

PHYS-H-200 Physique quantique et statistique

Chapitre 5: équation de Schrödinger à une dimension

Jean-Marc Sparenberg
Université Libre de Bruxelles

2011-2012

- 1 États liés et états libres
- 2 Particule dans une boîte
- 3 Oscillateur harmonique
- 4 Barrière de potentiel constante
- 5 Effet tunnel

Potentiels confinants et non confinants

- Équation de Schrödinger **stationnaire** (une particule, une dimension)

$$H\psi(x) = E\psi(x) \iff \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right)\psi(x) = E\psi(x)$$

$V(x)$ = potentiel **réel**. Solutions $\psi(x)$ **acceptables physiquement** ?

- Potentiel **confinant** : $V(x) \xrightarrow{|x| \rightarrow \infty} +\infty \Rightarrow$ **double condition aux limites**

- ▶ états **liés** : solutions **de carré sommable**, pour **certaines** valeurs de E

$$\psi(x) \underset{|x| \rightarrow \infty}{\sim} 0, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1 \quad (\text{spectre } \textbf{discret})$$

faible probabilité de présence à grande distance $\Rightarrow$ particule **liée**

- Potentiel **non confinant** : $V(x) \xrightarrow{|x| \rightarrow \infty} V_{\pm}(=0)$

- ▶ états **liés** pour certaines valeurs **éventuelles** de $E < 0$

$$\psi(x) \underset{|x| \rightarrow \infty}{\sim} \exp\left(-\sqrt{-2mE/\hbar^2} |x|\right), \quad \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$$

- ▶ états **libres** : solutions **bornées**, pour toute $E > 0$ (spectre **continu**)

$$\psi(x) \underset{|x| \rightarrow \infty}{\sim} \exp\left(\pm i \sqrt{2mE/\hbar^2} x\right), \quad |\psi(x)| < \infty \quad \forall x$$

probabilité de présence non nulle à grande distance $\Rightarrow$ particule **libre**
(cf ondes planes : nombre d'onde $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$, paquets d'ondes)

- 1 États liés et états libres
- 2 Particule dans une boîte**
- 3 Oscillateur harmonique
- 4 Barrière de potentiel constante
- 5 Effet tunnel

Conditions aux limites $\Rightarrow$ quantification de l'énergie

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x) = 0, \quad 0 \leq x \leq a$$

- Conditions aux limites : $V(0) = V(a) = \infty \Rightarrow \psi(0) = \psi(a) = 0$
- $E < 0 \Rightarrow$ solution **mathématique générale** ($\kappa = \sqrt{-2mE/\hbar^2}$)

$$\psi(x) = C_+ \exp(\kappa x) + C_- \exp(-\kappa x) = C_1 \sinh(\kappa x) + C_2 \cosh(\kappa x)$$

- ▶ $\psi(0) = 0 \iff C_2 = 0$
- ▶ $\psi(a) = 0 \iff C_1 \sinh(\kappa a) = 0 \iff C_1 = 0$

$\Rightarrow$ **pas** de solution **physique acceptable** $\Rightarrow$ **pas d'état lié** (cf classique)

- $E > 0 \Rightarrow$ solution **mathématique générale** ($k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$)

$$\psi(x) = C_+ \exp(ikx) + C_- \exp(-ikx) = C_1 \sin(kx) + C_2 \cos(kx)$$

- ▶ $\psi(0) = 0 \iff C_2 = 0$
- ▶ $\psi(a) = 0 \iff C_1 \sin(ka) = 0 \iff ka = n\pi, \quad n \in \mathbb{N}_0$

$\Rightarrow$ nombres d'onde **acceptables** : $k_n = n\frac{\pi}{a}$ (cf corde vibrante : $\lambda = \frac{2L}{n}$)

$\Rightarrow$ énergies **quantifiées** (spectre quadratique) : $E_n = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}, \quad n \in \mathbb{N}_0$

- Applications : **nanotechnologies** (points quantiques, diodes laser...)

