Chapitre3

Equation de Schrödinger et étude

De potentiel élémentaire à une dimension

I-Equation de Schrödinger et ses propriétés :

On se basant sur les relations de de Broglie (E=ħω et $\vec{P}$ =ħ$\vec{K}$) pour une particule non relativiste qui possède une énergie totale : (E=P^2/2m +V), et dont le but de trouver une équation différentielle à laquelle la fonction d'onde associée à cette particule doit obéir, Erwin Schrödinger a fait les substitutions formelles suivantes :

$$E = \frac{P^2}{2m} + V(\vec{r},t) \ \rightarrow \ \hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V(\vec{r},t) \tag{1}$$

$$\vec{\nabla} = i\vec{k} \ \Leftrightarrow \ \vec{\mathrm{k}} = \text{-i}\vec{\nabla} \tag{2}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} = -i\omega \ \Leftrightarrow \ \omega = \mathrm{i}\frac{\partial}{\partial \mathrm{t}} \tag{3}$$

Avec une généralisation des relations de de Broglie

$$\vec{P} \ \rightarrow \ -\mathrm{i}\hbar\vec{\nabla} \tag{4}$$

$$\mathrm{E} \ \rightarrow \ \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial \mathrm{t}} \tag{5}$$

Il obtient finalement :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2\Psi(\vec{r},t) + V(\vec{r},t)\Psi(\vec{r},t) \tag{6}$$

C'est l'équation de Schrödinger. ψ est la fonction d'onde solution de cette équation aux dérivées partielles. Elle caractérise l'état quantique d'un corpuscule et contient toutes les informations qu'il est possible d'obtenir sur le système.

Ici on a

$$\vec{\nabla} = \left(\partial/\partial x, \partial/\partial y, \partial/\partial z \right) \ \text{et} \ \vec{\nabla}^2 = \Delta = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) \ \text{: est le Lapacien}$$

$\hbar = \frac{h}{2\pi}$=1.054510^{-34}J.s

m : la masse de la particule.

$V(\vec{r},t)$: l'énergie potentielle de la particule.

$\Psi(\vec{r},t)$: l'amplitude de probabilité

Propriétés de l'équation de Schrödinger.

*Il s'agit d'une équation aux dérivées partielles linéaire. Le premier membre représente l'action sur la fonction d'onde de l'opérateur dérivation par rapport au temps multiplie par iħ. Le deuxième membre représente l'action sur l'onde d'un opérateur *H* défini par :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r},t) \qquad (7)$$

H est appelé l'hamiltonien de la particule de masse m en mouvement dans un champ de forces dérivant du potentiel $V(\vec{r},t)$, Δ étant l'opérateur Laplacien. La justification de l'équation de Schrödinger réside dans ces conséquences, car elle donne des résultats en parfait accord avec l'expérience. Nous pouvons la vérifier, en considérons pour simplifier, une fonction d'onde plane monochromatique décrivant une particule libre $(V(\vec{r},t) = 0)$. Cette fonction est donné par :

$$\psi(\vec{r},t) = A\exp(i(\frac{\vec{p}}{\hbar}\vec{r} - \omega t))$$

$\Psi(\vec{r},t)$ est solution de l'équation de Schrödinger à condition que $\omega = \frac{P^2}{2m\hbar}$. En effet

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

$$\Rightarrow i\hbar(-i\omega)\psi(\vec{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}\vec{\nabla}\psi(\vec{r},t)$$

Or $\vec{\nabla}\psi(\vec{r},t):\begin{pmatrix} i\frac{p_x}{\hbar} \\ i\frac{p_y}{\hbar} \\ i\frac{p_z}{\hbar}\end{pmatrix}$; $\vec{\nabla}\vec{\nabla}\psi(\vec{r},t) = -\frac{p_x^2}{\hbar^2} - \frac{p_y^2}{\hbar^2} - \frac{p_z^2}{\hbar^2} = -\frac{P^2}{\hbar^2}$

$$\Rightarrow \hbar\omega\psi = \frac{-\hbar^2}{2m}(-\frac{P^2}{\hbar^2})\psi$$

Donc $\omega = \frac{P^2}{2m\hbar}$.

