Définition :

Une particule matérielle non-relativise sans spin placée dans un champ de force dérivant d'une énergie potentielle $V(M,t)$ admet pour équation dynamique de sa fonction d'onde l'équation de Schrödinger :

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

Cette équation est basée sur la correspondance :

$$E = E_C + \underbrace{E_P}_{V(x)}$$

Exemple 1 Montrer que pour une onde plane de matière de la forme :

$$\Psi(x,t) = A^{i(kx-\omega t)}$$

l'équation de Schrödinger permet de retrouver l'expression de l'énergie mécanique du sytème.

Définition :

On appelle **état stationnaire**, l'état quantique caractérisé par une fonction d'onde pouvant s'écrire sous forme à variables d'espace et de temps séparées :

$$\boxed{\Psi(M,t) = \varphi(M) \times g(t)}$$

g et φ sont des fonctions complexes, $\varphi(M)$ est appelée la fonction d'onde spatiale et $g(t)$ traduit l'évolution temporelle de la fonction d'onde.

Définition :

Les états stationnaires de l'équation de Schrödinger dans le cas d'une énergie potentielle indépendante du temps (i.e. $V(M,t) = V(M)$) s'écrivent :

$$\Psi(M,t) = \varphi(M) \times e^{-iEt/\hbar}$$

Définition :

Pour un état stationnaire, la partie spatiale $\varphi(M)$ de la fonction d'onde vérifie l'équation de Schrödinger indépendante du temps :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi(M) + V(M)\varphi(M) = E \times \varphi(M)$$

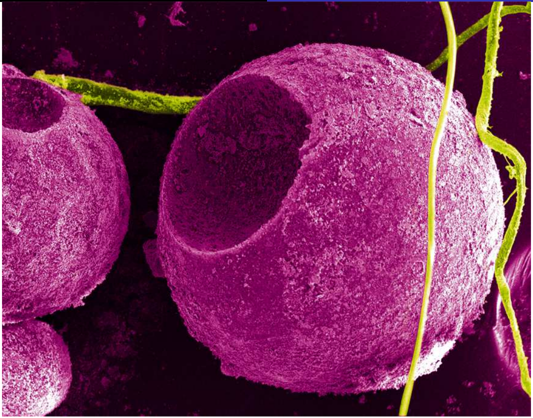
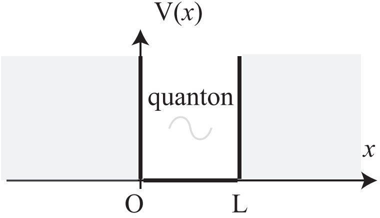


Figure – Cadmium sulfide quantum dots on cells, Wikipedia.

Exemple 2



On note $\Psi(x,t) = \varphi(x)e^{-iEt/\hbar}$ la fonction d'onde d'un quanton se déplaçant dans le potentiel $V(x)$ avec une énergie E. Le potentiel est infini en $x < 0$ et $x > L$. Pour la région à l'intérieur de la boîte $V(x) = 0$

1 - Déterminer l'équation vérifiée par φ pour $0 \leqslant x \leqslant L$.

2 - Justifier que φ est nul pour $x < 0$ et $x > L$.

3 - En déduire que $\varphi(x)$ peut s'écrire sous la forme :

