
Support de Cours : Physique Quantique (Première Partie)

2ème Année MP/T/PC

Proposé par : Prof. Neil JOMAA

I/ Concepts fondamentaux et équation de Shrödinger

I-1) Interférence des ondes lumineuses :

I-1-a) Description et analyse de l'expérience :

Le dispositif expérimental est un interféromètre à division du front d'onde constitué d'un biprisme de Fresnel (Voir figure 1)

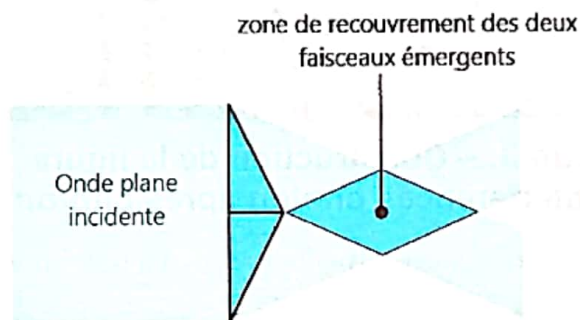


Figure 1: Dispositif du biprisme de Fresnel

Le biprisme est éclairé en incidence normale.

D'un point de vue classique ; ce dispositif offre deux chemins à la lumière. Elle peut passer soit du prisme supérieur, soit du prisme inférieur. La source lumineuse utilisée est une source à photon unique. Elle délivre les photons les uns après les autres.

On dispose de deux détecteurs D_1 et D_2 comme le montre la figure 2.

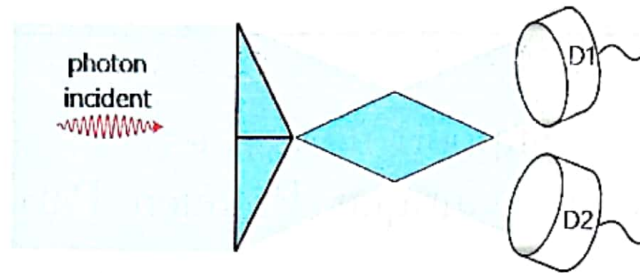


Figure 2: Détection d'un photon sur l'une des deux voies

Un dispositif électronique montre que D_1 et D_2 ne détectent pas simultanément un signal ce qui confirme un comportement particulier de la lumière. Le photon passe uniquement par l'un des deux prismes.

On rappelle que selon le modèle ondulatoire de la lumière, les deux détecteurs D_1 et D_2 peuvent recevoir simultanément les deux divisions du faisceau lumineux avec la même intensité.

On place, à présent, un détecteur dans le champ d'interférence.

On présente sur la figure 3 l'accumulation des images acquises par ce détecteur pour instants différents (a), (b), (c) et (d).

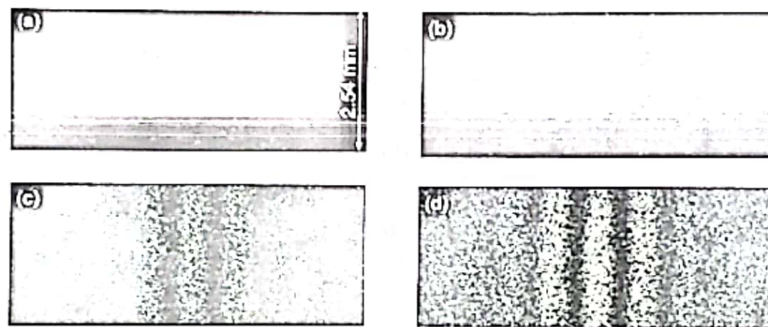


Figure3: – Construction de la figure d'interférences photon après photon

Ces images visualisent la construction progressive des franges d'interférence prévue par l'optique ondulatoire.

L'observation de la figure d'interférence ne permet pas de savoir par quelle voie est passé chaque photon détecté.

I-1-b) Conclusion :

Il faut renoncer à adopter une description classique (onde ou corpuscule) pour décrire de façon complète la lumière.

La mécanique quantique offre une description unique de la lumière.

Elle confirme l'aspect particulaire de la lumière, mais elle stipule en plus que la probabilité de détection d'un photon est proportionnelle au carré de l'amplitude de la vibration lumineuse (aspect ondulatoire). On parle, en conclusion, de la dualité onde-particule.

I-2) Interférence des ondes de matières :

I-2-a) Description et analyse de l'expérience :

En 1923 ; Louis de Broglie émet l'hypothèse que la notion de dualité onde-particule prouvée pour la lumière peut être étendue à la matière.

On a alors pensé à réaliser une expérience d'interférence avec des électrons.

Le dispositif interférentiel est analogue à un biprisme de Fresnel.

Il est constitué (voir figure 4) de deux électrodes planes latérales, reliées à la terre ; entre lesquelles on interpose une électrode cylindrique de diamètre micrométrique, portée à un potentiel positif (environ 10V).

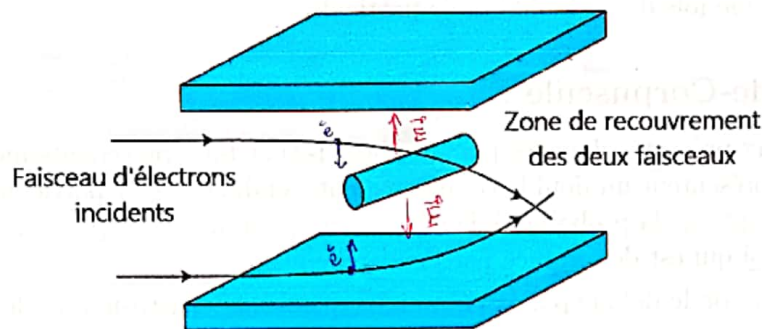


Figure 4: Dispositif interférentiel à deux voies pour des électrons : un système d'électrodes divise le faisceau électronique; les deux faisceaux déviés se recouvrent en sortie du dispositif.

La distance entre les deux électrodes latérales est de l'ordre du centimètre.

Le champ électrique créé par le système des électrodes permet de dévier les électrons incidents.

Un détecteur est placé dans la zone de recouvrement des deux faisceaux déviés.

L'accumulation des images détectées est représentée à des instants différents sur la figure 5.

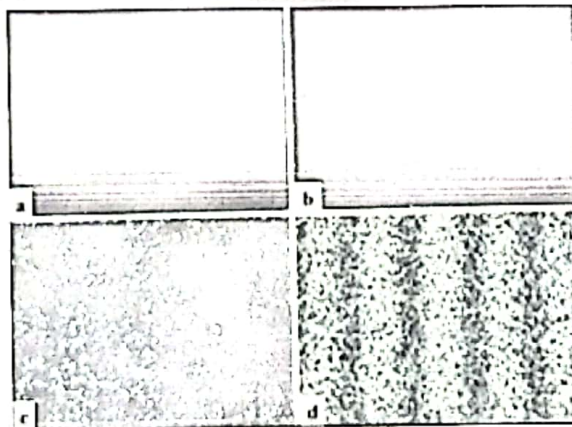


Figure 5 :– Impact successifs des électrons sur le détecteur, qui reconstruisent peu à peu la figure d'interférence à deux ondes.
(a) : 8 électrons détectés ; (b) : 270 ; (c) : 2000 ; (d) : 60000

L'observation de la figure d'interférence au cours du temps ne donne aucune information sur la

trajectoire suivie par un électron.

La notion de trajectoire (définie par la mécanique classique) n'a plus de sens.

I-2-b) Conclusion :

Comme dans le cas des photons, la description classique des électrons est insuffisante pour interpréter l'expérience.

La mécanique quantique donne une description unique et complète du phénomène.

La probabilité de détecter un électron en un point donné suit une loi qui est donnée par l'onde associée à cet électron.

On parle alors encore une fois de la dualité onde-particule.

I-3) Dualité Onde-Corpuscule :

Les faits expérimentaux présentés dans les paragraphes (I-2) et I-3)) précédents montrent que la lumière et la matière présentent un double comportement : ondulatoire et particulaire.

Selon la mécanique quantique la probabilité de détecter un photon ou une particule matérielle en un point donné suit une loi qui est déterminée par l'onde elle-même.

La présentation de cette onde définie par la mécanique quantique constitue l'un des principaux objectifs de cette leçon.

L'énergie d'un photon est donnée par la relation de Planck-Einstein : $E_{\text{photon}} = h\nu = \hbar\omega$ où

$$\hbar = \frac{h}{2\pi}$$

$h = 6,62 \cdot 10^{-34} \text{ J.s}$ est la constante de Planck.

Soit p_{photon} la quantité de mouvement du photon.

$$E_{\text{photon}} = p_{\text{photon}} c \quad (\text{Le photon est une particule relativiste}).$$

$$\text{Donc } p_{\text{photon}} = h \frac{\nu}{c} = \frac{h}{\lambda} = \hbar k \quad \text{où } k = \frac{2\pi}{\lambda} : \text{norme du vecteur d'onde.}$$

À une particule matérielle de quantité de mouvement p , est associée une longueur d'onde λ_{DB}

donnée par la relation de "de Broglie" : $\lambda_{DB} = \frac{h}{p}$, où $p = mv$: avec m est la masse de la particule et v sa vitesse.

