

# **Chapitre III :**

# **Particule dans un potentiel stationnaire**

## **Sommaire**

- 1- Résolution de l'équation de Schrödinger
  - 2- Analogie optique
  - 3- Marche de potentiel
  - 4- Barrière de potentiel
  - 5- Puits de potentiel
- Travaux dirigés**

En mécanique classique et lorsque les forces s'exerçant sur une particule dérivent d'un potentiel, les courbes d'énergie potentielle constituent une approche élégante pour déterminer au moins de façon qualitative le mouvement de la particule et ses principales caractéristiques : En particulier lorsque la particule se déplace suivant un axe  $\overline{OX}$  ou dans un champ de forces centrales, la connaissance des courbes  $V(\mathbf{x})$  ou  $V(\mathbf{r})$  nous permettent de décrire complètement le mouvement de cette particule sans résoudre l'équation fondamentale de la dynamique et donc sans faire appel à une mathématique élaborée. Ainsi, l'analyse de ces courbes permet de déterminer les positions d'équilibre stables et instables qui correspondent aux extrema du potentiel, de fixer les limites du mouvement, d'en connaître les zones interdites, d'en déduire les principales caractéristiques et d'atteindre la nature des trajectoires correspondant à une énergie totale fixée.

En mécanique quantique, l'analyse des courbes de potentiel revêt également une importance capitale dans l'étude d'une particule en mouvement dans un champ de forces extérieur dérivant d'un potentiel indépendant du temps et fonction uniquement de la position. On verra en particulier que lorsque le potentiel  $V(\vec{r})$  présente des discontinuités et qu'il est constant entre ces discontinuités, la résolution de l'équation de Schrödinger se simplifie considérablement et ses solutions permettent d'avoir une vision simple de problèmes physiques réels dont la résolution exacte est complexe et élaborée.

## I. Résolution de l'équation de Schrödinger

On considère une particule de masse  $m$  se déplaçant dans un potentiel  $V(\vec{r})$  indépendant du temps et on se propose de déterminer sa fonction d'onde  $\psi(\vec{r}, t)$ .

### 1.1- Séparation des variables

L'équation de Schrödinger s'écrit :

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}, t) \quad (3.1)$$

Comme les variables  $\vec{r}$  et  $t$  sont séparés dans les deux membres, on peut, de façon générale, chercher des solutions de la forme d'un produit d'une fonction d'espace  $\phi(\vec{r})$  et d'une fonction dépendant du temps  $\chi(t)$ , soit :

$$\psi(\vec{r}, t) = \phi(\vec{r})\chi(t) \quad (3.2)$$

En portant cette expression dans l'équation de Schrödinger, il vient :

$$i\hbar \phi \frac{\partial \chi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \chi \Delta \phi + V \phi \chi \quad (3.3)$$

En divisant les deux membres de l'équation par le produit  $\phi\chi$ , on obtient l'égalité :

$$i\hbar \frac{1}{\chi} \frac{d\chi}{dt} = \frac{\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \right] \phi}{\phi} \quad (3.4)$$

Le membre de gauche est une fonction du temps tandis que le membre de droite est fonction uniquement de la position. Pour qu'il y ait égalité quelque soient  $(\vec{r})$  et  $t$  il faut que les deux membres soient constants. Cette constante a les dimensions d'une énergie qu'on notera  $E$ . On aura alors les deux équations suivantes :

$$i\hbar \frac{d\chi}{d\chi} = E dt \quad (3.5)$$

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \right] \phi = E \phi \quad (3.6)$$

La première équation se résout simplement et a pour solution :

$$\chi(t) = \chi(0) e^{-i(E/\hbar)t}$$

Ce qui donne pour  $\psi(\vec{r}, t)$

$$\psi(\vec{r}, t) = \phi(\vec{r}) e^{-i(E/\hbar)t} \quad (3.7)$$

La dépendance sinusoïdale indique que la particule a une énergie bien définie et que sa densité de probabilité de présence est indépendante du temps :

$$|\psi(\vec{r}, t)|^2 = |\phi(\vec{r})|^2 \quad (3.8)$$

On dit dans ce cas que la particule est dans des **états stationnaires** c'est à dire pour lesquels l'énergie  $E$  est constante.

On obtient ces états en résolvant **l'équation (3.6)** qui s'écrit aussi sous la forme :

$$\mathbf{H}\phi = E\phi \quad (3.9)$$

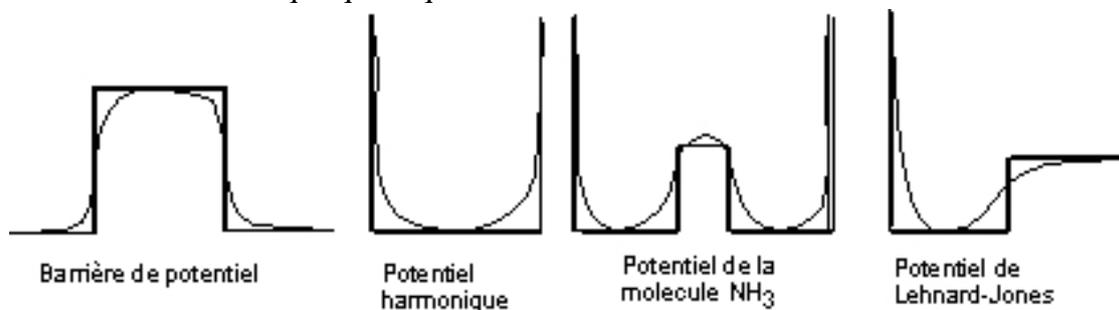
Où  $\mathbf{H}$  est l'opérateur hamiltonien ( $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V$ ) et  $\varphi$  tel que :

$$\int |\varphi(\vec{r})|^2 d^3r = 1 \tag{3.10}$$

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

### 1. 2. Modélisation de potentiels réels

A part les cas où le potentiel est nul ou constant, la situation la plus simple est celle où  $V(\vec{r})$  subit des discontinuités en restant constant entre deux discontinuités. La recherche des solutions pour de tels potentiels ne présente pas de difficultés mathématiques et cela permettra de modéliser des situations réelles qu'on peut approximer par de tels potentiels. La **figure 3.1** montre quelques exemples qui se rencontrent souvent en mécanique quantique.



**Figure 3.1** : Modélisation de potentiels réels

Pour simplifier le formalisme, on ne traitera dans la suite que des potentiels à une seule variable d'espace  $\mathbf{x}$ .