La condition $\hbar\,\omega = \frac{P^2}{2m} = E$ ***C'est la relation de de Broglie.***

*Nous avons vu (chap2) que $|\psi|^2$ représente une densité de probabilité de présence par suite doit avoir une valeur partout fini et continue. Donc les solutions de l'équation de Schrödinger qui sont physiquement acceptables sont celles qui ont une valeur partout finie et continu. Ψ doit être de carré sommable.

* Dans le 2^{ime} membre de l'équation (6) apparaît la dérivée seconde de Ψ par rapport à x,y,z→ψ($\vec{r}$,t) doit être deux fois dérivables (doit être continue et sa dérivée aussi).

*l'opérateur $i\frac{\partial}{\partial t}$ est imaginaire alors que opérateur qui apparaît dans le 2^{ime} membre de l'équation (6) est réel →la fonction $\psi(\vec{r}\ ,t)$ doit être complexe à toute instant. Pour certaines valeurs particulières de t , elle peut être réelle ou imaginaire pure.

La justification de l'équation de Schrödinger réside dans ces conséquences, car elle donne des résultats en parfait accord avec l'expérience.

*l'équation de Schrödinger est une équation différentielle aux dérivées partielles qui est linéaire. Ceci signifie que si $\psi_1(\vec{r},t)$ et $\psi_2(\vec{r},t)$ sont solutions, toute combinaison linéaire : $\lambda_1\psi(\vec{r},t)+\lambda_2\psi(\vec{r}\ ,t)$ est aussi une solution de cette équation : ***principe de superposition.***

II-Forme stationnaire de l'équation de Schrödinger :

On veut étudier le cas où la particule possède une énergie bien définie c-à-d ne dépend pas du temps donc E est une constante et ω aussi. C'est le cas où le potentiel ne dépend pas du temps $V(\vec{r},t)=V(\vec{r})$. En plus dans l'équation (6) les dérivées (les opérateurs différentielles) par rapport au temps et par rapport à l'espace sont indépendantes donc les solutions on peut les écrire sous la forme

$$\psi(\vec{r},t)=\varphi(\vec{r})\chi(t) \tag{8}$$

Remplaçant dans l'équation (6)

$$i\hbar\varphi(\vec{r})\frac{\partial\chi(t)}{\partial t}=\chi(t)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi(\vec{r})+V(\vec{r})\varphi(\vec{r})\right]$$

(9)

Divisant par $\varphi.\chi$ on obtient :

$$\frac{i\hbar}{\chi(t)}\frac{d\chi(t)}{dt}=\frac{1}{\varphi(\vec{r})}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi(\vec{r})+V(\vec{r})\varphi(\vec{r})\right]$$

(10)

Le premier membre de l'équation (9) dépend du temps et le second dépend des coordonnées de membres sont tous les deux égaux à une même constante qui a la dimension d'une énergie $E=\hbar\omega$.

Soit :

$$i\hbar\frac{d\chi(t)}{dt}=\hbar\omega\chi(t)\Rightarrow\chi(t)=e^{-i\omega t}$$ à une constante près

La solution est donc : $\psi(t)=\varphi(\vec{r})\ e^{-i\omega t}$.

Où $\varphi(\vec{r})$ est solution de l'équation indépendante du temps.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi(\vec{r})+V(\vec{r})\varphi(\vec{r})=\hbar\omega\varphi(\vec{r}) \tag{11}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi(\vec{r})+V(\vec{r})\varphi(\vec{r})=E\varphi(\vec{r}) \quad (12)$$

***C'est la forme stationnaire de l'équation de Schrödinger*.**

*$\psi(\vec{r},t) = \varphi(\vec{r},t)e^{-i\omega t}$ veut dire que si on connait la fonction d'onde au temps t=0, on peut en déduire la fonction d'onde à un instant t stationnaire ultérieure.

* La densité de probabilité reste constante au cours du temps car $|\psi(\vec{r},t)|^2 = |\varphi(\vec{r})|^2$.

