
CHAPITRE 5

LES MODÈLES À UNE DIMENSION

Dans ce chapitre, nous résolvons l'équation aux valeurs propres de Schrödinger dans quelques cas simples de potentiels "carrés" à une dimension d'espace. La figure (a) ci-contre représente un potentiel carré type. L'axe Ox est divisé en un certain nombre de régions, où le potentiel est constant. Ce potentiel subit une discontinuité à la frontière entre deux régions adjacentes.

En fait un potentiel réel nécessairement continu ne peut être représenté par cette figure (a). Nous l'utilisons pour approximer une énergie potentielle $V(x)$ réelle qui aurait l'allure de la figure (b).

$V(x)$ varie très rapidement au voisinage de certaines valeurs de x lorsque l'intervalle sur lequel se fait la variation est petit devant la longueur intervenant dans le problème. La force qui s'exerce sur la particule $F(x) = -dV(x)/dx$ est représentée sur la figure (c).

La figure (5.1) montre quelques exemples qui se rencontrent souvent en mécanique quantique

Les effets quantiques qui résultent de l'étude de ces potentiels "carrés" 1D sont souvent surprenants. On verra, par exemple, qu'une particule incidente sur un puits d'énergie peut être *réfléchie*, alors que classiquement, elle passe toujours ; de même une particule arrivant sur un mur avec une petite énergie est capable de *passer à travers le mur* (effet tunnel) alors que classiquement, elle ne peut que rebondir.

L'étude de ces situations est en soi physiquement intéressante. Elle permet, en effet, de se familiariser avec l'équation aux valeurs propres et surtout de réaliser le lien très fort entre les conditions imposées à la fonction d'onde, résultant de l'interprétation physique de celle-ci, et

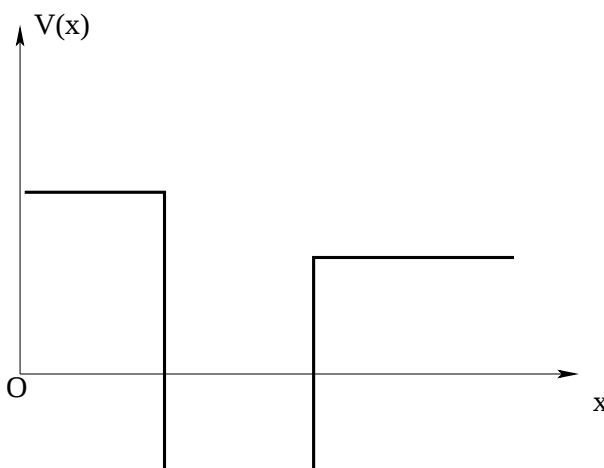


Fig a) Potentiel carré type

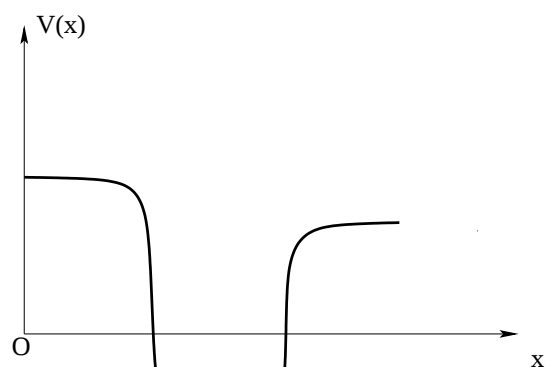


Fig b) Potentiel réel

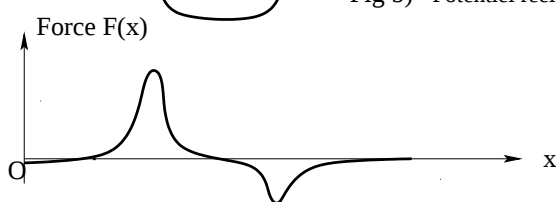
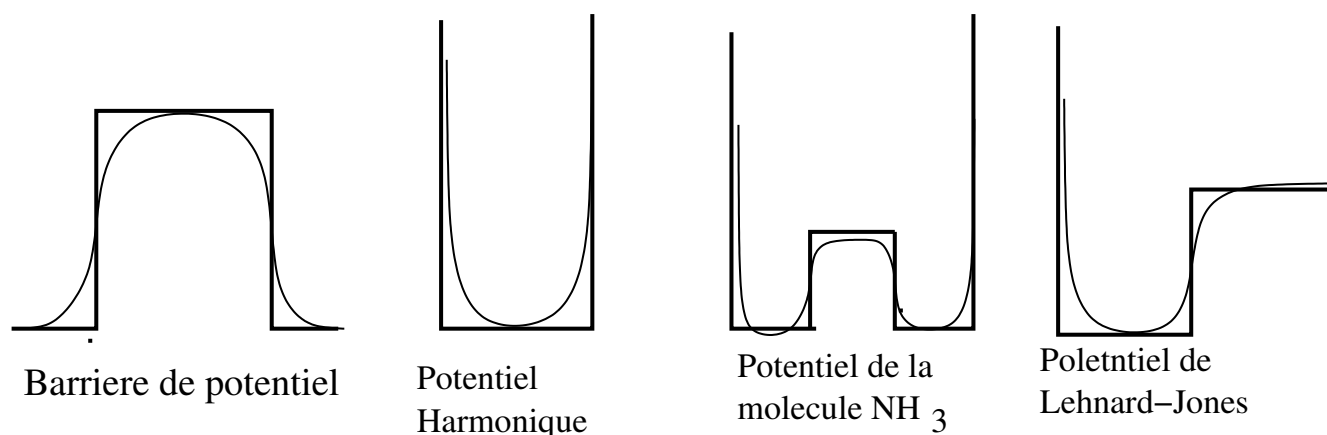


Fig c)

FIGURE 5.1 – *Modélisation de potentiels réels*

l'apparition spontanée de la quantification.

Certaines propriétés seront utilisées à diverses reprises dans l'étude de ces modèles à une dimension. Il est utile de les rappeler avant d'entreprendre l'étude des premiers cas :

- Rappelons que, dans les problèmes à une dimension, les fonctions d'onde sont des fonctions complexes de la variable réelle de position, x ; que ce sont des fonctions continues dont les dérivées sont continues.
- Les fonctions d'onde sont en général des fonctions de carré sommable. On accepte, cependant, parmi ces fonctions d'onde, les fonctions généralisées de Dirac $\delta(x - a)$ ainsi que les fonctions de la forme Ae^{ikx} qui décrivent correctement des états physique idéaux, respectivement une particule localisée en $x = a$ et une particule d'impulsion $\hbar k$, bien définie.

5.1 Généralités

Dans les exemples à 1D que nous allons étudier, nous considérerons une particule de masse m se déplaçant sur l'axe des x , dans un potentiel $V(x)$ indépendant du temps. L'équation de Schrödinger correspondant à ce problème est

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \Psi(x, t). \quad (5.1)$$

Le potentiel étant indépendant du temps, nous allons chercher des solutions stationnaires de la forme

$$\Psi(x, t) = \varphi(x) \exp(-iEt/\hbar) \quad (5.2)$$

où E est l'énergie de l'état stationnaire. La solution générale de (5.1) est une superposition linéaire des solutions stationnaires de la forme (5.2). La fonction d'onde stationnaire $\varphi(x)$ est solution de l'équation de Schrödinger stationnaire

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} + V(x) \varphi(x) = E \varphi(x) \quad (5.3)$$

qui dans le cas présent uni-dimensionnel est une équation différentielle ordinaire du second ordre. C'est cette équation différentielle que nous allons résoudre pour diverses formes du potentiel $V(x)$.

