

Cours : Mécanique Quantique

Particule dans un potentiel stationnaire

(Amphi 6)

Ahmed Dhouib

1- Introduction

En mécanique classique et lorsque les forces s'exerçant sur une particule dérivent d'un potentiel, **les courbes d'énergie potentielle** constituent une approche élégante pour déterminer au moins **de façon qualitative le mouvement de la particule et ses principales caractéristiques**.

Ainsi, l'analyse de ces courbes permet de déterminer **les positions d'équilibre stables et instables qui correspondent aux extrema du potentiel**, de fixer les limites du mouvement, d'en connaître les zones interdites, d'en déduire les principales caractéristiques et d'atteindre **la nature des trajectoires correspondant à une énergie totale fixée**.

En mécanique quantique, l'analyse des courbes de potentiel revêt également une importance capitale dans l'étude d'une particule en mouvement dans un champ de forces extérieur dérivant d'un potentiel indépendant du temps et fonction uniquement de la position. **On verra en particulier que lorsque le potentiel $V(\vec{r})$ présente des discontinuités et qu'il est constant entre ces discontinuités, la résolution de l'équation de Schrödinger se simplifie considérablement et ses solutions permettent d'avoir une vision simple de problèmes physiques réels dont la résolution exacte est complexe et élaborée.**

2- Résolution de l'équation de Schrödinger

On considère une particule de masse m se déplaçant dans un potentiel $V(\vec{r})$ indépendant du temps et on se propose de déterminer sa fonction d'onde $\Psi(\vec{r}, t)$

2-1- Séparation des variables:

L'équation de Schrödinger s'écrit :

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \right] \Psi(\vec{r}, t)$$

Comme les variables \vec{r} et t sont séparées dans les deux membres, on peut, de façon générale, chercher des solutions de la forme d'un produit d'une fonction d'espace $\varphi(\vec{r})$ et d'une fonction dépendant du temps $\chi(t)$, soit :

$$\Psi(\vec{r}, t) = \varphi(\vec{r}) \chi(t)$$

En portant cette expression dans l'équation de Schrödinger, il vient :

$$i\hbar \varphi \frac{d\chi}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \chi \Delta \varphi + V \varphi \chi$$

En divisant les deux membres de l'équation par le produit $\varphi\chi$, on obtient l'égalité :

$$i\hbar \frac{1}{\chi} \frac{d\chi}{dt} = \frac{[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V]\varphi}{\varphi}$$

Le membre de gauche est une fonction du temps tandis que le membre de droite est fonction uniquement de la position. Pour qu'il y ait égalité quelque soient \vec{r} et t , il faut que les deux membres soient constants. Cette constante a les dimensions d'une énergie qu'on notera E . On aura alors les deux équations suivantes :

$$i\hbar \frac{d\chi}{\chi} = E dt \quad \text{et} \quad (-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V)\varphi = E\varphi$$

La première équation se résout simplement et a pour solution :

$$\chi(t) = \chi(0)e^{-i(E/\hbar)t}$$

Ce qui donne pour $\Psi(\vec{r}, t)$:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \varphi(\vec{r})e^{-i(E/\hbar)t}$$

La dépendance sinusoïdale indique que la particule a une énergie bien définie et que sa densité de probabilité de présence est indépendante du temps :

$$|\Psi(\vec{r}, t)|^2 = |\varphi(\vec{r})|^2$$

On dit dans ce cas que la particule est dans des **états stationnaires** c'est à dire pour lesquels l'énergie E est constante.

On obtient ces états en résolvant l'équation :

$$H\varphi = E\varphi$$

où H est l'opérateur hamiltonien :

$$(H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V)$$

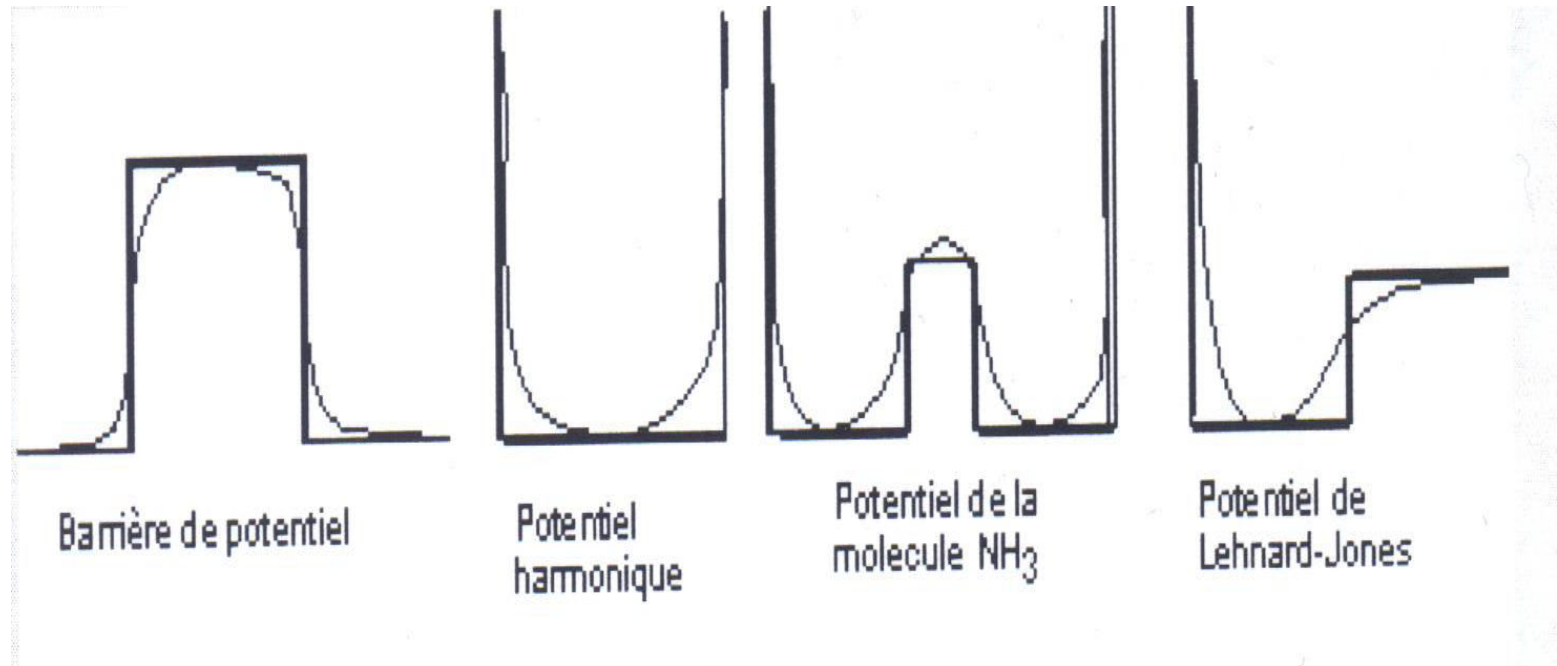
et tel que:

$$\int |\varphi(\vec{r})|^2 d^3r = 1$$

Cette équation est appelée **équation aux valeurs propres** : C'est à dire pour des conditions imposées à $\varphi(\vec{r})$, celle-ci n'existe que pour **certaines valeurs de l'énergie E , appelées valeurs propres de H** . $\varphi(\vec{r})$ est alors appelée **fonction propre correspondant à la valeur propre E** .

2-2- Modélisation de potentiels réels :

A part les cas où le potentiel est nul ou constant, la situation la plus simple est celle où $V(\vec{r})$ subit **des discontinuités en restant constant entre deux discontinuités**. La recherche des solutions pour de tels potentiels ne présente pas de difficultés mathématiques et cela permettra de **modéliser des situations réelles qu'on peut approximer par de tels potentiels**.



Pour simplifier le formalisme, on ne traitera dans la suite que **des potentiels à une seule variable d'espace x** .

2-3- Cas des potentiels pairs $V(x) = V(-x)$

Écrivons l'équation de Schrödinger pour x et pour $-x$; On a :

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

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

On remarque que $\varphi(x)$ et $\varphi(-x)$ sont solutions de la même équation différentielle linéaire; elles sont donc identiques à un facteur multiplicatif près, soit :

$$\varphi(x) = \varepsilon\varphi(-x)$$

Cette relation est vraie pour toute valeur de x et en particulier lorsqu'on change x en $-x$ donc :

$$\varphi(-x) = \varepsilon\varphi(x)$$

Si l'on combine ces deux relations, on a alors:

$$\varepsilon^2 = \pm 1$$

ε est appelée parité de la fonction :

pour $\varepsilon = 1$, la fonction d'onde est une fonction paire, elle est dite **symétrique**.

pour $\varepsilon = -1$, la fonction d'onde est une fonction impaire, elle est dite **antisymétrique**.

Ainsi, lorsque le potentiel est pair, l'ensemble des solutions possibles de l'équation de Schrödinger est constitué de deux systèmes : **les solutions paires ou symétriques et les solutions impaires ou antisymétriques**.

2-4- Conditions aux limites

Nous avons vu que la probabilité de trouver la particule en un point de l'espace est proportionnelle au module au carré $|\Psi|^2$ de la fonction d'onde. Cette quantité doit donc être une fonction continue partout et notamment aux discontinuités du potentiel. Si $|\Psi|^2$ est continue il est logique de supposer que $\Psi(x)$ l'est aussi.

Par ailleurs, l'existence d'une dérivée seconde dans l'équation de Schrödinger implique d'un point de vue mathématique que la fonction d'onde n'a pas de discontinuité et par conséquent que sa dérivée première $d\Psi/dx$ est continue en tout point.

Pour déterminer les relations donnant la quantification de l'énergie de la particule, on applique donc aux discontinuité de potentiel les deux conditions suivantes :

- **Continuité de la fonction d'onde.**
- **Continuité de la dérivée première de la fonction d'onde.**

2-5- Etats liés et états continus

Lorsque la particule reste confinée dans une région de l'espace, la probabilité de la trouver à l'infini est nulle à tout moment. **Sa fonction d'onde est donc normalisable et les valeurs de son énergie sont quantifiées** : Le spectre en énergie de la particule est dans ce cas discret et on dit que la particule se trouve dans des états liés.

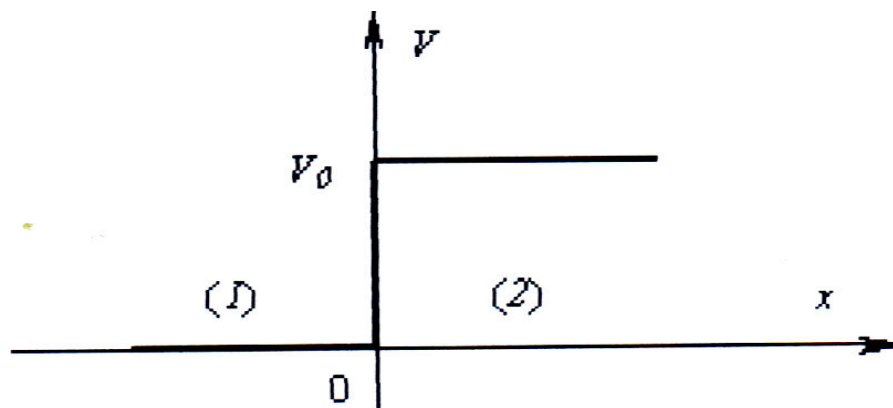
Si la particule n'est pas confinée dans une région donnée, elle peut explorer tout l'espace et se trouver même à l'infini. **La fonction d'onde n'est plus normalisable et le spectre en énergie est continu**. On dit alors que la particule se trouve dans des états non liés ou continus.

