

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) Rappels : puits et barrières de potentiel
- b) Puits de potentiel rectangulaire de profondeur infinie
- c) Puits de potentiel rectangulaire de profondeur finie
- d) Barrière de potentiel
- e) Superposition de deux états stationnaires

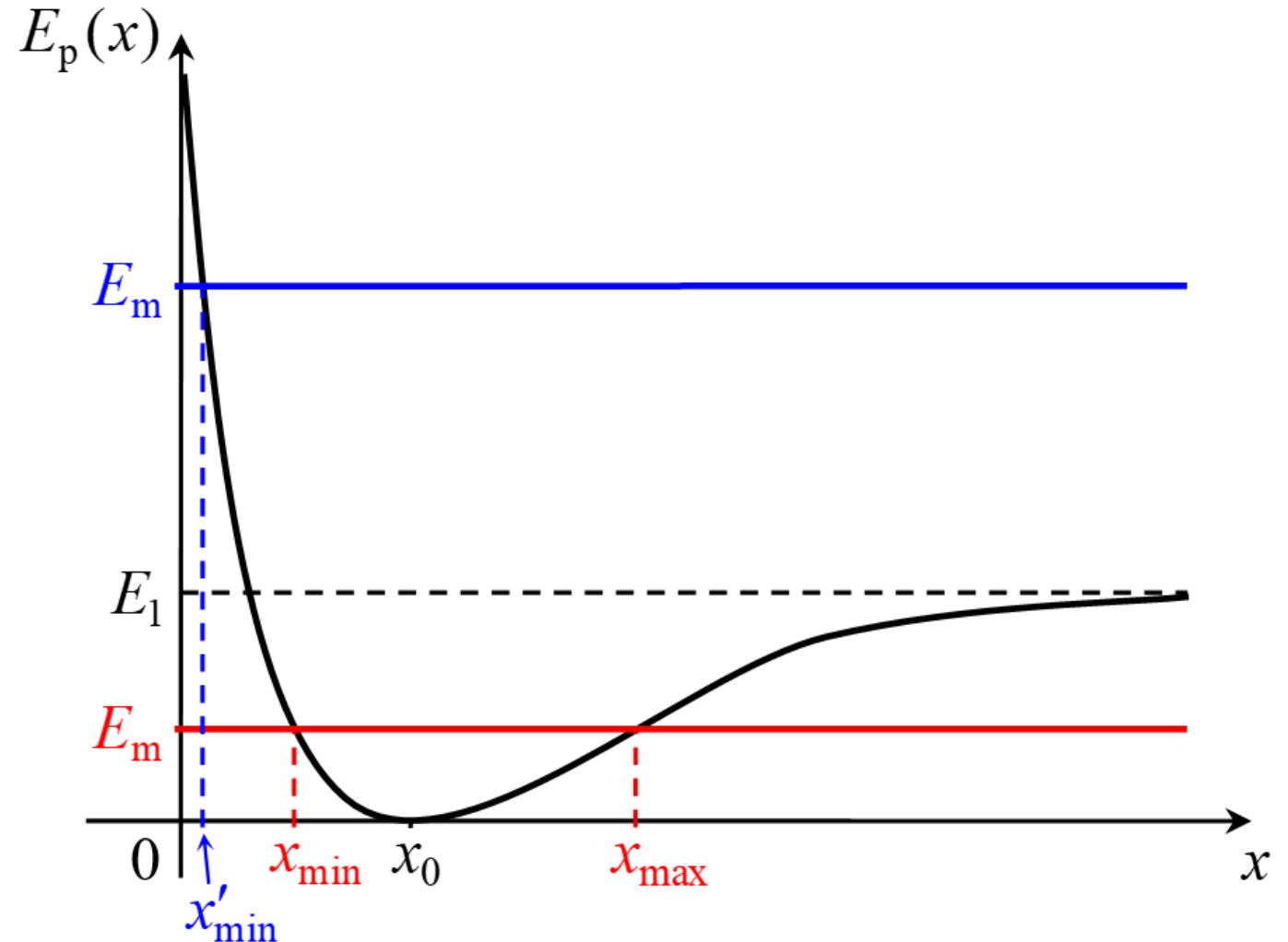
3. a) Rappels : puits et barrières de potentiel

En mécanique classique : $E_m - E_p(x) = E_c = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 \geq 0$ donc $E_p(x) \leq E_m$

- Puits de potentiel

Cas 1 : $E_m < E_1$
alors $x_{\min} \leq x \leq x_{\max}$
état lié, la particule ne
peut pas sortir du puits

Cas 2 : $E_m > E_1$
alors $x \geq x'_{\min}$
état libre, la particule
peut s'éloigner à l'infini



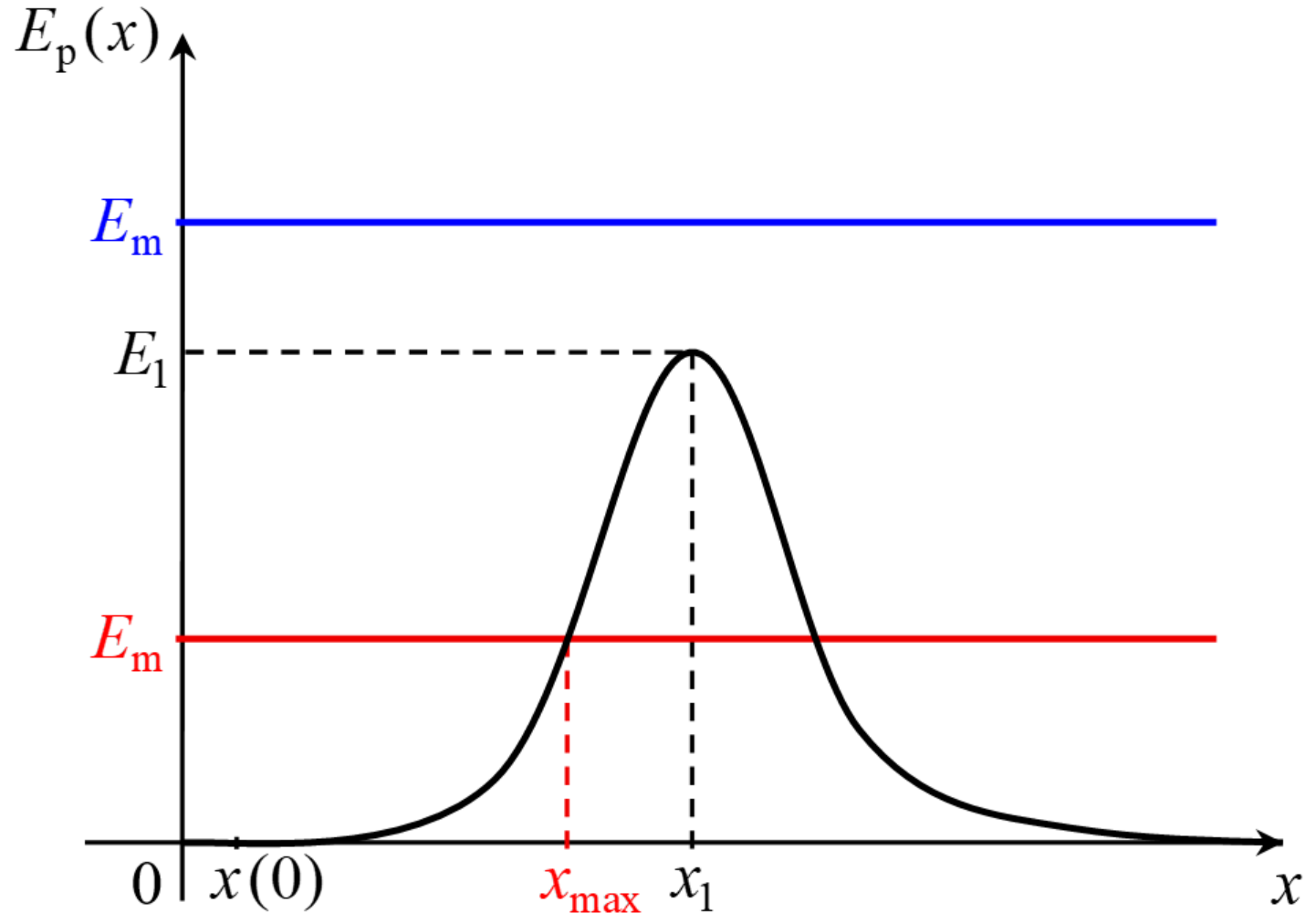
3. a) Rappels : puits et barrières de potentiel