Rappelons que la densité de probabilité associée à la fonction d'onde $\Psi(x, t)$ est donnée par

$$P(x, t) = |\Psi(x, t)|^2 \quad (5.4)$$

et le courant de densité de probabilité est

$$j(x, t) = \frac{\hbar}{2im} \left[\bar{\Psi}(x, t) \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} - \Psi(x, t) \frac{\partial \bar{\Psi}(x, t)}{\partial x} \right]. \quad (5.5)$$

Pour des états stationnaires (5.2) P et j sont tous les deux indépendants du temps. En particulier, puisque $|\Psi(x, t)|^2 = |\varphi(x)|^2$ la densité de probabilité devient

$$P(x) = |\varphi(x)|^2. \quad (5.6)$$

De plus, pour les solutions uni-dimensionnelles stationnaires (5.2), l'équation exprimant la conservation de la probabilité se réduit à $dj/dx = 0$, ainsi le courant de densité de probabilité qui se réduit à

$$j = \frac{\hbar}{2im} \left[\bar{\varphi}(x) \frac{d\varphi(x)}{dx} - \varphi(x) \frac{d\bar{\varphi}(x)}{dx} \right] \quad (5.7)$$

est indépendant de x .

5.1.1 Etats liés et états continus

Lorsque la particule reste confinée dans une région de l'espace (par exemple un puits de potentiel infini), la probabilité de la trouver à l'infini est nulle à tout moment. Sa fonction d'onde est donc normalisable et les valeurs de son énergie sont quantifiées : le spectre en énergie de la particule est dans ce cas discontinu et on dit que la particule est dans des *états liés*.

Si la particule n'est pas confinée dans une région donnée (exemple de particules libres), elle peut explorer tout l'espace et se retrouver même à l'infini. La fonction d'onde n'est plus normalisable et le spectre en énergie est continu. On dit alors que la particule se trouve dans des *états non liés* ou *continus* ou encore *états de diffusion*.

Les premières applications concernent des *états de diffusions*, les suivantes des *états liés*

5.2 La particule libre

Considérons une particule libre, de masse m , à une dimension. Son énergie se réduit à l'énergie cinétique. L'opérateur Hamiltonien est donc $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$.

Solution de l'équation aux valeurs propres

L'équation aux valeurs propres de l'énergie s'écrit $\hat{H}\psi = E\psi$ soit :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \quad (5.8)$$

On distingue deux cas :

$E < 0$.

La solution de l'équation s'écrit, en posant $\gamma^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2}$, sous la forme :

$$\psi(x) = Ae^{\gamma x} + Be^{-\gamma x} . \quad (5.9)$$

Les coefficients A et B sont des constantes d'intégration.

Lorsque $x \rightarrow +\infty$, la fonction $Be^{-\gamma x}$ s'annule tandis que $|Ae^{\gamma x}|$ devient infini, sauf pour $A = 0$. Les fonctions d'onde étant bornées nous devons poser $A = 0$.

De même, lorsque $x \rightarrow -\infty$, la fonction $Ae^{\gamma x}$ s'annule tandis que $|Ae^{-\gamma x}|$ devient infini, sauf pour $B = 0$. Les fonctions d'onde étant bornées nous devons poser $B = 0$. La seule fonction d'onde convenable est donc la fonction d'onde $\psi(x) = 0$. Une telle fonction d'onde ne représente pas une particule qui serait présente quelque part sur Ox . On en déduit que $E < 0$ n'appartient pas au spectre de l'Hamiltonien. Ce résultat est conforme au résultat classique qui donne une valeur positive ou nulle à l'énergie cinétique.

$E > 0$.

En posant $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$, la solution se met sous la forme :

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad (5.10)$$

où A et B sont des constantes d'intégration arbitraires. Cette solution apparaît comme la superposition de deux solutions $u_+(x)$ et $u_-(x)$:

$$u_+(x) \equiv Ae^{ikx} \quad \text{et} \quad u_-(x) \equiv Be^{-ikx} . \quad (5.11)$$

On constate que, E étant positif arbitraire, il existe toujours deux fonctions propres indépendantes u_+ et u_- , admettant E pour valeur propre. Le spectre de $\hat{H}$ est donc continu et dégénéré d'ordre 2 pour $E > 0$. Une base orthonormalisée de fonctions propres de $\hat{H}$ peut être prise sous la forme

$$u_p(x) = \frac{1}{2\pi\hbar} e^{ipx/\hbar} , \quad (5.12)$$

la valeur propre correspondante de l'énergie est $E = p^2/2m$.

Interprétation des états propres de l'énergie

a) La fonction $u_+(x) = Ae^{ikx}$ satisfait la relation $\hat{p}u_+(x) \equiv -i\hbar \frac{d}{dx}u_+(x) = \hbar k u_+(x)$. C'est une fonction propre de l'impulsion. Cette fonction d'onde représente donc des particules d'impulsion $p_+ = \hbar k = \sqrt{2mE}$; la longueur d'onde de de Broglie associée est $\lambda = \frac{2\pi\hbar}{|p_+|} = \frac{2\pi}{k}$.

La densité de courant associée à u_+ est

$$j \equiv -\frac{i\hbar}{2m} \left(\bar{u}_+ \frac{du_+}{dx} - \frac{d\bar{u}_+}{dx} u_+ \right) = |A|^2 \frac{\hbar k}{m} .$$

Elle représente un flux de particules de vitesse $\frac{\hbar k}{m}$ se dirigeant vers les $x > 0$.

b) La fonction $u_-(x) = Be^{-ikx}$ représente des particules d'impulsion $p_- = -\hbar k = -\sqrt{2mE}$; la longueur d'onde de de Broglie associée est $\lambda = \frac{2\pi\hbar}{|p_-|} = \frac{2\pi}{k}$.

La densité de courant associée à u_- est $-|B|^2 \frac{\hbar k}{m}$. Elle représente un flux de particules de vitesse $\frac{\hbar k}{m}$ se dirigeant vers les $x < 0$.

Interférences

La fonction d'onde d'expression $\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ est la superposition de deux fonctions d'onde dont les courants sont de sens opposés. Chacune des ondes $u_+(x) = Ae^{ikx}$ et $u_-(x) = Be^{-ikx}$ présente une densité linéaire uniforme mais leur superposition fait apparaître un terme d'interférences. Posons $\overline{AB} = |AB|e^{i\theta}$. La densité de présence associée à l'onde $\psi(x)$ est

$$\rho = |\psi(x)|^2 = |A|^2 + |B|^2 + 2|AB|\cos(2kx + \theta).$$

Le terme $2|AB|\cos(2kx + \theta)$, est le terme d'interférences.

