

Equation de Schrödinger

On raconte que quand Schrödinger a exposé l'hypothèse de de Broglie des ondes de matière lors d'un séminaire, Debye s'est exclamé : « Qu'est-ce que c'est que cette onde qui n'a pas d'équation ? ».

La quantité de mouvement est obtenue par la dérivée spatiale, l'énergie cinétique est reliée à la dérivée seconde spatiale :

I. Equation de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} = \underbrace{\frac{p^2}{2m}}_{E_C} \Psi(x,t)$$

1 - Postulat

a) L'équation de Schrödinger à une dimension

Schrödinger choisit en 1926 d'ériger cette équation en un postulat de base de la physique quantique! Celle-ci gouverne la dynamique de la fonction d'onde qui est interprétée avec le principe de Born (énoncé fin 1926, après l'équation de Schrödinger).

L'équation postulée par Schrödinger est basée sur le principe de correspondance. La fonction d'une onde plane à une dimension peut être décrite par :

$$\Psi(x,t) = \Psi_0 e^{i(px/\hbar - Et/\hbar)}$$

Ainsi une particule dans le vide possédant une quantité de mouvement p a une énergie

$$E = E_C = \frac{p^2}{2m}$$

L'équation vérifiée par sa fonction d'onde est :

L'énergie est reliée à la dérivée temporelle :

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = E \Psi(x,t)$$

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

Définition :

Une particule matérielle non-relativiste 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 :

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

En 3-D la généralisation de cette équation devient :

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

où Δ est l'opérateur Laplacien.

b) Propriétés de l'équation

L'équation régissant la dynamique de la fonction d'onde doit vérifier le cahier des charges suivants :

- l'équation doit être linéaire : si Ψ_1 et Ψ_2 sont solutions, alors $\Psi_1 + \Psi_2$ l'est aussi. Ceci est indispensable pour expliquer les expériences d'interférence de particules : il faut que les ondes puissent se superposer.
- l'équation doit être différentielle d'ordre 1 par rapport au temps : de la sorte, la connaissance de Ψ à un instant initial donne suffit à déterminer toute son évolution ultérieure (ce qui est conforme au principe de Born qui impose que Ψ détermine totalement l'état du système).
- l'équation respecte le principe de correspondance : les prévisions de la théorie quantique doivent se confondre avec celles de la théorie classique dans le domaine de validité de cette dernière.

- L'énergie totale d'une particule matérielle est égale à la somme de son énergie cinétique et de son énergie potentielle :

$$E = \frac{1}{2}mv^2 + V = \frac{p^2}{2m} + V$$

pour des particules non relativistes. Le terme $-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(M,t)$ correspond donc à l'énergie cinétique de la particule.

- Pour assurer la cohérence avec le cas du photon qui est une particule sans charge ni masse, nous devons retrouver une fonction d'onde harmonique, c'est à dire une combinaison linéaire de fonctions sinusoïdales, dans le cas particulier de la fonction d'onde d'une particule libre, c'est à dire une particule sur laquelle ne s'exerce aucune force.

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 système.

En injectant dans l'équation on obtient

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{p^2}{2m}$$

2 - États stationnaires

a) Expression de la fonction d'onde

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 :

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

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.

Résolvons l'équation de Schrödinger unidimensionnelle pour un état stationnaire. L'équation suivante

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

devient

$$i\hbar \varphi(x) \times g'(t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \varphi''(x) \times g(t) + V(x)\varphi(x) \times g(t)$$

Une technique de résolution consiste à isoler les fonctions temporelles des fonctions spatiales. Factorisons le membre de droite puis isolons les fonctions, on obtient alors :

$$i\hbar \varphi(x) \times g'(t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \varphi''(M) + V(x)\varphi(x) \right) \times g(t)$$

$$i\hbar \frac{g'(t)}{g(t)} = \frac{\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \varphi''(x) + V(x)\varphi(x) \right)}{\varphi(x)}$$

Le temps et l'espace n'étant pas couplés, chaque membre de l'égalité ci-dessus est forcément constant car une fonction temporelle ne peut être égal à chaque instant à une fonction spatiale en tout point. Notons C la constante, on obtient donc deux équations différentielle pour chaque fonction :

$$i\hbar g'(t) = Cg(t) \tag{1.1}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \varphi''(x) + V(x)\varphi(x) = C\varphi(x) \tag{1.2}$$

L'équation temporelle peut s'écrire sous la forme canonique suivante :

$$g'(t) - \frac{iC}{\hbar} g(t) = 0$$

Les solutions de cette équations sont de la forme

$$g(t) = g_0 e^{-iCt/\hbar}$$

C est une grandeur homogène à une énergie.

Supposons le système isolé, c'est-à-dire que le potentiel ne dépend pas explicitement du temps (ce ne serait pas le cas d'une particule chargée soumise à un champ électrique oscillant). L'énergie est alors bien définie, la fonction $g(t)$ peut donc s'écrire sous la forme

$$g(t) = g_0 e^{-iEt/\hbar}$$

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 :

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

Un état stationnaire n'évolue pas, son énergie est connue de façon certaine. Cette propriété se retrouve dans le principe d'incertitude d'Heisenberg temps-énergie :

$$\Delta E \times \tau \geq \hbar/2$$

où ΔE est la fluctuation d'énergie et τ le temps caractéristique d'évolution du système. Pour les états stationnaires : $\Delta E \rightarrow 0$ et $\tau \rightarrow \infty$.

Remarque 1 :

Il faut distinguer l'état stationnaire en mécanique quantique de l'onde stationnaire en physique des ondes. On peut en effet avoir un état stationnaire et une écriture d'une onde propagative en mécanique quantique alors que ces deux notions sont antinomique en physique des ondes.

b) Fonction d'onde spatiale

Lorsque l'on injecte la fonction d'onde dans l'équation de Schrödinger, on obtient une équation différentielle vérifiée par la partie spatiale.

