

# Chapitre On5 Mécanique quantique ondulatoire

## 1. Fonction d'onde

- a) Fonction d'onde et probabilité
- b) Principe de superposition
- c) Équation de Schrödinger et états stationnaires

## 2. Particule libre

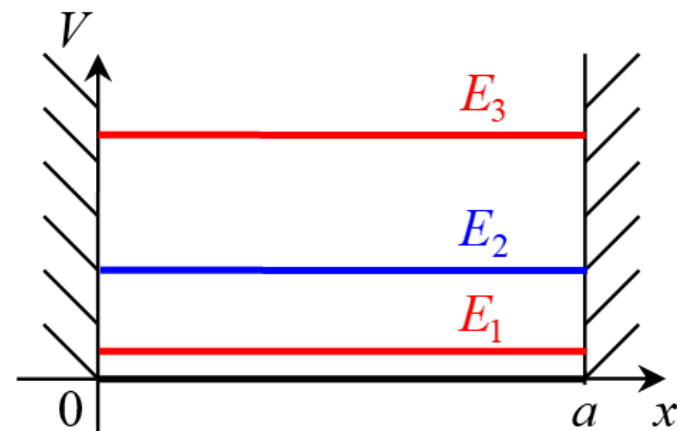
- a) Solution de l'équation de Schrödinger
- b) Paquet d'ondes
- c) Vecteur courant de probabilité

## 3. Particule dans un potentiel constant par morceaux

- a) Puits de potentiel rectangulaire de profondeur infinie
- b) Puits de potentiel rectangulaire de profondeur finie
- c) Barrière de potentiel
- d) Superposition de deux états stationnaires

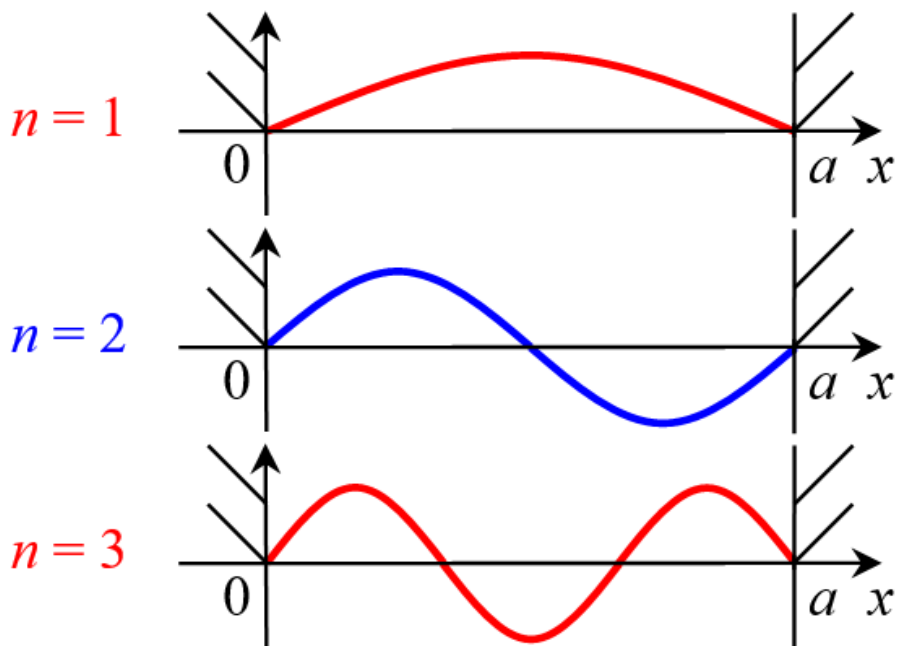
### 3. a) Puits de potentiel rectangulaire de profondeur infinie

Niveaux d'énergie



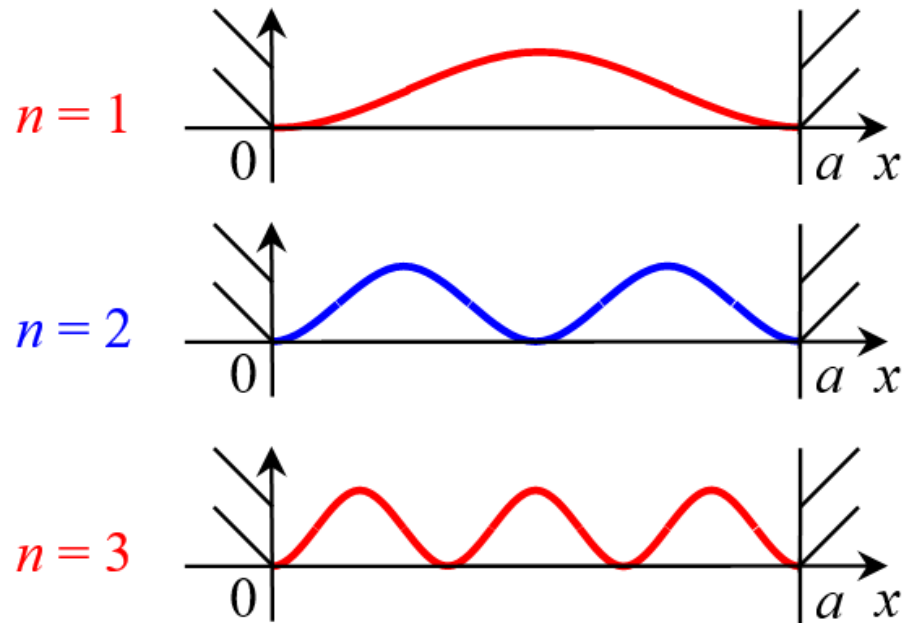
Fonction d'onde dans les trois premiers modes

$$\psi_n(x, 0) = \varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$



Densité de probabilité dans les trois premiers modes

$$|\psi_n(x, 0)|^2 = \frac{2}{a} \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$



### 3. a) Puits de potentiel rectangulaire de profondeur infinie

*Remarque* : symétrisation du puits

On peut rendre l'étude symétrique en mettant l'origine de l'axe ( $Ox$ ) au milieu du puits. Cela revient à remplacer  $x$  par  $x + a/2$  dans l'expression de la fonction d'onde :

