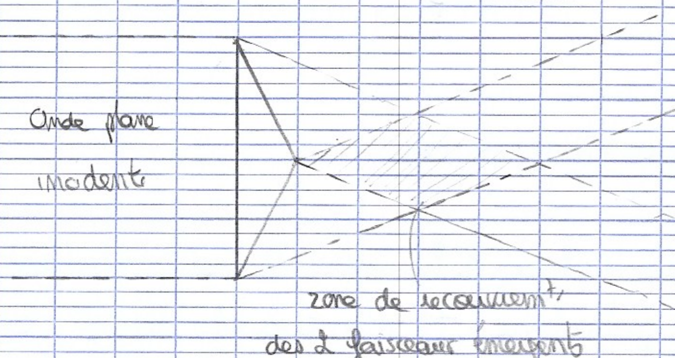
Mécanique quantique

Ondes ou particules ?

Interférences avec des ondes lumineuses



Soit un biprisme éclairé en incidence normale. Les 2 faisceaux déviés se superposent à la sortie du dispositif dans un volume de l'espace. D'un pt de vue classique, ce dispositif offre 2 chemins à la lumière, qui peut passer par le prisme supérieur ou inférieur. La source lumineuse utilisée est une source à photons uniques, elle est capable de délivrer les photons les uns après les autres. De façon imagée, un photon peut ê considéré comme une "particule de lumière". Sa énergie E_{photon} et sa quantité de mvt p_{photon} sont des qtités indivisibles et sont respectivement appelés quantum d'énergie et de qtité de mvt.

L'énergie E_{photon} est liée à la fréquence ν de l'onde électromagnétique associée par la relat° de Planck - Einstein :

$$\boxed{E_{ph} = h\nu}$$

avec $h = 6{,}62 \cdot 10^{-34}$ J

Le photon est une particule relativiste pour laquelle $E_{ph} = p_{ph} \cdot c$ alors :

$$\boxed{p_{photon} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}}$$

λ longueur d'onde dans le vide de l'onde électromag. associée au photon

Interférences avec des ondes de matière

↳ À une particule matérielle de qté de mvt de norme p, est associée une longueur d'onde λ_{DB}, donnée par la relat° de de Broglie :

$$\boxed{\lambda_{DB} = \frac{h}{p}}$$

Principe de complémentarité de Bohr

Selon l'expérience réalisée, la lumière et la matière possèdent un comportement ondulatoire ou particulaire. Il n'existe pas de descript° classique cohérente, en termes d'onde ou de particule, permettant d'interpréter les ≠ phénomènes observés.

La fonct° d'onde et l'équat° de Schrödinger

↳ Descript° de l'état d'une particule

La descript° complète de l'état dynamique d'une particule quantique, de masse m à un instant t dans un référentiel $\mathcal{R}$, se fait au moyen d'une fct° d'onde $\Psi(M,t)$ à valeurs complexes. La probabilité de présence de la particule, à l'instant t, dans un volume mésoscopique $d\tau$ centré au pt M est donnée par la relat° :

$$\boxed{dP(M,t) = \Psi(M,t)\,\Psi^*(M,t)\,d\tau = |\Psi(M,t)|^2\,d\tau}$$

↳ Amplitude de probabilité et condit° de normalisat°

La fct° d'onde $\Psi(x,t)$ est appelée amplitude de probabilité. C'est une fct° à valeurs complexes. On appelle densité de probabilité de présence la qté réelle $|\Psi(x,t)|^2$. Soit $\mathcal{D}$ le domaine de l'espace accessible à la particule. Celle-ci se trouve certainement dans $\mathcal{D}$. Cela se traduit par la relat° de normalisat° :

$$\boxed{\int_{\mathcal{D}} |\Psi(x,t)|^2 = 1}$$

Equat° de Schrodinger

On considère le mvt d'une particule quantique, de masse m, dans un référentiel R.
La particule est en interact° avec d'autres systèmes physiques, ce que l'on traduit par une énergie potentielle, notée $V(M,t)$.
L'équat° décrivant l'évolut° dans l'espace et dans le tps de la fct° d'onde d'une particule quantique a été proposé par Schrodinger. Cette équat° ne se démontre pas. Elle est un postulat fondamental de la mécanique quantique. Les résultats théoriques qu'on en déduit st validés par l'expérience. C'est ce qui lui donne sa légitimité. Elle s'écrit :

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \Psi(M,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(M,t) + V(M,t)\Psi(M,t)}$$

en 1D : $i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t)\Psi(x,t)$

$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1{,}05 \cdot 10^{-34}\ J\,s^{-1}$

↳ Cette éq. est linéaire → on peut superposer des solut°. Si $\Psi_1(x,t)$ et $\Psi_2(x,t)$ st solut° → $\alpha \Psi_1(x,t) + \beta \Psi_2(x,t)$ est solut° (α et β = cste)

↳ L'équat° de Schrodinger indépendante du temps

On appelle état stationnaire un état du système caractérisé par une fct° d'onde factorisé sous la forme $\Psi(x,t) = \varphi(x)\,f(t)$ où φ et f st à priori deux fct° à valeurs complexes.

La densité de probabilité de présence $|\Psi(x,t)|^2$ associée à un état stationnaire est indépendant du temps.