En mécanique classique : $E_m - E_p(x) = E_c = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 \geq 0$ donc $E_p(x) \leq E_m$

- Barrière de potentiel

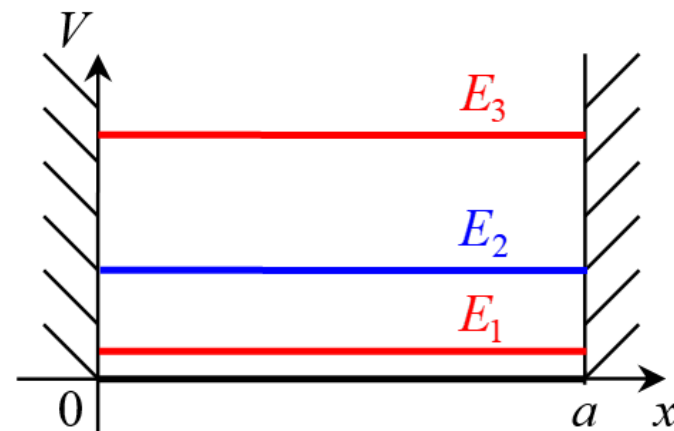
Cas 1 : $E_m < E_1$
alors $x \leq x_{\max} < x_1$
la particule ne peut pas franchir la barrière

Cas 2 : $E_m > E_1$
alors tout x est possible
la particule franchit la barrière



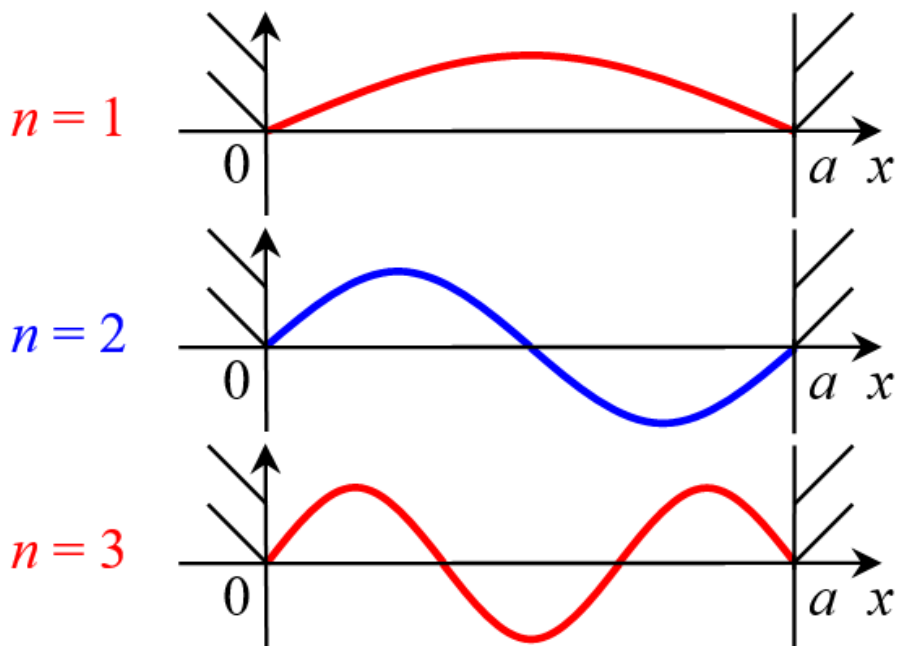
3. b) Puits de potentiel rectangulaire de profondeur infinie

Niveaux d'énergie



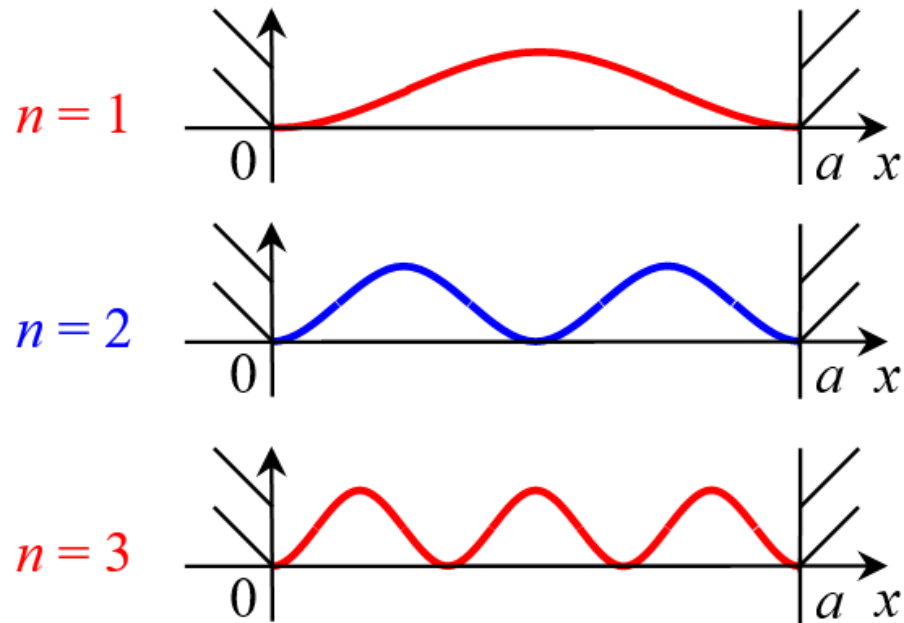
Fonction d'onde
dans les trois premiers modes

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



Densité de probabilité
dans les trois premiers modes

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



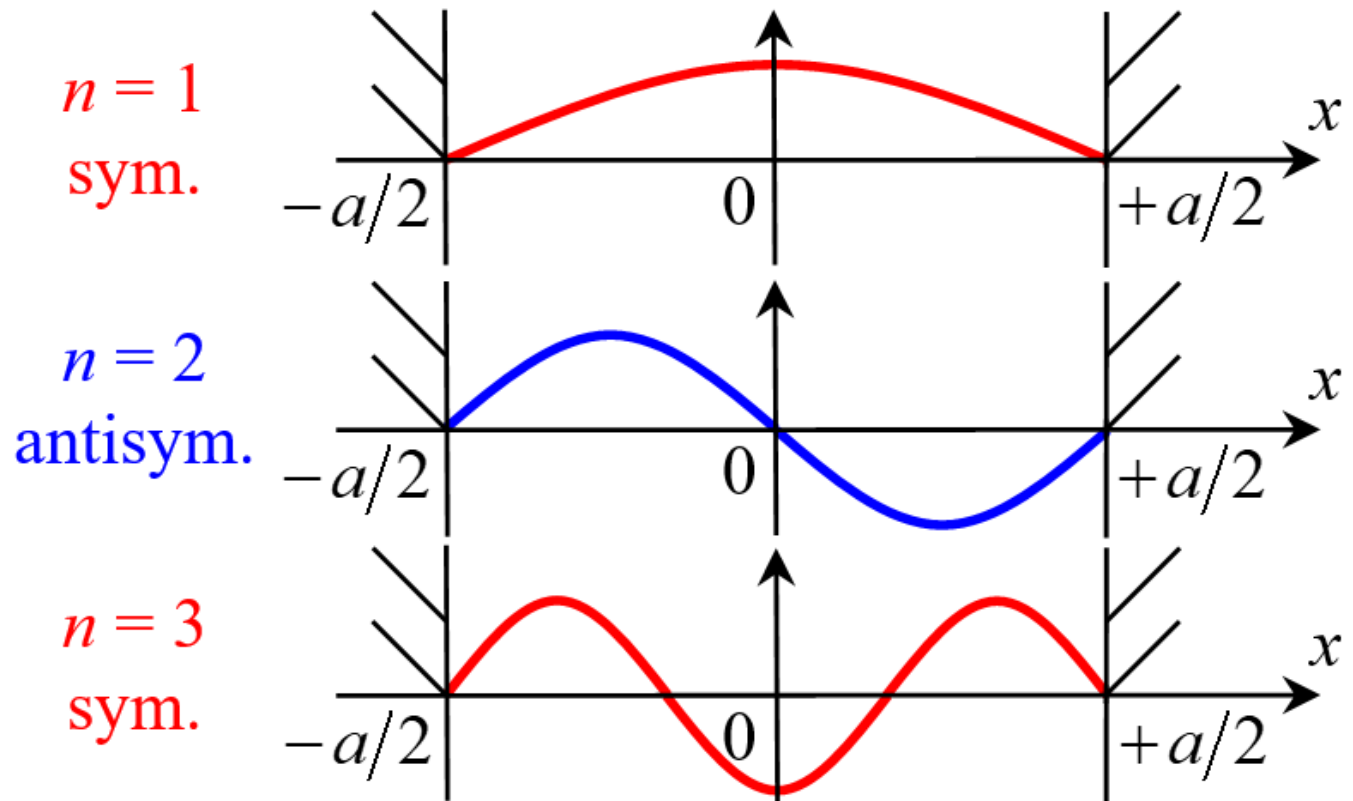
3. b) Puits de potentiel rectangulaire de profondeur infinie

