

PO5 : Approche ondulatoire de la mécanique quantique

Table des matières

1	Notion de fonction d'onde	1
2	Équation de Schrödinger	4
3	Dynamique d'une particule libre	5
4	Particule confinée dans un puits de potentiel infini	8
5	Particule dans un puits de potentiel fini	12
6	Barrière de potentiel et effet tunnel	18

1 Notion de fonction d'onde

1.1 Dualité onde-particule

def : Si des effets quantiques entrent en jeu, un système physique (lumière, matière, etc) n'est jamais complètement modélisé par une particule, ni par une onde. Cet objet est alors désigné par le terme de **quanton**.

Tout système peut présenter certaines propriétés associées en général à des particules (localisation précise, vitesse, etc) et d'autres propriétés associées à des ondes (phase, interférence, non-localité, etc). Par exemple, la lumière se décrit comme une onde permettant interférences ou diffraction (cf chapitres *Optique*) mais aussi comme un ensemble de particules appelées photons (cf effet photoélectrique, peut-être vu en PCSI). De même un atome peut être vu comme un objet matériel mais peut aussi produire des interférences, cf figure partie 1.6!!

1.2 Définition de la fonction d'onde

Programme de CPGE : problème unidimensionnel (1D) cartésien donc une seule variable d'espace, notée x .

def : On admet qu'un quanton 1D est représenté par une grandeur appelée **fonction d'onde** ou **amplitude de probabilité**, notée $\psi(x, t)$, d'arguments (position x , temps t), et à valeur complexe. Cette fonction contient toute l'information accessible sur le système.

La **probabilité de présence** $dP(x, t)$ d'une particule dans le domaine élémentaire 1D $[x, x + dx]$ à l'instant t vaut :

$$dP(x, t) = |\psi(x, t)|^2 dx$$

La grandeur $|\psi(x, t)|^2 = \frac{dP}{dx}$ est appelée **densité de probabilité de présence** en x à t .

formule utile : Soit $z \in \mathbb{C}$. Notons $\bar{z}$ le conjugué de z . Alors $|z|^2 = z \cdot \bar{z}$.

rq1 : Comme une probabilité est sans unité, à 1D : $[P] = 1 = [\psi]^2 [x]$ donne $[\psi] = [x]^{-1/2} = L^{-1/2}$, donc d'unité $m^{-1/2}$.

rq2 : attention, comme ψ est complexe, le module carré $|\psi|^2 = \psi \bar{\psi}$ est en général différent du carré $(\psi)^2$.

Ainsi, la probabilité de présence dans un domaine $L = [x_1, x_2]$ vaut :

$$P(L) = \int_{x_1}^{x_2} dP(x, t) = \int_{x_1}^{x_2} |\psi(x, t)|^2 dx$$

rq3 : L'unité de la fonction d'onde dépend de la dimension de l'espace accessible (1D, 2D ou 3D).

À 3D, ces relations deviennent $dP_{3D}(\vec{r}, t) = |\psi_{3D}(\vec{r}, t)|^2 dV$

et $P(V) = \int_V dP_{3D}(\vec{r}, t) = \int_V |\psi_{3D}(\vec{r}, t)|^2 dV$.

Donc $[P] = 1 = [\psi_{3D}]^2 [V]$ donne $[\psi_{3D}] = [V]^{-1/2} = L^{-3/2}$.

1.3 Normalisation de la fonction d'onde

prop : Soit I l'espace accessible à une particule. La probabilité de trouver cette particule dans I est alors égale à 1.

Donc $\forall t \quad \int_I |\psi(x, t)|^2 dx = 1$. On appelle cette relation « **condition de normalisation** »¹ de la fonction d'onde.

exo de cours : On verra plus tard que la fonction d'onde de l'état fondamental d'une particule dans un puits infini entre $x = 0$ et $x = L$ vaut : $\psi(x, t) = A \cdot \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \cdot \exp\left(-i\frac{Et}{\hbar}\right)$ sur $x \in [0, L]$ et $\psi(x, t) = 0$ sinon. Avec $n \in \mathbb{N}^*$ et où i est le nombre imaginaire parfois noté j .

Par normalisation de la fonction d'onde, déterminer que $|A| = \sqrt{2/L}$ donc $A = \sqrt{2/L} \cdot e^{i\theta}$ avec θ quelconque. On donne $\sin^2(\alpha) = \frac{1 - \cos(2\alpha)}{2}$.

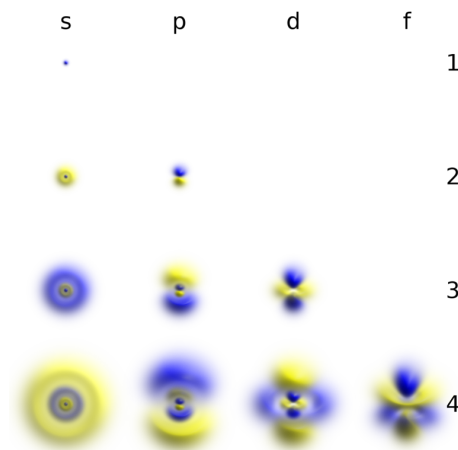
1.4 Exemple des orbitales atomiques

Dans un atome d'hydrogène, un électron est soumis à l'interaction électrique du noyau. Si on résout l'équation de Schrödinger (calcul hors-programme), on obtient les fonctions d'onde des orbitales atomiques.

représentations graphiques : Pour une orbitale atomique², on peut représenter par exemple la surface à l'intérieur de laquelle la probabilité de trouver l'électron est de 95%.

rq : On appelle « **surface nodale** » une surface où la fonction d'onde est nulle (*nodale* vient du mot *nœud*). On observe que plus les nombres quantiques sont élevés, plus la fonction d'onde présente de plans nodaux.

→ Ce résultat sera démontré dans le cas d'une particule dans un puits infini. Mais vous le connaissez déjà dans le cas des ondes stationnaires dans une corde : le nombre de nœud augmente avec le rang n des harmoniques !

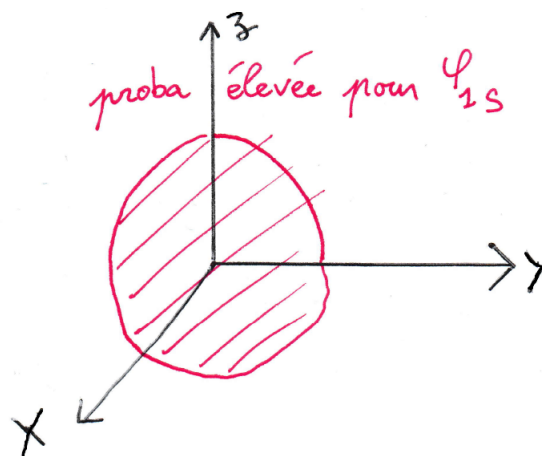
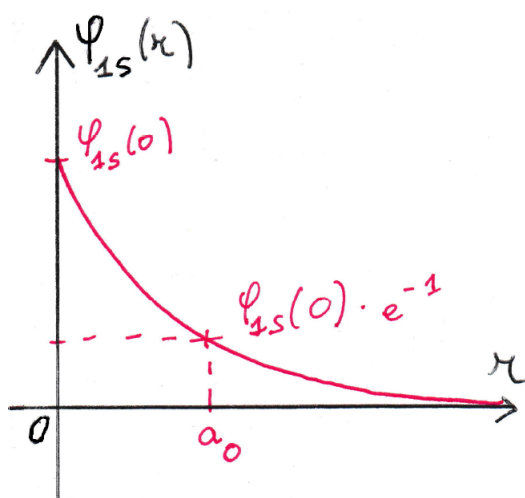


• Exemple 1 : La fonction d'onde d'un électron d'une orbitale 1s est, en coordonnées sphériques (r, θ, φ) :

$$\varphi_{1s}(\vec{r}) = \varphi_{1s}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right)$$

Avec le rayon de Bohr $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} = 0,53 \cdot 10^{-10}$ m. On remarque une symétrie sphérique : invariance par rotation selon les angles θ et φ .

schémas : Tracer le graphe de $\varphi(r)$. Dessiner l'allure de la zone de probabilité de présence forte de l'électron.



1. CE : Normaliser une fonction d'onde.

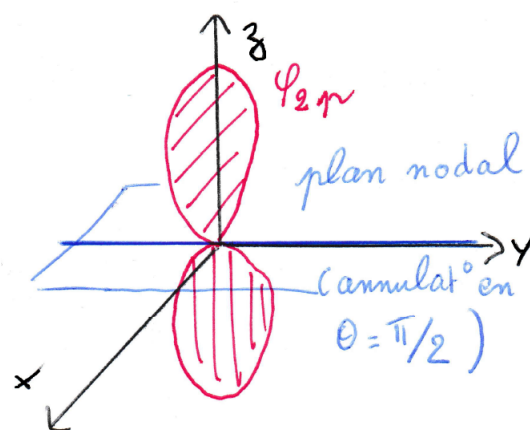
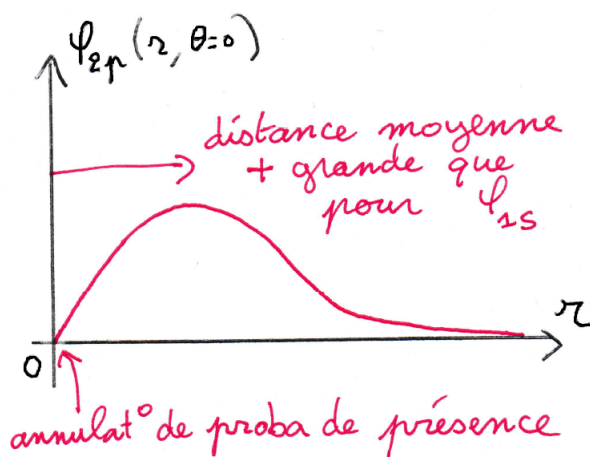
2. CE : Relier qualitativement la fonction d'onde à la notion d'orbitale en chimie.

exo facultatif : Condition de normalisation à 3D : $\int_0^\infty |\varphi(r)|^2 \cdot 4\pi r^2 dr = 1$ à vérifier pour les meilleurs (double intégration par partie).

- Exemple 2 : orbitale 2p. On remarque une annulation en $\theta = \pi/2$:

$$\varphi_{2p}(\vec{r}) = \varphi_{2p}(r, \theta) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos(\theta) \frac{1}{2\sqrt{6}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{5/2} \cdot r \cdot \exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right)$$

schémas : Tracer le graphe de $\varphi(r, \theta)$ en fonction de r à $\theta \neq \pi/2$. Dessiner l'allure de la zone de probabilité de présence forte de l'électron. Remarquer l'existence d'un plan nodal en $\theta = \pi/2$.



rq : La condition de normalisation à 3D est plus difficile à calculer...

1.5 Principe de superposition

Si ψ_1 et ψ_2 sont deux solutions de l'équation de Schrödinger (qui est linéaire), alors $\beta_1\psi_1 + \beta_2\psi_2$ est encore une solution. $\leadsto$ **On peut ajouter des fonctions d'onde, donc interférences possibles !**

rq : les coefficients β_i sont contraints par la normalisation de la fonction d'onde.

1.6 Principe de superposition et interférence

- Considérons une source d'atomes émettant ces atomes un par un. Ils sont envoyés vers un dispositif de fentes d'Young derrière lequel un écran détecte l'arrivée des atomes³.

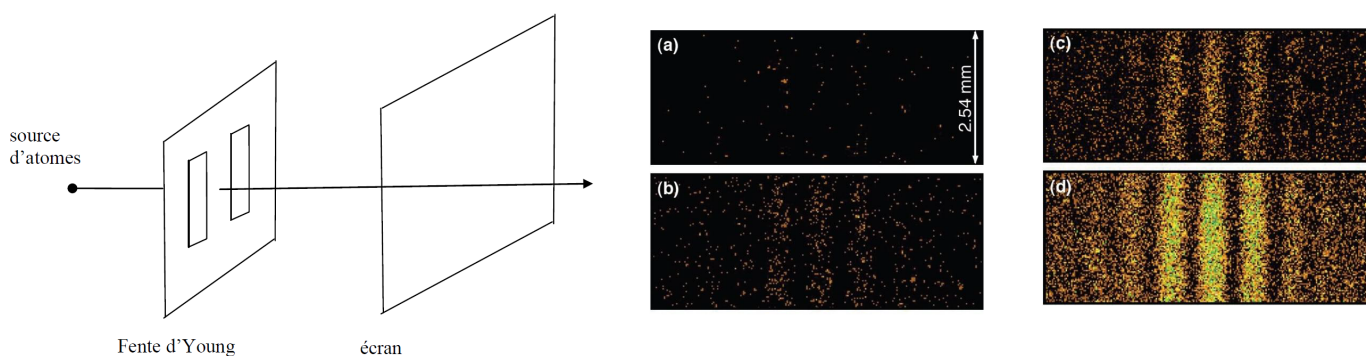


FIGURE 1 – Clichés d'une expérience de type *fentes d'Young* effectuée dans le Laboratoire de Photonique Quantique et Moléculaire de l'ENS Cachan.