Définition :

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

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

Propriétés :

- La densité de probabilité de présence d'un état stationnaire est indépendante du temps :

$$|\Psi(\mathbf{M},t)_{\text{ES}}| = |\varphi(\mathbf{M})|^2$$

- La fonction d'onde spatiale $\varphi(x)$ d'un état stationnaire unidimensionnel est de classe \mathcal{C}_1 et bornée.

II. Particule dans un puits infini de potentiel

1 - Les boîtes quantiques

On parle de confinement quantique lorsque les déplacements des électrons ou des trous d'un semiconducteur sont limités dans une ou plusieurs dimensions.

Selon que l'on a confinement dans une, deux ou trois dimensions on a un puits quantique, un fil quantique ou une boîte quantique. On obtient un régime de confinement quantique lorsque la taille du composant devient très petite, de l'ordre du rayon d'un exciton (paire électron-trou) dans un matériau massif (rayon de l'exciton de Bohr), soit moins de 20 nm.

Le confinement quantique modifie les propriétés électroniques d'un matériau. Il se manifeste par l'apparition de niveaux d'énergie discrets. Il apparaît dans les semiconducteurs et dans les métaux, lorsque les dimensions sont voisines de la longueur d'onde de Fermi qui décroît avec la densité des porteurs de charge. Le confinement quantique apparaît dans les semiconducteurs vers 200 nm et dans les métaux vers 1 nm.

La réalisation est souvent effectuée à l'aide de la croissance de cristaux sur un substrat semiconducteur (Silicium, GaAs ...). On obtient ainsi une sorte d'atome artificiel, bien plus grand en fait (100x), mais dont on peut à loisir choisir les raies d'absorption (couleur et propriétés physiques).

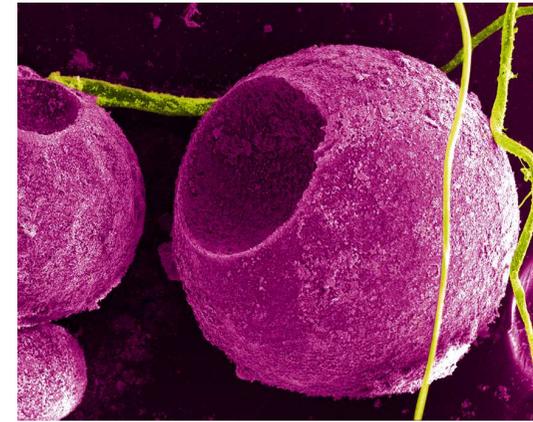


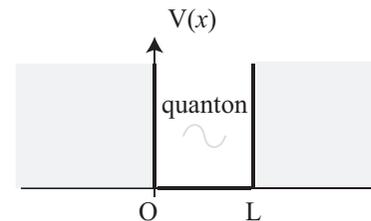
FIGURE 1.1 – Cadmium sulfide quantum dots on cells, Wikipedia.

2 - Fonction d'onde et niveau d'énergie

Pour le cas unidimensionnel, par exemple dans la direction de l'axe x , l'équation de Schrödinger indépendante du temps peut-être écrite comme :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi}{dx^2} + V(x)\varphi = E\varphi \quad (1)$$

où $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ où h est la constante de Planck, m est la masse de la particule,



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 $0 \leq x \leq L$.

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

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

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

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 :

$$E_n = n^2 E_0$$

1 - L'équation de Schrödinger indépendante du temps se réduit à :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi}{dx^2} = E \varphi \quad \text{soit} \quad \frac{d^2 \varphi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \varphi = 0$$

2 - Le potentiel étant infini, le quanton ne peut se trouver en $x < 0$ et $x > L$.

On en déduit que :

$$|\phi(x < 0)|^2 = |\phi(x > L)|^2 = 0$$

Ainsi :

$$\phi(x < 0) = \phi(x > L) = 0$$

3 - L'équation précédente est une équation du second ordre, la solution générale est

$$\varphi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx} \quad \text{avec} \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

où A et B sont des nombres complexes, et k est un nombre réel.

Par continuité de φ , il vient :

$$\varphi(x \leq 0) = \varphi(x \geq 0) = 0$$

En remplaçant ces conditions limites dans la solution générale, il s'ensuit que

$$A + B = 0 \quad \text{et} \quad A e^{ikL} + B e^{-ikL} = 0$$

On obtient donc $A = -B$ et :

$$\sin(kL) = 0$$

Ainsi les valeurs de k sont quantifiées :

$$kL = n\pi \quad \text{avec} \quad n = 1, 2, \dots$$

d'où

$$k_n = \frac{n\pi}{L}$$

Remarque 2 :

$n = 0$ ne convient pas car alors $\varphi = 0$ en tout point, correspondant au cas où la particule n'est pas dans la boîte). Les valeurs négatives de n sont aussi négligées, car elles changent simplement le signe de $\sin(nx)$.

4 - Maintenant afin de trouver la valeur de A , on utilise le fait que la probabilité de trouver la particule quelque part est égale à 1. La densité de probabilité s'écrit :

$$\varpi(x) = A e^{ikx} + (-A) e^{-ikx} = 2iA \sin kx$$

La condition de normalisation devient :

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\infty}^{\infty} |\varphi|^2 dx \\ &= 4|A|^2 \int_0^L \sin^2 kx dx \\ &= 4|A|^2 \int_0^L \frac{1 - \cos 2kx}{2} dx \\ &= 2|A|^2 L \end{aligned}$$

Ainsi, la constante A peut être tout nombre complexe de norme $1/\sqrt{2L}$ ces différentes valeurs de A correspondent au même état physique puisque seul $|\phi|^2$ définit la densité de probabilité de présence. On choisit donc $A = -i/\sqrt{2L}$ de sorte que $2iA = \sqrt{2/L}$ pour obtenir une forme plus agréable à la lecture :

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

5 - On avait trouvé :

$$k_n^2 = \frac{2mE_n}{\hbar^2}$$

On en déduit en inversant cette équation que :

$$E_n = \frac{n^2 \hbar^2 \pi^2}{2mL^2} = \frac{n^2 \hbar^2}{8mL^2}, \quad n = 1, 2, \dots$$

Remarque 3 :

La particule de plus basse énergie $n = 1$, n'a pas une énergie nulle ($E_1 \neq 0$). En effet, le confinement de la particule dans une boîte de taille L impose une quantité de mouvement non nulle ($\Delta p_x = \hbar/2L$) d'après la relation d'incertitude d'Heisenberg. Une particule bloquée dans un puits possède donc forcément une énergie cinétique.

