MOHAMMED V UNIVERSITY
FACULTY Of SCIENCES – RABAT

Chapitre II: Comportement quantique d'une particule dans des potentiels stationnaires

I-Description quantique d'une particule. Paquet d'ondes

1-Particule libre

Considérons ***une particule libre*** (elle n'est soumise à aucune force) dont le potentiel V(r,t)=0, de masse m. **La fonction d'onde associée à cette particule** est gouvernée par l'équation de Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{r},t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r},t)$$

A une dimension (l'axe des x), l'équation précédente devient:

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

Séparation des variables:

$$\psi(x,t) = \varphi(x)\chi(t)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\varphi(x)}\frac{d^2}{dx^2}\varphi(x) = i\hbar\frac{1}{\chi(t)}\frac{\partial}{\partial t}\chi(t) = cte$$

Cte= énergie= $\hbar\omega \longrightarrow \psi(x,t) = Ae^{i(kx-\omega t)}$ ***est une solution de l'équation précédente, à condition que*** $\omega = \dfrac{\hbar k^2}{2m}$

où A est une constante par rapport au temps et la position

Notons que la relation $\omega = \dfrac{\hbar k^2}{2m}$ montre que pour une particule libre; l'enérgie E et l'impulsion P vérifient bien la relation classique: $E = \dfrac{P^2}{2m}$

La solution précédente peut être généralisée facilement à trois dimensions:

$$\psi(\vec{r}, t) = A e^{i(\vec{k}.\vec{r} - \omega t)} \quad ; \qquad \vec{k} = k_x e_x + k_y e_y + k_z e_z \quad \text{et} \quad \vec{r} = x e_x + y e_y + z e_z$$

$$\|\psi(\vec{r}, t)\|^2 = \|A\|^2 \Rightarrow \int \|\psi(\vec{r}, t)\|^2 d^3\vec{r}$$ ***diverge; donc la fonction n'est*** $\psi(x, \mathrm{t})$ ***pas de carrée sommable***

Par conséquent la solution obtenue ne peut pas représenter l'état physique d'une particule libre. Cependant le principe de superposition montre que toute combinaison linéaire d'ondes planes vérifiant la relation $\omega = \hbar k^2 / 2m$ ***constitue une solution de l'équation de Schrödinger relative à une particule libre. Une telle superposition d'ondes planes monochromatiques (appelée un paquet d'ondes à trois dimensions) peut s'écrire :***

$$\psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int g(k) e^{i(\vec{k}.\vec{r} - \omega t)} d^3\vec{k}$$

$d^3\vec{k} = dk_x dk_y dk_y$:représente le volume élémentaire dans l'espace des vecteurs d'ondes.

Pour simplifier, considérons le cas d'un paquet d'ondes à une dimension, obtenu à partir d'une superposition infinie d'ondes planes se propageant toutes suivant une seule direction (ox). Ainsi la fonction d'onde correspondante s'écrit:

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) e^{i(k.x-\omega t)} dk$$

Dans une première étape nous allons étudier le paquet à un instant t fixé (t=0). La fonction d'onde devient:

$$\psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) e^{ik.x} dk$$

Il est clair que la fonction g(k) représente la transformée de Fourier de $\psi(x,0)$

Ainsi g(k) s'écrit:

$$g(k) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x,0) e^{-ik.x} dx$$

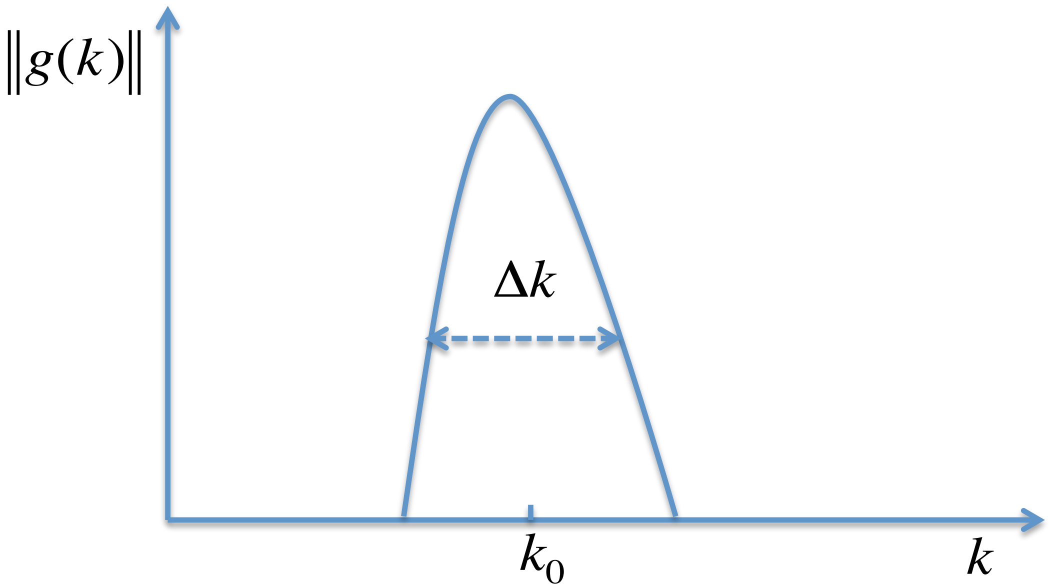
On dit aussi que $\psi(x,0)$ est la transformée inverse de g(k)