$\Psi(x,t)$ est de la forme : $\Psi(x,t) = \varphi(x)\exp(i\alpha(t))$

En posant $\alpha = \omega \Rightarrow$ on pose l'énergie $E = \hbar\omega$ on a l'équat° de Schrödinger indépendant du temps :

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

Opérateur hamiltonien : $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)$

$$\Rightarrow [\hat{H}\varphi](x) = E\varphi(x)$$

↳ Condit° imposées à la fct d'onde propre

- $\varphi(x)$ ne peut prendre qu'une seule valeur à l'abscisse x
- $\varphi(x)$ est normalisé : $\int_D |\varphi(x)|^2\, dx = 1$. Cette condit° interdit à $\varphi(x)$ de

  diverger en $\pm\infty$
- $\varphi(x)$ est continue
- $\frac{d\varphi(x)}{dx}$ est continue en tt point où l'énergie potentielle $V(x)$ est continue ou

  ne prend pas de discontinuité d'amplitude infinie.

Inégalités de Heisenberg

Soit $2N$ particules quantiques, ttes préparées dans un m̂ état initial donné par $\Psi(x, t=0)$. À un instant t on procède à une mesure de posit° (x) pour N de ces particules et pour les autres N on mesure la qtité de mvt.
Soit $N \gg 1$ on a

$$\langle x \rangle = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} x_i \ , \quad \langle p_x \rangle = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} p_{x_j} \ ; \ \langle x^2 \rangle = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} x_i^2$$

$$\langle p_x^2 \rangle = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} p_{x_j}^2$$

Chacune de ces 2 distributº peut ê caractérisé par une dispersion statistique des mesures autour de la valeur moyenne. Soit Δx et Δp_x, l'amplitude de ces fluctuatº stat. autour de la valeur moyenne. On les appelle indéterminatº quantiques sur la positº et la qtité de mvt. Elles st définies :

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} \qquad \Delta p_x = \sqrt{\langle p_x^2 \rangle - \langle p_x \rangle^2}$$

On ne peut pas attribuer simultanément à une particule quantique une positº rigoureusement précise et une qtité de mvt rigoureusement précise. Il existe une limitatº intrinsèque à la définitº simultanée de la positº et de la quantité de mouvement imposée par l'inégalité de Heisenberg spatiale

$$\boxed{\Delta x \, \Delta p_x \geqslant \frac{\hbar}{2}}$$

↳ inégalité temps - énergie

La pulsatº moyenne d'un signal est d'autant mieux définie que sa durée est importante. → l'indéterminatº sur la pulsatº, $\Delta\omega$, diminue lorsque la durée du signal, τ, augmente

↳ $\tau \cdot \Delta\omega \geqslant \frac{1}{2}$

En utilisant $E = \hbar\omega$ on obtient l'inégalité temps - énergie :

$$\boxed{\tau \cdot \Delta E \geqslant \frac{\hbar}{2}}$$

→ L'énergie associée à un état stationnaire est parfaitement définie.

Quantique ou classique ?

La limite classique correspond à la situat° où l'act° caractéristique d'un syst. physique est très largement supérieur à ħ.
La comparaison de l'act° caractéristique d'un syst. et de ħ donne une indicat° sur le comportement quantique ou classique du syst. étudié. Pour déterminer l'act° caractéristique d'un syst. on pourra utiliser les relat° :

$$\boxed{\begin{aligned} act° &= \text{énergie} \times \text{durée} \\ act° &= \text{qtité de mvt} \times \text{distance} \\ act°^2 &= \text{énergie} \times \text{masse} \times \text{longueur}^2 \end{aligned}}$$

Principe de correspondance de Bohr

Dans les condit° où les résultats classiques et quantiques doivent concorder, la théorie quantique doit se ramener au résultat classique

Evolut° d'une particule quantique libre

La particule quantique libre

Def : On appelle particule quantique libre, une particule quantique évoluant dans le vide sans interact°.

↳ particule isolée dont le mvt est caractérisé par une énergie potentielle nulle.
↳ on aura $V(x) = 0$ et :

$$\hookrightarrow i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2}$$

Etats stationnaires d'une particule quantique libre

↳ OPPH : on cherche une solut° où la fct° d'onde est factorisé ss la forme d'un produit d'une fct° de t et d'une fct° de x.
→ $\Psi(x,t) = \varphi(x) \exp(-i\omega t)$, où $\varphi(x)$ solut° de l'éq de Schrödinger indépendante du tps avec $V(x) = 0$

$$\Rightarrow \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + \frac{2m\omega}{\hbar} \varphi(x) = 0$$

- $\omega < 0$ → $\varphi(x) = A \exp(kx) + B \exp(-kx)$ avec A et B cstes
$$k = \sqrt{\frac{2m(-\omega)}{\hbar}}$$

Comme $|\varphi(x)|^2$ diverge qd $x \to \pm\infty$ → solut° pas acceptable
→ $A = B = 0$

- $\omega = 0$ → $\varphi(x) = Ax + B$ Comme $|\varphi(x)|^2$ ne doit pas diverger qd $x \to \pm\infty$
on a $A = 0$. $\int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi(x)|^2 dx = 1$ impose $B = 0$

- $\omega > 0$ → $\varphi(x) = A \exp(ikx) + B \exp(-ikx)$ avec $k = \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}$