5.3 La marche de potentiel

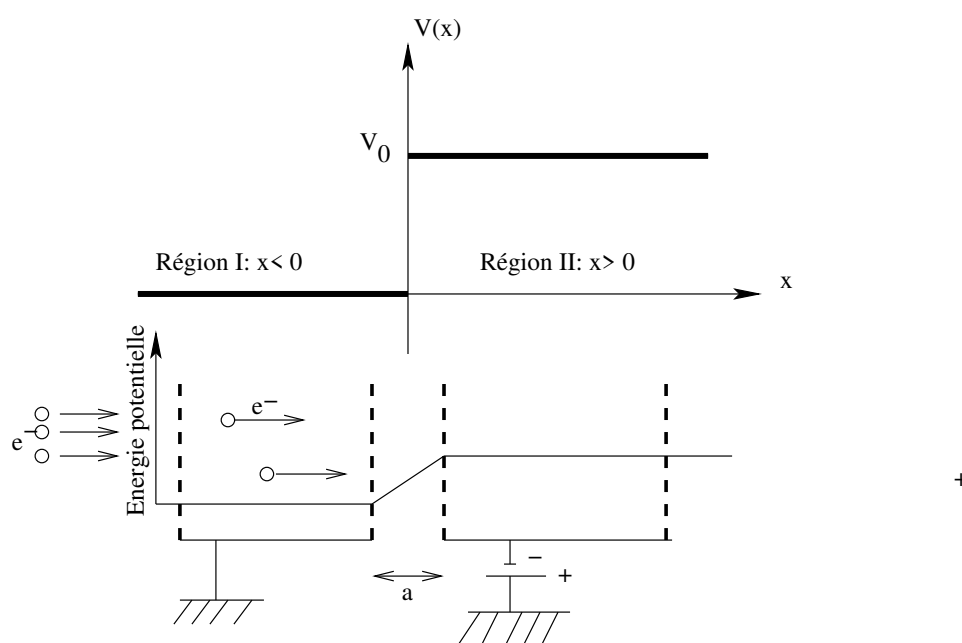


FIGURE 5.2 – Marche de potentiel

Considérons une particule de masse m soumise à l'énergie potentielle

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{pour } x < 0 : & \text{région I} \\ V_0 & \text{pour } x > 0 : & \text{région II} \end{cases} \quad (5.13)$$

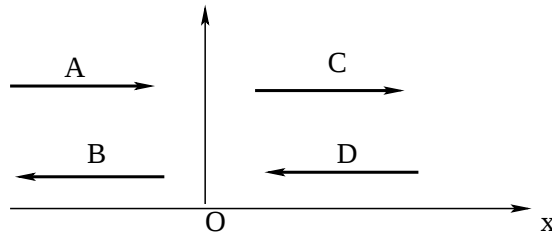


FIGURE 5.3 – Représentation des diverses ondes

Une telle *marche de potentiel* peut être réalisée par le montage de la figure 5.2 pour des électrons.

La marche de potentiel permet de décrire divers systèmes physiques : la surface d'un métal par exemple. Dans le métal, on peut considérer, en première approximation, que les électrons de conduction sont mis en commun et constituent un gaz d'électrons susceptibles de se déplacer librement. Les électrons restent piégés dans le métal car ils ne possèdent pas une énergie cinétique suffisante pour s'échapper. La région I de la figure 5.2 représente alors le métal tandis que la région II représente l'extérieur du métal.

L'Hamiltonien du système est la somme de l'énergie cinétique et de l'énergie potentielle

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x) . \quad (5.14)$$

L'équation aux valeurs propres de l'énergie s'écrit $\hat{H}\psi = E\psi$. On distingue les deux cas $E > V_0$ et $E < V_0$. Pour chacun des cas il faut étudier la solution dans la région I et dans la région II et assurer le raccordement entre les expressions de la solution obtenues pour chacune des régions.

5.3.1 Le cas $E > V_0$

a) Les solutions de l'équation aux valeurs propres de l'Hamiltonien

L'équation aux valeurs propres de l'Hamiltonien prend deux formes différentes selon que l'on considère la région I : $x < 0$ ou la région II : $x > 0$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi \quad \longrightarrow \quad \begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi & \text{pour } x < 0 \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V_0\psi = E\psi & \text{pour } x > 0 \end{cases} .$$

Posons $k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}$ et $k' = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E - V_0)}$. On obtient :

$$\psi = \begin{cases} \psi_I(x) & = A e^{ikx} + B e^{-ikx} & \text{pour } x < 0 \\ \psi_{II}(x) & = C e^{ik'x} + D e^{-ik'x} & \text{pour } x > 0 \end{cases} .$$

Les diverses ondes et leurs courants sont schématisés sur la figure 5.3.

La fonction d'onde est continue : on en déduit $\psi_I(0) = \psi_{II}(0)$ soit

$$A + B = C + D .$$

La dérivée de la fonction d'onde est continue :

$$\left(\frac{d\psi_I}{dx} \right) \Big|_{x=0} = \left(\frac{d\psi_{II}}{dx} \right) \Big|_{x=0}$$

soit

$$k(A - B) = k'(C - D) .$$

Les 4 coefficients A, B, C et D sont reliés entre eux par deux équations. Les coefficients B et C peuvent donc s'exprimer en fonction de A et D . Nous définissons les fonctions u_+ et u_- correspondant respectivement au cas $D = 0$ et au cas $A = 0$. On trouve

$$u_+(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + rAe^{-ikx} & \text{pour } x < 0 \\ \tau Ae^{ik'x} & \text{pour } x > 0 \end{cases}$$

$$u_-(x) = \begin{cases} \tau' De^{-ikx} & \text{pour } x < 0 \\ De^{-ik'x} + r'De^{ik'x} & \text{pour } x > 0 \end{cases}$$

Avec

$$r = \frac{k - k'}{k + k'} \quad , \quad \tau = \frac{2k}{k + k'}$$

$$r' = \frac{k' - k}{k' + k} \quad , \quad \tau' = \frac{2k'}{k' + k} .$$

Remarquons que r, r', τ et τ' sont réels dans le cas considéré.

Les solutions u_+ et u_- sont respectivement proportionnelles aux coefficients arbitraires A et D . La solution générale est la superposition des deux fonctions : $u = u_+ + u_-$ pour des valeurs de A et D a priori arbitraires, mais adaptées aux conditions physiques imposées. Les courants correspondants aux diverses composantes de u_+ et u_- sont représentés sur la figure (5.4). L'interprétation des solutions u_+ et u_- s'en déduit.

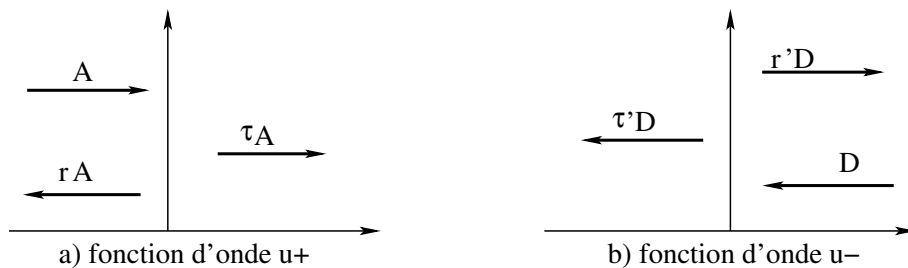


FIGURE 5.4 – Interprétation des ondes u_+ et u_-

b) L'interprétation physique

La fonction $u_+(x)$ représente une onde incidente issue de la région I : $\psi_i = Ae^{ikx}$. Le courant est $|A|^2 \frac{\hbar k}{m}$, il est positif. Cette onde donne naissance, dans la région I, à l'onde $\psi_r = Ae^{-ikx}$,

réfléchi en $x = 0$. Le courant correspondant se dirige vers les x négatifs, il vaut $-|Ar|^2 \frac{\hbar k}{m}$. Une onde est transmise dans la région II : $\psi_t = A\tau e^{ik'x}$. Le courant correspondant est positif : $|A\tau|^2 \frac{\hbar k'}{m}$.