3. Marche de potentiel

Soit une particule "incidente" d'énergie E venant des x négatifs et se dirigeant vers les x positifs. Cette particule rencontre en $x = 0$ une marche de potentiel V_0 définie par :

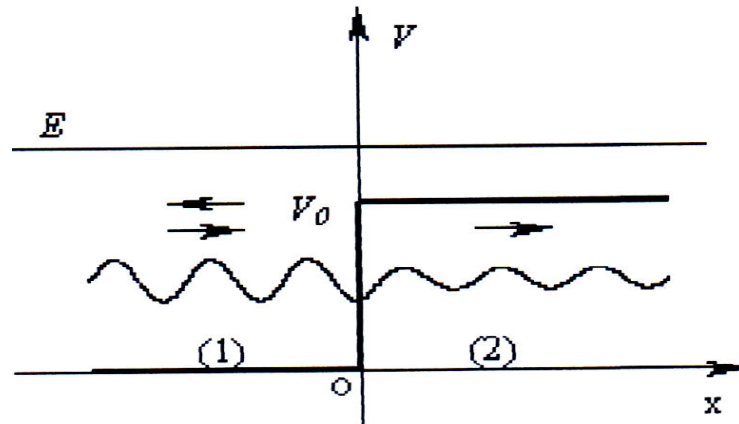
$$V(x) = 0 \quad \text{pour } x < 0$$

$$V(x) = V_0 \quad \text{pour } x > 0$$



Nous devons considérer deux cas, suivant que E est supérieure ou inférieure à la hauteur de la marche V_0 .

3.1. Cas où $E > V_0$



- Etude classique

La particule d'énergie E a une vitesse $\sqrt{2E/m}$ dans la région (1), elle est ralentie à la discontinuité et prend la vitesse $\sqrt{2(E - V_0)/m}$ dans la région(2).

- Etude quantique

L'équation de Schrödinger peut s'écrire

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

On a alors dans les deux régions (1) et (2) :

$$\text{Région(1)} : \quad \varphi''_1 + k_1^2 \varphi_1 = 0, \quad \text{soit} \quad \varphi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + A'_1 e^{-ik_1 x}, \quad \text{avec :} \quad k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$$

$$\text{Région(2)} : \quad \varphi''_2 + k_2^2 \varphi_2 = 0, \quad \text{soit} \quad \varphi_2(x) = A_2 e^{ik_2 x} + A'_2 e^{-ik_2 x}, \quad \text{avec :} \quad k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0)$$

$A_1 e^{ik_1 x}$ représente l'onde incidente et $A'_1 e^{-ik_1 x}$ l'onde réfléchiée par le saut de potentiel.
 $A_2 e^{ik_2 x}$ représente l'onde transmise et $A'_2 e^{-ik_2 x}$ est une onde réfléchiée qui reviendrait de l'infini, ce qui est impossible, donc $A'_2 = 0$.

Les solutions dans les deux régions sont donc en définitive :

$$\begin{aligned} \varphi_1(x) &= A_1 e^{ik_1 x} + A'_1 e^{-ik_1 x} \\ \varphi_2(x) &= A_2 e^{ik_2 x} \end{aligned}$$

Les conditions de continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée ($\varphi_1(0) = \varphi_2(0)$ et $\varphi'_1(0) = \varphi'_2(0)$) donnent :

$$\frac{A'_1}{A_1} = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \quad \text{et} \quad \frac{A_2}{A_1} = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}$$

On définit alors les coefficients de réflexion R et de transmission T de la particule par

$$R = \left| \frac{A'_1}{A_1} \right|^2 \quad \text{et} \quad T = \left| \frac{A_2}{A_1} \right|^2 \frac{V_{g2}}{V_{g1}}$$

où V_{g1} et V_{g2} , sont les vitesses de groupe associées aux paquets d'ondes dans les deux régions :

$$V_{g1} = \frac{\hbar k_1}{m} \quad \text{et} \quad V_{g2} = \frac{\hbar k_2}{m}$$

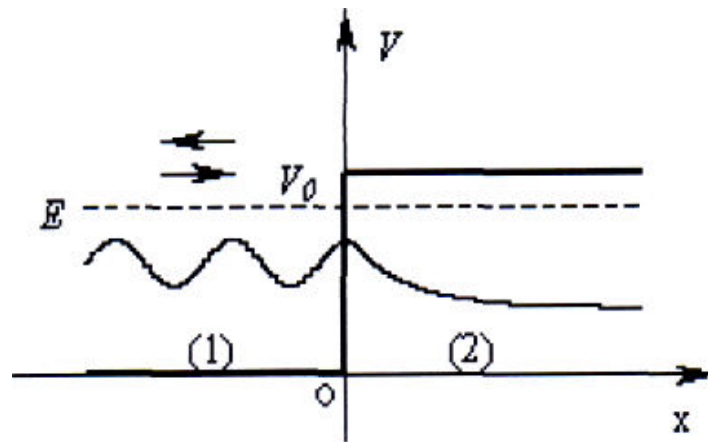
On a alors :

$$R = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2 = 1 - \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}$$
$$T = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}$$

On vérifie bien que l'on a $R+T= 1$. Cette relation signifie qu'on a conservation du flux incident de particules : chaque particule incidente ne peut être que réfléchi ou transmise. Cette situation est similaire à la conservation de l'énergie en mécanique classique.

Cependant, contrairement aux prévisions classiques, la particule a une probabilité non nulle de revenir en arrière.

3-2- Cas où $0 < E < V_0$



- Etude classique:

La particule a une vitesse $\sqrt{2E/m}$ dans la région (1), elle rebondit élastiquement à la discontinuité et repart avec une vitesse identique.

- Etude quantique :

Les fonctions d'onde de la particule dans les deux régions sont données par:

$$\begin{aligned}\varphi_1(x) &= A_1 e^{ik_1 x} + A'_1 e^{-ik_1 x} \\ \varphi_2(x) &= B_2 e^{\rho_2 x} + B'_2 e^{-\rho_2 x}\end{aligned}$$

avec

$$k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E \quad \text{et} \quad \rho_2^2 = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0)$$

Pour que $\varphi_2(x)$ reste bornée lorsque x tend vers l'infini il faut que $B_2 = 0$, ce qui conduit à :

$$\begin{aligned}\varphi_1(x) &= A_1 e^{ik_1 x} + A'_1 e^{-ik_1 x} \\ \varphi_2(x) &= B'_2 e^{-\rho_2 x}\end{aligned}$$

Les mêmes conditions de continuité que précédemment donnent :

$$\frac{A'_1}{A_1} = \frac{k_1 - i\rho_2}{k_1 + i\rho_2} \quad \text{et} \quad \frac{B'_2}{A_2} = \frac{2k_1}{k_1 + i\rho_2}$$

Le coefficient de réflexion R vaut alors :

$$R = \left| \frac{A'_1}{A_1} \right|^2 = 1$$

On doit donc avoir $T = 0$, cependant $|B^2/A_1|^2$ est différent de zéro, **ce qui implique que la vitesse de groupe du paquet d'ondes est nulle dans la région (2)**. Comme en mécanique classique, la particule est toujours réfléchié néanmoins **il existe une onde du type évanescente ($e^{-\rho_2 x}$) qui montre que la particule a une probabilité non nulle de se trouver dans la région (2), probabilité qui décroît exponentiellement en fonction de x et devient négligeable lorsque x est supérieure à $1/\rho_2$**

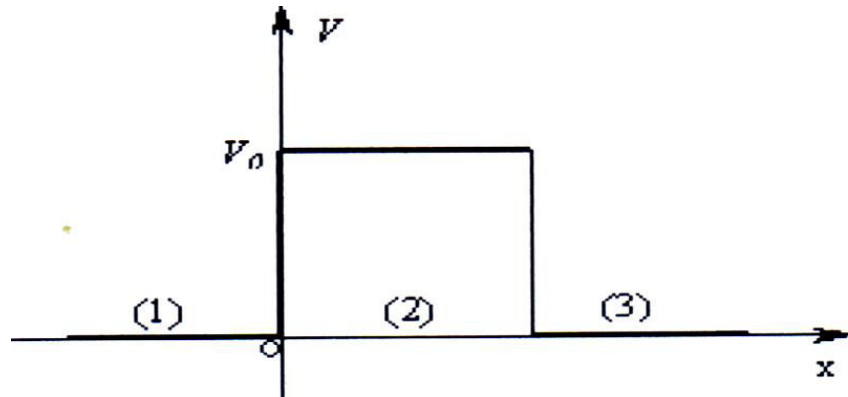
4. Barrière de potentiel

Elle est représentée par un potentiel qui est discontinu aux deux points d'abscisse $x = 0$ et $x = a$. et est décrite par :

$$V(x) = 0 \quad \text{pour } x < 0$$

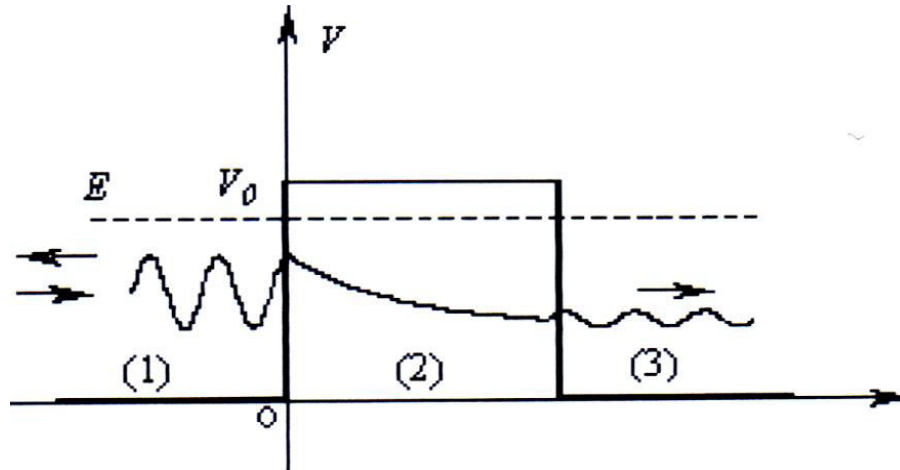
$$V(x) = V_0 \quad \text{pour } 0 < x < a$$

$$V(x) = 0 \quad \text{pour } x > a,$$



a est appelée épaisseur de la barrière et V_0 son hauteur

4.1. Cas où $E < V_0$: Effet Tunnel



- Traversée de la barrière

La barrière de potentiel est infranchissable pour la particule classique qui est toujours réfléchiée dans la région (1).

En écrivant l'équation de Schrödinger dans les trois régions (1), (2) et (3), les fonctions d'onde de la particule dans ces régions s'écrivent :

$$\begin{aligned}\varphi_1(x) &= A_1 e^{ik_1 x} + A'_1 e^{-ik_1 x} \\ \varphi_2(x) &= A_2 e^{\rho_2 x} + A'_2 e^{-\rho_2 x} \\ \varphi_3(x) &= A_3 e^{ik_1 x} + A'_3 e^{-ik_1 x}\end{aligned}$$

k_1 et ρ_2 ont leur signification précédente et A'_3 doit être nul car toute réflexion à l'infini est impossible.

