

Particule quantique dans des potentiels

Pour l'intégralité des exercices, il y a besoin de l'équation de Schrödinger. Je vous la fournis donc en préambule :

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

Ex. 1 Oscillateur harmonique quantique

On considère une particule quantique, de masse m , soumise à une énergie potentielle de la forme $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$.

Dans un état stationnaire d'énergie E , on écrit la fonction d'onde sous la forme $\psi(x,t) = \Phi(x) e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$.

- Donner un exemple en physique classique, de système soumis à des potentiels de ce type.
- Écrire l'équation de Schrödinger indépendante du temps dans le cas considéré.
- Pour l'état fondamental, la fonction d'onde indépendante du temps vaut $\Phi(x) = A e^{-\frac{x^2}{a^2}}$.
 - Déterminer la constante A .
 - Représenter l'allure de la densité de probabilité de présence de la particule. En déduire, sans calcul, la valeur de la position moyenne $\langle x \rangle$ de la particule.
 - Déterminer l'expression de l'énergie E et de a en fonction de m , ω et $\hbar$.
- Déterminer la moyenne quadratique $\langle x^2 \rangle$.
- Que dire de l'étalement des mesures en quantité de mouvement dans cet état ?

Formulaire : On donne pour $\alpha > 0$:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha u^2} du = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \quad \text{et} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} u^2 e^{-\alpha u^2} du = \sqrt{\frac{\pi}{4\alpha^3}}$$

Correction de l'exercice 1

Rappel sur la méthode à avoir en début d'exercice : représenter graphiquement $V(x)$. Non, ici, ce n'est pas un puits de potentiel, mais une "cuvette" de potentiel : on ne cherche donc pas à introduire une longueur a , qui n'aurait pas de sens.

- Un potentiel quadratique décrit, dans un problème conservatif, un oscillateur harmonique. On peut donc citer n'importe quel oscillateur harmonique de physique classique, par exemple : le système masse-ressort horizontal où $E_p = \frac{1}{2}k(\ell - \ell_0)^2$.
- Pour un état stationnaire, en injectant la forme d'un état stationnaire dans l'équation de Schrödinger, on aboutit à l'équation de Schrödinger stationnaire :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Phi}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \Phi(x) = E\Phi(x)$$

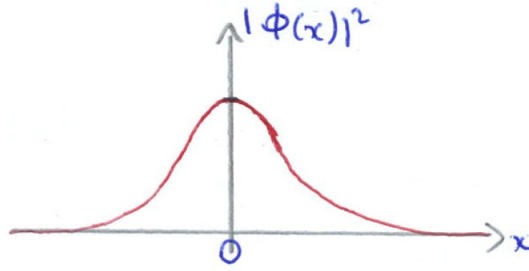
- (a) On cherche une constante dans la fonction d'onde propre : on utilise la condition de normalisation. On a :

$$\int_{x=-\infty}^{+\infty} |\Phi(x)|^2 dx = 1 = |A|^2 \underbrace{\int_{x=-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{2x^2}{a^2}} dx}_{=\sqrt{\frac{\pi a^2}{2}}}$$

On peut en déduire $|A|$. Comme la fonction d'onde est définie à un facteur de phase près, on peut alors

choisir A réel positif : $A = \left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{1/4}$

(b) On doit donc tracer $|\Phi(x)|^2$, qui est une fonction gaussienne (en $e^{-\text{cste} \times x^2}$).



Ceci représente la probabilité de mesurer la particule par unité de longueur. Par symétrie, la position moyenne de toutes les mesures de la particule quantique sera donc nulle : $\langle x \rangle = 0$.

(c) Comme toujours quand on cherche à déterminer l'énergie E d'un état stationnaire, il faut résoudre l'équation de Schrödinger stationnaire. On injecte $\Phi(x)$ fourni dans l'équation de Schrödinger stationnaire :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\left(\frac{2x}{a^2} \right)^2 - \frac{2}{a^2} \right) + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 = E \Rightarrow \left(\frac{1}{2} m \omega^2 - \frac{\hbar^2}{2m a^4} \right) x^2 = E - \frac{\hbar^2}{m a^2}$$

Cette équation étant vraie $\forall x$, on en déduit que :

$$a = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}$$

$$E = \frac{1}{2} \hbar \omega$$

4. Il s'agit ici d'une moyenne probabiliste : on cherche la moyenne des x^2 mesurés sur un grand nombre de mesures. Il s'agit donc de la même procédure qu'en mathématiques :

$$\langle x^2 \rangle = \int_{x=-\infty}^{+\infty} x^2 |\Phi(x)|^2 dx$$

On utilise ensuite le formulaire et on aboutit à $\langle x^2 \rangle = \frac{a^2}{4} = \frac{\hbar}{2m\omega}$.

Si on prend un peu de recul, on prend conscience qu'on nous a fait calculer $\langle x^2 \rangle$ et $\langle x \rangle$: on peut déterminer l'écart-type des mesures de position de la particule : $\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$

5. On cherche l'indétermination sur les mesures en quantité de mouvement, soit Δp_x . On utilise l'inégalité de Heisenberg :

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \Rightarrow \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2\Delta x} = \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}$$

Remarque : En fait, il se trouve que le cas d'une densité de probabilité gaussienne correspond au cas d'égalité dans l'inégalité de Heisenberg, donc on a trouvé exactement la valeur de Δp_x .