Les coefficients r et τ sont les *coefficients de réflexion et de transmission en amplitude*.

L'état physique décrit par u_+ est engendré par une source de particules (un canon à électrons par exemple) située dans la région $x < 0$.

L'interprétation hydrodynamique nous permet d'assimiler le système décrit par u_+ à un fluide dont la densité linéaire moyenne de particule est $|A|^2$ dans le courant incident, $|Ar|^2$ dans le courant réfléchi et $|A\tau|^2$ dans le courant transmis. Le nombre de particules incidentes qui atteint le point d'abscisse $x = 0$ pendant l'unité de temps est le courant associé au flux incident : $\Phi_i = |J_i| = |A|^2 \frac{\hbar k}{m}$. Le nombre de particules qui quitte le point d'abscisse $x = 0$ pendant l'unité de temps est $\phi_t = |J_t| = |A\tau|^2 \frac{\hbar k'}{m}$ dans le courant transmis et $\Phi_r = |J_r| = |Ar|^2 \frac{\hbar k}{m}$ dans le courant réfléchi. On vérifie aisément la relation $\Phi_i = \Phi_r + \Phi_t$. Cette relation signifie que le nombre de particules reste constant : il n'y a pas de particules qui disparaissent ni de particules qui apparaissent en $x = 0$, car toutes les particules qui y parviennent en repartent : il y a conservation du nombre de particules.

Dans le cadre classique, la particule possède l'énergie cinétique E dans la région I. Cette énergie cinétique est suffisante pour que la particule passe dans la région II où l'énergie cinétique de la particule est $E - V_0 > 0$. Aucune particule n'est réfléchi. Le phénomène de réflexion est donc un phénomène typiquement quantique.

5.3.2 Le cas $0 < E < V_0$.

a) Les solutions de l'équation aux valeurs propres de l'Hamiltonien

L'équation aux valeurs propres de l'Hamiltonien prend deux formes différentes selon que l'on considère la région I : $x < 0$ ou la région II : $x > 0$.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi \quad \Longleftrightarrow \quad \begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi & \text{pour } x < 0 \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V_0 = E\psi & \text{pour } x > 0 \end{cases}.$$

Posons $k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}$ et $\gamma = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)}$. Il vient

$$\psi = \begin{cases} \psi_I(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & \text{pour } x < 0 \\ \psi_{II}(x) = \alpha e^{\gamma x} + \beta e^{-\gamma x} & \text{pour } x > 0 \end{cases}$$

La fonction d'onde est bornée. Cela implique $\alpha = 0$; en effet si ce n'était pas le cas $|\psi|$ deviendrait infini pour $x \rightarrow \infty$.

La fonction d'onde est continue : on en déduit $\psi_I(0) = \psi_{II}(0)$ soit

$$A + B = \beta.$$

La dérivée de la fonction d'onde est continue : $\left(\frac{d\psi_I}{dx}\right)\Big|_{x=0} = \left(\frac{d\psi_{II}}{dx}\right)\Big|_{x=0}$ soit

$$ik(A - B) = -\gamma\beta.$$

De ce qui précède on déduit l'expression de ψ :

$$\psi_I(x) = Ae^{ikx} + rAe^{-ikx}, \quad \psi_{II}(x) = \tau Ae^{-\gamma x}$$

avec

$$r = \frac{ik + \gamma}{ik - \gamma}, \quad \tau = \frac{2ik}{ik - \gamma}.$$

b) L'interprétation physique

Dans la région I, la fonction d'onde est la superposition de l'onde $\psi_i = Ae^{ikx}$ et de l'onde $\psi_r = rAe^{-ikx}$. L'onde ψ_i décrit un flux de particules de courant positif $J_i = |A|^2 \frac{\hbar k}{m}$, venues de la région $x = -\infty$ et se dirigeant vers la marche de potentiel. Une telle onde représente l'onde *incidente*.

L'onde ψ_r représente un flux de particule de courant $J_r = -|B|^2 \frac{\hbar k}{m}$ négatif et se dirigeant donc vers la région $x = -\infty$; l'onde ψ_r est l'onde *réfléchie*. Le coefficient r est le *coefficient de réflexion en amplitude*. Le coefficient de réflexion en nombre de particules R est le *rapport du nombre de particules réfléchies au nombre de particules incidentes dans le même temps* : $R = \left|\frac{J_r}{J_i}\right| = |r|^2$. Calculons R en utilisant l'expression de r ; il vient $R = 1$. L'onde subit donc une *réflexion totale* dans la mesure où toute particule incidente est réfléchie.

Les ondes incidente et réfléchie construisent une figure d'interférences dans la région I. La densité de présence est $\rho_I = |\psi_I|^2$. Posons $R = |R|e^{i\theta}$, il vient $\rho_I = 2(1 + \cos(2kx - \theta))$. La réflexion étant totale, le minimum de ρ_I correspond à une frange noire, tandis que le maximum correspond à une frange brillante. Dans la région $x < 0$ on observe donc une alternance de franges brillantes et de frange noires. L'interfrange est $\frac{\lambda}{2} = \frac{\pi}{k}$.

Dans la région II, la fonction d'onde est $\psi_{II} = \tau Ae^{-\gamma x}$. On vérifie aisément que le courant est nul. La densité de présence décroît de façon exponentielle quand $x \rightarrow \infty$. L'onde présente dans la région II est appelée *onde évanescence*.

Dans la théorie classique, aucune particule ne peut passer dans la région II si son énergie cinétique dans la région I est inférieure à V_0 (soit $E < V_0$).

5.3.3 Conclusion

Le spectre de l'Hamiltonien est donc un spectre continu borné inférieurement ; les valeurs propres sont dans l'intervalle $[0, \infty[$. Elles ne sont pas dégénérées pour $E \in [0, V_0]$. Elles sont dégénérées d'ordre 2 pour $E > V_0$.

Comme la mécanique classique, la mécanique quantique prévoit que les particules d'énergie assez grande ($E > V_0$) peuvent passer de la région I à la région II.

Dans le cas contraire ($E < V_0$), la mécanique quantique prévoit, conformément à la mécanique classique, que les particules issues de la région I sont toutes réfléchies par la marche de potentiel

et n'engendrent aucun courant dans la région II .

A la différence de ce que prévoit la mécanique classique, dans le cas $E > V_0$, toutes les particules issues de la région I (resp. II) ne sont pas transmises dans la région II (resp. I) : certaines d'entre-elles sont réfléchies. La proportion de particules réfléchies est le rapport du courants de particules réfléchies au courant de particules incidentes, soit R . La proportion de particules transmises est $T = \left| \frac{J_t}{J_i} \right|$ le rapport des courants transmis et incident. La relation $R + T = 1$ peut être vérifiée directement. Elle exprime la conservation du nombre de particules au passage de l'une des régions à l'autre.

Dans le cas $E < V_0$, il n'est pas impossible de trouver des particules dans la région II où existe une onde évanescence que ne prévoit pas la mécanique classique.