Les conditions de continuité en $x = 0$ et $x = a$ donnent, après calcul, les expressions suivantes des coefficients de réflexion et de transmission R et T :

$$R = \left| \frac{A'_1}{A_1} \right|^2 = \frac{(k_1^2 + \rho_2^2) \operatorname{sh}^2(\rho_2 a)}{4 k_1^2 \rho_2^2 + (k_1^2 + \rho_2^2)^2 \operatorname{sh}^2(\rho_2 a)}$$
$$T = \left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2 = \frac{4 k_1^2 \rho_2^2}{4 k_1^2 \rho_2^2 + (k_1^2 + \rho_2^2)^2 \operatorname{sh}^2(\rho_2 a)}$$

Donc, contrairement aux prévisions classiques, **la particule a une probabilité non nulle de franchir la barrière de potentiel : c'est l'effet Tunnel**. Cet effet est une réalité physique et intervient dans l'interprétation de beaucoup de phénomènes (passage des électrons d'un atome à un autre, radioactivité α ...).

- Approximation de la barrière épaisse

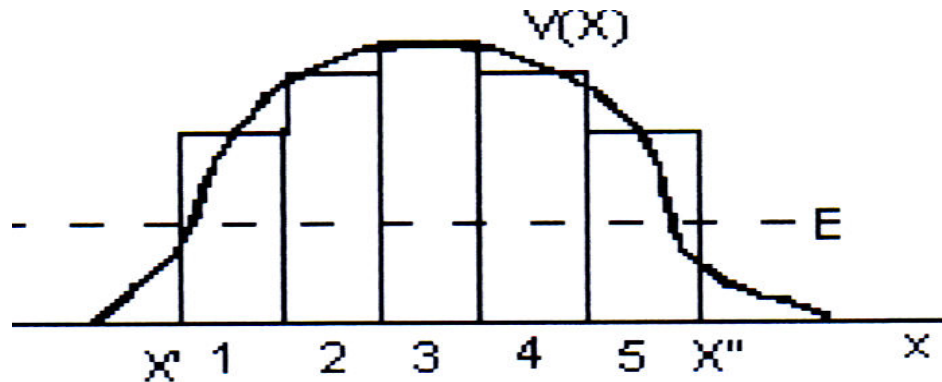
Cette approximation correspond à la situation où $\rho_2 a \gg 1$, le coefficient de transmission s'écrit alors :

$$T \approx \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-2\rho_2 a}$$

Si de plus la hauteur de la barrière est grande devant l'énergie ($E/V_0 \ll 1$), le coefficient de transmission s'écrit :

$$T \approx \frac{16E}{V_0} e^{-2\rho_2 a}$$

On pourra donc utiliser ces résultats pour traiter **de façon approximative une barrière de forme quelconque en la considérant comme une succession de barrières rectangulaires**



Le coefficient de transmission global est alors le produit des coefficients de transmission de toutes les barrières rectangulaires, soit :

$$T = T_1 T_2 T_3 \dots T_n$$

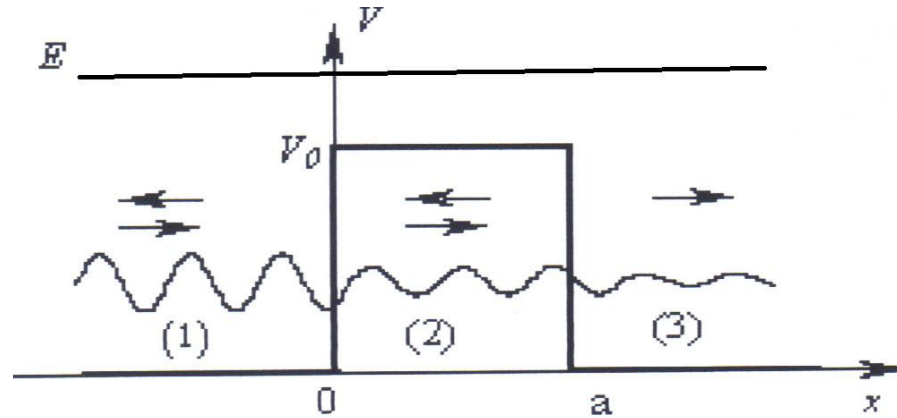
et $\text{Log}T = \text{Log}T_1 + \text{Log}T_2 + \dots \text{Log}T_n$

Si dx_n et $V(x_n)$ sont respectivement la largeur et la hauteur de chacune des barrières rectangulaires et si nous passons à la limite d'une subdivision infiniment fine, nous pouvons remplacer la somme des logarithmes par une intégrale et on obtient :

$$\text{Log}T \sim -\frac{2}{\hbar} \int_{x'}^{x''} \sqrt{2m[V(x) - E]} dx$$

Cette expression approchée du coefficient de transmission est très utile et donne une image qualitative correcte de la pénétration de la barrière dans de nombreux phénomènes (microscopie à effet Tunnel, radioactivité α , ...).

4.2. Cas où $E > V_0$: Transfert résonnant



Dans ce cas, on a toujours en mécanique classique une transmission de la particule avec un ralentissement dans la région centrale. En mécanique quantique, on obtient les fonctions d'onde suivantes :

$$\begin{aligned}\varphi_1(x) &= A_1 e^{ik_1 x} + A'_1 e^{-ik_1 x} \\ \varphi_2(x) &= B_2 e^{ik_2 x} + B'_2 e^{-ik_2 x} \\ \varphi_3(x) &= A_3 e^{ik_1 x} + A'_3 e^{-ik_1 x}\end{aligned}$$

Avec :

$$k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0)$$

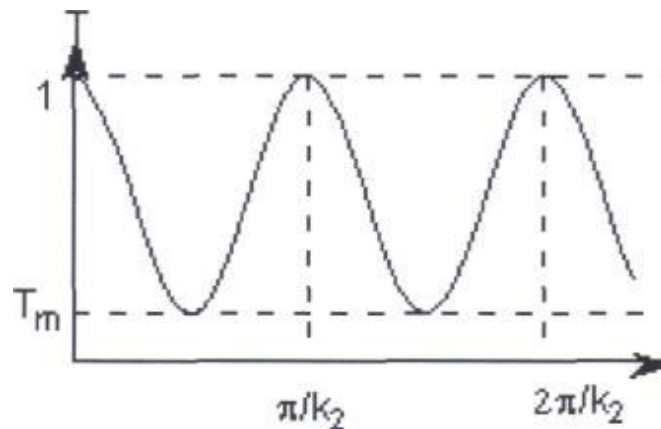
A'_3 sera bien sûr nul car la réflexion à l'infini est impossible. On obtient dans ce cas:

$$R = \left| \frac{A'_1}{A_1} \right|^2 = \frac{(k_1^2 - k_2^2) \sin^2(k_2 a)}{4 k_1^2 k_2^2 + (k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2(k_2 a)}$$

$$T = \left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2 = \frac{4 k_1^2 k_2^2}{4 k_1^2 k_2^2 + (k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2(k_2 a)}$$

On remarque qu'il n'y a transmission complète ($T=1$) que lorsque $k_2 a$ est un multiple de π . Au fur et à mesure que la largeur de la barrière croît, le coefficient de transmission oscille entre cette valeur maximum et une valeur minimale T_m pour laquelle $k_2 a = (2n + 1)\pi/2$ et qu'on montre égale à :

$$T_m = \frac{4E(E - V_0)}{(2E - V_0)^2}$$



On aura alors un transfert maximal ou résonnant chaque fois que $a = n\pi/k_2$.

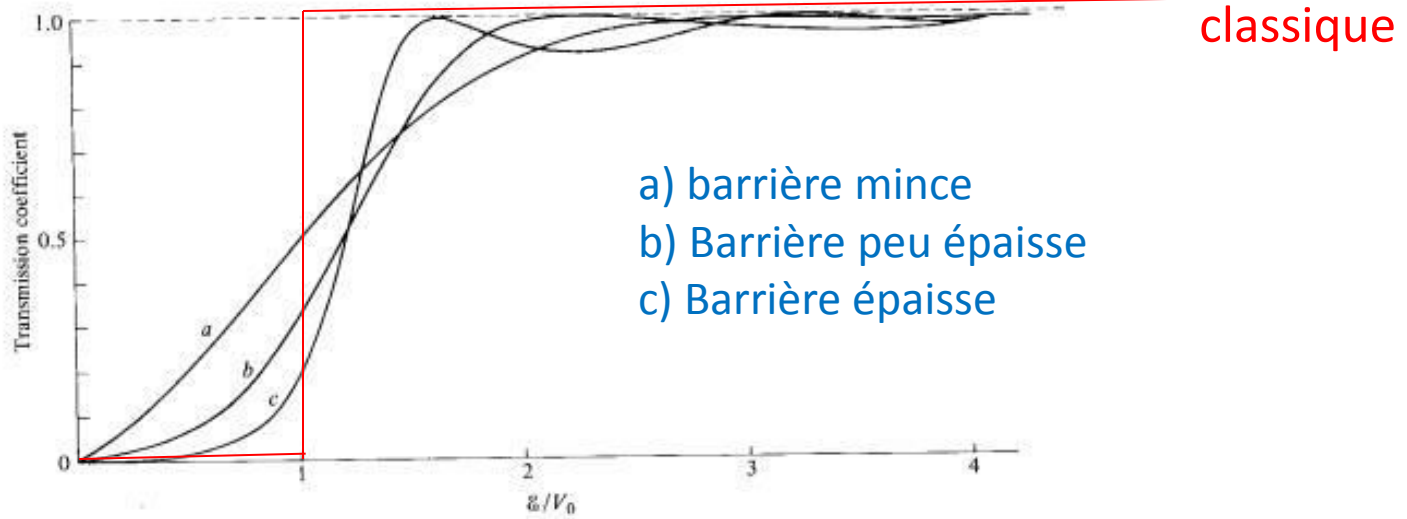
4.3. Transmission de la barrière en fonction de l'énergie de la particule :

le coefficient de transmission T s'écrit donc sous la forme :

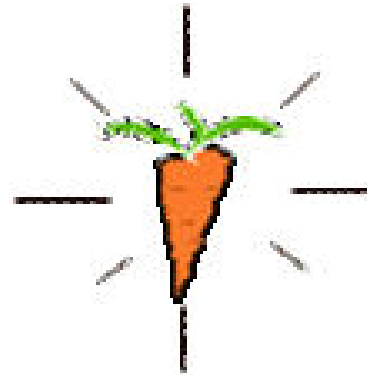
$$T = \begin{cases} \frac{4E(V_0 - E)}{4E(V_0 - E) + V_0^2 \operatorname{sh}^2 \rho_2 a} & \text{pour } E < V_0 \\ \frac{4E(E - V_0)}{4E(E - V_0) + V_0^2 \sin^2 k_2 a} & \text{pour } E > V_0 \end{cases}$$

Le facteur de transmission T est non nul, même lorsque la particule a une énergie inférieure à V_0 .

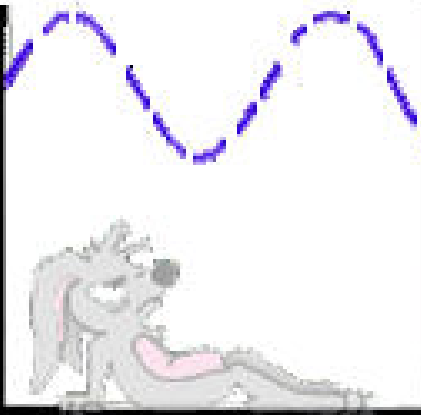
C'est l'effet tunnel.