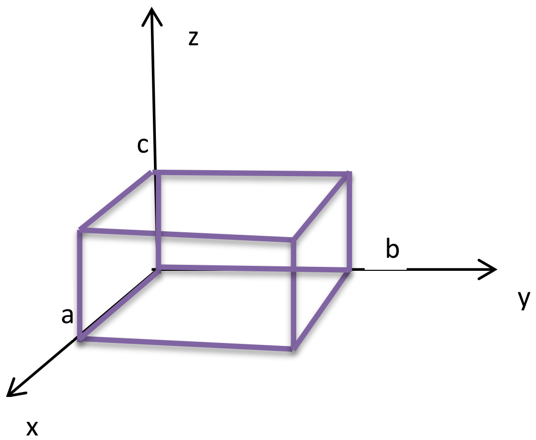
*Un état stationnaire est un état d'énergie bien définie. On obtient ces états en résolvant l'équation qui peut s'écrire sous la forme.

$$\mathbf{H}\varphi(\vec{r}) = \mathbf{E}\varphi(\vec{r}) \quad (13)$$

Cette équation est appelé équation aux valeurs propres. C'est-à-dire pour des conditions imposées de $|\varphi(\vec{r})$ celle-ci n'existe que pour certaines valeur de l'énergie *E* appelées *valeurs propres* de H, $\varphi(\vec{r})$ est alors appelée *fonction propre* correspondant à la *valeur propre E.*

III- Etude d'une particule libre enfermé dans une boîte de volume fini :

Une particule de masse m est contenue dans une boite parallélépipédique de cotés a, b et c le potentiel à l'intérieure est nul.



L'équation de Schrödinger $H\varphi=E\varphi$

à l'extérieure $\varphi(\overrightarrow{r})=0$.

à l'intérieure on a :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi = E\varphi$$

soit $\Delta\varphi + \frac{2mE}{\hbar^2}\varphi = 0$

En mettant la fonction solution sous

La forme *$\varphi(x,y,z)=f(x)g(y)h(z)$* et en écrivant *$E=E_x+E_y+E_z$*

L'équation de Schrödinger devient :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi(x,y,z)+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\varphi(x,y,z)+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\varphi(x,y,z)\right)=\left(E_x+E_y+E_z\right)\varphi(x,y,z) \quad (14)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(g(y)h(z)\frac{d^2}{dx^2}f(x)+f(x)h(z)\frac{d^2}{dy^2}g(y)+f(x)g(y)\frac{d^2}{dz^2}h(z)\right)=\left(E_x+E_y+E_z\right)\varphi(x,y,z)$$

(15)

on divise par *$\varphi(x,y,z)=f(x)g(y)h(z)$* on aura trois équations

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2 f(x)}{dx^2} = E_x f(x) \;\Rightarrow \frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2 f(x)}{dx^2} + E_x f(x) = 0 \tag{16-a}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2 g(y)}{dy^2} = E_y g(y) \;\Rightarrow \frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2 g(y)}{dy^2} + E_y g(y) = 0 \tag{16-b}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2 h(z)}{dz^2} = E_z h(z) \;\Rightarrow \frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2 h(z)}{dz^2} + E_z h(z) = 0 \tag{16-c}$$

Posons $K_x = \frac{\sqrt{2mE_x}}{\hbar}, K_y = \frac{\sqrt{2mE_y}}{\hbar}, \; K_z = \frac{\sqrt{2mE_z}}{\hbar}$ (17)

Les solutions sont :

$$f(x) = A_1 e^{ik_x x} + A_2 e^{-ik_x x} \tag{18-a}$$

$$g(x) = B_1 e^{ik_y y} + B_2 e^{-ik_y y} \tag{18-b}$$

$$h(x) = C_1 e^{ik_z z} + C_2 e^{-ik_z zx} \qquad ((18\text{-c})$$

En utilisant les conditions aux limites: nous avons la probabilité de trouver la particule à l'extérieur et sur les parois est nulle.

$$\varphi(0,y,z) = \varphi(a,y,z) => (A_1 + A_2)g(y)h(z) = (A_1 e^{ik_x a} + A_1 e^{-ik_x a})g(y)h(z)$$

$$=> A_1 + A_2 = A_1 e^{ik_x a} + A_1 e^{-ik_x a}$$

$$\varphi(x,0,z) = \varphi(x,b,z) => B_1 + B_2 = B_1 e^{ik_y b} + B_2 e^{-ik_y b}$$

$$\varphi(x,y,0) = \varphi(x,y,c) => C_1 + C_2 = C_1 e^{ik_z c} + C_2 e^{-ik_y c}$$

Pour les plans passant par l'origine.