5.4 La barrière de potentiel

Considérons une particule à une dimension de masse m soumise à l'énergie potentielle $V(x)$:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{pour } |x| > a \\ V_0 & \text{pour } |x| < a \end{cases} \quad \text{avec } V_0 > 0.$$

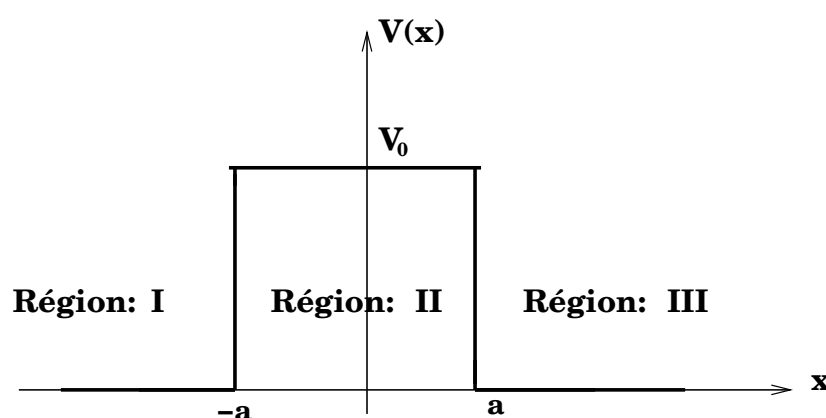


FIGURE 5.5 – Barrière de potentiel

Les fonctions propres de l'énergie satisfont l'équation

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} &= E\psi & \text{pour } |x| > a, \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V_0\psi &= E\psi & \text{pour } |x| < a. \end{aligned}$$

Nous distinguons les deux cas $E > V_0$ et $E < V_0$.

5.4.1 Le cas $E > V_0$

a) Les solutions de l'équation aux valeurs propres de l'Hamiltonien

La solution de l'équation aux valeurs propres de l'énergie est donnée ci-dessous pour chacune des trois régions indiquées sur la figure 5.5 :

$$x < -a \quad : \quad \psi_I = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad \text{avec} \quad k = \sqrt{2mE}/\hbar$$

$$-a < x < a \quad : \quad \psi_{II} = Ce^{ik'x} + De^{-ik'x} \quad \text{avec} \quad k' = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar$$

$$x > a \quad : \quad \psi_{III} = Fe^{ikx} + Ge^{-ikx} \quad \text{avec} \quad k = \sqrt{2mE}/\hbar$$

La continuité de la fonction d'onde en $x = -a$ et $x = a$ impose :

$$Ae^{-ika} + Be^{ika} = Ce^{-ik'a} + De^{ik'a} \quad (5.15)$$

$$Ce^{ik'a} + De^{-ik'a} = Fe^{ika} + Ge^{-ika} \quad (5.16)$$

La continuité de la dérivée impose

$$\left. \frac{d\psi_I}{dx} \right|_{x=-a} = \left. \frac{d\psi_{II}}{dx} \right|_{x=-a} \quad \text{et} \quad \left. \frac{d\psi_{II}}{dx} \right|_{x=a} = \left. \frac{d\psi_{III}}{dx} \right|_{x=a}$$

soit

$$k(Ae^{-ika} - Be^{ika}) = k'(Ce^{-ik'a} - De^{ik'a}) \quad (5.17)$$

$$k'(Ce^{-ik'a} - De^{-ik'a}) = k(Fe^{ika} - Ge^{-ika}) \quad (5.18)$$

Les six constantes d'intégration A, B, C, D, F et G sont reliées entre elles par les 4 équations (5.15 - 5.18). Il est possible d'exprimer B, C, D et F en fonction de A et G . La solution générale est la superposition des deux fonctions u_+ et u_- correspondant respectivement aux valeurs $G = 0$ et $A = 0$. On trouve

$$u_+(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + rAe^{-ikx} & \text{pour } x < -a \\ \tau Ae^{ik'x} & \text{pour } x > a \\ A\alpha e^{ik'x} + A\beta e^{-ik'x} & \text{pour } -a < x < a \end{cases}$$

$$u_-(x) = \begin{cases} \tau' Ge^{-ikx} & \text{pour } x < -a \\ Ge^{ik'x} + r' Ge^{-ik'x} & \text{pour } x > a \\ G\alpha' e^{ik'x} + G\beta' e^{-ik'x} & \text{pour } -a < x < a \end{cases}$$

Les quatre équations de raccordement permettent de calculer les coefficients r, τ, r' et τ' ainsi que les coefficients α, β, α' et β' . On trouve par exemple

$$\tau = \frac{e^{-2ika}}{\cos(2k'a) - i \frac{k^2 + k'^2}{2kk'} \sin(2k'a)} \quad (5.19)$$

La solution générale, fonction propre de l'énergie pour la valeur propre $E > V_0$, est

$$\psi(x) = u_+(x) + u_-(x)$$

pour des valeurs de A et G arbitraires, a priori, mais adaptées aux conditions physiques imposées.

b) Interprétation physique

La fonction d'onde $u_+(x)$ représente une onde incidente, issue de la région I. Cette onde est partiellement réfléchie et partiellement transmise dans la région III.

La fonction d'onde u_- représente une onde issue de la région III qui est partiellement réfléchie et partiellement transmise dans la région I. Les coefficients r et τ sont les *coefficient de réflexion et de transmission en amplitude* de l'onde u_+ , tandis que r' et τ' sont les *coefficients de réflexion et de transmission* associés à l'onde u_- (voir la figure 5.6).

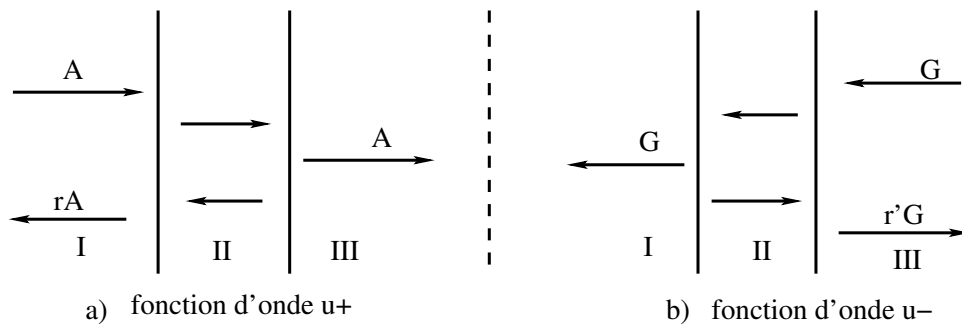


FIGURE 5.6 – *Interpretation des ondes u_+ et u_-*

Considérons, par exemple, l'onde u_+ . Le courant incident est $J_i = |A|^2 \frac{\hbar k}{m}$, le courant transmis dans la région III est $J_t = |\tau A|^2 \frac{\hbar k}{m}$. Le coefficient de transmission en intensité T est le rapport de ces deux courants : $T = \left| \frac{J_t}{J_i} \right| = |\tau|^2$. De même, le coefficient de réflexion en intensité R est le rapport des courants réfléchi et incident : $\left| \frac{J_r}{J_i} \right| = |r|^2$. La relation $R + T = 1$ peut être vérifiée à partir de l'expression de r et τ . Elle assure la conservation du nombre de particules : le nombre de particules qui pénètrent dans la barrière est égal aux nombre de particules qui en sortent pendant le même temps.