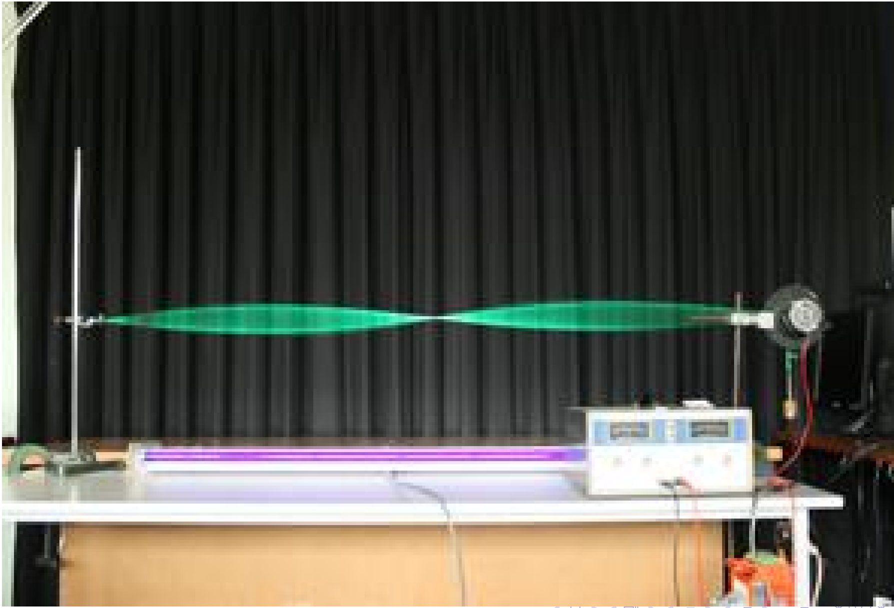
$$\varphi(x) = Ae^{ik_nx} + Be^{-ik_nx}$$

avec k_n s'exprimant en fonction de L.

4 - En utilisant la condition de normalisation, déterminer la constante A.

5 - Montrer que l'énergie peut se mettre sous la forme :

$$E_n = n^2 E_0$$



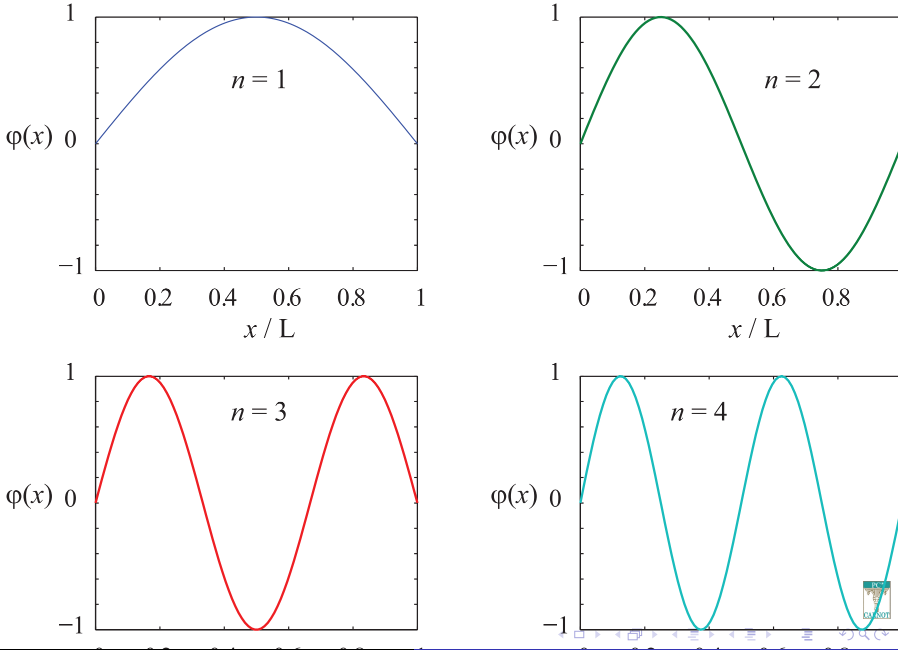
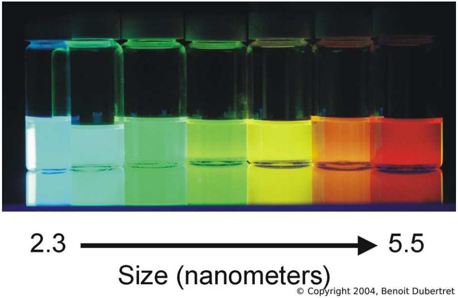

n = 1
n = 2
n = 3
n = 4
φ(x)
x / L
1
0
−1
0
0.2
0.4
0.6
0.8

Figure – Fonctions d'onde spatiales d'un état stationnaire dans un puits infini.

