

CHAPITRE 3 PARTICULES DANS DES POTENTIELS CONSTANTS PAR MORCEAUX 10/04/2020

I- PARTICULE DANS LE CAS D'UNE MARCHE DE POTENTIEL

1.1.1 Marche de potentiel:

1.1.2 1^{er} Cas: $E > V_0$

1.1.3 2^{eme} Cas $E < V_0$

II- BARRIERE DE POTENTIEL - EFFET TUNNEL

2.1 Cas $E < v_0$ EFFET TUNNEL

2.2 Cas $E > v_0$ TRANSFERT RESONNANT

2.3 Transmission de la barrière en fonction de E

III- PUIITS DE POTENTIEL INFINI

IV ETATS NON STATIONNAIRES D'UNE PARTICULE

4.1 Equation se Schrödinger ESDT

4.2 Combinaison linéaire d'états stationnaires

4.3 Densité de probabilité de présence, exemple

On se limitera à des potentiels de formes très simplifiées afin de pouvoir résoudre sans difficultés l'équation de Schrödinger. Bien que les formes du potentiel que nous allons étudier soient simples, ces potentiels correspondent à des applications très intéressantes, comme le cas de l'effet tunnel, ou bien la particule dans une boîte ou puits de potentiel. Il est toujours instructif de confronter les résultats de l'approche quantique avec ceux prévus par la mécanique classique pour mieux appréhender les effets purement quantiques.

I PARTICULE DANS UNE MARCHE DE POTENTIEL

1.1 MARCHE DE POTENTIEL:

Soit une particule "incidente" d'énergie E venant des x négatifs et se dirigeant vers les x positifs. Cette particule rencontre en $x = 0$ une marche de potentiel V_0 de finie par :



$$\begin{cases} \text{si } x < 0 & V(x) = 0 \\ \text{si } x > 0 & V(x) = V_0 \end{cases}$$

Nous devons considerer deux cas, selon que E est supérieure ou inférieure à la hauteur de la Marche V_0 .

1.2 1^{er} Cas: $E > V_0$

a) ETUDE CLASSIQUE $E = E_C + V = \frac{1}{2}mv^2 + V$

Dans la region (1), $E = E_C = \frac{1}{2}mV_1^2$: la particule est libre, ayant une énergie $E > 0$, se déplace avec une vitesse $v_1 = \sqrt{\frac{2E}{m}}$

Dans la region (2), $E = E_C + V_0 = \frac{1}{2}mV_2^2 + V_0$: la particule est ralentie, $v_2 = \sqrt{\frac{2(E-V_0)}{m}}$ il y a un changement du milieu, l'énergie cinétique de la particule varie à la variation de potentiel.

b) ETUDE QUANTIQUE $\Psi(x, t) = \varphi(t)\psi(x)$

État stationnaire $\Psi(x, t) = \psi(x) \exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right)$

Avec $\psi(x) =$ partie spatiale de la fonction d'onde, elle vérifie l'équation de Schrodinger indépendante du temps :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi = E \psi(x) \right]; \quad \left[\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) \psi(x) = 0 \right]$$

$$\left[\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k^2 \psi(x) = 0 \right] \quad \text{Avec} \quad \left[k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) \right]$$

b1) Region (1) Si $x < 0$, $V=0$, PARTICULE LIBRE:

La particule libre vérifie une équation de Schrödinger stationnaire

$$\left[\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi(x) = 0 \right] \quad \text{On pose } k^2 = k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$$

La solution générale s'écrit alors :

$$\psi_1(x) = A \exp(ik_1 x) + B \exp(-ik_1 x) \quad \text{POUR } x < 0$$

La Solution Globale : $\Psi_1(x < 0, t) = A \exp(i(k_1 x - \omega t)) + B \exp(-i(k_1 x + \omega t))$

$$\psi_i(x) = A \exp(ik_1 x) ; \quad \Psi_i(x, t) = A \exp(i(kx - \omega t)) \quad \text{ONDE INCIDENTE}$$

$$\psi_r(x) = A \exp(-ik_1 x) ; \quad \Psi_r(x, t) = B \exp(-i(kx - \omega t)) \quad \text{ONDE REFLECHIE}$$

Lorsque la particule arrive sur la marche en $x=0$, elle peut être réfléchiée, ou être transmise, $\Psi_r(x, t) = B \exp(-i(kx - \omega t))$ est la fonction d'onde associée à la particule réfléchiée par la marche

b2) region (2) Si $x > 0$, $V=V_0$, PARTICULE LIÉE

$$\left[\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) \psi(x) = 0 \right], \quad \text{On aura alors : } \left[\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + k_2^2 \psi(x) = 0 \right]$$

$$\left[k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) \right]$$

La solution générale s'écrit alors :

$$\psi_2(x) = C \exp(ik_2 x) + D \exp(-ik_2 x) \quad \text{POUR } x > 0$$

$$\Psi_2(x, t) = C \exp(i(kx - \omega t)) + D \exp(-i(kx + \omega t))$$

$C \exp(i(kx - \omega t))$ = Onde qui se propage dans le sens des x croissant, elle représente l'ONDE TRANSMISE par l'interface $x=0$

$D \exp(-i(kx + \omega t))$ = onde, qui se propage dans le sens des x décroissant, correspondant à une source à $-\infty$, physiquement elle n'existe pas, donc $D=0$.