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...).

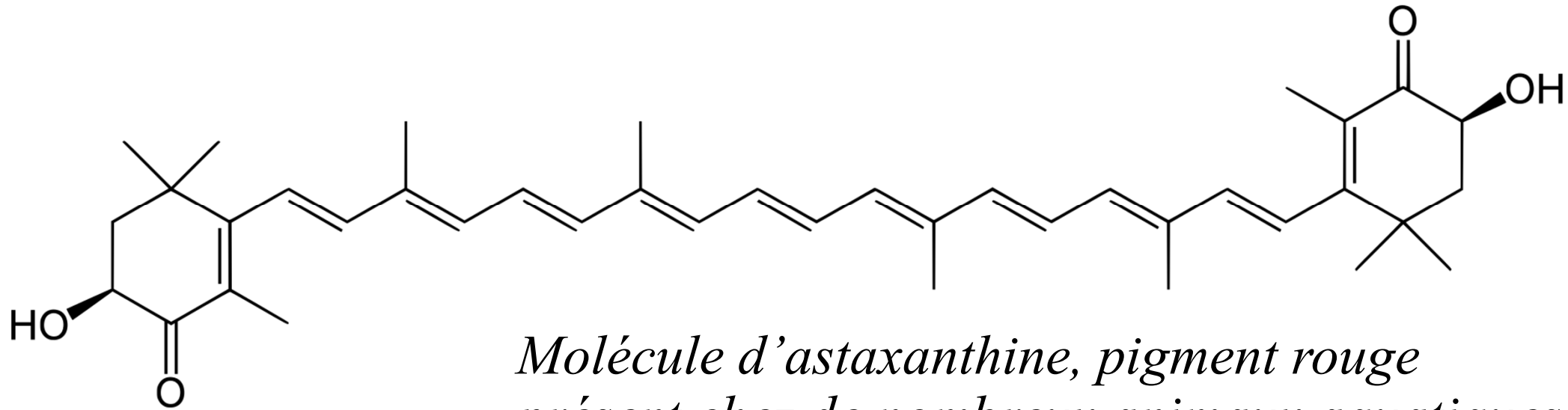


3. b) Puits de potentiel rectangulaire de profondeur infinie

Exemples

- Puits unidimensionnel

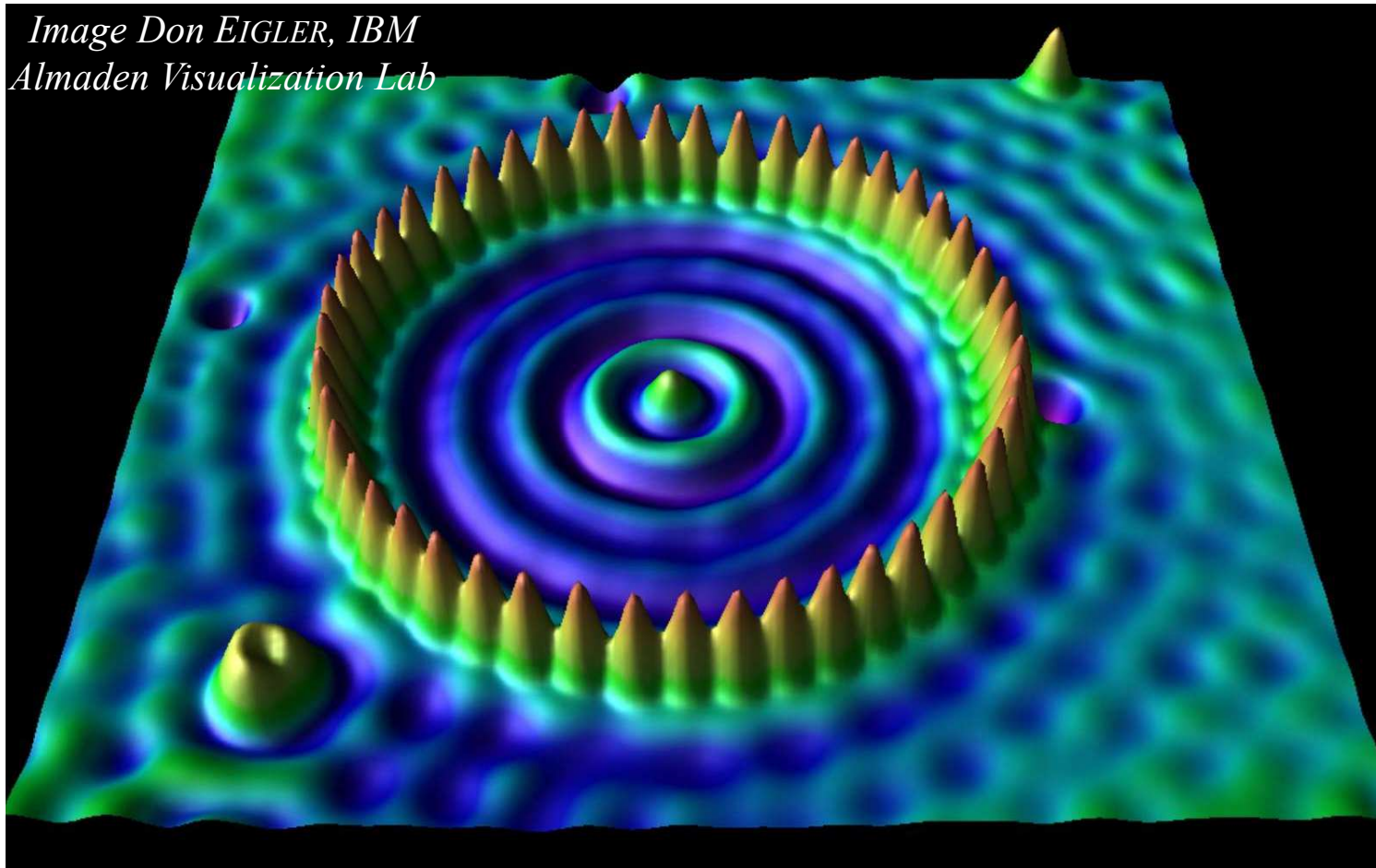
Molécule linéaire à longue chaîne, avec liaisons doubles conjuguées, comme le lycopène (11 liaisons conjuguées), l' α -carotène (10), le β -carotène (11), l'astaxanthine (13), qui absorbent toutes dans le visible



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

3. b) 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.