Ex. 2 Energie de Fermi pour un métal (*Ecrit Centrale PC 2022*)

Q 32. Pour une solution stationnaire $\psi(x, t) = \varphi(x)\chi(t)$, établir l'équation vérifiée par la fonction d'amplitude $\varphi(x)$ en faisant apparaître l'énergie E de la particule.

IV.B – Gaz d'électrons sur un segment

Les électrons contenus dans un milieu conducteur sont assimilés à des particules évoluant dans une boîte à une dimension de longueur L : $V(x) = 0$ pour $0 < x < L$, $V(x) = +\infty$ en dehors.

La densité d'électrons libres est $N_0 \approx 1 \times 10^{29} \text{ m}^{-3}$ dans un métal. On considérera donc qu'il y en a environ $N_0^{1/3}$ électrons libres par unité de longueur dans cette boîte de longueur L .

Q 33. Avec ce choix d'origine de l'énergie potentielle, l'énergie E de la particule peut-elle être négative ?

Q 34. Justifier que les valeurs prises par la grandeur $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$ sont de la forme $k_n = n k_1$, où n est un entier strictement positif. Exprimer complètement, à un facteur de phase près, les fonctions d'ondes $\psi_n(x, t)$ associées à ces états stationnaires dont les énergies sont notées E_n .

Q 35. Représenter graphiquement la relation $E = f(k)$ en faisant figurer avec une échelle adaptée les trois états stationnaires de plus faible énergie.

NB. Pour les applications numériques qui suivent, les énergies devront être exprimées en eV.

Q 36. Calculer la valeur numérique de E_1 , pour $L = 1 \text{ }\mu\text{m}$. Comparer cette valeur à l'ordre de grandeur de l'énergie d'agitation thermique à $T = 300 \text{ K}$. Pourquoi parle-t-on de quasi-continuum d'énergie au sein du matériau ?

Q 37. À $T = 0 \text{ K}$, les électrons peuplent les états obtenus par énergie croissante, avec au plus deux électrons dans le même état d'énergie d'après le principe d'exclusion de Wolfgang Pauli. En déduire le nombre de Fermi n_F , défini par la valeur maximale atteinte par l'entier n à $T = 0 \text{ K}$. Exprimer l'énergie de Fermi E_F associée en fonction de N_0 , L et E_1 .

Données :

- Masse d'un électron $m = 9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}$
- Constante de Boltzmann $k_B = 1.38 \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$
- Constante de Planck $h = 6.63 \times 10^{-34} \text{ J s}$

Correction de l'exercice 2

32. On injecte : $i\hbar \psi' = -\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' + V \psi$
 $\Rightarrow i\hbar \frac{\psi'}{\psi} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\psi''}{\psi} + V = E = \text{cste énergie de la part.}$
fonction de t fonction de x
 $\Rightarrow \psi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) = 0$

33. $E = E_c + V = E_c + 0 \geq 0 \Rightarrow E \geq 0$

34. $\psi''(x) + k^2 \psi(x) = 0 \Rightarrow \psi(x) = A \cos(kx) + B \sin(kx)$

On $\psi(0) = 0 \Rightarrow A = 0$ et donc $\psi(x) = B \sin(kx)$.

On $\psi(L) = 0 \Rightarrow \begin{cases} B = 0 \text{ exclu } (\psi = 0) \\ \sin(kL) = 0 \Rightarrow k_n = n \frac{\pi}{L} \quad n \in \mathbb{N}^* \quad (n=0 \Rightarrow \psi=0) \\ \Rightarrow k_1 = \frac{\pi}{L} \end{cases}$ ($n=0$ redondant)

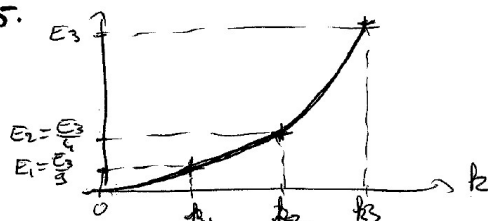
Alors $\psi_n(x) = B_n \sin(n k_1 x)$
 $\psi_n(x) = \text{cste} \exp(-i \frac{E_n}{\hbar} t)$ avec $E_n = \hbar \omega_n = \frac{\hbar^2}{2m} k_n^2 = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$

Puis normalisation : $\int_0^L |\psi|^2 dx = 1 \Rightarrow |\text{cste } B|^2 \times \frac{L}{2} = 1$ (cosus)

$\Rightarrow \psi_n(x,t) = \sqrt{\frac{2}{L}} e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t} \sin(n k_1 x) e^{i \varphi_n}$
 $k_1 = \frac{\pi}{L}$
 $E_n = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} = n^2 E_1$
 $(E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2})$

25.

35.



$(E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2})$

36. $E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} = \frac{\hbar^2}{8mL^2} = 3,7 \cdot 10^{-7} \text{ eV}$

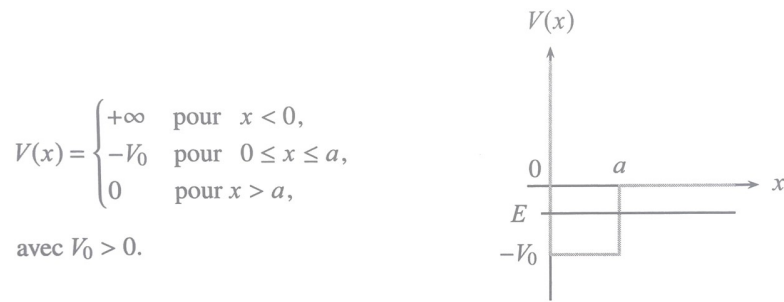
On $k_B T \approx 2,5 \cdot 10^{-2} \text{ eV} \gg E_1 \Rightarrow$ tous les états sont occupés

37. nb d' e^- dans "1 boîte" : $N = N_0^{1/3} L \Rightarrow n_F = \frac{N}{2} = \frac{N_0^{1/3} L}{2}$

Alors $E_F = n_F^2 E_1 = \frac{N_0^{2/3} L^2}{4} E_1$

Ex. 3 Puits mixte infini/fini

On considère les états stationnaires liés d'une particule quantique de masse m dans le puits de potentiel défini par :



La fonction d'onde représentant un état stationnaire d'énergie E s'écrit $\psi(x,t) = \varphi(x) e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$.