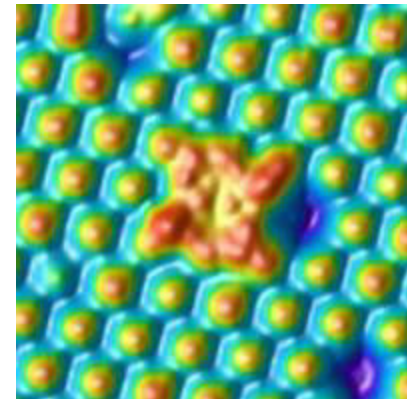
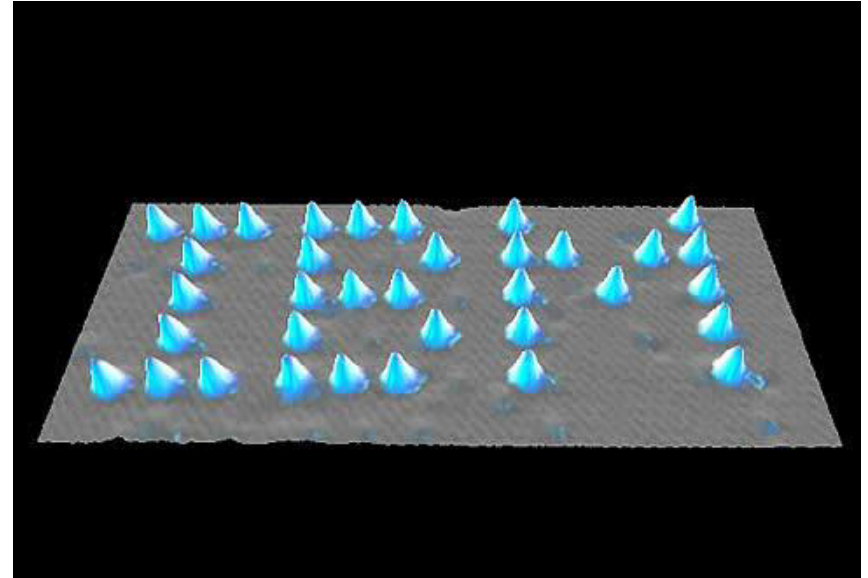
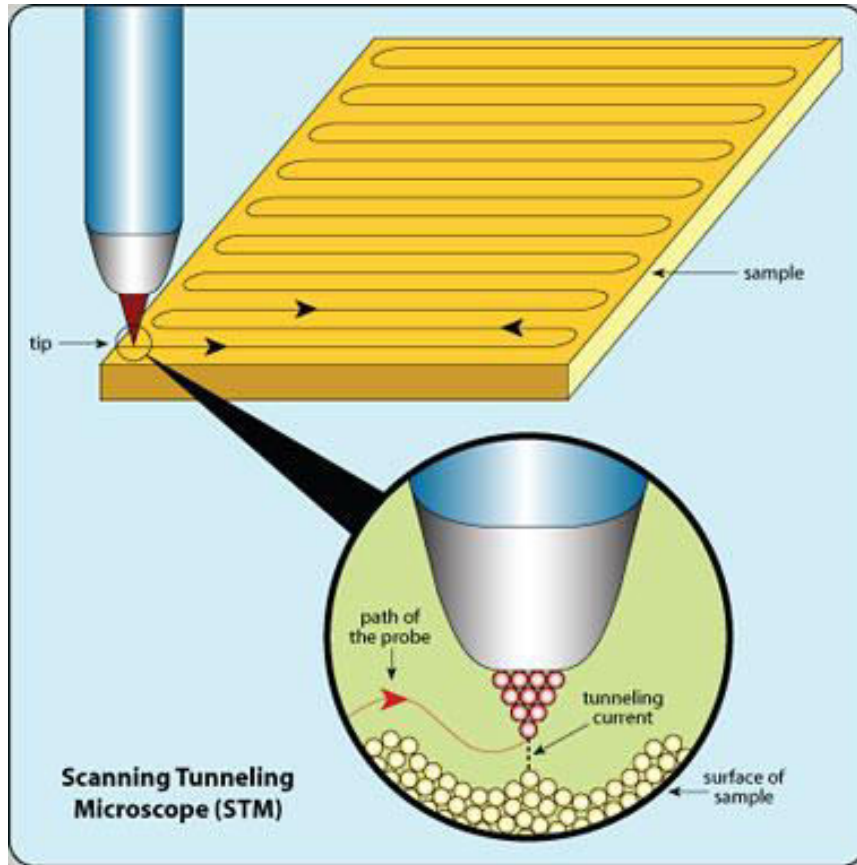
Lapin classique



Lapin quantique

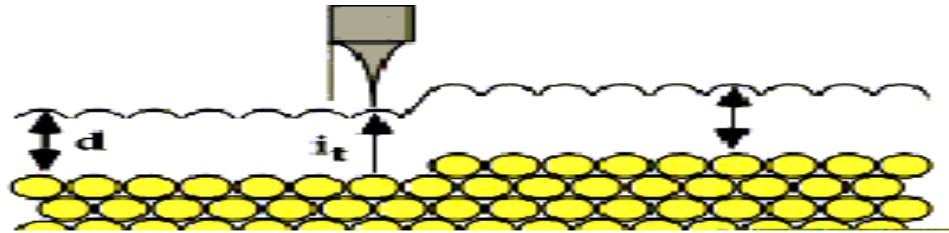


Application : **Microscope à effet tunnel**



Fonctionnement du STM

Si l'on applique une différence de potentiel V_t entre deux électrodes, qui sont, dans le cas du STM, la pointe (généralement en tungstène) et l'échantillon à étudier, le transfert d'électrons par effet tunnel est permis lorsque la pointe et l'échantillon sont à une très faible distance (de 1 à 2 nm), donnant lieu à un courant tunnel I_t . L'intensité de ce courant dépend avec une grande sensibilité de la distance entre la pointe et la surface.



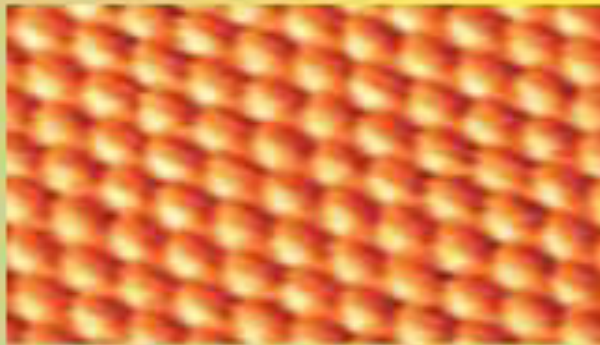
On approche donc la pointe à 1 à 2 nm de l'échantillon grâce à une approche manuelle qui doit être très précise, pour que le courant tunnel s'établisse. Si la distance est supérieure à 2 nm, le courant ne passe pas. Ensuite, on balaye la surface de l'échantillon (conducteur ou semi-conducteur) avec la pointe qui doit être la plus fine possible pour avoir une bonne résolution. Le positionnement de la pointe doit se faire de façon très précise. On utilise un tube piézo-électrique pour les déplacements.

En effet, à l'aide d'une boucle de régulation, on garde le courant I_t constant en faisant varier la hauteur du tube piézo-électrique.

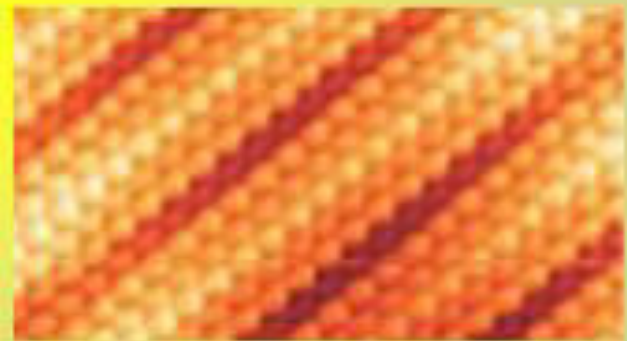
On comprend que maintenir le courant constant revient à maintenir constante la distance (d) entre la pointe et l'échantillon.



Atomes d'or observés au microscope à effet tunnel. (échelle: 1 cm représente 1,5 nm)



Atomes de cuivre observés au microscope à effet tunnel.
(échelle: 1 cm représente 0,5 nm)



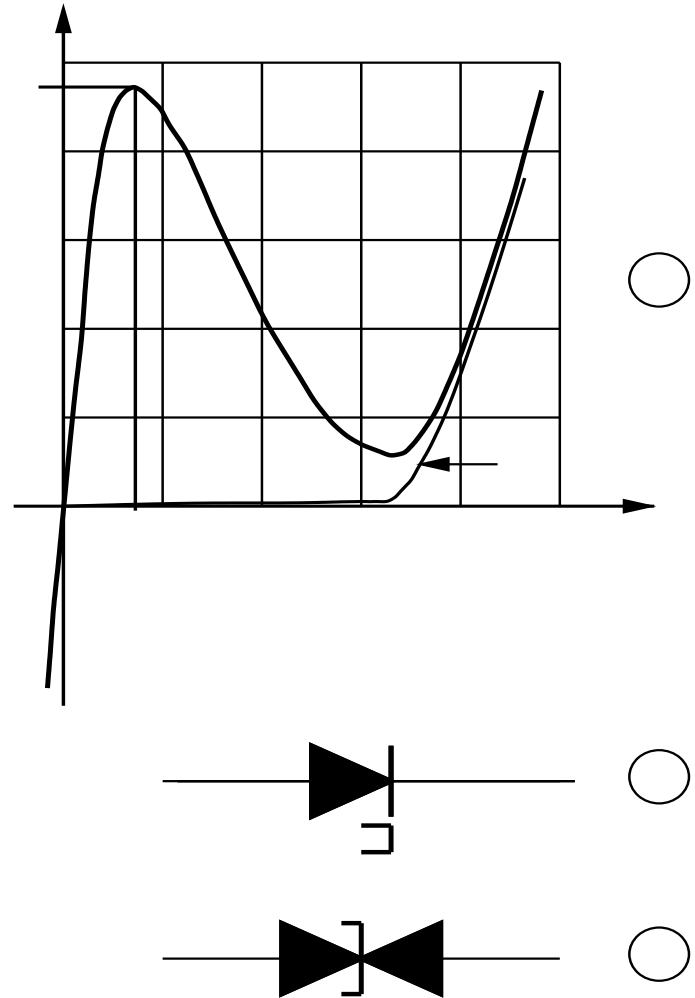
Atomes de platine observés au microscope à effet tunnel.
(échelle: 1 cm représente 1 nm)

Autre application: La diode tunnel ou la diode Gunn

La diode tunnel a été inventée par Esaki en 1963. Une diode tunnel possède une concentration en impuretés 10^5 à 10^6 fois plus grande qu'une diode ordinaire. Elle possède une résistance dynamique négative et fonctionne à des fréquences très élevées. La caractéristique d'une telle diode est montrée à la figure ci-contre.

Les diodes tunnel encore appelées "**diode Gunn**" sont essentiellement utilisées comme oscillateur dans les circuits à micro-ondes, on l'utilise par exemple comme source pour les détecteurs de mouvements (ouvre portes).

La figure ci-contre donne les deux symboles pour une diode tunnel. Pour des applications générales ou $f < 1$ GHz, il existe toute la série 1N3712 à 1N3721.