L'expression complète de l'onde est :

$$\Psi(x,t) = A\exp(i(kx-\omega t)) + B\exp(-i(kx+\omega t))$$

→ superposition d'une OPH progressant dans le sens des x croissants $Ae^{i(kx-\omega t)}$ et d'une OPH progressant dans le sens des x ↓ $B\exp(-i(kx+\omega t))$

On a aussi

$$|\Psi(x,t)|^2 = |A\exp(ikx) + B\exp(-ikx)|^2$$

↳ $\neq f(t)$ ⟹ état stationnaire

↳ Relation de dispersion et vitesse de phase

Relation de dispersion $\boxed{\omega = \dfrac{\hbar k^2}{2m}}$

Vitesse de phase : $\boxed{v_\varphi = \dfrac{\omega}{k} = \dfrac{\hbar k}{2m}}$

v_φ dépend de k → propagation dispersive

Représentation d'une particule quantique par un paquet d'ondes

Soit une propagation d'une superposition d'ondes harmoniques de pulsation et de vecteurs d'onde proches des valeurs ω_0 et k_0 liées par la relation de dispersion : $\omega_0 = \dfrac{\hbar k_0^2}{2m}$

On superpose N ondes harmoniques, avec $N \gg 1$. Leurs vecteurs d'onde sont supposés régulièrement distribués dans $[k_1, k_2]$. On pose $\Delta k = k_2 - k_1$ et $k_0 = \dfrac{1}{2}(k_1 + k_2)$

On suppose $\Delta k \ll k_0$. Cette approximation définit un paquet d'ondes quasimonochromatique.

Pour former le paquet d'ondes, on choisit d'ajouter des composantes de même amplitude : $\Psi_n(x,t) = A \exp(i(k_n x - \omega_n t))$

avec $k_n = \dfrac{\Delta k}{N-1}(n-1) + k_1$ et $\omega_n = \dfrac{\hbar k_n^2}{2m}$ et où $1 \leq n \leq N$

On aura alors :

$$\Psi_n(x,t) = A \exp(i(k_0 x - \omega_0 t)) \exp((k_n - k_0)x - (\omega_n - \omega_0)t)$$

Soit $\delta k_n = k_n - k_0$. Pour évaluer $\delta\omega_n = \omega_n - \omega_0$ on utilise la relat° de dispers°

$$\omega_n = \frac{\hbar k_n^2}{2m}$$

$$\Leftrightarrow \omega_0 + \delta\omega_n = \frac{\hbar}{2m}(k_0 + \delta k_n)^2 = \frac{\hbar k_0^2}{2m} + \frac{\hbar k_0}{m}\delta k_n + \frac{\hbar}{2m}\delta k_n^2$$

soit puisque $\omega_0 = \dfrac{\hbar k_0^2}{2m}$

$$\delta\omega_n = \frac{\hbar k_0}{m}\delta k_n + \frac{\hbar}{2m}\delta k_n^2$$

On remarque que $\dfrac{\hbar k_0}{m} = \left(\dfrac{d\omega}{dk}\right)_{k=k_0}$ → vitesse de groupe

$$\boxed{v_g = \frac{\hbar k_0}{m}}$$

Soit $\left|\dfrac{\frac{\hbar}{2m}\delta k_n^2}{\frac{\hbar k_0}{m}\delta k_n}\right| = \left|\dfrac{\delta k_n}{2k_0}\right| \ll 1 \Rightarrow \delta\omega_n = v_g\,\delta k_n$

La f°t° d'onde obtenue par superposit° s'écrit

$$\Psi(x,t) = A \exp(i(k_0 x - \omega_0 t)) \sum_{n=1}^{N} \exp(i\,\delta k_n (x - v_g t))$$

et la densité de proba de présence : $|\Psi(x,t)|^2 = |A|^2 \left|\sum_{n=1}^{N} \exp(i\,\delta k_n (x - v_g t))\right|^2$

Il importe de retenir qu'un paquet d'ondes construit par superposition d'ondes planes progressives harmoniques dont les vecteurs d'onde sont distribués dans un intervalle de largeur Δk a une extension spatiale Δx_0 qui varie comme l'inverse de Δk, conformément à l'inégalité de Heisenberg spatiale :

$$\boxed{\Delta x_0 \, \Delta k \geqslant 1/2}$$

On retiendra qu'on peut représenter une particule quantique par un paquet d'ondes quasi-monochromatiques de vecteur d'onde moyen $\vec{k} = k\,\vec{u}_x$ et de pulsation moyenne ω. La quantité de mouvement $\vec{p}$ et l'énergie E de la particule quantique sont données par les relations :

$$\boxed{\begin{array}{l} \vec{p} = \hbar \vec{k} \\ E = \hbar \omega \end{array}}$$

Vecteur densité de courant de probabilité

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

↳ met en évidence un "débit" de probabilité de présence à l'abscisse x à travers une surface unité.