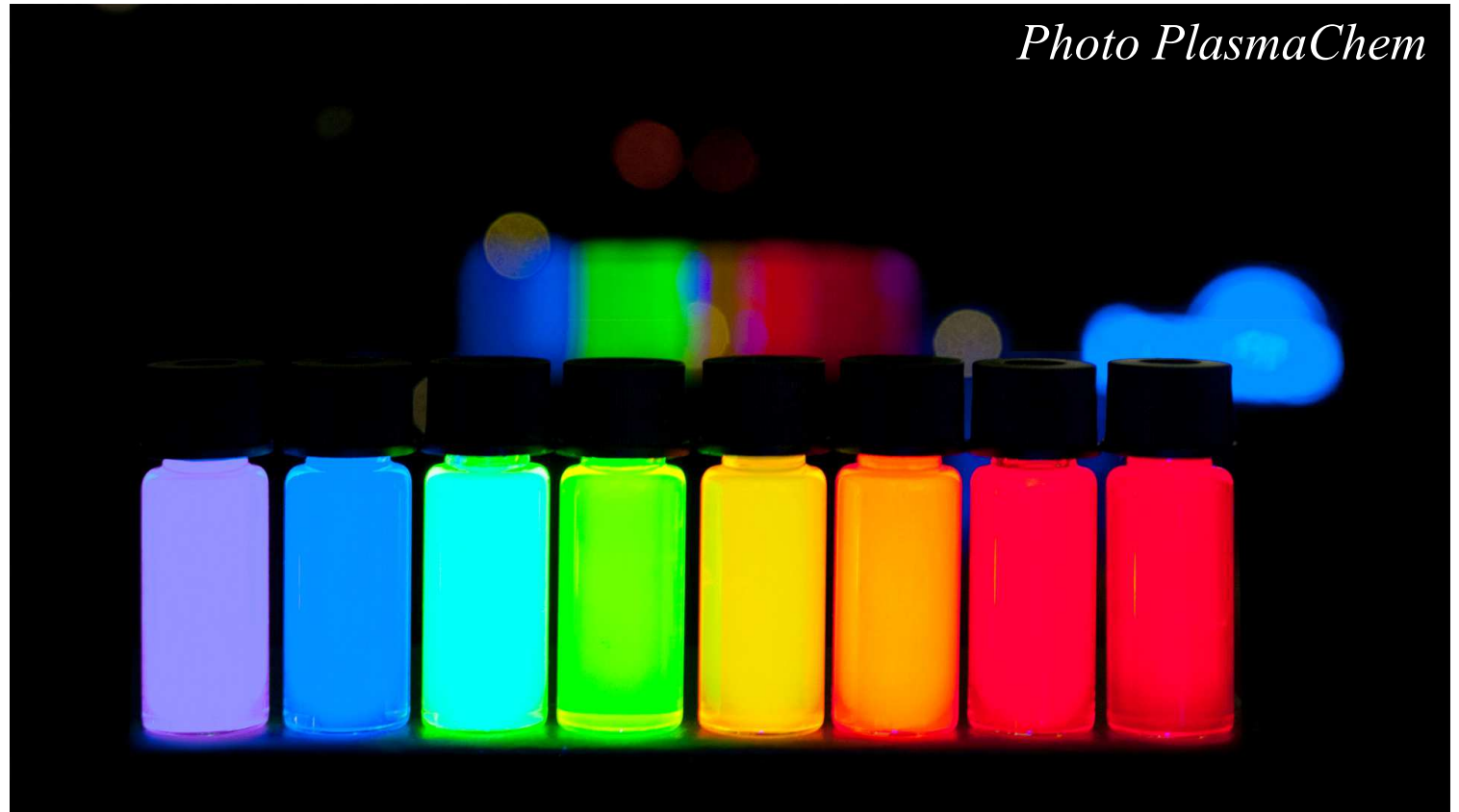
3. b) Puits de potentiel rectangulaire de profondeur infinie

- 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

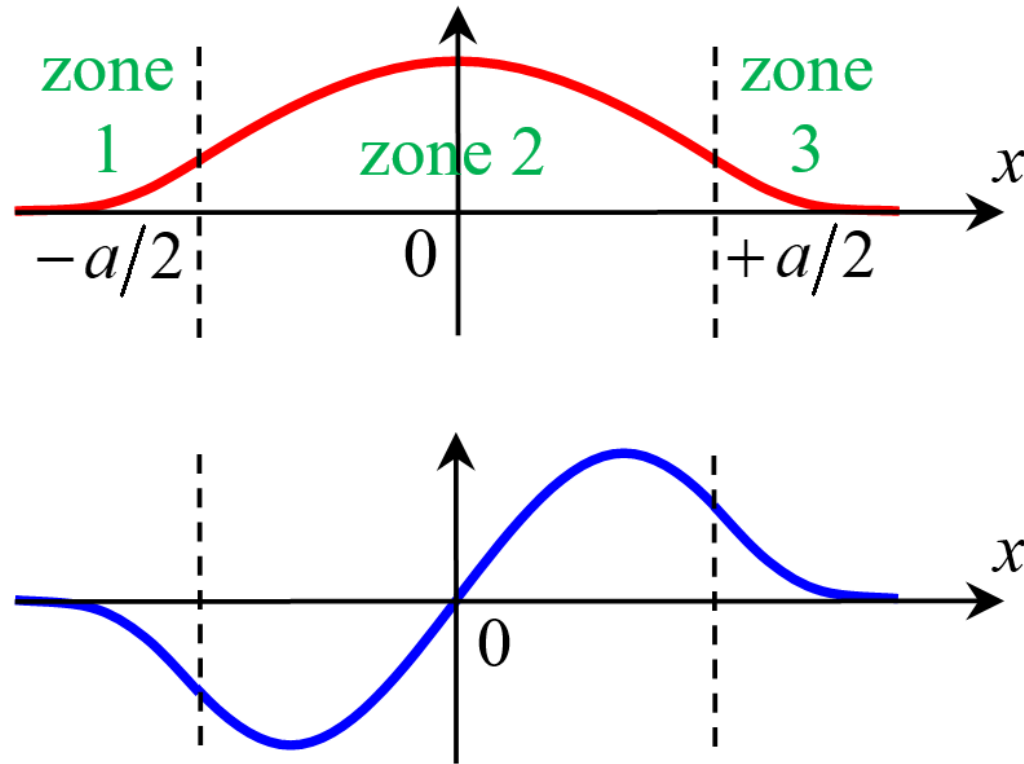
L'excitation par un rayonnement UV crée des paires électron/trou, confinées dans le point quantique de taille a avec une énergie E en $1/a^2$, comme dans le cas 1D. La recombinaison de l'électron et du trou entraîne l'émission d'un photon de longueur d'onde $\lambda = hc/E$.