CONCLUSION:

$$\Psi_1(x < 0, t) = A \exp(i(k_1 x - \omega t)) + B \exp(-i(k_1 x + \omega t))$$

$$\Psi_2(x > 0, t) = C \exp(i(k_2 x - \omega t))$$

CONDITIONS AUX LIMITES : raccordement en $x=0$

La fonction d'onde et sa dérivée première doivent être continues en $x=0$

$$\Psi_1(x = 0^-, t) = \Psi_2(x = 0^+, t) \quad \rightarrow \quad A + B = C$$

$$\Psi'_1(x = 0^-, t) = \Psi'_2(x = 0^+, t) \quad \rightarrow \quad (A - B)k_1 = Ck_2$$

$$B = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} A = r A \quad C = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} A = t A$$

Coefficient de réflexion en amplitude $r = \frac{B}{A} = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}$

Coefficient de transmission en amplitude $t = \frac{C}{A} = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}$

DENSITÉ DE PROBABILITÉ $\rho = |\Psi(x, t)|^2 = \rho(x)$

Pour $x < 0$ $\rho = |\Psi_1(x, t)|^2 = \rho_1(x < 0)$

$$\psi_1(x) = A \exp(ik_1x) + B \exp(-ik_1x) = A(\exp(ik_1x) + r \exp(-ik_1x))$$

$$\rho_1(x) = |\psi_1(x)|^2 = |A|^2(1 + |r|^2 + 2r \cos(2k_1x))$$

On pose $\rho_0 = |A|^2 =$ densité de probabilité de l'onde incidente

$$\rho_{1min} < \rho_1(x < 0) < \rho_{1Max}$$

$\rho_1(x < 0)$ oscille entre ρ_{1min} et ρ_{1Max} On pose $R = |r|^2$

$$\rho_{1min} = \rho_0(1 - 2\sqrt{R} + R) = \rho_0(1 - \sqrt{R})^2 \cdot \rho_{1Max} = \rho_0(1 + 2\sqrt{R} + R) = \rho_0(1 + \sqrt{R})^2$$

Contraste des interférences $\Gamma = \frac{\rho_{1Max} - \rho_{1min}}{\rho_{1Max} + \rho_{1min}} = \frac{2\sqrt{R}}{1 + R}$

Pour $x > 0$ $\rho_2(x > 0) = |\psi_2(x)|^2 = |C|^2 = \rho_0 |t|^2$ $\rho_2 = \left(\frac{2k_1}{k_1 + k_2}\right)^2$

CONCLUSION :

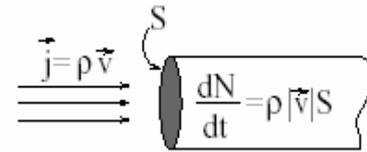
dans la région (1), il y a interférence entre l'onde incidente et l'onde réfléchie, ρ_1 oscille entre ρ_{1min} et ρ_{1Max}

La particule est transmise à travers l'interface $x=0$ avec une probabilité de présence non nulle ρ_2 .

Densité de courant de probabilité : $\vec{J} = \rho \vec{V} = |\Psi|^2 \frac{\vec{p}}{m}$

Soit D= débit des particule à travers S

dN=Ddt nombre de particule traversant S pendant dt



$D = \frac{dN}{dt} = \iint \rho \vec{V} d\vec{S} = \iint \vec{J} d\vec{S}$ flux en (s^{-1}), débit des particule à travers S, Taux de Comptage dans un Détecteur, exposé à un flux de particules, dont la densité de courant de probabilité est $\vec{J} = \rho \vec{V}$, c'est une grandeur mesurable.

Onde incidente $\vec{J}_i = |\Psi_i(x, t)|^2 \frac{\hbar \vec{k}_1}{m} = |A|^2 \frac{\hbar \vec{k}_1}{m} = \rho_0 \frac{\hbar \vec{k}_1}{m}$

Onde réfléchie $\vec{J}_r = -|\Psi_r(x, t)|^2 \frac{\hbar \vec{k}_1}{m} = -|B|^2 \frac{\hbar \vec{k}_1}{m} = -|r|^2 \rho_0 \frac{\hbar \vec{k}_1}{m}$

Onde Transmise $\vec{J}_t = |\Psi_t(x, t)|^2 \frac{\hbar \vec{k}_2}{m} = |C|^2 \cdot \frac{\hbar \vec{k}_2}{m} = |t|^2 \cdot \rho_0 \frac{\hbar \vec{k}_2}{m}$

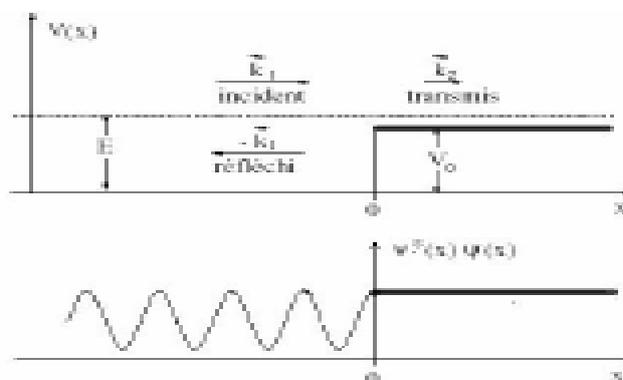
COEFFICIENT DE REFLEXION $R = \frac{\|\vec{J}_r\|}{\|\vec{J}_i\|} = |r|^2 = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2 \leq 1$

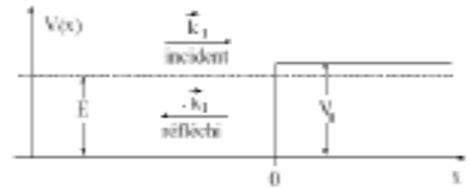
COEFFICIENT DE TRANSMISSION $T = \frac{\|\vec{J}_t\|}{\|\vec{J}_i\|} = \frac{k_2}{k_1} |t|^2 = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2} \leq 1$ **R+T=1**