Fonctions d'onde des états liés

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}, \quad n \in \mathbb{N}_0$$

$$\psi_n(x) = C_1 \sin k_n x = C_1 \sin \frac{\pi n x}{a}$$

- $(n - 1)$ zéros, paires/impaires
- Normalisation

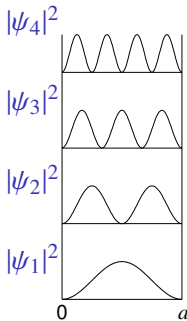
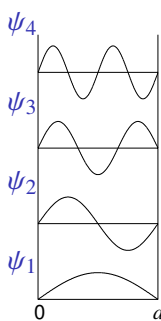
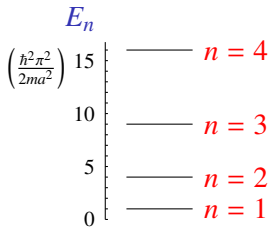
$$\begin{aligned} 1 &= \int_0^a |C_1|^2 \sin^2 \frac{\pi n x}{a} dx \\ &= \frac{1}{2} |C_1|^2 \int_0^a \left(1 - \cos \frac{2\pi n x}{a}\right) dx \\ &= \frac{1}{2} a |C_1|^2 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow C_1 = \sqrt{\frac{2}{a}} \text{ (choisi réel positif)}$$

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

- Orthonormalité (H hermitique)

$$\int_0^a \psi_n(x) \psi_{n'}(x) dx = \delta_{nn'}$$



- 1 États liés et états libres
- 2 Particule dans une boîte
- 3 Oscillateur harmonique**
- 4 Barrière de potentiel constante
- 5 Effet tunnel

Équation de Schrödinger en variables réduites

- Particule de masse m dans le potentiel $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$
 $\Rightarrow$ équation de Schrödinger stationnaire (unités vérifiables)

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2\right) \psi(x) = E\psi(x) \quad (1)$$

- Choix d'un système d'unités $\Rightarrow$ changement de variables

▶ longueur : paramètre d'oscillateur $b = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$

$\Rightarrow u = \frac{x}{b}$ (sans dimension), $\frac{d}{dx} = \frac{1}{b} \frac{d}{du}$ et $\varphi(u) \equiv \psi(bu)$

▶ énergie : $\frac{\hbar^2}{mb^2} = m\omega^2 b^2 = \hbar\omega \Rightarrow \epsilon = E/\hbar\omega$ (sans dimension)

$\Rightarrow$ équation (1) passe en unités réduites (unités non vérifiables)

$$-\varphi''(u) + u^2\varphi(u) = 2\epsilon\varphi(u) \quad (2)$$

- Forme asymptotique (potentiel confinant) $-\varphi''(u) + u^2\varphi(u) \underset{|u| \rightarrow \infty}{\sim} 0$

Solution approchée (WKB) $\varphi \sim e^{-u^2/2} \Rightarrow \varphi' \sim -ue^{-u^2/2} \Rightarrow \varphi'' \sim u^2 e^{-u^2/2}$
 $\Rightarrow$ changement de fonction $\varphi(u) \equiv e^{-u^2/2} F(u) \Rightarrow \varphi' = \dots \Rightarrow \varphi'' = \dots$
 $\Rightarrow$ équation (2) $\times e^{u^2/2} \Rightarrow$ équation différentielle de Hermite

$$F''(u) - 2uF'(u) + (2\epsilon - 1)F(u) = 0 \quad (3)$$

Résolution par séries de l'équation de Hermite

• Point ordinaire $u = 0 \Rightarrow F(u) \equiv \sum_{j=0}^{\infty} a_j u^j = \sum_{j=-2}^{\infty} a_{j+2} u^{j+2}$

$$(3) \Rightarrow \sum_{j=-2}^{\infty} a_{j+2}(j+2)(j+1)u^j - 2 \sum_{j=0}^{\infty} a_j j u^j + (2\epsilon - 1) \sum_{j=0}^{\infty} a_j u^j = 0$$

$$\sum_{j=0}^{\infty} [(j+2)(j+1)a_{j+2} - 2ja_j + (2\epsilon - 1)a_j] u^j = 0, \quad \forall u$$

$\Rightarrow$ équations de récurrence $(j+2)(j+1)a_{j+2} = (2j - 2\epsilon + 1)a_j$

$\Rightarrow$ 2 solutions indépendantes : $a_0 \neq 0, a_1 = 0$ ou $a_0 = 0, a_1 \neq 0$

• Forme asymptotique ($|u| \rightarrow \infty$) : $(j+2)a_{j+2} \underset{j \rightarrow \infty}{\sim} 2a_j$

$$\Rightarrow a_j \equiv a_{2k} \underset{k \rightarrow \infty}{\sim} \frac{\tilde{a}_0}{k!} \Rightarrow F(u) \underset{|u| \rightarrow \infty}{\sim} \tilde{a}_0 \sum_{k=0}^{\infty} \frac{u^{2k}}{k!} = \tilde{a}_0 e^{u^2} \Rightarrow \varphi(u) \underset{|u| \rightarrow \infty}{\sim} \tilde{a}_0 e^{u^2/2}$$