↳ la probabilité de présence qui "s'écoule" à travers une abscisse x pendant une durée dt est : $dP = \vec{j}(x,t) \cdot \vec{u}_x \, dt$

Interprétation hydrodynamique

Pour une OPPH $\psi_N(x,t) = \sqrt{\rho} \exp(i(kx - \omega t))$ tq ρ désigne la densité linéique de particules quantiques, le vecteur

$$\boxed{\vec{j}_N = \rho \frac{\hbar \vec{k}}{m}}$$

est le vecteur densité de courant de particules

On peut aussi définir le flux algébrique de particules ϕ

$$\boxed{\phi = \vec{j_N} \cdot \vec{u_x}}$$

le nbr de particules qui passent à une abscisse donnée par unité de tps

Interférences et diffract° d'ondes de matière

Interfrange : l'express° de l'interfrange est la m̂ qu'en optique :

$$\boxed{i = \frac{\lambda_{DB} D}{a}}$$

Diffract° : en raison du phénomène de diffract°, la probabilité de présence ne prend des valeurs non nulles qu'autour de l'origine O', dans une région, appelée tache centrale de diffract° d'extens° spatiale égale à :

$$\boxed{\Delta x_{diff} = \frac{2 \lambda_{DB} D}{d}}$$

Evolut° d'une particule quantique dans un potentiel

On envisage maintenant l'étude d'une particule quantique en interact° avec un syst. physique. Cette interact° est modélisée par une énergie potentielle, supposée stationnaire, $V(x)$.
On sait que l'évolut° de la fct° d'onde est régie par l'éq. de Schrödinger :

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

On supposera que l'énergie potentielle de la particule quantique est indépendante du temps. On cherchera des solut° du type $\Psi(x,t) = \varphi(x)\exp\left(\frac{-iEt}{\hbar}\right)$

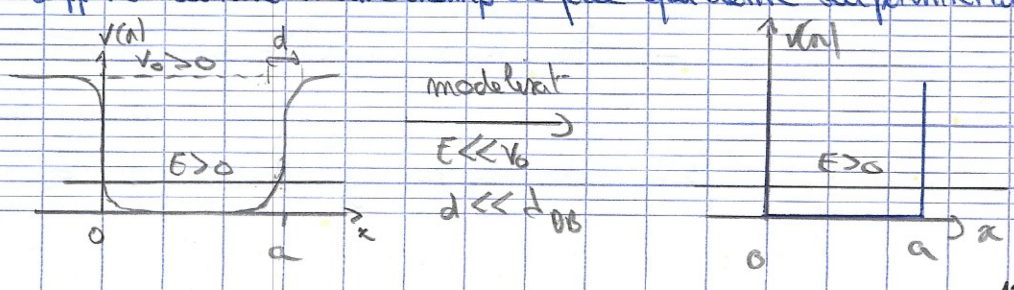
Il suffira de résoudre l'éq. de Schrödinger indépendante du tps :

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

Cas d'un puits de potentiel infiniment profond

On sait réaliser aujourd'hui des systèmes physiques véritablement confinés dans des boîtes de dimensions nanométriques ("boîtes quantiques"), et m̂ confiner des électrons à une dimens° dans un "puits quantique" où chaque électron est susceptible de se déplacer sur de grandes distances selon les 2 direct° y et z alors que son mouvement selon x est limité à l'échelle de quelques nanomètres.

Soit une situat° modèle : un puits de potentiel infiniment profond. La particule quantique est supposée soumise à un champ de force qui dérive du potentiel ayant l'allure :



La région entre 0 et a est appelée puits de potentiel.
On considère le potentiel suivant :

$$V(x) = \begin{cases} +\infty & \text{pour } x < 0 \\ 0 & \text{pour } 0 \leq x \leq a \\ +\infty & \text{pour } x > a \end{cases}$$

↳ fct° d'onde propres

Quand $V(x) \to +\infty$ l'éq de Schrödinger indépendante du tps impose $\varphi(x) \to 0$

Les rég° de l'espace où le potentiel est infiniment élevé sont interdites à la particule quantique.

Pour $0 \leq x \leq a \Rightarrow \frac{d^2\varphi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\varphi(x) = 0$

- Cas où $E \leq 0$

on pose alors $k = \frac{\sqrt{2m(-E)}}{\hbar} \to \varphi(x) = A\exp(kx) + B\exp(-kx)$

$\to \varphi(0) = \varphi(a) = 0 \Rightarrow A = B = 0 \to$ aucun intérêt

- Cas où $E > 0$

↳ $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \to \varphi(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx)$

Avec les C.L $\to \varphi(0) = \varphi(a) = 0 \Rightarrow B = 0$

$A\sin(ka) = 0$

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

$\Rightarrow \varphi_n = A_n\sin(k_n x) = A_n\sin(n\pi\frac{x}{a})$

↳ A_n déterminé par $\int_0^a |\varphi_n(x)|^2 = 1 \Rightarrow A_n = \sqrt{\frac{2}{a}}$

On a alors la fct° d'onde : $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(n\pi \frac{x}{a}\right)$ $(n = 1, 2, 3 \ldots)$

A partir de la relat° $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ on a les valeurs possibles de l'énergie de la particule quantique :

$$E_n = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \quad (n = 1, 2, 3 \ldots)$$

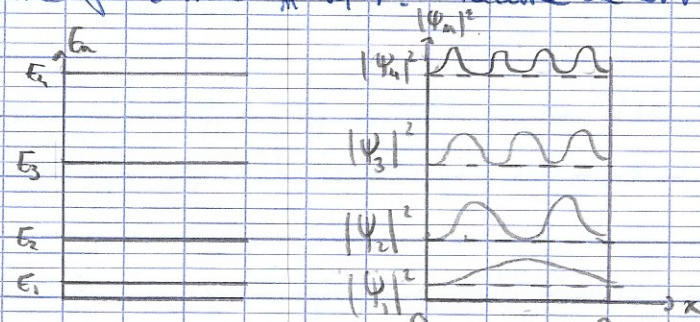
L'expression complète des fct° d'onde obtenues est :

$$\boxed{\psi_n(x,t) = \sqrt{\frac{2}{a}} \exp\left(-i \frac{E_n}{\hbar} t\right) \sin\left(n\pi \frac{x}{a}\right)} \quad \text{avec } E_n = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

<u>Niveau d'énergie</u>

On a une suite discrète de valeurs de l'énergie : les énergies possibles sont quantifiées et l'entier n est un nbre quantique. Cette suite discrète est appelée spectre d'énergie de la particule quantique.

