Chapitre 4 : Particule dans un potentiel stationnaire

I) Résolution de l'équation de Schrödinger

On considère un système physique constitué d'une particule de masse m et de charge q. L'évolution dans le temps du vecteur d'état $|\psi\rangle$ du système est déterminée par l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{d|\psi\rangle}{dt} = H|\psi\rangle \qquad (1)$$

H : est l'observable associée à l'énergie totale du système.
H est l'opérateur hamiltonien que l'on obtient à partir de la fonction de Hamilton classique :

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

avec :
V : est l'opérateur associé à l'énergie potentielle
$\vec{r} = \vec{r}(x, y, z)$: est le vecteur de position
Δ : est l'opérateur Laplacien où $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ en coordonnées cartésiennes.

Supposons que la particule est soumise à un potentiel indépendant du temps $V(\vec{r}, t) = V(\vec{r})$ et on se propose de déterminer sa fonction d'onde $\psi(\vec{r}, t)$.

L'équation ② devient :

$$i\hbar \frac{\partial\psi(\vec{r}, t)}{dt} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r})\right]\psi(\vec{r}, t) \qquad (3)$$

Cherchons des solutions pour l'équation ③ sous la forme d'un produit d'une fonction d'espace $\varphi(\vec{r})$ et d'une fonction dépendante du temps $\chi(t)$ telle que :

$$\psi(\vec{r}, t) = \varphi(\vec{r}) \cdot \chi(t) \qquad (4)$$

Remplaçant cette solution dans l'équation ③, il vient :

$$i\hbar\,\varphi\,\frac{d\chi}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\chi\,\Delta\varphi + V\varphi\chi \qquad (5)$$

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

$$i\hbar\,\frac{1}{\chi}\,\frac{d\chi}{dt} = \frac{\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V\right]\varphi}{\varphi} \qquad (6)$$

Cette équation est vraie quel que soit t et $\vec{r}$. Elle n'est possible que si chaque membre est constant. Cette constante a les dimensions d'une énergie qu'on notera E.

On aura alors les deux équations suivantes :

$$\begin{cases} i\hbar\,\dfrac{d\chi}{\chi} = E\,dt & (7) \\[2ex] \left(-\dfrac{\hbar^2}{2m}\Delta + V\right)\varphi = E\varphi & (8) \end{cases}$$

L'équation (7) a pour solution : $\chi(t) = \chi(0)\,e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$ (9)

En utilisant les équations (2) et (9), la fonction d'onde devient :

$$\psi(\vec{r},t) = \varphi(\vec{r})\,e^{-\frac{iEt}{\hbar}}\,.\,\chi(0) \qquad (10)$$

La densité de probabilité est :

$$|\psi(\vec{r},t)|^2 = |\varphi(\vec{r})|^2 \qquad (11)$$

Cette densité est indépendante du temps. On dit dans ce cas que la particule est dans des états stationnaires c'est à dire pour lesquels l'énergie E est constante.

Il reste à trouver la fonction $\varphi(\vec{r})$ à partir de l'équation ⑧ qui s'écrit sous la forme suivante :

$$\Delta\varphi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\varphi = 0 \qquad (12)$$

Pour simplifier le formalisme, on considère les potentiels à une seule variable d'espace x. Dans ce cas l'opérateur Laplacien $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2}$ et l'équation (12) devient :

$$\boxed{\frac{d^2\varphi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - V(x)\right)\varphi = 0} \quad (13)$$

qui s'écrit aussi sous la forme :

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

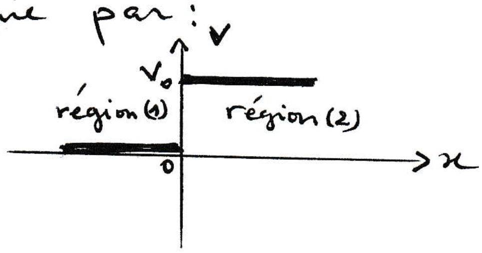
c'est l'équation de Schrödinger des états stationnaires.

II) Etude de quelques systèmes quantiques à une dimension

II.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 définie par :

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



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

Cas où $E > V_0$

L'équation de Schrödinger peut s'écrire :

$$\varphi'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\varphi = 0 \quad (14)$$

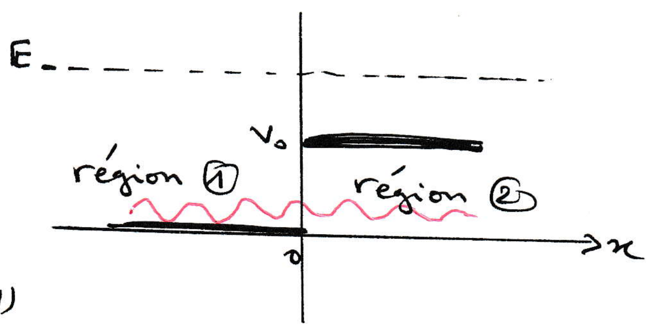


Figure : Marche de potentiel ($E > V_0$)

