

Physique microscopique - 2^{ème} partie

I

- 1- Dualité onde - corpuscule
- 2- Propriétés des fonctions d'onde
Equation de Schrödinger -
- 3- Particule dans un potentiel constant

II - Etude de potentiels plats par morceaux

- 1- Introduction
- 2- Barrière de potentiel
- 3- Barrière de potentiel - Effet tunnel
- 4- Puits de potentiel
- 5- Etude d'un système quantique: la molécule d'ammoniac NH_3 .

Dualité onde - corpuscule

①

La diffraction de la lumière ou les franges d'interférence mettent en évidence l'aspect ondulatoire du photon - L'effet Compton s'explique en le considérant le photon comme une particule.

Cette dualité onde - corpuscule n'est pas propre au photon - Les particules massives, naturellement considérées sous leur aspect corpusculaire, possèdent également des propriétés ondulatoires.

	corpuscule	onde
paramètre pertinents	E, \vec{p}	ω, \vec{k}

↙ ↘
onde - corpuscule

$$E = \hbar \omega$$

$$\vec{p} = \hbar \vec{k} \quad \Rightarrow \quad \lambda = \frac{h}{p}$$

Ainsi à toute particule massique d'énergie E et de quantité de mouvement \vec{p} on associe une fonction d'onde complexe $\Psi(\vec{r}, t)$. La longueur d'onde est reliée à la quantité de mouvement par la relation $\lambda = \frac{h}{p}$ (longueur d'onde de de Broglie).

Pourquoi ces propriétés ondulatoires ne se manifestent-elles pas à notre échelle ?

Considérons une masse de $10 \mu\text{g}$ se déplaçant à une vitesse de 1 cm/s . La longueur d'onde correspondante est $\lambda \sim 6,6 \cdot 10^{-22} \text{ cm}$. Or pour mettre en évidence un comportement ondulatoire, il faut que le système avec lequel interagit l'onde présente des distances caractéristiques du même ordre de grandeur que la longueur d'onde.

Des électrons d'énergie cinétique $\sim 150 \text{ eV}$, ou des neutrons d'énergie cinétique $\sim 80 \text{ meV}$ ont une longueur d'onde de l'ordre de 1 \AA . On peut donc s'attendre à ce que l'onde associée soit diffractée par le réseau des atomes d'un cristal.
 \Rightarrow cf expérience de Davisson et Germer.

Propriétés des fonctions d'onde

* Une fonction d'onde $\Psi(\vec{r}, t)$ caractérise un état de la particule. Toute fonction d'onde $\Psi'(\vec{r}, t) = \lambda \Psi(\vec{r}, t)$ où λ est un coefficient complexe, décrit le même état. A partir d'une fonction d'onde normée (telle que $\int \Psi(\vec{r}, t) \Psi^*(\vec{r}, t) d^3\vec{r} = 1$) on peut alors définir la densité de probabilité de présence :

$$* \Psi(\vec{r}, t) \Psi^*(\vec{r}, t) d^3\vec{r} = \mathcal{P}(\vec{r}, t) d^3\vec{r}$$

représente la probabilité que la particule se trouve dans le volume élémentaire $d^3\vec{r}$ centré sur \vec{r} , à l'instant t .
Autrement dit, le ~~carré~~ carré du module de la fonction d'onde normée est la densité de probabilité de présence de la particule.

* Toute combinaison linéaire de deux fonctions d'onde ^{non proportionnelles} $\Psi_1(\vec{r}, t)$ et $\Psi_2(\vec{r}, t)$ pouvant représenter la particule est une fonction d'onde $\Psi_3(\vec{r}, t)$ qui peut également la représenter. Les états de la particule associés à $\Psi_1(\vec{r}, t)$, $\Psi_2(\vec{r}, t)$ et $\Psi_3(\vec{r}, t)$ sont différents.

* Toute fonction d'onde associée à une particule massive non relativiste doit vérifier l'équation suivante :

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

Cette équation est connue sous le nom d'équation de Schrödinger.

* Il existe des états particuliers de la particule ⁽⁴⁾ pour lesquels la densité de probabilité de présence $P(\vec{r}, t)$ est indépendante de t . Ces états sont appelés états stationnaires de la particule. Les fonctions d'onde associées aux états stationnaires sont de la forme:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) e^{-i\omega t}$$

$\Psi(\vec{r}, t)$ devant vérifier l'équation de Schrödinger, il vient:

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

où $E = \hbar \omega$ est l'énergie de la particule qui se trouve dans l'état stationnaire $\Psi(\vec{r}, t)$.

Cette équation est appelée équation de Schrödinger des états stationnaires.

* Toute fonction d'onde correspondant à un état quelconque de la particule peut être exprimée sous la forme d'une combinaison linéaire de fonctions d'onde d'états stationnaires.

Particule dans un potentiel constant.