### 1. 3- Cas des potentiels pairs $V(x) = V(-x)$

Écrivons l'équation de Schrödinger pour  $x$  et pour  $-x$  :

On a :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + V(x)\varphi(x) = E \varphi(x) \tag{3.11}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi(-x)}{dx^2} + V(-x)\varphi(-x) = E \varphi(-x) \tag{3.12}$$

On remarque que  $\varphi(x)$  et  $\varphi(-x)$  sont solutions de la même équation différentielle linéaire ; elles sont donc identiques à un facteur multiplicatif près, soit :

$$\varphi(x) = \varepsilon \cdot \varphi(-x) \tag{3.13}$$

Cette relation est vraie pour toute valeur de  $x$  et en particulier lorsqu'on change  $x$  en  $-x$  donc :

$$\varphi(-x) = \varepsilon \varphi(x) \tag{3.14}$$

Si l'on remplace la relation (3.14) dans (3.13), il vient :

$$\varphi(x) = \varepsilon^2 \varphi(x) \tag{3.15}$$

ce qui implique que :  $\varepsilon = \pm 1$

$\varepsilon$  est appelée parité de la fonction :

- pour  $\varepsilon = 1$ , la fonction d'onde est une fonction paire, elle est dite symétrique.
- pour  $\varepsilon = -1$ , la fonction d'onde est une fonction impaire, elle est dite antisymétrique.

Ainsi, lorsque le potentiel est pair, l'ensemble des solutions possibles de l'équation de Schrödinger est constitué de deux systèmes : les solutions paires ou symétriques et les solutions impaires ou antisymétriques.

#### 1. 4. Conditions aux limites

Nous avons vu que la probabilité de trouver la particule en un point de l'espace est proportionnelle au module au carré  $|\Psi|^2$  de la fonction d'onde. Cette quantité doit donc être une fonction continue partout et notamment aux discontinuités du potentiel. Si  $|\Psi|^2$  est continue il est logique de supposer que  $\Psi(x)$  l'est aussi.

Par ailleurs, l'existence d'une dérivée seconde dans l'équation de Schrödinger implique d'un point de vue mathématique que la fonction d'onde n'a pas de discontinuité et par conséquent que sa dérivée première  $d\Psi(x)/dx$  est continue en tout point. On verra plus loin que cette condition peut également être déduite du courant de probabilité associé au mouvement de la particule.

Pour déterminer les relations donnant la quantification de l'énergie de la particule, on applique donc à la discontinuité de potentiel les deux conditions suivantes :

- Continuité de la fonction d'onde.
- Continuité de la dérivée première de la fonction d'onde.

#### 1. 5. Etats liés et états continus

Lorsque la particule reste confinée dans une région de l'espace, 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 se trouve dans des **états liés**.

Si la particule n'est pas confinée dans une région donnée, elle peut explorer tout l'espace et se trouver 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**.

## 2. Analogie optique

On sait que l'équation de Maxwell dans le vide s'écrit :

$$\left(\frac{1}{C^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta\right) \vec{E} = 0 \quad (3.16)$$

Lorsque la lumière se propage dans un milieu d'indice  $n$ , cette équation devient :

$$\left(\frac{n^2}{C^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta\right) \vec{E} = 0 \quad (3.17)$$

Cette équation admet, lorsque  $n$  est indépendant du temps, une solution de la forme :

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{\xi}(\vec{r}) e^{-i\omega t} \quad (3.18)$$

$\vec{\xi}(\vec{r})$  vérifiant l'équation :

$$\left(\Delta + \frac{n^2 \omega^2}{C^2}\right) \vec{\xi}(\vec{r}) = \vec{0} \quad (3.19)$$

En comparant cette équation avec l'équation de Schrödinger :

$$\left[\Delta + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V)\right] \varphi(\vec{r}) = 0 \quad (3.20)$$

On remarque que ces deux équations ont la même forme, ce qui suggère qu'on peut associer au problème de mécanique quantique un problème d'optique et réciproquement. La relation décrivant cette analogie est :

$$\frac{n\omega}{C} \leftrightarrow \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E - V)} \quad (3.20)$$

### 3. 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  $V_0$  (**fig. 3.2**) définie par :

$$V(x) = 0 \text{ pour } x < 0 \tag{3.22}$$

$$V(x) = V_0 \text{ pour } x > 0 \tag{3.23}$$

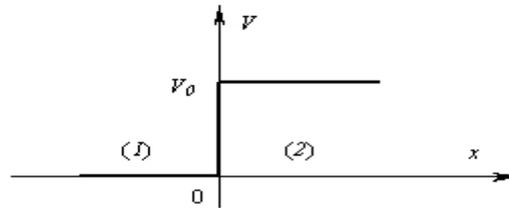


Figure 3.2 : Marche de potentiel

Nous devons considérer deux cas, suivant que  $E$  est supérieur ou inférieure à la hauteur de la marche  $V_0$ .

#### 3.1. Cas où $E > V_0$

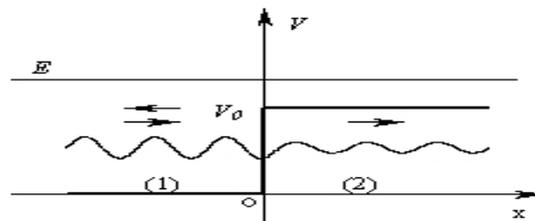


Figure 3.3 : Marche de potentiel ( $E > V_0$ )

##### 3.1.1. Etude classique

La particule d’énergie  $E$  à une vitesse  $\sqrt{2E/m}$  dans la **région (1)**, elle est ralentie à la discontinuité et prend la vitesse  $\sqrt{2(E - V_0)/m}$  dans la **région (2)**.

##### 3.1.2. Etude quantique

L’équation de Schrödinger peut s’écrire :

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) \varphi = 0 \tag{3.24}$$

On a alors dans les deux régions (1) et (2) :

Région (1) :  $\varphi_1'' + k_1^2 \varphi_1 = 0 \tag{3.25}$

Soit  $\varphi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + A_1' e^{-ik_1 x}$  avec  $k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$

Région (2) :  $\varphi_2'' + k_2^2 \varphi_2 = 0 \tag{3.26}$

Soit  $\varphi_2(x) = A_2 e^{ik_2 x} + A_2' e^{-ik_2 x}$  avec  $k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0)$

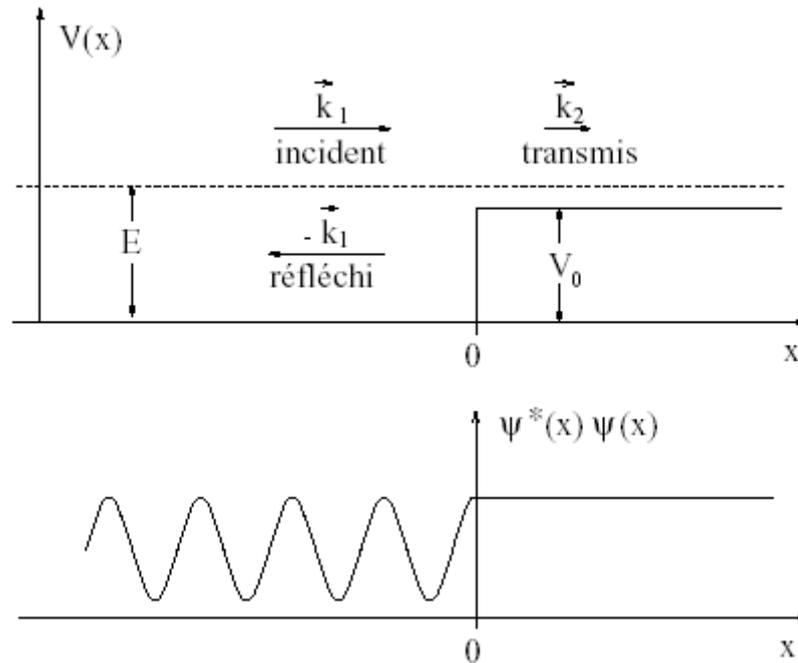
$A_1 e^{ik_1 x}$  représente l’onde incidente et  $A_1' e^{-ik_1 x}$  l’onde réfléchi par le saut de potentiel.