Notons que : $$\int_{-\infty}^{+\infty} \left\|\psi(x,0)\right\|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \left\|g(k)\right\|^2 dk$$

Ce qui montre que si la fonction d'onde $\psi(x,0)$ est de carrée sommable dans l'espace position, la fonction g(k) l'est aussi dans l'espace des k.

2-Forme du paquet d'ondes à un instant donné

Pour fixer les idées supposons que la norme de la fonction g(k) présente un maximum en k=k0, et dont la largeur à mi-hauteur a pour valeur Δk comme l'indique la figure suivante:



- Cas simple : superposition de trois ondes

Pour bien comprendre qualitativement le comportement du paquet d'onde, considérons un exemple très simple concernant la superposition de trois ondes planes de vecteurs d'onde:

$$k_0 \;,\quad k_0 - \frac{\Delta k}{2} \quad \text{et} \quad k_0 + \frac{\Delta k}{2} \quad \Longrightarrow \quad \psi(x,0) = \frac{g(k_0)}{\sqrt{(2\pi)}} e^{ik_0 x}\left[1 + \cos\left(\frac{\Delta k}{2} x\right)\right]$$

Il est clair que $\|\psi(x)\|$ est maximale en x=0, car en ce point les trois ondes planes sont en phase; par conséquent elles interfèrent de manière constructive et pas destructive. En revanche

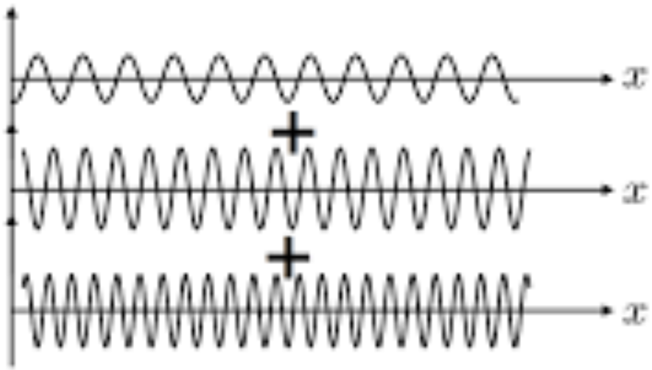
L'interférence devient totalement destructive lorsque le déphase est égal à $\pm\pi$

La fonction $\psi(x)$ s'annule lorsque $x = \pm\dfrac{\Delta x}{2}$ $\Longrightarrow$ $\Delta x . \Delta k = 4\pi$

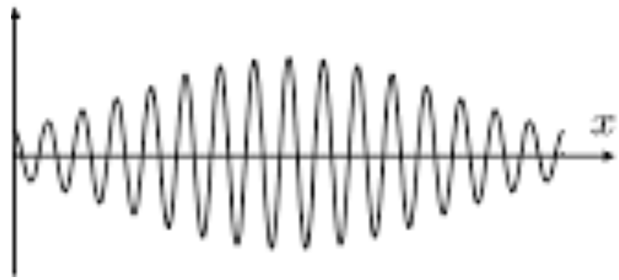
Ceci signifie que la largeur de $\|\psi(x)\|$ est d'autant plus grande que la largeur de $\|g(k)\|$ est plus petite et vise versa.

$$\psi(x) = \|\psi(x)\| e^{ik_0 x} \qquad \text{avec} \qquad \|\psi(x)\| = \frac{g(k_0)}{\sqrt{2\pi}}\left[1 + \cos\left(\frac{\Delta k}{2}x\right)\right]$$

N.B: $\psi(x)$ est périodique et possède plusieurs extremums relatifs. Ceci est du au fait que est une superposition d'un nombre fini d'ondes planes. En revanche dans le cas d'une superposition infinie d'ondes planes le paquet en général possède un seul maximum.