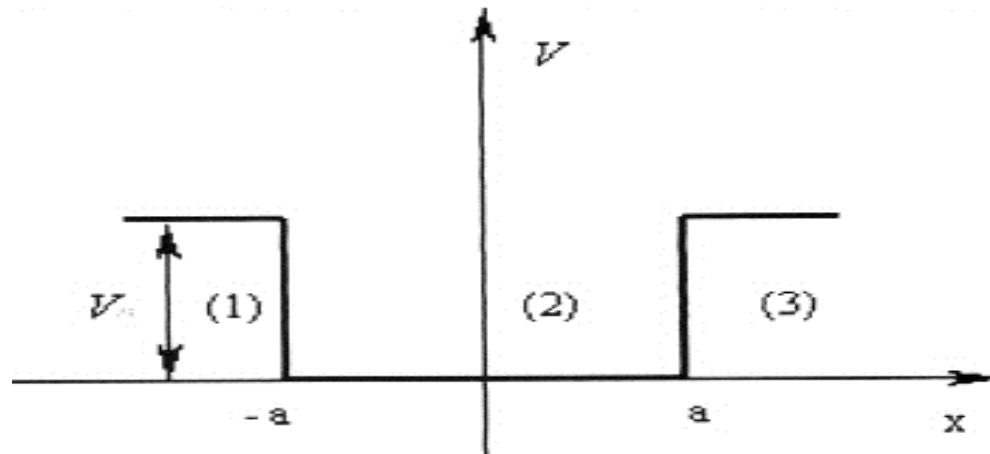
On remarque que dans le cas où $E < V_0$ (effet Tunnel), les coefficients R et T sont bien définis ce qui prouve que le paquet d'ondes incident associé à la particule se scinde en un paquet réfléchi et un paquet transmis dont les intensités ne sont jamais nulles.

Pour $E > V_0$, T peut atteindre l'unité pour certaines valeurs de l'énergie et on assiste dans ce cas à une transmission totale. Au fur et à mesure que l'énergie augmente T oscille entre cette valeur et un minimum.

5. Puits de potentiel

5.1. Puits de potentiel fini

La particule est en mouvement dans un potentiel $V(x)$ tel que $V(x)$ est nul sur le segment $[-a, a]$ et $V(x) = V_0$ en dehors de ce segment.



En mécanique classique, lorsque V_0 est inférieur à l'énergie E de la particule ; celle-ci venant des x négatifs subit une accélération au passage de la discontinuité du potentiel en $x = -a$ et reprend sa vitesse au passage de la discontinuité du potentiel en $x = a$ pour aller se perdre à l'infini. Lorsque V_0 est supérieur à E , tout mouvement de la particule est interdit en dehors du segment $]-a, +a[$. La particule est donc astreinte à se mouvoir sur le segment de droite de longueur $2a$ où elle est confinée.

C'est à ce confinement qu'on va s'intéresser en mécanique quantique en écrivant l'équation de Schrödinger dans les trois régions (1), (2) et (3) où agit le potentiel.

- A l'extérieur du puits : $|x| > a$

L'équation de Schrödinger s'écrit :

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} - \rho^2\varphi = 0 \quad \text{avec} \quad \rho^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)$$

et ses solutions sont de la forme:

$$\begin{aligned}\varphi_1(x) &= B_1 e^{\rho x} + B'_1 e^{-\rho x} \\ \varphi_3(x) &= B_2 e^{\rho x} + B'_2 e^{-\rho x}\end{aligned}$$

Comme $\varphi(x)$ doit être bornée dans les régions (1) et (3), on a nécessairement : $B'_1 = B_2 = 0$

-A l'intérieur du puits : $|x| < a$, L'équation de Schrödinger est :

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} + k^2\varphi = 0 \quad \text{avec} \quad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E$$

La solution générale de cette équation est donc de la forme :

$$\varphi_2(x) = A_1 e^{ikx} + A'_1 e^{-ikx}$$

Comme le potentiel est pair, les fonctions d'onde à l'intérieur du puits sont soit paires soit impaires c'est à dire qu'on a :

$$\varphi_2^P(x) = A \cos kx \quad \text{et} \quad \varphi_2^I(x) = B \sin kx$$

le problème admet deux ensembles de solutions :

$$\left\{ \begin{array}{l} \varphi_1(x) = B_1 e^{\rho x} \\ \varphi_2^P(x) = A \cos kx \\ \varphi_3(x) = B'_2 e^{-\rho x} \end{array} \right. \quad \text{et} \quad \left\{ \begin{array}{l} \varphi_1(x) = B_1 e^{\rho x} \\ \varphi_2^I(x) = B \sin kx \\ \varphi_3(x) = B'_2 e^{-\rho x} \end{array} \right.$$

Les conditions de raccordement imposées à la fonction d'onde et à sa dérivée aux points $x = -a$ et $x = +a$. conduisent pour les deux ensembles de solutions aux deux conditions de quantification suivantes :

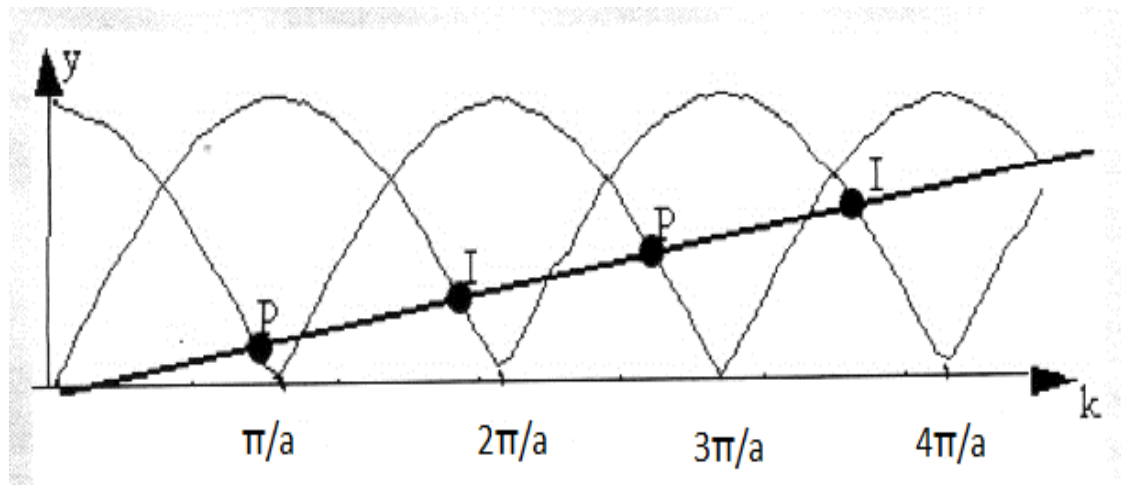
$$\operatorname{tg}(ka) = \frac{\rho}{k} \quad \text{et} \quad \operatorname{cotg}(ka) = -\frac{\rho}{k}$$

Il est possible de résoudre graphiquement ces équations implicites en E , mais il est plus simple de les ramener aux deux systèmes d'équations équivalentes suivantes:

$$\begin{cases} |\cos ka| = \frac{k}{k_0} \\ \operatorname{tg}(ka) > 0 \end{cases} \quad \text{et} \quad \begin{cases} |\sin ka| = \frac{k}{k_0} \\ \operatorname{tg}(ka) < 0 \end{cases}$$

où k_0 est tel que : $ko^2 = k^2 + \rho^2 = 2mVo/\hbar^2$

Les niveaux d'énergie sont déterminés par l'intersection d'une droite de pente $1/k_0$ avec des arcs de sinus. Ces niveaux sont intercalés en niveaux pairs et impairs correspondant à des fonctions d'onde paires et impaires représentant les états liés de la particule.

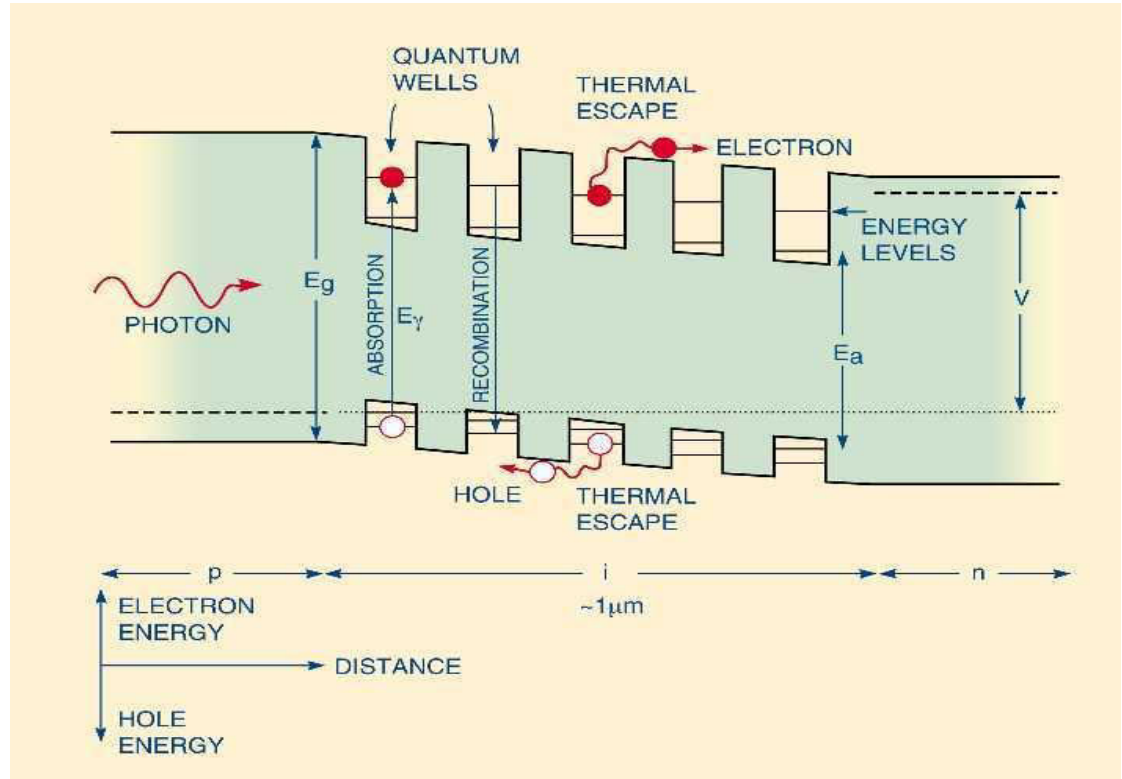
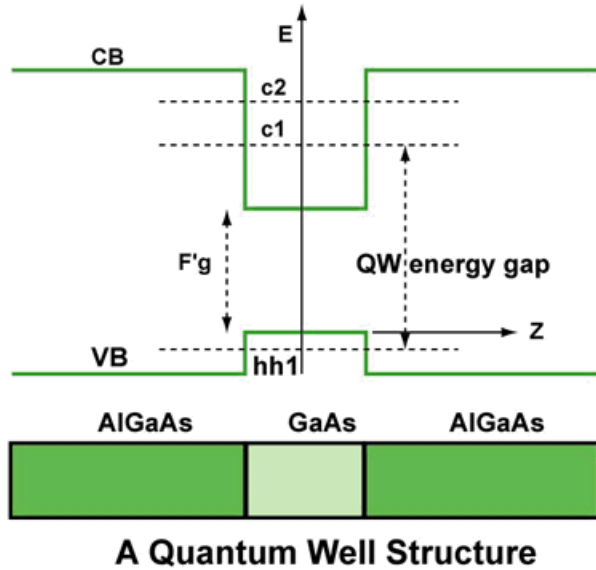


Autre application: Laser à cascade quantique

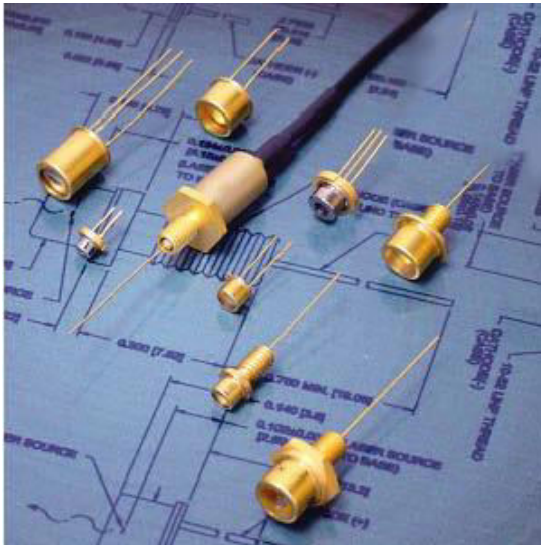
Un laser à cascade quantique utilise un semi-conducteur possédant une structure à confinement quantique, un puits quantique. Ce confinement quantique, ici en une dimension créé à l'intérieur de la structure des sous-bande d'énergie. Un électron de haute énergie de la bande de conduction « tombe » alors dans le puits quantique, tout d'abord sur la sous-bande supérieure, puis est relaxé en tombant sur la sous-bande inférieure, en émettant alors un photon d'énergie équivalente à l'énergie entre ces deux sous-bandes. On parle alors d'émission par transition inter-sous-bande. Or, comme l'énergie entre deux sous-bandes dépend directement de la largeur du puits, donc de l'épaisseur de la couche de semi-conducteur constituant le puits, il est possible en contrôlant cette épaisseur de choisir la longueur d'onde émise, ce qui permet d'émettre un très large spectre avec le même type de matériel.