$A_2 e^{ik_2 x}$  représente l’onde transmise et  $A_2' e^{-ik_2 x}$  est une onde réfléchi qui reviendrait de l’infini, ce qui est impossible, donc  $A_2' = 0$ .

Les solutions dans les deux régions sont en définitive :

$$\varphi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + A_1' e^{-ik_1 x} \tag{3.27}$$

$$\varphi_2(x) = A_2 e^{ik_2 x} \tag{3.28}$$



Les conditions de continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée ( $\psi_1(0) = \psi_2(0)$  et  $\psi_1'(0) = \psi_2'(0)$ ) donnent :

$$\frac{A_1'}{A_1} = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \quad \text{et} \quad \frac{A_2}{A_1} = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} \quad (3.29)$$

On définit alors les coefficients de réflexion  $R$  et de transmission  $T$  de la particule par :

$$R = \left| \frac{A_1'}{A_1} \right|^2 \quad \text{et} \quad T = \left| \frac{A_2}{A_1} \right|^2$$

où  $V_{g1}$  et  $V_{g2}$  sont les vitesses de groupe associées aux paquets d'ondes dans les deux régions :

$$V_{g1} = \frac{\hbar k_1}{m} \quad \text{et} \quad V_{g2} = \frac{\hbar k_2}{m} \quad (3.31)$$

On reviendra sur le bien fondé de ces définitions de  $R$  et de  $T$  lors de l'étude du courant de probabilité.

On a alors :

$$R = \left( \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2 = 1 - \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2} \quad (3.32)$$

$$T = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2} \quad (3.33)$$

On vérifie bien que l'on a  $R + T = 1$ . Cette relation signifie qu'on a conservation du flux incident de particules : chaque particule incidente ne peut être que réfléchi ou transmise. Cette situation est similaire à la conservation de l'énergie en mécanique classique.

En conclusion on peut dire que contrairement aux prévisions classiques la particule a une probabilité non nulle de revenir en arrière (**fig. 3.3**).

### 3.1.3. Analogie optique

On a deux milieux d'indices  $n_1$  et  $n_2$  réels (réflexion vitreuse). L'onde incidente donne naissance à une onde réfléchi et à une onde transmise.

$R$  et  $T$  sont interprétés comme des probabilités de réflexion et de transmission de la particule par la barrière de potentiel. Par ailleurs

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad k_2 = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}$$

$$R = \frac{[\sqrt{2mE} - \sqrt{2m(E - V_0)}]^2}{[\sqrt{2mE} + \sqrt{2m(E - V_0)}]^2} = \left( \frac{1 - \sqrt{1 - \frac{V_0}{E}}}{1 + \sqrt{1 - \frac{V_0}{E}}} \right)^2$$

$$T = 1 - R = \frac{4\sqrt{1 - \frac{V_0}{E}}}{\left[1 + \sqrt{1 - \frac{V_0}{E}}\right]^2} \quad \text{ce qui permet l'interprétation de R et T.}$$

**3.2. Cas où  $0 \leq E \leq V_0$**

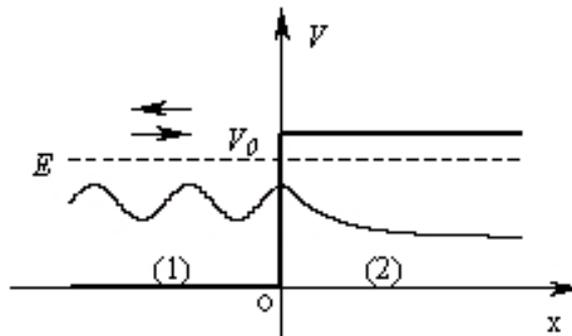


Figure 3.4 : Marche de potentiel ( $E < V_0$ )

**3.2.1. Etude classique :**

La particule a une vitesse  $\sqrt{2E/m}$  dans la **région (1)**, elle rebondit élastiquement à la discontinuité et repart avec une vitesse identique.

**3.2.2. Etude quantique :**

Les fonctions d'onde de la particule dans les deux régions sont données par :

$$\varphi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + A_1' e^{-ik_1 x} \quad (3.34)$$

$$\varphi_2(x) = B_2 e^{\rho_2 x} + B_2' e^{-\rho_2 x} \quad (3.35)$$

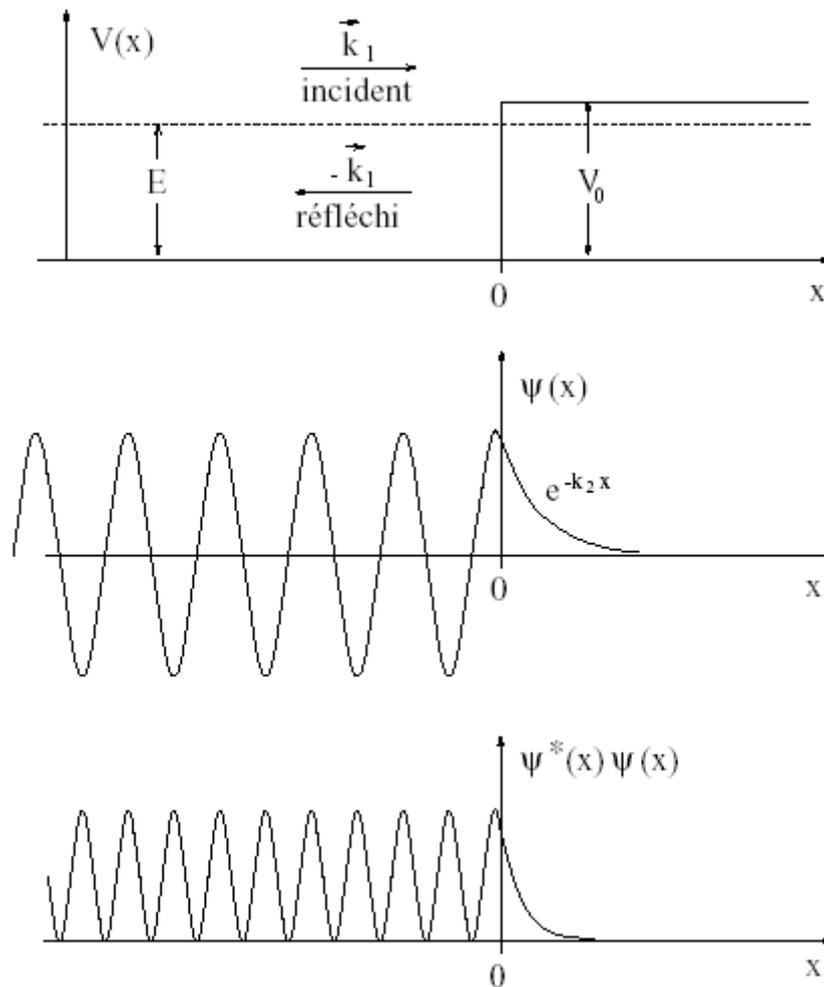
Où :

$$k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E \quad \text{et} \quad \rho_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) \quad (3.36)$$