REMARQUE : Cette relation signifie qu'on a conservation du flux incidents des particules, chaque particule incidente ne peut être que réfléchie ou transmise ; cette situation est similitude à la conservation de l'énergie en MC :

$D_i = D_r + D_t$

Dans une situation analogue en mécanique classique, la particule serait toujours transmise, alors qu'en mécanique quantique elle a une probabilité non nulle d'être réfléchie





1.3 2^{ème} Cas: $E < V_0$

a) ETUDE CLASSIQUE

La region (2) est une zône interdite pour la particule, impossible de se retrouver car $E - V_0 = E_c < 0$, absurde! La particule rebondit élastiquement à la discontinuité et repart avec la même vitesse.

b) ETUDE QUANTIQUE

POUR $x < 0$ $\psi_1(x < 0) = A \exp(ik_1x) + B \exp(-ik_1x)$

POUR $x > 0$ $V(x > 0) = V_0 > E$

$$\left[\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E) \psi(x) = 0 \right] \text{ On aura Alors } \left[\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - \beta^2 \psi(x) = 0 \right]$$

$$\beta^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E), \quad \beta = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)} > 0$$

$$\psi_2(x > 0) = C \exp(-\beta x) + D \exp(\beta x)$$

Le terme $D \exp(\beta x)$ diverge si x tend vers l'infini sauf si $D=0$!

Donc $\psi_2(x > 0) = C \exp(-\beta x)$

$\Psi_2(x > 0, t) = C \exp(-\beta x) \exp(-i\omega t)$ **ONDE EVANESCENTE**

Il n'y a pas d'onde progressive transmise dans la région (2)

Si $x < 0$ $\psi_1(x < 0) = A \exp(ik_0x) + B \exp(-ik_0x)$ $k_0 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE} > 0$

Si $x > 0$ $\psi_2(x > 0) = C \exp(-\beta x)$ $\beta = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)} > 0$

CONDITIONS AUX LIMITES EN $x=0$

$$\psi_1(x = 0^-) = \psi_2(x = 0^+)$$

$$A + B = C$$

$$\psi_1'(x = 0^-) = \psi_2'(x = 0^+)$$

$$(A - B)k_0 = i\beta C$$

$$B = \frac{k_0 - i\beta}{k_0 + i\beta} A = r A$$

$$C = \frac{2k_0}{k_0 + i\beta} A = t A$$

$$r = \frac{B}{A} = \frac{k_0 - i\beta}{k_0 + i\beta}, \quad |r| = 1 \quad t = \frac{C}{A} = \frac{2k_0}{k_0 + i\beta}, \quad |t| \neq 0$$

DENSITE DE COURANT DE PROBABILITE \vec{j} :

Onde incidente $\vec{j}_i = |\psi_i(x)|^2 \frac{\hbar \vec{k}_1}{m} = |A|^2 \frac{\hbar \vec{k}_1}{m} = \rho_0 \frac{\hbar k_0}{m} \vec{e}_x$

Onde réfléchie $\vec{j}_r = -|\psi_r(x, t)|^2 \frac{\hbar \vec{k}_1}{m} = -|B|^2 \frac{\hbar k_0}{m} \vec{e}_x = -|r|^2 \rho_0 \frac{\hbar \vec{k}_1}{m}$

On a $|r|^2=1$ donc $\vec{j}_r = -\vec{j}_i$ on a **R=1** alors **T=0**

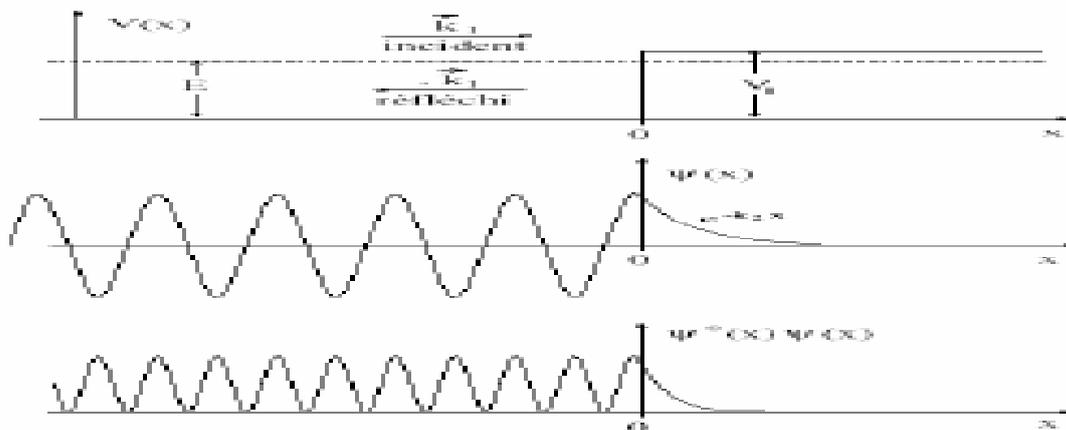
En effet : $C \neq 0$, $\psi_2(x > 0) = C \exp(-\beta x)$

$\rho_2(x > 0) = |C|^2 \exp(-2\beta x) = \rho(x=0) \exp(-\frac{x}{\delta})$ Onde évanescence