$f(0)=0$ $=>A_1 + A_2=0 => A_1 =-A_2 =>f(x) =2i A_1 sin(k_x x)$

$g(0)=0$ $=>A_1 + A_2=0 => A_1 =-A_2 =>f(x) =2i A_1 sin(k_x x)$

$h(0)=0$ $=>A_1 + A_2=0 => A_1 =-A_2 =>f(x) =2i A_1 sin(k_x x)$

Pour les autres plans des parois

$f(a)=0$ $=>f(a) =2i A_1 sin(k_x a)=0 =>k_x=\frac{n_1\pi}{a}$

$g(0)=0$ $=>g(y) =2i B_1 sin(k_y y)=0 =>k_y=\frac{n_2\pi}{b}$

$h(0)=0$ $=>h(z) =2i C_1 sin(k_z z)=0 => k_z= \frac{n_3\pi}{c}$

Avec n_1, n_2 *et* n_3 *sont des entiers naturels.*

L'énergie totale s'écrie $E=\frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$

$$E=\frac{\hbar^2\pi^2}{2m}(\frac{n_1^2}{a^2} + \frac{n_2^2}{b^2} + \frac{n_3^2}{c^2})$$

La normalisation de la fonction d'onde.

$$\iiint \varphi(x,y,z)\varphi^*(x,y,z)dxdydz = 1$$

Devient

$$\int_0^a f(x)f^*(x)dx \int_0^b g(y)g^*(y)dy \int_0^c h(z)h^*(z)dz = 1$$

On peut

$$\int_0^a f(x)f^*(x)dx = \int_0^a 4A_1^2 sin^2(k_x x) = 2A_1^2 \int_0^a (1-\cos(2k_x x)\,dx$$

$$=2A_1^2\left[1-\frac{\sin 2k_x x}{2k_x}\right] = 2A_1^2 a$$

De même $\int_0^b g(y)g^*(y) = 2B_1^2 b$

$\int_0^b h(z)h^*(z) = 2C_1^2 b$ utiliser la relation $sin^2(\alpha) = (1-\cos 2\alpha)/2$

Donc $2A_1^2B_1^2C_1^2 abc = 1 \;\; => A_1B_1C_1 = \frac{1}{2\sqrt{2abc}}$

La solution s'écrira :

$$\varphi(x,y,z) = f(x)g(y)h(z) = \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{abc}}\sin(k_x x)\sin(k_y y)\sin(k_z z) \qquad (19)$$

Si la boîte est cubique de côté a :

L'énergie totale : $E = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}(n_1^2+n_2^2+n_3^2)$

Les solutions sont de la forme : $\varphi(x,y,z) = (\frac{2}{a})^{\frac{3}{2}}\sin(n_1\frac{\pi x}{a})\sin(n_2\frac{\pi y}{a})\sin(n_3\frac{\pi y}{a})$

*Le premier niveau d'énergie E_1 correspond à $n_1=n_2=n_3=1$

$$\boldsymbol{E_1 = \frac{3\pi^2\hbar^2}{2ma^2}}$$

On peut l'obtenir d'une seule façon donc une solution possible le niveaud'énergie n'est pas **dégénéré**

*Le de deuxième niveau d'énergie on peut l'obtenir par trois façon différentes :

* $n_1=n_2=1$ et $n_3=2$, * $n_1=n_3=1$ et $n_2=2$, * $n_3=n_2=1$ et $n_1=2$, pour ces trois combinaisons

$$\boldsymbol{E_2 = \frac{6\pi^2\hbar^2}{2ma^2}} \;;\qquad \boldsymbol{E_2 = \frac{3\pi^2\hbar^2}{ma^2}}$$

Mais chaque combinaisons correspond à une solution distincte donc ce niveau est trois fois **dégénéré**

IV-Etude des potentiels stationnaires élémentaires à une dimension.