Afin de maximiser le rendement, le laser est en fait constitué d'une multitude de puits quantiques. Une fois l'électron relaxé sur la sous-bande de plus basse énergie, il traverse l'interstice entre deux puits quantiques par effet tunnel, et, en raison de la polarisation du composé, se retrouve sur la sous-bande supérieure, d'où il pourra à nouveau se relaxer, et produire un nouveau photon, et ainsi de suite. C'est ce principe qui donne son nom de « cascade » au laser.

Autre application: laser à cascade quantique



Laser Diode Incorporated's CVD series lasers are strained layer quantum well devices fabricated by the MOCVD process. These pulsed lasers are available with up to 140W of peak power at either 850nm or 905nm.



5.2. Puits de Potentiel infini

Niveaux d'énergie et fonctions d'onde

Quand l'énergie potentielle V_0 caractérisant la profondeur du puits devient infiniment grande devant l'énergie E de la particule, on obtient un puits de potentiel infini.

Classiquement la particule ne peut qu'osciller entre les deux parois du puits.

Quantiquement la fonction d'onde de la particule doit être nulle à l'extérieur du puits ($\varphi = 0$) et continue en $x = \pm a$.

A l'intérieur du puits, et en raison de la parité du potentiel les solutions de l'équation de Schrödinger sont soit paires soit impaires.

Les fonctions d'onde de la particule sont donc :

$$\varphi^P(x) = A \cos kx \quad \text{et} \quad \varphi^I(x) = B \sin kx$$

Les conditions de continuité en $x = -a$ et en $x = a$ donnent :

Pour les fonctions paires

$$\cos kx = 0 \text{ soit : } ka = (2n + 1)\frac{\pi}{2} \text{ et } E_P = (2n + 1)^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2}$$

Pour les fonctions impaires

$$\sin kx = 0 \text{ soit : } ka = n\pi \text{ et } E_I = (2n)^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2}$$

-Les deux expressions de l'énergie E_P et E_I peuvent être regroupées en une seule relation :

$$E_N = N^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} \text{ avec } N = 1, 2, 3, \dots$$

Ce résultat qui peut être obtenu à partir de l'étude du puits fini, en faisant tendre V_0 vers l'infini. Le spectre d'énergie est constitué de niveaux discrets, éloignés les uns des autres comme le carré des nombres entiers successifs.

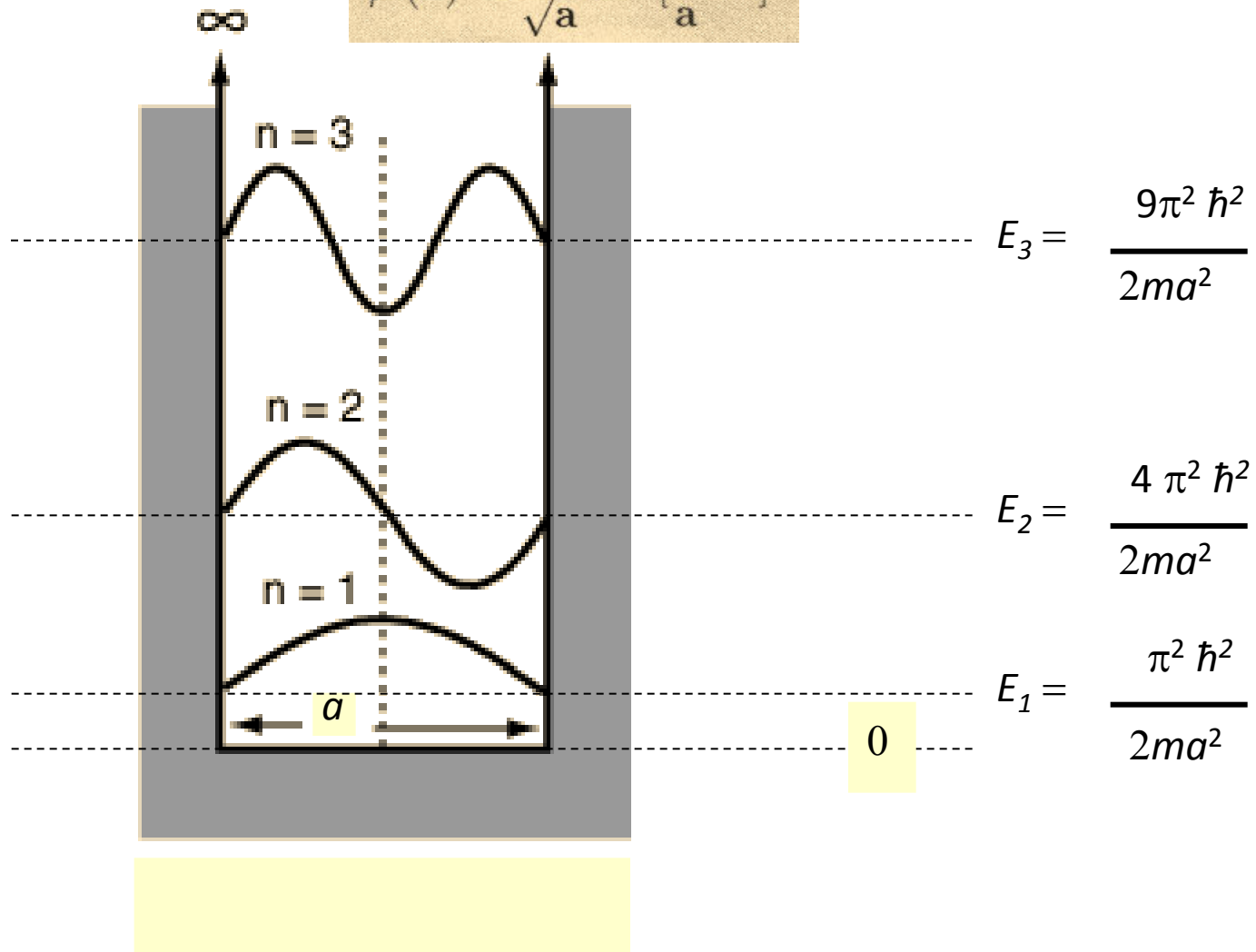
Les constantes A et B se calculent facilement en normalisant les fonctions d'onde c'est à dire en écrivant :

$$\int_{-a}^{+a} |\varphi(x)|^2 dx = 1$$

ce qui donne pour les fonctions d'onde :

$$\varphi^P(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \cos \left[\frac{(2n+1)}{2a} \pi x \right]$$

$$\varphi^I(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin \left[\frac{n}{a} \pi x \right]$$

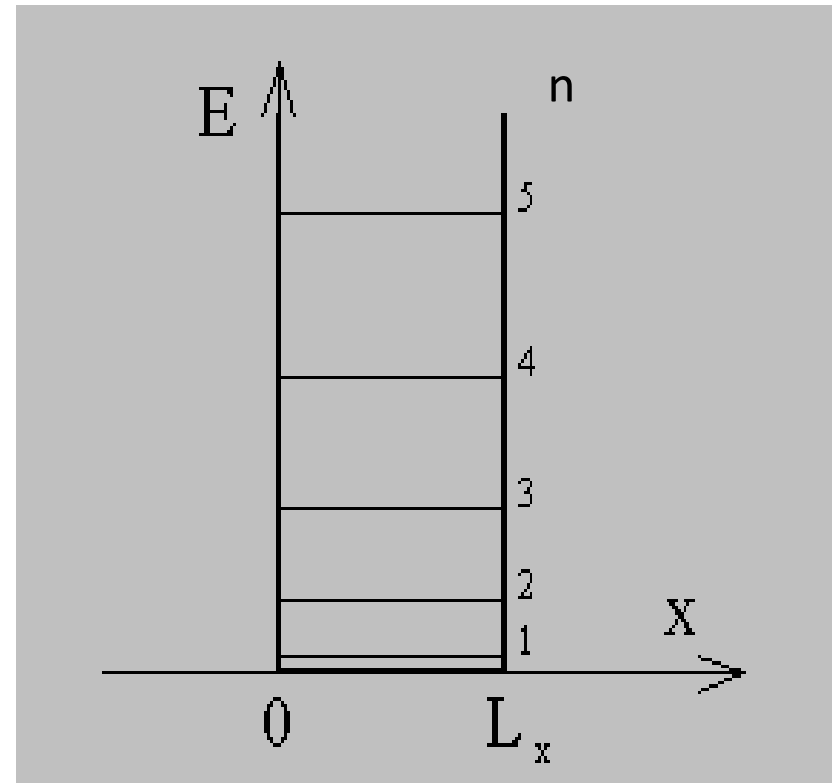


$$E_N = N^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} \quad \text{avec} \quad N = 1, 2, 3, \dots$$

- Les niveaux s'éloignent les uns des autres lorsque n augmente
- L'énergie minimale n'est pas nulle ! C'est l'énergie de point zéro.

- Ceci a des conséquences très importantes en physique statistique et n'a pas d'équivalent « classique ».

- Lorsque a augmente, les niveaux se resserrent. Lorsque a tend vers l'infini la quantification disparaît.



Remarques :

Etat fondamental

Alors que l'état fondamental de la particule classique est caractérisé par une énergie nulle, l'état fondamental ($N = 1$) de la particule quantique est tel que :

$$E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} \neq 0$$

Ce résultat est une conséquence du principe d'incertitude de Heisenberg, en effet:

$$\Delta x \approx 2a \quad \text{et} \quad \Delta p \approx p - (-p) = 2p$$

ce qui donne :

$$\Delta x \Delta p \approx 4ap \geq h \quad \text{et} \quad p \geq \frac{h}{4a}$$

La particule étant libre à l'intérieur du puits on a :

$$E = \frac{p^2}{2m} \quad \text{soit} \quad E \geq \frac{1}{2m} \left(\frac{h}{4a} \right)^2$$

donc : toujours $E > E_1$

Analogie avec les cordes vibrantes :

A l'intérieur du puits la particule est dans des états stationnaires. On peut donc faire une analogie avec la corde vibrante en prenant pour **longueur d'onde associée à la particule la longueur d'onde de De Broglie**. On sait que lorsque la corde de longueur L est le siège d'ondes stationnaires de longueur d'onde λ , on a :

$$L = N \frac{\lambda}{2}$$

$$L = 2a \text{ et } \lambda = \lambda_{DB} = \frac{h}{P}$$

Dans le cas du puits de potentiel on a :

$$2a = \frac{Nh}{2P} \text{ soit : } P = N \frac{h}{4a}$$

On aura donc :

$$E = \frac{P^2}{2m} = \frac{1}{2m} N^2 \left(\frac{h}{4a} \right)^2 = \frac{1}{2m} N^2 \left(\frac{2\pi\hbar}{4a} \right)^2$$

et l'énergie E est telle que

$$E = N^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2}$$

soit :

qui est un résultat identique à celui trouvé à partir des conditions de quantification.