Exemple 3 Les boites quantiques sont utilisées comme des atomes artificiels calibrés en fonction de la fréquence d'émission voulue. On suppose que les énergies des différents niveaux suivent la loi : $E_n = \frac{n^2 h^2}{8mL^2}$ où m est la masse du quanton et L la largeur du puits infini.



Dans les boites synthétisées ci-dessus, les quantons sont appelés excitons et ont une masse apparente de $m^* = 0,06 \times m_e$.

1 - Calculer en J puis en eV les énergies des deux premiers niveaux

E_1 et E_2 de ces excitons.
2 - Montrer que pour un piège de taille $L = 3\ \mathrm{nm}$, le photon émis par une désexcitation du niveau E_2 est dans le spectre visible.
3 - Justifier que plus la taille de la cavité est grande plus la longueur d'onde du photon associé à cette transition est importante.
Données : $m_e = 9.10^{-31}\ \mathrm{kg}$, $h = 6,6.10^{-34}\ \mathrm{m^2.kg.s^{-1}}$

Exemple 4 On considère un électron d'une boite quantique placé à l'état initial dans l'état correspondant à la superposition :

$$\psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1(x) + \phi_2(x))$$

où ϕ_1 et ϕ_2 correspondent aux états stationnaires d'énergie E_1 et $E_2 = 4E_1$.

1 - Exprimer et repré

1 - Exprimer la densité de probabilité de présence $P(x,t)$. Que peut ont dire de son évolution ?

2 - Montrer que le système oscille entre deux états décrits par les fonction d'onde spatiale :

$$\Psi^+(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1(x) + \phi_2(x)) \quad \text{et} \quad \Psi^-(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1(x) - \phi_2(x))$$

Données : fonction d'onde spatiale dans un puits infini

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

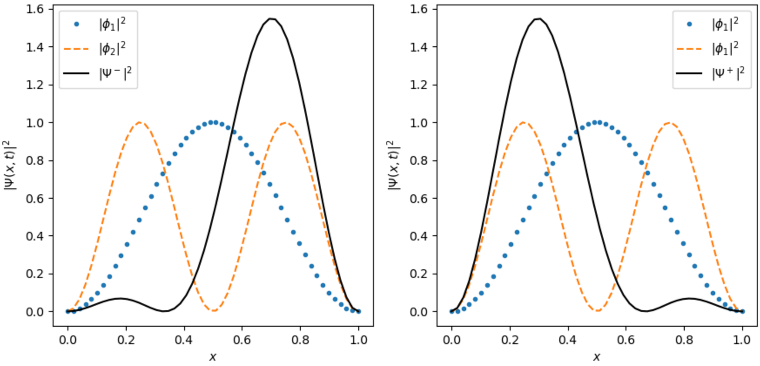


Figure – Superposition d'état

Définition :

En mécanique quantique, une fonction d'onde est dite évanescente lorsque son module diminue exponentiellement avec la distance à la source.