$\Rightarrow$ série converge vers fonction **divergente**, non physique

$\Rightarrow$ série **tronquée** = **polynôme de Hermite** : $a_{i>n} = 0, a_n \neq 0$

$$\iff 2n - 2\epsilon + 1 = 0$$

Quantification de l'énergie

- Spectre **discret**, linéaire

$$\epsilon = n + \frac{1}{2} \Rightarrow E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega$$

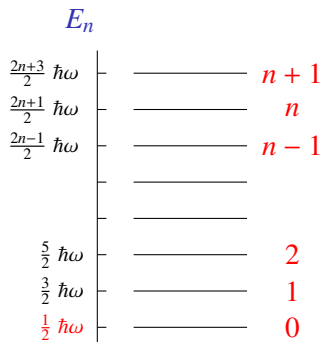
- Énergie vibration minimale (point zéro)

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega$$

- Applications : $\forall$ oscillations autour d'une **position d'équilibre**
Exemples : vibrations de molécules, de réseaux cristallins...

- Généralisation importante : **théorie quantique des champs**

- ▶ apparition/disparition des particules
- ▶ **n = nombre de particules**
- ▶ (pseudo)particule = quantum de vibration du champ
- ▶ exemples : (phonons), **photons**, $\forall$ particule élémentaire



Fonctions d'onde des états liés

$$\varphi_n(u) \propto H_n(u) e^{-u^2/2}$$

- $H_n(u)$ = polynôme de Hermite, degré n , n zéros réels, **parité** $(-1)^n$

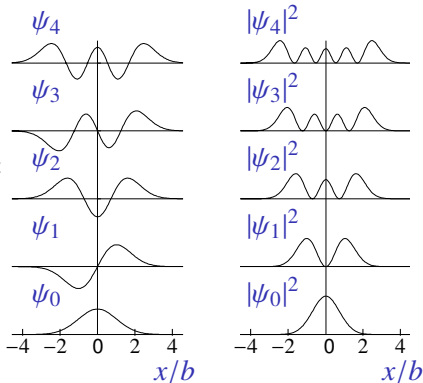
$$H_0(u) = 1, \quad H_1(u) = 2u$$

$$H_2(u) = 4u^2 - 2, \quad H_3(u) = 8u^3 - 12u$$

$$H_n(x) = e^{x^2} \left(-\frac{d}{dx} \right)^n e^{-x^2}$$

- Fonctions **dimensionnées**

$$\begin{aligned} \psi_n(x) &= \frac{1}{\sqrt{b}} \varphi\left(\frac{x}{b}\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{b} \sqrt{\pi} 2^n n!} H_n\left(\frac{x}{b}\right) e^{-x^2/2b^2} \end{aligned}$$



- et **orthonormées** (H **hermitique**) $\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n(x) \psi_{n'}(x) dx = \delta_{nn'}$
- Similaires à particule dans une boîte mais **points d'inflexion** aux points de rebroussement classiques $E = V(x)$

- 1 États liés et états libres
- 2 Particule dans une boîte
- 3 Oscillateur harmonique
- 4 Barrière de potentiel constante**
- 5 Effet tunnel

Équation de Schrödinger stationnaire

- Effet d'un potentiel sur une **particule libre**

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

⇒ résolution **par morceaux**

- Pour **$E < V_0$** (réflexion totale en classique)

$$\begin{cases} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x) \equiv \psi''(x) + k^2\psi(x) = 0 & x < 0 \text{ et } a < x \\ \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - \frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2} \psi(x) \equiv \psi''(x) - K^2\psi(x) = 0 & 0 \leq x \leq a \end{cases}$$

- Particule **venant de gauche**

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + Re^{-ikx} & x < 0 \\ A \sinh Kx + B \cosh Kx & 0 \leq x \leq a \\ Te^{ikx} + 0 & x > a \end{cases}$$

- R = **coefficient de réflexion** ($|R|^2$ = probabilité de réflexion)
- T = **coefficient de transmission** ($|T|^2$ = probabilité de transmission)