Pour que  $\varphi_2(x)$  reste bornée lorsque  $x$  tend vers l'infini il faut que  $B_2 = 0$ , ce qui conduit à :

$$\varphi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + A_1' e^{-ik_1 x} \quad (3.34)$$

$$\varphi_2(x) = B_2' e^{-\rho_2 x} \quad (3.35)$$



Les mêmes conditions de quantification que précédemment donnent :

$$\frac{A_1'}{A_1} = \frac{k_1 - i\rho_2}{k_1 + i\rho_2} \quad \text{et} \quad \frac{B_2'}{A_1} = \frac{2k_1}{k_1 + i\rho_2} \tag{3.39}$$

Le coefficient de réflexion  $R$  vaut alors :

$$R = \left| \frac{A_1'}{A_1} \right|^2 = 1 \tag{3.40}$$

On doit donc avoir  $T = 0$ , cependant  $\left| \frac{B_2'}{A_1} \right|^2$  est différent de zéro, ce qui implique que la vitesse de groupe du paquet d'ondes est nulle dans la **région (2)**.

Comme en mécanique classique, la particule est toujours réfléchié néanmoins il existe une onde du type évanescence ( $e^{-\rho_2 x}$ ) qui montre que la particule a une probabilité non nulle de se trouver dans la **région (2)**, probabilité qui décroît exponentiellement en fonction de  $x$  et devient négligeable lorsque  $x$  est supérieure à la portée  $\frac{1}{\rho_2}$  (**fig. 3.4**).

### 3.2.3. Analogie optique

L'indice  $n_1$  est réel alors que  $n_2$  est imaginaire : c'est le cas de la réflexion métallique. L'onde incidente est réfléchié intégralement et on a une onde évanescence dans le milieu métallique.

## 4. Barriere de potentiel

Elle est représentée par un potentiel qui est discontinu aux deux points d'abscisse  $x = 0$  et  $x = a$  (**fig. 3.5**) et est décrite par :

$$V(x) = 0 \text{ pour } x < 0 \tag{3.41}$$

$$V(x) = V_0 \text{ pour } 0 \leq x \leq a \tag{3.42}$$

$$V(x) = 0 \text{ pour } x > a \tag{3.43}$$

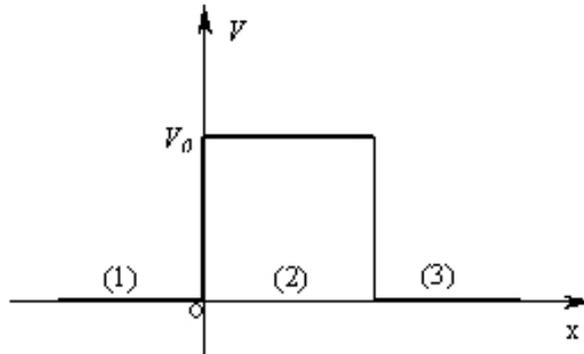


Figure 3.5 : Barrière carrée de potentiel

$a$  est appelé épaisseur de la barrière et  $V_0$  son hauteur.

### 4.1. Cas où $E < V_0$ : Effet Tunnel

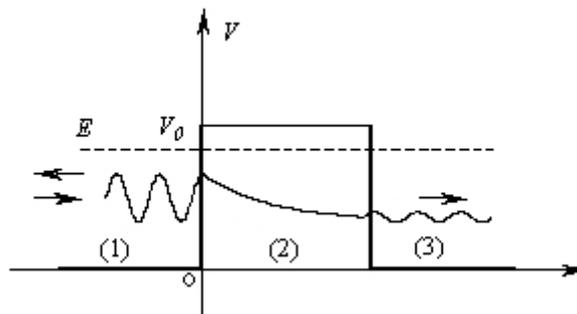


Figure 3.6 : Barrière carrée de potentiel ( $E < V_0$ )

#### 4.1.1. Traversée de la barrière

La barrière de potentiel est infranchissable pour la particule classique qui est toujours réfléchiée dans la **région (1)**.

En écrivant l'équation de Schrödinger dans les trois régions (1), (2) et (3) on montre facilement que les fonctions d'onde de la particule dans ces régions s'écrivent :

$$\varphi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + A_1' e^{-ik_1 x} \tag{3.44}$$

$$\varphi_2(x) = A_2 e^{\rho_2 x} + A_2' e^{-\rho_2 x} \tag{3.45}$$

$$\varphi_3(x) = A_3 e^{ik_1 x} + A_3' e^{-ik_1 x} \tag{3.46}$$

$k_1$  et  $\rho_2$  ont leur signification précédente et  $A_3'$  doit être nul car toute réflexion à l'infini est impossible.

Les conditions de continuité en  $x = 0$  et  $x = a$  donnent, après un calcul laborieux mais non difficile à mener, les expressions suivantes des coefficients de réflexion et de transmission **R** et **T** :

$$R = \left| \frac{A_1'}{A_1} \right|^2 = \frac{(k_1^2 + \rho_2^2) \text{sh}^2(\rho_2 a)}{4k_1^2 \rho_2^2 + (k_1^2 + \rho_2^2)^2 \text{sh}^2(\rho_2 a)} = \frac{V_0^2 \text{sh}^2(\rho_2 a)}{4E(V_0 - E) + V_0^2 \text{sh}^2(\rho_2 a)} \tag{3.47}$$

$$T = \left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2 = \frac{4k_1^2 \rho_2^2}{4k_1^2 \rho_2^2 + (k_1^2 + \rho_2^2)^2 \text{sh}^2(\rho_2 a)} = \frac{4E(V_0 - E)}{4E(V_0 - E) + V_0^2 \text{sh}^2(\rho_2 a)} \quad (3.48)$$

Donc, contrairement aux prévisions classiques, la particule a une probabilité non nulle de franchir la barrière de potentiel : c'est l'effet Tunnel (**fig. 3.6**).

Cet effet est une réalité physique et intervient dans l'interprétation de beaucoup de phénomènes : radioactivité  $\alpha$ , passage des électrons d'un atome à un autre, ...

L'équivalent optique de la barrière est une lame métallique plongée dans un milieu transparent ( $n_1$  et  $n_3$  sont réels et  $n_2$  imaginaire). Si la largeur de la lame n'est pas très grande devant la portée  $1/\rho_2$  de l'onde évanescente de la région centrale, l'onde peut être transmise dans la **région (3)** (**fig. 3.6**).