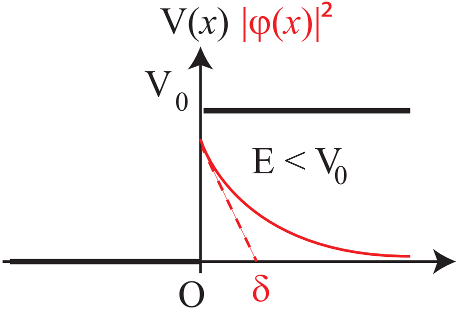


Figure – Décroissance de la densité de probabilité dans le cas où $E < V_0$

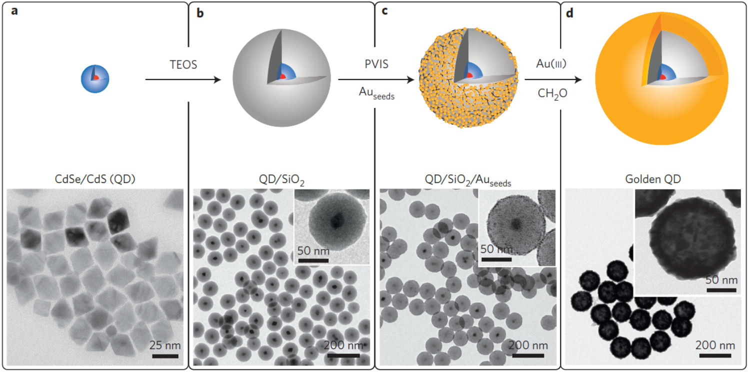
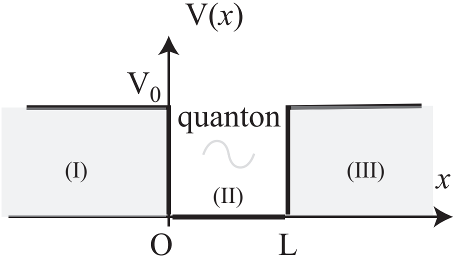


Figure – Réalisation de boite quantique protégée. Nature 2015, Non-blinking quantum dot with a plasmonic nanoshell resonator, Dubertret.

Exemple 5

On note $\Psi(x,t) = \varphi(x)e^{-iEt/\hbar}$ la fonction d'onde d'un quanton se déplaçant un puits de potentiel fini de hauteur V_0 sur une distance L.



On considère que l'énergie E est inférieure à V_0.

1 - Déterminer l'équation différentielle vérifiée par la fonction d'onde spatiale φ dans les 3 domaines notés *I*, *II* et *III*.

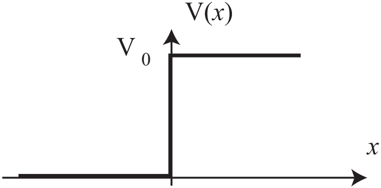
2 - En déduire la forme de la fonction d'onde dans chaque domaine. On posera $q = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$

3 - Définir l'extension spatiale caractéristique du quanton dans le puits de hauteur fini.

4 - Dans un puits infini de largeur L, l'énergie du quanton est de la forme $E_n = n^2 h^2 / 8mL^2$. Représenter approximativement les niveaux d'énergie du puits fini en le justifiant.

Exemple 6

Soit un quanton non relativiste de masse m et d'énergie E se déplaçant vers une marche de potentiel définie par :



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

On supposera que l'énergie du quanton est inférieure à la marche $E < V_0$, sa fonction d'onde est de la forme :

$$\psi_1(x,t) = A_1 e^{ik_1 x - iEt/\hbar}$$

1 - Déterminer la forme de la fonction d'onde spatiale de l'état stationnaire quantique associé au quanton dans l'espace $x < 0$ et $x > 0$. On posera $k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar$ et $q = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$.
2 - Montrer que l'expression de la fonction d'onde spatiale peut se mettre sous la forme :

$$\varphi(x<0)=A_1\left(e^{ik_1x}+re^{-ik_1x}\right)\quad \text{et} \quad \varphi(x\geqslant 0)=\tau A_1 e^{-qx}$$

où A_1 est une constante indéterminée, on exprimera r et τ en fonction de k_1 et q.