Remarque 4 :

La fonction d'onde d'une particule dans un puits infini possède des analogies avec la corde de Melde. En effet : la fonction d'onde est nulle aux extrémités de la boîte et elle est la superposition de deux ondes contra-propagative formant une onde stationnaire.

Les différentes représentations des fonctions d'onde spatiales présentent la même forme que les modes de vibration d'une corde tendue à ces deux extrémités.

Remarque 5 :

Expliquer qu'une superposition de deux états stationnaires engendre une évolution au cours du temps de l'état de la particule. Établir l'expression de la densité de probabilité de présence de la particule dans le cas d'une superposition de deux états stationnaires ; interpréter le résultat.

3 - Atomes artificiels

Un quanton enfermé dans un puits de potentiel infini possède une énergie quantifiée :

$$E_n = \frac{n^2 \hbar^2 \pi^2}{2mL^2} = \frac{n^2 \hbar^2}{8mL^2}, \quad n = 1, 2, \dots$$

La quantification est proportionnelle à n^2 et est donc différente d'un atome réel : pour l'atome d'Hydrogène, l'énergie était de la forme $E = -13,6 \text{ eV}/n^2$.

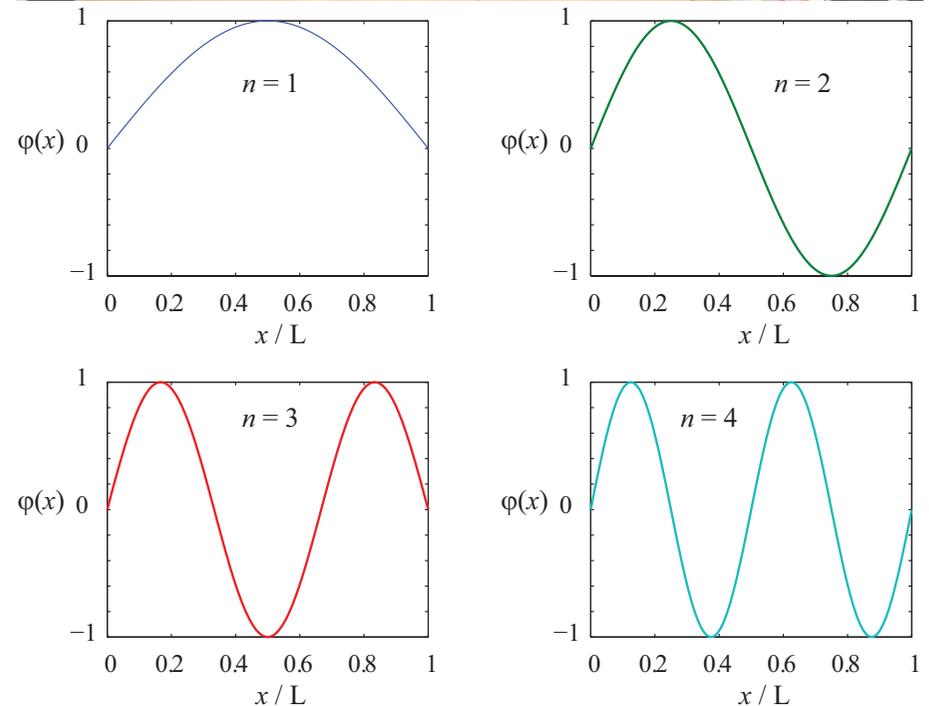
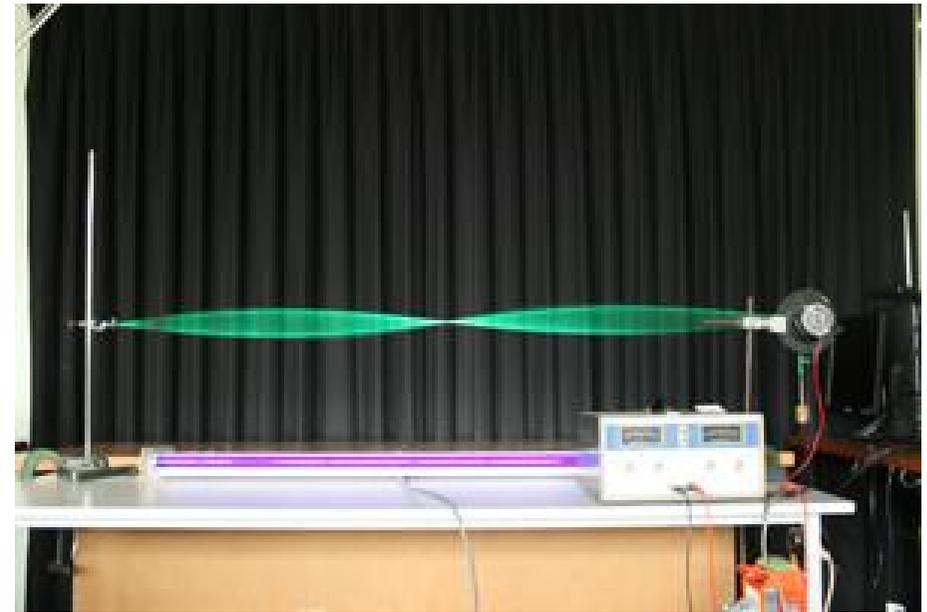
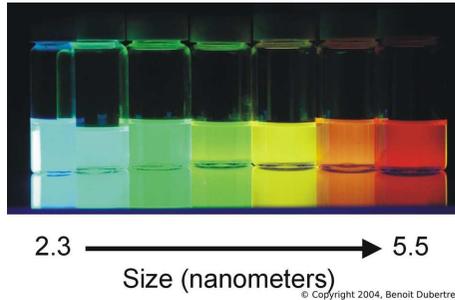


FIGURE 1.2 – Fonctions d'onde spatiales d'un état stationnaire dans un puits infini.