- Soit un point M de l'écran E repéré par son vecteur position $\vec{r}$: $M(\vec{r}) \in E$.
- Notons $\psi_1 = \psi_{01} \cdot \exp(j\varphi_1)$ la fonction d'onde d'une particule passée par la fente 1 en un point $\vec{r}$ de l'écran. On prendra $\psi_{01} \in \mathbb{R}^+$ pour simplifier. Si la fente 2 est fermée, alors l'intensité lumineuse I_1 en M est proportionnelle à la densité de probabilité de présence d'une particule : $I_1 = \alpha |\psi_1|^2$.

3. CE : Relier la superposition de fonctions d'ondes à la description d'une expérience d'interférences entre particules.

- De même, on note $\psi_2 = \psi_{02} \cdot \exp(j\varphi_2)$ la fonction d'onde d'une particule en M passée par la fente 2. Alors $|\psi_2|^2$ représente la densité de probabilité de présence en M d'une particule passée par la fente 2. On prendra $\psi_{02} \in \mathbb{R}^+$ pour simplifier. Si la fente 1 est fermée, alors l'intensité lumineuse I_2 en M est proportionnelle à la densité de probabilité de présence d'une particule : $I_2 = \alpha|\psi_2|^2$.

exo : En utilisant le théorème de superposition, montrer que le calcul de la densité de probabilité en M fait intervenir un terme d'interférence, analogue à la formule de Fresnel en optique. **indications** :

1. On considère le point M dans le cas où les deux fentes sont ouvertes. Appliquer le théorème de superposition pour exprimer la fonction d'onde totale ψ en fonction de ψ_1 et ψ_2 (on n'écrira pas ici le facteur de normalisation).
2. Montrer alors que la densité de probabilité de présence en M ($|\psi|^2 = \psi \cdot \bar{\psi}$) en fonction de ψ_1 et ψ_2 est : $|\psi|^2 = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + \psi_1\bar{\psi}_2 + \bar{\psi}_1\psi_2$.
3. L'intensité lumineuse totale $I = \alpha|\psi|^2$ est-elle la somme des intensités I_1 et I_2 ? Interpréter le terme supplémentaire en montrant qu'il est proportionnel à $\cos(\varphi_2 - \varphi_1)$. Cette formule vous rappelle-t-elle quelque chose ?

2 Équation de Schrödinger

2.1 Postulat et cadre du programme

★ Problème unidimensionnel cartésien. Donc la fonction d'onde $\psi(\vec{r}, t)$ s'écrit $\psi(x, t)$.

★ Énergie potentielle constante (indépendante du temps), uniforme par morceau (donc peut dépendre de x) : $V(x)$.

Exemple : énergie potentielle électrique subie par un électron dans le champ électrique produit par un noyau.

rq : En mécanique quantique, par abus de langage, l'énergie potentielle est simplement appelée « **potentiel** », et noté V (comme pour le potentiel électrique qui n'a pas la même dimension !).

postulat : Considérons une particule non relativiste de masse $m \neq 0$. Son évolution est décrite par l'équation de Schrödinger :

$$\underbrace{i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}}_{\text{énergie mécanique}} = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}}_{\text{énergie cinétique}} + \underbrace{V \cdot \psi}_{\text{énergie potentielle}} \quad (1)$$

D'après le programme, cette équation doit être fournie par un énoncé, mais il faut savoir l'interpréter et l'utiliser.

où $\hbar = \frac{h}{2\pi} \simeq 1,05 \cdot 10^{-34}$ J.s est la **constante de Planck réduite**.

rq1 : C'est une équation aux dérivées partielles (EDP) linéaire, donc le **théorème de superposition** s'applique.

rq2 : L'équation de Schrödinger est un postulat fondamental de la mécanique quantique, de rôle similaire au théorème de l'énergie mécanique (ou au PFD) en mécanique classique.

2.2 Interprétation des termes par une onde plane

ATTENTION : En mécanique quantique, les ondes planes progressives suivant $\vec{e}_x$ sont en général notées $\exp(i(kx - \omega t))$ (signe opposé de l'habitude en physique des ondes) !

exo : En utilisant une solution de type onde plane $\psi(x, t) = C \cdot \exp(i(kx - \omega t))$, interpréter les différents termes de l'équation de Schrödinger. On s'appuiera sur la relation de Planck-Einstein et la relation de de Broglie. **indications** :

1. On rappelle la **relation de Planck-Einstein** $[E = h\nu = \hbar\omega]$. Démontrer que le premier terme vaut $E \cdot \psi$.
2. On rappelle la **relation de de Broglie** (prononcer « de Breuille ») qui relie la quantité de mouvement p à la longueur d'onde $[p = h/\lambda]$. Démontrer que $p = \hbar k$.
3. Exprimer l'énergie cinétique d'une particule massive non relativiste $E_c = mv^2/2$ en fonction de p . En déduire que le deuxième terme vaut $E_c \cdot \psi$.
4. Conclure que l'équation de Schrödinger devient dans ce cas : $E = E_c + V$ et reconnaître la définition de l'énergie mécanique.

2.3 État stationnaire en mécanique quantique

def : En mécanique quantique, un **état stationnaire** est caractérisé par une fonction d'onde factorisée sous la forme :

$$\psi(x, t) = \varphi(x) \cdot f(t) \quad (2)$$

où les fonctions φ et f sont a priori à **valeurs complexes**.

rq : ATTENTION⁴, ce n'est pas exactement la même définition qu'une onde stationnaire au sens usuel de la physique des ondes où les fonctions factorisées doivent être à valeurs réelles. Par exemple, $s(x, t) = \sin(2\pi x/\lambda) \cdot \sin(\omega t)$ est une onde stationnaire, mais pas $s(x, t) = \cos(\omega t - kx)$ qui se factorise en notation complexe en $\underline{s} = \exp(j\omega t) \cdot \exp(-jkx)$.

prop : Un état stationnaire en mécanique quantique peut s'écrire : $\psi(x, t) = \varphi(x) \cdot \exp(i\alpha(t))$ avec $\alpha(t) \in \mathbb{R}$.

démo : Utiliser la condition de normalisation de $\psi(x, t) = \varphi(x) \cdot f(t)$. indications :

1. Écrire la condition de normalisation d'un état stationnaire $\psi(x, t) = \varphi(x) \cdot f(t)$. En déduire que $|f(t)|^2$ est égal à une constante positive A indépendante de x et de t .
2. En déduire que $f(t) = \sqrt{A} \cdot \exp(i\alpha(t))$ avec $\alpha(t) \in \mathbb{R}$.

2.4 Équation de Schrödinger indépendante du temps

prop : La partie spatiale φ d'un état stationnaire est décrit par l'équation de Schrödinger indépendante du temps :

$$E \cdot \varphi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + V(x) \cdot \varphi(x) \quad (3)$$

où E est l'énergie de la particule dans l'état φ , constante pour un état stationnaire.

prop : Un état stationnaire en mécanique quantique peut s'écrire :

$$\psi(x, t) = \varphi(x) \cdot \exp\left(-i\frac{Et}{\hbar}\right) = \varphi(x) \cdot \exp(-i\omega t) \quad (4)$$

rq : Ce n'est plus une équation aux dérivées partielles mais c'est une équation différentielle, moins difficile à résoudre.

rq : Un état stationnaire correspond donc à un état d'énergie fixée⁵.

démo : Injecter $\psi(x, t) = \varphi(x) \cdot \exp(i\alpha(t))$ dans l'équation de Schrödinger. indications :

1. Injecter $\psi(x, t) = \varphi(x) \cdot \exp(i\alpha(t))$ dans l'équation de Schrödinger et en déduire que l'énergie E vaut $E = -\hbar \frac{d\alpha}{dt}$ et ne dépend pas du temps.
2. En déduire qu'à une constant près, $\alpha(t) = -Et/\hbar$.

2.5 Partie spatiale de la fonction d'onde d'une onde plane en état stationnaire

prop : La partie spatiale de la fonction d'onde d'une onde plane est de la forme $\varphi(x) = A \cdot \exp(ikx)$ pour une propagation suivant $+\vec{e}_x$ et de la forme $\varphi(x) = A \cdot \exp(-ikx)$ pour une propagation suivant $-\vec{e}_x$.

explication : Onde plane progressive suivant $+\vec{e}_x$: $\psi(x, t) = A \cdot \exp(i(kx - \omega t)) = \underbrace{A \cdot \exp(ikx)}_{\varphi(x)} \cdot \exp(-i\omega t)$.

3 Dynamique d'une particule libre

3.1 Équation de Schrödinger pour une particule libre

def : On dit qu'une particule est « libre » si l'énergie potentielle est constante et uniforme. Comme elle est définie à une constante près, on peut choisir $V(x) = 0$.

prop : L'équation de Schrödinger pour une particule libre est : $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}$.

4. CE : Distinguer l'onde associée à un état stationnaire en mécanique quantique d'une onde stationnaire au sens usuel de la physique des ondes.

5. CE : Associer les états stationnaires aux états d'énergie déterminée. Établir et utiliser la forme $\psi(x, t) = \varphi(x) \exp(-iEt/\hbar)$ pour la fonction d'onde d'un état stationnaire et l'associer à la relation de Planck-Einstein.

prop : Un état stationnaire est de la forme $\psi(x, t) = \varphi(x) \cdot \exp(-i\omega t) = \varphi(x) \cdot \exp(-iEt/\hbar)$. L'équation de Schrödinger indépendante du temps pour une particule libre stationnaire est : $\hbar\omega\varphi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi}{dx^2}$.

3.2 Relation de dispersion d'une particule libre

prop : La **relation de dispersion** d'une particule libre s'écrit :

$$\boxed{\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}} \Leftrightarrow \boxed{k = \pm \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}} \quad (5)$$

interprétation : énergie mécanique = énergie cinétique (car énergie potentielle nulle).

| démo de cours : Pour trouver la relation de dispersion, injecter une onde plane $\psi(x, t) = C \cdot \exp(i(kx - \omega t))$ dans l'équation de Schrödinger pour une particule libre.

prop : La vitesse de phase d'une particule libre $v_\varphi = \omega/k$:

$$v_\varphi = \frac{\hbar k}{2m} = \frac{1}{2} \frac{p}{m} \quad (6)$$

interprétation : La propagation d'une particule libre quantique est **dispersive** !

prop : La vitesse de groupe d'une particule libre $v_g = d\omega/dk$:

$$\boxed{v_g = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m}} \quad (7)$$

interprétation : La vitesse de groupe est égale à p/m . En physique classique, $p/m = v$ est la vitesse d'ensemble d'un système. **Ainsi, la vitesse de groupe⁶ s'assimile à la vitesse d'ensemble de la particule quantique.**

| démo de cours : Déterminer v_φ et v_g à partir de la relation de dispersion.

3.3 États stationnaires d'une particule libre

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

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} + \underbrace{\frac{2m\omega}{\hbar}}_{k^2} \varphi = 0 \quad (8)$$

On remarque que $\frac{2m\omega}{\hbar} = k^2 > 0$. On reconnaît une équation de type oscillateur harmonique dont les solutions sont de la forme $\varphi(x) = A \cdot \cos(kx) + B \sin(kx)$ (solution à privilégier dans le cas d'une particule confinée $\rightarrow$ condition aux limites nulle) ou bien de la forme $\varphi(x) = A \exp(ikx) + B \exp(-ikx)$ (solution à privilégier pour une particule non confinée qui se propage).

prop : **Les solutions stationnaires⁷ d'une particule libre d'énergie $E = \hbar\omega$ s'écrivent comme combinaison d'ondes planes :**

$$\varphi(x) = A \exp(ikx) + B \exp(-ikx) \quad (9)$$

rq : Pour une particule libre, aucune condition de quantification ne s'applique à k ou E , contrairement au cas d'une particule dans un puits qui sera étudié ultérieurement.

prop : Une onde plane ne peut pas être normalisée. Elle ne peut donc pas représenter directement l'état d'une particule.

démo : Si $\psi(x, t) = A \cdot \exp(i(kx - \omega t))$, la condition de normalisation donne $\int_{-\infty}^{+\infty} |A|^2 dx = 1$, donc $|A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx = 1$. **Impossible car l'intégrale diverge en intégrant sur tout l'espace !**

6. CE : Identifier la vitesse d'une particule libre et la vitesse du paquet d'ondes la décrivant.

7. CE : Utiliser l'équation de Schrödinger pour déterminer la partie spatiale des fonctions d'onde stationnaires d'une particule libre.