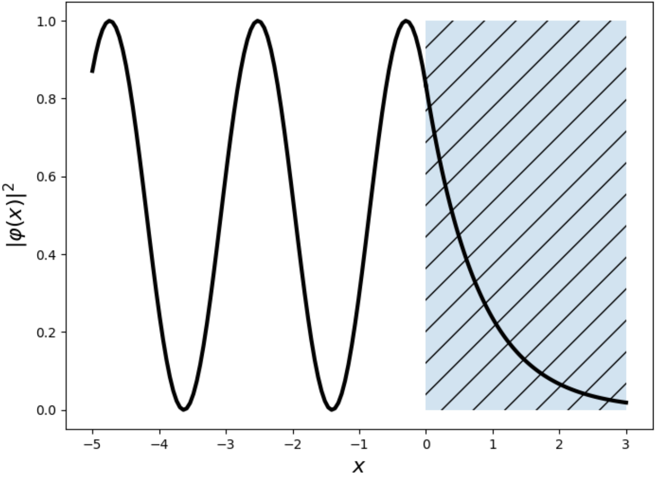
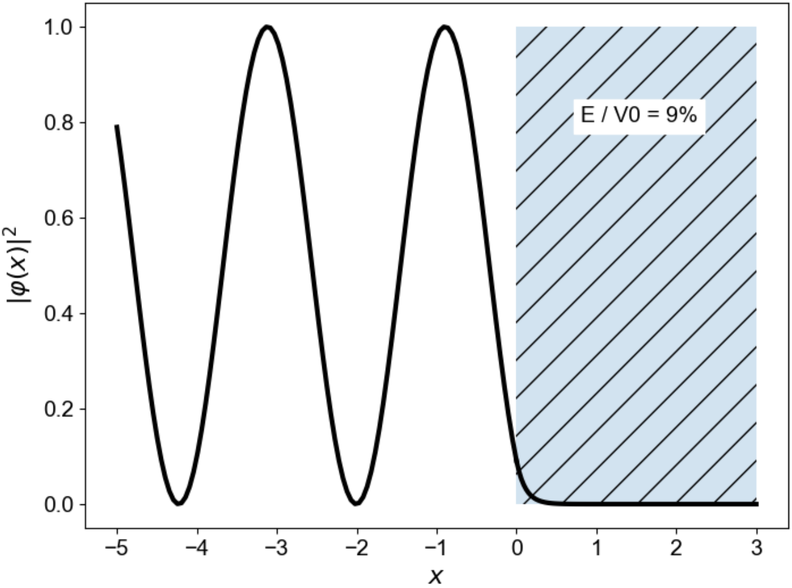


Figure – Densité de probabilité pour $E = 0,8 \times V_0$


E / V0 = 9%
1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0.0
$|\varphi(x)|^2$
−5
−4
−3
−2
−1
0
1
2
3
x

Définition :

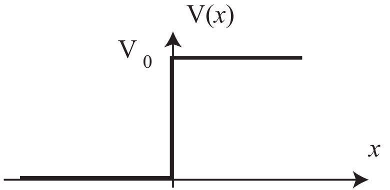
Le flux de densité de probabilité d'une onde de de Broglie est défini par

$$\vec{J} = |\psi|^2 \frac{\hbar \vec{k}}{m}$$

Le direction du vecteur $\vec{J}$ indique la direction de propagation de la fonction d'onde. Sa norme correspond au nombre de quanton par seconde traversant une surface perpendiculaire à $\vec{J}$.

Exemple 7

Soit un quanton non relativiste de masse m et d'énergie E se déplaçant vers une marche de potentiel définie par :



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

On supposera que l'énergie du quanton est inférieure à la marche $E<V_0$, sa fonction d'onde spatiale est de la forme :

$$\varphi(x<0)=A_1\big(e^{ik_1x}+re^{-ik_1x}\big) \quad \text{et} \quad \varphi(x\geqslant 0)=\tau A_1 e^{-qx}$$

avec $r=\frac{ik_1+q}{ik_1-q}$ et $\tau=\frac{2ik_1}{(ik_1-q)}$.

1 - Montrer que sa fonction d'onde dans la zone $x<0$ peut se mettre sous la forme

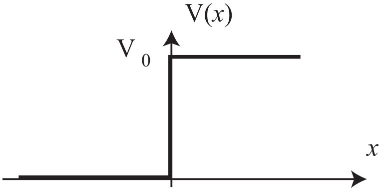
$$\Psi(x<0,t)=\Psi^+(x,t)+\Psi^-(x,t)$$

où Ψ^+ et Ψ^- sont des fonctions progressives.
2 - Définir à partir de Ψ^+ et Ψ^- deux courants de probabilité $\vec{J}^+$ et $\vec{J}^-$. Commenter les valeurs obtenues.

Exemple 8 Soit un quanton non relativiste de masse m et d'énergie E se déplaçant dans une marche de potentiel définie par :

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

On supposera que l'énergie du quanton est supérieur à la marche $E > V_0$.