Exemple 3 Les boîtes 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 boîtes 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 $L = 3$ 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 : $m_e = 9.10^{-31}$ kg, $h = 6,6.10^{-34}$ m².kg.s⁻¹

- 1 - L'énergie du premier niveau d'un électron est donné par :

$$E_1 = \frac{h^2}{8m^*L^2} \approx 1,1.10^{-19} \text{ J} \approx 0,7 \text{ eV}$$

$$E_2 = \frac{4h^2}{8m^*L^2} \approx 4,5.10^{-19} \text{ J} \approx 2,8 \text{ eV}$$

- 2 - Un photon émis par cette désexcitation vérifie :

$$h\nu = E_2 - E_1 \quad \text{soit} \quad \nu = \frac{E_2 - E_1}{h}$$

On en déduit que :

$$\lambda = \frac{hc}{E_2 - E_1} = 590 \text{ nm}$$

- 3 - En remplaçant dans l'expression précédente :

$$\lambda = \frac{8m^*L^2c}{3h}$$

Ainsi plus la taille de la boîte quantique est importante plus la longueur d'onde est grande.

Remarque 6 :

La réalisation de boîte de taille différente permet d'adapter la fréquence à volonté

Lorsqu'une particule est dans un état stationnaire, cela signifie que sa fonction d'onde ne varie pas avec le temps. Ainsi un électron placé dans un état excité stationnaire ne se désexcite jamais... Sauf s'il existe un couplage entre les différents états d'énergie.

Pendant, lorsqu'une superposition de deux états stationnaires est créée, la fonction d'onde de la particule est une combinaison linéaire des fonctions d'ondes de ces deux états. Cette superposition n'est pas un état stationnaire, car elle peut évoluer au cours du temps.

Lorsque l'on mesure l'état de la particule, on peut obtenir une des valeurs correspondant aux deux états stationnaires de la superposition. Si on répète cette mesure plusieurs fois, on obtiendra des résultats différents de façon aléatoire, avec une probabilité déterminée par les coefficients de la superposition.

Les oscillations de Rabi se produisent lorsqu'une particule est soumise à un champ électromagnétique oscillant, comme un champ laser. Dans ce cas, la particule peut être excitée à un état d'énergie plus élevé, formant ainsi une superposition d'états stationnaires.

Les oscillations de Rabi se produisent entre l'état initial et l'état excité, avec une fréquence qui dépend de l'intensité et de la fréquence du champ électromagnétique appliqué. Pendant ces oscillations, l'état de la particule varie périodiquement entre l'état initial et l'état excité, conduisant à des interférences quantiques similaires à celles observées dans les superpositions d'états stationnaires.

L'évolution au cours du temps de la superposition d'états stationnaires est donc similaire aux oscillations de Rabi, où l'état de la particule varie périodiquement entre les états de la superposition. Les oscillations de Rabi sont donc un exemple de l'évolution dynamique de la superposition d'états stationnaires.

Cette superposition est une propriété purement quantique mais fragile. Dès que l'objet quantique superposé dans deux états interagit avec son environnement, qu'il s'agisse d'atomes, de lumière ou de chaleur, la superposition cesse au bout d'un temps très court appelé temps de décohérence. Plus l'interaction est importante, plus ce temps est court. Les oscillations de Rabi disparaissent alors.

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

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1(x)e^{-iE_1t/\hbar} + \phi_2(x)e^{-iE_2t/\hbar})$$

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

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

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

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

Données : fonction d'onde spatiale dans un puits infini

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

1 - Par définition, $P(x,t) = |\Psi|^2$, on obtient donc

$$P(x,t) = \left| \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1(x)e^{-iE_1t/\hbar} + \phi_2(x)e^{-iE_2t/\hbar}) \right|^2$$

Les fonctions d'onde spatiales étant à valeurs réelles, on peut écrire :

$$P(x,t) = \left| \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1(x)e^{-iE_1t/\hbar} + \phi_2(x)e^{-iE_2t/\hbar})(\phi_1(x)e^{iE_1t/\hbar} + \phi_2(x)e^{iE_2t/\hbar}) \right|$$

Développons cette expression, il vient :

$$P(x,t) = \frac{\phi_1^2(x) + \phi_2^2(x) + \phi_1(x)\phi_2(x)e^{-i(E_1-E_2)t/\hbar} + \phi_1(x)\phi_2(x)e^{-i(E_2-E_1)t/\hbar}}{2}$$

En reconnaissant l'expression d'un cos, on peut écrire :

$$P(x,t) = \frac{\phi_1^2(x) + \phi_2^2(x) + 2\phi_1(x)\phi_2(x) \cos((E_2 - E_1)t/\hbar)}{2}$$

La superposition de deux états stationnaires (où la densité de probabilité respective de chaque état est indépendante du temps) donne une évolution temporelle comportant des oscillations à la pulsation $\Omega = (E_2 - E_1)/\hbar = 3E_1/\hbar$.