1. Quelles inégalités vérifie l'énergie E de la particule dans un état lié ?

On pose alors $k = \frac{\sqrt{2m(V_0 + E)}}{\hbar} > 0$ et $q = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} > 0$.

2. Expliciter les conditions limites portant sur la partie spatiale $\varphi(x)$ de la fonction d'onde.
3. Déterminer la forme de la partie spatiale de la fonction d'onde dans les différentes régions de l'espace. Commenter la forme de la fonction d'onde dans la région $x > a$ et donner l'expression de la profondeur de pénétration δ de la particule dans cette région.
4. En utilisant les conditions limites, montrer que les états liés vérifient

$$q = -k \cotan(ka)$$

De par leur définition, on a aussi $k^2 + q^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}$.

5. En utilisant le graphe du cours (partie : résolution graphique du puits de potentiel fini), déterminer que pour qu'il existe un unique état lié dans le puits mixte, il est nécessaire que V_0 soit compris entre deux valeurs $V_{\min}$ et $V_{\max}$ dont on donnera les expressions en fonction de m , a et de constantes fondamentales.

On utilise ce modèle du puits mixte pour décrire l'interaction nucléaire forte entre un proton et un neutron dans un noyau d'hydrogène.

6. (a) Expliquer en quoi ce potentiel peut modéliser (simplement) l'interaction nucléaire forte.
 (b) L'expérience montre qu'il existe un unique état lié, appelé "deutéron". On donne $a = 2.8 \times 10^{-15}$ m et m la masse réduite du proton et du neutron $m = \frac{m_n}{2}$ avec $m_n = 1.7 \times 10^{-27}$ kg la masse d'un nucléon. Déterminer les valeurs numériques de $V_{\min}$ et $V_{\max}$ en eV.
 (c) L'énergie de liaison du deutéron est $E = -2.2$ MeV. En déduire la valeur de q et donc de δ . Estimer également avec la question précédente les valeurs minimale et maximale possibles pour k .
 (d) En utilisant une résolution numérique à la calculatrice, déterminer la valeur numérique de V_0 .

Donnée : Constante de Planck $\hbar = 6.63 \times 10^{-34}$ Js

Correction de l'exercice 3

1. Pour les états liés, $-V_0 < E < 0$. **Remarque :** Les cas d'égalité ne mènent, en règle général, à aucune solution acceptable à cause soit des conditions limites, soit de la condition de normalisation. Le seul moyen que ces cas soient acceptables est que a vaille précisément une certaine valeur. On les exclut donc directement.
2. CL en $x = 0$ (sauf de potentiel infini) : $\varphi(x = 0^+) = \varphi(x = 0^-) = 0$
 CL en $x = a$ (saut de potentiel fini) : $\varphi(x = a^-) = \varphi(x = a^+)$ et $\frac{\partial \varphi}{\partial x}(x = a^-) = \frac{\partial \varphi}{\partial x}(x = a^+)$
3. Région I : $0 \leq x \leq a$:

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + k^2 \varphi(x) = 0 \Rightarrow \varphi(x) = A \cos(kx) + B \sin(kx) = B \sin(kx)$$

en utilisant le fait que $\varphi(x = 0^+) = 0$.

Région II : $x \geq a$:

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} - q^2 \varphi(x) = 0 \Rightarrow \varphi(x) = C e^{qx} + D e^{-qx} = D e^{-qx}$$

en imposant la non divergence de la densité de probabilité en $x = +\infty$.

Commentaire :

La fonction d'onde dans la région $x \geq a$ est donc du type onde évanescence : on est susceptible de détecter la particule avec une bonne probabilité dans une zone d'épaisseur caractéristique $\delta = 1/q = \frac{\hbar}{\sqrt{-2mE}}$ à proximité du puits.

4. Avec les CL en $x = a$, on détermine :

$$\begin{cases} B \sin(ka) = D e^{-qa} \\ Bk \cos(ka) = -qD e^{-qa} \end{cases}$$

Donc, en éliminant D :

$$Bk \cos(ka) = -qB \sin(ka) \Rightarrow q = -k \cotan(ka)$$

car $B \neq 0$ pour éliminer la solution triviale.