Pas de vecteur d'onde dans la région (2), pas d'impulsion :

$$\vec{p} = m\vec{V} = \hbar\vec{k} = \vec{0}$$

Comme en MC, la particule est toujours réfléchi néanmoins, il existe une onde du type évanescence, qui montre que la particule a une probabilité non nulle de se trouver dans la région (2), probabilité qui décroît exponentiellement en fonction de x, c'est analogue à une réflexion métallique en électromagnétisme et optique



REMARQUE: Le coefficient R dépend de la valeur de E par rapport à V_0

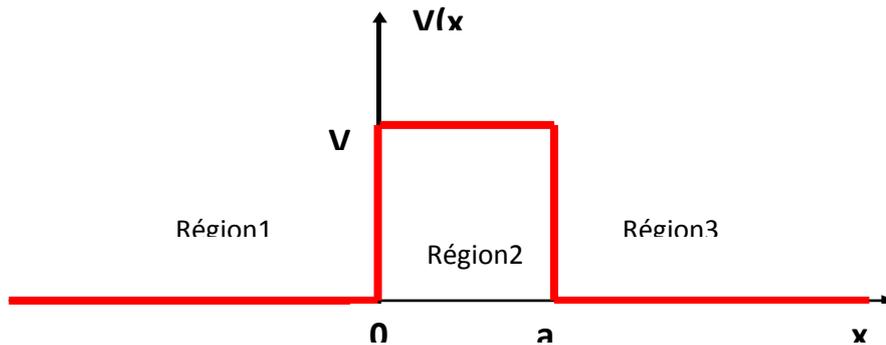
Si $E < V_0$ $R=1$, $T=0$,

Si $E < V_0$ $R = \left[\frac{1 - \sqrt{1 - \left(\frac{V_0}{E}\right)^2}}{1 + \sqrt{1 - \left(\frac{V_0}{E}\right)^2}} \right]^2$; **T=1-R**

II- BARRIERE DE POTENTIEL - EFFET TUNNEL

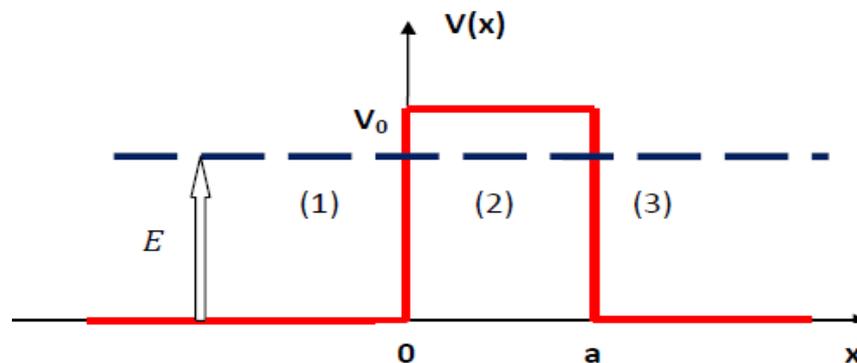
Soit une particule "incidente" d'énergie E venant des x négatifs et se dirigeant vers les x positifs. Cette particule rencontre une barrière de potentiel entre $x=0$ et $x=a$ de hauteur V_0 de finie par :

$$\left\{ \begin{array}{ll} V(x) = 0 & \text{si } x < 0 \\ V(x) = V_0 & \text{si } 0 < x < a \\ V(x) = 0 & \text{si } x > a \end{array} \right.$$



Nous devons considerer trois régions et deux cas, selon que E est supérieure ou inférieure à la hauteur de la barriere V_0 .

2.1 CAS $E < V_0$ EFFET TUNNEL



a) ETUDE CLASSIQUE:

La barrière de potentiel V_0 est infranchissable pour la particule classique, qui est toujours réfléchiée dans la region (1).

b) ETUDE QUANTIQUE: En écrivant l'ES dans les trois regions (1), (2) et (3), on montre facilement que les fonctions d'ondes associés à la particule dans ces regions s'écrivent.

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{si } x < 0 \quad \psi_1(x) = A_1 \exp(ik_1x) + B_1 \exp(-ik_1x) \\ \text{si } 0 < x < a \quad \psi_2(x) = A_2 \exp(-\beta x) + B_2 \exp(\beta x) \\ \text{si } x > a \quad \psi_3(x) = A_3 \exp(ik_3x) + B_3 \exp(-ik_3x) \end{array} \right\} \quad (B_3=0)$$

$$k_1 = k_3 = k_0 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE} > 0 \quad \text{et} \quad \beta = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)} > 0$$

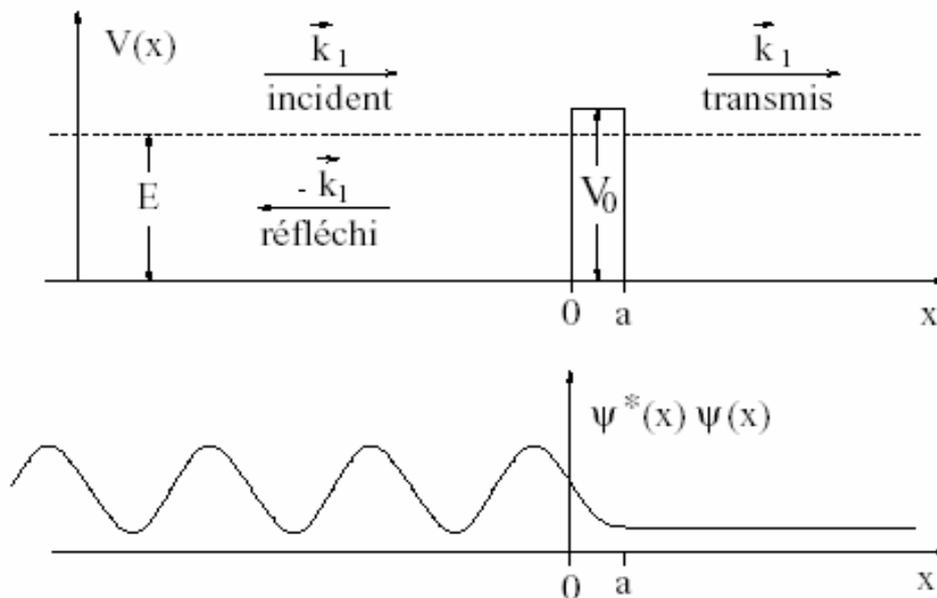
Les conditions aux limites en $x=0$ et $x=a$ donnent après un calcul laborieux!