Région (1) : $x < 0$, $V(x) = 0$

$$\varphi_1'' + \frac{2m}{\hbar^2}E\,\varphi_1 = 0 \quad (15)$$

on pose $k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

L'équation (15) devient : $\varphi_1'' + k_1^2 \varphi_1 = 0$

La solution est : $$\boxed{\varphi_1(x) = A\, e^{ik_1x} + A'\, e^{-ik_1x}} \quad (16)$$

Région (2) $\quad x > 0 \quad , \; V(x) = V_0$

L'équation (14) devient : $$\boxed{\varphi_2'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)\, \varphi_2 = 0} \quad (17)$$

Puisque $E > V_0$ ce qui implique que $E - V_0 > 0$. Posons :

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

L'équation (17) devient :

$$\boxed{\varphi_2'' + k_2^2\, \varphi_2 = 0} \quad (18)$$

La solution de l'équation (18) est de type sinusoïdale telle que : $$\boxed{\varphi_2(x) = B\, e^{ik_2x} + B'\, e^{-ik_2x}} \quad (19)$$

Les solutions dans les deux régions sont en définitive :

$$\begin{cases} \varphi_1(x) = A\, e^{ik_1x} + A'\, e^{-ik_1x} \\ \varphi_2(x) = B\, e^{ik_2x} + B'\, e^{-ik_2x} \end{cases} \quad (20)$$

Calcul des constantes : On a quatre constantes A, A', B et B' à déterminer.

Dans l'équation (20) :

$A\, e^{ik_1x}$: représente l'onde incidente et $A'\, e^{-ik_1x}$ l'onde réfléchie par le saut de potentiel.

$B\, e^{+ik_2x}$: représente l'onde transmise et $B'\, e^{-ik_2x}$ est une onde réfléchie qui reviendrait de l'infini, ce qui est impossible donc $\boxed{B' = 0}$. Ainsi, les solutions (20) deviennent :

$$\begin{cases} \varphi_1(x) = A e^{ik_1 x} + A' e^{-ik_1 x} \\ \varphi_2(x) = B e^{ik_2 x} \end{cases} \qquad (21)$$

Condition de normalisation : on calcule toutes les constantes en fonction d'une seule constante comme par exemple A.

Ainsi on a : $\varphi_1(x) = A\left(e^{ik_1 x} + a e^{-ik_1 x}\right)$ avec $a = \frac{A'}{A}$

$$\Rightarrow \boxed{\varphi_1(x) = e^{ik_1 x} + a e^{-ik_1 x}}$$

$\varphi_2(x) = A\left(b e^{ik_2 x}\right)$ avec $b = \frac{B}{A}$

$$\Rightarrow \boxed{\varphi_2(x) = b e^{ik_2 x}}$$

les deux solutions sont donc :

$$\begin{cases} \varphi_1(x) = e^{ik_1 x} + a e^{-ik_1 x} \\ \varphi_2(x) = b e^{ik_2 x} \end{cases} \qquad (22)$$

Les conditions de continuité

Les conditions de continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée à $x=0$ permet d'écrire :

$$\begin{cases} \varphi_1(0) = \varphi_2(0) \\ \varphi_1'(0) = \varphi_2'(0) \end{cases} \qquad (23)$$

On a : $\left.\begin{array}{l} \varphi_1(0) = 1 + a \\ \varphi_2(0) = b \end{array}\right\} \Rightarrow \boxed{1 + a = b} \qquad (24)$

on a : $\left.\begin{array}{l} \varphi_1'(x) = ik_1 e^{ik_1 x} - ik_1 a e^{-ik_1 x} \\ \varphi_2'(x) = ik_2 b e^{ik_2 x} \end{array}\right\} \Rightarrow \begin{array}{l} \varphi_1'(0) = ik_1(1-a) \\ \varphi_2'(0) = ik_2 b \end{array}$

Selon (23), on a $\varphi_1'(0) = \varphi_2'(0) \Rightarrow \boxed{ik_1(1-a) = ik_2 b} \qquad (25)$

Les équations (24) et (25) peuvent s'écrire sous la forme :

$$\begin{cases} 1 + a = b \\ 1 - a = \dfrac{k_2}{k_1} b \end{cases} \qquad (26)$$

La somme et la différence de ces deux équations donne :

$$\boxed{a = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}} \quad \text{et} \quad \boxed{b = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}}$$

Calcul du coefficient de réflexion R

Le coefficient de réflexion de la particule est :

$$\boxed{R = \left|\frac{A'}{A}\right|^2 = |a|^2} \qquad (27)$$

ce qui donne : $R = \dfrac{(k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2}$

Calcul du coefficient de transmission T

$$\boxed{T = \left|\frac{B}{A}\right|^2 \cdot \frac{k_2}{k_1}} \Rightarrow \boxed{T = |b|^2 \frac{k_2}{k_1}} \qquad (28)$$

ce qui donne

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

⇒ On vérifie bien que l'on a : $\boxed{R + T = 1}$ (29)