A une dimension l'équation de Schrödinger stationnaire s'écrit comme :

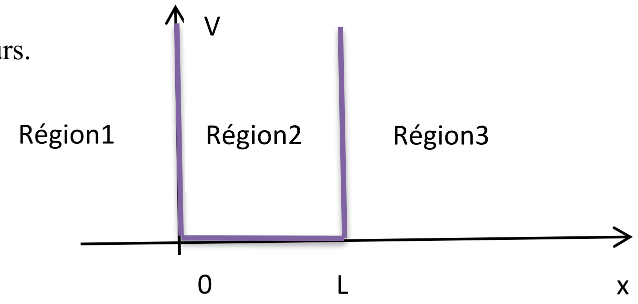
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)+V(x)\psi(x)=E\psi(x) \qquad (20)$$

Dans cette partie nous allons étudier des cas élémentaires de base les plus rencontré.

1-Puits de potentiel de profondeur infini :

On considère une particule dans un puits de potentiel infini à une dimension, de largeur L, c'est-à-dire que le potentiel auquel est soumise la particule est :

$V(x) = 0$ si $0 < x < L$ $\quad V(x) \longrightarrow +\infty$ ailleurs.



On doit résoudre l'équation de Schrödinger indépendante (20) dans les trois régions :

Dans la région2 V(x)=0 est l'équation de(20) devient :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi_2(x)=E\psi_2(x) \qquad (21)$$

$$\Rightarrow \quad \frac{d^2}{dx^2}\psi_2(x)=-\frac{2m}{\hbar^2}E\psi_2(x)$$

On pose $K=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ $\quad => \quad E_k=\frac{\hbar^2k^2}{2m}$

La solution peut se mettre sous la forme :

$\Psi_2(x)=Csinkx+Dcoskx$

Dans les régions 1 et 3 le potentiel V est infini donc la fonction d'onde doit être nulle,

$\Psi_1(x) = \Psi_3(x)=0$

La solution finale de l'équation (20) est donc :

$$\Psi(x)=\begin{cases}\Psi_2(x)=C\sin(kx)+D\cos(kx) \text{ si } x\in[0,L]\\ \Psi_1(x)=\Psi_3(x)0 \text{ si } 0\leq x \text{ et } L\leq x\end{cases}$$

Nous avons mentionné que $\Psi(x)$ doit être continue donc ;

Pour $x=0$: $\Psi_2(x)=\Psi_1(x)=0 \;=>\; D=0$

Pour $x=L$: $\Psi_2(x)= \Psi_3(x)=0 \Rightarrow kL=n\pi \Rightarrow k= n\pi/L$

Le module du vecteur $\vec{k}$ ne peut prendre que des valeurs distinctes $n\pi/L$. L'impulsion correspondante p vaut : $p=\hbar k= \hbar n\pi/L$ on dit alors que k et p sont quantifiés et par suite l'énergie E aussi

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad \text{donc} \quad \boldsymbol{E = n^2 \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}}$$

*Normalisation de la fonction d'onde

Dans la région2 $\Psi_2(x)=C\sin(\frac{n\pi}{L}x)$

Utilisons la relation $sin^2(\alpha) = (1-\cos 2\alpha)/2$

Et la condition de normalisation de la fonction d'onde :

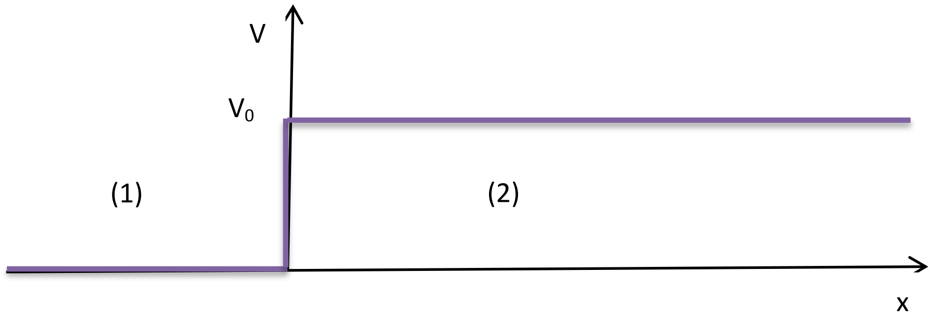
$$\int_0^L |C|^2 sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right) dx = 1$$