Probabilités de réflexion et transmission

- **Continuité** de $\psi(x)$ et $\psi'(x)$ en $x = 0$ et $x = a$ ($v^2 \equiv \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}}$)

$$\begin{cases} 1 + R = B \\ ik(1 - R) = KA \\ A \sinh Ka + B \cosh Ka = Te^{ika} \\ K(A \cosh Ka + B \sinh Ka) = ikTe^{ika} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} T = \frac{e^{-ika} 2kK}{2kK \cosh Ka + i(K^2 - k^2) \sinh Ka} \\ R = -iTe^{ika} \frac{v^2 \sinh Ka}{2kK} \\ A = \dots \\ B = \dots \end{cases}$$

$$\Rightarrow |T|^2 = \frac{4k^2 K^2}{4k^2 K^2 + v^4 \sinh^2 Ka} \neq 0, \quad |R|^2 + |T|^2 = 1$$

- $\psi(x) \neq 0$ pour $x > 0 \Rightarrow$ probabilité de présence non nulle **dans** et **au-delà** de la barrière (**effet tunnel**) mais **décroissance exponentielle**
- Barrière **large** $\Rightarrow$ **grande sensibilité** à la largeur et à l'énergie

$$|T|^2 \underset{Ka \gg 1}{\approx} \frac{16k^2 K^2}{v^4} e^{-2Ka}$$

- **Paquet d'ondes** (combinaison linéaire de plusieurs E) $\Rightarrow$ **division**

- 1 États liés et états libres
- 2 Particule dans une boîte
- 3 Oscillateur harmonique
- 4 Barrière de potentiel constante
- 5 Effet tunnel

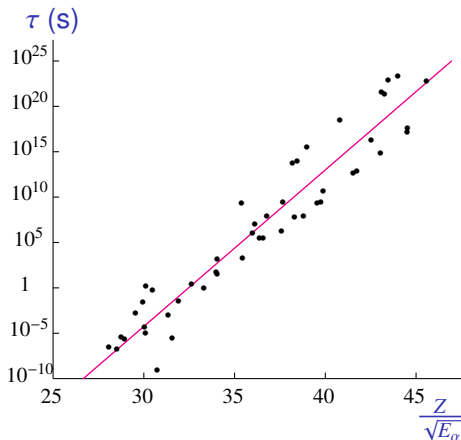
Effet tunnel en physique nucléaire

- Barrière entre noyaux Z_1, Z_2
= répulsion **électrostatique**
versus attraction **nucléaire forte**
- Probabilité transmission (WKB)

$$|T|^2 \approx \exp(-2\pi\eta)$$

- ▶ $\eta = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar v}$ (sans dimension)
= paramètre de Sommerfeld
- ▶ $v = \sqrt{\frac{2E}{\mu}}$ = vitesse relative

- Fusion (Soleil, ITER) : difficulté à vaincre la répulsion



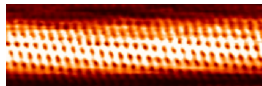
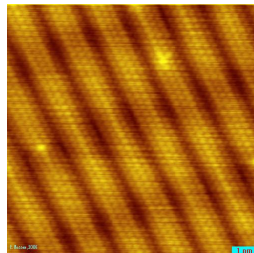
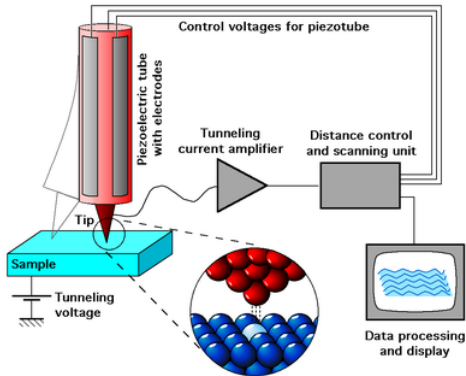
- Radioactivité α : **durées de vie τ** très variables

- Exemple : ${}_{92}^{238}\text{U}_{146} \rightarrow {}_{90}^{234}\text{Th}_{144} + {}_2^4\text{He}$ ($Z_1 = Z = 90, Z_2 = 2$)

- ▶ $\tau_{1/2} = 1.41 \times 10^{17} \text{ s} = 4.5 \times 10^9 \text{ ans}, E_\alpha = 4.267 \text{ MeV}$

Nanotechnologies : microscope à effet tunnel

- Barrière entre la surface et l'échantillon (métalliques) : **potentiel d'extraction** des électrons
- Courant proportionnel à $T \Rightarrow$ **très sensible** à la distance
 $\Rightarrow$ visualisation et contrôle



[Wikipedia]