$$\left\{ \begin{array}{l} R = \left| \frac{B_1}{A_1} \right|^2 = \frac{(k_0^2 + \beta^2)^2 \operatorname{sh}^2(\beta a)}{4k_0^2 \beta^2 + (k_0^2 + \beta^2)^2 \operatorname{sh}^2(\beta a)} \\ T = \left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2 = \frac{4k_0^2 \beta^2}{4k_0^2 \beta^2 + (k_0^2 + \beta^2)^2 \operatorname{sh}^2(\beta a)} \end{array} \right.$$

$$\beta a = \frac{a}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)} > 0 \quad \alpha = \frac{E}{V_0} : \quad \text{si } \beta a \gg 1, T = 16 \alpha (1 - \alpha) e^{-2\beta a}$$

CONCLUSION:

Contrairement aux prévisions classiques, la particule a une probabilité non nulle de franchir la barrière de potentiel : c'est **l'effet TUNNEL**; cet effet est une réalité physique et intervient dans l'interprétation de beaucoup de phénomènes: Radioactivité α ; Microscope effet tunnel , passage des électrons d'un atome à un autre



2.2 Cas $E > V_0$ TRANSFERT RESONNANT

a) **ETUDE CLASSIQUE:** $E_C = E - V_0 > 0$, alors la vitesse existe!

$$v_1 = v_3 > v_2$$

Dans ce cas, on a toujours en MC, une transmission de la particule avec ralentissement dans la region (2)

b) **ETUDE QUANTIQUE:** En écrivant l'ES dans les trois regions (1), (2) et (3), on montre facilement que les fonctions d'ondes associés à la particule dans ces regions s'écrivent.

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{si } x < 0 \quad \psi_1(x) = A_1 \exp(ik_1x) + B_1 \exp(-ik_1x) \\ \text{si } 0 < x < a \quad \psi_2(x) = A_2 \exp(-ik_2x) + B_2 \exp(ik_2x) \\ \text{si } x > a \quad \psi_3(x) = A_3 \exp(ik_3x) + B_3 \exp(-ik_3x) \end{array} \right\} \quad (B_3 = 0)$$

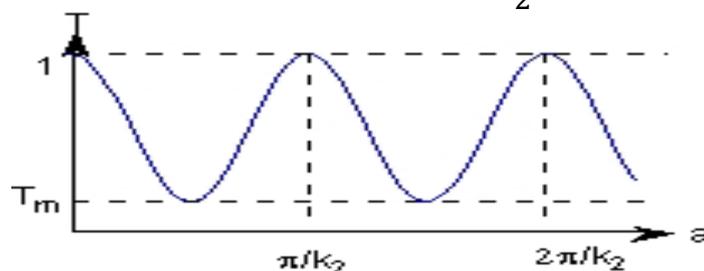
$$k_1 = k_3 = k_0 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE} > 0 \quad ; \quad k_2 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)} > 0$$

L'exploitation des conditions aux limites en $x=0$ et $x=a$ donnent après calcul les coefficients de réflexion et de transmission

$$\left\{ \begin{array}{l} R = \left| \frac{B_1}{A_1} \right|^2 = \frac{(k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2(\beta a)}{4k_1^2 k_2^2 + (k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2(\beta a)} \\ T = \left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2 = \frac{4k_0^2 k_2^2}{4k_1^2 \beta^2 + (k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2(\beta a)} \end{array} \right.$$

On remarque qu'il y a transmission complète ($T=1$), ssi $\sin(k_2 a) = 0 \rightarrow k_2 a = n\pi$, pour $a = \frac{n\pi}{k_2}$ le transfert est maximal ou résonant

$$T = T_{\min} \text{ ssi } \sin(k_2 a) = \pm 1 \rightarrow k_2 a = (n + \frac{1}{2})\pi \quad T_{\min} = \frac{4E(E-V_0)}{(2E-V_0)^2}$$



2.3 TRANSMISSION DE LA BARRIÈRE EN FONCTION DE E

L'expression de coefficient T en fonction de E peut s'écrire sous la forme:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{1er CAS } E < V_0 ; T = \frac{4E(V_0 - E)}{4E(V_0 - E) + V_0^2 sh^2(\beta a)} = \left[1 + \frac{sh^2(\beta a)}{4 \frac{E}{V_0} (1 - \frac{E}{V_0})} \right]^{-1} \\ \beta a = \frac{a}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)} = \frac{a}{\hbar} \sqrt{2mV_0} (1 - \frac{E}{V_0})^{1/2} \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{2eme CAS } E > V_0 ; T = \frac{4E(E - V_0)}{4E(E - V_0) + V_0^2 sin^2(k_2 a)} = \left[1 + \frac{sin^2(k_2 a)}{4 \frac{E}{V_0} (\frac{E}{V_0} - 1)} \right]^{-1} \\ k_2 a = \frac{a}{\hbar} \sqrt{2m(E - V_0)} = \frac{a}{\hbar} \sqrt{2mV_0} (\frac{E}{V_0} - 1)^{1/2} \end{array} \right.$$