On trouve $C = \sqrt{\frac{2}{L}}$

Finalement $\Psi_2(x)= \sqrt{\frac{2}{L}}\sin(\frac{n\pi}{L}x)$

2-Marche de potentiel :

Considérons une marche de potentiel présenté dans la figure suivante. Une particule de masse m et d'énergie E venant de $-\infty$ se dirige vers $+\infty$.



On distingue deux régions : la région(1) pour $x<0$ où $V=0$, et la région(2) pour $x>0$ où $V=V_0$

L'équation (20) on peut la mettre dans la zone (1) sous la forme :

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi_1(x) + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi_1(x) = 0 \tag{22}$$

et dans la zone (2) sous la forme

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi_2(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E-V_0)\psi_2(x) = 0 \tag{23}$$

On suppose que l'énergie de la particule est inférieure à la hauteur de la particule : ***E<V₀***

On pose : $k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$, $\quad k_2 = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$, avec $k_2 < k_1$

Les solutions sont : dans la région(1) $\psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$

Dans la région(2) $\psi_2(x) = A'e^{ik_2x} + B'e^{-ik_2x}$

où e^{ikx} représente l'onde venant de la gauche vers la droite et e^{-ikx} représente venant de la droite vers la gauche. Les deux solutions sont sinusoïdales : elles sont toujours définies puisque leur module est inférieur ou égal à l'unité pour toute valeur de x.

Ae^{ik_1x}est l'onde incidente A est l'amplitude de l'onde incidente,

Be^{-ik_1x} est l'onde réfléchie sur la marche de potentiel et B est l'amplitude de l'onde réfléchie.

$A'e^{ik_2x}$est l'onde transmise A' est l'amplitude de l'onde transmise.

Par suit $B'=0$ on peut pas avoir une onde réfléchie car la particule ne rencontre pas de discontinuité de potentielle dans la région 2.

* Maintenant on va calculer le coefficient de transmission et le coefficient de réflexion de la marche. Pour cela on doit d'abord définir le courant de probabilité.

Densité de courant de Probabilité associer à la particule décrit par $\psi(x,t)$ est donnée par.

$$J(\vec{r},t) = \frac{\hbar}{2mi}(\psi^*\vec{\nabla}\psi - \psi\vec{\nabla}\psi^*) \tag{24}$$

A une dimension et dans le cas stationnaire

$$J(x) = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*\frac{d\psi}{dx} - \psi\frac{d\psi^*}{dx}\right) \tag{25}$$

On trouve pour la région(1)

$$J_1 = \frac{\hbar k_1}{m}|A|^2 - \frac{\hbar k_1}{m}|B|^2 = J_I - J_R \tag{26}$$

Le premier terme du second membre de l'équation (26) est la densité de courant de probabilité incident. Le deuxième est la densité de courant de probabilité réfléchi.

Pour la deuxième région on trouve :

$$J_2 = \frac{\hbar k_2}{m}|A'|^2 = J_T \tag{27}$$

Densité de courant transmis.

Le coefficient de réflexion de la marche est donné par :

$$R = \frac{J_R}{J_I} = \frac{|B|^2}{|A|^2} \tag{28}$$

Le coefficient de transmission de la marche :

$$T = \frac{J_T}{J_I} = \frac{k_2|A'|^2}{k_1|A|^2} \tag{29}$$

Pour trouver ces rapports nous allons utiliser les conditions de continuité au point x=0.

Car la fonction d'onde acceptable doit être deux fois dérivable : la fonction d'onde et sa dérivée se conserve en x=0 (voir éq (20)).