I-4) La fonction d'onde :

I-4-a) La notion de la fonction d'onde et l'interprétation probabiliste :

Le concept de la fonction d'onde se trouve à la base de la mécanique quantique. Son objectif est la description de l'état dynamique d'une particule quantique. (sa position, sa quantité de mouvement, son moment cinétique et son énergie).

La fonction d'onde est une fonction complexe continue des variables spatiales et temporelle $\Psi(\vec{r}, t)$.

$\Psi(\vec{r}, t)$ est solution de l'équation de Schrödinger présentée dans le paragraphe I-5).

La probabilité de trouver la particule dans le volume élémentaire $d\tau$ autour de la position $\vec{r}$ est

$$dP = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d\tau$$

On définit alors la densité de probabilité de présence :

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

Conformément au programme, on se limitera à des problèmes unidimensionnels où

$$\Psi(\vec{r}, t) = \Psi(x, t). \text{ Donc, } dP = |\Psi(x, t)|^2 dx.$$

$$([\Psi] = L^{-1/2}).$$

La relation de normalisation s'écrit $\int_{\text{espace}} |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d\tau = 1$.

Dans le cas unidimensionnel : $\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 1$

La position d'une particule quantique n'est pas certaine : parler de la valeur instantanée de la position n'a pas de sens.

Il en est de même pour la quantité de mouvement de la particule.

Remarque :

Albert Einstein resta sceptique par rapport à cet aspect probabiliste de la théorie quantique qu'il jugeait incomplète.

Sa citation célèbre est "Dieu ne joue pas aux dés".

I-4-b) Exemple :

Soit $\Psi(x, t) = A.e^{-\lambda|x|+i\omega t}$ où $A, \lambda, \omega = \text{constantes} > 0$.

1- Déterminer A :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi|^2 dx = 1 \Rightarrow |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2\lambda|x|} dx = 1 \Rightarrow |A|^2 2 \int_0^{+\infty} e^{-2\lambda x} dx = 1$$

$$\Rightarrow 2|A|^2 \frac{[-e^{-2\lambda x}]_0^{+\infty}}{2\lambda} = 1 \Rightarrow |A|^2 = \lambda \Rightarrow A = \sqrt{\lambda}.$$

2- Quelle est la valeur moyenne $\langle x \rangle$ de la position x de la particule :

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x dP = \int_{-\infty}^{+\infty} x |\Psi(x, t)|^2 dx = \lambda \int_{-\infty}^{+\infty} \underbrace{x.e^{-2\lambda|x|}}_{\text{fonction impaire}} dx = 0$$

I-5) Équation de Schrödinger :

I-5-a) Énoncé général :

Considérons une particule quantique de masse m en mouvement dans un référentiel R .

On note $V(M, t)$ l'énergie potentielle (appelée "potentiel" par abus de langage) traduisant l'interaction de la particule avec les autres systèmes physiques.

Schrödinger a postulé (sans démonstration) l'équation qui gère l'évolution spatio-temporelle de la fonction d'onde Ψ :

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

$$= H\Psi$$

où $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(M, t)$: opérateur appelé Hamiltonien.

Conformément au programme ; nous nous limitons à des problèmes unidimensionnels et une énergie potentielle statique, donc :

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

Remarques :

✓ L'équation de Schrödinger est du premier ordre par rapport au temps, donc si Ψ est connue à un instant initial t_0 alors elle le sera à tout instant ultérieur.

✓ L'énergie potentielle peut être définie à une constante additive près notée V_0 . Notons

$V'(x) = V(x) + V_0$, alors c'est la fonction $\Psi' = \Psi \cdot e^{-i \frac{V_0 t}{\hbar}}$ qui vérifie l'équation de Schrödinger écrite avec V' . En effet :

$$\text{On a : } i\hbar \frac{\partial \Psi'}{\partial t} = i\hbar \left[\frac{\partial \Psi}{\partial t} - i \frac{V_0}{\hbar} \Psi \right] \cdot e^{-i \frac{V_0 t}{\hbar}} = \left[i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} + V_0 \Psi \right] \cdot e^{-i \frac{V_0 t}{\hbar}}$$

$$\text{Or } \frac{-\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2 \Psi'}{\partial x^2} + V'(x) \cdot \Psi' = \frac{-\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \cdot e^{-i \frac{V_0 t}{\hbar}} + (V(x) + V_0) \Psi \cdot e^{-i \frac{V_0 t}{\hbar}}$$

$$= \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V(x) \cdot \Psi + V_0 \Psi \right] \cdot e^{-i \frac{V_0 t}{\hbar}}$$

$$= \left[i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} + V_0 \Psi \right] \cdot e^{-i \frac{V_0 t}{\hbar}}$$

$$\text{Donc on a bien } i\hbar \frac{\partial \Psi'}{\partial t} = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi'}{\partial x^2} + V'(x) \Psi'$$

Ψ et Ψ' correspondent à la même probabilité de présence car $|\Psi| = |\Psi'|$

I-5-b) Principe de superposition :

L'équation de Schrödinger est linéaire donc on peut superposer plusieurs solutions pour construire une nouvelle solution. En particulier, si Ψ_1, Ψ_2 sont deux solutions alors la combinaison

$\Psi = \alpha_1 \Psi_1(x, t) + \alpha_2 \Psi_2(x, t)$ est aussi une solution ($\alpha_1, \alpha_2 \in \mathbb{C}$). Ψ doit être normalisée.

I-5-c) L'équation de Schrödinger indépendante de temps et état stationnaire :

On appelle état stationnaire un état du système caractérisé par une fonction d'onde sous la forme :

$\Psi(x, t) = \varphi(x)f(t)$ où φ, f sont a priori à valeurs complexes.

Remarque : Cette définition est différente de celle d'une onde électromagnétique stationnaire où $\varphi(x)$ et $f(t)$ doivent être à valeur réelles.

La condition de normalisation impose que $\int |\Psi|^2 dx = 1$

$$\Rightarrow |f(t)|^2 \underbrace{\int |\varphi(x)|^2 dx}_{\text{constante}} = 1 \Rightarrow |f(t)| \text{ est constante.}$$

On peut choisir $|f(t)| = 1$ et faire 'rentrer' la constante dans $\varphi(x)$. Donc il faut que

$$\int |\varphi(x)|^2 dx = 1$$

$\Rightarrow \varphi(x)$ est normalisée.

Puisque $|f(t)| = 1$, alors $f(t)$ s'écrit $f(t) = e^{-i\alpha(t)}$

Où $-\alpha(t)$ est l'argument de $f(t)$. Injectons $\Psi(x, t) = \varphi(x).e^{-i\alpha(t)}$ dans l'équation de

$$\text{Schrödinger alors } i\hbar(-i\dot{\alpha}(t)).\varphi(x).e^{-i\alpha(t)} = \frac{-\hbar^2}{2m}\varphi''(x).e^{-i\alpha(t)} + V(x).\varphi(x).e^{-i\alpha(t)}$$

$$\text{où } \dot{\alpha}(t) = \frac{d\alpha}{dt} \text{ et } \varphi''(x) = \frac{d^2\varphi}{dx^2}$$

$$\Rightarrow \underbrace{\dot{\alpha}(t)}_{\text{fonction}(t)} = \underbrace{\frac{-\hbar}{2m} \frac{\varphi''(x)}{\varphi(x)} + \frac{1}{\hbar} V(x)}_{\text{fonction}(x)}$$

Donc nécessairement ces deux fonctions doivent être constantes.

Notons $\dot{\alpha}(t) = \text{constante} = \omega$ (homogène à une pulsation)

$$\Rightarrow \alpha(t) = \omega t$$

$$\text{Donc } f(t) = e^{-i\omega t} \Rightarrow \boxed{\Psi(x, t) = \varphi(x).e^{-i\omega t}}$$

est la fonction d'onde d'un état stationnaire.

$$\text{En plus } \varphi(x) \text{ vérifie l'équation : } \frac{-\hbar}{2m} \frac{\varphi''(x)}{\varphi(x)} + \frac{V(x)}{\hbar} = \omega$$

$$\Rightarrow \frac{-\hbar^2}{2m}\varphi''(x) + V(x).\varphi(x) = \hbar\omega\varphi(x)$$

Or $\hbar\omega = E$ (Relation de Planck-Einstein)

$$\text{Donc } \boxed{\varphi''(x) + \frac{2m(E - V(x))}{\hbar^2}\varphi(x) = 0}$$

Cette équation est appelée équation de Schrödinger indépendante de temps.

Conclusion : (à retenir)

Un état stationnaire est décrit par une fonction d'onde de la forme

$$\Psi(x, t) = \varphi(x) \cdot e^{-i\omega t} = \varphi(x) \cdot e^{-i \frac{E}{\hbar} t} \text{ avec } \varphi(x) \text{ solution de } \varphi''(x) + \frac{2m(E-V(x))}{\hbar^2} \varphi(x) = 0$$

et vérifie $\int |\varphi(x)|^2 dx = 1$

Remarque :

- La fonction φ est continue.
- La fonction dérivée $\frac{d\varphi}{dx}$ est continue en tout point où $V(x)$ ne présente pas de discontinuité d'amplitude infinie.
- $\int_{\text{espace}} |\Psi(x, t)|^2 dx = 1$ (car $|\Psi(x, t)| = |\varphi(x) \cdot e^{-i\omega t}| = |\varphi(x)|$).
- La densité de probabilité $\rho = |\Psi(x, t)|^2 = |\varphi(x)|^2$ d'un état stationnaire est indépendante de temps.