3.4 Paquet d'onde associé à une particule libre

Un système physique est mieux décrit comme une superposition continue d'ondes planes. Sa fonction d'onde s'écrit :

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} A(k) \cdot \exp(i(kx - \omega t)) dk \quad (10)$$

où $A(k)$ est l'amplitude de la composante de vecteur d'onde k . Le graphe de $A(k)$ représente le **spectre** en k de la particule.

rappel : Plus on somme des ondes de pulsations différentes (plus le spectre est large), plus le paquet d'onde est de courte durée : $\tau \cdot \Delta\nu \simeq 1$.

analogie : Plus on somme des ondes de k différents, plus le paquet d'onde est d'étalement faible.

prop admise : L'**inégalité de Heisenberg spatiale**⁸ sur la position x s'écrit :

$$\boxed{\Delta x \cdot \Delta k \geq \frac{1}{2}} \quad \Leftrightarrow \quad \boxed{\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}} \quad (11)$$

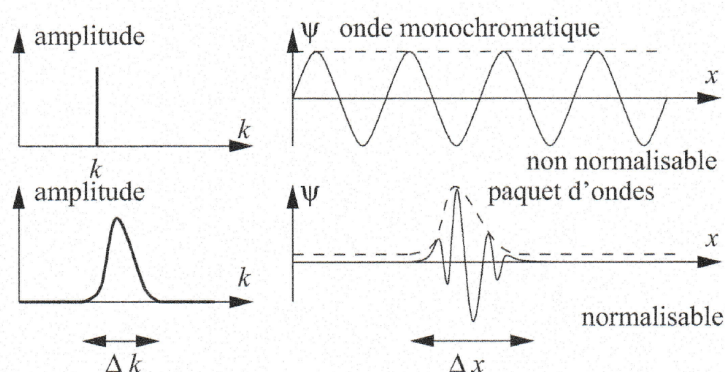
rq : Cette inégalité est souvent appelée « principe d'incertitude d'Heisenberg », à tort pour deux raisons :

★ Ce n'est pas un *principe* car c'est une propriété de la transformée de Fourier qui se *démontre*.

★ Δx et Δk ne sont pas des *incertitudes* (où un meilleur appareil donnerait une mesure plus précise), mais une *indétermination* intrinsèque à la particule qui a sa fonction d'onde étalée sur un intervalle.

→ C'est pourquoi on l'appelle parfois « **relation d'indétermination** ».

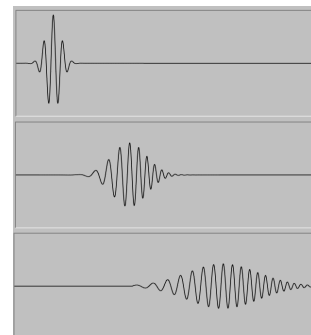
conséquence 1 : **Il est impossible de préparer une particule dans un état où sa position et sa quantité de mouvement sont simultanément arbitrairement bien définies.** En effet, avoir par exemple Δx petit fixé empêche d'avoir Δk aussi petit qu'on veut.



conséquence 2 : **Le paquet d'onde s'étale dans le temps.** En effet, comme $\Delta k \neq 0$, les composantes n'ont pas toutes la même vitesse (dispersion), donc le paquet d'onde s'étale au cours du temps. Cf figure qui montre l'étalement du paquet d'onde d'une particule libre au cours de la propagation. Issu de l'animation <http://ressources.univ-lemans.fr/AccesLibre/UM/Pedago/physique/02/divers/paquet.html> avec $\omega(k) = A \cdot k^2$.

description de la propagation : On a déjà démontré $v_\phi = \hbar k / (2m)$ et $v_g = 2\phi = p/m$.

rappel : Pour un paquet d'onde peu étalé, v_g est la vitesse de l'enveloppe du paquet d'onde.



3.5 Courant de probabilité associé à une particule libre

prop admise : Le vecteur densité de courant de probabilité d'une particule de fonction d'onde $\psi(x, t)$ s'écrit :

$$\vec{j}(x, t) = |\psi(x, t)|^2 \cdot \frac{\hbar \vec{k}}{m} \quad (12)$$

8. CE : Exploiter l'inégalité de Heisenberg pour relier l'étendue spatiale et l'étendue spectrale du paquet d'ondes d'une particule libre.

interprétation : On a vu en thermodynamique que le vecteur densité de courant de particule s'écrit : $\vec{j} = n \cdot \vec{v}$ avec n la densité volumique de particules. Ici on a aussi⁹ :

$$\vec{j}(x, t) = (\text{densité}) \cdot (\text{vitesse}) = |\psi(x, t)|^2 \cdot \vec{v}_g \quad (13)$$

4 Particule confinée dans un puits de potentiel infini

4.1 Exemples de confinement d'électrons

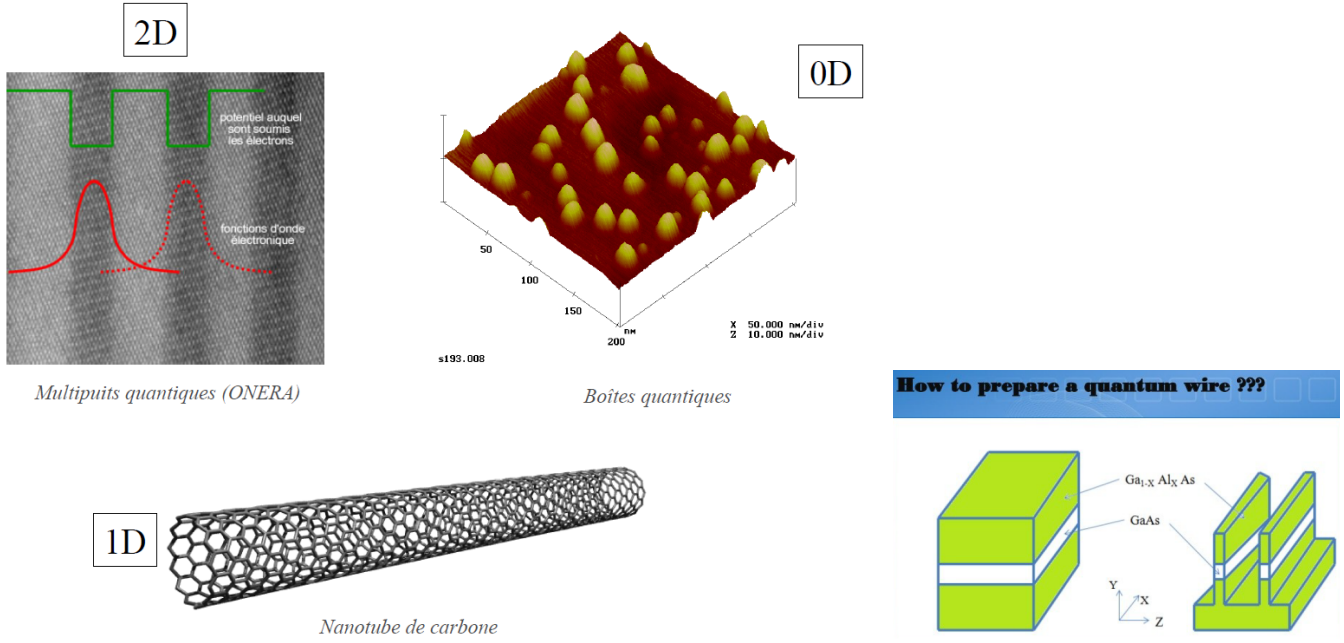


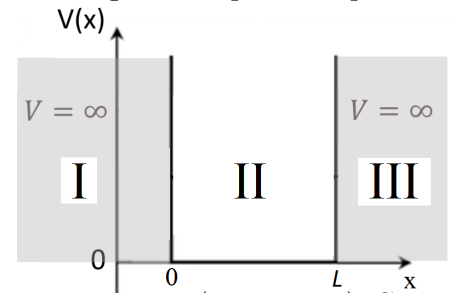
FIGURE 2 – On sait produire des objets dont on maîtrise la dimensionnalité du confinement.

4.2 Modèle du puits infini

Si une particule est confinée dans un puits de potentiel profond par rapport à l'énergie cinétique de la particule, on peut alors modéliser ce puits comme étant infini.

- potentiel : On considérera un puits de longueur L . Le potentiel est uniforme par morceaux :

$$\begin{cases} V(x) = +\infty & \forall x \in]-\infty, 0[\\ V(x) = 0 & \forall x \in [0, L] \\ V(x) = +\infty & \forall x \in]L, +\infty[\end{cases} \quad (14)$$



- conditions aux limites (admisses) : On admet¹⁰ que la fonction d'onde $\psi(x, t)$ est continue en x (pour tout t). Comme la particule doit avoir une probabilité nulle d'être en dehors du puits, on a $\psi(x < 0, t) = 0$ et $\psi(x > L, t) = 0$.

Ainsi, par continuité de la fonction d'onde, les **conditions aux limites du puits infini** donnent :

$$\psi(0, t) = 0 \quad \text{et} \quad \psi(L, t) = 0 \quad (15)$$

4.3 Recherche des fonctions d'ondes

résultat : Les états stationnaires d'une particule dans un puits infini dans $[0, L]$ sont :

$$\varphi_n(x) = A \cdot \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \quad \text{avec } n \in \mathbb{N}^* \quad (16)$$

9. CE : Utiliser l'expression admise du courant de probabilité associé à une particule libre et l'interpréter comme un produit (densité) $\times$ (vitesse).

10. CE : Utiliser les conditions aux limites admises dans un puits infini : continuité de φ .

démo : Résoudre l'équation de Schrödinger¹¹ indépendante du temps : $E\varphi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi}{dx^2} + V\varphi$.

indications : Le début de la démarche est similaire au cas d'une particule libre, cf partie 3.1.

1. Reformuler l'équation de Schrödinger sous la forme $\frac{d^2\varphi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\varphi = 0$.
2. Cas $E < 0$, l'équation de Schrödinger devient $\frac{d^2\varphi}{dx^2} - K^2\varphi = 0$ avec $K = \sqrt{-2mE/\hbar^2}$. Écrire la solution générale. Utiliser les conditions aux limites pour montrer que dans ce cas la fonction d'onde est nulle. En conclure qu'une particule dans ce puits ne peut pas avoir $E < 0$.
3. Cas $E > 0$, l'équation de Schrödinger devient $\frac{d^2\varphi}{dx^2} + k^2\varphi = 0$ avec $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$. Écrire la solution générale. Utiliser les conditions aux limites pour en déduire que k est quantifiée par un entier n et déterminer la forme des solutions. Déterminer le préfacteur $A = \sqrt{2/L}$ par la condition de normalisation. Choisir pour simplifier un argument nul pour le nombre complexe A .