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



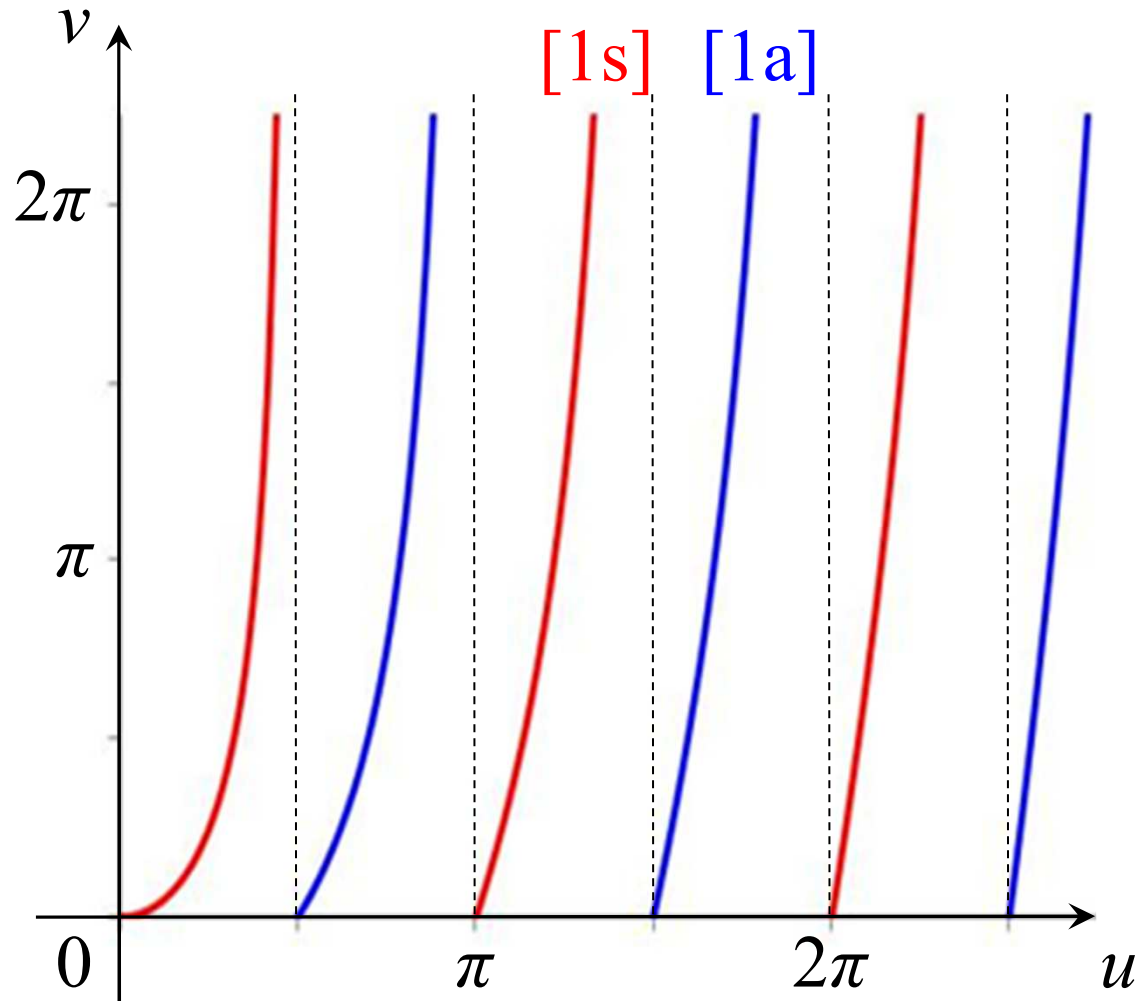
3. c) Puits de potentiel rectangulaire de profondeur finie