5. On utilise le graphe du cours avec $X = ka$ et $Y = qa$ en ne conservant que les solutions antisymétriques (les solutions symétriques ne vérifient pas le même système d'équations). Le rayon du cercle est donc $\sqrt{2mV_0} \frac{a}{\hbar}$. Pour qu'il y ait une unique solution, il faut que

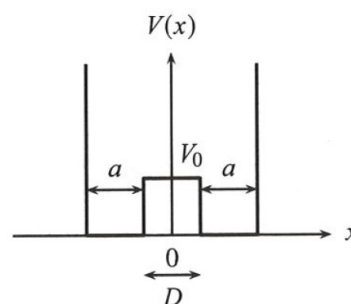
$$\frac{\pi}{2} \leq \sqrt{2mV_0} \frac{a}{\hbar} \leq \frac{3\pi}{2} \Rightarrow V_{\min} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} \leq V_0 \leq V_{\max} = 9V_{\min}$$

6. (a) Interaction nucléaire forte attractive (d'où un potentiel négatif) mais de courte portée (caractérisée par a), puis aucune interaction hors du noyau. a représente donc la taille du noyau.
- (b) $V_{\min} = 13 \text{ MeV}$ et $V_{\max} = 116 \text{ MeV}$
- (c) $q = 2.3 \times 10^{14} \text{ m}^{-1}$ et donc $\delta = 4.3 \times 10^{-15} \text{ m}$. On détermine $k_{\min} = 5.1 \times 10^{14} \text{ m}^{-1}$ et $k_{\max} = 1.7 \times 10^{15} \text{ m}^{-1}$
- (d) En utilisant le solveur de la calculatrice : $k = 6.8 \times 10^{14} \text{ m}^{-1}$ et $V_0 + E = 19 \text{ MeV}$ donc $V_0 = 21 \text{ MeV}$

Ex. 4 Double puits de potentiel

On étudie l'évolution d'une particule quantique de masse m dans un double puits de potentiel, représenté ci-contre. On considère un état

stationnaire, de fonction d'onde $\psi(x,t) = \varphi(x) e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$, où l'énergie E de la particule est faible devant la hauteur V_0 de la barrière de potentiel : $E \ll V_0$.



1. Pourquoi peut-on se limiter à chercher des états symétriques et antisymétriques par rapport à $x = 0$?

Dans un premier temps, on se limite à étudier un état symétrique par rapport à $x = 0$, c'est-à-dire que la partie spatiale de la fonction d'onde est paire.

On pose $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ et $q = \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar}$.

2. Montrer que la partie spatiale de la fonction d'onde dans la région I ($-a - \frac{D}{2} \leq x \leq -\frac{D}{2}$) s'écrit

$$\varphi(x) = A \sin \left(k \left(x + a + \frac{D}{2} \right) \right)$$

avec A une constante. Déterminer l'expression de la partie spatiale de la fonction d'onde dans les autres régions de l'espace.

3. Ecrire les conditions de raccordement et en déduire la relation de quantification, dans la limite où $qD \gg 1$:

$$\tan(ka) = -\frac{k}{q} (1 + 2 e^{-qD})$$

4. En supposant $qD \gg 1$ et $qa \gg 1$, tracer les graphes de $ka \mapsto \tan(ka)$ et $ka \mapsto -\frac{ka}{qa} (1 + 2 e^{-qD})$ et en déduire grossièrement l'expression de k pour l'état fondamental symétrique.

Une résolution approchée donne l'expression de l'énergie de l'état fondamental symétrique (on ne cherchera pas à déterminer cette expression)

$$E_s = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \left(1 - 2 \frac{1 + 2 e^{-qD}}{qa} \right)$$

L'énergie E_a de l'état stationnaire antisymétrique de plus faible énergie peut être évalué en suivant une démarche similaire. On peut alors calculer la différence d'énergies

$$\Delta E = E_a - E_s = \frac{\hbar^2}{mq a^3} e^{-qD}$$

5. On considère un état de la particule quantique défini par la superposition des deux états symétrique et antisymétrique d'énergies respectives E_s et E_a . Montrer que la densité de probabilité de présence oscille à une fréquence f dont on donnera l'expression.
6. **Application :** Ce modèle de puits de potentiel permet de décrire l'inversion de Walden de la molécule d'ammoniac (passage de l'atome d'azote de part et d'autre du plan défini par les atomes d'hydrogène). Quelle est l'influence de la hauteur et de la largeur de la barrière de potentiel sur la fréquence d'oscillation ?

Correction de l'exercice 4

1. Le puits de potentiel est symétrique par rapport à $x = 0$, ainsi la densité de probabilité de présence doit aussi être symétrique par rapport à $x = 0$. Cela permet de se restreindre à l'étude des états symétriques et antisymétriques.
2. On a nécessairement $E > 0$. Equation de Schrödinger stationnaire, dans la région I :

$$\frac{d^2 \varphi}{dx^2} + k^2 \varphi(x) = 0$$

Donc, la fonction d'onde propre est de la forme :

$$\varphi(x) = A \sin(kx + \text{cste})$$

(cette écriture est ici la plus pratique pour résoudre ce problème, et l'énoncé nous invite à choisir une solution de cette forme).

On détermine cste avec la CL en $x = -a - \frac{D}{2}$: le potentiel tendant vers $+\infty$, la fonction d'onde propre est continue en $x = -a - \frac{D}{2}$: $\varphi(x = -a - \frac{D}{2}) = 0$. Ainsi, $\text{cste} = -k(a + \frac{D}{2}) + n\pi$. Comme d'habitude quand on cherche une phase à l'origine, on choisit $\text{cste} = -k(a + \frac{D}{2})$. Ainsi, dans la région I :

$$\varphi(x) = A \sin \left(k \left(x + a + \frac{D}{2} \right) \right)$$

Région III ($\frac{D}{2} \leq x \leq a + \frac{D}{2}$) :

La fonction d'onde étant paire : $\varphi(x) = A \sin \left(k \left(-x + a + \frac{D}{2} \right) \right) = -A \sin \left(k \left(x - a - \frac{D}{2} \right) \right)$

Région II ($-\frac{D}{2} \leq x \leq \frac{D}{2}$) :

L'équation de Schrödinger stationnaire est alors :

$$\frac{d^2 \varphi}{dx^2} - \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} \varphi(x) = 0 \simeq \frac{d^2 \varphi}{dx^2} - \frac{2mV_0}{\hbar^2} \varphi(x) = \frac{d^2 \varphi}{dx^2} - q^2 \varphi(x)$$

car $E \ll V_0$. Ainsi, la solution est de la forme :

$$\varphi(x) = B \cosh(qx) + C \sinh(qx) = B \cosh(qx)$$

car on cherche uniquement des fonctions d'onde propres paires.

