la fonction d'onde est nulle en-dehors de la zone $[0, a]$ dans laquelle elle est solution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps.

$$\varphi''(x) + \frac{2mE}{\hbar^2} \varphi = 0$$

On pose $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$. Le problème est similaire à celui de la particule libre mais on a cette fois :

$$\varphi(0) = \varphi(a) = 0$$

On écrit la solution sous la forme :

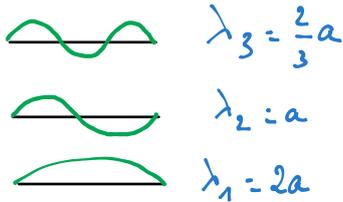
$$\varphi(x) = A \cos(kx) + B \sin(kx)$$

Les conditions aux limites imposent :

$$\begin{cases} A = 0 & \text{en } x=0 \\ A \cos(ka) + B \sin(ka) = 0 & \text{en } x=a \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} A = 0 \\ \sin(ka) = 0 \end{cases}$$

k et donc E ne peut donc prendre qu'un ensemble de valeurs discrètes (on dit qu'il y a **quantification** de l'énergie) :

$$k_n = n \frac{\pi}{a}$$

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


Remarques :

- On peut retrouver ce résultat sans faire de calcul en dessinant les modes propres ce qui permet de déduire les longueurs d'ondes $\lambda_n = 2a/n$. On écrit ensuite $k_n = 2\pi/\lambda_n$ et $E_n = p^2/2m$.
- Pour déterminer B_n et écrire la fonction d'onde φ_n , on utilise la condition de normalisation :

$$\int_0^a B_n^2 \sin^2 \left(n \frac{\pi x}{a} \right) dx = 1 \Rightarrow \frac{B_n^2 a}{2} = 1$$

On a alors :

$$\psi_n(x, t) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \left(n \frac{\pi x}{a} \right) \exp \left(-i \frac{\hbar \pi^2}{2ma^2} n^2 t \right)$$

Les fonctions d'onde solutions sont obtenues par combinaison linéaire des ψ_n (linéarité de l'équation de Schrödinger).

$$B_n^2 \int_0^a \frac{1 - \cos \left(\frac{2n\pi x}{a} \right)}{2} dx = B_n^2 \frac{a}{2} \quad \left(\cos(2u) = 1 - 2\sin^2 u \right)$$

2. Énergie de confinement

On appelle énergie de confinement l'énergie minimale d'une particule confinée dans un puits. On peut la calculer en prenant $n = 1$ dans la relation précédente, ou bien utiliser les inégalités d'Heisenberg pour obtenir un ordre de grandeur.

$$\Delta x \simeq \frac{a}{2} \Rightarrow \Delta k \simeq \frac{1}{a}$$

$$\left(\Delta x \cdot \Delta k \simeq \frac{1}{2} \right)$$

On a alors la quantité de mouvement :

$$\Delta p \simeq \frac{\hbar}{a}$$

Et l'énergie :

$$E = \frac{p^2}{2m} \Rightarrow E_{cf} \simeq \frac{\hbar^2}{2ma^2}$$

Elle diminue quand la largeur du puits a augmente (elle est nulle pour un puits de largeur infinie cf particule libre).

Ordres de grandeur :

— Électron dans un atome : $m = 10^{-30}$ kg, $a = 10^{-10}$ m

$$\frac{\hbar^2}{ma^2} \simeq \frac{10^{-68}}{10^{-30} \cdot 10^{-20}} = 10^{-18} \text{ J}$$

soit une dizaine d'eV (à comparer aux -13,6 eV pour l'état fondamental de l'atome d'hydrogène).

— Nucléon dans le noyau atomique : $m = 10^{-27}$ kg, $a = 10^{-15}$ m

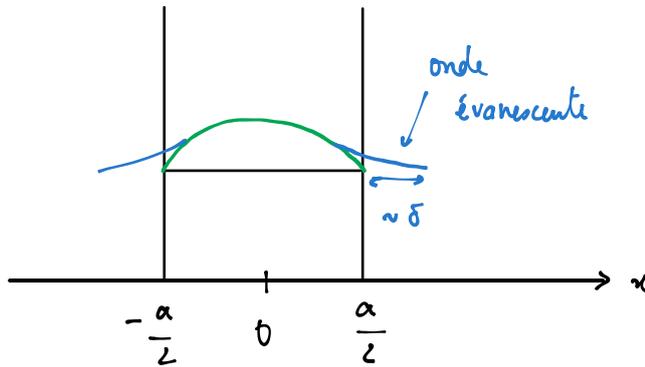
$$\frac{\hbar^2}{ma^2} \simeq \frac{10^{-68}}{10^{-27} \cdot 10^{-30}} = 10^{-11} \text{ J}$$

Cohérent avec le fait qu'il faut fournir une énergie beaucoup plus importante pour extraire un nucléon du noyau que pour arracher un électron d'un atome.