2 - On peut remarquer que :

$$|\Psi^+|^2 = \frac{\phi_1^2 + \phi_2^2 + 2\phi_1\phi_2}{2} \quad \text{et} \quad |\Psi^-|^2 = \frac{\phi_1^2 + \phi_2^2 - 2\phi_1\phi_2}{2}$$

Ainsi :

$$\phi_1^2 + \phi_2^2 = |\Psi^+|^2 + |\Psi^-|^2 \quad \text{et} \quad 2\phi_1\phi_2 = |\Psi^+|^2 - |\Psi^-|^2$$

La densité de probabilité devient donc :

$$P(x,t) = \frac{|\Psi^+|^2 + |\Psi^-|^2 + (|\Psi^+|^2 - |\Psi^-|^2) \cos \Omega t}{2}$$

Ainsi, quand $\cos \Omega t = 1$, on obtient :

$$P(x, 2k\pi/\Omega) = |\Psi^+|^2$$

Ainsi, quand $\cos \Omega t = -1$, on obtient :

$$P(x, (2k+1)\pi/\Omega) = |\Psi^-|^2$$

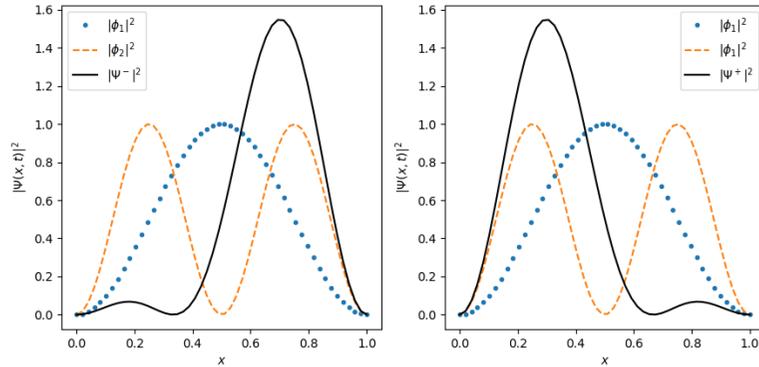


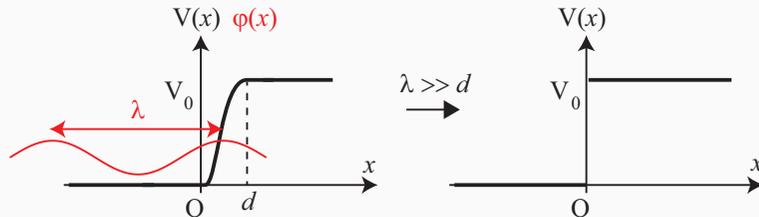
FIGURE 1.3 – Superposition d'état

III. Particule dans un potentiel constant par morceau

1 - Ondes progressives ou évanescentes

Propriété :

On considère que le potentiel V dans lequel baigne le quanton peut être continu par morceau si la longueur d'onde du quanton est très grande devant les variations du potentiel



Pour un quanton matériel non relativiste, les états stationnaires solutions de

l'équation de Schrödinger indépendante du temps vérifient l'équation suivante :

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

Supposons $\varphi(x)$ de la forme, $\varphi(x) = C^{te} e^{rx}$, l'équation caractéristique associée à cette équation différentielle est :

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

Selon le signe de $E - V$, on obtient deux formes complètement différentes de la fonction d'onde.

- cas $E > V$. Lorsque l'énergie de la particule est supérieure au potentiel, les solutions de l'équation caractéristiques sont complexes :

$$r = \pm i \frac{\sqrt{2m(E - V)}}{\hbar}$$

Les solutions sont de la forme :

$$\varphi(x) = A e^{\pm ikx} \quad \text{avec} \quad k = \sqrt{2m(E - V)}/\hbar = \frac{p}{\hbar}$$

Propriété :

Lorsque l'énergie de la particule est supérieure au potentiel dans lequel elle se déplace, les fonctions d'onde sont des ondes progressives

$$\Psi(x,t) = A e^{\pm ikx - iEt/\hbar}$$

- cas $E < V$, les solutions de l'équation caractéristique sont réelles :

$$r = \pm \frac{\sqrt{2m(V - E)}}{\hbar}$$

Les solutions de l'équation de Schrödinger indépendante du temps sont de la forme :

$$\varphi(x) = Ae^{\pm qx}$$

$$\text{avec } q = \frac{\sqrt{2m(V-E)}}{\hbar}.$$

◆ Définition :

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

Lorsque l'énergie de la particule est inférieure au potentiel dans lequel elle se déplace, les fonctions d'onde sont des ondes évanescentes

$$\Psi(x,t) = Ae^{\pm qx} \times e^{-iEt/\hbar}$$

ⓘ Remarque 7 :

En mécanique classique, un système ne peut accéder à une zone de potentiel supérieur à son énergie. En mécanique quantique, un tel quanton a une probabilité non nul d'être dans une zone où son énergie est inférieure au potentiel.

La densité de probabilité est alors donnée par :

$$|\Psi(x,t)|^2 = Ae^{-2qx}$$

La densité décroît exponentiellement avec la distance de pénétration dans la marche de potentiel. La distance caractéristique de décroissance de la probabilité est alors :

$$\delta = 1/2q = \frac{\hbar}{2\sqrt{2m(V_0 - E)}}$$

ⓘ Remarque 8 :

Plus l'énergie est proche de la marche, plus la distance de pénétration dans la marche est importante :

$$\delta \xrightarrow{E \rightarrow V_0} \infty$$

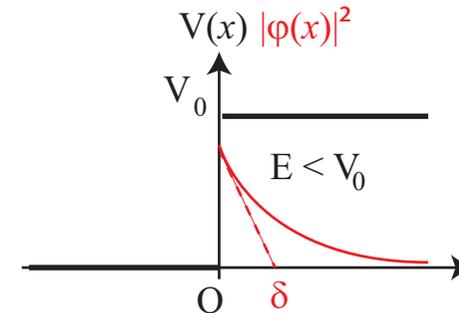


FIGURE 1.4 – Décroissance de la densité de probabilité dans le cas où $E < V_0$

ⓘ Remarque 9 :

Pour les atomes artificiels, si les électrons ne sont pas dans un puits infini, on remarque que l'électron a une densité de probabilité non nulle en dehors du puits puisqu'il s'agit d'une onde évanescente. La fonction d'onde des électrons « déborde » en dehors du cristal. Il est donc nécessaire de protéger la fonction d'onde du milieu extérieur par un système de coquilles pour s'assurer que la fonction d'onde de l'électron reste confinée dans une zone de l'espace en limitant les interactions avec le milieu extérieur.