4.4 Représentations spatiales des fonctions d'onde et densité de probabilité

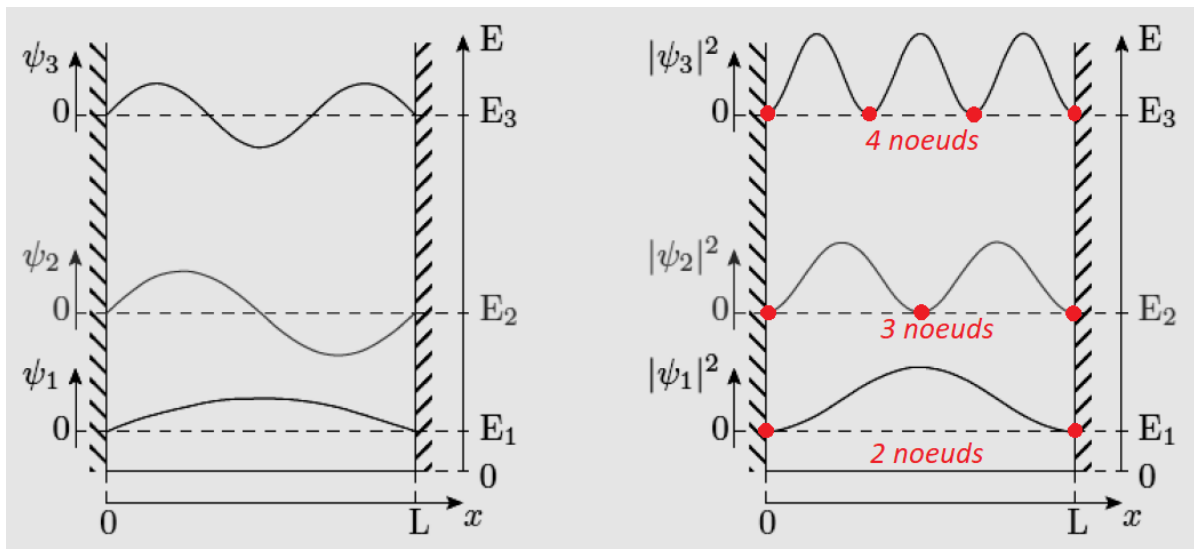


FIGURE 3 – Graphes des fonctions d'ondes spatiales notées ψ_n et de la densité de probabilité pour les trois premiers états stationnaires.

prop : Il existe une analogie formelle très forte entre les modes propres d'une corde vibrante et les états stationnaires d'un puits infini :

★ Même relation de quantification sur k_n et λ_n :

$$\boxed{k_n = n \frac{\pi}{L}} \quad \Leftrightarrow \quad \boxed{\lambda_n = \frac{2L}{n}} \quad (17)$$

★ Même expression sinusoïdale en $\boxed{\varphi(x) \propto \sin(k_n x)}$.

★ L'état d'ordre n comporte n ventres et $(n+1)$ nœuds (en comptant les bords).

★ La fonction d'onde $\varphi_n(x)$ est symétrique par rapport au milieu du puits si n est impair, et antisymétrique si n est pair.

★ La densité de probabilité $|\varphi_n(x)|^2$ est symétrique par rapport au milieu du puits.

rq : Cette analogie¹² est forte car la quantification de k provient de la même condition aux limites : $\sin(kL) = 0$.

11. CE : Utiliser l'équation de Schrödinger fournie. Déterminer la partie spatiale $\varphi(x)$ des fonctions d'onde stationnaires.

12. CE : Décrire la forme des fonctions d'onde dans les différents domaines.

4.5 Quantification de l'énergie

résultat : Les états stationnaires d'une particule dans un puits infini dans $[0, L]$ sont d'énergie quantifiées¹³ :

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \quad (18)$$

| démo : Utiliser le lien entre E et k .

prop : **L'énergie d'un état stationnaire dans un puits infini est quantifiée par un entier n .**

→ qualitativement, on comprend pourquoi l'énergie d'un électron dans un atome est aussi quantifiée.

rq0 : Comme $V = 0$ dans le puits, l'énergie d'une particule est uniquement son énergie cinétique $p^2/(2m) = \hbar^2 k^2/(2m)$.

rq1 : Les niveaux d'énergie ne sont pas régulièrement espacés, l'écart $\Delta E_{n,n+1}$ entre deux niveaux successifs augmente avec n .

rq2 : Plus le puits est large, plus les niveaux sont d'énergies proches. C'est pourquoi l'énergie apparaît continue à l'échelle macroscopique¹⁴.

4.6 Énergie de confinement

prop : Même à l'état fondamental ($n = 1$), une particule dans un puits infini de largeur L est d'énergie non nulle¹⁵. On parle d'« **énergie de confinement** », ou « **énergie de point zéro** » :

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} > 0 \quad (19)$$

interprétation¹⁶ : D'après la relation de Heisenberg, $\Delta x \Delta k \geq 1/2$. Donc, avec $\Delta x \simeq L/2$, on a $\Delta k \geq 1/L$ puis $\Delta E \simeq \hbar^2 k^2/(2m) \geq \hbar^2/(2mL^2)$. Résultats cohérents avec $k_1 = \pi/L$ et $E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$.

4.7 Fonction d'onde complète

résultat : Les états stationnaires d'une particule dans un puits infini dans $[0, L]$ sont :

$$\psi_n(x, t) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cdot \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \cdot e^{-iE_n t/\hbar} \quad \text{avec} \quad E_n = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \quad (20)$$

4.8 Différences avec la corde vibrante

L'analogie entre l'onde sur une corde fixée et la particule dans un puits infini est complète sur la représentation spatiale de l'onde et la quantification de k_n et λ_n . Mais il existe des différences entre ces deux ondes :

★ L'énergie d'une corde vibrante n'est pas quantifiée. **L'analogie entre corde vibrante et quanton dans un puits n'est pas valide concernant les énergies.**

★ Les équations d'onde sont différentes. Notamment dérivée d'ordre 2 en t pour d'Alembert (corde), et d'ordre 1 en t pour Schrödinger (quanton). Les parties temporelles de ces ondes stationnaires sont donc différentes.

★ En conséquence, les relations de dispersion sont différentes, et donc un même k_n donne différentes pulsations : $\omega_n = k_n c$ pour la corde (non dispersive), et $\omega_n = \hbar k_n^2/2m$ pour le quanton (dispersive).

4.9 Exemples

• ex1 : Considérons un système macroscopique dans un puits macroscopique. Par exemple, vous-même dans une salle de classe.

→ résultat : Pour un système macroscopique :

★ l'énergie de confinement est négligeable devant l'énergie thermique, et devant l'énergie totale,

★ la vitesse minimale due au confinement est insignifiante,

★ le nombre quantique n est gigantesque, l'énergie peut être considérée continue.

13. CE : Établir les expressions des énergies des états stationnaires.

14. CE : Associer la quantification de l'énergie au caractère lié de la particule.

15. CE : Associer le confinement d'une particule quantique à une augmentation de l'énergie cinétique.

16. CE : Retrouver qualitativement l'énergie minimale à partir de l'inégalité de Heisenberg spatiale.

- ex2 : Considérons un système microscopique dans un puits microscopique. Par exemple, un électron dans un atome.
→ résultat : Pour un électron dans un atome :
★ l'énergie de confinement et l'écart entre niveaux sont élevées devant l'énergie thermique, l'énergie ne peut pas être considérée continue,
★ la vitesse minimale due au confinement est presque relativiste,
★ la longueur d'onde typique entre niveaux électroniques est de l'ordre de l'UV.

exo de cours : Démontrer toutes ces propriétés. On donne $\hbar = 1,05 \cdot 10^{-34}$ J.s, l'énergie thermique à température ambiante $E_{th} \simeq k_B T_{amb} = 4 \cdot 10^{-21}$ J $\simeq 0,025$ eV, $m_{\text{électron}} = 9,1 \cdot 10^{-31}$ kg.

4.10 Évolution temporelle de la densité de probabilité pour une superposition d'états stationnaires

- Un état stationnaire : $\psi_n(x, t) = \sqrt{2/L} \cdot \sin(n\pi x/L) \cdot \exp(-iE_n t/\hbar)$.

$$P_n(x, t) = |\psi(x, t)|^2 = \frac{2}{L} \cdot \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \quad (21)$$

- ★ La densité de probabilité $P_n(x)$ est indépendante du temps.
- ★ Elle est de même symétrie que le potentiel $V(x)$: symétrie par rapport au milieu du puits $x = L/2$. La fonction d'onde est ainsi symétrique ou antisymétrique par rapport au milieu du puits.

- Superposition d'états stationnaires :

$$\text{cas général : } \psi(x, t) = \sum_{n=1}^{+\infty} A_n \cdot \sin(n\pi x/L) \cdot \exp(-iE_n t/\hbar) \quad (22)$$

$$\text{cas de deux états : } \psi(x, t) = \psi_n(x, t) + \psi_m(x, t) = A_n \cdot \sin(n\pi x/L) \cdot \exp(-iE_n t/\hbar) + A_m \cdot \sin(m\pi x/L) \cdot \exp(-iE_m t/\hbar) \quad (23)$$

On montre que la densité de probabilité s'écrit :

$$P(x, t) = \underbrace{A_n^2 \cdot \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right)}_{\text{proba d'être dans l'état } n} + \underbrace{A_m^2 \cdot \sin^2\left(\frac{m\pi x}{L}\right)}_{\text{proba d'être dans l'état } m} + \underbrace{2A_n A_m \cdot \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \cdot \sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right) \cdot \cos\left(\frac{E_n - E_m}{\hbar} t\right)}_{\text{interférences entre } n \text{ et } m} \quad (24)$$

- ★ La densité de probabilité $P(x)$ dépend du temps.
- ★ Elle oscille¹⁷ entre les probabilités des deux états propres avec une pulsation $\Omega = \Delta E/\hbar$, soit une période $T = h/\Delta E$. Cf animation *PO5-MQ-anim_superposition*.

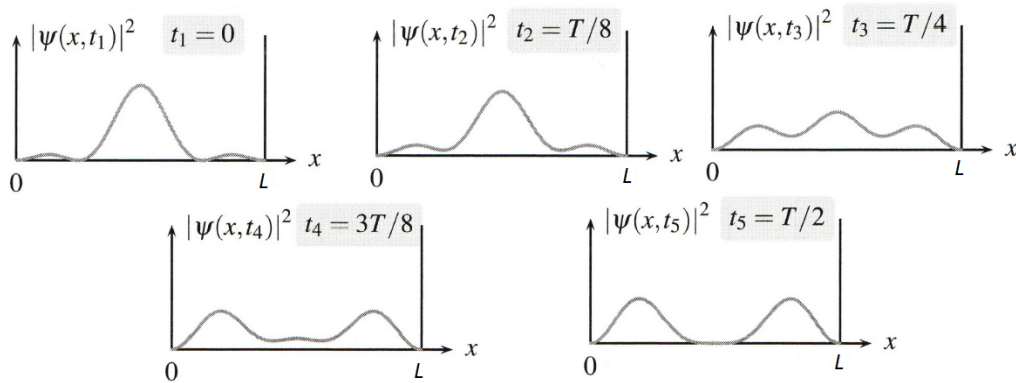


FIGURE 4 – Évolution de la densité de probabilité pour une superposition d'états stationnaires $n = 1$ et $n = 3$. L'état n'est alors pas stationnaire, sa période est $T = mL^2/h$.

17. CE : Mettre en évidence les oscillations d'une particule dont la fonction d'onde s'écrit comme la superposition de deux états stationnaires et relier la fréquence d'oscillation à la différence des énergies.

5 Particule dans un puits de potentiel fini

Le modèle du puits *infini* est simple à développer, cf partie précédente. Nous allons développer maintenant quelques propriétés du modèle plus réaliste de puits *fini*.

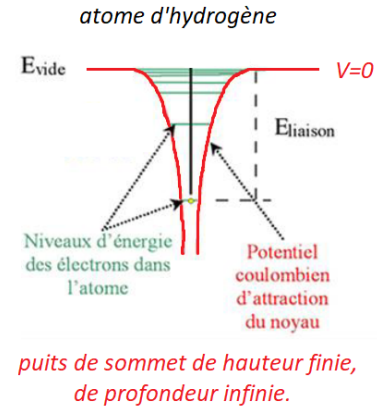
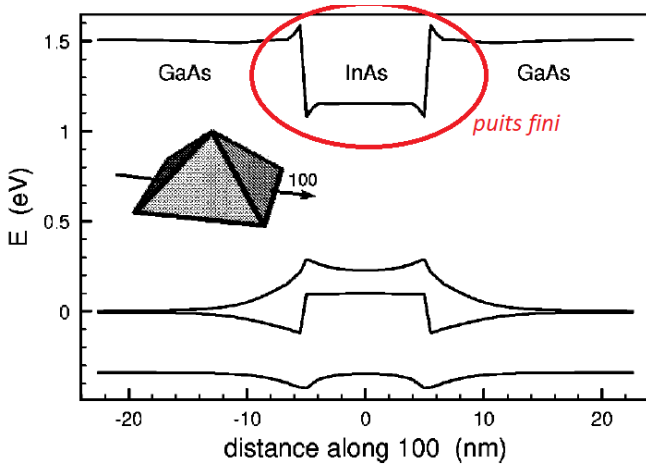


FIGURE 5 – Gauche : Puits fini dans la structure de bandes d'une boîte quantique de InAs dans du GaAs. Source : C. Pryor, *Eight-band calculations of strained InAs/GaAs quantum dots compared with one-, four-, and six-band approximations*, Physical Review B, vol. 57, no. 12, pp. 7190–7195, 1998. Droite : puits de sommet fini dans un atome.