Variation de coefficient T Pour des Particules à travers Une barrière de Potentiel en fonction du rapport

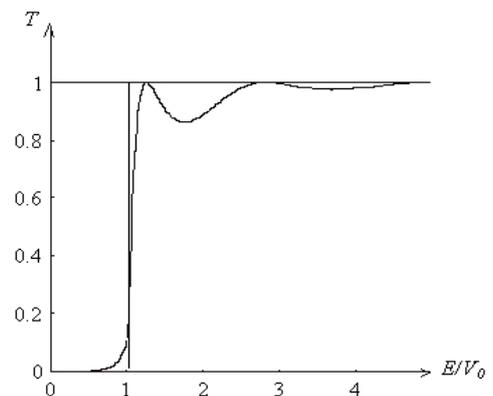
$$\alpha = \frac{E}{V_0}$$

COMMENTAIRES :

On remarque que dans le cas où $E < V_0$ (effet TUNNEL), les coefficients R et T sont bien définis ce qui prouve que le paquet d'ondes incident associé à la particule se scinde en un paquet réfléchi et un paquet transmis dont les intensités ne sont jamais nulles.

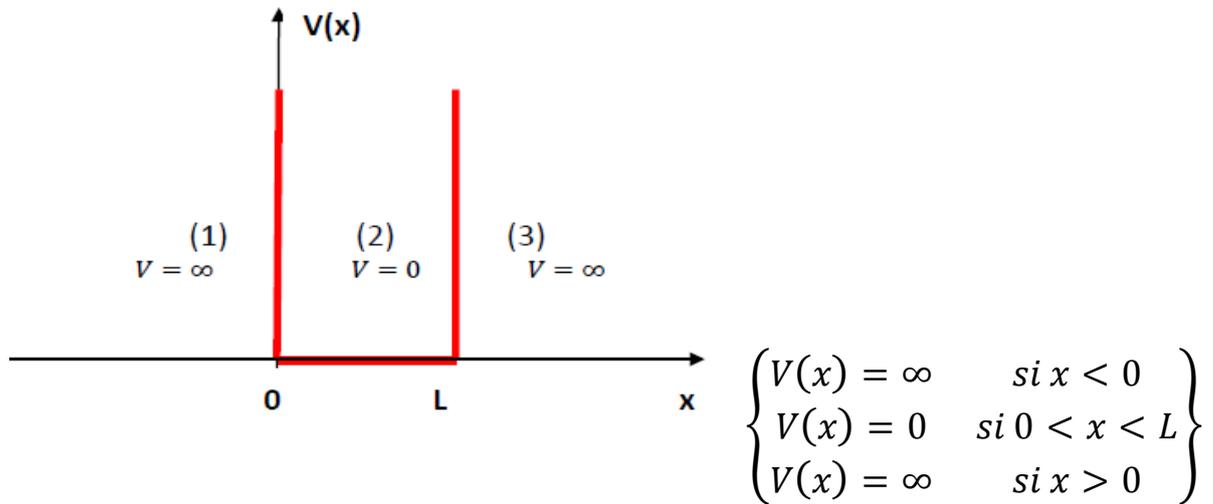
Pour $E > V_0$, T peut atteindre l'unité pour certaines valeurs de l'énergie et on assiste dans ce cas à une transmission totale = phenomena de resonance.

Au fur et à mesure que E augmente: T oscille entre T=1 et un minimum de l'ordre de $T_{min} = \frac{4E(E-V_0)}{(2E-V_0)^2}$, l'effet est d'autant plus marquée lorsque la barrière est très élevée (ou très épaisse) et que l'énergie cinétique dans la région est petite.



III- PUIITS DE POTENTIEL INFINI

Il n'est pas rare qu'en physique, les objets étudiés soient piégés dans un volume délimité : par exemple, les molécules d'une phase gazeuse ou liquide peuvent être contenues dans un récipient clos, les électrons de conduction sont confinés dans l'échantillon conducteur.. Afin d'étudier théoriquement de tels systèmes, on considère une situation modèle : le puits de potentiel infiniment profond, en se limitant à une approche unidimensionnelle.



Pour $x < 0$ et $x > L$, il est impossible de trouver la particule, les parois sont rigides et imperméables aux particules.

CONDITIONS AUX LIMITES : $\left\{ \begin{array}{l} \psi(x < 0) = 0 = \psi(x > L) \\ \psi(x = 0^+) = 0 = \psi(x = L^-) \end{array} \right\}$

Pour $0 < x < L$: $\left[\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi(x) = 0 \right]$ On pose $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

$$\psi(x) = A \exp(ikx) + B \exp(-ikx)$$

$$\text{En } x = 0 \quad A + B = 0 \quad B = -A \neq 0$$

$$\text{En } x = L \quad A \exp(ikL) + B \exp(-ikL) = 0 \quad 2iA \sin(kL) = 0$$

QUANTIFICATION DES MODES :

Pour satisfaire les conditions aux limites, on doit avoir $\sin(kL) = 0$!

$$\text{Alors, } \exists n \in \mathbb{N} \quad (kL) = n\pi \Rightarrow k_n = \frac{n\pi}{L}$$

$$\psi(x) = A \left(\exp\left(i \frac{n\pi}{L} x\right) - \exp\left(-i \frac{n\pi}{L} x\right) \right) = C \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right)$$