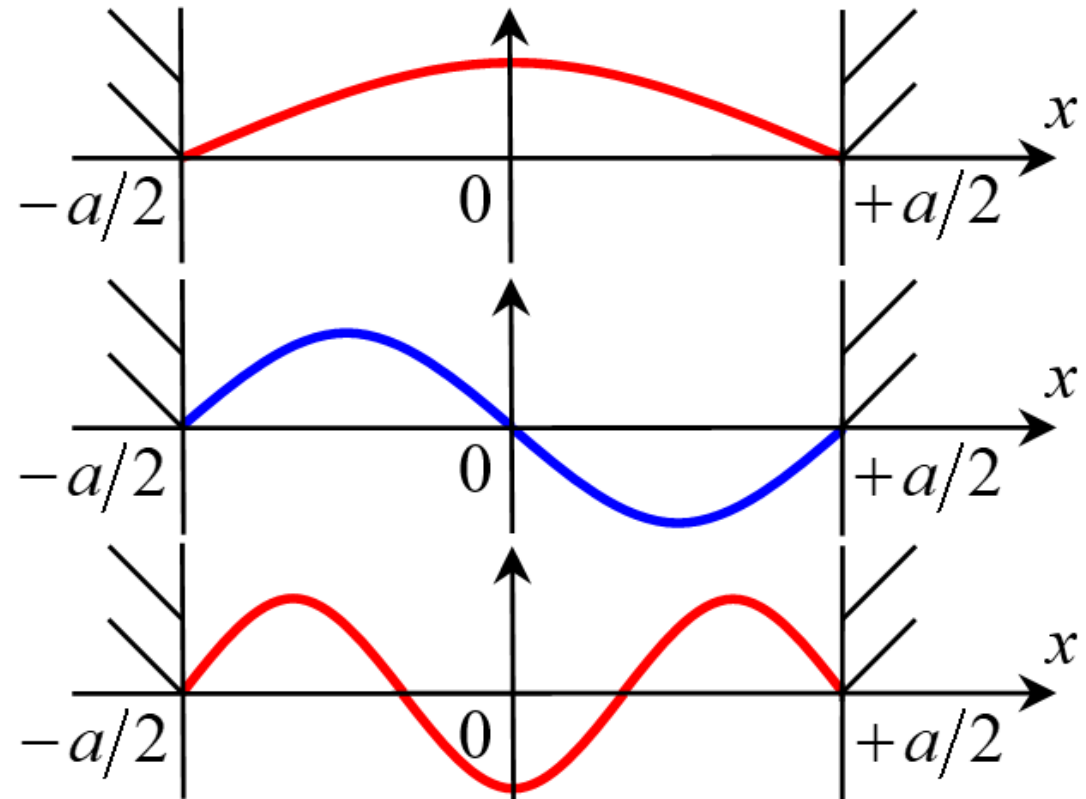
$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a} + \frac{n\pi}{2}\right)$$

Ainsi, selon la parité de l'entier  $n$ , on alterne en fait des fonctions cosinus, symétriques par rapport à l'origine (modes 1, 3, 5...) et des fonctions sinus, antisymétriques (modes 2, 4, 6...).

$n = 1$   
sym.

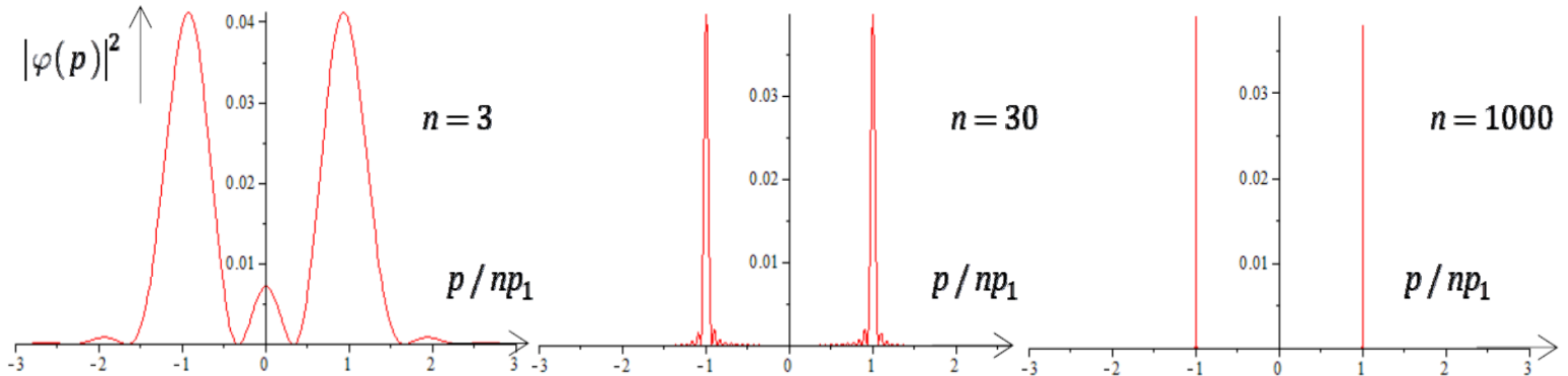
$n = 2$   
antisym.

$n = 3$   
sym.