=



Superposition d'ondes planes $\Longrightarrow$ **Paquet d'ondes**

➢ Cas général: superposition infinie d'ondes planes

Nous reprenons la forme du paquet correspondant à une superposition infinie d'ondes:

$$\psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) e^{ik.x} dk$$

On pose: $g(k) = \|g(k)\| e^{i\alpha(k)}$; $\alpha(k)$: l'argument de g(k)

Pour Δk suffisamment petit on peut développer $\alpha(k)$ au premier ordre au voisinage de $k=k_0$:

$$\alpha(k) = \alpha(k_0) + (k-k_0) \left.\frac{d\alpha(k)}{dk}\right|_{k=k_0}$$

Ce qui montre que: $$\psi(x,0) = \frac{e^{i(\alpha(k_0)-k_0 x)}}{\sqrt{(2\pi)}} \int_{-\infty}^{+\infty} \|g(k)\| e^{i(k-k_0)(x-x_0)} dk$$

avec $$x_0 = -\left.\frac{d\alpha(k)}{dk}\right|_{k=k_0}$$

L'expression précédente montre que :

Si $\Delta k > \frac{1}{|x - x_0|}$ la fonction de k à intégrer oscille un très plusieurs fois à l'intérieur de l'intervalle Δk dans lequel g(k) possède des valeurs non négligeables. Cependant les oscillations successives s'annulent entre elles par suite la fonction $\psi(x)$ prend des valeurs négligeables. Physiquement lorsqu'on s'éloigne du centre du paquet le déphasage entre les ondes augmente et donne lui à des interférences destructives.

Si $\Delta k < \frac{1}{|x - x_0|}$ la fonction de k à intégrer n'oscille pratiquement pas et donne une amplitude maximale de $\psi(x)$

Donc lorsque x s'écarte de la valeur $x_M(t = 0) = x_0$ la norme de la fonction d'onde décroît et devient considérable lorsque la fonction $e^{i(k-k_0)(x-x_0)}$ à intégrer oscille au moins une fois dans l'intervalle Δk. Donc $\Delta k.(x - x_0) \cong 1$

Et puisque la fonction $\|\psi(x)\|$ ne possède des valeurs appréciables que dans l'intervalle on déduit donc que : $\Delta p.\Delta x \geq \hbar$

N.B: En termes d'impulsion ($p = \hbar k$ ***); l'inégalité précédente devient :*** $\Delta p.\Delta x \geq \hbar$

Cette relation signifie qu'on ne peut pas avoir des précisions à la fois sur la mesure de l'impulsion et la position d'une particule à l'échelle quantique. C'est à dire on ne peut Pas connaître simultanément la position et l'impulsion de la particule.

N.B: Dans le chapitre III on retrouve nous allons établir de manière rigoureuse la relation d'incertitude de Heisenberg : $\Delta p.\Delta x \geq \hbar / 2$

3-Evolution dans le temps: vitesse de phase et vitesse du groupe

On reprend l'expression générale du paquet

$$\psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{(2\pi)}}\int_{-\infty}^{+\infty} g(k)e^{i(k.x-\omega t)}dk \quad \text{avec} \quad g(k)=\|g(k)\|e^{i\alpha(k)}$$

En posant $\beta(k)=\alpha(k)-\omega t$ ➡ $\psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{(2\pi)}}\int_{-\infty}^{+\infty}\|g(k)\|e^{i\beta(k)}e^{ik.x}dk$

➡ $\psi(x,\mathrm{t})=\frac{e^{i(\beta(k_0)-k_0x)}}{\sqrt{(2\pi)}}\int_{-\infty}^{+\infty}\|g(k)\|e^{i(k-k_0)(x-x_M)}dk$

Où $x_M=-\left.\frac{d\beta(k)}{dk}\right|_{k=k_0}=-\left.\frac{d\alpha(k)}{dk}\right|_{k=k_0}+\left.\frac{d\omega(k)}{dk}\right|_{k=k0}t$ **est le centre du paquet**