• $\varphi(x)$ est solution de $\frac{-\hbar^2}{2m} \varphi''(x) + V(x)\varphi(x) = E\varphi(x)$ de la forme $\boxed{H\varphi(x) = E\varphi(x)}$ où

$H = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)$ est l'opérateur hamiltonien. Cette forme montre que les solutions $\varphi(x)$ sont les fonctions propres de l'opérateur H associées aux valeurs propres E . $\varphi(x)$ est appelée alors fonction d'onde propre.

L'équation aux valeurs propres : $H\varphi(x) = E\varphi(x)$ vérifiées par $\varphi(x)$ et les conditions aux limites montrent que l'énergie ne peut prendre que des valeurs particulières, c'est là qu'apparaît la quantification de l'énergie d'une particule quantique.

I-5-d) État quantique non stationnaire (quelconque) :

Selon le paragraphe précédent ; un état stationnaire est décrit par $\Psi_n(x, t) = \varphi_n(x) \cdot e^{-i\omega_n t}$ où

$$\omega_n = \frac{E_n}{\hbar}. \quad (n \text{ est un indice pour numérotter les états stationnaires}).$$

$\varphi_n(x)$ est une fonction propre solution de l'équation de Shrödinger indépendante du temps. (Équation aux valeurs propres).

L'ensemble des fonctions propres $\varphi_n(x)$ constitue une base de l'espace des fonctions d'onde. Remarquons que $\Psi_n(x, t=0) = \varphi_n(x)$.

Soit $\Psi(x, t)$ la fonction d'onde associée à un état quantique quelconque (non stationnaire) $\Psi(x, t=0)$ peut être alors décomposée sur la base formée par les $\Psi_n(x, t=0) = \varphi_n(x)$:

$$\Psi(x, t=0) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \varphi_n(x) \quad \text{avec} \quad \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 = 1 \quad (\text{Pour assurer la normalisation})$$

$$\Rightarrow \Psi(x, t=0) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \Psi_n(x, t=0) \Rightarrow \Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \Psi_n(x, t)$$

Conclusion :

À un instant t quelconque ; un état quantique quelconque est décrit par :

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \varphi_n(x) \cdot e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t}$$

avec, $\sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 = 1$ et les $\varphi_n(x)$ sont les solutions (propres) de l'équation de Schrödinger

indépendante du temps associées aux valeurs propres E_n .

Application :

On considère deux états stationnaires décrits par les fonctions d'onde Ψ_1 et Ψ_2 d'énergies E_1 et E_2 .

Ψ_1, Ψ_2 sont orthogonaux c.à.d $\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_2^*(x, t) \Psi_1(x, t) dx = 0$.

Soit l'état quantique quelconque $\Psi(x, t)$ définie par $\Psi(x, t) = A(\Psi_1 + \Psi_2)$ où A est une constante réelle positive.

1) Déterminer A :

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi \Psi^* dx = A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} (\Psi_1 \Psi_1^* + \Psi_2 \Psi_2^* + \Psi_1 \Psi_2^* + \Psi_2 \Psi_1^*) dx \\ &= A^2 [1 + 1 + 0 + 0] = 2A^2 \Rightarrow A = \frac{1}{\sqrt{2}} \end{aligned}$$

2) Donner l'évolution temporelle de $\Psi(x, t)$ en faisant apparaître le temps t dans son expression.

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_1(x) \cdot e^{-i \frac{E_1}{\hbar} t} + \varphi_2(x) \cdot e^{-i \frac{E_2}{\hbar} t})$$

où $\varphi_1(x), \varphi_2(x)$ sont les solutions propres de l'équation de Schrödinger indépendante du temps.

3) Évaluer la densité de probabilité $\rho = |\Psi(x, t)|^2$

$$\begin{aligned} \rho &= \Psi \cdot \Psi^* = \frac{1}{2} (\varphi_1(x) \cdot e^{-i \frac{E_1}{\hbar} t} + \varphi_2(x) \cdot e^{-i \frac{E_2}{\hbar} t}) \cdot (\varphi_1^*(x) \cdot e^{+i \frac{E_1}{\hbar} t} + \varphi_2^*(x) \cdot e^{+i \frac{E_2}{\hbar} t}) \\ &= \frac{1}{2} [|\varphi_1(x)|^2 + |\varphi_2(x)|^2 + \varphi_1(x) \varphi_2^*(x) \cdot e^{i\varphi} + \varphi_1^*(x) \varphi_2(x) \cdot e^{-i\varphi}] \quad \text{où } \varphi = \frac{E_2 - E_1}{\hbar} \\ \Rightarrow \rho &= \frac{1}{2} [\rho_1 + \rho_2 + 2 \operatorname{Re}(\varphi_1 \varphi_2^* \cdot e^{i\varphi})] \end{aligned}$$

I-6) Inégalités de Heisenberg :

I-6-a) Indétermination quantique :

Soit g une grandeur physique caractérisant l'état quantique d'une particule (par exemple : position (x) , quantité de mouvement (p_x) ; norme de vecteur d'onde k_x ; énergie E ; pulsation ω ...).

La mesure de g d'une particule quantique ne livre pas une valeur certaine. En effectuant plusieurs mesures de g ; on obtient une distribution de g . Cette distribution peut être caractérisée par une dispersion statistique autour de la valeur moyenne de g (notée $\langle g \rangle$). L'amplitude de cette dispersion statistique est notée Δg et appelée indétermination (ou incertitude) quantique sur g .

$$\Delta g = \sqrt{\langle g^2 \rangle - \langle g \rangle^2}.$$

I-6-b) Inégalité de Heisenberg spatiale :

L'inégalité de Heisenberg spatiale s'écrit : $\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$

$$\Leftrightarrow \Delta x \cdot \Delta k_x \geq 1/2 \quad (\text{car } p_x = \hbar k_x).$$

Interprétation : On ne peut pas attribuer simultanément à une particule quantique une position rigoureusement précise et une quantité de mouvement rigoureusement précise.

Remarque :

Cette limitation est intrinsèque c.à.d. elle ne dépend pas de la qualité des détecteurs utilisés.

I-6-c) Application : Diffraction

De la lumière est envoyée au travers d'une fente de largeur a en incidence normale (Voir figure)

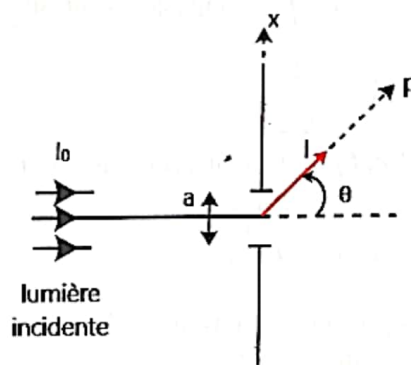
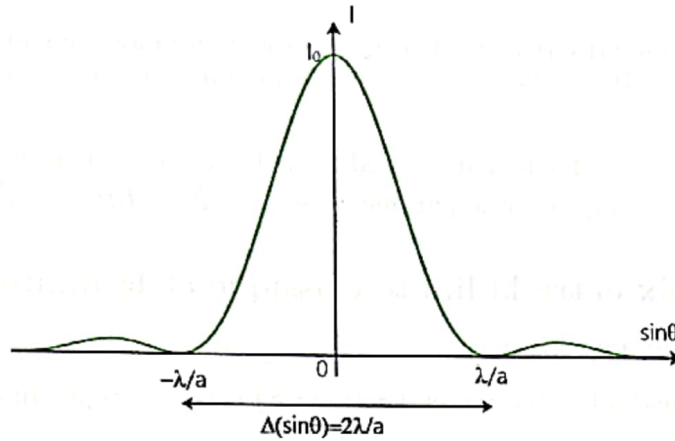


Figure 6

1) Déterminer l'ordre de grandeur de la gamme d'angles dans laquelle la lumière est diffractée ?

L'intensité de la lumière diffractée est $I = I_0 \cdot \text{sinc}^2\left(\pi \frac{\sin \theta}{\lambda} a\right)$



La gamme d'angles est telle que $\Delta(\sin \theta) = \frac{2\lambda}{a}$

$$\Rightarrow \Delta(\sin \theta) \sim \lambda/a$$

2) Dans quelle gamme de positions Δx se situe un photon :

Un photon passe au travers de la fente, il est alors localisé sur un intervalle $\Delta x = a$.