3. On écrit les CL en $x = \frac{D}{2}$ (les CL en $x = -\frac{D}{2}$ donneront les mêmes relations comme on a choisi des fonctions d'onde propres paires) :

$$\begin{cases} \varphi(x = D/2^-) = \varphi(x = D/2^+) \Rightarrow B \cosh\left(\frac{qD}{2}\right) = A \sin(ka) \\ \frac{d\varphi}{dx}(x = D/2^-) = \frac{d\varphi}{dx}(x = D/2^+) \Rightarrow qB \sinh\left(\frac{qD}{2}\right) = -Ak \cos(ka) \end{cases}$$

En faisant le rapport de ces deux équations, on en déduit : $\frac{1}{q \tanh\left(\frac{qD}{2}\right)} = -\frac{1}{k} \tan(ka)$.

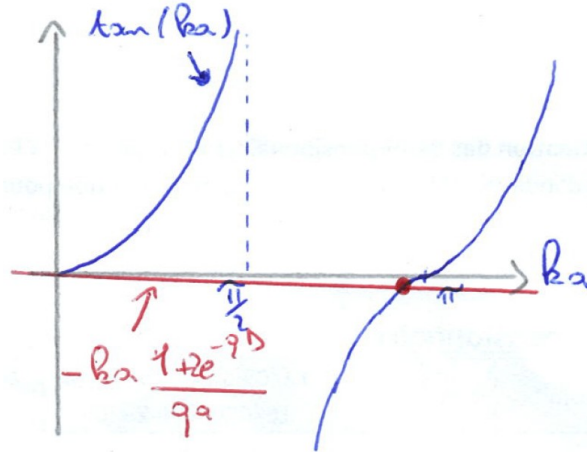
Dans la limite où $qD \gg 1$ (barrière centrale épaisse devant la profondeur de pénétration), alors $e^{-qD} \ll 1$ et donc un DL mène à

$$\frac{1}{\tanh\left(\frac{qD}{2}\right)} = \frac{e^{qD/2} + e^{-qD/2}}{e^{qD/2} - e^{-qD/2}} = \frac{1 + e^{-qD}}{1 - e^{-qD}} \sim (1 + e^{-qD})(1 + e^{-qD}) \sim 1 + 2e^{-qD}$$

On aboutit à

$$\tan(ka) = -\frac{k}{q} (1 + 2e^{-qD})$$

4. Bien remarquer que q est une constante caractérisant la hauteur V_0 de la barrière, et donc que $ka \mapsto -ka \frac{1 + 2e^{-qD}}{qa}$ est une fonction linéaire décroissante de pente $-\frac{1 + 2e^{-qD}}{qa}$. Au vu des approximations choisies, cette pente est en valeur absolue très faible devant 1 : la droite représentative est quasiment confondue avec l'axe des abscisses.



Pour l'état fondamental symétrique, on en déduit que $ka \simeq \pi \Rightarrow k \simeq \frac{\pi}{a}$.

Remarque : On retrouve bien le terme prédominant dans l'expression de E_s . Pour avoir l'expression plus complète de E_s , il faudrait déterminer k avec un DL.

5. On superpose les fonctions d'onde des premiers états symétrique et antisymétrique (attention, pas les fonctions d'onde propres, car les énergies E_a et E_s sont différentes) :

$$\psi(x,t) = \alpha \varphi_s(x) e^{-\frac{iE_s t}{\hbar}} + \beta \varphi_a(x) e^{-\frac{iE_a t}{\hbar}}$$

avec $\varphi_s(x)$ la fonction d'onde propre associée à l'état symétrique, et $\varphi_a(x)$ celle associée à l'état antisymétrique. On cherche la densité de probabilité :

$$\begin{aligned} |\psi(x,t)|^2 &= \psi(x,t) \psi^*(x,t) = |\alpha \varphi_s(x)|^2 + |\beta \varphi_a(x)|^2 + 2 \operatorname{Re} \left(\alpha \beta^* \varphi_s(x) \varphi_a^*(x) e^{\frac{i\Delta E t}{\hbar}} \right) \\ &= |\alpha \beta^* \varphi_s(x) \varphi_a^*(x)| \cos \left(\frac{\Delta E t}{\hbar} + \text{cste} \right) \end{aligned}$$

où on détermine la partie réelle en décomposant le complexe en son module et son argument (la constante représente donc l'argument (indépendant du temps) de $\alpha\beta^*\varphi_s(x)\varphi_a^*(x)$). Ainsi, en ne s'intéressant qu'aux aspects temporels, la densité de probabilité de présence oscille à une pulsation $\omega = \frac{\Delta E}{\hbar}$, soit une fréquence $f = \frac{\Delta E}{2\pi\hbar} = \frac{\Delta E}{h}$.