🍃 Exemple 5

On note $\Psi(x,t) = \varphi(x)e^{-iEt/\hbar}$ la fonction d'onde d'un quanton se dépla-

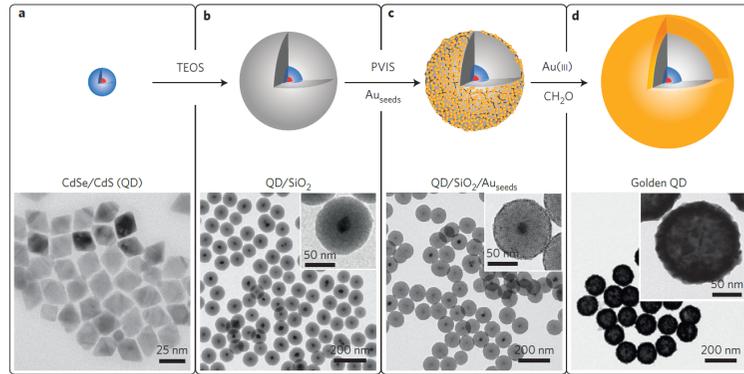
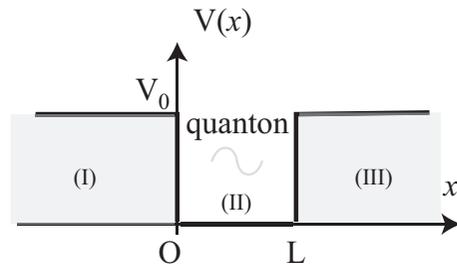


FIGURE 1.5 – Réalisation de boîte quantique protégée. Nature 2015, Non-blinking quantum dot with a plasmonic nanoshell resonator, Dubertret.

çant 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 $E_n = n^2\hbar^2/8mL^2$. Représenter approximativement les niveaux d'énergie du puits fini en le justifiant.

1 - Pour un quanton matériel non relativiste, les états stationnaires solutions de l'équation de Schrödinger indépendante du temps vérifient l'équation suivante :

- si $x < 0$ ou $x > L$:

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

- si $0 < x < L$:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + (E - V_0)\varphi = 0$$

2 - Posons $k = \hbar/\sqrt{2mE}$, on en déduit que les solutions sont de la forme

$$\varphi(x < 0) = Ae^{+qx}$$

$$\varphi(0 < x < L) = Be^{ikx} + Ce^{-ikx}$$

$$\varphi(x > L) = De^{-qx}$$

3 - La fonction d'onde est évanescence dans les parties I et III. La densité de probabilité liée à cette fonction d'onde ($|\varphi|^2$) possède une distance caractéristique de décroissance de $\delta = 1/2q$. L'extension spatiale vaut donc :

$$\ell = L + 2\delta = L + 1/q$$

4 - On remarque que la pénétration dans les zones I et III donnée par $1/q = \hbar/\sqrt{2m(V_0 - E)}$ est d'autant plus grande que l'énergie est grande. On peut donc proposer la figure ci-contre.

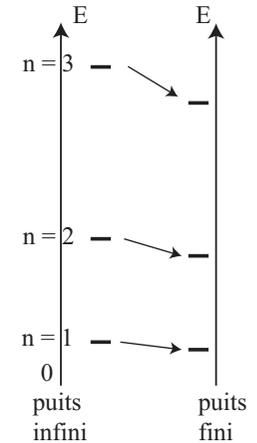


FIGURE 1.6 – Décalage des niveaux d'énergie pour un puits fini.

2 - Réflexion sur une marche de potentiel

a) Cas d'une énergie inférieure à la marche

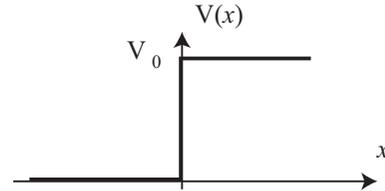


Exemple

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 :

$$\varphi(x < 0) = A_1 (e^{ik_1 x} + r e^{-ik_1 x}) \quad \text{et} \quad \varphi(x \geq 0) = \tau A_1 e^{-qx}$$

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

1 - Pour un quanton matériel non relativiste, recherchons les états stationnaires qui sont solutions de l'équation de Schrödinger indépendante du temps

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

Comme $E - V(x) > 0$ et que $V(x)$ est constante par morceaux, il vient la forme des solutions générales :

$$\varphi_1(x < 0) = A_1 e^{ik_1 x} + A'_1 e^{-ik_1 x} \quad \text{et} \quad \varphi_2(x > 0) = A_2 e^{-qx} + A'_2 e^{qx}$$

avec $k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar$ et $q = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$.

La valeur A'_2 est nulle puisque la fonction φ est bornée.

2 - La continuité de la fonction d'onde spatiale et sa dérivée en $x = 0$ conduisent à

$$\begin{cases} A_1 + A'_1 = A_2 \\ ik_1 A_1 - ik_1 A'_1 = -q A_2 \end{cases}$$

La résolution de ce système conduit à

$$\begin{cases} A_2 = \frac{2ik_1}{(ik_1 - q)} A_1 \\ A'_1 = \frac{ik_1 + q}{ik_1 - q} A_1 \end{cases}$$

On en déduit que :

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



Remarque 10 :

La densité de probabilité est alors analogue d'une onde stationnaire obtenue par réflexion sur un métal parfait. On observe des nœuds et des ventres de probabilité dans la zone de potentiel nul.

b) Courant de probabilité

En mécanique quantique, le courant de probabilité est un concept décrivant le flux de densité de probabilité. Tout comme la loi de conservation de la charge en électrodynamique, il existe une loi de conservation de la densité de probabilité en mécanique quantique. Intuitivement, cette dernière indique que lorsque la densité de probabilité dans un volume fixé varie dans le temps, alors il doit exister un flux de densité de probabilité à travers les parois de ce volume. La notion de courant de probabilité permet de décrire ce flux de probabilité.