3) Déterminer l'incertitude minimale $(\Delta p_x)_{\min}$ sur p_x :

$$\text{Inégalité de Heisenberg spatiale : } \Delta p_x \cdot \underbrace{\Delta x}_a \geq \hbar/2 \Rightarrow \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2a}$$

$$\Rightarrow (\Delta p_x)_{\min} = \frac{\hbar}{2a}$$

4) Retrouver l'ordre de grandeur de la gamme d'angles trouvée à la question 1.

$$\Rightarrow p_x = p \cdot \sin \theta \Rightarrow (\Delta p_x)_{\min} = p \cdot \Delta(\sin \theta) \Rightarrow p \cdot \Delta(\sin \theta) = \frac{\hbar}{2a}$$

$$\text{or } p = \frac{h}{\lambda} \text{ (Relation de De Broglie)}$$

$$\text{donc } \frac{h}{\lambda} \cdot \Delta(\sin \theta) = \frac{h}{2\pi} \frac{1}{2a} \Rightarrow \Delta(\sin \theta) = \frac{\lambda}{4\pi a}$$

$$\Rightarrow \Delta(\sin \theta) \sim \frac{\lambda}{a}$$

5) Commenter :

La diffraction (aspect ondulatoire) peut être vue comme un cas particulier de l'inégalité de Heisenberg appliquée sur le photon en tant que particule quantique (aspect corpusculaire).

I-6-d) Inégalité de Heisenberg temps-énergie :

$$\text{Elle s'écrit : } \boxed{\tau \cdot \Delta E \geq \frac{\hbar}{2}}$$

ΔE est l'indétermination (ou incertitude) quantique sur E .

τ est la durée caractéristique d'évolution du système quantique.

Remarque :

Un état stationnaire est caractérisé par une densité de probabilité indépendante du temps
 $\Rightarrow \tau \rightarrow +\infty \Rightarrow \Delta E \rightarrow 0 \Rightarrow$ l'énergie associée à un état stationnaire est parfaitement définie.

Remarque : la relation $\Delta\nu \cdot \tau_c \sim 1$ vue dans le module de l'optique ondulatoire peut être justifiée par l'inégalité de Heisenberg temps-énergie puisque $\tau \sim \tau_c$ et $E = h\nu$ donc $\Delta E = h\Delta\nu$

I-7) Critères de choix entre la limite classique et la limite quantique :

I-7-a) Critère portant sur l'action :

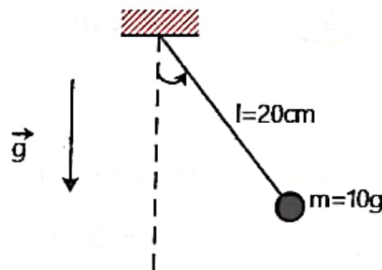
La limite classique correspond à la situation où l'action (S) caractéristique du système physique est très supérieur à $\hbar$:

$$\begin{array}{ll} \boxed{S \gg \hbar} & \rightarrow \text{limite classique} \\ \boxed{S \sim \hbar} & \rightarrow \text{limite quantique} \end{array}$$

L'action (S) peut être évaluée grâce à

$$\left\{ \begin{array}{l} S = \text{énergie} \times \text{durée} \\ \text{ou } S = \text{quantité de mouvement} \times \text{distance} \\ \text{ou } S^2 = \text{énergie} \times \text{masse} \times \text{longueur}^2. \end{array} \right.$$

Exemple 1 :



Pendule constitué d'une masse $m = 10g$.

L'énergie : $E \sim m \cdot g \cdot l$

La période des oscillations est $T = \sqrt{\frac{l}{g}}$

$$\text{Donc } S \sim E \cdot T = m \cdot g \cdot l \cdot \sqrt{\frac{l}{g}} = m \sqrt{g} \cdot l^{3/2}$$

$$\Rightarrow S \sim 10 \cdot 10^{-3} \sqrt{9,8} \cdot (20 \cdot 10^{-2})^{3/2} \sim 10^{31} \hbar (\hbar \sim 10^{-34} \text{ J.s})$$

$\Rightarrow S \gg \hbar \rightarrow$ la mécanique classique est suffisante pour étudier ce phénomène.

Exemple 2 : Électron dans son atome

énergie $E \sim 10eV$

masse $m \sim 10^{-30} Kg$

diamètre : $d \sim \text{\AA}$.

$$S^2 = E \cdot m \cdot d^2 \Rightarrow S^2 \sim 10 \cdot 10^{-19} \cdot 10^{-30} \cdot 10^{-20}$$

$$\Rightarrow S^2 \sim 10^{-68} J^2 S^2 \Rightarrow S \sim 10^{-34} JS \Rightarrow S \sim \hbar$$

⇒ Une approche quantique est nécessaire pour étudier un électron confiné dans son atome.

I-7-b) Critère portant sur la longueur d'onde de De Broglie :

Soit $\lambda_{DB} = \frac{h}{p}$ la longueur d'onde de De Broglie associée à un système. On note l la distance caractéristique du système.

$$\boxed{\lambda_{DB} \ll l} \rightarrow \text{limite classique}$$

$$\boxed{\lambda_{DB} \sim l} \rightarrow \text{limite quantique}$$

Exemple 1 : Un électron dans son atome : $\lambda_{DB} = \frac{h}{p}$ et

$$E = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{(mv)^2}{2m} = \frac{p^2}{2m} \Rightarrow p = \sqrt{2mE}.$$

$$E \sim 10\text{eV} \text{ et } m \sim 10^{-30}\text{Kg} \text{ et } h \sim 10^{-34}\text{J.s}$$

$$\Rightarrow \lambda_{DB} \sim \frac{10^{-34}}{(10^{-30} \cdot 10 \cdot 10^{-19})^{1/2}} \Rightarrow \lambda_{DB} \sim 10^{-10}\text{m}$$

$$\Rightarrow \lambda_{DB} \sim \text{diamètre de l'atome.}$$

Ce critère montre (comme le critère précédent) la nécessité d'une approche quantique pour étudier l'électron dans son atome.

Exemple 2 : Une personne de masse $m = 70\text{kg}$ qui se déplace à une vitesse $v \sim 1\text{m/s}$.

$$\lambda_{DB} = \frac{\lambda}{p} = \frac{h}{mv} \Rightarrow \lambda_{DB} \sim \frac{10^{-34}}{70} \simeq 10^{-36}\text{m}$$

$$\Rightarrow \lambda_{DB} \ll \text{taille d'une personne} \rightarrow \text{la limite classique est suffisante pour étudier une personne.}$$

I-7-c) Principe de correspondance de Bohr :

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

II/ Évolution d'une particule quantique libre :

II-1) Définition et conséquence :

II-1-a) Définition :

Une particule quantique est dite libre si elle évolue dans le vide sans interaction.

L'énergie potentielle d'une particule quantique libre est alors identiquement nulle :

$$\boxed{V(x) = 0 ; \forall x}$$

II-1-b) Conséquence :

L'énergie totale (E) d'une particule quantique s'identifie avec son énergie cinétique (E_c).

$$\Rightarrow \boxed{E = E_c = \frac{1}{2}mv^2} \text{ où } v \text{ est la vitesse de la particule.}$$

L'équation de Schrödinger indépendante du temps s'écrit :

$$\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\varphi(x) = 0 \quad \text{or} \quad E = \hbar\omega; \text{ donc :}$$

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

II-2) Les états stationnaires d'une particule quantique libre :

II-2-a) Onde plane progressive monochromatique (OPPM) :

Un état stationnaire (voir paragraphe I-5-c) est décrit par une fonction d'onde de la forme :

$$\Psi(x, t) = \varphi(x) \cdot e^{-i\omega t}, \text{ où, } \varphi(x) \text{ est solution de } \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + \frac{2m\omega}{\hbar}\varphi(x) = 0$$

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

$$\text{Équations caractéristique : } r^2 + k^2 = 0 \Rightarrow r = \pm ik \in i\mathbb{R}.$$

$$\Rightarrow \varphi(x) = A \cdot e^{ikx} + B \cdot e^{-ikx} \quad (A, B = \text{constantes})$$

$$\Rightarrow \Psi(x, t) = \underbrace{A \cdot e^{i(kx - \omega t)}}_{\text{OPPM progressive selon } (+\vec{u}_x)} + \underbrace{B \cdot e^{-i(kx + \omega t)}}_{\text{OPPM progressive selon } (-\vec{u}_x)}$$

II-2-b) Relation de dispersion et vitesse de phase :

$$\text{L'équation de Schrödinger générale s'écrit pour une particule quantique libre : } i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta \Psi.$$

En injectant dans cette équation la solution $\Psi(x, t)$ trouvée dans le paragraphe précédent; on aboutit à :

$$i\hbar(-i\omega)\Psi = \frac{-\hbar^2}{2m}(-k^2)\Psi \Rightarrow \boxed{\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}} \text{ dite relation de dispersion.}$$

Donc la vitesse de phase v_φ de l'OPPM est :

$$\boxed{v_\varphi = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar k}{2m}}$$

La relation de dispersion est non linéaire (et $v_\varphi = \text{fonction}(k)$) donc la propagation d'une onde associée à une particule quantique libre est dispersive.

II-3) Représentation d'une particule quantique libre par un paquet d'onde :

II-3-a) Caractère non physique de l'OPPM :

La densité de probabilité ρ associée à l'OPPM $\Psi = A.e^{i(kx-\omega t)}$ est

$\rho = |\Psi|^2 = |A|^2 = \text{cte} > 0 \Rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi|^2 dx$ diverge et par suite la condition de normalisation est non vérifiée. L'OPPM n'a donc pas de réalité physique.

II-3-b) Paquet d'onde :

Remarque :

Pour avoir plus de détails sur la notion du paquet d'onde, vous pouvez consulter le paragraphe II du chapitre "Propagation des ondes électromagnétiques dans le plasma et dans le métal".