6. Remarque en passant : le passage de l'atome d'azote de part et d'autre du plan défini par les atomes d'hydrogène est une manifestation de l'effet tunnel.
 - Si la hauteur V_0 de la barrière augmente, alors q augmente, et donc ΔE diminue : plus la hauteur de la barrière est importante, plus la fréquence d'oscillation diminue. Sur la durée de l'expérience, il sera alors possible que l'azote reste d'un seul côté du plan défini par les atomes d'hydrogène : la barrière est trop haute et il la franchirait après un temps très long.
 - Plus la barrière est large, plus D augmente, et plus f diminue aussi : mêmes constats que ci-dessus.

Ex. 5 Courant tunnel

On considère une barrière de potentiel de hauteur $V_0 = 2.0 \text{ eV}$ et de largeur $a = 1.0 \text{ nm}$ sur laquelle on envoie un électron de masse $m = 9.1 \times 10^{-31} \text{ kg}$. Le potentiel $V(x)$ est donc défini par :

$$\begin{cases} V(x) = 0 & \text{si } x < -a/2 \\ V(x) = V_0 & \text{si } -a/2 < x < a/2 \\ V(x) = 0 & \text{si } x > a/2 \end{cases}$$

On s'intéresse à un état stationnaire d'énergie $E = 1.0 \text{ eV}$ de fonction d'onde $\psi(x,t) = \Phi(x) e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$.

1. Exprimer la forme de la partie spatiale de la fonction d'onde dans la région $-a/2 < x < a/2$. Commenter et donner l'expression de la profondeur de pénétration δ en fonction de m , E , V_0 et $\hbar$.
2. Justifier que l'on peut se placer dans l'approximation d'une barrière épaisse.

Dans l'approximation d'une barrière épaisse, on peut montrer que le coefficient de transmission de la barrière de potentiel par effet tunnel s'écrit :

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

3. On envoie un faisceau d'électrons d'intensité $I = 0.1 \text{ mA}$ sur cette barrière de potentiel. Calculer l'intensité du courant tunnel qui émerge de l'autre côté de la barrière.
4. Toutes choses égales par ailleurs, on remplace les électrons par des protons de masse $m = 1.7 \times 10^{-27} \text{ kg}$. Déterminer la nouvelle valeur de l'intensité du courant tunnel émergeant de l'autre côté de la barrière.

Donnée : Constante de Planck : $h = 6.63 \times 10^{-34} \text{ Js}$

Correction de l'exercice 5

1. On doit résoudre l'équation de Schrödinger stationnaire dans la région $[-a/2, a/2]$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Phi}{dx^2} + V_0\Phi(x) = E\Phi(x) \Rightarrow \frac{d^2\Phi}{dx^2} - q^2\Phi(x) = 0$$

avec $q = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$. La forme de $\Phi(x)$ est alors :

$$\Phi(x) = A e^{qx} + B e^{-qx} = A e^{x/\delta} + B e^{-x/\delta} \quad \text{avec} \quad \delta = \frac{1}{q} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}$$

En passant à la fonction d'onde $\psi(x,t) = A e^{qx} e^{-i\omega t} + B e^{-qx} e^{-i\omega t}$ (où $E = \hbar\omega$), on reconnaît une superposition d'ondes évanescentes dans la région $[-a/2, a/2]$.

2. On souhaite vérifier que $a \gg \delta$. A.N. : $\delta = 0.20 \text{ nm}$. On a donc $a \simeq 5\delta$: en pratique, cela est suffisant pour se placer dans l'approximation d'une barrière épaisse (le coefficient de transmission T contient un $\sinh$ dans lequel $e^{-a/\delta} \ll e^{a/\delta}$).
3. Le coefficient T caractérise la probabilité qu'un électron incident traverse la barrière de potentiel. Or, l'intensité électrique représente un nombre de charges passant à travers une surface par unité de temps. Donc, après la barrière, on obtient le courant tunnel : $I_{\text{tunnel}} = TI$. A.N. : $T = 1.4 \times 10^{-4}$ et donc $I_{\text{tunnel}} = 14 \text{ nA}$, ce qui est très faible, mais mesurable en laboratoire (pas en salle de TP de lycée).

4. En tapant le calcul à la calculatrice, celle-ci donne $T = 0...$ En effet, $\frac{2a}{\delta} = 442...$ Donc, on ruse et on calcule y tel que $10^y = e^{-\frac{2a}{\delta}} = e^{-442} \Rightarrow y = \frac{\ln(e^{-442})}{\ln(10)} = 192$. Ainsi : $T = 4 \times 10^{-192}$, et donc $I_{\text{tunnel}} = 4 \times 10^{-196}$ A : totalement indétectable ! On retrouve le fait que les particules de faible masse franchissent avec une plus grande probabilité une barrière de potentiel par effet tunnel.

Ex. 6 Marche de potentiel

On étudie le mouvement d'une particule quantique de masse m dans le potentiel d'énergie $V(x)$ suivant, appelé marche de potentiel :

$$\begin{cases} V(x < 0) = 0 \\ V(x \geq 0) = V_0 > 0 \end{cases}$$

On envisage, dans un premier temps, le cas d'une particule incidente envoyée depuis $x = -\infty$ et d'énergie $E > V_0$.

1. Décrire le mouvement de la particule si celle-ci était décrite par la physique classique. On précisera la vitesse que la particule aurait dans les différentes régions de l'espace.