### 3. a) Puits de potentiel rectangulaire de profondeur infinie

Densité de probabilité en impulsion

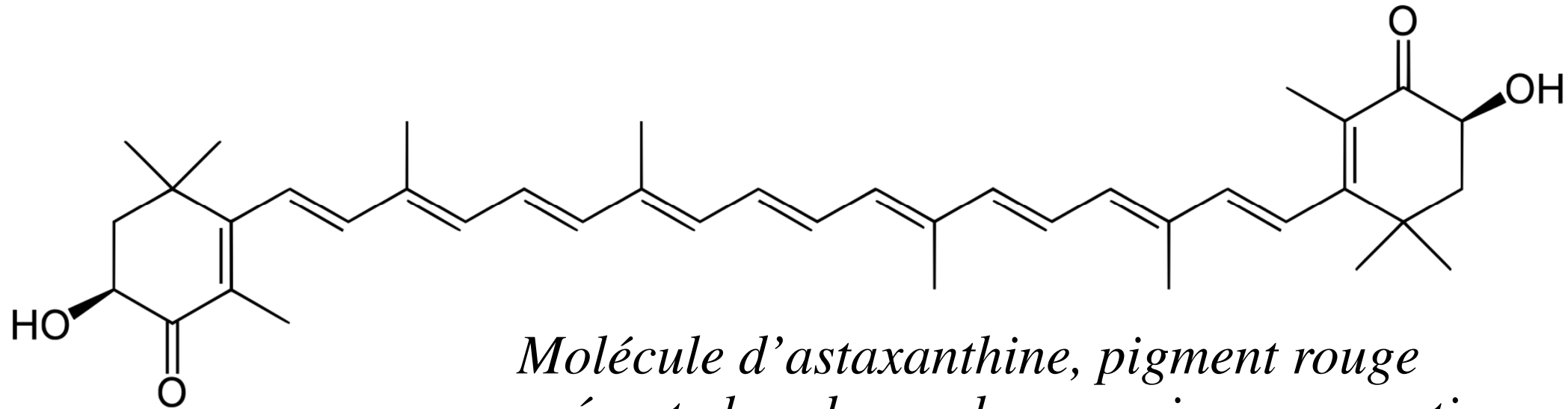


### 3. a) Puits de potentiel rectangulaire de profondeur infinie

#### *Exemples*

- Puits unidimensionnel

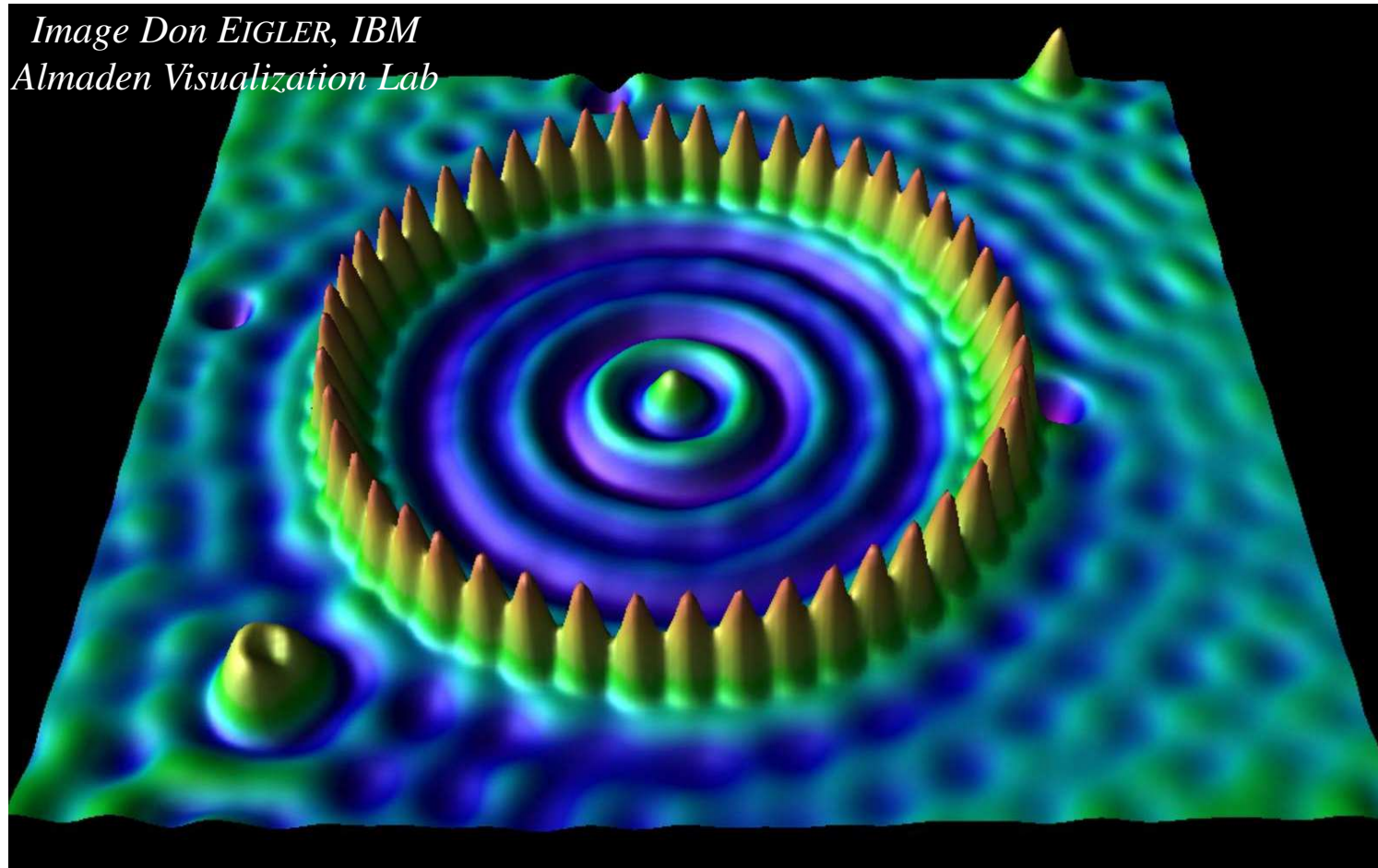
Molécule linéaire à longue chaîne, avec liaisons doubles conjuguées, comme le lycopène (11 liaisons conjuguées), l' $\alpha$ -carotène (10), le  $\beta$ -carotène (11), l'astaxanthine (13), qui absorbent toutes dans le visible



*Molécule d'astaxanthine, pigment rouge présent chez de nombreux animaux aquatiques (crustacés, saumons, flamants roses...)*

### 3. a) Puits de potentiel rectangulaire de profondeur infinie

- Puits bidimensionnel : enclos quantique créé artificiellement sur une surface de cuivre (CROMMIE, LUTZ, EIGLER, 1993)



*Cercle de diamètre 14,3 nm, constitué de 48 atomes de fer déposés sur une surface de cuivre, formant un « enclos » qui délimite un puits de potentiel en forme de disque*

*À l'intérieur, on visualise réellement la répartition de probabilité de présence des électrons, sous forme de vagues concentriques.*