Puisque l'OPPM ne possède pas de réalité physique; une particule quantique peut être représentée de façon plus réaliste par un paquet d'onde. Ce dernier constitue une superposition d'une infinité des OPPM de pulsations ω différentes et donc de normes de vecteur d'onde k différentes.

Les pulsations ω sont voisines d'une valeur moyenne ω_0 (Le paquet est alors quasi-monochromatique).

La fonction d'onde qui décrit un paquet d'onde s'écrit :

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(k).e^{i(kx-\omega(k)t)} dk$$

où $\omega(k)$ est donnée par la relation de dispersion et $g(k)$ est l'amplitude de l'OPPM de vecteur d'onde de norme k .

II-3-c) Propagation d'un paquet d'onde :

Le paquet est quasi-monochromatique donc les normes k des vecteurs d'onde sont voisines d'une valeur moyenne k_0 .

Effectuons un développement limité au premier ordre en $(k - k_0)$ de la pulsation ω :

$$\omega(k) = \underbrace{\omega(k_0)}_{\omega_0} + (k - k_0) \left(\frac{d\omega}{dk} \right)_{k_0}$$

$$\Rightarrow \Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(k).e^{i(kx-\omega_0 t - (k-k_0)(\frac{d\omega}{dk})_{k_0} t)} dk$$

$$= \underbrace{\left[\int_{-\infty}^{+\infty} g(k).e^{i(k-k_0)[x - (\frac{d\omega}{dk})_{k_0} t]} dk \right]}_{A(x - (\frac{d\omega}{dk})_{k_0} t)} . e^{i(k_0 x - \omega_0 t)}$$

$$\Rightarrow \Psi(x, t) = \underbrace{A(x, t)}_{\text{amplitude}} . e^{\underbrace{i(k_0 x - \omega_0 t)}_{\text{phase}}}$$

$\Psi(x, t)$ est une onde plane progressive de pulsation ω_0 dont l'amplitude complexe $A(x, t)$ est variable et présente un couplage entre le temps et l'espace. En effet $A(x, t) = A(x - \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k_0} t)$ donc $A(x, t)$ se déplace à la vitesse $\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k_0} = v_g$ dite vitesse de groupe. La phase se propage à la vitesse de phase $v_\varphi = \frac{\omega_0}{k_0}$.

Selon le paragraphe II.2.b; la relation de dispersion est $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$ donc $v_\varphi = \frac{\omega_0}{k_0} = \frac{\hbar k_0}{2m}$ et

$$v_g = \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k_0} = \frac{\hbar k_0}{m} = \frac{p}{m} = v_{\text{particule}} \text{ (vitesse de la particule).}$$

$$\text{Or } E_{\text{particule}} = E_{\text{cinétique}} = \frac{1}{2} m v_{\text{particule}}^2 = \frac{p_{\text{particule}}^2}{2m}$$

$$\Rightarrow E_{\text{particule}} = \frac{(\hbar k_0)^2}{2m} \Rightarrow \text{selon la relation de dispersion; } E_{\text{particule}} = \hbar \omega_0$$

Conclusion :

Une particule quantique libre peut être représentée par un paquet d'onde quasi-monochromatique de vecteur d'onde moyen $\vec{k}_0 = k_0 \cdot \vec{u}_x$ et de pulsation moyenne ω_0 tels que :

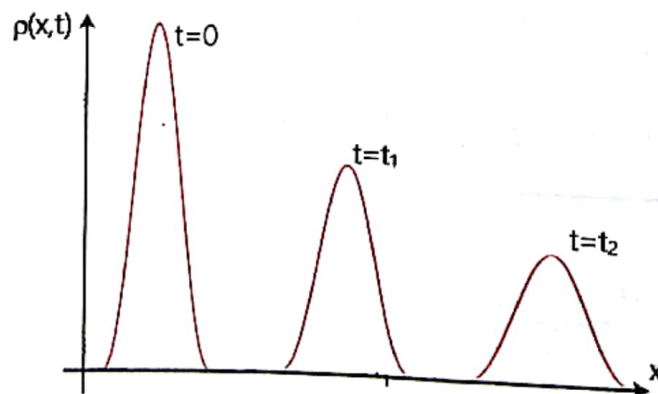
$$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

$$v_{\text{particule}} = v_g = \frac{\hbar k_0}{m}$$

$$\vec{p}_{\text{particule}} = \hbar \vec{k}_0$$

II-3-d) Dispersion au cours de la propagation :

On suppose que la particule est bien localisée à l'instant initial ($t = 0$), c.à.d. sa densité de probabilité $\rho = |\Psi|^2$ est de largeur faible à $t = 0$. (voir figure)



On choisit ici un profil gaussien pour la fonction d'onde Ψ .

La relation de dispersion est non linéaire et par suite la propagation est dispersive, d'ailleurs on a trouvé que v_ϕ et v_g sont différentes. Donc, l'enveloppe $A(x, t)$ de $\Psi(x, t)$ (voir II-3-c) se propage à la vitesse $v_g = v_{\text{particule}}$ différente de la vitesse de la phase de $\Psi(x, t)$.

La dispersion se traduit par un étalement du paquet d'onde.

Au cours du temps; la particule peut être détectée sur un intervalle de position de plus en plus étendu (voir figure) c.à.d. l'incertitude Δx augmente au cours du temps.

II-4) Courant de probabilité :

II-4-a) Vecteur densité de courant de probabilité :

Considérons une particule quantique représentée par un paquet d'ondes de vecteur d'onde moyen k qui se déplace à la vitesse de groupe $v_g = \frac{\hbar k}{m}$

Donc la probabilité de présence à l'instant t de cette particule dans l'intervalle $[x, x + dx]$ est $dP = |\Psi(x, t)|^2 dx = |\Psi(x, t)|^2 \cdot v_g dt$

Alors : le débit de probabilité $\frac{dP}{dt}$ à l'abscisse x à travers une surface unité peut être exprimé au moyen du vecteur densité de courant de probabilité :

$$\vec{j} = \frac{dP}{dt} \vec{u}_x = |\Psi(x, t)|^2 v_g \vec{u}_x$$

$$\text{Donc } \boxed{\vec{j} = |\Psi(x, t)|^2 \frac{\hbar \vec{k}}{m}} \quad \text{l'unité de } \vec{j} \text{ est } s^{-1}.$$

Remarque :

Pour décrire un faisceau de particules quantiques identiques, libres et indépendantes; on introduit aussi la notion de vecteur densité de courant de particules défini par :

$$\boxed{\vec{j}_N = \rho_0 \vec{v}_g = \rho_0 \frac{\hbar \vec{k}}{m}}$$

où ρ_0 désigne la densité linéique de particules quantiques.

Le flux de particule $\boxed{\phi = \vec{j}_N \vec{u}_x}$ représente le nombre de particules qui passent à une abscisse x donnée par unité de temps.

II-4-b) Analogie :

Le vecteur densité de courant de probabilité $\vec{j} = |\Psi(x, t)|^2 \vec{v}_g$ et de particules $\vec{j}_N = \rho_0 \vec{v}_g$ sont analogues au vecteur densité de courant électrique introduit dans le module de l'électromagnétisme $\vec{j}_c = \rho_m \cdot \vec{v}$ où ρ_m est la densité volumique des charges mobiles et $\vec{v}$ leur vitesse moyenne. On rappelle que ce courant intervient notamment dans l'équation de Maxwell-Ampère.

II-4-c) Exemple :

Considérons un faisceau d'électrons libres et indépendants correspondant à un courant électrique de $1mA$. L'énergie d'un électron est $E = 3eV$. On rappelle que sa masse est $m_e = 9.10^{-31} Kg$.

Déterminer ϕ ; $\vec{j}_N$ et ρ_0 sachant que la longueur du faisceau est $l = 50cm$.

Réponse :

- $I = \frac{dq}{dt}$ donc I représente le débit de charge $\Rightarrow I = \phi \cdot e$

$$\Rightarrow \boxed{\phi = \frac{I}{e}} \quad \text{A.N : } \phi = 6.10^{15} \cdot s^{-1}.$$

- $\vec{j}_N = \phi \vec{u}_x = 6.10^{15} \cdot \vec{u}_x (s^{-1})$

- $\rho_0 = \frac{j_N}{v}$ où $v = v_g = v_{\text{particule}}$

$$\text{Or } E = E_c = \frac{1}{2} m_e v^2 \Rightarrow v = \sqrt{\frac{2E}{m_e}}$$

$$\text{Donc : } \rho_0 = j_N \sqrt{\frac{m}{2E}} \quad \text{A.N : } \rho = 6.10^9 m^{-1}$$

II-4-d) Généralisation pour une particule non libre :

Dans le cas où la particule quantique est non libre (c.à.d $V(x)$ est une fonction non nulle); on peut lui associer un vecteur densité de courant de probabilité à condition qu'elle soit dans un état stationnaire représenté par une fonction d'onde sous forme d'une OPPM ou de paquet d'ondes quasi-monochromatique.

Support de Cours : 2ème partie de Physique Quantique

2eme Année MP/T/PC

Proposé par : Prof. Neil JOMAA

III/ Évolution d'une particule quantique dans un potentiel :

III-1) Introduction :

On envisage maintenant l'étude, dans un référentiel $\mathcal{R}$, d'une particule quantique en interaction avec un système physique (particule non libre). Cette interaction est modélisée par une énergie potentielle supposée stationnaire $V(x)$.