◆ **La vitesse de phase** est par définition la vitesse avec laquelle se propage une onde plane. . Soit $\varphi=kx-\omega(k)t$ la phase de l'onde à un instant t donné. La vitesse de phase ϑ_φ peut être obtenue à partir de la condition de la phase stationnaire:

$$\frac{\partial\varphi}{\partial t}=0 \Rightarrow \vartheta_\varphi=\frac{dx}{dt}=\frac{\omega}{k} \quad ; \quad \omega(k)=\frac{\hbar k^2}{2m} \Rightarrow \vartheta_\varphi=\frac{\hbar k}{2m}$$

La vitesse de phase en k=k_0 s'appelle la vitesse de phase moyenne: $\vartheta_{\varphi_m}=\frac{\omega_0}{k_0}=\frac{\hbar k_0}{2m}$

La vitesse du groupe ϑ_g est la vitesse avec laquelle se déplace le centre du paquet x_M :

$$\vartheta_g = \frac{dx_M(t)}{dt} = \left.\frac{d\omega(k)}{dk}\right|_{k=k_0}$$

$$\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m} \quad \Longrightarrow \quad \vartheta_g = \frac{\hbar k_0}{m}$$

On remarque que lorsque le paquet est constitué par des ondes planes ayant des phases de Phase différentes (cas milieu dispersif :vitesse de phase dépend de k):

$$\vartheta_g = 2\vartheta_\varphi(k_0)$$

N.B: la vitesse de phase n'est pas une grandeur physique réelle. Elle peut dépasser célérité C de la lumière dans le vide. Tandis que la vitesse du groupe est une quantité physique réelle; elle est toujours inférieure ou égale à la célérité de la lumière C.

II-Particule dans un potentiel scalaire indépendant du temps

1-Courant de probabilité:

dans le cas d'une particule plongée dans un potentiel l'équation de Schrödinger s'écrit:

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

$$\longrightarrow \begin{cases} \psi^*(\vec{r},t)(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r))\psi(\vec{r},t) = i\hbar\psi^*(\vec{r},t)\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r},t) \\ \psi(\vec{r},t)(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r))\psi^*(\vec{r},t) = -i\hbar\psi(\vec{r},t)\frac{\partial}{\partial t}\psi^*(\vec{r},t) \end{cases}$$

$$\longrightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}(\psi^*(\vec{r},t)\Delta\psi(\vec{r},t) - \psi(\vec{r},t)\Delta\psi^*(\vec{r},t)) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left\|\psi(\vec{r},t)\right\|^2$$

$$\longrightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}.\left[\psi^*(\vec{r},t)\vec{\nabla}\psi(\vec{r},t) - \psi(\vec{r},t)\vec{\nabla}\psi^*(\vec{r},t)\right] = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left\|\psi(\vec{r},t)\right\|^2$$

d'où la relation de continuité ou ce qu'on appelle la loi de conservation locale de la probabilité de présence :

$$div\vec{J} + \frac{\partial}{\partial t}\rho(\vec{r},t) = 0 \quad \text{avec} \quad \vec{J} = \frac{\hbar}{2mi}\left[\psi^*(\vec{r},t)\vec{\nabla}\psi(\vec{r},t) - \psi(\vec{r},t)\vec{\nabla}\psi^*(\vec{r},t)\right]$$

2-Etats stationnaires

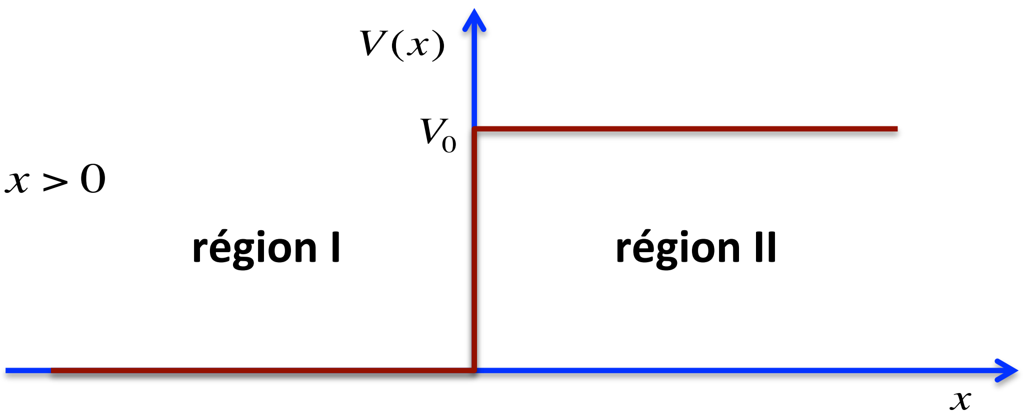
On considère une particule de masse m en mouvement à une dimension (l'axe des x). Dans toute la suite on suppose que la particule provient de moins l'infini.