(5)

Dans un potentiel $V(x) = V_0$ constant, la particule est dite libre.

Nous allons chercher, dans un premier temps, les états stationnaires de cette particule de masse m , en nous limitant au cas d'un problème à une dimension.

L'équation de Schrödinger des états stationnaires s'écrit :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} = (E - V_0) \psi(x)$$

Pour $E > V_0$, la solution générale est de la forme :

$$\psi(x) = A^+ e^{ik_0 x} + A^- e^{-ik_0 x} \quad \text{où } k_0 = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}$$

L'état stationnaire correspondant est donc

$$\Psi(x, t) = \left(A^+ e^{ik_0 x} + A^- e^{-ik_0 x} \right) e^{-i\omega_0 t}$$

$$\text{avec } E = \hbar \omega_0 = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} + V_0$$
$$\vec{p} = \hbar \vec{k}_0$$

La densité de probabilité de présence $\rho(x)$ est donnée par $\rho(x) = \Psi(x, t) \Psi^*(x, t) = \psi(x) \psi^*(x)$.

D'une manière analogue, on peut définir la densité spectrale en quantité de mouvement $\sigma(p)$ à partir de la transformée de Fourier $F(k)$ de $\psi(x)$:

$$F(k) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) e^{ikx} dx$$

$$\sigma(k) = F(k)F^*(k)$$

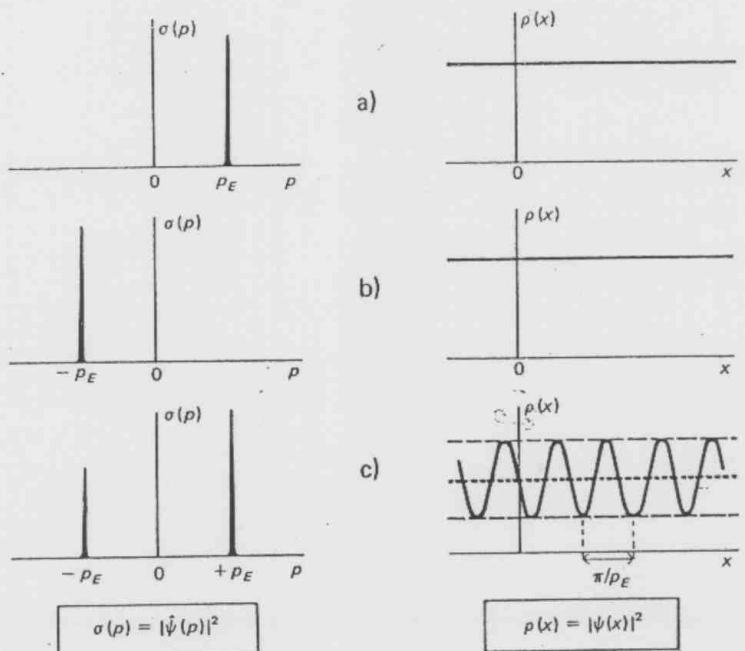


Figure 5.12 États stationnaires d'une particule libre
 A gauche, le spectre en quantité de mouvement, à droite, la densité de probabilité de localisation (arbitrairement normalisée) pour :
 a) un état stationnaire d'énergie E qui est aussi état propre de la quantité de mouvement, avec la valeur propre $p_E = \sqrt{2mE}$. L'état est totalement délocalisé, et sa densité de localisation constante.
 b) Même chose pour $p = -p_E$.
 c) L'état stationnaire d'énergie E le plus général a une fonction-d'onde superposition des deux précédentes. Sa densité de localisation est oscillante (le « contraste », $\rho_{\max} - \rho_{\min}$ est d'autant plus grand que le spectre en p est plus symétrique).
 Les états considérés ici étant stationnaires, la densité de probabilité $\rho(x)$ ne dépend pas du temps.

Nous avons résolu mathématiquement notre problème de recherche des états stationnaires de la particule matérielle libre. Mais, d'un point de vue physique, ces solutions posent un problème. En effet, comme on peut le voir sur la figure précédente, ils correspondent à une particule totalement délocalisée. Or $\psi(x)\psi^*(x)$ représentant la densité de probabilité de présence de la particule, il est raisonnable d'attendre $\int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x)\psi^*(x) dx = 1$, ou tout au moins que $\psi(x)$ soit de carré sommable.