Nous allons chercher alors les solutions de l'équation de Schrödinger sous la forme d'état stationnaire $\Psi(x, t) = \varphi(x) \cdot e^{-i(E/\hbar)t} = \varphi(x) \cdot e^{-i\omega t}$. Pour cela, on doit résoudre l'équation de Schrödinger indépendante du temps :

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

(voir paragraphe I-5-c)

On traitera plusieurs cas de profil d'énergie potentielle $V(x)$.

Dans chaque cas étudié, la démarche suivie s'articule principalement sur les étapes suivantes :

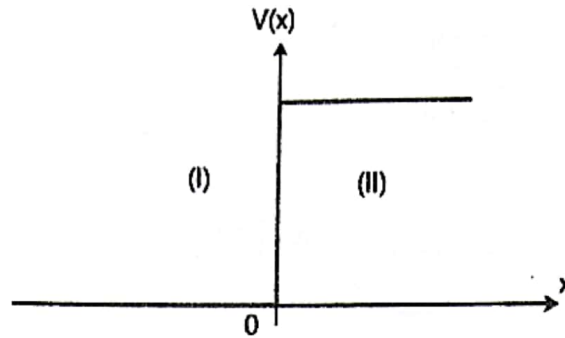
- On cherchera les états stationnaires
- On interprétera ces solutions. L'interprétation peut être statistique (en considérant un faisceau de particules) ou basée sur une seule particule en lui associant un paquet d'onde.
- On confrontera les résultats de l'approche quantique avec ceux prévus par la mécanique classique.

III-2) Marche de potentiel :

III-2-a) Modélisation :

On envisage le cas où l'énergie potentielle d'interaction (potentiel) de la particule avec un système physique varie brusquement à partir d'une position prise comme origine. La variation est considérée brusque lorsque la distance caractéristique de variation du potentiel est négligeable devant λ_{DB} la

longueur d'onde de Broglie de la particule. Dans ce cas le profil du potentiel est donné par la figure suivante :



$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{pour } x < 0 \quad (\text{Région I}) \\ V_0 = \text{cte} > 0 & \text{pour } x > 0 \quad (\text{Région II}) \end{cases}$$

Ce profil permet de modéliser par exemple, l'énergie d'interaction d'un électron de conduction au sein d'un métal avec le reste de particules.

III-2-b) Premier cas : $E > V_0$

Fonction d'onde :

L'équation de Schrödinger indépendante du temps s'écrit :

$$\text{Région(I)} : \varphi_1''(x) + k_1^2 \varphi_1(x) = 0 \text{ où } k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \text{ car } V(x) = 0$$

$$\text{Région(II)} : \varphi_2''(x) + k_2^2 \varphi_2(x) = 0 \text{ où } k_2 = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar} \text{ car } V(x) = V_0$$

$$\text{Les solutions sont : } \begin{cases} \varphi_1 = A_1.e^{ik_1x} + B_1.e^{-ik_1x} \\ \varphi_2 = A_2.e^{ik_2x} + B_2.e^{-ik_2x} \end{cases}$$

Or $\Psi(x, t) = \varphi(x).e^{-i\omega t}$ pour un état stationnaire d'énergie : $E = \hbar\omega$, donc :

$$\begin{aligned} \Psi_1 = & \underbrace{A_1.e^{i(k_1x - \omega t)}}_{\substack{\text{OPPM se propageant selon } \vec{u}_x \\ \text{c'est l'onde incidente } \Psi_i}} + \underbrace{B_1.e^{-i(k_1x + \omega t)}}_{\substack{\text{OPPM se propageant selon } -\vec{u}_x \\ \text{c'est l'onde réfléchi } \Psi_r}} \\ \Psi_2 = & \underbrace{A_2.e^{i(k_2x - \omega t)}}_{\substack{\text{OPPM se propageant selon } +\vec{u}_x \\ \text{c'est l'onde transmise } \Psi_t}} + \underbrace{B_2.e^{-i(k_2x + \omega t)}}_{\substack{\text{OPPM se propageant selon } -\vec{u}_x \\ \text{c'est inacceptable dans II donc } \boxed{B_2 = 0}}} \end{aligned}$$

• Conditions aux limites et coefficients de réflexion et de transmission :

La continuité de $\varphi(x)$ en $x = 0 \Rightarrow \varphi_1(x = 0^-) = \varphi_2(x = 0^+)$

$$\Rightarrow A_1 + B_1 = A_2 \quad (a)$$

$V(x)$ présente une discontinuité finie en $x = 0$, donc $\varphi'(x)$ est continue en $x = 0 \Rightarrow \varphi_1'(0) = \varphi_2'(0)$

$$\Rightarrow (A_1 - B_1)ik_1 = A_2ik_2 \quad (b)$$

Notons $\begin{cases} r = \frac{B_1}{A_1} \text{ le coefficient de réflexion} \\ t = \frac{A_2}{A_1} \text{ le coefficient de transmission} \end{cases}$

$$\begin{cases} (a) \\ (b) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} 1 + r = t \\ 1 - r = \frac{k_2}{k_1} t \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} t = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} \\ r = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \end{cases}$$

• Courant de probabilités et probabilités de réflexion R et de transmission T

On associe à chaque onde le vecteur densité de courant probabilité :

$$\Psi_i \rightarrow \vec{j}_i = |\Psi_i|^2 \cdot \frac{\hbar k_1}{m} \vec{u}_x = |A_1|^2 \cdot \frac{\hbar k_1}{m} \vec{u}_x$$

$$\Psi_r \rightarrow \vec{j}_r = |\Psi_r|^2 \cdot \frac{\hbar k_1}{m} (-\vec{u}_x) = |r|^2 |A_1|^2 \cdot \frac{\hbar k_1}{m} (-\vec{u}_x) = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2 |A_1|^2 \frac{\hbar k_1}{m} (-\vec{u}_x)$$

$$\Psi_t \rightarrow \vec{j}_t = |\Psi_t|^2 \cdot \frac{\hbar k_2}{m} \vec{u}_x = |t|^2 |A_1|^2 \cdot \frac{\hbar k_2}{m} \vec{u}_x = \frac{4k_1^2}{(k_1 + k_2)^2} |A_1|^2 \frac{\hbar k_2}{m} \vec{u}_x$$

La probabilité de réflexion est par définition : $R = \frac{\|\vec{j}_r\|}{\|\vec{j}_i\|}$

$$\Rightarrow R = |r|^2 = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2. \text{ Si } E > V_0 \Rightarrow R = \left(\frac{1 - \sqrt{1 - V_0/E}}{1 + \sqrt{1 - V_0/E}} \right)^2$$

La probabilité de transmission de la particule de la région (I) vers la région (II) est par définition

$$T = \frac{\|\vec{j}_t\|}{\|\vec{j}_i\|}$$

donc $T = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}$. Si $E > V_0 \Rightarrow T = \frac{4\sqrt{1 - V_0/E}}{(1 + \sqrt{1 - V_0/E})^2}$

Commentaires :

• R est toujours non nulle donc malgré que $E > V_0$; il est possible que la particule quantique soit réfléchi. Cet effet est purement quantique car selon la mécanique classique si $E > V_0$; la particule traverse la marche de potentiel.

• $R + T = 1$ ce qui est en accord avec la condition de normalisation de la probabilité. En effet, la particule quantique est soit réfléchi, soit transmise.

• Dans la limite où $E \gg V_0$; on obtient $R \rightarrow 0$ et $T \rightarrow 1$ donc l'influence de la marche de potentiel sur la particule est négligeable.

• Densité de probabilité :

Région (I) : $|\Psi_1|^2 = |\varphi_1|^2 = \varphi_1 \cdot \varphi_1^*$

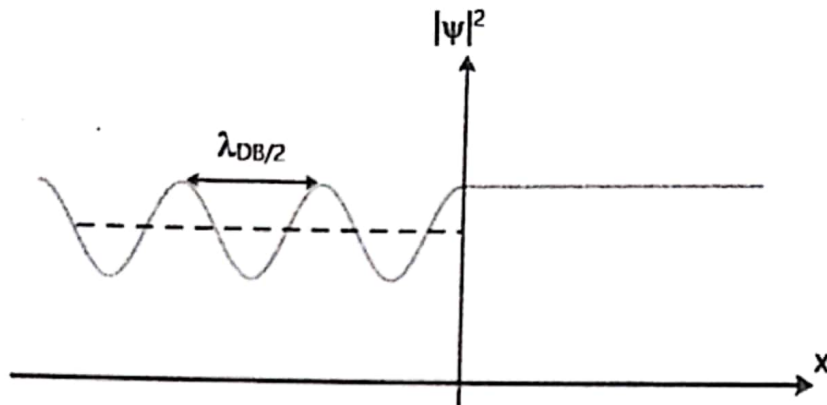
$$= (A_1 \cdot e^{+ik_1x} + A_1 r \cdot e^{-ik_1x}) \cdot (A_1 \cdot e^{-ik_1x} + A_1 r \cdot e^{+ik_1x})$$

$$= A_1^2 [1 + r^2 + r(e^{2ik_1x} + e^{-2ik_1x})] \text{ or } R = r^2$$

$$\text{donc } |\Psi_1|^2 = A_1^2 [1 + R + 2\sqrt{R} \cos(2k_1x)]$$

$$\text{Région (II)} : |\Psi_2|^2 = |\varphi_2|^2 = |A_2|^2 = t^2 \cdot A_1^2 = \frac{4A_1^2}{(1 + \sqrt{1 - \frac{V_0}{E}})^2}$$

Représentation de la densité de probabilité :



$$\lambda_{DB} = \frac{2\pi}{k_1} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2mE}} = \frac{h}{\sqrt{2mE}}$$

Les oscillations de $|\Psi|^2$ pour $x \leq 0$ résultent de l'interférence entre l'onde incidente Ψ_i et l'onde réfléchie Ψ_r . Cet effet est purement quantique.