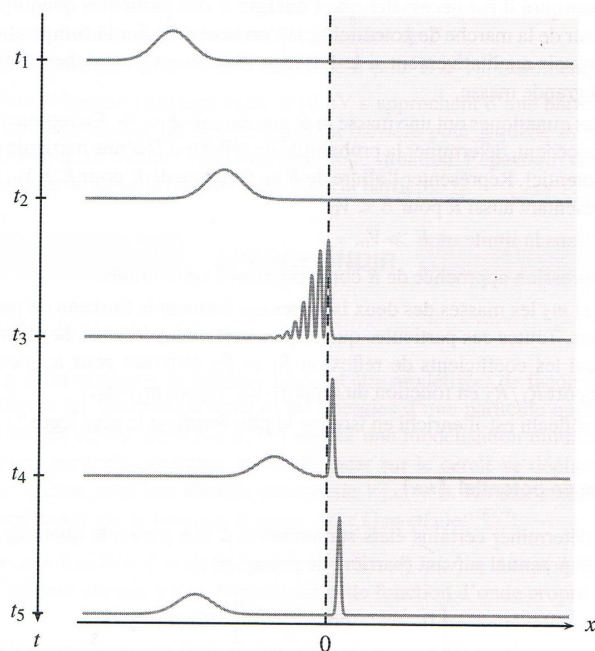
On pose $k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ et $k_2 = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}$.

2. Montrer qu'un état stationnaire de la particule peut être décrit par la fonction d'onde propre :

$$\begin{cases} \Phi(x) = A e^{ik_1 x} + rA e^{-ik_1 x} & \text{si } x < 0 \\ \Phi(x) = tA e^{ik_2 x} & \text{si } x \geq 0 \end{cases}$$

où A est une constante non nulle et r et t sont des coefficients complexes, que l'on ne cherchera pour le moment pas à déterminer. Interpréter physiquement ce que représente la fonction d'onde dans les différentes régions de l'espace.

3. Donner les expressions des courants de probabilité modélisant la particule incidente, la particule réfléchie et la particule transmise.
4. Ecrire les conditions de raccordement de la fonction d'onde propre en $x = 0$. En déduire les expressions de r et de t .
5. Définir puis déterminer les expressions des coefficients de réflexion R et de transmission T en probabilité. Discuter les spécificités du comportement quantique vis-à-vis du comportement classique.
6. Examiner le cas où $E \gg V_0$ et commenter.
7. En superposant des états stationnaires d'énergies voisines de E , on forme un paquet d'ondes représentant une particule quantique incidente. La figure ci-dessous représente l'évolution dans l'espace et dans le temps de la densité de probabilité de ce paquet d'ondes. Le temps s'écoule du haut vers le bas de la figure. Commenter ces graphes.



On envisage désormais le cas d'une particule quantique incidente envoyée depuis $x = -\infty$ et d'énergie $E < V_0$.

8. Déterminer la forme des fonctions d'onde propres dans les différentes régions de l'espace. En déduire le coefficient de réflexion R en probabilité. Commenter.
9. En guise de synthèse, tracer l'allure de R en fonction de E à la fois pour $E < V_0$ et pour $E > V_0$.

Application : enrichissement isotopique

Une source envoie, depuis $x = -\infty$, un faisceau de particules quantiques, constitué d'un mélange de deux isotopes de masses m_1 et $m_2 > m_1$. Tous ces isotopes sont envoyés à la même vitesse. On souhaite utiliser le phénomène de réflexion sur la marche de potentiel pour modifier la composition isotopique du mélange.

10. Expliquer pourquoi il est nécessaire que l'énergie E des particules quantiques soit supérieure à la hauteur de la marche de potentiel V_0 si l'on veut modifier la composition isotopique du mélange. Prévoir si le faisceau réfléchi est plus riche ou plus pauvre en isotope de plus grande masse.

Correction de l'exercice 6

1. Particule a une trajectoire rectiligne depuis $x = -\infty$ vers $x = +\infty$ (elle ne rebrousse jamais chemin) : elle est dans un état de diffusion. Dans la région $x < 0$, sa vitesse est $v = \sqrt{\frac{2E}{m}}$ et dans la région $x \geq 0$, sa vitesse est $v = \sqrt{\frac{2(E - V_0)}{m}}$.
2. Région I : $x < 0$: L'équation de Schrödinger stationnaire est :

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + k_1^2 \Phi(x) = 0 \Rightarrow \Phi(x) = A e^{ik_1 x} + B e^{-ik_1 x}$$

soit la solution proposée en posant $r = \frac{B}{A}$.

Région II : $x \geq 0$: L'équation de Schrödinger stationnaire est :

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + k_2^2 \Phi(x) = 0 \Rightarrow \Phi(x) = C e^{ik_2 x} + D e^{-ik_2 x}$$

On pose alors $t = \frac{C}{A}$.

Pour interpréter, il faut repasser à la fonction d'onde complète $\psi(x, t) = \Phi(x) e^{-i\omega t}$ avec $E = \hbar\omega$ pour un état stationnaire. Le premier terme de la fonction d'onde dans la région I représente une OPH modélisant la particule libre incidente (sens de propagation : x croissants). Le second représente une OPH modélisant la particule libre réfléchi (sens de propagation : x décroissants). Enfin, dans la région II, le premier terme représente une OPH se propageant dans le sens des x croissants, et modélisant donc la particule transmise. Le second terme représenterait une OPH se propageant dans le sens des x décroissants, ce qui n'a pas de sens.

dans la modélisation étudiée ici, vu qu'il n'y a aucune réflexion possible dans cette région II et aucune source de particule. On impose donc bien $D = 0$.