Puits de potentiel quelconque

Si le potentiel $V(x)$ n'est pas pair, une démarche analogue à la précédente conduirait aux énergies et aux fonctions d'onde suivantes (voir TD):

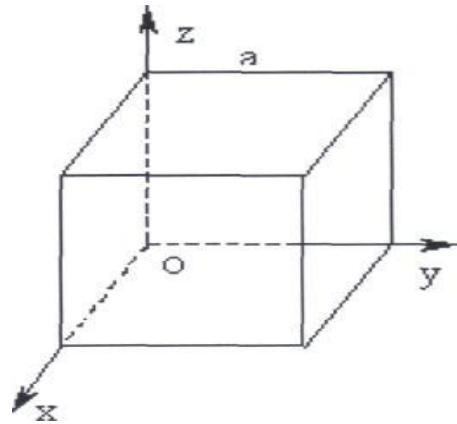


$$E_n = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \quad \text{et} \quad \varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \left[\frac{n\pi}{a} x \right] \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

5.3. Boîte de Potentiel

C'est une généralisation à trois dimensions du puits infini. La particule est dans ce cas placée dans le potentiel cubique défini par :

$$V(x, y, z) = \begin{cases} 0 & \text{pour } 0 < x < a, 0 < y < a, 0 < z < a \\ \infty & \text{ailleurs} \end{cases}$$



l'équation aux valeurs propres s'écrit :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(x, y, z)\right]\Psi(x, y, z) = E\Psi(x, y, z)$$

A l'extérieur de la boîte la fonction d'onde est nulle car le potentiel est infini.

A l'intérieur de la boîte où le potentiel est nul, l'équation aux valeurs propres devient :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\Psi(x, y, z) = E\Psi(x, y, z)$$

Cette équation se résout en séparant les variables

$$\Psi(x, y, z) = \Psi_1(x) * \Psi_2(y) * \Psi_3(z)$$

ce qui conduit à trois équations du type

$$\frac{1}{\Psi_i(x_i)} \frac{\partial^2 \Psi_i(x_i)}{\partial x_i^2} = -k_i^2$$

où $i = 1, 2, 3$ et $x_1 = x$, $x_2 = y$ et $x_3 = z$. Les solutions de ces équations sont

$$\Psi_i(x_i) = A \sin(k_i x_i + \delta_{x_i})$$

Les conditions de continuité en $x = 0$, $y = 0$ et $z = 0$ et en $x = a$, $y = a$ et $z = a$ donnent :

$$\delta_x = \delta_y = \delta_z = 0$$

Et

$$ak_x = n_x \pi, ak_y = n_y \pi, ak_z = n_z \pi$$

ce qui conduit en définitive aux énergies propres et fonctions propres suivantes de la particule :

$$E_n = (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$$
$$\Psi_{n_x, n_y, n_z}(x, y, z) = A \sin\left(n_x \frac{\pi}{a} x\right) \sin\left(n_y \frac{\pi}{a} y\right) \sin\left(n_z \frac{\pi}{a} z\right)$$

La constante A s'obtient en normalisant la fonction d'onde :

$$\int \Psi_{n_x, n_y, n_z}^* \Psi_{n_x, n_y, n_z} dV =$$
$$|A|^2 \int_0^a \sin^2(k_x x) dx \int_0^a \sin^2(k_y y) dy \int_0^a \sin^2(k_z z) dz = 1$$

on obtient :

$$|A| = \sqrt{\frac{8}{a^3}}$$

En posant $N^2 = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2$, on peut écrire enfin

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

$$\Psi_{n_x, n_y, n_z}(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{a^3}} \sin\left(n_x \frac{\pi}{a} x\right) \sin\left(n_y \frac{\pi}{a} y\right) \sin\left(n_z \frac{\pi}{a} z\right)$$

Dans ce cas, une même énergie peut correspondre à plusieurs fonctions propres car plusieurs jeux des nombres entiers n_x , n_y et n_z peuvent donner une même valeur de N^2 . On dit alors que l'énergie est dégénérée; son degré de dégénérescence g est le nombre de fonctions propres linéairement indépendantes correspondant à cette même valeur de l'énergie. Il est facile de déterminer le degré de dégénérescence g comme le montre le

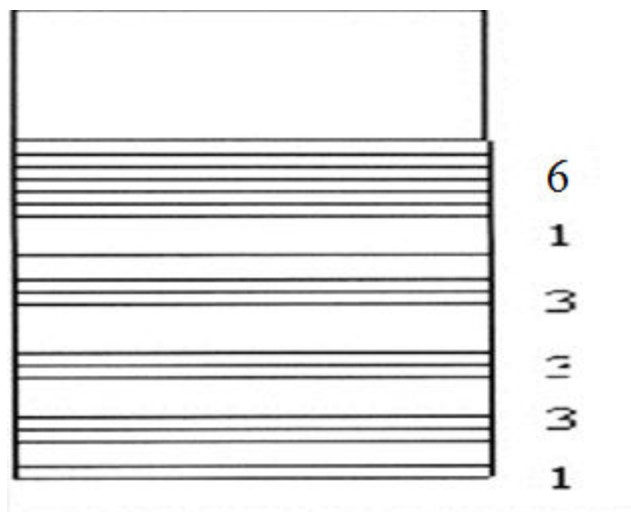
tableau suivant où on a posé : $E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$

Energie	Combinaisons (n_x, n_y, n_z)	Degré de dégénérescence
$3E_1$	(1, 1, 1)	1
$6E_1$	(2, 1, 1), (1, 2, 1), (1, 1, 2)	3
$9E_1$	(2, 2, 1), (2, 1, 2), (1, 2, 2)	3
$11E_1$	(3, 1, 1), (1, 3, 1), (1, 1, 3)	3
$12E_1$	(2, 2, 2)	1
$14E_1$	(1, 3, 2), (2, 1, 3), (3, 1, 2), (1, 2, 3), (3, 2, 1), (2, 3, 1)	6

Lorsque la boîte est rectangulaire d'arêtes a , b , c on montre facilement que les énergies propres et fonctions propres sont données par :

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2} \right)$$

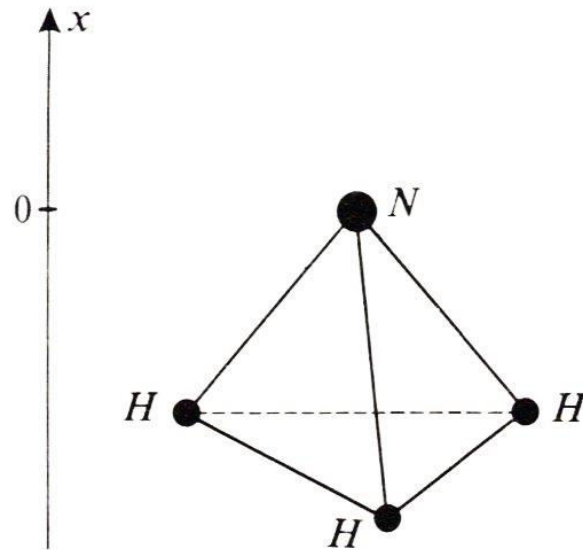
$$\Psi_{n_x, n_y, n_z}(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{abc}} \sin\left(n_x \frac{\pi}{a} x\right) \sin\left(n_y \frac{\pi}{b} y\right) \sin\left(n_z \frac{\pi}{c} z\right)$$



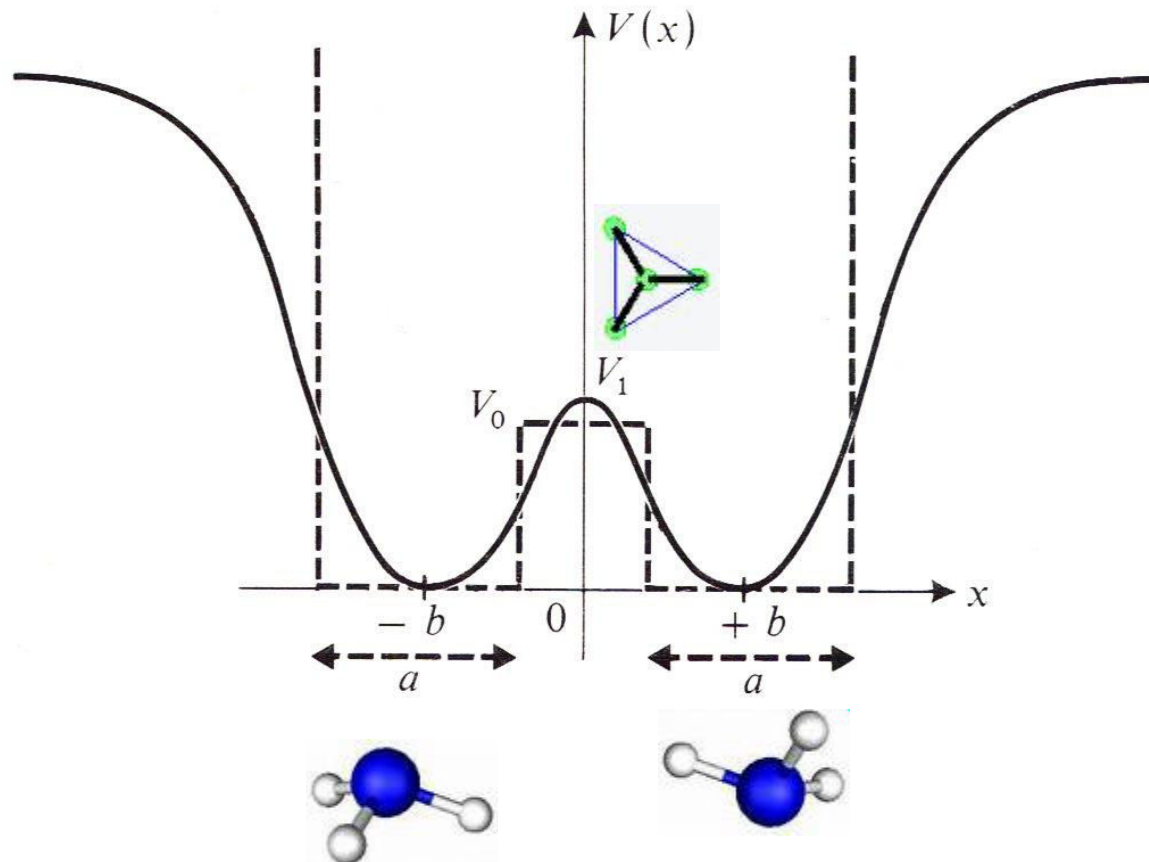
Dans ce situation, la dégénérescence est levée. Dans le cas où a , b , et c ne diffèrent pas beaucoup, tous les niveaux associés au triplet (n_x, n_y, n_z) sont proches les uns des autres et on dit qu'on a **des niveaux "multiplets"**. **De telles structures d'états en multiplets sont appelées des "couches" et donnent lieu à de modèles très utilisés en physique atomique et en physique nucléaire.**

6) Inversion de l'ammoniac

L'inversion de l'ammoniac peut être représentée en considérant la coordonnée d'inversion x qui est la distance (signée) entre le plan engendré par les trois hydrogènes et l'azote ; $x=0$ correspond à la molécule plane.



Le potentiel réel suivant la coordonnée d'inversion (ligne continue) peut être modélisé par un double puits (ligne pointillée). Les puits sont de largeur a et sont centrés en $+b$ et $-b$.