$\psi_1(0) = \psi_2(0) \quad => \; A + B = A'$ ....(a)

$\left.\frac{d\psi_1}{dx}\right|_{x=0} = \left.\frac{d\psi_2}{dx}\right|_{x=0} \; => ik(A - B) = ikA'$ ....(b)

Les équations (a) et (b) nous donne :

$\frac{B}{A} = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}$ et $\frac{A'}{A} = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}$

On déduit les coefficients :

$$\boldsymbol{R = \left|\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right|^2} \qquad \textbf{(30)}$$

$$\boldsymbol{T = \frac{4k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2}} \qquad \textbf{(31)}$$

***On vérifie que R+T=1 ;** la particule est soit réfléchie soit transmise

****R≠0 ,*** y a donc probabilité non nul que la particule soit réfléchie ceci contraire à la mécanique classique où la particule ralentie au passage de la marche mais poursuit son mouvement vers la droite sans changer la direction.

***Le cas E<V_0**

Point de vu classique la particule venant de la gauche est réfléchie en x=0 vers la gauche. Elle ne peut pas pénétrer dans la région x>0où son énergie totale est inférieur à l'énergie potentielle.

Pour les solutions :

Dans la région(1) la solution ne change pas: $\psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$

Dans la région (2) on a **E-V_0<0 :**

On pose : $\rho = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$

la solutions est exponentiel et s'écrit :

$$\psi_2(x) = A''e^{\rho x} + B''e^{-\rho x} \qquad (32)$$

Il faut que $A'' = 0$ car $\psi_2(x)$ doit être de carré sommable.

Les conditions de continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée nous donnent

$\psi_1(0) = \psi_2(0) \quad => A + B = B''$ ....(c)

$\left.\frac{d\psi_1}{dx}\right|_{x=0} = \left.\frac{d\psi_2}{dx}\right|_{x=0} \; => ik(A - B) = \rho B''$ ....(d)

Les équations (c) et (d) nous donne :

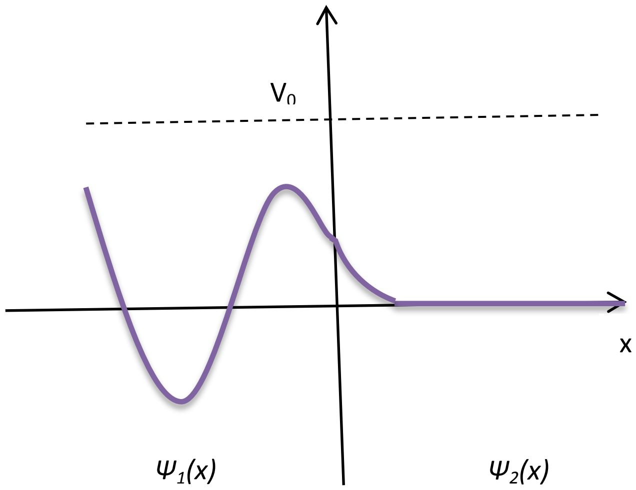
$\frac{B}{A} = \frac{k_1 - i\rho}{k_1 + i\rho}$ et $\frac{B''}{A} = \frac{2k_1}{k_1 + i\rho}$

En remplaçant ces deux solutions pour obtenir les densités de courant on obtient après calculs dans la région(1) ***J_1=0.de même pour la région(2) J_2=0***. Dans la région(1) on a un terme incident d'amplitude

A et un terme réfléchi d'amplitude *B* : ***J_1=0=>J_I=J_R(on peut le voir dans l'expression du rapport A/B)***. Mais dans la région(2), il y a qu'une solution d'amplitude B'' représente la transmission :***J_T=0.***