On remarque que pour $x \geq 0$, la probabilité de présence est constante et s'étend à l'infini : on dit que la particule est dans un état de diffusion.

III-2-c) Second cas : $E < V_0$

Région (I) : aucune modification par rapport au cas précédent donc

$$\varphi_1 = \underbrace{A_1 \cdot e^{i(k_1x - \omega t)}}_{\varphi_i} + \underbrace{B_1 \cdot e^{-i(k_1x + \omega t)}}_{\varphi_r}$$

$$\text{avec } k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$\text{Région (II)} : \varphi_2''(x) - q^2 \varphi_2(x) = 0 \quad \text{où} \quad q = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

$$\text{Donc } \varphi_2(x) = A_2 \cdot e^{-qx} + B_2 \cdot e^{qx}$$

$B_2 = 0$ sinon $\varphi_2(x)$ diverge si $x \rightarrow +\infty$ ce qui est inacceptable

$$\Rightarrow \varphi_2(x) = A \cdot e^{-qx} \Rightarrow \Psi_2(x, t) = A_2 \cdot e^{-qx} \cdot e^{-i\omega t}$$

$\Psi_2(x, t)$ est une onde stationnaire.

- Coefficients r et t :

Un raisonnement analogue à celui du paragraphe précédent donne $r = \frac{B_1}{A_1} = \frac{k_1 - iq}{k_1 + iq}$ et

$$t = \frac{A_2}{A_1} = \frac{2k_1}{k_1 + iq}$$

Remarquer que tout se passe comme si on remplace k_2 par iq .

• Courants de probabilité et R, T :

$$\Psi_i \rightarrow \vec{j}_i = |\Psi_i|^2 \cdot \frac{\hbar k_1}{m} \vec{u}_x = A_1^2 \frac{\hbar k_1}{m} \vec{u}_x$$

$$\Psi_r \rightarrow \vec{j}_r = |\Psi_r|^2 \cdot \frac{\hbar k_1}{m} (-\vec{u}_x) = |r|^2 A_1^2 \frac{\hbar k_1}{m} (-\vec{u}_x)$$

$$R = \frac{||\vec{j}_r||}{||\vec{j}_i||} = |r|^2 = \left| \frac{k_1 - iq}{k_1 + iq} \right|^2 = 1$$

L'onde transmise est stationnaire (évanescence) donc on ne peut pas lui associer un vecteur densité de courant de probabilité.

$$\text{Or } \begin{cases} R + T = 1 \Rightarrow T = 0 \\ R = 0 \end{cases}$$

Voir paragraphe II.4.1 (page 18).

Donc si $E < V_0$; la particule quantique est forcément réfléchi par la marche de potentiel.

On peut représenter alors R, T en fonction de E pour les deux cas ($E > V_0$ et $E < V_0$) :



Densité de probabilité de présence :

$$\bullet |\Psi_1|^2 = |\varphi_1|^2 \quad \text{avec} \quad \varphi_1 = A_1 \cdot e^{ik_1 x} + r \cdot A_1 \cdot e^{-ik_1 x}$$

$$r = \frac{k_1 - iq}{k_1 + iq} \Rightarrow |r| = 1; \quad \text{soit } \theta = \arg(r) \text{ donc}$$

$$r = e^{i\theta} \Rightarrow \varphi_1 = A_1 [e^{ik_1 x} + e^{i(\theta - k_1 x)}]$$

$$\text{Donc } |\Psi_1|^2 = |\varphi_1|^2 = \varphi_1 \varphi_1^* = |A_1|^2 [1 + 1 + e^{i(2k_1 x - \theta)} + e^{-i(2k_1 x - \theta)}]$$

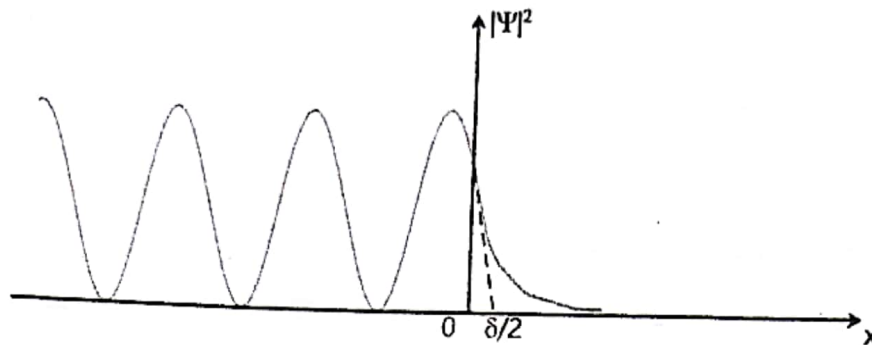
$$\Rightarrow |\varphi_1|^2 = 2|A_1|^2 [1 + \cos(2k_1 x - \theta)]$$

$$\bullet |\Psi_2|^2 = |\varphi_2|^2 = |A_2|^2 [e^{-qx}]^2 = |t|^2 |A_1|^2 \cdot e^{-2qx}$$

$$t = \frac{2k_1}{k_1 + iq} \Rightarrow |t|^2 = \frac{(2k_1)^2}{k_1^2 + q^2} = \frac{4}{1 + \left(\frac{q}{k_1}\right)^2} = \frac{4E}{V_0}$$

$$\Rightarrow |\Psi_2|^2 = \frac{4E}{V_0} |A_1|^2 e^{-2qx} = \frac{4E}{V_0} |A_1|^2 e^{-\frac{2x}{\delta}} \quad \text{où } \delta = \frac{1}{q}$$

Représentation de la densité de probabilité :



On constate que dans la région (II) ($x > 0$) interdite à la particule (car $R = 1$); la densité de probabilité de présence n'est pas nulle! Elle s'étend sur une distance caractéristique $\delta/2$ avec

$$\delta = \frac{1}{q} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}} \quad \text{appelée quantique. Comme c'est prévu; si } m \nearrow \text{ l'effet quantique } \searrow$$

car $\delta \searrow$.

Cet effet est analogue à l'effet de peau étudié en électromagnétisme.

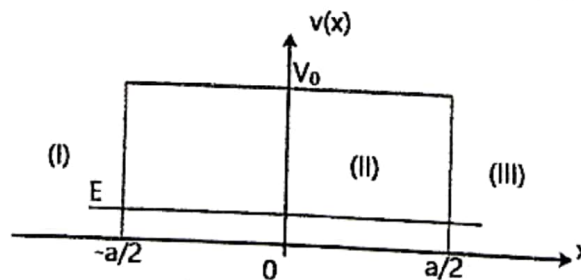
Imaginons que l'extension de la marche de potentiel est finie.

On parle alors d'une barrière de potentiel. Si la décroissance de la fonction d'onde Ψ_t est suffisamment lente par rapport à l'extension de cette barrière; on peut s'attendre à ce que la probabilité T de présence soit non nulle de l'autre côté de la barrière! c'est l'effet tunnel dont l'étude est l'objet du paragraphe suivant.

III-3) Barrière de potentiel et effet tunnel :

III-3-a) Modélisation

La barrière de potentiel est une marche de potentiel d'extension limitée.



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

La barrière (région (II)) est de largeur a et de hauteur $V_0 > 0$.

Les discontinuités de $V(x)$ en $x = \pm a/2$ modélisent une évolution de $V(x)$ sur une échelle spatiale négligeable devant λ_{DB} .

Un faisceau incident de particules quantiques provenant de $x = -\infty$ se dirige vers la barrière.

On s'intéresse au cas où l'énergie E d'une particule incidente est $E < V_0$.
De point de vue de la mécanique classique, la particule rebrousse chemin car $E < V_0$.