**4.1.2. Approximation de la barrière épaisse**

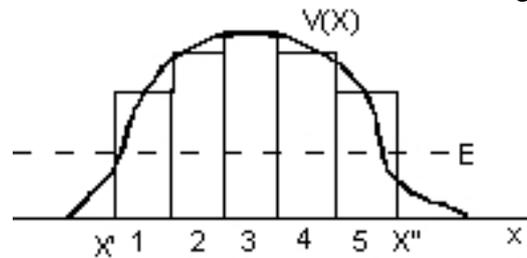
Cette approximation correspond à la situation où  $\rho_2 a \gg 1$  Dans ce cas  $\text{sh}(\rho_2 a) \approx \exp(\rho_2 a)$  et  $4E(V_0 - E) \ll V_0^2 \text{sh}^2 \rho_2 a$ , le coefficient de transmission s'écrit alors :

$$T \approx \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-2\rho_2 a} \quad (3.49)$$

Si de plus la hauteur de la barrière est grande devant l'énergie  $(\frac{E}{V_0} \ll 1)$  le coefficient de transmission s'écrit :

$$T \approx \frac{16E}{V_0} e^{-2\rho_2 a} \quad (3.50)$$

On pourra donc utiliser ces résultats pour traiter de façon approximative une barrière de forme quelconque en le considérant comme une succession de barrières rectangulaires (**fig. 3.7**).



**Figure 3.7 :** Barrière de potentiel de forme quelconque

Le coefficient de transmission global est alors le produit des coefficients de transmission de toutes les barrières rectangulaires, soit :

$$T = T_1 \times T_2 \times T_3 \times \dots \times T_n \quad (3.51)$$

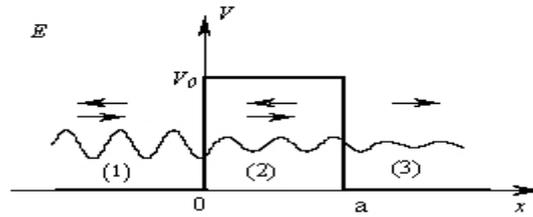
$$\text{Log}T = \text{Log}T_1 + \text{Log}T_2 + \text{Log}T_3 + \dots + \text{Log}T_n \quad (3.52)$$

Si  $dx_n$  et  $V(x_n)$  sont respectivement la largeur et la hauteur de chacune des barrières rectangulaires et si nous passons à la limite d'une subdivision infiniment fine, nous pouvons remplacer la somme des logarithmes par une intégrale et on obtient :

$$\text{Log}T \sim -\frac{2}{\hbar} \int_{x'}^{x''} \sqrt{2m(V(x) - E)} dx \quad (3.53)$$

Cette expression approchée du coefficient de transmission est très utile et donne une image qualitative correcte de la pénétration de la barrière dans de nombreux phénomènes (radioactivité  $\alpha$ , microscopie à effet Tunnel,...).

**4.2. Cas où  $E > V_0$  : Transfert résonnant**



**Figure 3.8 :** Barrière carrée de potentiel ( $E > V_0$ )

Dans ce cas, on a toujours en mécanique classique une transmission de la particule avec un ralentissement dans la région centrale. Quantiquement on obtient les fonctions d'onde suivantes :

$$\varphi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + A_1' e^{-ik_1 x} \tag{3.54}$$

$$\varphi_2(x) = B_2 e^{ik_2 x} + B_2' e^{-ik_2 x} \tag{3.55}$$

$$\varphi_3(x) = A_3 e^{ik_1 x} + A_3' e^{-ik_1 x} \tag{3.56}$$

Avec 
$$k_2^2 = \frac{2m}{\hbar} (E - V_0) \tag{3.57}$$

$A_3'$  sera bien sûr nul car la réflexion à l'infini est impossible.

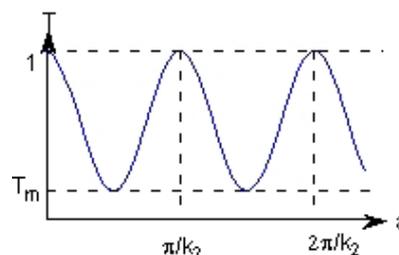
En remplaçant  $\rho_2$  par  $ik_2$  dans les expressions (3.48) et (3.49) de **R** et **T**, on obtient :

$$R = \left| \frac{A_1'}{A_1} \right|^2 = \frac{(k_1^2 - k_2^2) \sin^2(\rho_2 a)}{4k_1^2 k_2^2 + (k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2(k_2 a)} \tag{3.48}$$

$$T = \left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2 = \frac{4k_1^2 k_2^2}{4k_1^2 \rho_2^2 + (k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2(k_2 a)} \tag{3.59}$$

On remarque qu'il n'y a transmission complète (**T** = **1**) que lorsque  $k_2 a$  est un multiple de  $\pi$ . Au fur et à mesure que la largeur de la barrière croît, le coefficient de transmission oscille entre cette valeur maximum et une valeur minimale **T<sub>m</sub>** pour laquelle  $k_2 a = (2n + 1)\pi/2$  et qu'on montre égale à :

$$T_m = \frac{4E(E - V_0)}{(2E - V_0)^2} \tag{3.60}$$



**Figure 3.9 :** Variation du coefficient de transmission avec a

On aura alors un transfert maximal ou résonnant chaque fois que  $a = n\pi/k_2$ .

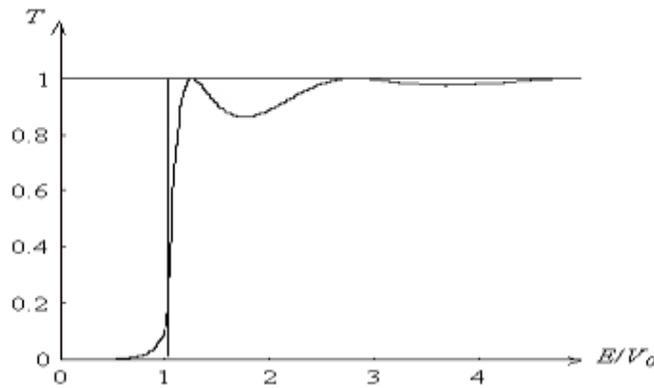
Optiquement les trois indices  $n_1$ ,  $n_2$ , et  $n_3$  sont réels, l'onde incidente donne naissance à une onde réfléchie et à une onde transmise.

### 4.3. Transmission de la barrière en fonction de l'énergie de la particule

Les relations (3.47) et (3.58) donnant le coefficient de transmission  $T$  peuvent s'écrire sous la forme :

$$T = \begin{cases} \frac{4E(V_0 - E)}{4E(V_0 - E) + V_0^2 \operatorname{sh}^2(\rho_2 a)} & \text{pour } E < V_0 \\ \frac{4E(E - V_0)}{4E(E - V_0) + V_0^2 \sin^2(k_2 a)} & \text{pour } E > V_0 \end{cases}$$

Nous avons tracé sur la **figure 3.10** la variation de  $T$  en fonction du rapport  $E/V_0$  pour des électrons en prenant à titre d'exemple  $V_0 a^2 = 120 \text{ eV} \cdot \text{Å}^2$ .