Rq : cette estimation de l'énergie de confinement est généralisable à un puits non rectangulaire (on estime Δx à partir de la forme du puits).

3. Puits de profondeur finie

Analyse qualitative :



— solution pour le puits infini

⇒ comme si Δx augmentant par rapport au puits infini

⇒ abaissement des niveaux d'énergie ($E \downarrow$)

Pour $x > a$:

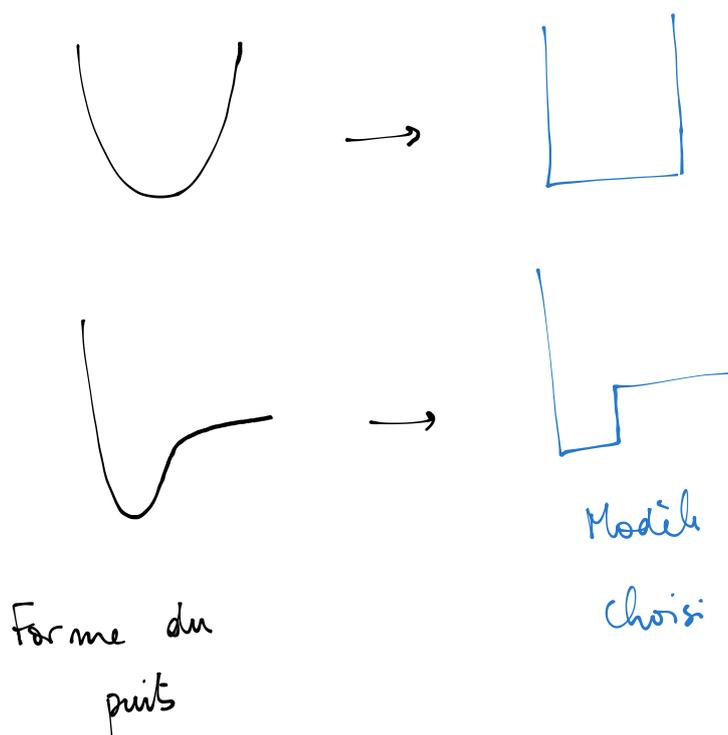
$$\varphi(x) = A \exp(-q_n x) ; \psi(x, t) = A \exp(-q_n x) \exp(-iE_n/\hbar t)$$

$$q_n = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E_n)}}{\hbar}$$

Conséquences :

- Quantification des solutions
- "Élargissement" par rapport au puits de profondeur infinie : l'énergie correspondant au mode n est plus basse que celle obtenue dans le cas du puits infini.

En pratique : on modélise un puits de forme quelconque par un puits rectangulaire. Si on a besoin de déterminer les valeurs des niveaux d'énergie E_n on se ramènera à un puits de profondeur infinie



II. Marche de potentiel

On considère un potentiel $V(x)$ nul pour $x < 0$ et égal à $V_0 > 0$ pour $x > 0$. Suivant les cas étudiés, on considèrera :

- Une particule non relativiste de masse m , d'énergie E arrivant de $-\infty$ décrite par une onde plane $\psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)}$ ou un paquet d'ondes.
- Un flux de particules de masse m et d'énergie E que l'on décrira par la donnée du vecteur densité de courant de probabilité :

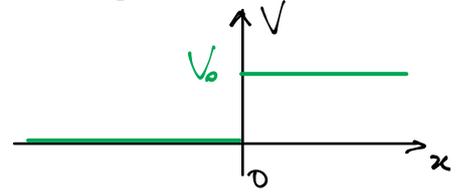
$$\vec{J} = |\psi|^2 \frac{\hbar \vec{k}}{m}$$

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

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \varphi''(x) = E\varphi(x) \quad \text{pour } x < 0$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \varphi''(x) + V_0 \varphi(x) = E\varphi(x) \quad \text{pour } x > 0$$

$\varphi(x)$ et $\varphi'(x)$ doivent être continues en $x = 0$.



1. Premier cas : $E > V_0$

On pose :

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

— Pour $x < 0$:

$$\varphi_1(x, t) = Ae^{k_1 x} + Be^{-k_1 x}$$

— Pour $x > 0$:

$$\varphi_2(x, t) = Ce^{k_2 x} + De^{-k_2 x}$$

Dans le cas où on étudie le phénomène correspondant à une particule arrivant de $-\infty$, la composante $De^{-k_2 x}$ associée à une particule se propageant depuis $+\infty$ vers les x décroissants n'a pas de sens physique. On prend donc : $D = 0$.