A chaque valeur du nbre quantique n, correspond une valeur précise de l'énergie E_n, associée à une fct° d'onde $\psi_n(x,t)$. Chacune de ces valeurs définit un niveau d'énergie.



Le niveau d'énergie le plus bas, appelé niveau fondamental pour $n = 1$

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

Quand une particule classique est piégée dans un puits de potentiel infiniment profond, elle peut avoir une énergie arbitrairement petite mais ne peut pas ê $< E_1$

L'energie minimale de la particule quantique est d'autant plus élevé que la longueur a du puits est petite cad que la particule est mieux localisé.

Les nvx d'energie de nbre quantique > 1 st appelés niveaux excités

Interprétat° de l'existence d'un état d'energie minimale

L'energie cinétique minimale d'une particule quantique confinée est d'autant plus élevé que la particule est piégé dans un domaine d'extens° spatiale réduite. On l'appelle energie de localisat° ou energie de confinement.
Son ordre de grandeur est :

$$\boxed{E_{c,min} \simeq \frac{\hbar^2}{ma^2}}$$ a longueur du confinement

Densité de probabilité de présence

La densité de proba. de presence dans le puit de potentiel ∞ est donnée, pour $0 \leq x \leq a$ par la relat° $P_n(x) = |\Psi_n(x)|^2 = \frac{2}{a} \sin^2(n\pi \frac{x}{a})$. Elle est nulle en dehors du puits.

↳ $|\Psi_n(x)|^2$ est symétrique par rapport à $x = a/2$ → conséquence directe de la symétrie du potentiel $V(x)$ par rapport à $x = a/2$

↳ Une particule classique piegée dans un puits de potentiel ∞ profond a une energie cinétique et dc une vitesse qui gardent la m̂ valeur, quelle que soit la posit° de la particule.
↳ proba. egales de se trouver n'importe où entre $x = 0$ et $x = a$
→ $P_{cl} = 1/a$

Évolut° temporelle d'une superposit° d'états stationnaires

Toute fonction d'onde non stationnaire peut ê écrite comme une combinaison linéaire des fonct d'onde stationnaires :

$$\boxed{\Psi(x,t) = \sum_{n=1}^{+\infty} c_n \varphi_n(x) \exp(-i E_n t / \hbar)}$$

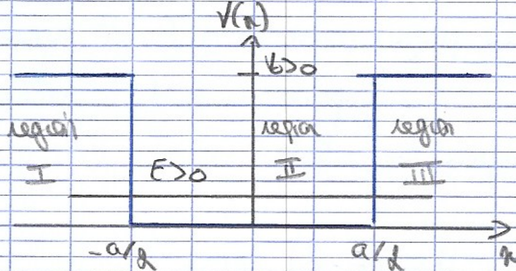
$$\text{avec } \sum_{n=1}^{+\infty} |c_n|^2 = 1$$

Cas d'un puits de potentiel de profondeur finie

On envisage la situat° où l'énergie E de la particule quantique n'est plus négligeable devant la profondeur du puits V_0. C'est le modèle du puits de potentiel de profondeur finie.

Il correspond à :

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



Les discontinuités de potentiel en $x = -a/2$ et $x = a/2$ modélisent des variat° du potentiel réel sur des distances caractéristiques très inférieures à la longueur d'onde de de Broglie de la particule quantique.

Le potentiel est stationnaire → on cherche des solut° de l'éq. de Schrödinger sous la forme d'états stationnaires pour des valeurs positives de l'énergie E de la particule quantique.

Etats symétriques et antisymétriques

Soit l'origine des abscisses tel que $V(x)$ soit pair : $V(x) = V(-x)$
Soit une fct° d'onde propre connue $\varphi(x)$ solut° de l'éq. de Schrodinger indépendante du tps et correspondant à une valeur E de l'energie :

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

Si on transforme x en $-x$ = $\frac{d^2\varphi(-x)}{d(-x)^2} + V(x)\varphi(-x) = E\varphi(-x)$

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

$\varphi(x)$ et $\varphi(-x)$ st tles des fct° d'onde propres associées à la m̂ valeur de l'energie E. On a alors à partir de $\varphi(x)$ et $\varphi(-x)$ deux nvelles fct° d'onde propres :

$$\varphi_S(x) = \gamma(\varphi(x) + \varphi(-x)) \quad \text{et} \quad \varphi_A(x) = \gamma'(\varphi(x) - \varphi(-x))$$