**Figure 3.10** : Variation du coefficient de transmission pour les électrons à travers une barrière de potentiel en fonction du rapport  $E/V_0$

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. Au fur et à mesure que l'énergie augmente  $T$  oscille entre cette valeur et un minimum de l'ordre de  $\frac{4E(E - V_0)}{(2E - V_0)^2}$ . L'effet est d'autant plus marqué lorsque la barrière est très élevée ou très épaisse et que l'énergie cinétique  $E - V_0$  dans la **région (2)** est petite.

## 5. Puits de potentiel

### 5.1. Puits de potentiel fini

Il est représenté sur la **figure 3.11**.

La particule est en mouvement dans un potentiel  $V(x)$  tel que  $V(x)$  est nul sur le segment  $[-a, +a]$  et  $V(x) = V_0$  en dehors de ce segment.

En mécanique classique, lorsque  $V_0$  est inférieur à l'énergie  $E$  de la particule ; celle-ci venant des  $x$  négatifs subit une accélération au passage de la discontinuité du potentiel en  $x = -a$  et reprend sa vitesse au passage de la discontinuité du potentiel en  $x = a$  pour aller se perdre à l'infini. Lorsque  $V_0$  est supérieur à  $E$ , tout mouvement de la particule est interdit en dehors du segment  $]-a, a[$ . La particule est donc astreinte à se mouvoir sur le segment de droite de longueur  $2a$  où elle est confinée.

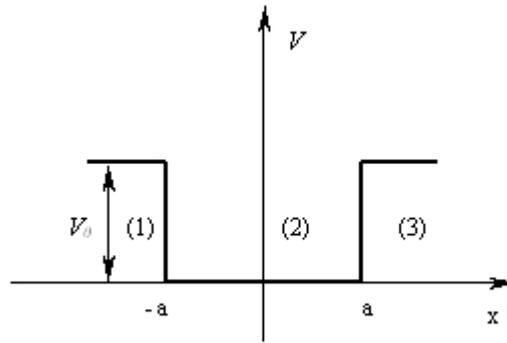


Figure 3.11 : Puits carré de potentiel

C'est à ce confinement qu'on va s'intéresser en mécanique quantique en écrivant l'équation de Schrödinger dans les trois régions (1), (2) et (3) où agit le potentiel :

- A l'extérieur du puits :  $|x| > a$

L'équation de Schrödinger s'écrit :

$$\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} - \rho^2\varphi(x) = 0 \tag{3.61}$$

Avec 
$$\rho^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)$$

et ses solutions sont :

$$\varphi_1(x) = B_1 e^{\rho x} + B_1' e^{-\rho x} \tag{3.62}$$

$$\varphi_3(x) = B_2 e^{\rho x} + B_2' e^{-\rho x} \tag{3.63}$$

Comme  $\varphi(x)$  doit être bornée dans les régions (1) et (3), on a nécessairement :

$$B_1' = B_2' = 0$$

- A l'intérieur du puits :  $|x| < a$

L'équation de Schrödinger est :

$$\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + k^2\varphi(x) = 0 \tag{3.64}$$

Avec 
$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$$

La solution générale de cette équation est donc de la forme :

$$\varphi_2(x) = A_1 e^{ikx} + A_1' e^{-ikx} \tag{3.65}$$

Une simplification importante provient de la symétrie du problème  $V(x) = V(-x)$ . Ainsi, si  $\psi(x)$  est solution de l'équation de Schrödinger pour une valeur E de l'énergie, alors  $\psi(-x)$  aussi et pour la même valeur E : c'est à dire qu'on a :

$$\varphi_2^P(x) = A \cos kx \quad \text{et} \quad \varphi_2^I(x) = B \sin kx \tag{3.65}$$

En conclusion le problème admet deux ensembles de solutions (normalisables):

$$\left\{ \begin{array}{l} \varphi_1(x) = B_1 e^{\rho x} \\ \varphi_2^P(x) = A \cos kx \\ \varphi_3(x) = B_2' e^{-\rho x} \end{array} \right. \quad \text{et} \quad \left\{ \begin{array}{l} \varphi_1(x) = B_1 e^{\rho x} \\ \varphi_2^I(x) = B \sin kx \\ \varphi_3(x) = B_2' e^{-\rho x} \end{array} \right.$$

Avec 
$$B_2' = B_1$$

Les conditions de raccordement imposées à la fonction d'onde et à sa dérivée aux points  $x = -a$  et  $x = +a$  conduisent pour les deux ensembles de solutions aux deux conditions de quantification suivantes :

$$tg(ka) = \frac{\rho}{k} \quad \text{et} \quad \cot g(ka) = -\frac{\rho}{k} \quad (3.66)$$

Il est possible de résoudre graphiquement ces équations implicites en  $E$ , mais il est plus simple de les ramener aux deux systèmes d'équations équivalentes suivantes :

$$\begin{cases} |\cos ka| = \frac{k}{k_0} \\ tg(ka) > 0 \end{cases} \quad \text{et} \quad \begin{cases} |\sin ka| = \frac{k}{k_0} \\ tg(ka) < 0 \end{cases} \quad (3.67)$$

$$\text{Où } k_0 \text{ est tel que : } k_0^2 = k^2 + \rho^2 = \frac{2m}{\hbar^2} V_0$$

Les niveaux d'énergie sont déterminés par l'intersection d'une droite de pente  $1/k_0$  avec des arcs de sinus (fig. 3.12). Ces niveaux sont intercalés en niveaux pairs et impairs correspondant à des fonctions d'onde paires et impaires représentant les états liés de la particule.

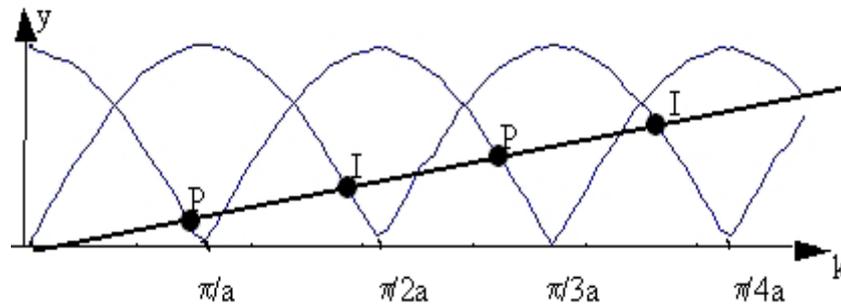


Figure 3.12 : Détermination graphique des énergies des états liés d'une particule dans un puits carré de potentiel

L'analogie optique de ce système est une lame d'air emprisonnée entre deux blocs métalliques ( $n_1$  et  $n_3$  sont imaginaires et  $n_2$  réel) : C'est le principe d'une cavité. L'onde électromagnétique se confine dans la région centrale et il s'établit un système d'ondes stationnaires.