Fonction d'onde des deux premiers états stationnaires



3. c) Puits de potentiel rectangulaire de profondeur finie

Méthode graphique pour obtenir les niveaux d'énergie



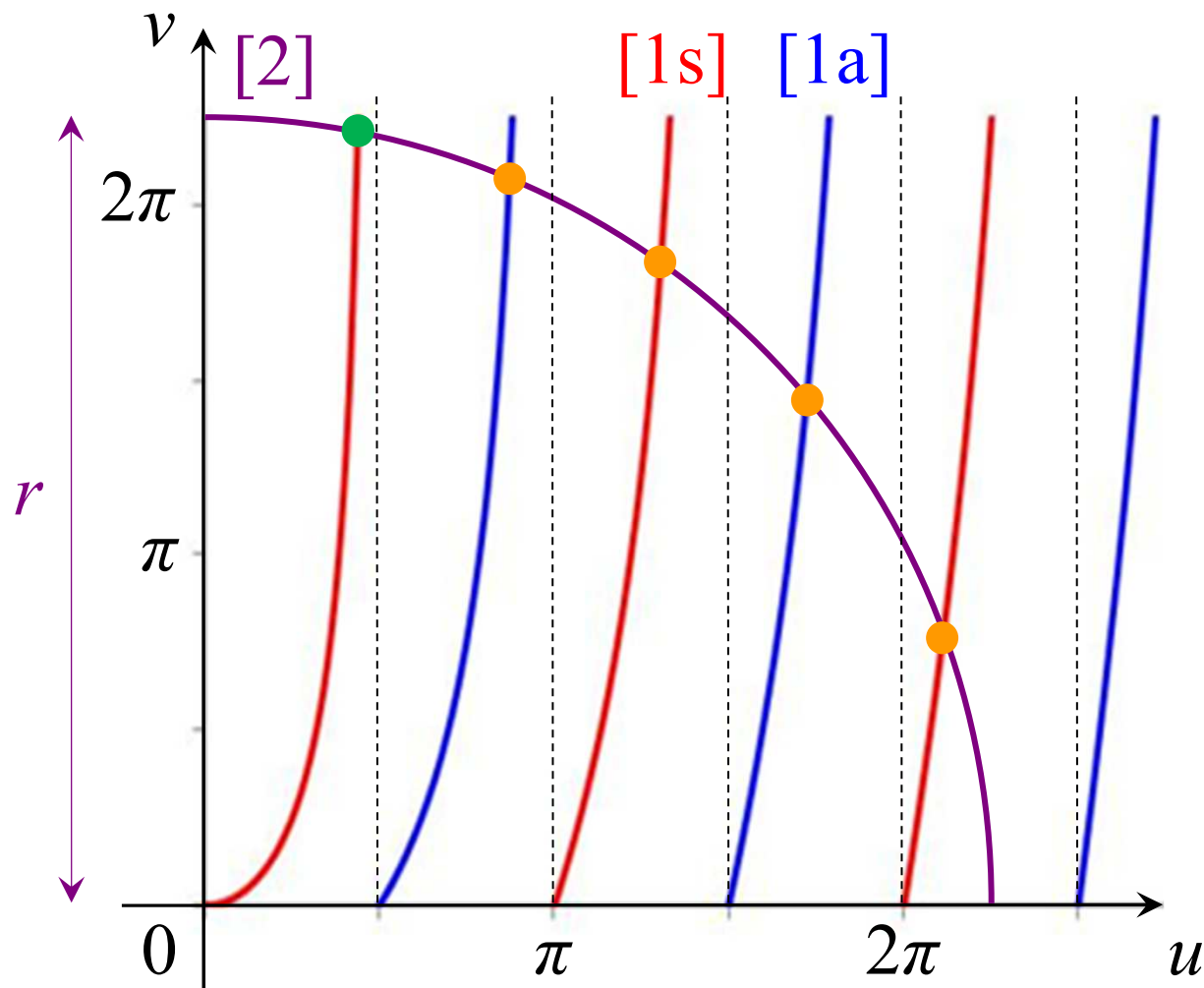
$$v = u \tan(u) \quad [1s]$$

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

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

3. c) Puits de potentiel rectangulaire de profondeur finie

Méthode graphique pour obtenir les niveaux d'énergie



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

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

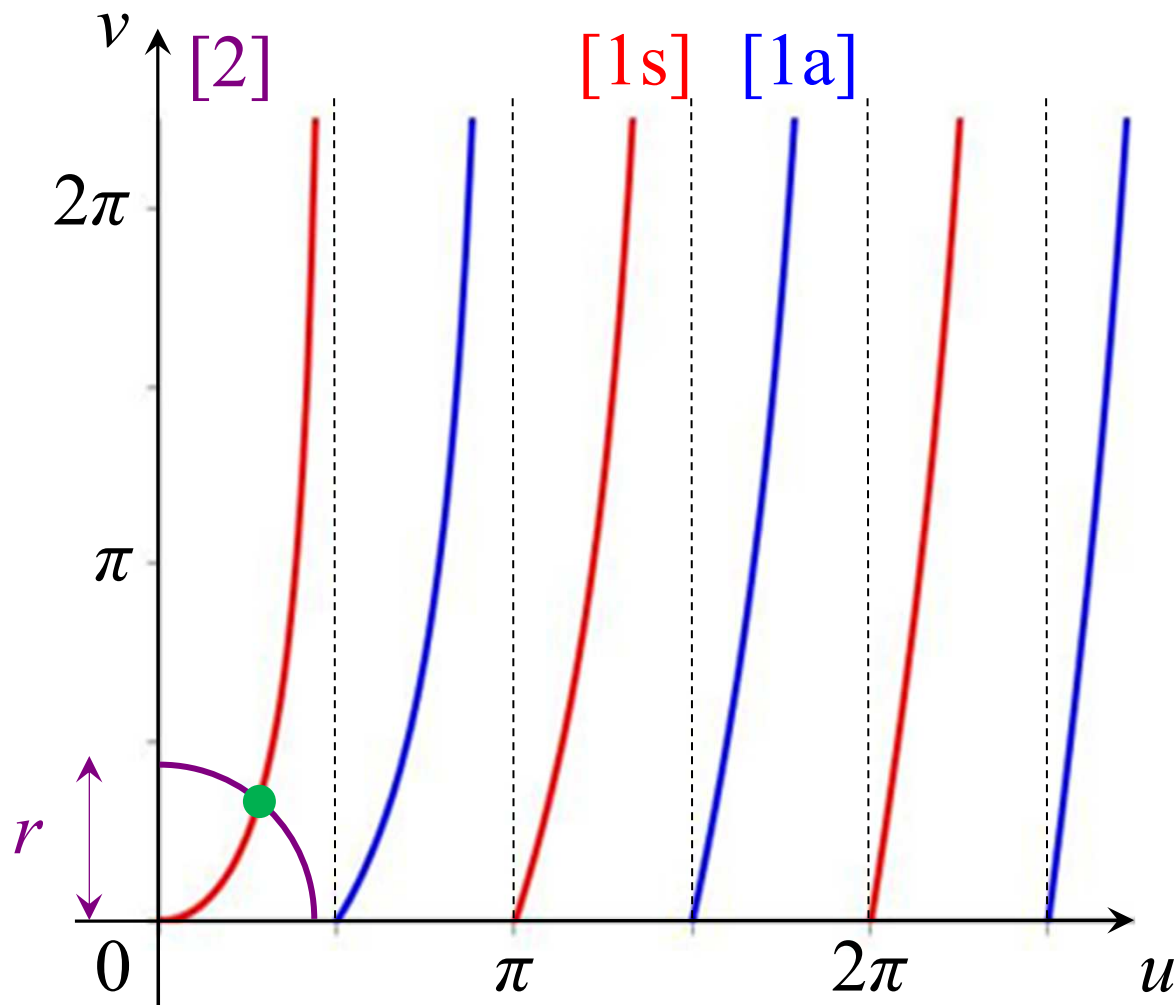
$$u = \frac{ka}{2} \quad v = \frac{qa}{2}$$

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

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

3. c) Puits de potentiel rectangulaire de profondeur finie

Méthode graphique pour obtenir les niveaux d'énergie



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

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

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

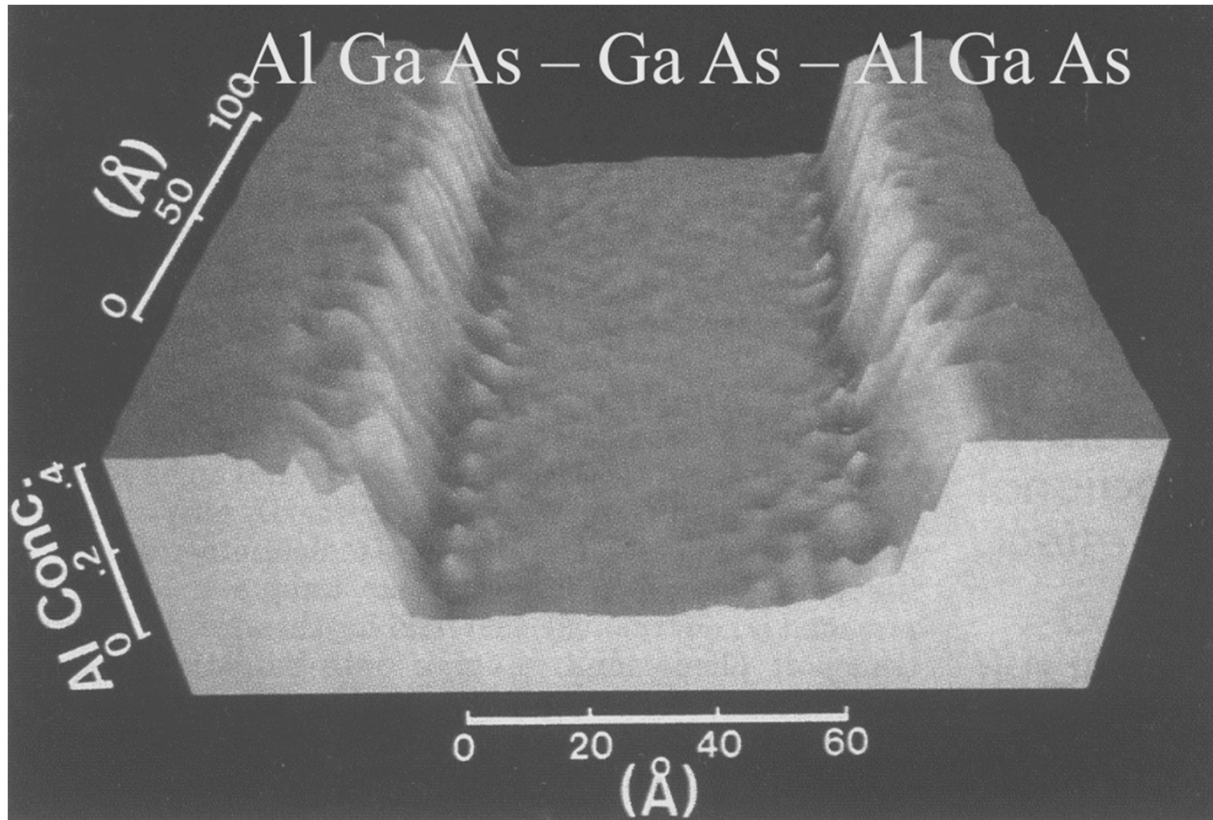
$$u^2 + v^2 = r^2 \quad [2]$$

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

3. c) 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)

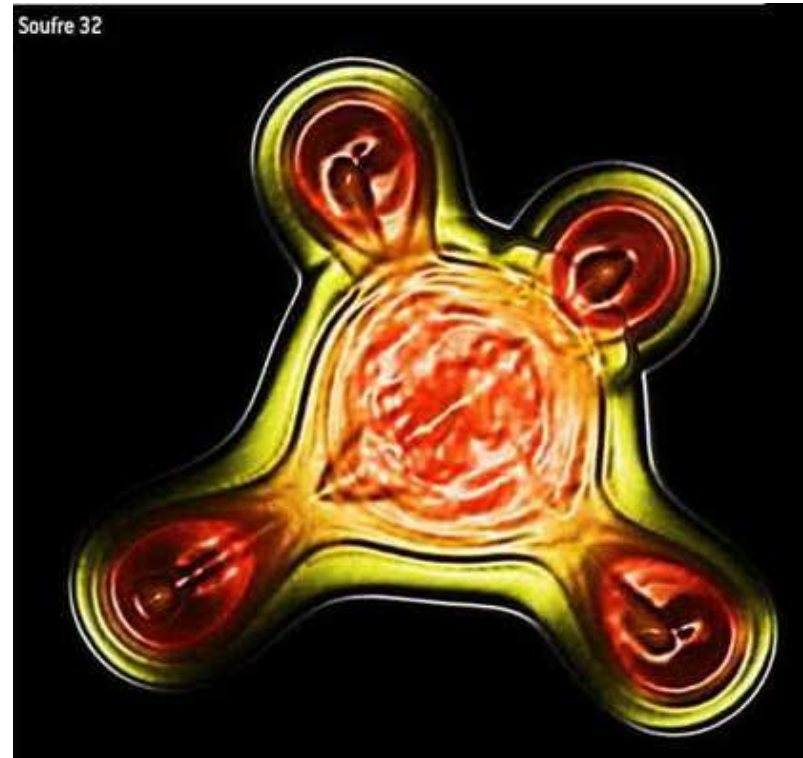


Profil de concentration en atomes d'aluminium, qui correspond à un profil d'énergie potentielle, sensiblement rectangulaire, pour les électrons du matériau