γ et γ' facteurs de normalisat°
$\varphi_S(x)$ fct° d'onde propre paire de x (fct° symétrique)
$\varphi_A(x)$ " " " impaire de x (" antisymétrique)
Ces fct° doivent vérifier les relat°

$$\varphi''(x) + \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}\varphi(x) = 0 \quad \text{region I et III}$$

$$\varphi''(x) + \frac{2mE}{\hbar^2}\varphi(x) = 0 \quad \text{region II}$$

↳ - Etat de diffus° $E \geq V_0$ → particule non confinée → E de la particule quantique n'est pas quantifiée = elle peut varier de façon c° → spectre continue d'energie

- Etats liés $0 \leq E \leq V_0$ → particule confinée dans le puits de potentiel → son energie est quantifiée

Déterminat° des fct° d'onde propres symétriques et antisymétriques des états liés

Les états liés correspondent à $0 \leq E \leq V_0$, ce qui conduit à poser :

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad \text{et} \quad q = \frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}$$

Les éq s'écrivent alors :

$$\varphi''(x) - q^2\varphi(x) = 0 \qquad \text{région I et III}$$
$$\varphi''(x) + k^2\varphi(x) = 0 \qquad \text{région II}$$

Les solut° de ces éq. sont :

I $\quad \varphi_S(x) = A_1 e^{qx} + B_1 e^{-qx} \qquad \varphi_A(x) = C_1 e^{qx} + D_1 e^{-qx}$

II $\quad \varphi_S(x) = A_2 \cos(kx) \qquad \varphi_A(x) = C_2 \sin(kx)$

III $\quad \varphi_S(x) = B_1 e^{qx} + A_1 e^{-qx} \qquad \varphi_A(x) = -D_1 e^{qx} - C_1 e^{-qx}$

La fct° d'onde ne peut pas diverger qd $x \to \pm\infty \Rightarrow B_1 = 0$ et $D_1 = 0$

I $\quad \varphi_S(x) = A_1 e^{qx} \qquad \varphi_A(x) = C_1 e^{qx}$

II $\quad \varphi_S(x) = A_2 \cos(kx) \qquad \varphi_A(x) = C_2 \sin(kx)$

III $\quad \varphi_S(x) = A_1 e^{-qx} \qquad \varphi_A(x) = -C_1 e^{-qx}$

Le potentiel $V(x)$ présente des discontinuités d'amplitude finie en $x = -a/2$ et $x = a/2 \Rightarrow$ on doit alors imposer la c° de la fct° d'onde propre, mais aussi la disc° de sa dérivée première en $x = -a/2$ et $x = a/2$. La symétrie du pb fait qu'il suffit d'écrire ces condit° en $a/2$

→ Pour la fct° d'onde propre symétrique :

$$\varphi_S\left(\frac{a^-}{2}\right) = \varphi_S\left(\frac{a^+}{2}\right) \Rightarrow A_1 e^{-qa/2} = A_2 \cos(ka/2)$$

$$\varphi_S'\left(\frac{a^-}{2}\right) = \varphi_S'\left(\frac{a^+}{2}\right) \Rightarrow qA_1 e^{-qa/2} = kA_2 \sin(ka/2)$$

Afin d'éviter la solut° $A_1 = 0$ et $A_2 = 0$ on doit avoir :

$$k\sin\left(\frac{ka}{2}\right) = q\cos\left(\frac{ka}{2}\right)$$

Pour la fct° d'onde propre antisymétrique, le m̂ type de calculs conduit à la solut° :

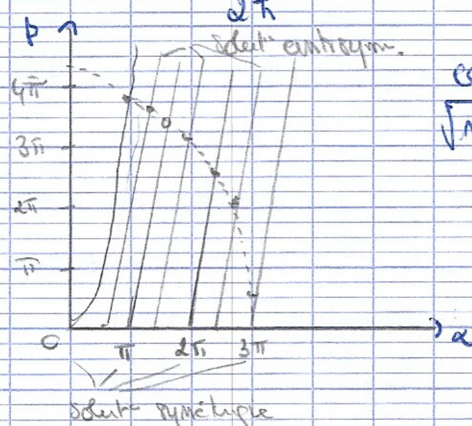
$$q \sin\left(\frac{ka}{2}\right) = -k \cos\left(\frac{ka}{2}\right)$$

Posons $\alpha = ka/2$ et $\beta = qa/2$, on a alors :

$$\beta = \alpha \tan \alpha$$
$$\beta = -\alpha \cotan \alpha$$

Par ailleurs les express° de k et q en fct° de V_0 donnent : $k^2 + q^2 = \frac{2mV_0}{\hbar}$

$$\Rightarrow \alpha^2 + \beta^2 = \frac{ma^2 V_0}{2\hbar^2}$$



cercle centré sur l'origine, de rayon $\sqrt{ma^2V_0/2\hbar}$

Niveaux d'énergie

Les solut° obtenues sont en nombre fini et alternent entre solut° symétriques et antisymétriques. Aux solut° obtenues pour α, correspondent des valeurs quantifiées de k et donc de l'énergie E. En repérant par un indice n les solut° obtenues pour α (n pair → solut° symétrique et n impair → solut° antisym.) on a :

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{2\hbar^2}{ma^2}\alpha_n^2$$

n = nb quantique permettant de repérer chaque niv d'énergie

Profondeur de pénétrat°

La présence d'une particule classique en dehors du puits de potentiel est formellement interdite par la mécanique classique, l'énergie mécanique étant nécessairement supérieure ou égale à l'énergie potentielle.
La fct° d'onde propre varie proportionnellement à $\exp(qx)$ dans la région I et propot. à $\exp(-qx)$ dans la région III. Elle est atténuée sur une distance caractéristique $\delta = 1/q$ que l'on identifie à la distance caractéristique de la particule quantique dans ces régions.