DENSITE DE PROBABILITE :

$$\rho(x) = |\psi(x)|^2 = |C|^2 \sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right) = \rho_0 \sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$$

CN $\int_0^L \rho_0 \sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right) dx = 1 \Rightarrow \rho_0 = |C|^2 = \frac{2}{L}$

QUANTIFICATION DE L'ENERGIE DE LA PARTICULE :

D'après $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ et $k = k_n = \frac{n\pi}{L}$ on trouve $E = E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$

Niveau fondamental $n=1$: $E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$; $\psi_1(x) = C \sin\left(\frac{\pi}{L}x\right)$

1^{er} Niveau excité $n=2$: $E_2 = \frac{4\pi^2\hbar^2}{2mL^2} = 4E_1$ $\psi_2(x) = C \sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right)$

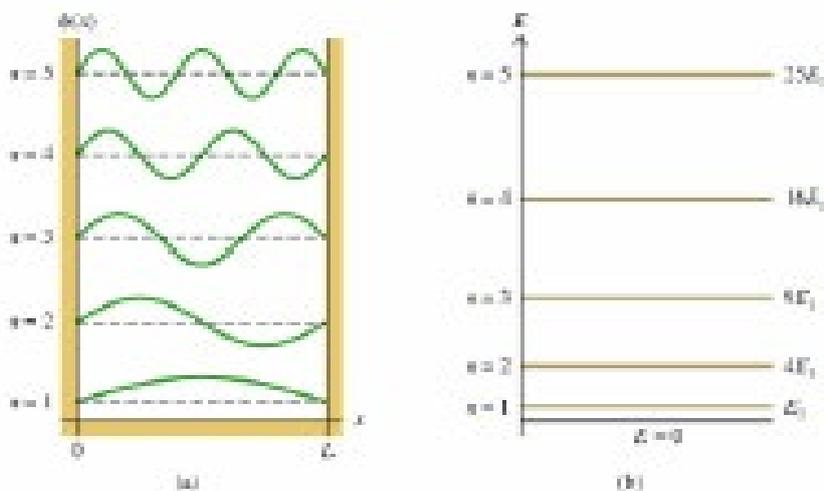
Pour le mode n $E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2} = n^2E_1$ $\psi_n(x) = C \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$

Analogie avec les ondes stationnaires dans une corde vibrante :

A l'intérieur du puits, la particule est dans des états stationnaires, on peut établir une analogie avec la corde vibrante : $\lambda = \lambda_{DB} = \frac{h}{p}$

D'après l'étude des ondes stationnaires on a $L = n \frac{\lambda}{2}$

$$L = n \frac{\lambda_{DB}}{2} = \frac{nh}{2p} \quad \text{D'où} \quad p = \frac{nh}{2L} = \frac{n\pi\hbar}{L} \quad E = \frac{p^2}{2m} = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2} = n^2E_1$$



IV ETATS NON STATIONNAIRES D'UNE PARTICULE

4.1 EQUATION SE SCHRÖDINGER ESDT

si la particule se déplace suivant une seule direction de l'espace ,
alors $\Psi(M, t) = \Psi(x, t)$ qui vérifie L' **Equation ESDT à 1D**:

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

On régime non stationnaire on ne peut pas faire la séparation des variables, la particule évolue dans le temps et dans l'espace, son énergie varie dans le temps alors la densité de probabilité de présence est fonction dans le temps.

La résolution de l'équation ES est plus compliquée dans ce cas, l'ES est une équation aux dérivées partielles, il y a plusieurs méthodes envisageables selon le cas étudié.

4.2 COMBINAISON LINEAIRE D'ETATS STATIONNAIRES

Toute fonction d'onde non stationnaire peut être écrite comme une combinaison linéaire des fonctions d'onde stationnaires : d'après la linéarité de l'équation de Schrödinger.

L'ensemble des fonctions d'onde stationnaires sont des fonctions propres constituent une base (**HILBERTIENNE**) de l'espace des fonctions d'onde, qui permet d'écrire la fonction d'onde sous la forme d'une série convergente lorsque la fonction d'onde est correctement normalisée.

$$\Psi(x, t) = \sum \psi_n(x) \exp\left(-\frac{E_n}{\hbar} t\right)$$

$$\{\{E_n = \text{valeur propre}\} = \text{Spectre} \quad \{\psi_n = \text{vecteur propre}\} = \text{Base}\}$$

$$\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n = \text{équation aux valeurs propres}$$

$$\hat{H} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V \right] \text{opérateur HAMILTONIEN}$$

4.3 EXEMPLE : Densité de probabilité de présence :

a) Fonction d'onde non stationnaire

Imaginons qu'une particule quantique, piégée dans un puits de potentiel INFINI, soit préparée à l'instant initial $t = 0$ dans un état quantique formé par une superposition d'états stationnaires :

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

Cette expression est une combinaison linéaire de solutions de l'équation de Schrödinger. Or, cette équation est une équation différentielle linéaire. On peut montrer, et nous l'admettrons, que cette expression constitue une solution acceptable de l'équation de Schrödinger, pourvu qu'elle soit correctement normalisée :

$$\sum_{n=1}^{+\infty} |c_n(t = 0)|^2 = 1 \quad \text{CN à } t=0$$

On souhaite déterminer l'expression de la fonction d'onde $\Psi(x, t > 0)$ de la particule quantique à un instant ultérieur. On recherche une solution de l'équation de Schrödinger sous la forme de la série suivante :

$$\Psi(x, t > 0) = \sum_{n=1}^{+\infty} c_n(t) \varphi_n(x) \quad \text{Avec} \quad \hat{H} \varphi_n(x) = E_n \varphi_n(x)$$

avec $\sum_{n=1}^{+\infty} |c_n(t > 0)|^2 = 1$ CN à $t > 0$;