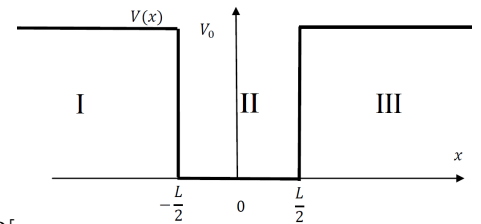
ODG : Par exemple, pour un électron dans une boîte quantique de InAs de 10 nm confinée dans du GaAs, la profondeur du puits est de quelques dixièmes d'électron-volt. Pour un électron dans un atome, la profondeur effective du puits de potentiel est de l'ordre de quelques dizaines d'électron-volt.

5.1 Modèle du puits fini rectangulaire

On considère un puits rectangulaire de longueur L , de base en $V = 0$ et de hauteur V_0 .

- Le potentiel $V(x)$ uniforme par morceaux s'écrit :

$$\begin{cases} I : & V(x) = V_0 & \forall x \in]-\infty, -L/2[\\ II : & V(x) = 0 & \forall x \in [-L/2, L/2] \\ III : & V(x) = V_0 & \forall x \in]L/2, +\infty[\end{cases} \quad (25)$$



- On cherche des solutions stationnaires $\psi(x, t) = \varphi(x) \cdot \exp(-iEt/\hbar)$.
- On doit donc résoudre l'équation de Schrödinger indépendante du temps :

$$\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + \frac{2m(E - V(x))}{\hbar^2} \cdot \varphi(x) = 0 \quad (26)$$

- Comme le potentiel $V(x)$ est pair en x , la densité de probabilité $|\psi(x, t)|^2$ doit aussi être paire en x . Ainsi, $\psi(x, t)$ est soit paire (solution $\psi_S(x, t)$ dite « symétrique »), soit impaire (solution $\psi_A(x, t)$ dite « antisymétrique »).

5.2 Solutions stationnaires pour $E > V_0$: états de diffusion

prop, rappel PCSI : En mécanique classique, une particule d'énergie mécanique E supérieure au sommet d'un puits d'énergie potentielle n'est pas confinée dans le puits. Elle s'éloigne infiniment du puits. On parle d'**état de diffusion**.

Si une particule arrive de la gauche du puits, elle gagnera un peu d'énergie cinétique lors du passage dans le puits, puis ressortira de l'autre côté en retrouvant sa vitesse initiale.

prop : En mécanique quantique, comme en mécanique classique, une particule d'énergie E supérieure au sommet d'un puits de potentiel n'est pas confinée dans le puits. Elle s'éloigne infiniment du puits.

def : On parle d'**état de diffusion**.

→ Les solutions sont combinaisons d'ondes planes progressives.

rq non exigible : Contrairement à la mécanique classique, si une particule arrive de la gauche du puits, une partie de la fonction d'onde est potentiellement réfléchiée et une partie transmise au niveau des interfaces entre domaines. On pourrait calculer des coefficients de réflexion et transmission comme en acoustique ou électromagnétisme.

démo de cours : Démontrer que dans le cas $E > V_0$, les solutions sont des combinaisons d'ondes planes progressives. On donne l'équation de Schrödinger indépendante du temps $\frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} + \frac{2m(E-V(x))}{\hbar^2} \cdot \varphi(x) = 0$. indications :

1. On note les nombres d'onde des différents domaines : $k_I = k_{III} = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}}$ et $k_{II} = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$. Écrire l'équation de Schrödinger fournie dans chaque domaine en fonction de k_I ou k_{II} .
2. Dans chacun des domaines, quel est le signe du coefficient devant le terme en φ ? En déduire que dans chaque domaine, $\varphi(x)$ s'écrit comme combinaison d'exponentielles complexes.
3. En déduire que les fonctions d'ondes $\psi(x, t) = \varphi(x) \cdot \exp(-i\omega t)$ sont des combinaisons d'ondes progressives.

5.3 Solutions stationnaires pour $E < V_0$: états liés

On cherche les solutions¹⁸ $\varphi(x)$ et leurs énergies.

5.3.1 Résumé des propriétés des états liés du puits fini

prop, rappel PCSI : En mécanique classique, une particule d'énergie mécanique E inférieure au sommet d'un puits d'énergie potentielle est strictement confinée dans le puits. On parle d'**état lié**. Une bille confinée dans un bol ne va jamais en sortir !

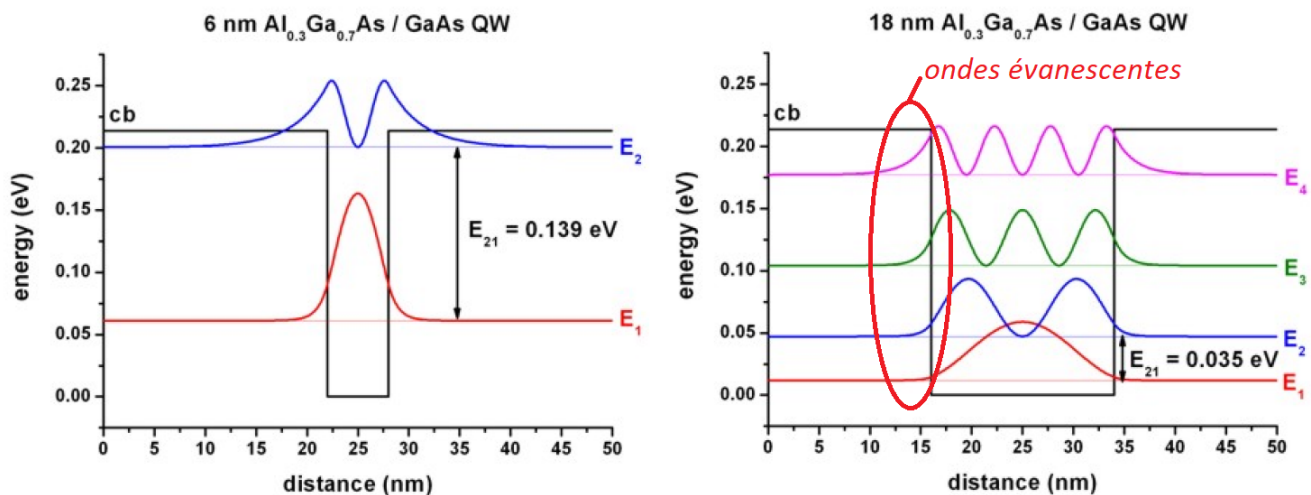


FIGURE 6 – Calcul des états liés dans deux puits quantiques (*quantum Well* QW) de GaAs dans AlGaAs d'épaisseurs 6 nm (gauche) et 18 nm (droite). Le nombre d'états liés dépend de l'épaisseur du puits. Les fonctions d'ondes débordent légèrement à l'extérieur du puits.

prop : En mécanique quantique, une particule d'énergie E inférieure au sommet d'un puits de potentiel est confinée dans le puits. On parle d'**état lié**.

★ Comme pour un puits infini, les états liés du puits fini sont d'**énergie quantifiée**. Les fonctions d'onde ont une allure proche du cas du puits infini.

★ Contrairement au puits infini, les **fonctions d'ondes débordent en dehors du puits sous forme d'ondes évanescences**.

★ Contrairement au puits infini, il existe un **nombre fini d'état lié**. Cela dépend de la largeur et profondeur du puits.

18. CE : Décrire la forme des fonctions d'onde dans les différents domaines.

5.3.2 Élargissement effectif du puits par ondes évanescentes

exo de cours : Pour $E < V_0$, démontrer qu'en dehors du puits, $\varphi(x)$ est une onde évanescente. On donne l'équation de Schrödinger indépendante du temps $\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + \frac{2m(E-V(x))}{\hbar^2} \cdot \varphi(x) = 0$. indications :

1. On note $K = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$. Écrire l'équation de Schrödinger fournie dans chaque domaine extérieur au puits (domaines I et III) en fonction de K .
2. En dehors du puits, quel est le signe du coefficient devant le terme en φ ? En déduire que dans chaque domaine, $\varphi(x)$ s'écrit comme combinaison d'exponentielles réelles.
3. Pour pouvoir être normalisée la fonction d'onde spatiale $\varphi(x)$ est nécessairement bornée. En déduire une simplification de $\varphi(x)$ dans les domaines I et III :

$$\varphi(x < -L/2) = A \cdot e^{Kx}, \quad \varphi(x > L/2) = C \cdot e^{-Kx} \quad (27)$$

4. Tracer l'allure de $\varphi(x)$ dans ces deux domaines.
5. Définir une longueur typique δ d'élargissement du puits. Commenter la dépendance de δ avec la masse m et avec l'écart au sommet du puits $V_0 - E$.
6. On donne $\hbar = 1,05 \cdot 10^{-34}$ J.s. On admet qu'on doit utiliser la masse effective m_{eff} de l'électron dans GaAs : $m_{\text{eff}} = 0,067 \times m_{\text{électron}}$ avec $m_{\text{électron}} = 9,1 \cdot 10^{-31}$ kg. On rappelle que $1 \text{ eV} = 1,6 \cdot 10^{-19}$ J. À partir de la figure 6, estimer graphiquement $V_0 - E$ pour les différents niveaux et calculer δ . Comparer qualitativement aux valeurs estimées sur le graphe.
7. En déduire que les fonctions d'ondes $\psi(x, t) = \varphi(x) \cdot \exp(-i\omega t)$ sont des ondes évanescentes en dehors du puits. Dans quel autre domaine de la physique ce phénomène est-il présent ?

prop : Du fait des solutions évanescentes à l'extérieur du puits fini, celui-ci semble présenter un **élargissement effectif**. La distance typique δ de pénétration du quanton à l'extérieur du puits est :

$$\delta = \frac{1}{K} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}} \quad (28)$$

★ δ est d'autant plus grand que E est proche de V_0 . **Les particules d'énergie proche de la hauteur du puits s'en échappent plus facilement**, l'effet est bien visibles sur les graphes de la figure 6.

★ δ est d'autant plus grand que la masse m est faible. **Les particules légères sont moins bien piégées**.

5.3.3 Allure des fonctions d'onde dans le puits

exo de cours : Pour $E < V_0$, démontrer que dans le puits, $\varphi(x)$ est sinusoidale. On donne l'équation de Schrödinger indépendante du temps $\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + \frac{2m(E-V(x))}{\hbar^2} \cdot \varphi(x) = 0$. indications :

1. On note $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$. Écrire l'équation de Schrödinger fournie dans le puits en fonction de k .
2. Dans le puits, quel est le signe du coefficient devant le terme en φ ? En déduire que dans chaque domaine, $\varphi(x)$ s'écrit comme combinaison de sinusoides :

$$\varphi(-L/2 < x < L/2) = B_1 \cos(kx) + B_2 \sin(kx) \quad \text{avec} \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (29)$$

prop ; Dans le puits fini pour $E < V_0$, même équation différentielle que pour le puits infini, donc même solution générale. Pour un état lié, il est plus pratique de choisir la base de solutions sinusoidales plutôt que la base des exponentielles complexes.

5.3.4 Utilisation des conditions aux limites pour les états liés

prop admise : Les **conditions aux limites**¹⁹ dans un puits fini sont :

19. CE : Utiliser les conditions aux limites admises dans un puits fini : continuité de φ et $d\varphi/dx$.

- ★ continuité de $\varphi(x)$ (condition toujours vraie, même pour un puits infini),
- ★ continuité de $d\varphi(x)/dx$ (condition valide seulement si la discontinuité de potentiel (V_0 dans notre modèle) est finie).

exo : Appliquer les conditions aux limites aux interfaces $x = -L/2$ et $x = +L/2$ dans le cas d'un état lié ($E < V_0$) pour démontrer les relations suivantes :

- ★ continuité de $\varphi(x)$:

$$\begin{cases} Ae^{-KL/2} = B_1 \cos\left(\frac{kL}{2}\right) - B_2 \sin\left(\frac{kL}{2}\right) \\ Ce^{-KL/2} = B_1 \cos\left(\frac{kL}{2}\right) + B_2 \sin\left(\frac{kL}{2}\right) \end{cases} \quad (30)$$

- ★ continuité de $d\varphi(x)/dx$:

$$\begin{cases} KAe^{-KL/2} = kB_1 \sin\left(\frac{kL}{2}\right) + kB_2 \cos\left(\frac{kL}{2}\right) \\ KCe^{-KL/2} = kB_1 \sin\left(\frac{kL}{2}\right) - kB_2 \cos\left(\frac{kL}{2}\right) \end{cases} \quad (31)$$

5.3.5 Discussion graphique : quantification des états liés

Pour un puits donné (profondeur V_0 , largeur L), on cherche les valeurs de k vérifiant les équations précédentes. On séparera l'étude en deux cas : fonction d'onde symétrique puis antisymétrique. La démarche est la suivante :

- ★ Simplifier les relations entre k et K (issues des conditions aux limites) en prenant en compte la parité.
- ★ L'équation algébrique obtenue est non-linéaire, on ne va pas la résoudre analytiquement. On propose alors une résolution graphique²⁰, sachant qu'une méthode numérique (dichotomie, Newton) peut donner des solutions approchées.