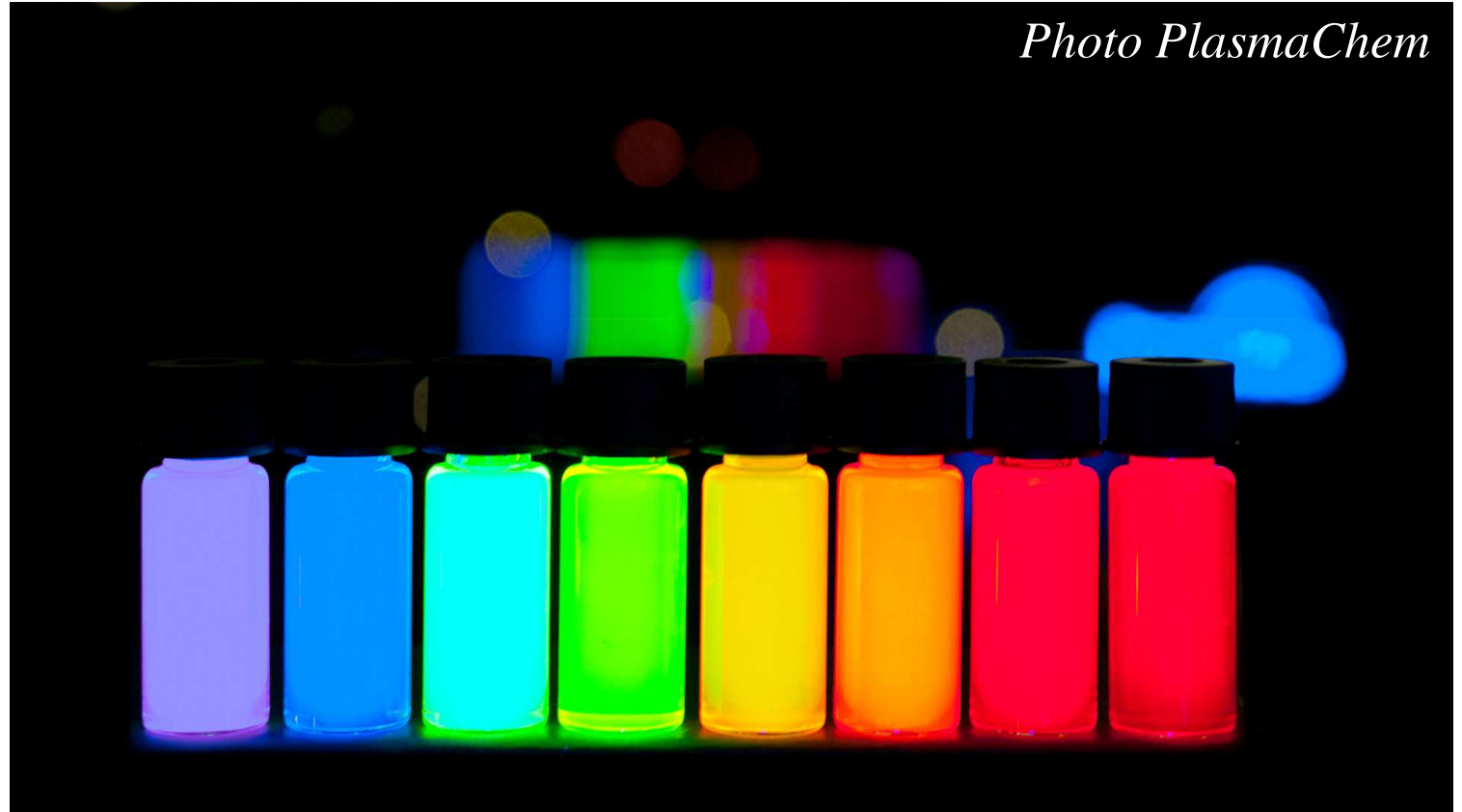
### 3. a) Puits de potentiel rectangulaire de profondeur infinie

- Puits tridimensionnel : point (ou boîte) quantique (*quantum dot*)

*Lumière émise par des points quantiques en alliage ZnCdSeS, de différentes tailles, en suspension dans un liquide.*

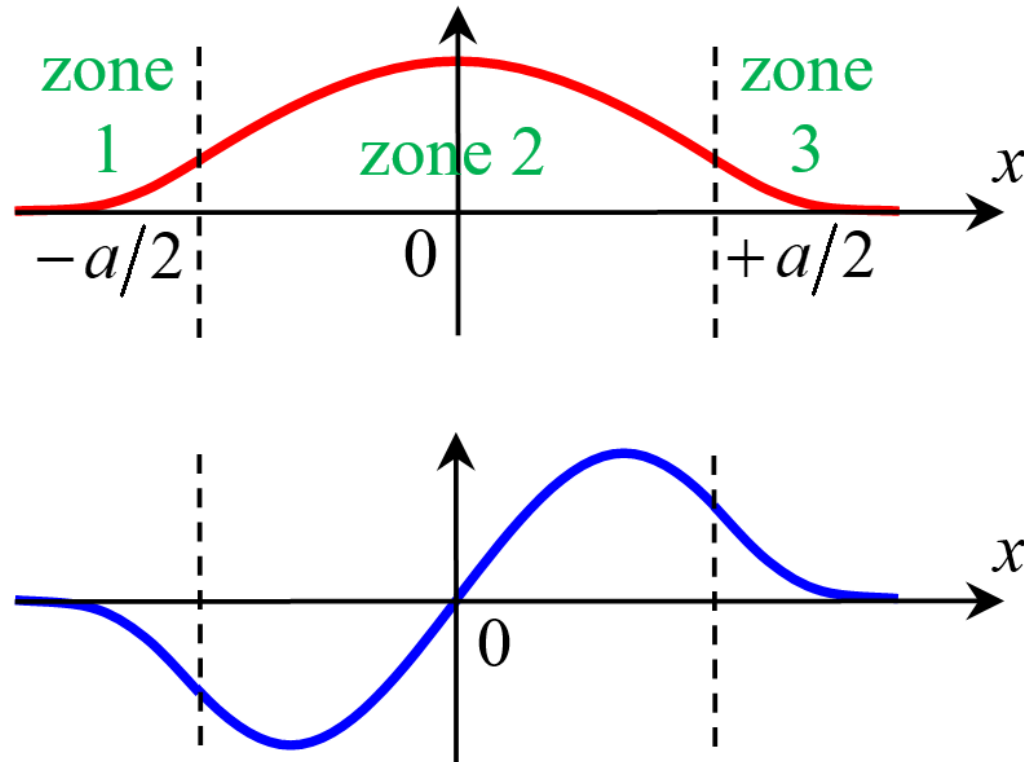
L'excitation par un rayonnement UV crée des paires électron/trou, confinées dans le point quantique de taille  $a$  avec une énergie  $E$  en  $1/a^2$ , comme dans le cas 1D. La recombinaison de l'électron et du trou entraîne l'émission d'un photon de longueur d'onde  $\lambda = hc/E$ .

On obtient une grande variété de longueurs d'onde (de 470 nm à 630 nm) en faisant varier la taille  $a$ .