Les états stationnaires que nous avons obtenus ne vérifient pas cette condition. (7)

Cherchons à exprimer un état quelconque de la particule. D'après la propriété (A-6) des fonctions d'onde il peut être écrit :

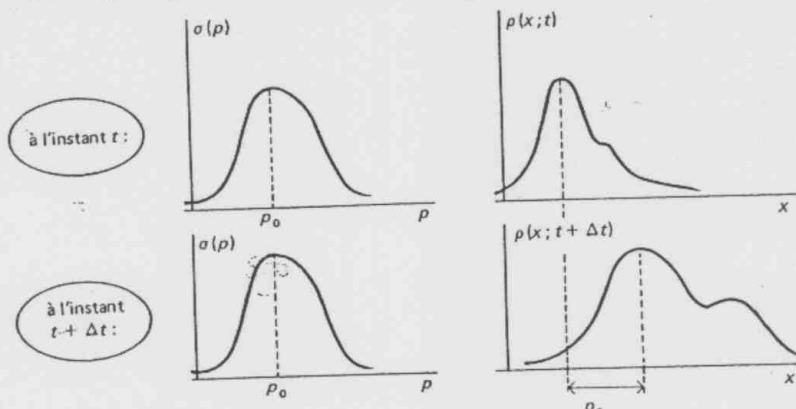
$$\Psi(x, t) = C \int_{-\infty}^{+\infty} F(k) e^{i(kx - \omega_k t)} dk$$

$$\hbar \omega_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V_0$$

où C est une constante de normalisation et $F(k)$ la transformée de Fourier de $\Psi(x, t=0)$.

La signification "physique" de cette relation est la suivante : La fonction d'onde $\Psi(x, t)$ est obtenue par superposition ^{linéaire} d'ondes stationnaires $e^{i(kx - \omega_k t)}$ en poids variables, le poids de l'onde stationnaire de quantité de mouvement $\hbar k$ est donné par $F(k)$. $\Psi(x, t)$ est appelée "paquet d'ondes".

La figure suivante est une illustration d'un paquet d'ondes dans le cas où la fonction $F(k)$ présente des valeurs non négligeables sur un domaine Δk centré autour d'une valeur $k = k_0$.



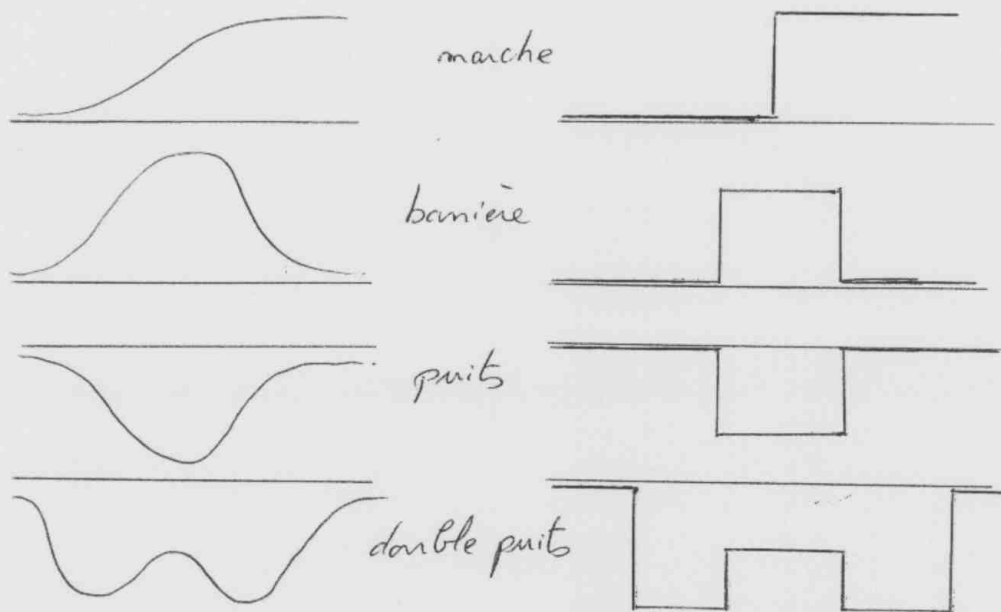
De par la largeur $\Delta(k)$ du spectre en quantité de mouvement, la particule tend à être localisée dans l'espace (ceci est une manifestation du principe d'incertitude d'Heisenberg). (8)

$\Psi(x,t)$ n'étant pas un état stationnaire, la densité de probabilité de présence $\rho(x,t)$ dépend du temps. Cela se traduit, sur notre exemple, par un déplacement et une déformation du paquet d'onde entre les instants t et $(t+\Delta t)$.

⑨

= Marche, barrière, puits :
 Etude de potentiels "plats par morceaux" -

Ces potentiels en paliers sont des approximations de potentiels physiques continus, en rendant l'étude plus aisée.