## 5.2. Puits de Potentiel infini

### 5.2.1. Niveaux d'énergie et fonctions d'onde

Si l'énergie potentielle  $V_0$  caractérisant la profondeur du puits devient infiniment grande devant l'énergie  $E$  de la particule, on obtient un puits de potentiel infini (fig. 3.13).

Classiquement la particule ne peut qu'osciller entre les deux parois du puits.

Quantiquement la fonction d'onde de la particule doit être nulle à l'extérieur du puits ( $\phi_1 = \phi_3 = 0$ ) et continue en  $x = \pm a$ .

A l'intérieur du puits, et en raison de la parité du potentiel les solutions de l'équation de Schrödinger sont soit paires soit impaires.

Les fonctions d'onde de la particule sont donc :

$$\phi_2^P(x) = A \cos kx \quad \text{et} \quad \phi_2^I(x) = B \sin kx \quad (3.68)$$

Les conditions de continuité en  $x = -a$  et en  $x = a$  donnent :

- Pour les fonctions paires

$$\cos ka = 0 \quad \text{soit : } ka = (2n + 1) \frac{\pi}{2} \quad \text{et} \quad E_p = (2n + 1)^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} \quad (3.69)$$

- Pour les fonctions impaires

$$\sin ka = 0 \quad \text{soit} \quad : ka = n\pi \quad \text{et} \quad E_I = (2n)^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} \quad (3.70)$$

Les deux expressions de l'énergie  $E_P$  et  $E_I$  peuvent être regroupées en une seule relation :

$$E_P = N^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} \quad \text{avec} \quad N = 1, 2, 3, \dots \quad (3.71)$$

Ce résultat qui peut être obtenu à partir de l'étude du puits fini, en faisant tendre  $V_0$  vers l'infini dans les relations de quantification (3.65) et (3.66), montre que le spectre d'énergie est constitué de niveaux discrets, éloignés les uns des autres comme le carré des nombres entiers successifs.

Les constantes  $A$  et  $B$  se calculent facilement en normalisant les fonctions d'onde c'est à dire en écrivant :

$$\int_{-a}^{+a} |\varphi(x)|^2 dx = 1 \quad (3.72)$$

On obtient :  $A = B = \frac{1}{\sqrt{a}}$  ce qui donne pour les fonctions d'onde :

$$\varphi_2^P(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \cos\left[\frac{(2n + 1)}{2a} \pi x\right] \quad : \text{fonctions paires ou symétriques}$$

$$\varphi_2^I(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left(\frac{n}{a} \pi x\right) \quad : \text{fonctions impaires ou antisymétriques}$$

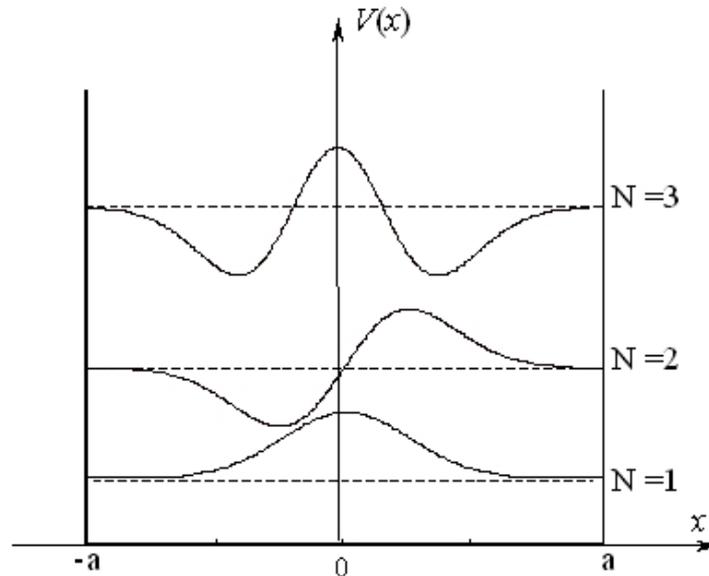


Figure 3.13 : Fonctions d'onde et niveaux d'énergie d'une particule dans un puits de potentiel

Nous avons représenté sur la **figure 3.13** les positions des niveaux d'énergie et dessiné l'allure des fonctions d'onde pour l'état fondamental ( $N = 1$ ) et les deux premiers états excités ( $N = 2, N = 3$ ).

### 5.2.2. Remarques

#### 5.2.2.1. Etat fondamental

Alors que l'état fondamental de la particule classique est caractérisé par une énergie nulle, l'état fondamental ( $N = 1$ ) de la particule quantique est tel que :

$$E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \neq 0 \quad (3.73)$$

Ce résultat est une conséquence du principe d'incertitude de Heisenberg, en effet :

$$\Delta x \approx 2a \quad \text{et} \quad \Delta p \approx p - (-p) = 2p \quad (3.74)$$

ce qui donne :

$$\Delta x \Delta p \approx 4ap \geq h \quad \text{et} \quad p \geq h/4a \quad (3.75)$$

La particule étant libre à l'intérieur du puits on a :

$$E = \frac{P^2}{2m} \quad \text{soit} \quad E \geq \frac{1}{2m} \left(\frac{h}{4a}\right)^2$$

$$E_1 \geq \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$$

On aura alors toujours  $E \geq E_1$ .

**5.2.2.2. Analogie avec les cordes vibrantes**

A l'intérieur du puits la particule est dans des états stationnaires. On peut donc faire une analogie avec la corde vibrante en prenant pour longueur d'onde associée à la particule la longueur d'onde de De Broglie. On sait que lorsque la corde de longueur  $L$  est le siège d'ondes stationnaires de longueur d'onde  $\lambda$ , on a :

$$L = N \frac{\lambda}{2} \quad (3.76)$$

Dans le cas du puits de potentiel on a :

$$L = 2a \quad \text{et} \quad \lambda = \lambda_{DB} = \frac{h}{p} \quad (3.77)$$

On aura donc :

$$2a = \frac{Nh}{2p} \quad \text{soit} \quad p = \frac{Nh}{4a}$$

et l'énergie  $E$  est telle que :

$$E = \frac{P^2}{2m} = \frac{1}{2m} N^2 \left(\frac{h}{4a}\right)^2 = \frac{1}{2m} N^2 \left(\frac{2\pi\hbar}{4a}\right)^2 \quad (3.78)$$

Soit 
$$E = N^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} \quad (3.79)$$

qui est un résultat identique à celui trouvé à partir des conditions de quantification (3.68) et (3.69).