### 3. b) Puits de potentiel rectangulaire de profondeur finie

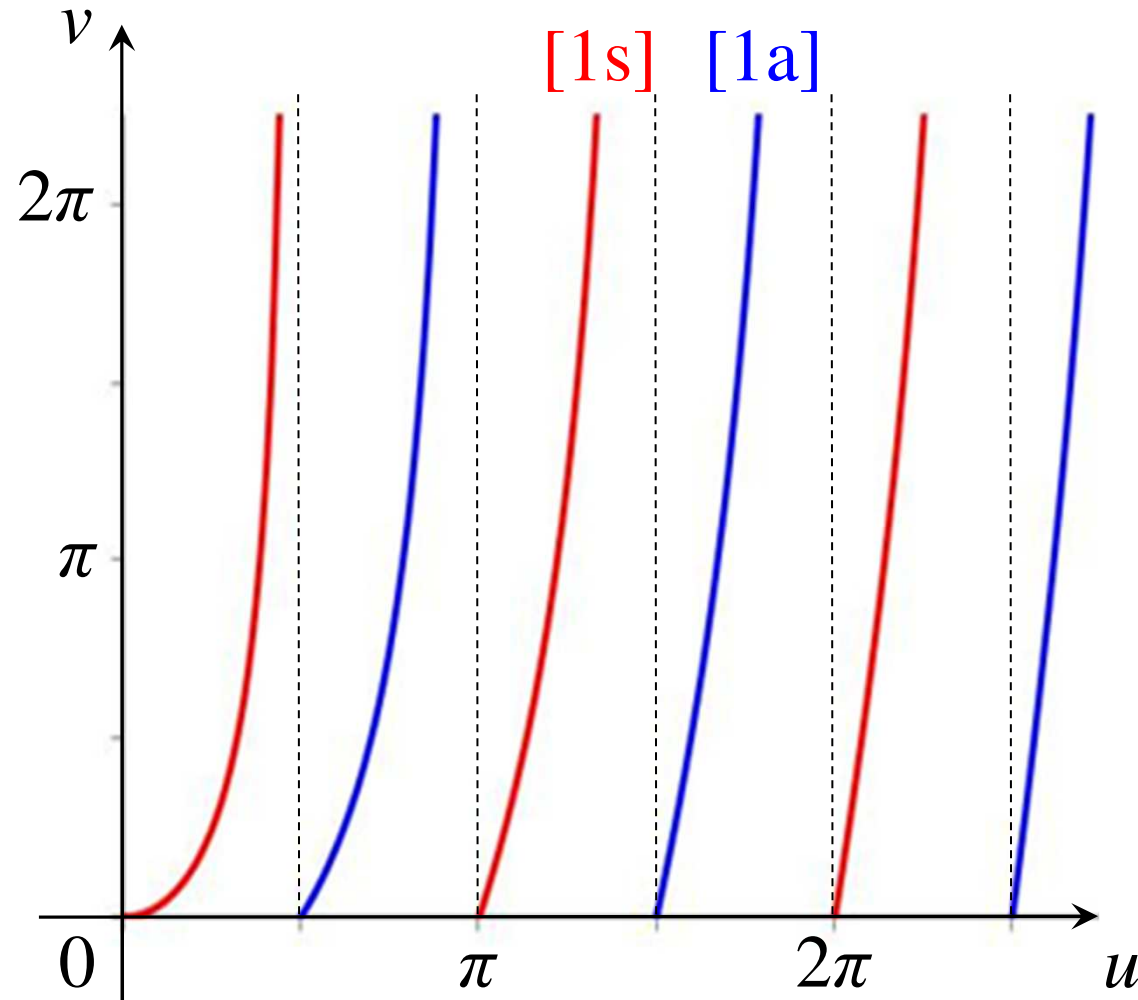
Fonction d'onde des deux premiers états stationnaires