Les relations de continuité en $x = 0$ s'écrivent :

$$A + B = C$$

$$ik_1 A - ik_1 B = ik_2 C$$

On définit les coefficients de réflexion r et de transmission t en amplitude :

$$r = \frac{B}{A} ; t = \frac{C}{A}$$

$$\begin{cases} 1 + r = t \\ ik_1 - ik_1 r = ik_2 t \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} 1 + r = t \\ 1 - r = \frac{k_2}{k_1} t \end{cases} \text{ soit } \begin{cases} t = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} \\ r = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \end{cases}$$

La fonction d'onde du côté $x < 0$ est donc la superposition de l'onde incidente et de l'onde réfléchie :

$$\psi(x, t) = A (e^{i(k_1 x - \omega_1 t)} + r e^{-i(k_1 x + \omega_1 t)})$$

La densité de probabilité fait ainsi intervenir un terme d'interférence (voir exercice 4 TD1) :

$$|\psi|^2 = |A|^2 (1 + r^2 + 2r \cos(2k_1 x))$$

$$|\Psi|^2 = |A|^2 \left(1 + r^2 + \underbrace{r e^{2ik_1 x} + r e^{-2ik_1 x}}_{2r \cos(2k_1 x) \text{ terme d'interférence}} \right)$$

2. Deuxième cas $E < V_o$

Dans le cas où $E < V_o$, on pose :

$$q = \frac{\sqrt{2m(V_o - E)}}{\hbar}$$

— Pour $x < 0$:

$$\varphi_1(x, t) = A e^{k_1 x} + B e^{-k_1 x}$$

— Pour $x > 0$:

$$\varphi_2(x, t) = C e^{-qx} + D e^{qx}$$

La solution $D e^{qx}$ valable dans la zone $x > 0$ n'est pas de carré sommable : on prend $D = 0$. La fonction d'onde dans le domaine $x > 0$ est appelée **onde évanescente** :

$$\psi_2(x, t) = C e^{-qx} e^{-iE/\hbar t}$$

Elle ne se propage pas et s'atténue sur une longueur : $\delta \simeq 1/q$.

$$\delta \simeq \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_o - E)}}$$

δ tend vers 0 lorsque $\hbar \rightarrow 0$, ou pour $V_o \gg E$ (ce qui correspond à la limite classique).

3. Retour au vecteur densité de courant de probabilité

On peut également introduire des coefficients de réflexion et de transmission en utilisant les vecteurs densités de probabilité : \vec{J}_i pour l'onde incidente, \vec{J}_r pour l'onde réfléchie et \vec{J}_t pour l'onde transmise, avec à chaque fois :

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

On a ainsi, pour le cas $E > V_o$:

$$R = \frac{J_r}{J_i} = r^2 = \frac{(k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2}$$

$$T = \frac{J_t}{J_i} = t^2 \frac{k_2}{k_1} = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}$$

Le même calcul pour le cas $E < V_o$ conduit à :

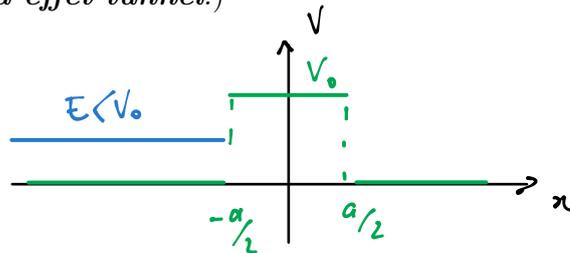
$$R = 1 ; T = 0$$

On a dans tous les cas $R + T = 1$.

III. Effet tunnel

Si la zone dans laquelle $V(x) = V_0$ est peu large par rapport à δ , il existe une probabilité non nulle que la particule franchisse la barrière de potentiel (comme si il y avait un tunnel ...). On peut donner une interprétation en utilisant les inégalités d'Heisenberg. L'énergie E est connue avec une indétermination ΔE , on peut alors se trouver avec $E + \Delta E > V_0$ ce qui permet à la particule de franchir l'obstacle.