On injecte cette expression dans **ESDT**: $\hat{H} \Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t}$

$$\hat{H} \Psi(x, t) = \hat{H} \left(\sum_{n=1}^{+\infty} c_n(t) \varphi_n(x) \right) = \sum_{n=1}^{+\infty} c_n(t) \hat{H} \varphi_n(x) = \sum_{n=1}^{+\infty} c_n(t) E_n \varphi_n(x)$$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = i\hbar \frac{\partial (\sum_{n=1}^{+\infty} c_n(t) \varphi_n(x))}{\partial t} = \left(\sum_{n=1}^{+\infty} i\hbar \frac{dc_n(t)}{dt} \varphi_n(x) \right)$$

$\{\varphi_n(x)\}$ = base hilbertienne de l'espace des fonctions d'onde

$$i\hbar \frac{dc_n(t)}{dt} = E_n c_n(t), \quad \text{on obtient l'équation : } \frac{dc_n(t)}{dt} + i \frac{E_n}{\hbar} c_n(t) = 0$$

La solution s'écrit $c_n(t) = c_n(t = 0) \exp \left(-i \frac{E_n}{\hbar} t \right)$

$$\Psi(x, t > 0) = \sum_{n=1}^{+\infty} c_n(t = 0) \varphi_n(x) \exp \left(-i \frac{E_n}{\hbar} t \right)$$

Toute fonction d'onde non stationnaire peut être écrite comme une combinaison linéaire des fonctions d'onde stationnaires :

b) Exemple d'une combinaison de deux états stationnaires

La Figure ci-dessous représente un exemple particulier de l'évolution temporelle d'une fonction d'onde construite comme une combinaison linéaire de deux fonctions d'onde stationnaires :

$$\Psi(x, t = 0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \varphi_1(x) + \frac{1}{\sqrt{2}} \varphi_3(x)$$

En vertu du résultat établi précédemment, on peut écrire la fonction d'onde à un instant quelconque ultérieur :

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \varphi_1(x) \exp\left(-i \frac{E_1}{\hbar} t\right) + \frac{1}{\sqrt{2}} \varphi_3(x) \exp\left(-i \frac{E_3}{\hbar} t\right)$$

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \exp\left(-i \frac{E_1}{\hbar} t\right) [\varphi_1(x) + \varphi_3(x) \exp\left(-i \frac{E_3 - E_1}{\hbar} t\right)]$$

On peut calculer la densité de probabilité de présence :

$$\rho(x, t) = |\Psi(x, t)|^2 = \frac{1}{2} [\varphi_1^2(x) + \varphi_3^2(x) + 2\varphi_1(x)\varphi_3(x) \cos\left(\frac{E_3 - E_1}{\hbar} t\right)]$$

La densité de probabilité de présence dépend explicitement du temps : il s'agit bien d'un état non stationnaire. Elle oscille périodiquement dans le

temps à la fréquence : $\nu = \frac{E_3 - E_1}{h}$;

La période correspondante est $T = \frac{1}{\nu} = \frac{h}{E_3 - E_1}$; en utilisant les

expressions de $E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$ on obtient $T = \frac{ma^2}{h}$

La superposition de deux états stationnaires d'énergie E_1 et $E_2 > E_1$ conduit à une probabilité de présence qui oscille à la fréquence ν vérifiant

$$\text{la relation suivante : } h\nu = E_2 - E_1$$

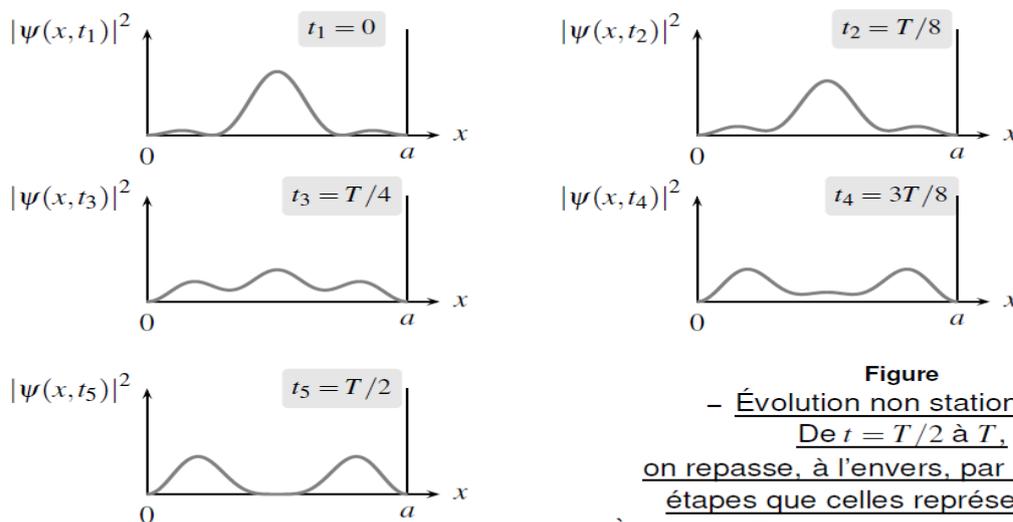


Figure
- Évolution non stationnaire.
De $t = T/2$ à T ,
on repasse, à l'envers, par les mêmes
étapes que celles représentées ici.
À l'instant T , on retrouve la fonction d'onde
initiale. ($T = ma^2/h$)