### 3. b) Puits de potentiel rectangulaire de profondeur finie

Méthode graphique pour obtenir les niveaux d'énergie



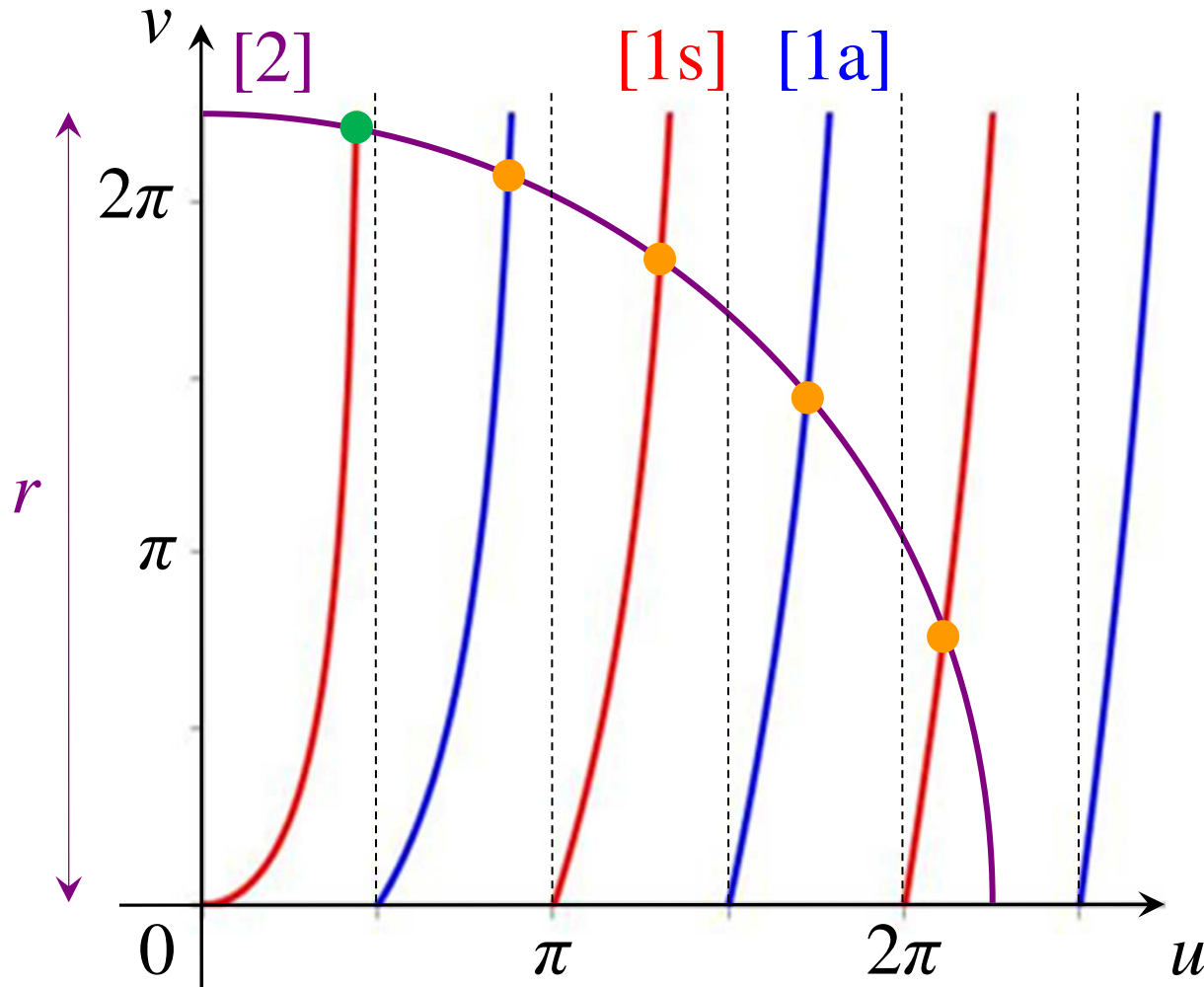
$$v = u \tan(u) \quad [1s]$$

$$v = -u \cot(u) \quad [1a]$$

$$u = \frac{ka}{2} \quad v = \frac{qa}{2}$$

### 3. b) Puits de potentiel rectangulaire de profondeur finie

Méthode graphique pour obtenir les niveaux d'énergie



$$v = u \tan(u) \quad [1s]$$

$$v = -u \cot(u) \quad [1a]$$

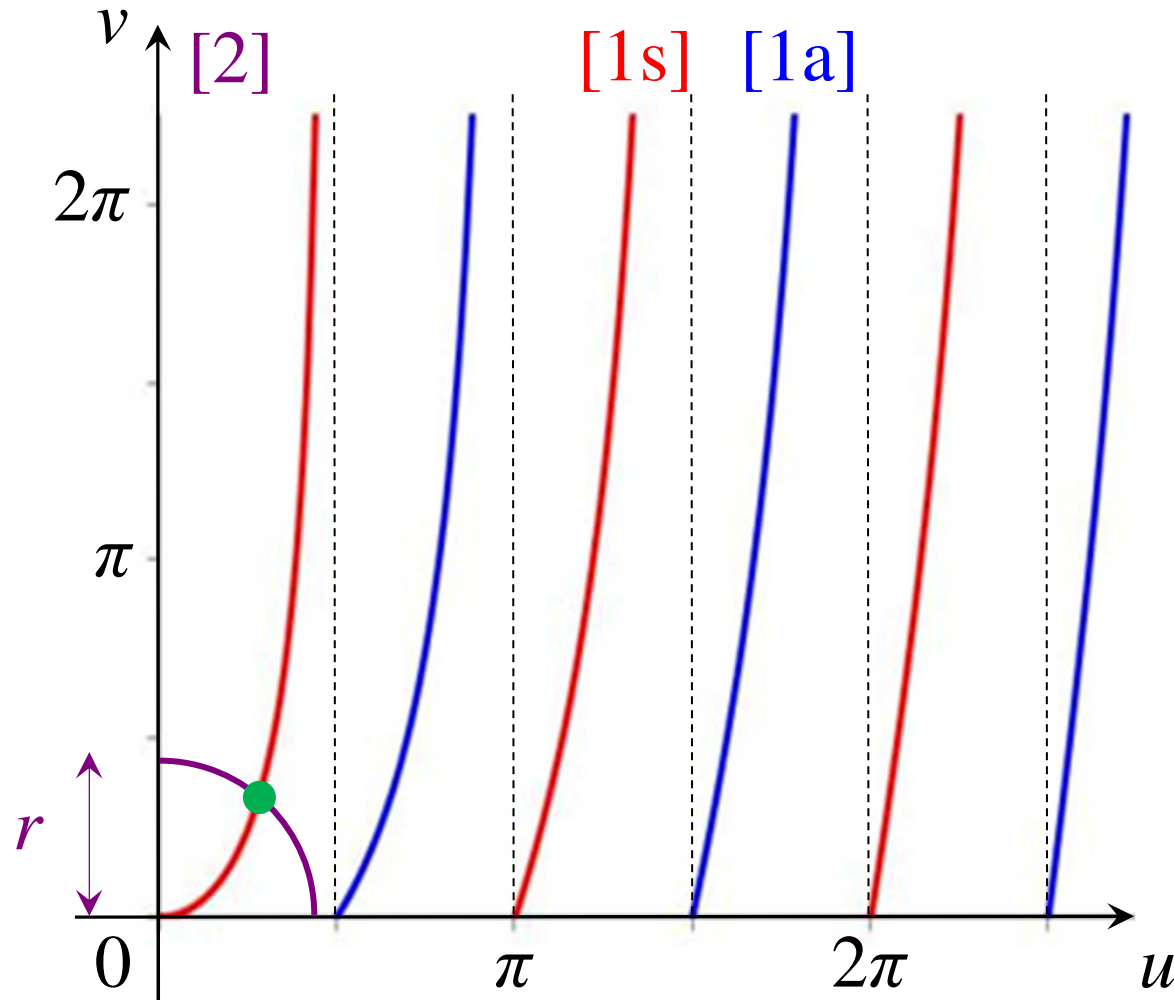
$$u = \frac{ka}{2} \quad v = \frac{qa}{2}$$