- cas symétrique : On suppose $\varphi_S(x)$ paire.

exo de cours :

1. En prenant en compte la parité de $\varphi_S(x)$, simplifier ses coefficients A , B_1 , B_2 et C .
2. Montrer que les conditions aux limites donnent alors :

$$\begin{cases} Ae^{-KL/2} = B \cos\left(\frac{kL}{2}\right) \\ KAe^{-KL/2} = kB \sin\left(\frac{kL}{2}\right) \end{cases} \quad (32)$$

3. En déduire la relation $K = k \tan\left(\frac{kL}{2}\right)$ (relation 1). Que dire du signe de $\tan\left(\frac{kL}{2}\right)$?
4. À partir des définitions de K et k , démontrer que $k^2 + K^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} = \text{cte}$ (relation 2). On notera cette constante q_0^2 . Dans un repère K en fonction de k , quelle est la courbe associée à cette relation 2 ?
5. Comme K doit être solution de ces deux relations, la figure 7 donne le tracé de $Y = X \cdot \tan(X)$ et $Y^2 + X^2 = R^2$ avec R arbitrairement choisi. Déterminer graphiquement sur cet exemple les valeurs accessibles pour k . Y-a-t-il quantification ?
6. Comment évolue le nombre de solutions avec la profondeur V_0 du puits [Indice : Utiliser le rayon $q_0 = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}}$.] ? Et avec la largeur L [Indice : Utiliser les asymptotes en $1/L$.] ? Y-a-t-il toujours une solution ?

20. CE : Mener une discussion graphique.

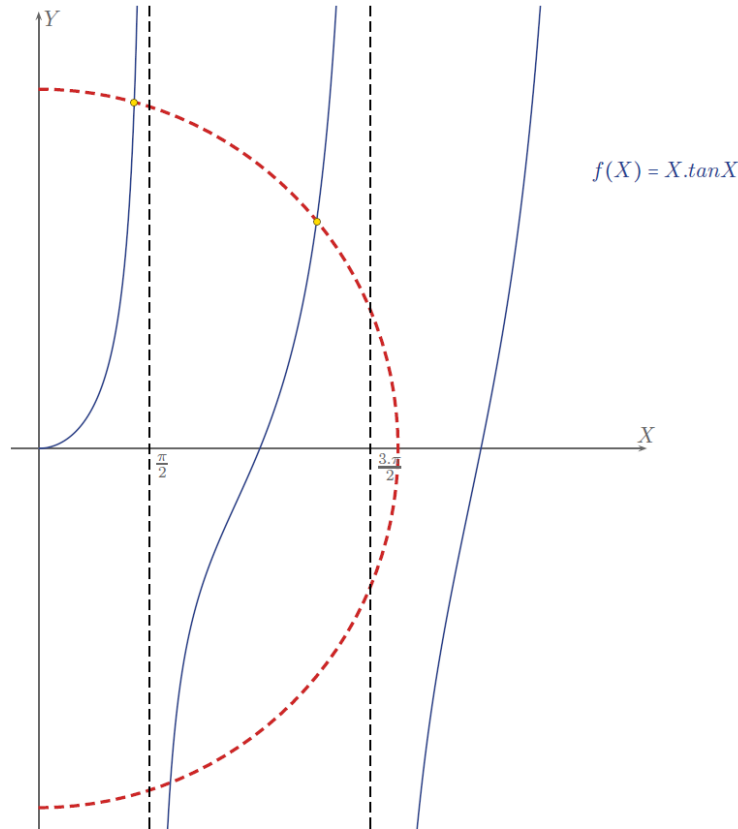


FIGURE 7 – Tracé de $Y = X \cdot \tan(X)$ en fonction de X (lignes bleues), et de ses asymptotes verticales (tirets noirs). Tracé d'un exemple de cercle (tirets rouges) centré sur l'origine de rayon environ 2,2 (choisi arbitrairement). Pour cet exemple de rayon, ces deux fonctions présentent deux intersections à valeurs positives repérées par un cercle jaune.

- cas antisymétrique : On suppose $\varphi_A(x)$ impaire.

exo de cours :

1. En prenant en compte la parité de $\varphi_A(x)$, simplifier ses coefficients A , B_1 , B_2 et C .
2. Montrer que les conditions aux limites donnent alors :

$$\begin{cases} Ae^{-KL/2} = -B \sin\left(\frac{kL}{2}\right) \\ KAe^{-KL/2} = kB \cos\left(\frac{kL}{2}\right) \end{cases} \quad (33)$$

3. En déduire la relation $K = -k / \tan\left(\frac{kL}{2}\right)$ (relation 3). Que dire du signe de $\tan\left(\frac{kL}{2}\right)$?
4. Comme K doit être solution de cette relation 3, ainsi que de la relation 2 trouvée dans l'exo précédent $k^2 + K^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} = \text{cte}$, la figure 8 donne le tracé de $Y = X / \tan(X)$ et $Y^2 + X^2 = R^2$ avec R arbitrairement choisi. Déterminer graphiquement sur cet exemple les valeurs accessibles pour k . Y-a-t-il quantification ?
5. Comment évolue le nombre de solutions avec la profondeur V_0 du puits [Indice : Utiliser le rayon $q_0 = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}}$] ? Et avec la largeur L [Indice : Utiliser les asymptotes en $1/L$.] ? Y-a-t-il toujours une solution ?

- résumé²¹ :

prop : Dans un puits de potentiel de profondeur finie, les états liés sont tels que :
 ★ les valeurs de k sont quantifiées, et donc **l'énergie** $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ **est aussi quantifiée**,
 ★ **le nombre d'états liés est fini**.

prop : Si la profondeur du puits est inférieure à une valeur seuil $V_0 < \pi^2 \hbar^2 / (2mL^2)$, alors, il n'existe qu'un seul état lié, symétrique.

21. CE : Associer la quantification de l'énergie au caractère lié de la particule.

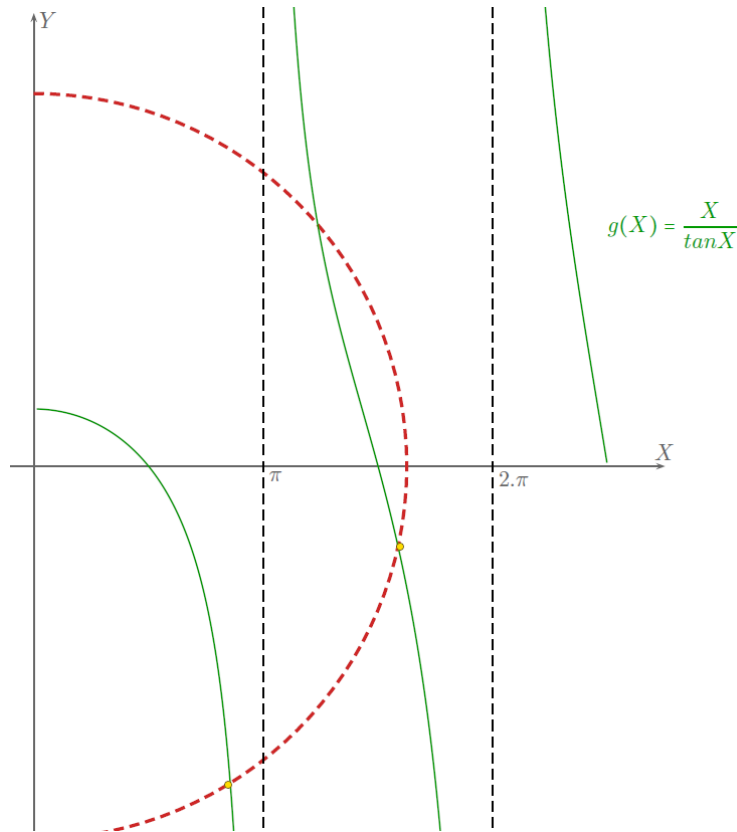


FIGURE 8 – Tracé de $Y = X/\tan(X)$ en fonction de X (lignes vertes), et de ses asymptotes verticales (tirets noirs). Tracé d'un exemple de cercle (tirets rouges) centré sur l'origine de rayon environ 2,2 (choisi arbitrairement). Pour cet exemple de rayon, ces deux fonctions présentent deux intersections à valeurs négatives repérées par un cercle jaune.

5.3.6 Limite du puits infini

Faisons tendre la profondeur V_0 du puits vers $+\infty$:

prop : Dans la limite de profondeur infinie $V_0 \rightarrow +\infty$, les valeurs de k sont quantifiées par $k_n = n\pi/L$, on retrouve la quantification du puits infini.

exo : À partir des graphes de détermination des solutions, remarquer que :

- ★ les solutions symétriques pour k tendent vers $k_S = (2n+1)\pi/L$ avec $n \in \mathbb{N}$.
- ★ les solutions antisymétriques pour k tendent vers $k_A = (2n)\pi/L$ avec $n \in \mathbb{N}^*$.

interprétation graphique : les solutions graphiques dans la limite d'un puits infini sont situées sur les asymptotes verticales des arcs de tangentes.

5.3.7 Abaissement des niveaux d'énergie par élargissement effectif du puits

prop : Pour le puits fini, les valeurs quantifiées de k sont inférieures aux cas du puits infini de même largeur. Donc il en est de même pour les valeurs d'énergie E .

interprétation graphique : pour un puits fini, les solutions graphiques sont toujours situées avant les solutions dans la limite infinie (asymptotes verticales).

interprétation par relation d'Heisenberg spatiale²² : Dans un puits fini, la largeur effective du puits est **élargie par les ondes évanescentes** (la fonction d'onde déborde du puits). Donc Δx est plus grand dans un puits fini. Comme $\Delta x \Delta k \geq 1/2$ (relation d'Heisenberg), Δk est alors réduit dans un puits fini, et donc E aussi.

²² CE : Interpréter qualitativement, à partir de l'inégalité de Heisenberg spatiale, l'abaissement des niveaux d'énergie par rapport au puits de profondeur infinie.

6 Barrière de potentiel et effet tunnel

6.1 Situation physique, exemple de la désintégration de l'uranium 238

Plusieurs situations sont décrites par un potentiel qui a une forme opposée à celui étudié dans la section précédente : une barrière de potentiel. C'est par exemple le cas de l'émission de particules α lors de la désintégration radioactive d'un noyau atomique.

- ex : Un noyau d'uranium 238 ($^{238}_{92}\text{U}$) se désintègre en un noyau de thorium 234 ($^{234}_{90}\text{Th}$) et une particule alpha (qui est un noyau d'hélium ^4_2He). Le bilan est : $^{238}_{92}\text{U} \rightarrow ^{234}_{90}\text{Th} + \alpha$.

Le noyau d'uranium 238 peut donc être modélisé comme l'association d'un noyau $^{234}_{90}\text{Th}$ et d'une particule alpha liés. La désintégration correspond alors à la séparation de ces deux entités. La figure 9 présente un modèle de potentiel pour un particule α au voisinage d'un noyau de ^{234}Th : un puits entouré de deux barrières de potentiel de sommet $V_0 \simeq 25$ MeV.

★ Plusieurs états liés existent, correspondant à un noyau d'uranium 238 stable. Par exemple, l'état 2 se trouve à énergie $E > 0$ mais inférieure à la hauteur de la barrière, c'est donc un état lié.