La profondeur de pénétrat° de la particule quantique d'énergie $E < V_0$ dans les régions interdites par la mécanique classique est :

$$\boxed{\delta = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}}$$

Comparaison avec le puit de potentiel infiniment profond

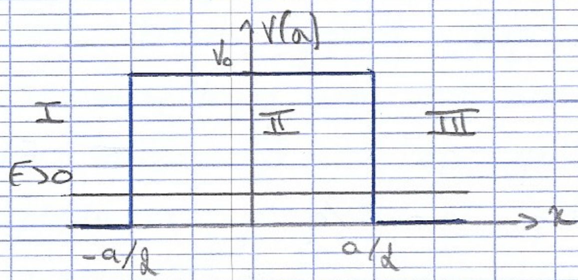
Une particule quantique piégée dans un puit de profondeur finie, et d'énergie $E \ll V_0$, "voit" un puit de potentiel de profondeur infinie de largeur
$a_{eff} = a + 2\delta$

Barrière de potentiel et effet tunnel

L'étude du puits de potentiel de profondeur finie a mis en évidence la pénétrat° de la fct° d'onde, sa forme d'onde évanescente, dans des régions inaccessibles au sens de la méca classique. Nous allons étudier le cas d'une barrière de potentiel où cet effet, qui porte le nom d'effet tunnel, se manifeste de façon encore plus spectaculaire.
Le problème étudié correspond à celui d'un faisceau de particules quantiques incidentes, d'énergie E, provenant de $x \to -\infty$ et se dirigeant vers une

barrière de potentiel. On pose :

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



La région $-a/2 \leq x \leq a/2$ constitue la barrière de potentiel, de largeur a et de hauteur V_0

↳ du pt de vue de la méca classique, si une particule classique incidente a une énergie E supérieure à V_0, elle peut aller au delà de la barrière de potentiel et atteindre $x \to +\infty$. Dans le cas inverse, elle ne peut pas aller au delà de $x = -a/2$ et rebrousse chemin.

↳ du pt de vue de la méca quantique, l'étude du puits de potentiel de profondeur finie a montré que, lorsque $E < V_0$, la proba. de présence est non nulle dans la région classiquement interdite → une particule quantique peut donc traverser la barrière ou peut ê réfléchie.

On veut déterminer les proba. de réflexion et de transmission. On se limitera au cas où l'énergie E de la particule quantique est $E \leq V_0$.

Express° de la f^{tc} d'onde propre

On cherche une solut° sous forme d'état stationnaire en résolvant l'éq. de Schrodinger indépendante du tps. La f^{tc} d'onde doit vérifier les éq. diff

$$\varphi''(x) + k^2 \varphi(x) = 0 \qquad \text{région I et III}$$
$$\varphi''(x) - q^2 \varphi(x) = 0 \qquad \text{région II}$$

Avec $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ et $q = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$

Les solut° mathématiques des éq. diff sont :

$$\text{I} \quad \varphi(x) = A_1 \exp(ikx) + B_1 \exp(-ikx)$$
$$\text{II} \quad \varphi(x) = A_2 \operatorname{ch}(qx) + B_2 \operatorname{sh}(qx)$$
$$\text{III} \quad \varphi(x) = A_3 \exp(ikx) + B_3 \exp(-ikx)$$

Dans la région I, la fct° d'onde retenue correspond à la somme d'une onde plane harmonique progressant dans le sens des x croissants (que l'on appellera onde incidente) et d'une onde plane harmonique progressant dans le sens des x décroissants (onde réfléchie).
Dans la région III, la fct° d'onde retenue s'écrit aussi ss la forme d'une somme de 2 ondes progressant dans 2 sens opposés. Nous supposons qu'il n'existe, au delà de $x > a/2$ aucune source émettant des particules quantiques vers la barrière, et donc aucune onde provenant de $+\infty$: nous pouvons donc imposer $B_3 = 0$ et ne considérer, pour $x > a/2$, qu'une onde progressant dans le sens des x croissants : l'onde transmise.
Dans la rég° II, la fct° d'onde peut ê écrite ss la forme d'une superposit° de deux ondes évanescentes.

Le potentiel $V(x)$ présente des disc° d'amplitude finie en $x = -a/2$ et $x = a/2$ => on doit alors imposer la c° de la fct° d'onde propre, mais aussi la c° de sa dérivée première en $x = -a/2$ et $x = a/2$

- Continuité de $\varphi(x)$ en $-a/2$

$$A_1 \exp\left(-i\frac{ka}{2}\right) + B_1 \exp\left(i\frac{ka}{2}\right) = A_2 \operatorname{ch}\left(\frac{qa}{2}\right) - B_2 \operatorname{sh}\left(\frac{qa}{2}\right)$$

- Continuité de $\varphi(x)$ en $a/2$

$$A_3 \exp\left(i\frac{ka}{2}\right) = A_2 \operatorname{ch}\left(\frac{qa}{2}\right) + B_2 \operatorname{sh}\left(\frac{qa}{2}\right)$$