$$u^2 + v^2 = r^2 \quad [2]$$

$$r = \frac{a}{\hbar} \sqrt{\frac{mV_0}{2}}$$

### 3. b) Puits de potentiel rectangulaire de profondeur finie

Méthode graphique pour obtenir les niveaux d'énergie



$$v = u \tan(u) \quad [1s]$$

$$v = -u \cot(u) \quad [1a]$$

$$u = \frac{ka}{2} \quad v = \frac{qa}{2}$$

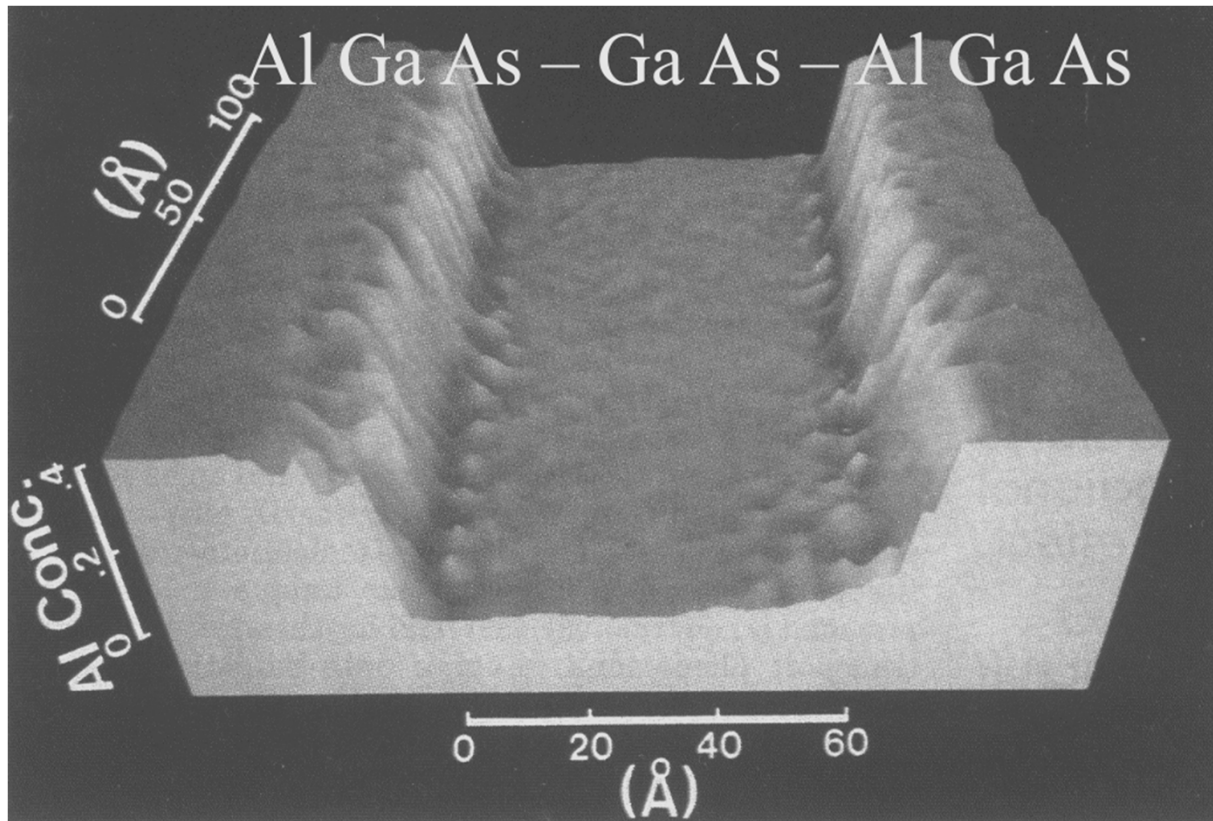
$$u^2 + v^2 = r^2 \quad [2]$$

$$r = \frac{a}{\hbar} \sqrt{\frac{mV_0}{2}}$$

### 3. b) Puits de potentiel rectangulaire de profondeur finie

#### *Exemples*

- Puits unidimensionnel : mince couche d'un semi-conducteur (GaAs) entre deux couches d'un autre semi-conducteur (AlGaAs)

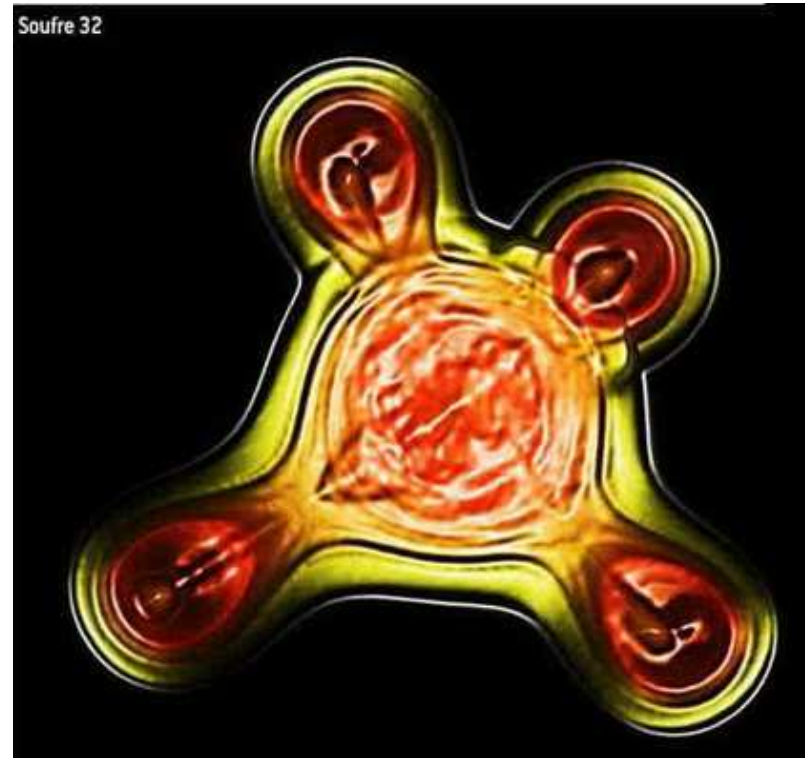


*Profil de concentration en atomes d'aluminium, qui correspond à un profil d'énergie potentielle, sensiblement rectangulaire, pour les électrons du matériau*

### 3. b) Puits de potentiel rectangulaire de profondeur finie

#### *Exemples*

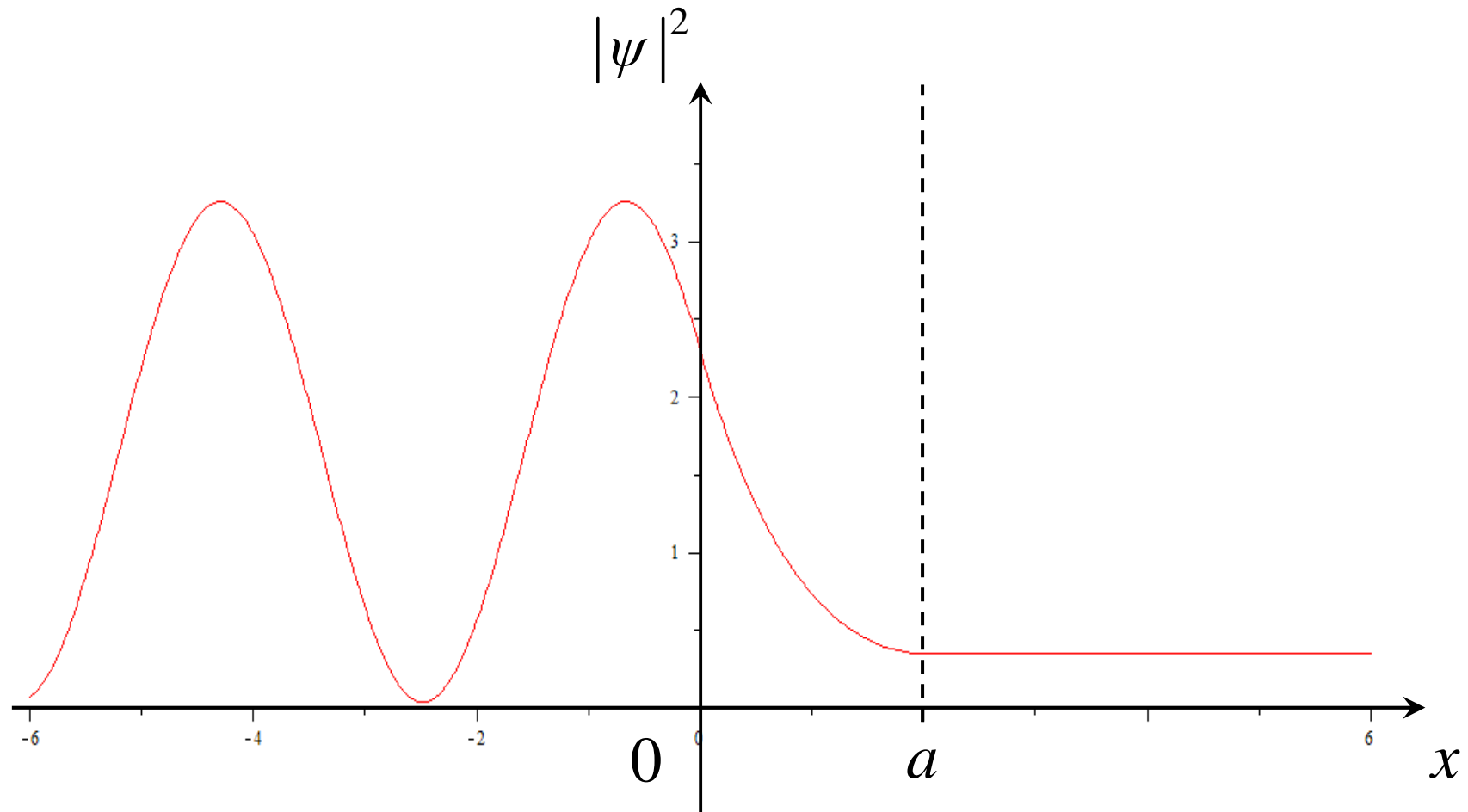
- Puits tridimensionnel : noyau atomique, constituant pour chaque nucléon un puits de potentiel dû à l'interaction forte