En effet : $R + T = \dfrac{(k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2} + \dfrac{4 k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2} = \dfrac{k_1^2 + k_2^2 - 2k_1 k_2 + 4 k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}$

$$= \frac{k_1^2 + k_2^2 + 2k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2} = \frac{(k_1 + k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2} = 1.$$

II.2) Cas où $0 \leqslant E \leqslant V_0$

Région (1) $x<0$, $V(x)=0$

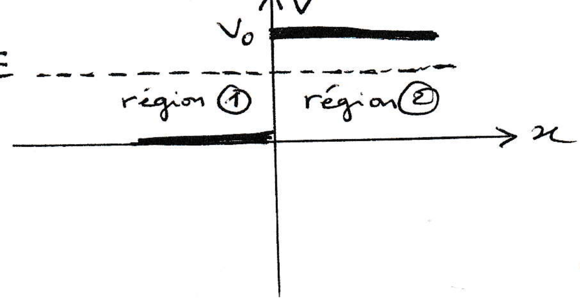


Figure : Marche de potentiel ($E < V_0$)

$$\varphi_1'' + \frac{2mE}{\hbar^2}\varphi_1 = 0$$

on pose $k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

$$\boxed{\varphi_1'' + k_1^2 \varphi_1 = 0} \quad (30)$$

La solution est de type sinusoïdale : $\boxed{\varphi_1(x) = A e^{ik_1x} + A' e^{-ik_1x}}$ (31)

Région (2) : $x>0$, $V(x) = V_0$

$$\boxed{\varphi_2'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E-V_0)\varphi_2 = 0} \quad (32)$$

Puisque $E < V_0$ ce qui implique que $E - V_0 < 0$. Posons :

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

L'equation (32) devient : $\boxed{\varphi_2'' - \rho^2 \varphi_2 = 0}$ (33)

La solution de l'equation (33) est de type exponentielle telle que :

$$\boxed{\varphi_2(x) = B e^{\rho x} + B' e^{-\rho x}} \quad (34)$$

Les solutions dans les deux régions sont en définitive :

$$\begin{cases} \varphi_1(x) = A e^{ikx} + A' e^{-ikx} \\ \varphi_2(x) = B e^{\rho x} + B' e^{-\rho x} \end{cases} \quad (35)$$

Calcul des constantes : On a quatre constante A, A', B, B' à déterminer.

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

$$\begin{cases} \varphi_1(x) = A e^{ikx} + A' e^{-ikx} \\ \varphi_2(x) = B' e^{-\rho x} \end{cases}$$

Condition de normalisation : on calcule les constantes en fonction de A :

$$\varphi_1(x) = A\left(e^{ikx} + a\,e^{-ikx}\right) \qquad \text{avec } a = \frac{A'}{A}$$

$$\Rightarrow \boxed{\varphi_1(x) = e^{ikx} + a\,e^{-ikx}}$$

$$\varphi_2(x) = A\left(b'\,e^{-\rho x}\right) \qquad \text{avec } b' = \frac{B'}{A}$$

$$\Rightarrow \boxed{\varphi_2(x) = b'\,e^{-\rho x}}$$

Les deux solutions sont donc :

$$\begin{cases} \varphi_1(x) = e^{ikx} + a\,e^{-ikx} \\ \varphi_2(x) = b'\,e^{-\rho x} \end{cases}$$

Les conditions de continuité

à $x=0$, on a : $\begin{cases} \varphi_1(0) = \varphi_2(0) \longrightarrow 1 + a = b' \\ \varphi_1'(0) = \varphi_2'(0) \longrightarrow ik(1-a) = -\rho b' \end{cases}$

On a :

$$\begin{cases} 1 + a = b' \\ 1 - a = \dfrac{i\rho b'}{k} \end{cases}$$

ce qui donne : $a = \dfrac{k - i\rho}{k + i\rho}$, $b' = \dfrac{2k}{k + i\rho}$

Calcul du coefficient de réflexion R :

$$R = \left|\frac{A'}{A}\right|^2 = |a|^2 = \left|\frac{k - i\rho}{k + i\rho}\right|^2 = \frac{k^2 + \rho^2}{k^2 + \rho^2} = 1$$

$\Rightarrow \boxed{R = 1}$ c'est à dire, il y a réflexion totale.

$\Rightarrow$ La particule est toujours réfléchie néanmoins il existe une onde évanescente dans la région ② : $\varphi_2(x) = b'\,e^{-\rho x}$ qui montre que la particule a une probabilité non nulle de se trouver dans la région (2). La densité de probabilité de présence de la particule dans la région ($x>0$) n'est pas nulle et dépend de x. En effet, la densité s'écrit : $|\varphi_2(x)|^2 = |b' e^{-\rho x}|^2 = |b'|^2 e^{-2\rho x}$

Lorsque x est supérieur à la portée $\frac{1}{\rho}$ de l'onde évanescente ($b' e^{-\rho x}$), cette densité devient négligeable. Donc les particules avant d'être réfléchies, pénètrent dans la région ($x>0$) sur une distance (profondeur) de l'ordre de : $\delta = \frac{1}{\rho} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}$.