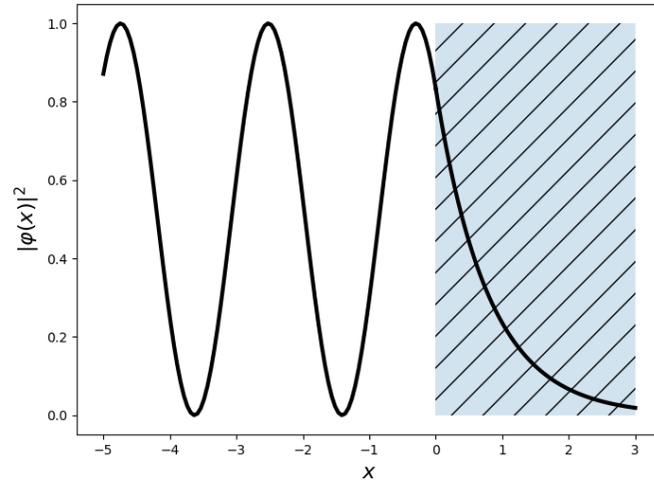


FIGURE 1.7 – Densité de probabilité pour $E = 0,8 \times V_0$

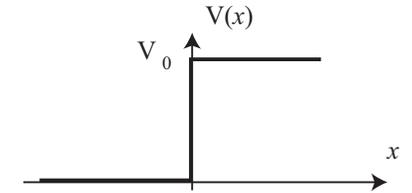


Exemple

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 :

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

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.

1 - La fonction d'onde peut alors se mettre sous la forme :

$$\Psi^+(x, t) = A_1 e^{ik_1x - iEt/\hbar} \quad \text{et} \quad \Psi^-(x, t) = A_1 r e^{-ik_1x - iEt/\hbar}$$

2 - Par définition : $\vec{J} = |\Psi|^2 \hbar \vec{k} / m$, on obtient alors :

$$\vec{J}^+ = \frac{|A_1|^2 \hbar k_1}{m} \vec{e}_x \quad \text{et} \quad \vec{J}^- = -\frac{|r|^2 |A_1|^2 \hbar k_1}{m} \vec{e}_x$$

Comme $|r|^2 = 1$, on obtient :

$$\vec{J}^+ = -\vec{J}^-$$

Le quanton est réfléchi sur la marche de potentiel.

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} .

Remarque 11 :

L'expression du vecteur courant de probabilité est à rapprocher des expressions précédemment utilisées comme la densité de courant électrique : $\vec{j} = \rho \vec{v}$.

Remarque 12 :

Du point de vue statistique, en considérant un faisceau de particules "venant de la gauche" et arrivant sur la "marche de potentiel", on conclut que toutes les particules sont réfléchies.

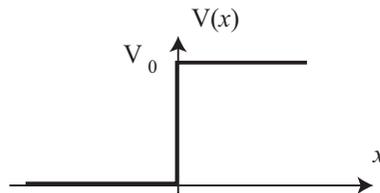
c) Cas d'une énergie supérieure à la marche

L'écart entre l'énergie du quanton et l'énergie potentielle dans laquelle il évolue correspond à l'énergie cinétique. En se retrouvant dans un potentiel plus élevé, le quanton possèdera une énergie cinétique moindre. Un parallèle peut donc être effectué avec une onde lumineuse passant du vide avec une vitesse c dans un milieu d'indice n où sa vitesse sera c/n .

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 :

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

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.

1 - Pour un quanton matériel non relativiste, recherchons les états stationnaires qui sont solutions de l'équation de Schrodinger indépendante du temps

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

Comme $E - V(x) > 0$ et que $V(x)$ est constante par morceaux, il vient la forme des solutions générales :

$$\varphi_1(x < 0) = A_1 e^{ik_1x} + A'_1 e^{-ik_1x} \quad \text{et} \quad \varphi_2(x > 0) = A_2 e^{ik_2x} + A'_2 e^{-ik_2x}$$

avec $k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar$ et $k_2 = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar$.

2 - La continuité de la fonction d'onde spatiale et sa dérivée en $x = 0$ conduisent à

$$A_1 + A'_1 = A_2 + A'_2 \quad \text{et} \quad ik_1 A_1 - ik_1 A'_1 = ik_2 A_2 - ik_2 A'_2$$

Le quanton venant de $x \rightarrow -\infty$, on prendra $A'_2 = 0$. La résolution de ce système conduit à

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

avec $r = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}$ et $\tau = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}$

3 - Évaluons les densités de probabilités :

$$|\varphi(x < 0)|^2 = |A_1|^2(1 + r^2 + 2r \cos(2k_1x)) \quad \text{et} \quad |\varphi(x \geq 0)|^2 = \tau^2 |A_1|^2$$

La description statistique est à présent quasi-immédiate. En considérant un faisceau de particules "venant de la gauche" et arrivant sur la "marche de potentiel", certaines particules sont "réfléchies" et d'autres passent dans la région $x > 0$ (i.e. sont transmises).

d) Coefficient de réflexion

Exemple 9 4 - La densité de courant de probabilité est définie par $\vec{J} = |\Psi|^2 \frac{\hbar \vec{k}}{m}$. 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.