3. c) Puits de potentiel rectangulaire de profondeur finie

Exemples

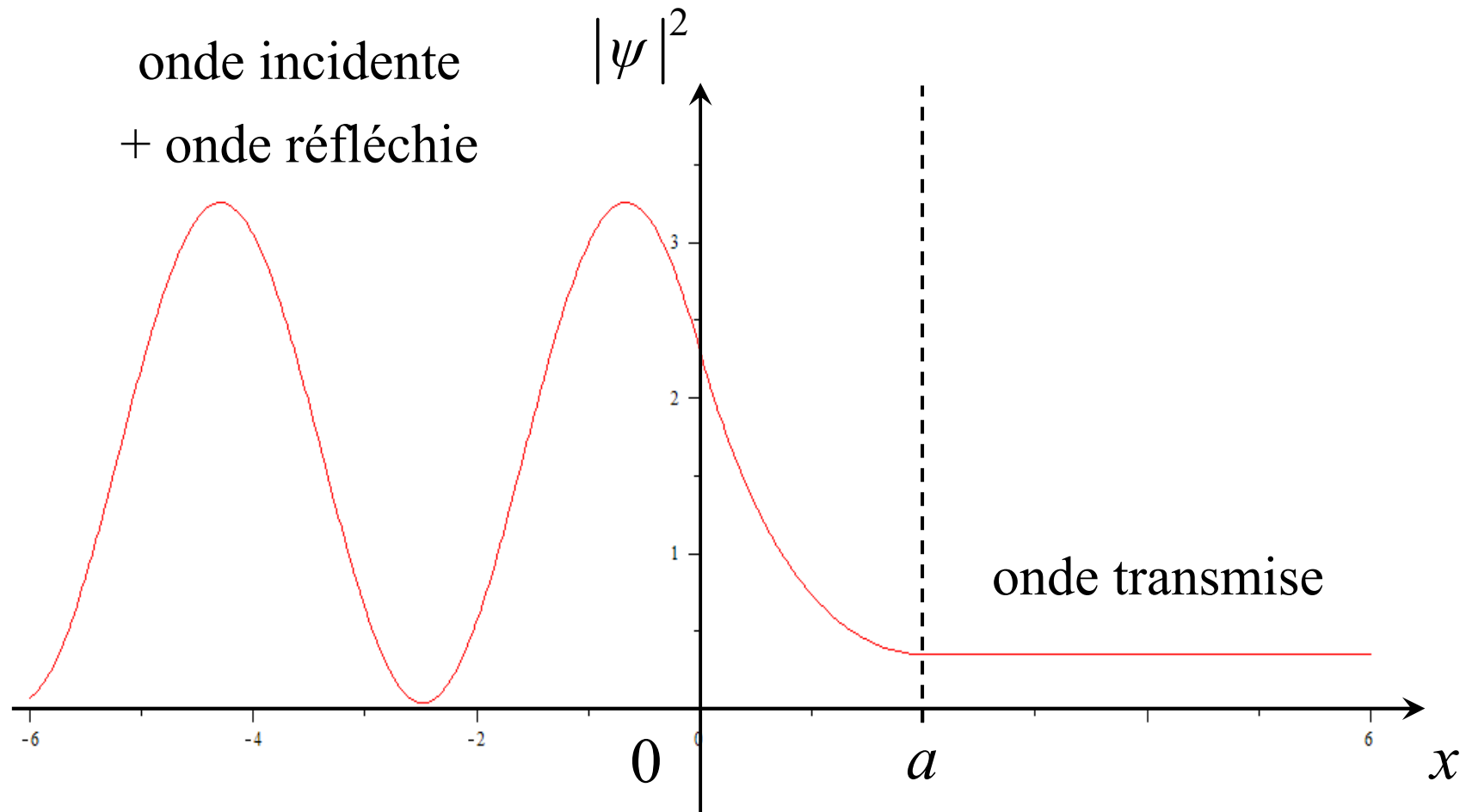
- Puits tridimensionnel : noyau atomique, constituant pour chaque nucléon un puits de potentiel dû à l'interaction forte



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

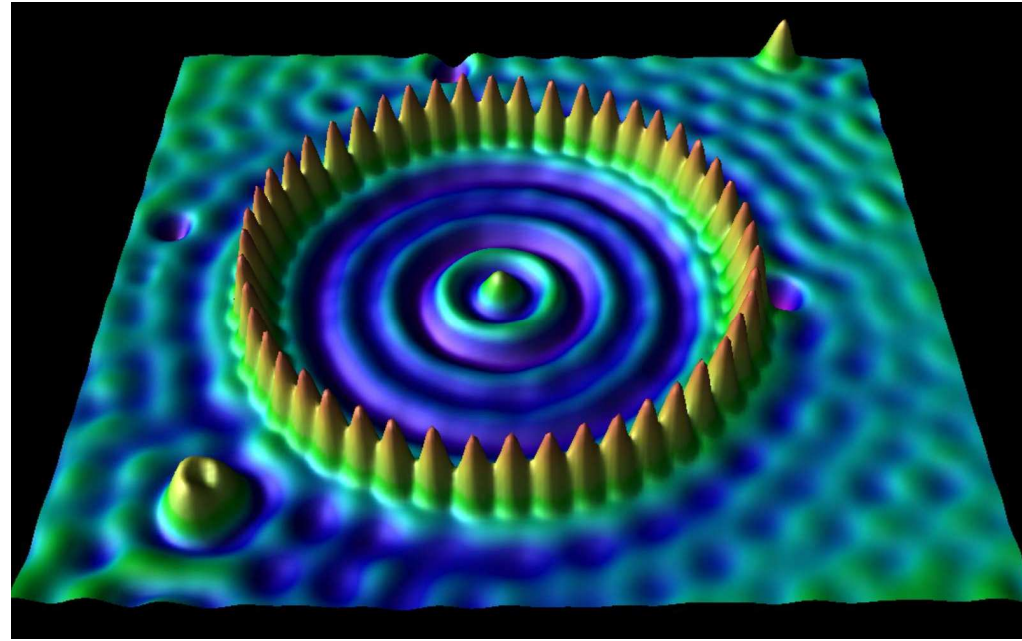
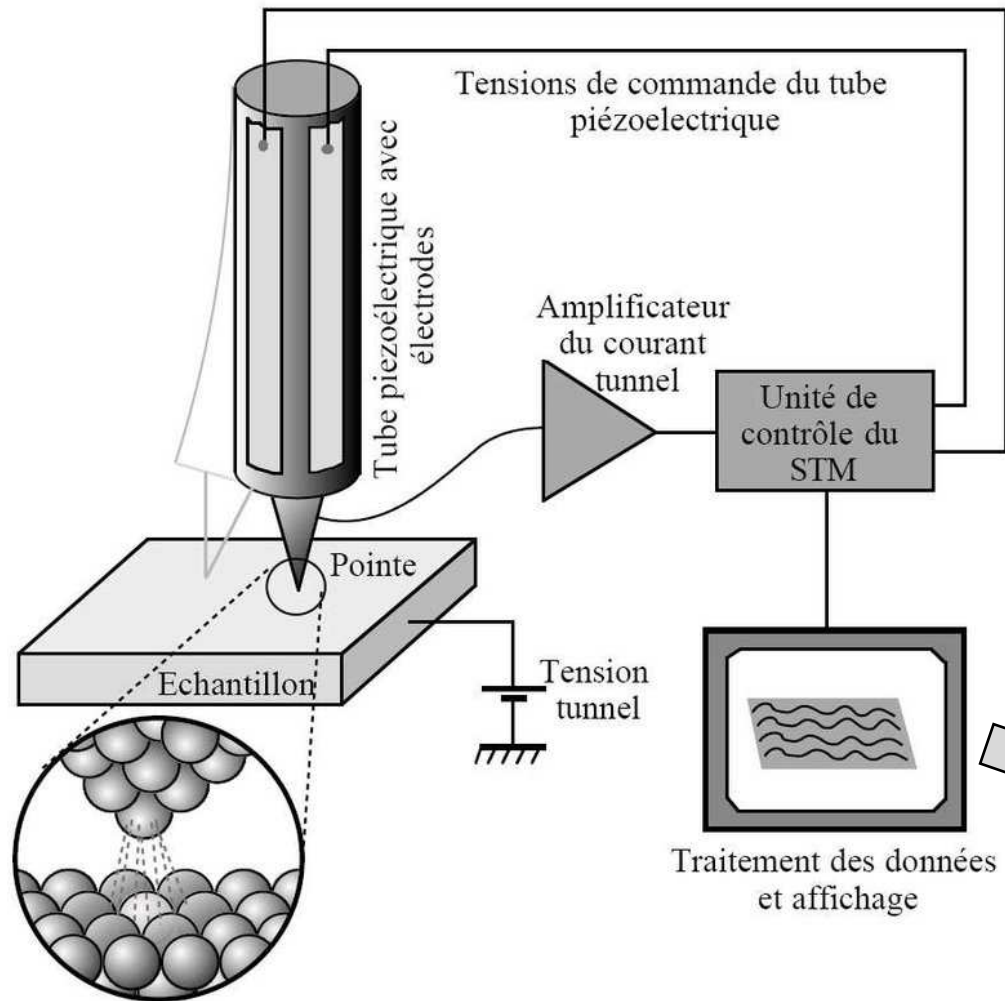
3. d) Barrière de potentiel