III-3-b) Fonction d'onde et conditions aux limites

✓ L'équation de Schrödinger indépendante de temps s'écrit :

- Dans les régions (I) et (III) : $\varphi''(x) + k^2\varphi(x) = 0$, où $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$
- Dans la région (II) : $\varphi''(x) - q^2\varphi(x) = 0$ où $q = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$

✓ Les solutions de ces équations sont :

- Dans la région (I) : $\varphi_I(x) = A_1.e^{ikx} + B_1.e^{-ikx}$
- Dans la région (II) : $\varphi_{II}(x) = A_2.ch(qx) + B_2.sh(qx)$
- Dans la région (III) : $\varphi_{III}(x) = A_3.e^{ikx} + B_3.e^{-ikx}$

✓ Donc :

$$\Psi_I = \varphi_I.e^{-i\omega t} = \underbrace{A_1.e^{i(kx-\omega t)}}_{\text{OPPM incidente } \Psi_i} + \underbrace{B_1.e^{-i(kx+\omega t)}}_{\text{OPPM réfléchie } \Psi_r}$$

$$\Psi_{III} = \varphi_{III}.e^{-i\omega t} = \underbrace{A_3.e^{i(kx-\omega t)}}_{\text{OPPM transmise : } \Psi_t} + \underbrace{B_3.e^{-i(kx+\omega t)}}_{\text{OPPM se propageant selon } (-\vec{u}_x) \rightarrow \text{inacceptable} \rightarrow B_3 = 0}$$

✓ Continuité de $\varphi(x)$:

$$\bullet \varphi_I(x = -a/2^-) = \varphi_{II}(x = -a/2^+) \Rightarrow A_1.e^{-ika/2} + B_1.e^{ika/2} = A_2.ch\left(\frac{qa}{2}\right) - B_2.sh\left(\frac{qa}{2}\right) \quad (1)$$

$$\bullet \varphi_{III}(x = a/2^+) = \varphi_{II}(x = a/2^-) \Rightarrow A_3.e^{ika/2} = A_2.ch\left(\frac{qa}{2}\right) + B_2.sh\left(\frac{qa}{2}\right) \quad (2)$$

✓ $V(x)$ présente des discontinuités d'amplitude finie $\Rightarrow \varphi'(x)$ continue.

$$\bullet \varphi'_I(x = -a/2^-) = \varphi'_{II}(x = -a/2^+) \Rightarrow ik(A_1.e^{-ika/2} - B_1.e^{ika/2}) = q(-A_2.sh\left(\frac{qa}{2}\right) + B_2.ch\left(\frac{qa}{2}\right)) \quad (3)$$

$$\bullet \varphi'_{III}(x = a/2^+) = \varphi'_{II}(x = a/2^-) \Rightarrow ik.A_3.e^{ika/2} = q(A_2.sh\left(\frac{qa}{2}\right) + B_2.ch\left(\frac{qa}{2}\right)) \quad (4)$$

$$\text{En ajoutant la condition de normalisation } \int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi|^2 dx = 1 \quad (5),$$

On obtient un système à 5 équations et 5 inconnus qui sont A_1, A_2, B_1, B_2 et A_3 . La résolution du système est alors possible, c'est un calcul mathématique assez long dont on exploitera directement le résultat dans les paragraphes suivants.

III-3-c) Probabilités de réflexion R et de transmission T à travers la barrière. Effet tunnel :

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

- Pour l'onde incidente : $\vec{j}_i = |\Psi_i|^2 \frac{\hbar \vec{k}}{m} = |A_1|^2 \frac{\hbar k}{m} \vec{u}_x$.
- Pour l'onde réfléchi : $\vec{j}_r = |\Psi_r|^2 \frac{\hbar (-\vec{k})}{m} = |B_1|^2 \frac{\hbar k}{m} (-\vec{u}_x)$ 
- Pour l'onde transmise : $\vec{j}_t = |\Psi_t|^2 \frac{\hbar \vec{k}}{m} = |A_3|^2 \frac{\hbar k}{m} \vec{u}_x$.

Remarque : on ne peut pas associer à φ_{II} , un vecteur densité de courant de probabilité car l'onde n'est pas progressive dans (II).

On en déduit :

$$R = \frac{||\vec{j}_r||}{||\vec{j}_i||} = \left| \frac{B_1}{A_1} \right|^2$$

$$T = \frac{||\vec{j}_t||}{||\vec{j}_i||} = \left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2$$

La résolution du système à 5 équations présenté dans le paragraphe précédent donne.

$$R = \frac{\frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \sinh^2(qa)}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \sinh^2(qa)} \quad \text{et} \quad T = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \sinh^2(qa)}$$

On remarque de $T \neq 0$ donc une particule quantique possède toujours la possibilité de traverser la barrière de potentiel malgré que son énergie $E < V_0$. Cet effet inacceptable par la mécanique classique est purement quantique et appelé l'effet tunnel.

On vérifie bien que $R + T = 1$. (Condition de normalisation).

III-3-d) Densité de probabilité de présence $|\varphi|^2$:

$$(I) : \varphi_I = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx} = A_1 \left(e^{ikx} + \frac{B_1}{A_1} e^{-ikx} \right)$$

$$R = \left| \frac{B_1}{A_1} \right|^2 \Rightarrow \frac{B_1}{A_1} = \sqrt{R} e^{i\theta} \quad \text{où } \theta = \arg \left(\frac{B_1}{A_1} \right)$$

$$\text{donc } \varphi_I = A_1 (e^{ikx} + \sqrt{R} e^{-i(kx-\theta)})$$

$$|\varphi_I|^2 = \varphi_I \varphi_I^* = |A_1|^2 (1 + R + 2\sqrt{R} \cos(2kx - \theta))$$

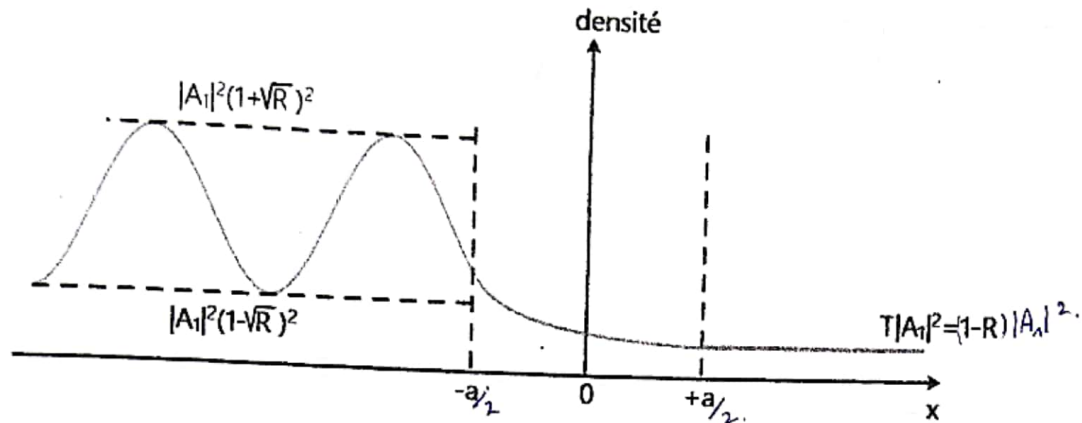
$$|\varphi_I|_{\max}^2 = |A_1|^2 (1 + \sqrt{R})^2 \quad \text{et} \quad |\varphi_I|_{\min}^2 = |A_1|^2 (1 - \sqrt{R})^2$$

$$(III) : \varphi_3 = A_3 e^{ik_2 x} \Rightarrow |\varphi_3|^2 = |A_3|^2 = T |A_1|^2 = \text{cte.}$$

(II) : Dans cette région la densité de probabilité décroît avec une distance caractéristique :

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

d'où l'allure de la densité de probabilité :



III-3-e) Approximation d'une barrière épaisse :

Ce cas correspond à $a \gg \delta \Leftrightarrow a \gg \frac{1}{q} \Leftrightarrow aq \gg 1$

$$\Rightarrow sh(qa) \simeq \frac{e^{qa}}{2} \gg 1$$

$$\Rightarrow T \simeq \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \left(\frac{e^{qa}}{2}\right)^2} \simeq \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-2qa}$$

Donc la probabilité de transmission s'écrit dans cette approximation :

$$T \simeq 16 \frac{E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0}\right) e^{-2qa}$$

L'effet quantique en général diminue lorsque la masse augmente. Vérifions cela pour une barrière de hauteur $V_0 = 4\text{eV}$ et de largeur $2a = 0,6\text{nm}$: $T(\text{électron}) = 10^{-2} \gg T(\text{proton}) = 10^{-63}$.

L'effet tunnel est donc plus marqué pour l'électron.

On a bien la masse (proton) $\simeq 10^{-27}\text{kg} \gg \text{masse}(\text{électron}) \simeq 10^{-30}\text{kg}$

III-3-f) Interprétation qualitative de l'effet tunnel :

La particule quantique est représentée par un paquet d'ondes quasi-monochromatique qui est un état non stationnaire : son énergie peut fluctuer autour d'une valeur moyenne. Notons ΔE l'indétermination sur E .

Au moment de l'interaction de la particule avec la barrière ΔE peut être suffisamment grande pour que $E + \Delta E \geq V_0$ et par suite la particule quantique puisse traverser la région (II) de la barrière

du potentiel avec une vitesse $V \simeq \sqrt{\frac{2(E + \Delta E - V_0)}{m}}$.

Selon l'inégalité de Heisenberg temps-énergie ; la fluctuation de E peut se maintenir pendant une durée τ telle que :

$$\tau \geq \frac{\hbar}{2\Delta E} \Rightarrow \tau_{\min} \simeq \frac{\hbar}{2\Delta E}$$

Pendant cette durée, la particule quantique peut parcourir la distance

$$d(\Delta E) \simeq V \cdot \tau_{\min} \simeq \sqrt{\frac{2(E + \Delta E - V_0)}{m}} \frac{\hbar}{2\Delta E}$$