De même, on peut démontrer la conservation du nombre de particules à l'interface entre deux régions voisines. Entre les régions I et II par exemple, on écrit que le nombre de particules qui atteignent le point d'abscisse $x = -a$ pendant le temps dt est égal au nombre de particules qui s'éloignent de ce même point pendant le même temps :

$$|A|^2 \frac{\hbar k}{m} + |\beta|^2 \frac{\hbar k'}{m} = |rA|^2 \frac{\hbar k}{m} + |\alpha|^2 \frac{\hbar k'}{m}.$$

5.4.2 Le cas $0 < E < V_0$

a) Les solutions de l'équation aux valeurs propres de l'Hamiltonien

La solution de l'équation aux valeurs propres de l'énergie est donnée ci-dessous pour chacune

des trois régions indiquées sur la figure 5.5

$$\begin{aligned}
 x < -a & : \psi_I = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & \text{avec} & \quad k = \sqrt{2mE}/\hbar \\
 -a < x < a & : \psi_{II} = Ce^{\gamma x} + De^{-\gamma x} & \text{avec} & \quad \gamma = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar \\
 x > a & : \psi_{III} = Fe^{ikx} + Ge^{-ikx} & \text{avec} & \quad k = \sqrt{2mE}/\hbar
 \end{aligned}$$

Nous devons nous assurer de la continuité de la fonction d'onde et de celle de sa dérivée. Les équations de passage sont

$$\begin{aligned}
 Ae^{-ika} + Be^{ika} &= Ce^{-\gamma a} + De^{\gamma a} \\
 Ce^{\gamma a} + De^{-\gamma a} &= Fe^{ika} + Ge^{-ika} \\
 ik(Ae^{-ika} - Be^{ika}) &= \gamma(Ce^{-\gamma a} - De^{\gamma a}) \\
 \gamma(Ce^{\gamma a} - De^{-\gamma a}) &= ik(Ae^{ika} - Be^{-ika})
 \end{aligned}$$

Ici encore nous distinguons les deux solutions u_+ correspondant à $G = 0$ et u_- correspondant à $A = 0$.

La solution générale, fonction propre de l'énergie pour la valeur propre $E < V_0$, est

$$\psi(x) = u_+(x) + u_-(x)$$

pour des valeurs de A et G arbitraires, a priori, mais adaptées aux conditions physiques imposées. La fonction d'onde $u_+(x)$ décrit un courant positif, de particules incidentes issues de la région I tandis que $u_-(x)$ décrit des particules issues de la région III :

$$u_+(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Ae^{-ikx} & \text{pour } x < -a \\ A\tau e^{ikx} & \text{pour } x > a \\ A\alpha e^{\gamma x} + A\beta e^{-\gamma x} & \text{pour } -a < x < a \end{cases}$$

Le coefficient de transmission, r , se déduit de l'expression (5.19) ci-dessus en effectuant la substitution $ik' \rightarrow \gamma$ et en utilisant la relation $\cos(i\theta) = \cosh \theta \equiv \frac{1}{2}(e^\theta + e^{-\theta})$ ainsi que $\sin(i\theta) = i \sinh \theta = \frac{i}{2}(e^\theta - e^{-\theta})$:

$$T = \frac{e^{-2ika}}{\cosh(2\gamma a) - i \frac{k^2 - \gamma^2}{2k\gamma} \sinh(2\gamma a)}$$

b) L'effet tunnel

Dans le cadre de la théorie classique, l'énergie cinétique des particules dans la région I est E . Cette valeur est insuffisante pour que les particules issues de la région I passent dans la région II où leur énergie potentielle, V_0 , serait supérieure à E . Les particules sont toutes réfléchies. La situation est différente dans le cadre de la mécanique quantique où la barrière de potentiel présente un coefficient de transmission non nul. Cet effet est appelé *effet tunnel*¹.

1. L'image véhiculée par cette dénomination est la suivante. Pour qu'un véhicule passe un col de montagne sur son élan, il faut qu'il possède, au pied de la montagne, une énergie cinétique, E , supérieure (ou égale) à l'énergie potentielle, V_0 , qu'il aura au sommet du col. A cette seule condition le véhicule pourra passer sur l'autre versant de la montagne. Si ce n'est pas le cas (pour $E < V_0$), le véhicule peut atteindre l'autre versant de la montagne en empruntant un tunnel.

5.4.3 Conclusion

On peut démontrer qu'aucune solution n'existe pour $E < 0$. Le spectre de l'Hamiltonien est donc un spectre continu. Les valeurs propres sont positives et dégénérées d'ordre 2. Cette dégénérescence d'ordre 2 est directement liée à la possibilité de disposer de deux sortes de sources différentes :

- (i) la première, située dans la région I , produit des particules d'énergie E se dirigeant vers les x positifs (courant incident positif),
- (ii) la seconde, située dans la région III , engendre un courant incident négatif (particules se dirigeant vers les x négatifs).

Dans le 1er cas $E > V_0$, la mécanique classique prévoit que toutes les particules lancées de la région I vont passer dans la région III . Il n'y a aucune possibilité de retour. Mais la mécanique quantique prévoit qu'une partie des particules vont être transmises et l'autre partie réfléchi par la barrière de potentielle. Cette réflexion exclue par la mécanique classique est un effet purement quantique. La probabilité pour qu'une particule soit réfléchi est donnée par le coefficient de réflexion R . Le coefficient de transmission T mesure la probabilité qu'une particule soit transmise.

Dans le second cas $0 < E < V_0$, la mécanique classique prévoit que toutes les particules lancées de la région I vont y revenir, leur énergie étant insuffisante pour passer la barrière. Il n'y a aucune possibilité de transmission dans la région III . Mais la mécanique quantique prévoit qu'une partie des particules sera réfléchi par la barrière de potentielle, conformément à la mécanique classique. Mais certaines particules vont être transmises dans la région III . Cette transmission exclue classiquement mais permise par la mécanique quantique est appelée effet tunnel. L'effet tunnel joue un rôle fondamentale en physique. Il est par exemple responsable de la désintégration α des noyaux lourds qui, classiquement, devraient rester stables, de la fission, de la fusion thermonucléaire, de la catalyse de la liaison chimique, etc. Une application importante de l'effet tunnel a été récompensée par le prix Nobel en 1985. Il s'agit du *microscope à effet tunnel*. Dans cet appareil, on déplace une pointe très fine près de la surface d'un échantillon conducteur. Les électrons peuvent passer par effet tunnel de la pointe à l'échantillon, et cela produit un courant qui permet d'effectuer une cartographie de haute précision de l'échantillon.