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

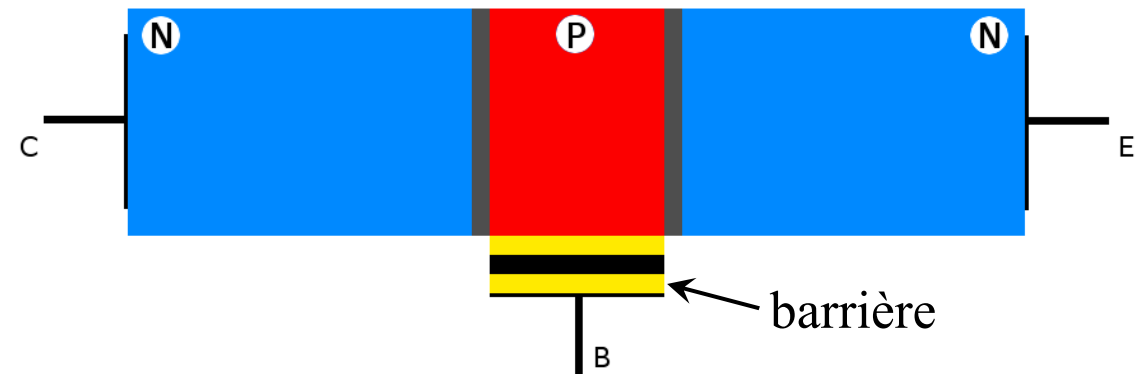


3. d) Barrière de potentiel

- Microscope à effet tunnel

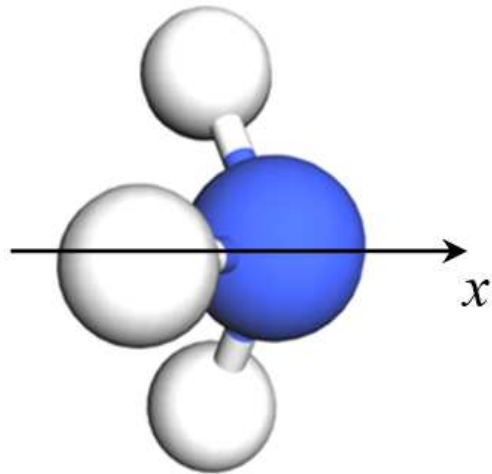


- Gravure par effet tunnel
(mémoire flash de lecteur SSD)

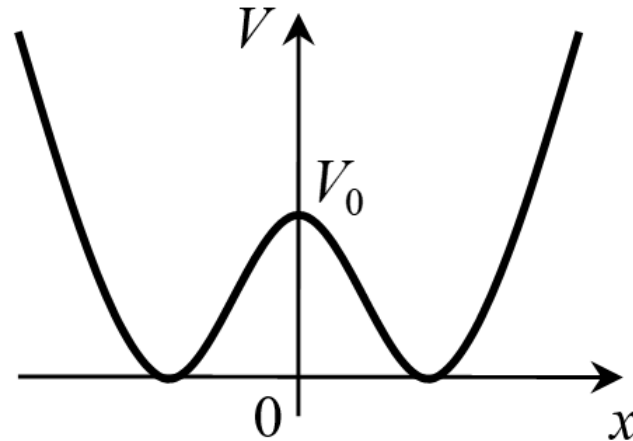


3. e) Superposition d'états stationnaires

- Oscillations de la molécule d'ammoniac

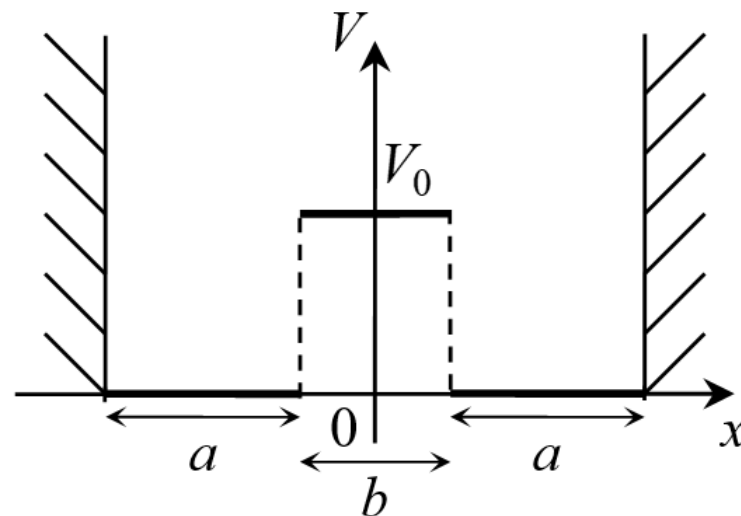
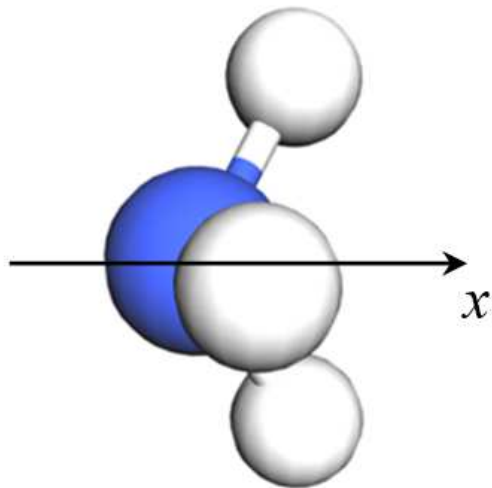
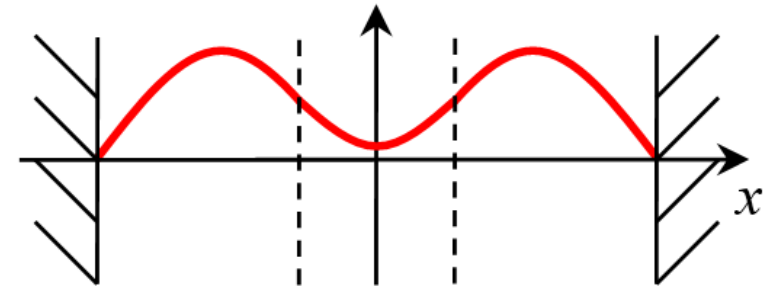


Double puits symétrique



Premier état
symétrique

Fonction d'onde



Premier état
antisymétrique