Fonction d'onde stationnaire:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)-E\right)\varphi(x)=0 \quad \Longrightarrow \quad \left(\frac{d^2}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E-V(x))\right)\varphi(x)=0$$

i)-Marche de potentiel

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



Réflexion partielle $E>V_0$

Région I

$$\left(\frac{d^2}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}E\right)\varphi(x)=0 \quad \Longrightarrow \quad \left(\frac{d^2}{dx^2}+k_1^2\right)\varphi(x)=0 \quad \text{avec} \quad k_1=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

Région II

$$\left(\frac{d^2}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E-V_0)\right)\varphi(x)=0 \quad \Longrightarrow \quad \left(\frac{d^2}{dx^2}+k_2^2\right)\varphi(x)=0 \quad \text{avec} \quad k_2=\sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}}$$

Dans les deux régions I et II on a :

$$\begin{cases}\varphi_I(x) = A_I e^{ik_1 x} + A_I^{'} e^{-ik_1 x} \\ \varphi_{II}(x) = A_{II} e^{ik_2 x} + A_{II}^{'} e^{-ik_2 x}\end{cases}$$

l'onde réfléchie ne peut pas avoir lieu dans la région II $\Rightarrow$ $A_{II}^{'} = 0$

Les relations de raccordement de la fonction stationnaire ainsi que sa dérivée première dans les deux régions I et II:

$$\begin{cases}\varphi_I(0) = \varphi_{II}(0) \\ \varphi_I^{'}(0) = \varphi_{II}^{'}(0)\end{cases} \Rightarrow \begin{cases}A_I + A_I^{'} = A_{II} + A_{II}^{'} \\ ik_1(A_I - A_I^{'}) = ik_2 A_{II}\end{cases}$$

Le Courant de probabilité donne les coefficients de Rélexion R et de Transmission T (chap.IV)

Coefficient de Réflexion

$$R = \left\|\frac{J_1^{'}}{J_1}\right\|$$

$$R = \left\|\frac{A_I^{'}}{A_I}\right\|^2 = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2$$

Coefficient de Transmission

$$T = \left\|\frac{J_2}{J_1}\right\|$$

$$T = \frac{k_2}{k_1}\left\|\frac{A_{II}}{A_I}\right\|^2 = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}$$

A noter que

$$R + T = 1$$

b-Réflexion Totale $E < V_0$

$$\begin{cases} \varphi_I(x) = A_I e^{ik_1 x} + A_I^{'} e^{-ik_1 x} \\ \varphi_{II}(x) = B_{II} e^{+\rho_2 x} + B_{II}^{'} e^{-\rho_2 x} \end{cases} \qquad k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \qquad \rho_2 = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$$

avec $B_{II} = 0 \ \left(\varphi_{II}(x) \xrightarrow[x \to \infty]{} 0\right)$

Les relations de raccordement de la fonction stationnaire ainsi que sa dérivée première dans les deux régions I et II

$$\Rightarrow \begin{cases} \varphi_I(0) = \varphi_{II}(0) \\ \varphi_I^{'}(0) = \varphi_{II}^{'}(0) \end{cases}$$

$$\Rightarrow \frac{A_I^{'}}{A_I} = \frac{k_1 - i\rho_2}{k_1 + i\rho_2} \quad \text{et} \quad \frac{B_{II}^{'}}{A_I} = \frac{2k_1}{k_1 + i\rho_2}$$

$$\Downarrow$$

$$R = \left\| \frac{A_I^{'}}{A_I} \right\|^2 = 1$$

Le déphasage entre l'onde incidente et l'onde réfléchie est dû au retard effectué par l'onde réfléchie au niveau de x=0 avant réflexion .