★ Comme la barrière est de hauteur finie, la fonction d'onde de cet état 2 déborde dans la barrière par onde évanescence (cf chapitre précédent). Puis, comme la largeur de la barrière est suffisamment fine, la fonction d'onde n'est pas nulle de l'autre côté de la barrière. En conséquence, une fraction non nulle de la fonction d'onde peut donc sortir du puits. **La particule α possède donc une probabilité non nulle de sortir du puits!!**

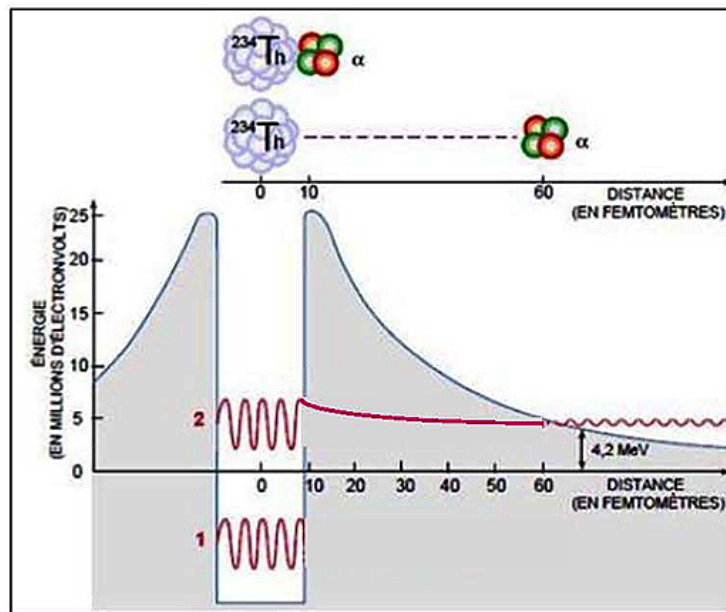


FIGURE 9 – Modélisation de la désintégration de l'uranium 238 par effet tunnel.

- prop, rappel PCSI : Une particule d'énergie E inférieure à la hauteur V_0 de la barrière ne la passe JAMAIS! **La particule classique est parfaitement piégée dans le puits.**

- observation expérimentale : À l'échelle microscopique, on observe parfois qu'une particule peut franchir une barrière de potentiel V_0 même si son énergie $E < V_0$! **La particule quantique n'est PAS parfaitement piégée.**

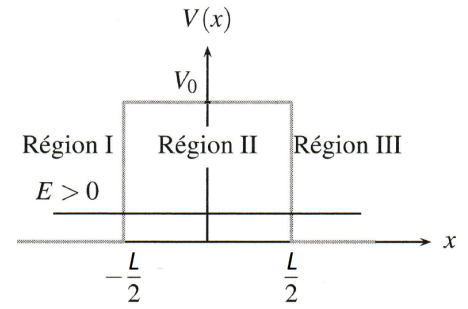
def : On parle alors d'« **effet tunnel** »²³ car la particule ne peut pas passer au dessus de la barrière mais la traverse tout de même.

6.2 Modèle de la barrière de potentiel rectangulaire

23. CE : Associer l'existence d'une probabilité de traverser une barrière de potentiel et l'existence d'une onde évanescence dans la zone classiquement interdite.

- Le potentiel $V(x)$ uniforme par morceaux s'écrit, avec $V_0 > 0$:

$$\begin{cases} I : & V(x) = 0 & \forall x \in]-\infty, -L/2[\\ II : & V(x) = V_0 & \forall x \in [-L/2, L/2] \\ III : & V(x) = 0 & \forall x \in]L/2, +\infty[\end{cases} \quad (34)$$



- On cherche des solutions stationnaires $\psi(x, t) = \varphi(x) \cdot \exp(-iEt/\hbar)$.
- On doit donc résoudre l'équation de Schrödinger indépendante du temps :

$$\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + \frac{2m(E - V(x))}{\hbar^2} \cdot \varphi(x) = 0 \quad (35)$$

- L'étude de l'effet tunnel correspond à $0 \leq E \leq V_0$. Si $E < 0$, alors aucune propagation ne serait possible. Et si $E > V_0$, la particule peut franchir la barrière directement (éventuellement avec réflexion partielle aux interfaces).

6.3 Démarche simple approchée

Cette approche donne un résultat du bon ordre de grandeur pour des barrières larges devant la profondeur de pénétration : $L \gg \delta$.

- D'après la section sur le puits fini, la fonction d'onde déborde dans une zone de potentiel supérieur à l'énergie selon :

$$\varphi(x) \propto e^{-x/\delta} \quad \text{avec} \quad \delta = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}} \quad (36)$$

- Le coefficient de transmission T en densité de probabilité pour une barrière de longueur L est estimé par la probabilité de présence de la particule au bout de la barrière :

$$T \propto |\varphi(L)|^2 \propto e^{-2L/\delta} \quad (37)$$

Cette proportionnalité est bien vérifiée si $L > 2\delta$. De plus, le préfacteur n'est pas trop éloigné de 1 si E n'est pas trop proche de 0 ou V_0 .

- En faisant un calcul complet, on obtient les résultats suivants dans l'exemple de $E = V_0/2$:

Particule	m (kg)	V_0 (eV)	L (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}

→ L'effet tunnel est d'autant plus important que : m est faible, V_0 est faible, L est faible.

6.4 Expression de la fonction d'onde stationnaire dans les différents domaines

démo de cours : On considère une onde incidente selon $\vec{e}_x$ d'énergie E vérifiant $0 < E < V_0$. Exprimer la fonction d'onde dans les 3 domaines différents. On donne l'équation de Schrödinger indépendante du temps : $\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + \frac{2m(E - V(x))}{\hbar^2} \cdot \varphi(x) = 0$. Interpréter chacun des termes des solutions.

résultats :

- solution avant la barrière (zone I) :

$$\varphi_I(x) = A_1 e^{ikx} + A_2 e^{-ikx} \quad \forall x \in]-\infty, -L/2[, \quad \text{avec } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}. \quad (38)$$

- solution dans la barrière (zone II) :

$$\varphi_{II}(x) = B_1 e^{Kx} + B_2 e^{-Kx} \quad \forall x \in [-L/2, L/2], \quad \text{avec } K = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}. \quad (39)$$

avec $K = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$.

- solution après la barrière (zone III) :

$$\varphi_{III}(x) = C_1 e^{ikx} + C_2 e^{-ikx} \quad \forall x \in]L/2, +\infty[, \quad \text{avec } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}. \quad (40)$$

- interprétation des termes : Dans le cas d'une onde incidente selon $+\vec{e}_x$:

- ★ dans φ_I , le terme $A_1 e^{ikx}$ correspond à
- ★ dans φ_I , le terme $A_2 e^{-ikx}$ correspond à
- ★ dans φ_{III} , le terme $C_1 e^{ikx}$ correspond à
- ★ dans φ_{III} , $C_2 = \dots\dots\dots$ car

6.5 Coefficient de transmission

On s'intéresse à la fraction de la fonction d'onde qui est transmise à travers la barrière. Le coefficient de transmission est défini à partir des courants de probabilité.

def, fournie par un énoncé, à savoir interpréter : Pour une particule se propageant à vitesse de groupe $v_g = \hbar k/m$ de fonction d'onde ψ , le **vecteur densité de courant de probabilité** est :

$$\vec{j} = |\psi|^2 \cdot \frac{\hbar \vec{k}}{m} \quad (41)$$

def, à savoir construire par analogie avec transmission des ondes acoustiques²⁴ :

Le coefficient de transmission se définit par $T = \frac{\|\vec{j}_t\|}{\|\vec{j}_i\|}$.

prop : Dans le cadre du franchissement de barrière, avec les notations de la sous-section précédente : $T = \frac{|C_1|^2}{|A_1|^2}$.

prop, fournie par un énoncé, à savoir exploiter²⁵ : Dans la limite de barrière large²⁶ $L/\delta \gg 1$, le coefficient de transmission pour l'effet tunnel vaut :

$$T = \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} \exp\left(-\frac{2L}{\delta}\right) \quad (42)$$

démo : Hors-programme car longue et fastidieuse. Mais le principe est simple : appliquer les conditions aux limites aux interfaces pour φ et $d\varphi/dx$.

rq : on retrouve le résultat approché $T \propto \exp(-2L/\delta)$ de la partie 6.3.

prop : Contrairement au résultat de physique classique, le coefficient de transmission à travers une barrière de potentiel $V_0 > E$ est non nul ! **On parle d'effet tunnel.**

6.6 Résultats de simulations

Considérons une barrière de potentiel de hauteur V_0 et largeur a . Les figures suivantes sont issue d'une animation²⁷ basée sur des expressions théoriques. La hauteur de la barrière est fixée à $V_0 = 5$ en unité non précisée. Un curseur permet de régler l'épaisseur a de la barrière. Un autre curseur permet de régler l'énergie E de l'onde incidente. Dans ce chapitre sur l'effet tunnel, on se restreint à $E < V_0$, mais vous pouvez tester le cas $E > V_0$ (il y a aussi réflexion/transmission partielle).

Les figures tracent la partie réelle des fonctions d'onde. L'onde incidente de la gauche vers la droite est représentée par la courbe rouge, l'onde réfléchie par la barrière est représentée par la courbe bleue. L'onde résultante (incidente

24. CE : Définir le coefficient de transmission comme un rapport de courants de probabilités.

25. CE : Utiliser une expression fournie du coefficient de transmission à travers une barrière de potentiel.

26. C'est une approximation de la formule $T = \frac{4E(V_0 - E)}{4E(V_0 - E) + V_0^2 \sinh^2(L/\delta)}$.

27. Université du Mans : <http://ressources.univ-lemans.fr/AccesLibre/UM/Pedago/physique/02/divers/qbarr.html>.

+ réfléchi) est représentée en violet. Dans la barrière, l'onde évanescente est représentée en jaune. L'onde transmise par la barrière, se propageant vers la droite, est représentée en vert.

Le coefficient de transmission T en courant de probabilité est indiqué dans le graphe en haut à gauche.

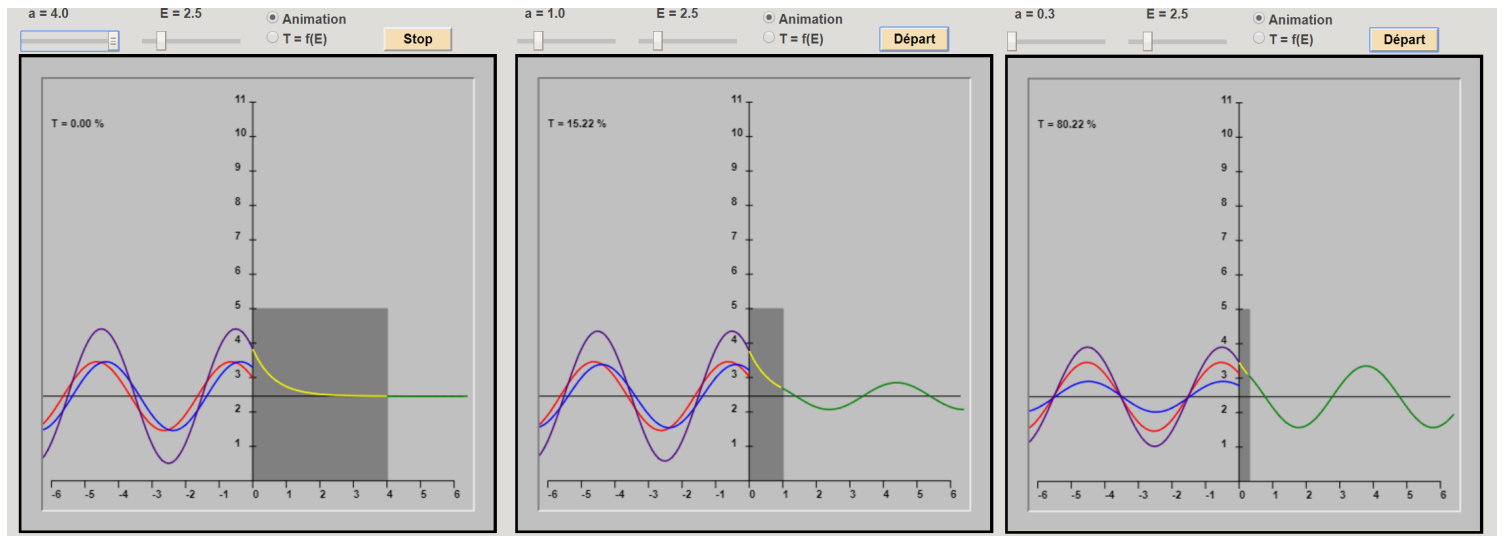


FIGURE 10 – Influence de la largeur a d'une barrière de potentiel sur l'effet tunnel. Plus la barrière est fine, plus la transmission T est importante.