1 - Déterminer la forme de la fonction d'onde spatiale de l'état stationnaire quantique associé au quanton dans l'espace $x<0$ et $x>0$. On posera $k_1=\sqrt{2mE}/\hbar$ et $k_2=\sqrt{2m(E-V_0)}/\hbar$.
2 - En exploitant la continuité de la fonction d'onde et sa dérivée, montrer que l'expression de la fonction d'onde spatiale peut se

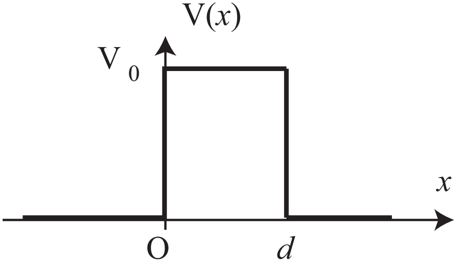
mettre sous la forme :

$$\varphi(x<0) = A_1\left(e^{ik_1x} + re^{-ik_1x}\right) \quad \text{et} \quad \varphi(x \geqslant 0) = \tau A_1 e^{ik_2x}$$

où r et τ sont deux constantes que l'on exprimera en fonction de k_1 et k_2.

3 - Représenter le profil de densité de probabilité de présence. Interpréter le résultat obtenu d'un point de vue ondulatoire probabiliste en imaginant un flux continu de quantons incidents identiques indépendants.

Exemple 9 4 - La densité de courant de probabilité est définie par $\vec{J} = |\Psi|^2 \dfrac{\hbar\vec{k}}{m}$. Exprimer les densités de courant de probabilité pour un faisceau de particules incidentes $\vec{J}_{inc}$, réfléchies $\vec{J}_{ref}$ et transmises $\vec{J}_{trans}$.
5 - Déterminer le coefficient de réflexions et de transmission correspondant au pourcentage de particules réfléchies et transmises. Conclure en comparant à un comportement classique des particules.


V(x)
V 0
x
O
d

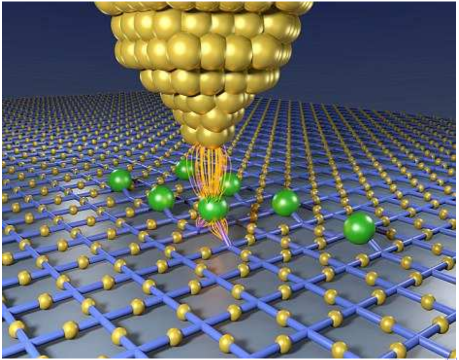


Figure – Barrière de potentiel associée à une pointe de microscope électronique à effet tunnel. Vue d'artiste d'après Wikipédia.

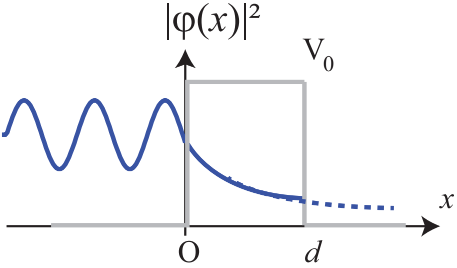


Figure – Fonction d'onde sur une barrière de potentielle.

Exemple 10 Un faisceau de charges (charge q, masse m, énergie $E = 5\ \mathrm{eV}$) parvient sur une barrière de potentiel de largeur $L = 0,5\ \mathrm{nm}$ et de hauteur énergétique $V_0 = 10\ \mathrm{eV}$ (énergie potentielle nulle en-dehors de celle-ci). On note T le coefficient de transmission définie par :

$$T = 16\frac{E}{V_0}\left(1 - \frac{E}{V_0}\right)e^{-2L/\delta}$$

1 - S'il s'agit d'un faisceau électronique d'intensité $I = 10\ \mathrm{mA}$, estimer la proportion des électrons qui franchissent la barrière et l'intensité I_s du courant associé.

2 - Reprendre la question précédente pour des protons.

3 - Conclure.