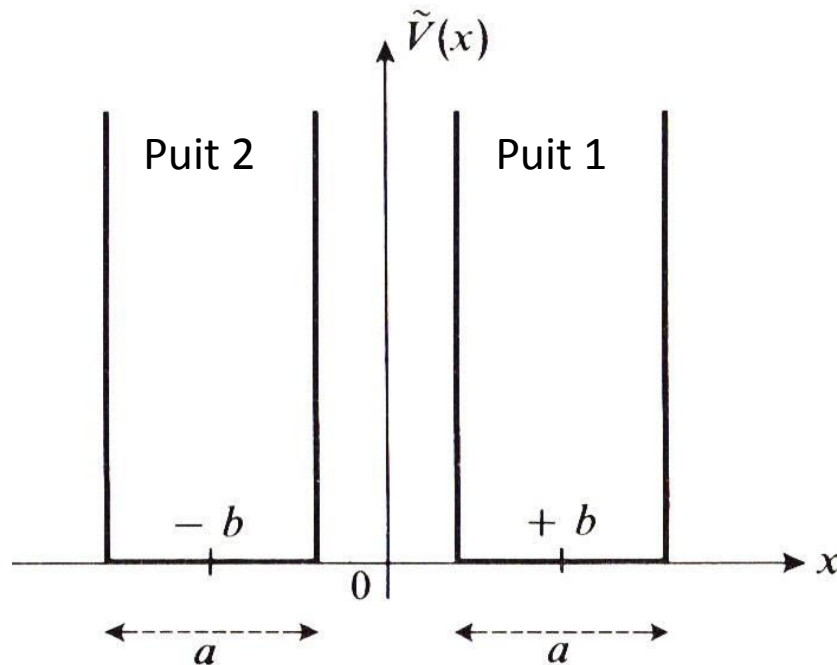


Si la barrière d'inversion est infinie, on se retrouve avec les solutions du système étudié précédemment :

Puit 1 $\varphi_1^n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(k_n (b + a/2 - x))$ si $b - a/2 \leq x \leq b + a/2$

Puit 2 $\varphi_2^n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(k_n (b + a/2 + x))$ si $-b - a/2 \leq x \leq -b + a/2$

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



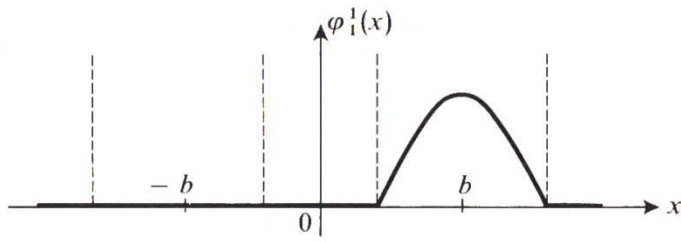
Énergie :

$$E_n = \frac{(n\pi\hbar)^2}{2ma^2} \quad n=1, 2, \dots, \infty$$

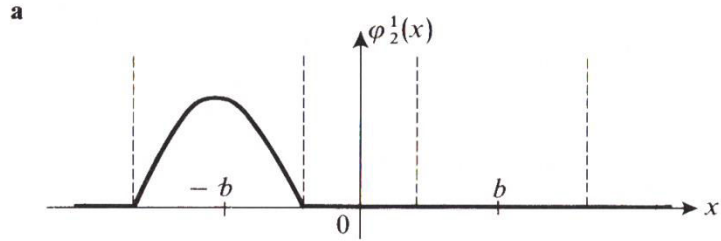
Dans chaque puit

m : masse réduite

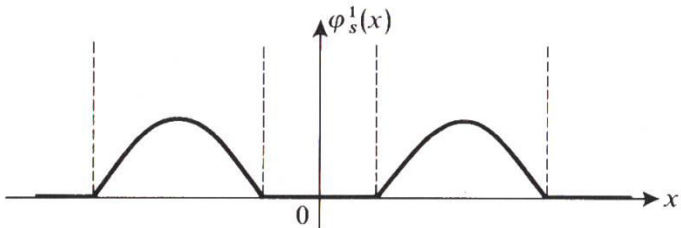
$$m = \frac{m_N \times 3m_H}{m_N + 3m_H}$$



φ_1 Etat fondamental du puit 1

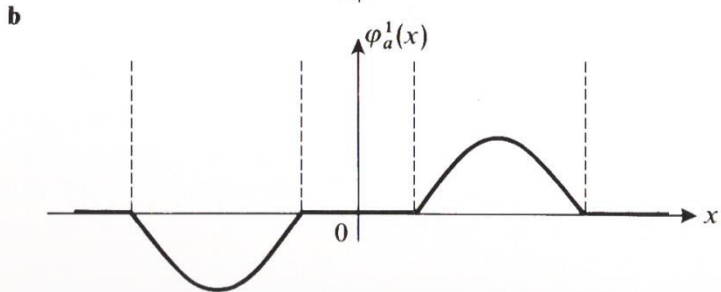


φ_2 Etat fondamental du puit 2



$$\varphi_s = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_1 + \varphi_2]$$

Fonction symétrique



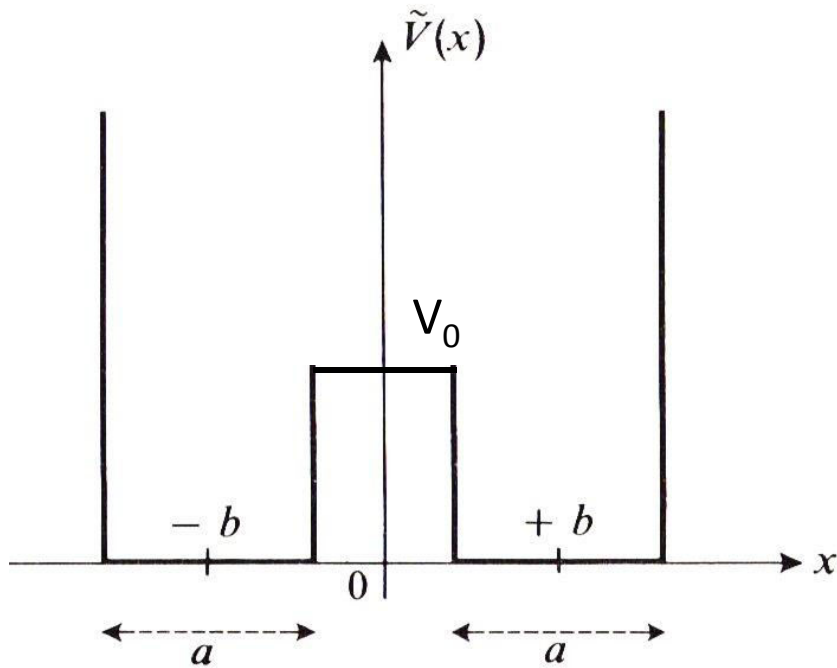
$$\varphi_a = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_1 - \varphi_2]$$

Fonction antisymétrique

NB : les fonctions φ_s et φ_a sont également orthogonales

$$\int \varphi_s^* \varphi_a = \frac{1}{2} \int [\varphi_1^* + \varphi_2^*] [\varphi_1 - \varphi_2] = \frac{1}{2} \left(\int \varphi_1^* \varphi_1 + \int \varphi_1^* \varphi_2 - \int \varphi_2^* \varphi_1 - \int \varphi_2^* \varphi_2 \right) = 0$$

\downarrow \downarrow \downarrow \downarrow
 1 0 0 1



Les solutions que l'on va obtenir pour le double puits avec barrière finie seront également symétriques ou antisymétriques.

On recherche les états d'énergie $E < V_0$

Dans les puits

$$\varphi_1 = A \sin(k(b+a/2-x)) \quad \text{si } b-a/2 \leq x \leq b+a/2$$

$$\varphi_2 = A' \sin(k(b+a/2+x)) \quad \text{si } -b-a/2 \leq x \leq -b+a/2$$

Solution symétrique : $A_s = A'_s$

Antisymétrique : $A_a = -A'_a$

A l'intérieur de la barrière, on a vu qu'il y avait une décroissance exponentielle de la fonction d'onde à partir de chaque extrémité de la forme :

$$\varphi = B e^{qx} \quad \text{avec} \quad q = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} V_0 - k^2}$$

Solution symétrique :

$$\varphi_s = B_s e^{-q(-b+a/2+x)} + B_s e^{-q(-b+a/2-x)} = 2B_s e^{-q(-b+a/2)} \cosh(qx)$$

Solution antisymétrique :

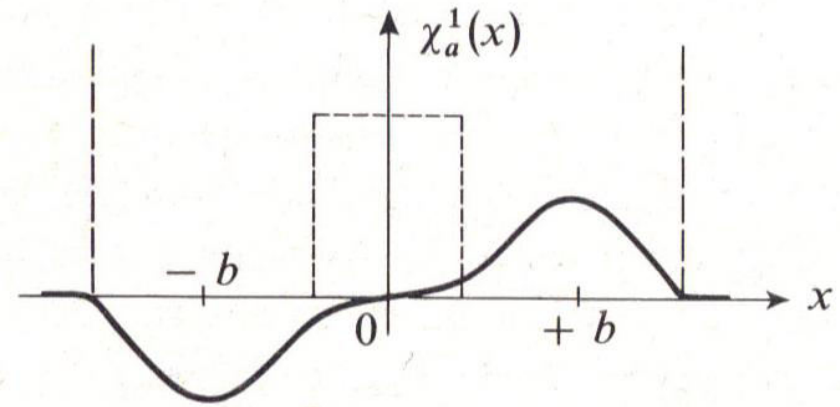
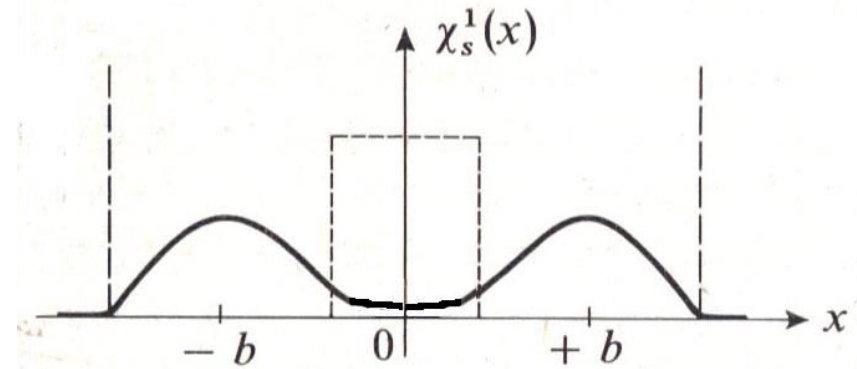
$$\varphi_a = B_s e^{-q(-b+a/2+x)} - B_s e^{-q(-b+a/2-x)} = 2B_s e^{-q(-b+a/2)} \sinh(qx)$$

En écrivant les conditions aux limites de continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée, on obtient ces fonctions.

Il apparaît une condition sur les valeurs possibles de k , différentes suivant que l'on ait une fonction symétrique ou antisymétrique :

$$\operatorname{tg}(k_s a) = \frac{-k_s}{\sqrt{\alpha^2 - k_s^2}} \operatorname{coth} \left[\sqrt{\alpha^2 - k_s^2} \left(b - \frac{a}{2} \right) \right]$$

$$\operatorname{tg}(k_a a) = \frac{-k_a}{\sqrt{\alpha^2 - k_a^2}} \operatorname{th} \left[\sqrt{\alpha^2 - k_a^2} \left(b - \frac{a}{2} \right) \right]$$



$$k_s \neq k_a \Rightarrow E_s \neq E_a$$