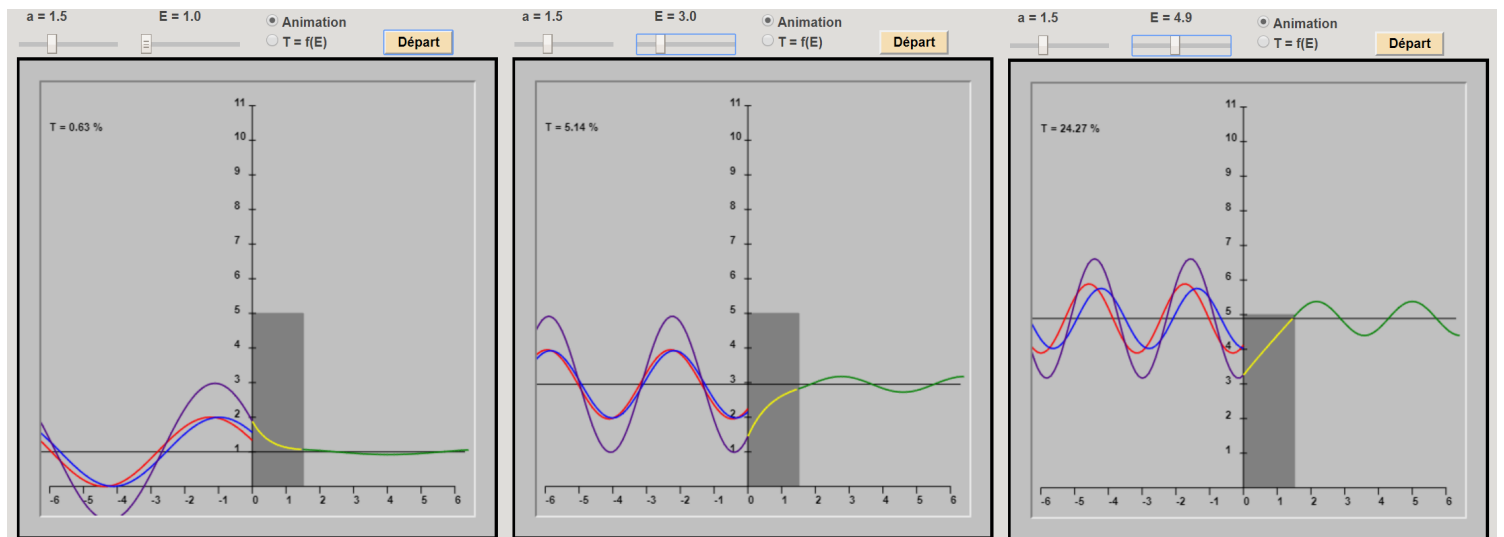


FIGURE 11 – Influence de l'énergie E de la particule incidente sur l'effet tunnel. Plus l'énergie E est proche du sommet V_0 de la barrière, plus la transmission T est importante.

6.7 Exemples d'applications numériques

Soit une particule de masse m et énergie E incidente sur une barrière de hauteur V_0 , de longueur L épaisse devant la profondeur de pénétration δ de l'onde évanescente. On donne le coefficient de transmission dans la limite de barrière épaisse $L > 4\delta$: $T = \frac{16E(V_0-E)}{V_0^2} \exp\left(-\frac{2L}{\delta}\right)$ avec $\delta = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0-E)}}$ et $\hbar = 1,05 \cdot 10^{-34}$ J.s.

prop : L'effet tunnel est parfois notable à l'échelle microscopique.

exo : Un faisceau d'électrons (masse $m_{\text{électron}} = 9,1 \cdot 10^{-31}$ kg) d'intensité $I = 0,1$ mA est incident sur une barrière de potentiel de largeur $d = 1,0$ nm et de hauteur $V_0 = 2$ eV. L'énergie des électrons incidents vaut $E = 1,0$ eV. On rappelle que $1 \text{ eV} = 1,6 \cdot 10^{-19}$ J.

1. Peut-on se placer dans l'approximation de barrière épaisse ?
2. Estimer l'intensité du courant transmis à travers la barrière. Avec un équipement adapté, il est possible de mesurer et contrôler des courants de l'ordre de 1 nA.

prop : L'effet tunnel est négligeable à l'échelle macroscopique. Les fonctions d'ondes ne sortent quasiment pas des puits.

exo : Considérons une balle de masse $m = 50 \text{ g}$ arrivant sur une barrière d'énergie potentielle de pesanteur de hauteur $h = 10 \text{ cm}$ et d'épaisseur $a = 1 \text{ cm}$. Elle possède une énergie mécanique telle qu'elle ne pourrait gravir que la moitié de la barrière : $E = mgh/2$. D'après la mécanique classique, la barrière est infranchissable. Qu'en est-il en prenant en compte l'effet tunnel ?

6.8 Application : microscopie par effet tunnel

Le microscope²⁸ à effet tunnel (Scanning Tunneling Microscope ou STM) a été développé par Binnig et Rohrer au début des années 80 au laboratoire de recherche IBM en Suisse. Les deux inventeurs ont été récompensés dès 1986 par le Prix Nobel de Physique pour cette innovation révolutionnaire.

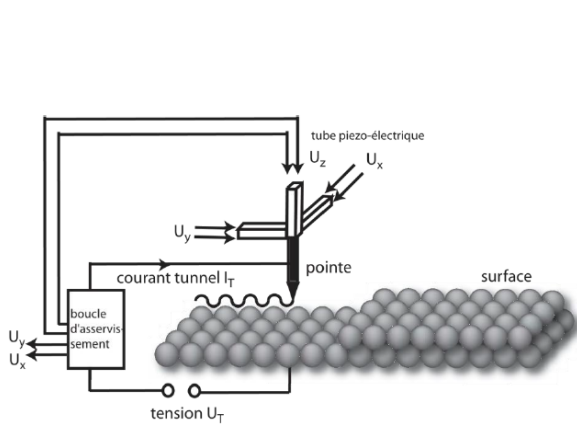


Figure 1: Représentation simplifiée d'un STM

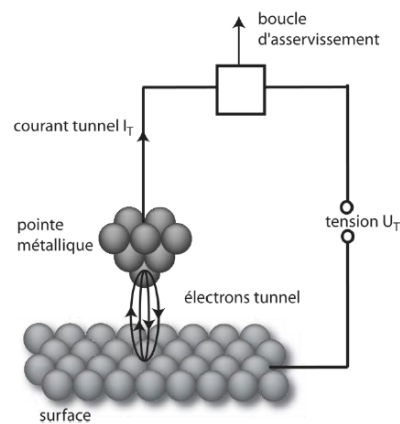


Figure 2: Représentation simplifiée de l'effet tunnel dans le STM

Le STM utilise un balayage à courant constant : le courant mesuré est comparé à chaque instant au courant de consigne de la boucle d'asservissement. Si le courant est plus faible que la consigne alors la pointe s'approche de la surface dans le cas contraire elle s'éloigne de la surface. On enregistre alors le déplacement de la pointe.

Sous de bonnes conditions de réglages, il est par exemple possible d'observer la surface présentée sur la figure suivante :

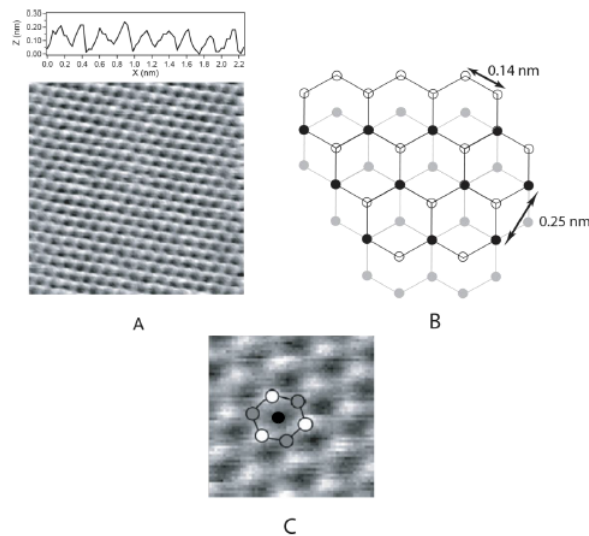


Figure 4: A: Résolution atomique sur la surface de graphite (image $4 \text{ nm} \times 4 \text{ nm}$), profil de la ligne dessinée sur l'image; B: vue du dessus des deux premiers plans atomiques de la surface de graphite (la plan inférieur est représenté en gris); C: correspondance image STM/positions des atomes de graphite.

28. CE : Citer quelques applications de l'effet tunnel.

6.9 Pour la culture : exemples d'effet tunnel entre deux puits couplés

6.9.1 Partage d'électron dans une liaison chimique

Expérimentalement, certaines paires d'atomes peuvent être stabilisées en se rapprochant à une distance de l'ordre des centaines de picomètres. Cela veut dire que l'énergie potentielle d'interaction entre atomes présente un minimum local pour cette distance.

On va s'intéresser à l'entité moléculaire la plus simple : l'ion H_2^+ , deux protons et un électron. La répulsion électrostatique devrait a priori repousser les deux noyaux, quelle est l'origine physique de l'effet antagoniste qui les attirent ?

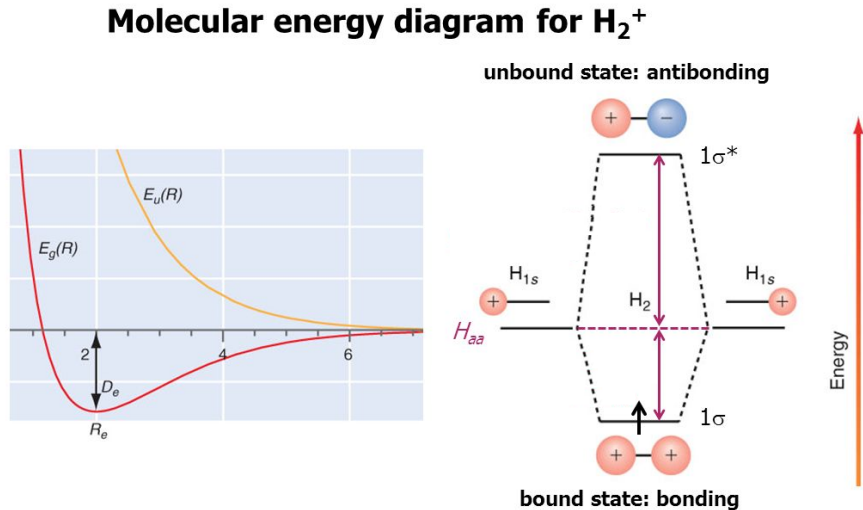


FIGURE 12 – Gauche : graphe de l'énergie de l'état liant de l'ion H_2^+ (rouge) et de l'énergie de l'état anti-liant de l'ion H_2^+ (jaune) en fonction de la distance entre noyaux de H. Droite : la combinaison des orbitales atomiques $1s$ de deux H donnent un état plus stable et un état moins stable.

Plus précisément, on observe :

- ★ L'état fondamental de fonction d'onde symétrique présente un minimum local d'énergie, il est dit « liant ».
- ★ L'état suivant, antisymétrique, est minimum quand les noyaux s'éloignent à l'infini, il est dit « anti-liant ».

Les positions les plus stables de l'électron correspondent à une situation à proximité d'un noyau ou de l'autre.
→ modélisation de l'énergie potentielle de l'électron par un double puits de potentiel.

6.9.2 Oscillation micro-onde de la molécule d'ammoniac

Considérons la molécule d'ammoniac NH_3 . En général, une molécule interagit avec des ondes électromagnétiques plutôt dans le domaine de l'UV/visible (niveaux électroniques) ou IR (vibrations des positions des noyaux). Expérimentalement, la molécule d'ammoniac absorbe et émet aussi en dehors de ce domaine : à une fréquence de l'ordre de $\nu = 24$ GHz (soit $\lambda = 1,25$ cm), dans le domaine micro-onde.

Cette raie d'absorption sert par exemple de marqueur de la présence d'ammoniac dans l'étude de gaz interstellaire en astrophysique.

Historiquement, le 1er maser fut développé en exploitant l'émission stimulée de cette transition (Charles H. Townes, James P. Gordon, and H. J. Zeiger at Columbia University in 1953). Le maser est l'équivalent du laser dans le domaine micro-onde et fut développé plus tôt. Son développement expérimental et théorique fut récompensé par le Nobel de physique en 1964.

Cette transition s'explique par l'oscillation réciproque des atomes d'hydrogène et du doublet non liant de part et d'autre de l'atome d'azote central. L'encombrement stérique implique que la molécule est moins stable quand tous les atomes sont dans le même plan.

→ modélisation de l'énergie potentielle des atomes d'hydrogène par un double puits de potentiel.