**5.2.2.3. Puits de potentiel quelconque**

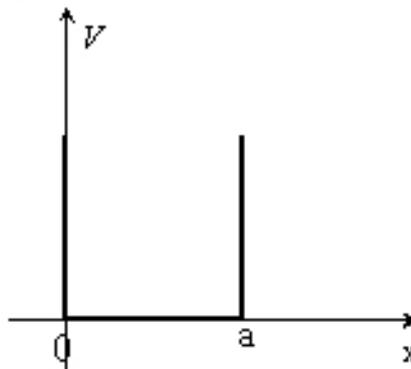


Figure 3.14 : Puits de potentiel quelconque

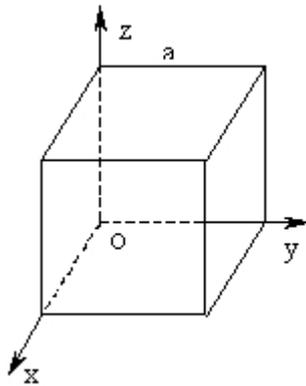
Si le potentiel  $V(\mathbf{x})$  n'est pas pair, comme c'est le cas du potentiel représenté sur la **figure 3.14**, une démarche analogue à la précédente conduirait aux énergies et aux fonctions d'onde suivantes :

$$E_n = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \quad \text{et} \quad \varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right) \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (3.80)$$

### 5.3. Boite de Potentiel

C'est une généralisation à trois dimensions du puits infini (**fig. 3.15**). La particule est dans ce cas placée dans le potentiel défini par :

$$V(x, y, z) = \begin{cases} 0 & \text{pour } 0 < x < a, 0 < y < a, 0 < z < a \\ \infty & \text{ailleurs} \end{cases} \quad (3.81)$$



**Figure 3.15** : Boite de potentiel cubique

L'équation aux valeurs propres s'écrit :

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(x, y, z) \right] \psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z) \quad (3.82)$$

Avec 
$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

A l'extérieur de la boite la fonction d'onde est nulle car le potentiel est infini.

A l'intérieur de la boite où le potentiel est nul, l'équation aux valeurs propres devient :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z) \quad (3.83)$$

Cette équation se résout en séparant les variables :

$$\psi(x, y, z) = \psi_1(x) \times \psi_2(y) \times \psi_3(z) \quad (3.84)$$

ce qui conduit à trois équations du type :

$$\frac{1}{\psi_i(x_i)} \frac{\partial^2 \psi_i(x_i)}{\partial x_i^2} = -k_i^2 \quad (3.85)$$

où  $i = 1, 2, 3$  et  $x_1 = x, x_2 = y$  et  $x_3 = z$ .

Les solutions de ces équations sont :

$$\psi_i(x_i) = A \sin(k_i x_i + \delta_{x_i}) \quad (3.86)$$

Les conditions de continuité en  $x = 0, y = 0$  et  $z = 0$  et en  $x = a, y = a$  et  $z = 0$  donnent :

$$\delta_x = \delta_y = \delta_z = 0 \quad (3.87)$$

et

$$ak_x = n_x \pi, \quad ak_y = n_y \pi, \quad ak_z = n_z \pi \quad (3.88)$$

ce qui conduit en définitive aux énergies propres et fonctions propres suivantes de la particule :

$$E_{n_x, n_y, n_z} = (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \quad (3. 89)$$

$$\Psi_{n_x, n_y, n_z}(x, y, z) = A \sin(n_x \frac{\pi}{a} x) \sin(n_y \frac{\pi}{a} y) \sin(n_z \frac{\pi}{a} z) \quad (3. 90)$$

La constante  $A$  s'obtient en normalisant la fonction d'onde :

$$\int \Psi_{n_x, n_y, n_z}^*(x, y, z) \Psi_{n_x, n_y, n_z}(x, y, z) dV = |A|^2 \int_0^a \sin^2(n_x \frac{\pi}{a} x) dx \int_0^a \sin^2(n_y \frac{\pi}{a} y) dy \int_0^a \sin^2(n_z \frac{\pi}{a} z) dz \quad (3. 91)$$

on aura après un calcul d'intégration simple :

$$|A| = \sqrt{\frac{8}{a^3}} \quad (3. 92)$$

En posant  $n^2 = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2$ , on peut écrire enfin :

$$E_n = N^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \quad (3. 93)$$

$$\Psi_{n_x, n_y, n_z}(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{a^3}} \sin(n_x \frac{\pi}{a} x) \sin(n_y \frac{\pi}{a} y) \sin(n_z \frac{\pi}{a} z) \quad (3. 94)$$

Dans ce cas, une même énergie peut correspondre à plusieurs fonctions propres car plusieurs jeux des nombres entiers  $n_x, n_y, n_z$  peuvent donner une même valeur de  $N^2$ . On dit alors que l'énergie est dégénérée; son degré de dégénérescence  $g$  est le nombre de fonctions propres linéairement indépendantes correspondant à cette même valeur de l'énergie. Il est facile de déterminer le degré de dégénérescence  $g$  comme le montre le tableau suivant :

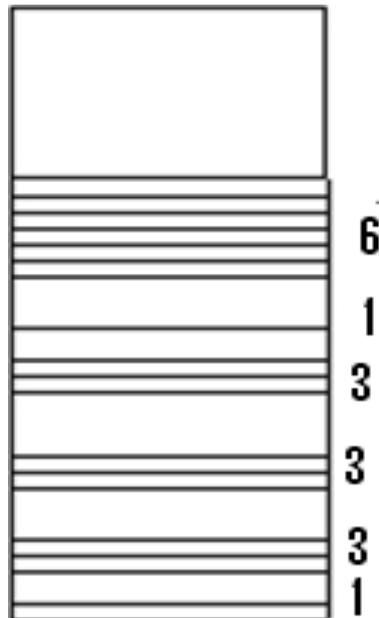
Où on a posé :  $E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$

Energie	Combinaisons ( $n_x, n_y, n_z$ )	Degré de dégénérescence
<b>3</b> $E_1$	(1, 1, 1)	<b>1</b>
<b>6</b> $E_1$	(2, 1, 1), (1, 2, 1), (1, 1, 2)	<b>3</b>
<b>9</b> $E_1$	(2, 2, 1), (2, 1, 2), (1, 2, 2)	<b>3</b>
<b>11</b> $E_1$	(3, 1, 1), (1, 3, 1), (1, 1, 3)	<b>3</b>
<b>12</b> $E_1$	(2, 2, 2)	<b>1</b>
<b>14</b> $E_1$	(1, 3, 2), (2, 1, 3), (3, 1, 2) (1, 2, 3), (3, 2, 1), (2, 3, 1)	<b>6</b>

Lorsque la boîte est rectangulaire d'arêtes  $a, b, c$  on montre facilement que les énergies propres et fonctions propres sont données par :

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left( \frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2} \right) \quad (3. 95)$$

$$\Psi_{n_x, n_y, n_z}(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{abc}} \sin(n_x \frac{\pi}{a} x) \sin(n_y \frac{\pi}{b} y) \sin(n_z \frac{\pi}{c} z) \quad (3. 96)$$



**Figure 3.16** : Levée de dégénérescence des niveaux d'énergie dans une boîte rectangulaire

Dans ce cas et comme le montre **la figure 3.16**, la dégénérescence est levée. Dans le cas où **a**, **b** et **c** ne diffèrent pas beaucoup, tous les niveaux associés au triplet ( $n_x, n_y, n_z$ ) sont proches les uns des autres et on dit qu'on a des niveaux "multiplets". De telles structures d'états en multiplets sont appelées des "couches" et donnent lieu à de modèles très utilisés en physique atomique et en physique nucléaire.