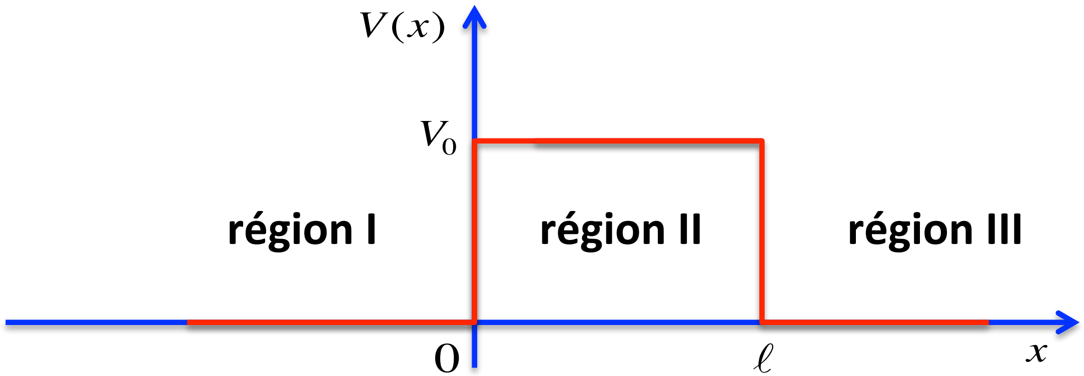
❑ Remarques:

- La particule a une probabilité non nulle de se réfléchir (revenir en arrière); et vu que les rapports des amplitudes A'_I/A_I et A'_{II}/A_I sont réels; ***la particule ne subit aucun retard à sa réflexion ou sa transmission.***

- Si $E>>V_0$ le coefficient de transmission est presque égal à 1. C'est à dire que lorsque la particule possède une énergie suffisamment grande elle franchit cette marche de potentiel sans réflexion (comme le cas classique)

ii-Barriere de potentiel de largeur finie-Effet tunnel

$$V(x)=\begin{cases} V_0 \;;\; 0 \le x \le \ell \\ 0 \;;\; ailleurs \end{cases}$$



Cas $0 < E < V_0$

Région I

$$(\frac{d^2}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}E)\varphi(x)=0 \Rightarrow (\frac{d^2}{dx^2}+k_1^2)\varphi(x)=0 \quad \text{avec} \quad k_1=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

Région II

$$(\frac{d^2}{dx^2}-\frac{2m}{\hbar^2}(V-E_0))\varphi(x)=0 \Rightarrow (\frac{d^2}{dx^2}-\rho_2^2)\varphi(x)=0 \quad \text{avec} \quad \rho_2=\sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}}$$

Région III

$$(\frac{d^2}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}E)\varphi(x)=0 \Rightarrow (\frac{d^2}{dx^2}+k_3^2)\varphi(x)=0 \quad \text{avec} \quad k_3=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

$$k_3=k_1$$

Dans les trois régions on a:

$$\begin{cases} \varphi_I(x) = A_I e^{ik_1x} + A_I^{'} e^{-ik_1x} \\ \varphi_{II}(x) = A_{II} e^{+\rho_2 x} + A_{II}^{'} e^{-\rho_2 x} & ; \quad \rho_2 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar}(V_0 - E)} \\ \varphi_{III}(x) = A_{III} e^{ik_1x} + A_{III}^{'} e^{-ik_1x} & ; \quad A_{III}^{'} = 0 \end{cases}$$

il n'y a pas d'onde réfléchie dans la région III

Relations de raccordement en x=0 de la fonction et ses dérivées montre que:

$$\begin{cases} \varphi_I(0) = \varphi_{II}(0) \\ \varphi_I^{'}(0) = \varphi_{II}^{'}(0) \end{cases} \qquad \begin{cases} \varphi_{II}(x=\ell) = \varphi_{III}(\ell) \\ \varphi_{II}^{'}(\ell) = \varphi_{III}^{'}(\ell) \end{cases}$$

$$T = \left\| \frac{A_{III}}{A_I} \right\|^2 = \frac{4E(V_0 - E)}{4E(V_0 - E) + V_0^2 sh^2(\sqrt{\frac{2m}{\hbar}(V_0 - E)}\ell}$$

Si la portée de l'onde évanescente est très courte. La probabilité de transmission est très faible $\frac{1}{\rho_2 \ell} << 1 \Rightarrow T \approx \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-2\rho_2 \ell}$

;

Si la portée de l'onde évanescente est très grande. La particule a une forte probabilité de franchir la probabilité par "effet tunnel" $\frac{1}{\rho_2 \ell} << 1$