4 - Le faisceau venant de la gauche est composé de particules d'impulsion \vec{k}_1 et est décrit par le terme $A_0 e^{-i\omega t} e^{ik_1 x}$. La densité de probabilité est uniforme $|A_0|^2$ et le courant de probabilité vaut alors

$$\vec{J}_{inc} = |\Psi|^2 \frac{\hbar \vec{k}_1}{m} = |A_0|^2 \frac{\hbar \vec{k}_1}{m}$$

Les particules "réfléchies par le saut de potentiel" ont une impulsion $-\vec{k}_1$. Elles sont décrites par le terme $r A_0 e^{-i\omega t} e^{-ik_1 x}$: leur densité de probabilité est également uniforme $|r A_0|^2$ et le courant de probabilité vaut :

$$\vec{J}_{ref} = -|\Psi|^2 \frac{\hbar \vec{k}_1}{m} = -r^2 |A_0|^2 \frac{\hbar \vec{k}_1}{m}$$

Les particules "transmises", ont quant à elles une impulsion \vec{k}_2 . Leur densité de probabilité est également uniforme $|\tau A_0|^2$ et le courant de probabilité

$$\vec{J}_{trans} = |\Psi|^2 \frac{\hbar \vec{k}_2}{m} = \tau^2 |A_0|^2 \frac{\hbar \vec{k}_2}{m}$$

5 - Les coefficients de réflexion et de transmission sont alors définis par les relations

$$R = \frac{|J_{ref}|}{|J_{inc}|} \quad \text{et} \quad T = \frac{|J_{trans}|}{|J_{inc}|}$$

d'où
$$R = r^2 = \frac{(k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2} \quad \text{et} \quad T = \tau^2 = \frac{4k_1^2}{(k_1 + k_2)^2}$$

On vérifie bien que $R + T = 1$. Contrairement au cas de la physique classique, où une particule possédant une énergie suffisante traverse la marche de potentielle, il existe une probabilité non nulle de trouver un quanton dans le domaine $x < 0$, c'est-à-dire que dans un flux de particules, certaines sont réfléchies.

3 - Effet tunnel

La plupart des particularités de l'effet tunnel apparaissent lors de la considération de la barrière de potentiel la plus simple, une barrière rectangulaire symétrique, pour laquelle le potentiel est constant sur une distance d .

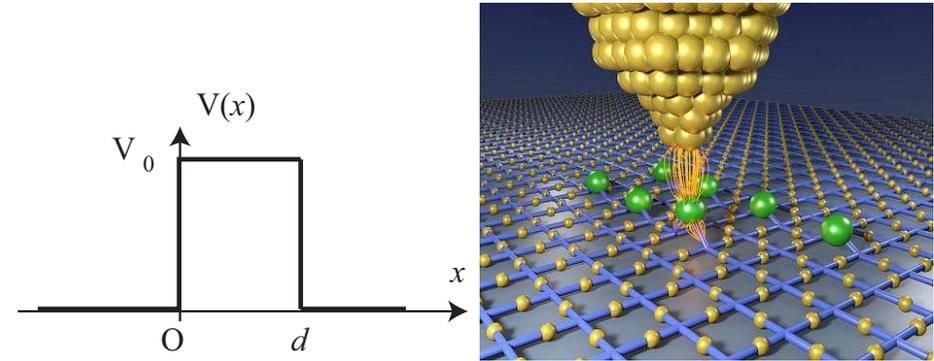


FIGURE 1.8 – Barrière de potentiel associée à une pointe de microscope électronique à effet tunnel. Vue d'artiste d'après Wikipédia.

Pour un électron d'énergie inférieure à la barrière de potentiel, la fonction d'onde dans la barrière est une onde évanescente. Si la barrière n'est pas trop épaisse typiquement $d < 5\delta$ où δ est la grandeur caractéristique associée à l'onde évanescence, la fonction d'onde traverse la barrière et la probabilité de trouver l'électron après la barrière est non nulle.

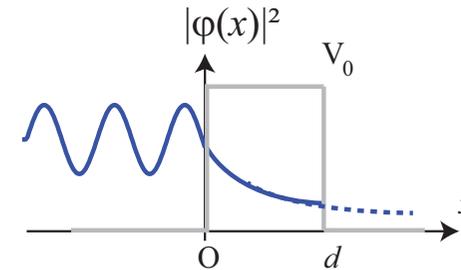


FIGURE 1.9 – Fonction d'onde sur une barrière de potentielle.

Dans le cas de barrière épaisse ,on obtient la formule simple :

$$T = 16 \frac{K^2 k^2}{(K^2 + k^2)^2} \exp(-2Kd) T$$

On peut faire un petit bilan de résultats clés associés à l'effet tunnel quantique dans la barrière rectangulaire étudiée :

- l'effet tunnel quantique se produit pour des quantons d'énergie E inférieure à l'énergie potentielle V_0 de barrière ;
- la densité de probabilité de présence décroît de façon exponentielle dans la barrière dès lors que d dépasse quelques δ
- la densité de probabilité de présence après barrière est uniforme ;
- le coefficient de probabilité de transmission T à travers la barrière évolue en exponentielle décroissante avec la largeur de barrière pour L supérieur à quelques δ :

$$T \sim e^{-2d/\delta}$$

- le coefficient de probabilité de transmission T diminue quand la hauteur énergétique V_0 de barrière augmente.

Exemple 10 Un faisceau de charges (charge q , masse m , énergie $E = 5$ eV) parvient sur une barrière de potentiel de largeur $L = 0,5$ nm et de hauteur énergétique $V_0 = 10$ 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 $I = 10$ 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.

Les électrons incident ne sont pas relativistes ($v \sim 1.10^6$ m.s⁻¹ et la distance caractéristique de pénétration sous barrière est

$$\delta = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}} = 0,09 \text{ nm}$$

Puisque $L \sim 6\delta$, on peut déduire la proportion demandée par la formule approchée

$$T = 16 \frac{E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0}\right) e^{-2L/\delta} \approx 4.10^{-5}$$

En ce qui concerne l'intensité, on n'en récupère que la fraction T , soit

$$I_s = TI \approx 0,4 \mu\text{A}$$

2 - Les protons sont non relativistes (vitesse $v \sim 3.10^4$ m.s⁻¹) et δ diminue fortement : $\delta = 2$ pm.

Ainsi, $T \approx 3.10^{-213}$ et $I_s \approx 2.10^{-215}$ A

3 - Dans les conditions proposées, les protons ne conduisent pas à un effet tunnel mesurable, contrairement au cas des électrons. Cela est simplement dû à la différence de leur masse...