5.5 Le puits de potentiel

5.5.1 Etude générale d'un puits de potentiel

On considère le puits de potentiel défini par la figure 5.7 :

$$V(x) = \begin{cases} V_1 & \text{pour } x < 0 \\ 0 & \text{pour } 0 \leq x \leq a \\ V_2 > V_1 & \text{pour } x > a . \end{cases}$$

On suppose que l'énergie de la particule est telle que : $0 < E < V_1$. On posera :

$$\begin{aligned} k &= \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, & \mu_1 &= \frac{\sqrt{2m(V_1 - E)}}{\hbar}, & \mu_2 &= \frac{\sqrt{2m(V_2 - E)}}{\hbar} \quad \text{et} \\ K_1 &= \frac{\sqrt{2mV_1}}{\hbar}, & K_2 &= \frac{\sqrt{2mV_2}}{\hbar} . \end{aligned}$$

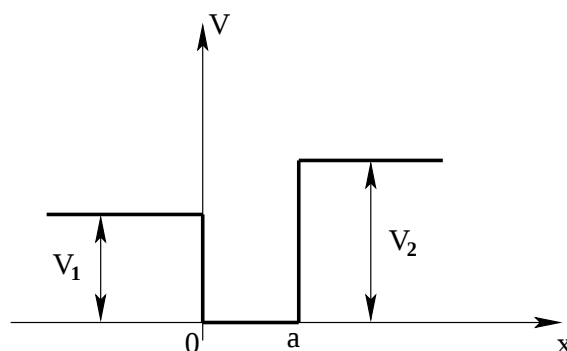


FIGURE 5.7 – Puits de potentiel - forme quelconque

1° Forme générale des fonctions d'onde

Le potentiel $V(x)$ délimite l'espace en trois régions :

- Région I : $x < 0$
L'équation de Schrödinger

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} (V_1 - E)\psi_1, \quad \text{ou} \quad \psi_1'' = \mu_1^2 \psi_1,$$

admet des solutions de type exponentiel :

$$\psi_1(x) = Ae^{\mu_1 x}.$$

- Région II : $0 \leq x \leq a$ L'équation de Schrödinger

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi_2 \quad \text{ou} \quad \psi_2'' = -k^2 \psi_2$$

admet des solutions de type oscillatoire :

$$\psi_2(x) = B \sin(kx + \phi).$$

- Région III : $x > a$ L'équation de Schrödinger

$$\frac{d^2\psi_3}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} (V_2 - E)\psi_3 \quad \text{ou} \quad \psi_3'' = \mu_2^2 \psi_3 = 0,$$

admet des solutions de type exponentiel :

$$\psi_3(x) = Ce^{-\mu_2 x}.$$

Remarque : Dans les solutions de type exponentiel, on n'a conservé que les fonctions d'onde décroissant exponentiellement avec x afin que $\psi(x)$ soit une fonction de carré sommable.

2° Détermination des niveaux d'énergie

La continuité de la fonction d'onde ψ et de sa dérivée ψ' entraîne la continuité de la dérivée logarithmique ψ'/ψ :

— A la frontière $x = 0$, on a :

$$\frac{\psi_1'(0)}{\psi_1(0)} = \frac{\psi_2'(0)}{\psi_2(0)} \quad \text{soit} \quad \mu_1 = k \cotan \phi. \quad (5.20)$$

— A la frontière $x = a$, on a :

$$\frac{\psi'_2(a)}{\psi_2(a)} = \frac{\psi'_3(a)}{\psi_3(a)} \quad \text{soit} \quad k \cotan(ka + \phi) = -\mu_2 . \quad (5.21)$$

Compte tenu de la relation (5.20) et de la relation trigonométrique

$$\sin^2 \phi = \frac{1}{1 + \cotan^2 \phi} ,$$

on obtient :

$$\sin \phi = \frac{k}{\sqrt{k^2 + \mu_1^2}} = \frac{k}{K_1}$$

car

$$k^2 + \mu_1^2 = \frac{2mV_1}{\hbar^2} = K_1^2 .$$

D'où

$$\phi = \arcsin \frac{k}{K_1} = \arcsin \sqrt{\frac{E}{V_1}} . \quad (5.22)$$

Compte tenu de la relation (5.21), on obtient, de même :

$$\sin(ka + \phi) = -\frac{k}{\sqrt{k^2 + \mu_2^2}} = -\frac{k}{K_2}$$

car

$$k^2 + \mu_2^2 = \frac{2mV_2}{\hbar^2} = K_2^2 .$$

D'où

$$\phi = -ka - \arcsin \frac{k}{K_2} = -ka - \arcsin \sqrt{\frac{E}{V_2}} . \quad (5.23)$$

Les arcs Φ définis par la relation (5.22) et (5.23) sont égaux à un multiple de π près, donc :

$$\arcsin \frac{k}{K_1} = -ka - \arcsin \frac{k}{K_2} + n\pi \quad \text{avec} \quad n = 1, 2, 3 \dots$$

$$ka = n\pi - \arcsin \frac{k}{K_1} - \arcsin \frac{k}{K_2} . \quad (5.24)$$

Comme k est fonction de l'énergie E de la particule, la relation (5.24) détermine les valeurs possibles de k ; donc des niveaux d'énergie discrets : $E = k^2 \hbar^2 / 2m$. Le nombre de ces niveaux d'énergie dépend essentiellement de la largeur a du puits de potentiel.

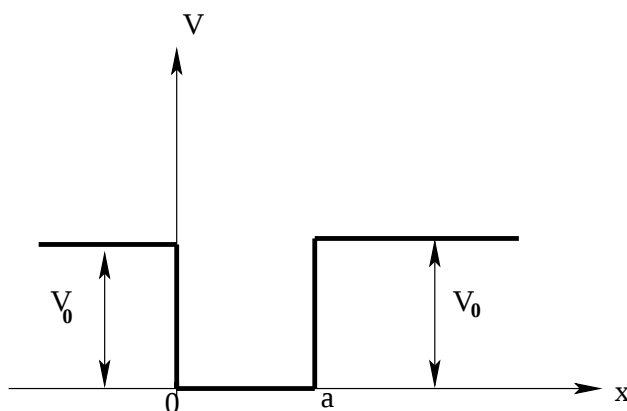


FIGURE 5.8 – Puits de potentiel carré

5.5.2 Puits de potentiels carrés particuliers

1° Puits de potentiel carrés symétrique (figure 5.8)

Ici

$$V_1 = V_2 = V_0 \quad \text{alors} \quad K_1 = K_2 = K = \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar}.$$

La relation générale (5.24) devient donc :

$$ka = n\pi - 2 \arcsin \frac{k}{K}.$$

Or d'après la relation (5.22), $\arcsin \frac{k}{K} = \phi$, d'où

$$ka = n\pi - 2\phi.$$

Cette condition de quantification de l'énergie peut aussi s'écrire

$$\phi = -\frac{ka}{2} + \frac{n\pi}{2};$$

donc la fonction d'onde de la particule dans le puits est

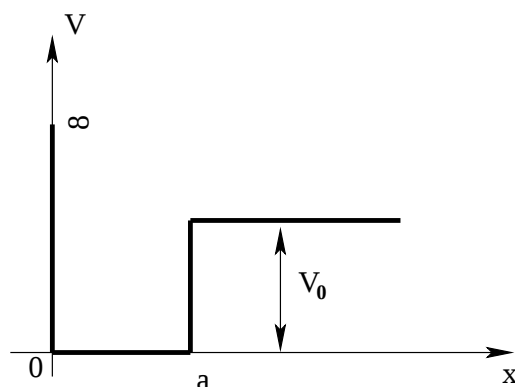
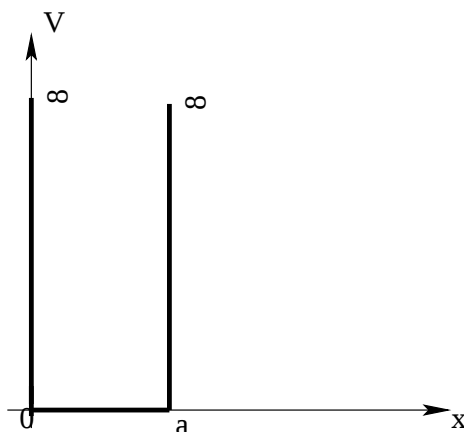
$$\psi_2(x) = B \sin \left[k \left(x - \frac{a}{2} \right) + \frac{n\pi}{2} \right].$$

- **si n est impair** : $\psi_2(x) = \pm B \cos k(x - a/2)$: la solution est une fonction **paire** de x ;
- **si n est pair** : $\psi_2(x) = \pm B \sin k(x - a/2)$: la solution est une fonction **impaire** de x .