On déduit les coeffitions : R=1 et T=0

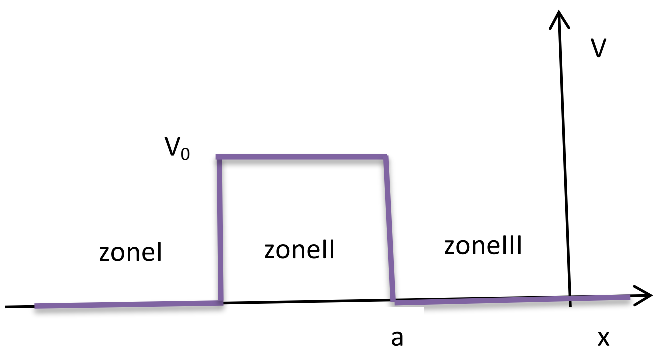
Il y a réflexion totale comme en mécanique classique la particule est toujours réfléchie, mais la fonction d'onde est non nulle pour x>0. Donc il y a une probabilité exponentiellement décroissante mais différente de zéro que la particule pénetre une certain distance dans la région qui lui est infranchissable classiquement. La solution dans la région(2) correspond à une onde évanescente voir figure ci-dessous -> analogie avec une onde évanescente qui existe en optique lorsque une onde lumineuse subit une réflexion totale sur une surface de séparation de deux milieux.<-



3-Barrière de Potentiel, Effet tunnel.

On considère la distribution de potentiel suivante :

$$V(x)=\begin{cases}0\,pour\,x \prec 0\\ V_0\,pour\,0\le x\le a\\ 0\,pour\,x\succ a\end{cases}$$



Une particule de masse m d'énergie *E* venant de -∞ se dirige vers +∞. On suppose que l'énergie de la particule est inférieure à V_0 . En mécanique classique la particule est réfléchie par la barrière du potentiel.

Résolvons le problème dans le cadre de la mécanique quantique.

Dans la zoneI : l'équation de Schrödinger s'écrit :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi_1(x) = E\psi_1(x) \tag{33}$$

La solution est sinusoïdale :

$$\psi_1(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad \text{avec } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Dans la zone II l'équation de Schrödinger est donné par :

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi_2(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)\psi_2(x) = 0 \tag{34}$$

La solution est exponentielle

$$\psi_2(x) = A'e^{\rho x} + B'e^{-\rho x} \quad \text{avec } \rho = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

Dans la zone III : même que la zone I : la solution est

$$\psi_3(x) = A''e^{ikx} + B''e^{-ikx} \quad \text{Avec } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

B''=0 car dans la zone III on ne peut pas avoir une onde réfléchie.

Nous devant utiliser les conditions de continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée au point x=0 et x=a.

Pour x=0

$\psi_1(0) = \psi_2(0) \quad => A + B = A' + B'$ ....(e)

$\left.\frac{d\psi_1}{dx}\right|_{x=0} = \left.\frac{d\psi_2}{dx}\right|_{x=0} \quad => ik(A - B) = \rho(A' - B')$ ....(f)

Pour x=a

$\psi_2(a) = \psi_3(a) \quad => A'e^{\rho a} + B'e^{-\rho a} = A''e^{ika}$ ....(g)

$\left.\frac{d\psi_2}{dx}\right|_{x=a} = \left.\frac{d\psi_3}{dx}\right|_{x=a} \quad => \rho(A'e^{\rho a} - B'e^{-\rho a}) = ikA''e^{ikx}$ ....(h)

Nous avons 5 inconnues et 4 équations 0 L'amplitude *A* et arbitraire. On peut exprimer toute les autres quantités en fonction de *A*. En utilisant l'équation (24) on trouve pour les coefficients de réflexion et de transmission les formules suivantes.

$R = \frac{|B|^2}{|A|^2}$ et $T = \frac{|A''|^2}{|A|^2}$

T est le cofficient de transmission de la zoneI à la zone III en traversant la barrière de potentiel

En utilisant les 4 équations (e, f, g et h) on trouve.

$R = \frac{(k^2+l^2)^2 sh^2(\rho a)}{4k^2\rho^2 + (k^2+l^2)^2 sh^2(\rho a)}$ et $T = \frac{4k^2\rho^2}{4k^2\rho^2 + (k^2+l^2)^2 sh^2(\rho a)}$

(Les détails de calcul nous allons les voir en TD)

T non nul veut dire qu'il y a une probabilité non nulle pour que la particule traverse la barrière Potentiel et ressorte dans la zone III c'est l'effet tunnel.