*

Le point de départ des ces différentes études sera l'équation de Schrödinger. Aussi, nous devons nous demander si cette équation permet de traiter les discontinuités de potentiel.

$$\frac{d^2 \Psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x)] \Psi(x) = 0$$

Supposons qu'en un point $x = x_0$ le potentiel $V(x)$ présente une discontinuité finie:

$$V(x_0 - \epsilon) \neq V(x_0 + \epsilon) \text{ avec } \epsilon > 0$$

Intégrons l'équation de Schrödinger entre $(x_0 - \epsilon)$ et $(x_0 + \epsilon)$. Il vient :

$$\Psi'(x_0 + \varepsilon) - \Psi'(x_0 - \varepsilon) = -\frac{2m}{\hbar^2} \int_{x_0 - \varepsilon}^{x_0 + \varepsilon} [E - V(x)] \Psi(x) dx$$

(10)

Si $V(x)$ est borné sur $[x_0 - \varepsilon, x_0 + \varepsilon]$, et si l'on fait l'hypothèse que $\Psi(x)$ reste également bornée au voisinage de x_0 (ce qui est raisonnable car le contraire correspondrait à une probabilité de présence infinie), alors ~~le terme~~ l'intégrale tend vers zéro avec ε . On en déduit que $\Psi'(x)$ est continue et donc a fortiori que $\Psi(x)$ l'est également.

* Remarque sur les potentiels en paliers:

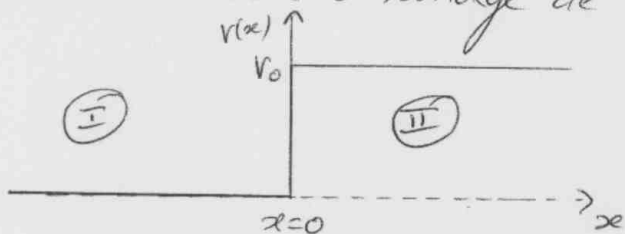
1) L'approximation d'un potentiel physique $V(x)$ par un potentiel en paliers est justifiée lorsque les intervalles sur lesquels $V(x)$ varie sont très petits devant toutes les longueurs intervenant dans le problème, en particulier la longueur d'onde de la particule. Ainsi, cette approximation peut assez d'être valable pour ~~des~~ une particules de grande énergie.

2) On peut remarquer qu'une ~~potentiel~~ particule soumise à un potentiel en paliers subit une force impulsive qui est non nulle seulement aux discontinuités du potentiel. En dehors des discontinuités et si l'énergie E de la particule est supérieure à $V(x)$, alors on se retrouve dans le cas de la particule libre.

Marche de Potentiel

[Nous nous limiterons au traitement du problème à 1 dimension]

Considérons la marche de potentiel suivante, pouvant correspondre au potentiel "vu" par les électrons de conduction d'un métal au voisinage de la surface.



$$V = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ V_0 & x > 0 \end{cases}$$

(L'origine du potentiel est arbitraire).

Classiquement, si la particule arrive de la gauche, si son énergie est inférieure à V_0 , alors la particule s'arrête ~~en~~ lorsque son énergie cinétique est égale à l'énergie potentielle $V(x)$. Si l'énergie de la particule est supérieure à V_0 , alors la particule monte la marche, pendant de l'énergie cinétique qui se transforme en énergie potentielle.

Traitement quantique

Nous cherchons les fonctions d'onde associées aux états stationnaires de la particule. Elles ~~seront~~ sont solution de l'équation de Schrödinger:

$$\boxed{E > V_0} \quad - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} = (E - V(x)) \psi(x)$$

→ Dans la région I

$V(x) = 0$ On a donc

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

La solution générale est de la forme

(cf particule libre)
$$\psi(x) = A_1^+ e^{ik_1 x} + A_1^- e^{-ik_1 x} \quad \text{avec } k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

→ Dans la région (II)

$$\Psi(x) = A_2^+ e^{i k_2 x} + A_2^- e^{-i k_2 x} \quad \text{avec } k_2 = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$$

Appliquons les conditions de continuité de $\Psi(x)$ et de sa dérivée - Il vient :

$$\begin{cases} A_1^+ + A_1^- = A_2^+ + A_2^- \\ k_1 (A_1^+ - A_1^-) = k_2 (A_2^+ - A_2^-) \end{cases}$$

Plaçons-nous dans le cas particulier où une source de particules est située à l'infini dans la région I. Des particules arrivent donc de la gauche sur la barrière. Si elles parviennent à la franchir, rien ne peut provoquer leur changement de sens. D'où $A_2^- = 0$.

Les égalités précédentes deviennent alors :

$$\begin{cases} A_1^+ + A_1^- = A_2^+ \\ k_1 (A_1^+ - A_1^-) = k_2 A_2^+ \end{cases}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} A_2^+ = A_1^+ \frac{2k_1}{k_1 + k_2} \\ A_1^- = A_1^+ \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \end{cases}$$

Le fait que $A_1^- \neq 0$ est un résultat spécifiquement quantique. "Une partie" de l'onde incidente est transmise: passe la barrière, et "une partie" est réfléchiée. Deux grandeurs pertinentes pour traiter ce problème sont les coefficients de réflexion R et de transmission T .