*Simulation numérique  
de noyaux :  
carbone-12 (à gauche)  
et soufre-32 (à droite)*

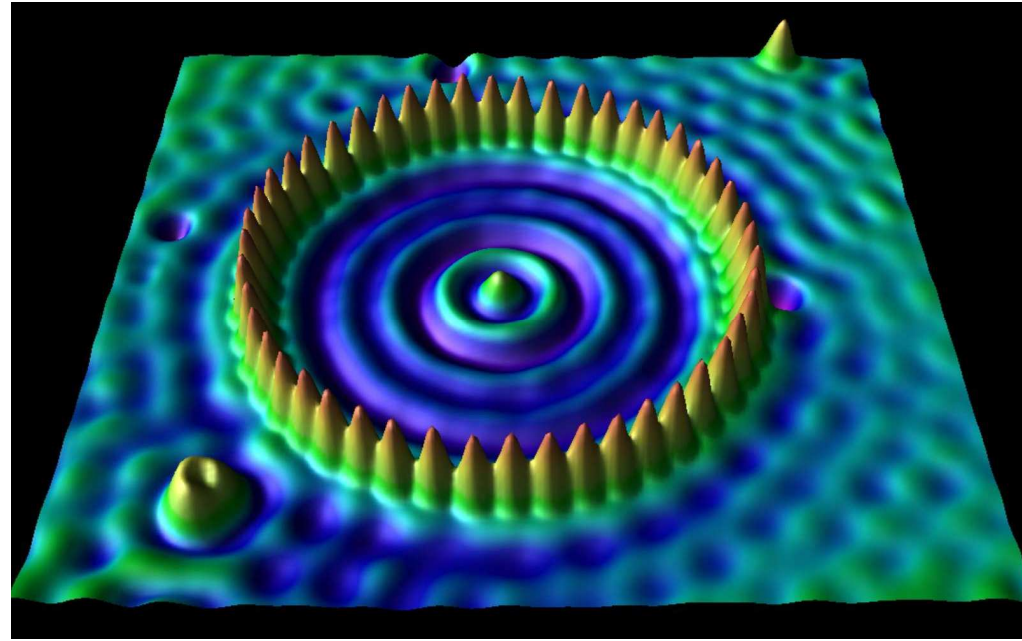
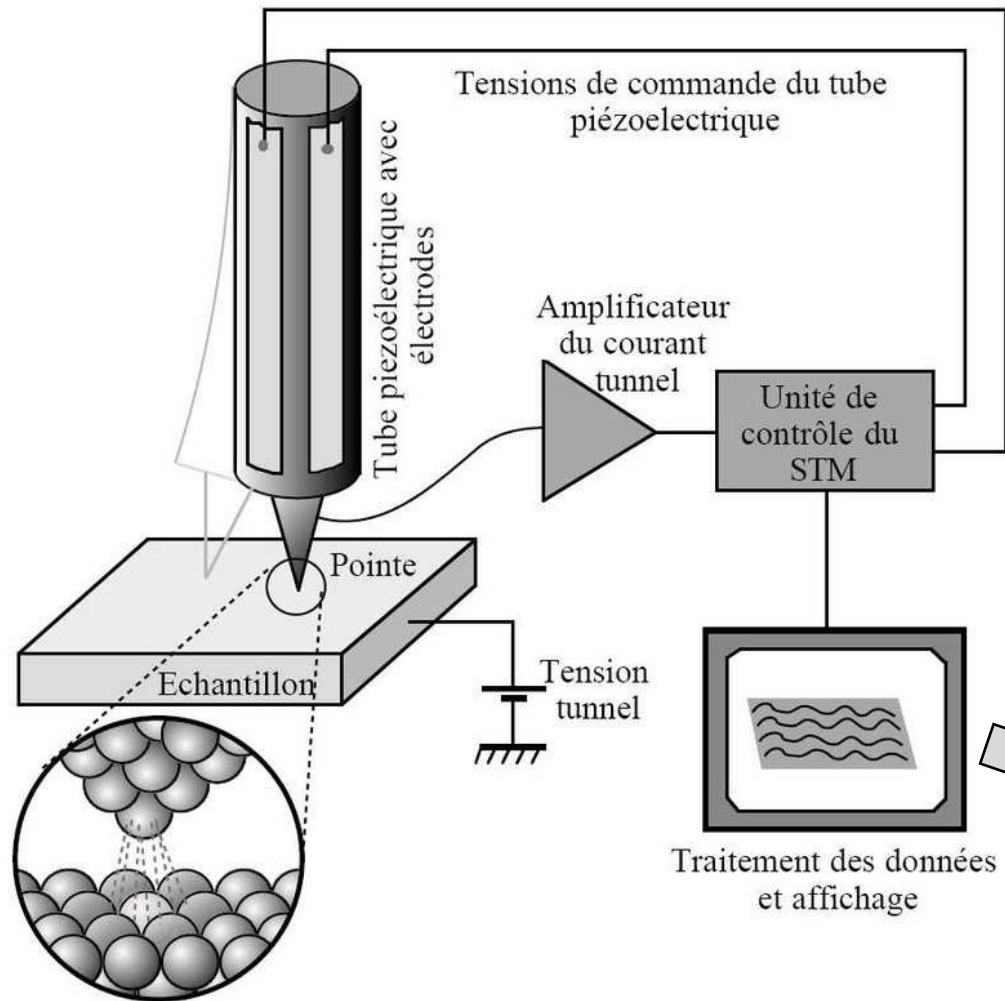
### 3. c) Barrière de potentiel

- Densité de probabilité pour  $E < V_0$  : effet tunnel



### 3. c) Barrière de potentiel

- Microscope à effet tunnel



- Gravure par effet tunnel (mémoire flash de lecteur SSD)