- Continuité de $\varphi'(x)$ en $-a/2$:

$$ikA_1 \exp\left(-i\frac{ka}{2}\right) - ikB_1 \exp\left(i\frac{ka}{2}\right) = -qA_2 \operatorname{sh}\left(\frac{qa}{2}\right) + qB_2 \operatorname{ch}\left(\frac{qa}{2}\right)$$

- Continuité de $\varphi'(x)$ en $a/2$:

$$ikA_3 \exp\left(i\frac{ka}{2}\right) = qA_2 \operatorname{sh}\left(\frac{qa}{2}\right) + qB_2 \operatorname{ch}\left(\frac{qa}{2}\right)$$

Proba. de réflexion et de transmiss°. Effet tunnel

On pose $\omega = E/\hbar$

Onde incidente : $\psi_i(x,t) = A_1 \exp(i(kx - \omega t))$
Onde réfléchie : $\psi_r(x,t) = B_1 \exp(-i(kx + \omega t))$
Onde transmise : $\psi_t(x,t) = B_3 \exp(i(kx - \omega t))$

Les vecteurs densité de courant de probabilité s'expriment ainsi :

Onde incidente : $\vec{j_i} = \dfrac{\hbar \vec{k}}{m} |\psi_i(x,t)|^2 = |A_1|^2 \dfrac{\hbar \vec{k}}{m}$

Onde réfléchie $\vec{j_r} = -\dfrac{\hbar \vec{k}}{m} |\psi_r(x,t)|^2 = -|B_1|^2 \dfrac{\hbar \vec{k}}{m}$

Onde transmise $\vec{j_t} = \dfrac{\hbar \vec{k}}{m} |\psi_t(x,t)|^2 = |A_3|^2 \dfrac{\hbar \vec{k}}{m}$

On peut en déduire les proba. de réflex° et de transmiss°

$$R = \frac{\|\vec{j_r}\|}{\|\vec{j_i}\|} = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2}$$

$$T = \frac{\|\vec{j_t}\|}{\|\vec{j_i}\|} = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2}$$

On a alors :

$$R = \frac{\frac{V_0^2}{4E(V_0-E)} sh^2(qa)}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0-E)} sh^2(qa)}$$

$$T = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0-E)} sh^2(qa)}$$

→ T n'est jamais nulle : une particule quantique a donc toujours la possibilité de traverser la barrière de potentiel. Cet effet est purement quantique → effet tunnel, il est dû à l'existence d'ondes évanescentes dans la barrière de potentiel

On a aussi

$$\boxed{R + T = 1}$$

__Représentat° de la densité de proba de présence__

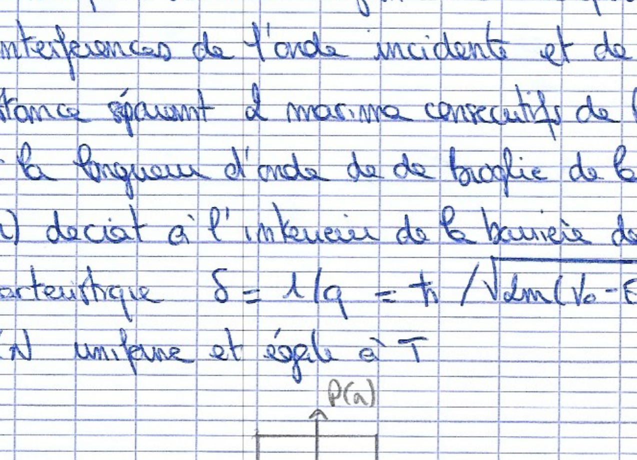
La densité de proba de présence = $P(x) = |\Psi(x,t)|^2$

Région I : $P(x) = 1 + R + 2\sqrt{R}\cos(2kx - \varphi)$

avec φ argument du rapport B_1/A_1. La densité de proba n'est pas uniforme dans la région I car on y observe un phénomène d'interférences de l'onde incidente et de l'onde réfléchie. La distance séparant 2 maxima consécutifs de $P(x)$ est $\lambda_{DB}/2$ où λ_{DB} est la longueur d'onde de de Broglie de la particule quantique

Rég° II : $P(x)$ décroit à l'intérieur de la barrière de potentiel sur une distance caractéristique $\delta = 1/q = \hbar/\sqrt{2m(V_0-E)}$. A la sortie $P(x) \neq 0$

Rég° III : $P(x)$ uniforme et égale à T



Approximat° d'une barrière épaisse

Dans III, $\varphi(x)$ décroît sur une distance de l'ordre de la distance de pénétrat° δ. Une situat° courante correspond au cas où $a \gg \delta$:

$$a \gg \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}$$

Cette inégalité définit l'approximat° d'une barrière épaisse. Dans cette limite on peut simplifier l'express° de T

$$\boxed{T \approx \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} \exp\left(-\frac{2a}{\delta}\right)}$$

Pour une estimat° de l'ordre de grandeur de la proba. de transmiss° à travers une barrière épaisse, on pourra utiliser l'express° approchée suivante :

$$\boxed{T \simeq f\left(\frac{E}{V_0}\right) \exp\left(-\frac{2a}{\delta}\right)}$$

Si E diffère de 0 ou V_0, on peut remplacer $f(E/V_0)$ par sa valeur moyenne, proche de 3