2° Puits de potentiel semi-infini (figure 5.9)

Il est défini par :

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

FIGURE 5.9 – *Puits de potentiel semi-infini*FIGURE 5.10 – *Puits de potentiel infini*

Les résultats de l'étude générale sont valables, avec $V_1 = \infty$ et $V_2 = V_0$. Donc

$$\arcsin \frac{k}{K_1} = \arcsin \sqrt{\frac{E}{V_1}} = 0 \quad \text{puisque} \quad V_1 = \infty$$

et

$$K_2 = K = \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar} \quad \text{puisque} \quad V_2 = V_0.$$

La relation (5.24) de quantification de l'énergie dans le puits devient :

$$ka = n\pi - \arcsin \frac{k}{K}.$$

3° Puits de potentiel infini à une dimension (figure 5.10)

a) Fonction d'onde et niveau d'énergie

Dans ce cas,

$$\arcsin \frac{k}{K_1} = \arcsin \sqrt{\frac{E}{V_1}} = 0 \quad \text{car} \quad V_1 = \infty$$

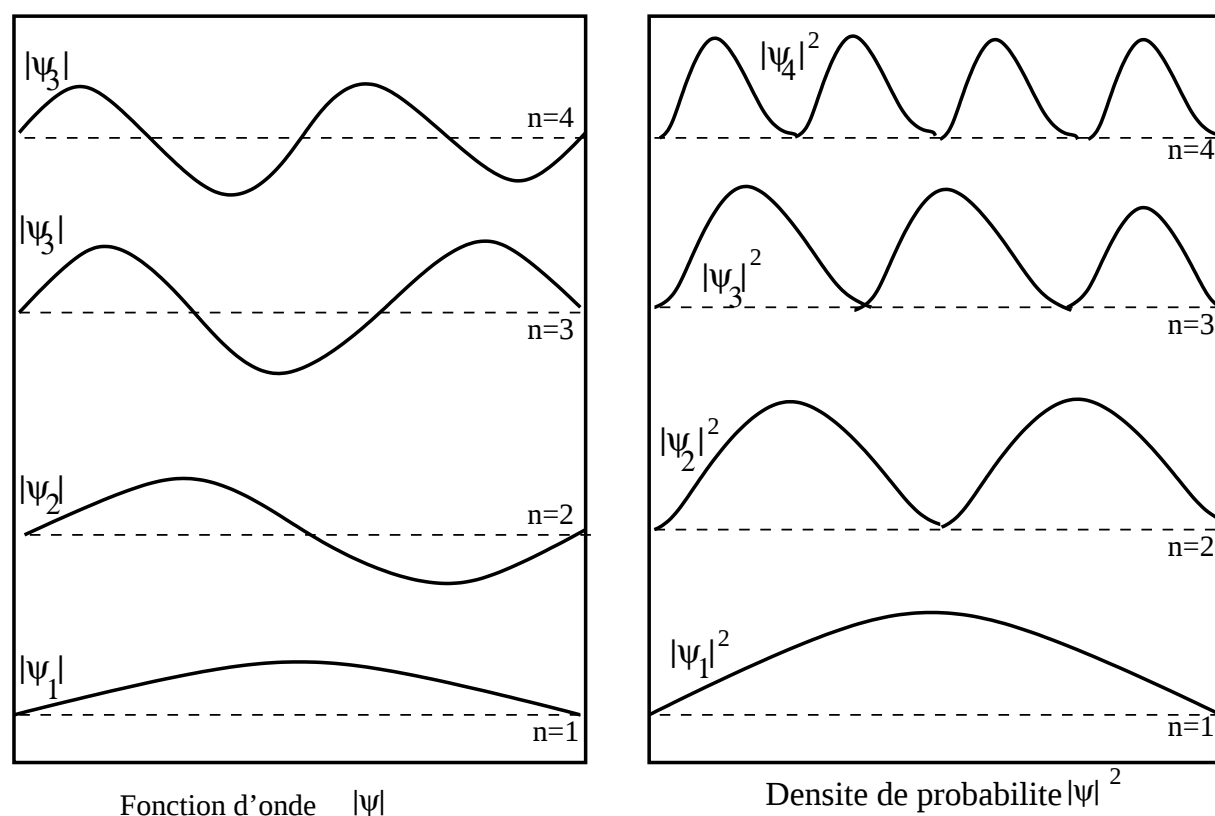


FIGURE 5.11 – Fonctions d'onde et densités de probabilités

et

$$\arcsin \frac{k}{K_2} = \arcsin \sqrt{\frac{E}{V_2}} = 0 \quad \text{car} \quad V_2 = \infty .$$

La relation générale (5.24) se réduit à :

$$\boxed{ka = n\pi} \quad (n \text{ entier non nul}).$$

Les niveaux d'énergies sont alors quantifiés :

$$E = \frac{k^2 \hbar^2}{2m} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2 .$$

Et la fonction d'onde de la particule dans le puits est :

$$\psi_n(x) = B \sin \frac{n\pi}{a} x . \quad (5.25)$$

b) Fonction d'onde et probabilité de présence

La probabilité de trouver la particule présente dans l'élément dx du puits d'abscisse x , est :

$$dP = |\psi_n|^2 dx .$$

Comme la particule est confinée dans le puits entre $x = 0$ et $x = a$, et qu'ailleurs elle n'a aucune chance d'exister, on a :

$$P = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_n|^2 dx = \int_0^a |\psi_n|^2 dx = 1;$$

Cette condition de normalisation permet de déterminer la constante B de la relation (5.25). On obtient :

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi}{a} x$$

Représentons les fonctions d'onde et les densités de probabilités $dP/dx = |\psi_n|^2$ de la particule dans le puits infini, pour les 4 premiers niveaux : $n = 1, 2, 3$ et 4 (figure 5.11).

Pour $x = 0$ et $x = a$, $\psi(x) = 0$, quel que soit n . D'autre part la fonction d'onde $\psi(x)$ présente en tout $n + 1$ zéros dans l'intervalle $[0, a]$

La probabilité de présence de la particule varie avec sa position x ainsi qu'avec son niveau d'énergie défini par n . Ainsi, pour $x = a/2$ (milieu du puits), $|\psi_1|^2$ est maximum alors que $|\psi_2|^2 = |\psi_4|^2 = 0$, ce qui signifie physiquement qu'il n'y a aucune chance de trouver la particule dans les états $n = 2$ et $n = 4$ au milieu du puits, alors que dans l'état fondamental $n = 1$ (de plus basse énergie), cette particule a un maximum de chance de s'y trouver.