3. Comme toutes ces particules sont LIBRES (modélisées par des OPH), les expressions des courants de probabilités sont (comptés positivement dans le sens des x croissants) :

$$j_i = |A|^2 \frac{\hbar k_1}{m} \quad \text{et} \quad j_r = -|rA|^2 \frac{\hbar k_1}{m} \quad \text{et} \quad j_t = |tA|^2 \frac{\hbar k_2}{m}$$

4. CL en $x = 0$ (saut de potentiel fini) ($A \neq 0$ pour éliminer la solution non physique) :

$$\begin{cases} A + rA = tA \Rightarrow 1 + r = t \\ ik_1 A - rAik_1 = tAik_2 \Rightarrow k_1(1 - r) = k_2 t \end{cases}$$

On trouve :

$$r = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \quad \text{et} \quad t = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}$$

On retrouve la même forme que les coefficients de réflexion et de transmission en amplitudes usuels de la physique des ondes ! En particulier, si $k_1 = k_2$, i.e. si $V_0 = 0$, on trouve que la probabilité d'être réfléchi est nulle, ce qui est cohérent avec un potentiel uniforme.

5. On définit

$$R = \frac{-j_r}{j_i} \geq 0 \quad \text{et} \quad T = \frac{j_t}{j_i} \geq 0$$

Ici, on en déduit donc :

$$R = |r|^2 = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2 \quad \text{et} \quad T = |t|^2 \frac{k_2}{k_1} = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}$$

On retrouve les formes usuelles de la physique des ondes des coefficients de réflexion et de transmission en puissance. On vérifie bien que $R + T = 1$. En mécanique quantique, contrairement à la physique classique, il y a donc une probabilité non nulle d'être réfléchi par la marche de potentiel si $k_1 \neq k_2$, i.e. si $V_0 \neq 0$.

A remarquer : On remarque par ailleurs que les vitesses de groupe associées à la particule libre incidente et transmise sont les mêmes que dans le cadre de la physique classique. En effet, pour la particule incidente :

$$v_1 = \frac{\hbar k_1}{m} = \sqrt{\frac{2E}{m}} \quad \text{et pour la particule transmise : } v_2 = \frac{\hbar k_2}{m} = \sqrt{\frac{2(E - V_0)}{m}} !$$

6. Si $E \gg V_0$, alors $k_1 \simeq k_2$ et donc $R \simeq 0$ et $T \simeq 1$. On retrouve le cas d'une probabilité de transmission de 1 de la particule incidente. Vu depuis la particule, la marche de potentiel est « quasiment plate ».

7. On retrouve que :

- le paquet d'onde est en partie réfléchi, en partie transmis. Les amplitudes des enveloppes dépendent des valeurs de R et T .
- le paquet d'onde se déplace à une vitesse de groupe plus grande pour $x < 0$ et moins grande pour $x > 0$.
- il y a interférences entre le paquet d'onde incident et le paquet d'onde réfléchi à l'instant t_3 !

8. On pose alors $k'_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$. Les formes des fonctions d'onde propres sont alors :

$$\begin{cases} \Phi(x) = A e^{ik_1 x} + rA e^{-ik_1 x} & \text{si } x < 0 \\ \Phi(x) = B e^{k'_2 x} + C e^{-k'_2 x} & \text{si } x \geq 0 \end{cases}$$

En imposant la non divergence de la densité de probabilité pour $x \rightarrow +\infty$, on impose $B = 0$. On retrouve alors une onde évanescence dans la région $x \geq 0$.

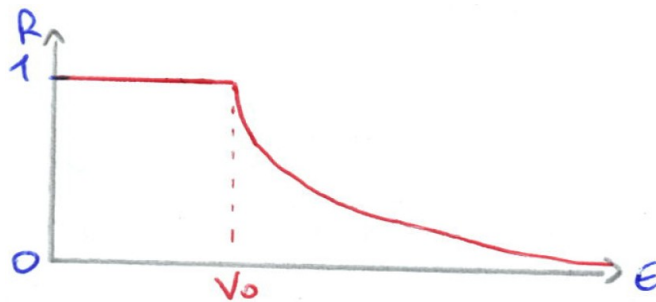
On utilise à nouveau les CL en $x = 0$ pour déterminer :

$$\begin{cases} (1 + r)A = C \\ ik_1 A(1 - r) = -k'_2 C \end{cases}$$

soit

$$ik_1(1 - r) = -k'_2(1 + r) \Rightarrow r = \frac{ik_1 + k'_2}{ik_1 - k'_2}$$

c'est-à-dire un complexe sur son conjugué. Il en résulte que $R = |r|^2 = 1$: la particule est réfléchiée avec une probabilité de 1. Ceci est à mettre en relation avec le fait que dans la région $x \geq 0$, la particule n'est pas décrite par une OPH : pas de propagation.



9. **Remarque :** Pour se convaincre de la tangente à droite pour $E = V_0$, le plus simple est de faire un DL à l'ordre 1 en $\frac{E - V_0}{E}$. On trouve alors :

$$R = 1 - 4\sqrt{\frac{E - V_0}{E}} = 1 - 4\sqrt{\frac{E - V_0}{V_0}}$$

Donc, à partir de $E = V_0$, la courbe évolue comme une racine carrée.

10. Si pour les deux isotopes, $E < V_0$, alors toutes les particules sont réfléchies : aucun enrichissement en isotope. Il faut donc que, pour au moins l'un des isotopes, $E > V_0$. Dans la région $x < 0$, $E = E_c = \frac{1}{2}mv^2$. Ainsi, $E_2 > E_1$. D'après le graphe précédent, les isotopes de masse m_1 ont une plus grande probabilité d'être réfléchis : le faisceau réfléchi est donc plus riche en isotopes de faible masse.