*Encore une fois : soit on a une unique particule qui rencontre plusieurs fois la barrière (comme dans l'étude de la **radioactivité** α) et on s'intéresse à sa probabilité de franchir la barrière, soit on considère un flux de particules et on cherche quelle proportion franchit la barrière (comme dans l'étude du **microscope à effet tunnel**.)*



1. Description du système

On considère une barrière de hauteur V_0 dans une zone comprise entre $x = -a/2$ et $x = a/2$. On pose à nouveau :

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

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

On écrit les fonctions d'ondes dans les trois zones de l'espace :

— Pour $x < -a/2$:

$$\varphi_1(x) = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}$$

— Pour $-a/2 < x < a/2$ (onde évanescente) :

$$\varphi_2(x) = A_2 \cosh(qx) + B_2 \sinh(qx)$$

— Pour $x > a/2$:

$$\varphi_3(x) = A_3 e^{ikx}$$

2. Probabilité de transmission

On écrit les vecteurs densités de courant de probabilité :

$$\vec{J}_i = |A_1|^2 \frac{\hbar k}{m} \vec{u}_x$$

$$\vec{J}_t = |A_3|^2 \frac{\hbar k}{m} \vec{u}_x$$

Le coefficient de transmission à travers la barrière :

$$T = \frac{J_t}{J_i}$$

L'écriture des conditions aux limites permet d'établir l'expression de T :

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

3. Approximation de la barrière épaisse

Dans le cas où $a \gg \delta$, l'expression de T se simplifie en :

$$T \simeq 16 \frac{E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0}\right) e^{-2qa}$$

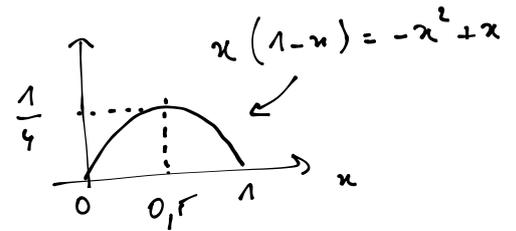
On peut essayer de retenir :

$$T = \alpha e^{-2qa}$$

avec α compris entre 0 et 4.

$$\left(\sinh(qa)\right)^2 \simeq \frac{e^{2qa}}{4} \quad \text{pour } qa \gg 1 \quad \text{et } e^{2qa} \gg 1$$

$$\rightarrow T \simeq \frac{1}{\frac{V_0^2}{4E(V_0-E)} \frac{e^{2qa}}{4}} = 16 \frac{E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0}\right) e^{-2qa}$$



$$\Rightarrow 16 \frac{E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0}\right) \in [0, 4]$$

Cas du puits de profondeur finie : On cherche à obtenir une représentation de la fonction d'onde $\varphi(x)$ associée au mode fondamental dans le cas d'un puits tel que $a = 1.10^{-9}m$, $V_o = 10 * E_{1\infty}$ ($E_{1\infty}$ désignant l'énergie du mode fondamental dans le cas du puits infini).

1. Donner l'expression de $E_{1\infty}$.
2. Pour la modélisation, on souhaite prendre $a = 1$ et $\frac{\hbar^2}{2m} = 1$, comment cela va-t-il se traduire sur la lecture de nos résultats? Exprimer V_o avec ce choix.
3. Justifier que $\varphi(x)$ est une fonction paire. On écrit :

$$\varphi(x) = A \cos(kx) \text{ pour } x \in [0, a]$$

$$\varphi(x) = B \exp(-qx) \text{ pour } x \geq a$$

Que peut-on dire de $k^2 + q^2$?

4. Montrer que :

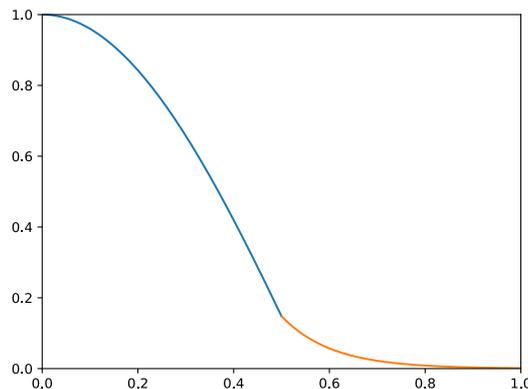
$$\frac{k}{2} \tan\left(\frac{ka}{2}\right) = q$$

5. Représenter graphiquement les deux équations liant k et q . Proposer une estimation de la plus petite valeur de k solution de ce système d'équations. Déterminer k par dichotomie.
6. On pose $k_1 = \pi - \epsilon$. On a alors :

$$\varphi_1(x) = \cos((\pi - \epsilon)x) \text{ pour } -a/2 \leq x \leq a/2$$

$$\varphi_2(x) = A \exp(-qx) \text{ pour } a/2 \leq x$$

Montrer que $A = e^{q/2} \sin(\epsilon/2)$.



$$3) \quad \underline{q^2 + k^2 = \frac{2m(V_o - E)}{\hbar^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{2mV_o}{\hbar^2}}$$

$$4) \quad \begin{cases} A \cos\left(\frac{ka}{2}\right) = B e^{-qa/2} \\ -k A \sin\left(\frac{ka}{2}\right) = -q B e^{-qa/2} \end{cases}$$

$$\Rightarrow \underline{k \tan\left(\frac{ka}{2}\right) = q}$$

