

Approximation de la barrière épaisse.

(25)

Nous allons nous intéresser au cas où le coefficient de transmission est non nul, mais où la profondeur de pénétration est faible par rapport à la largeur de la barrière : $Ka \gg 1$.

Dans ce cas,

$$V_0^2 \operatorname{sh}^2 Ka = \frac{V_0^2 (e^{Ka} - e^{-Ka})^2}{4} \approx \frac{V_0^2 e^{2Ka}}{4} \gg 4E(V_0 - E)$$

Il vient donc

$$T \approx \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-2Ka}$$

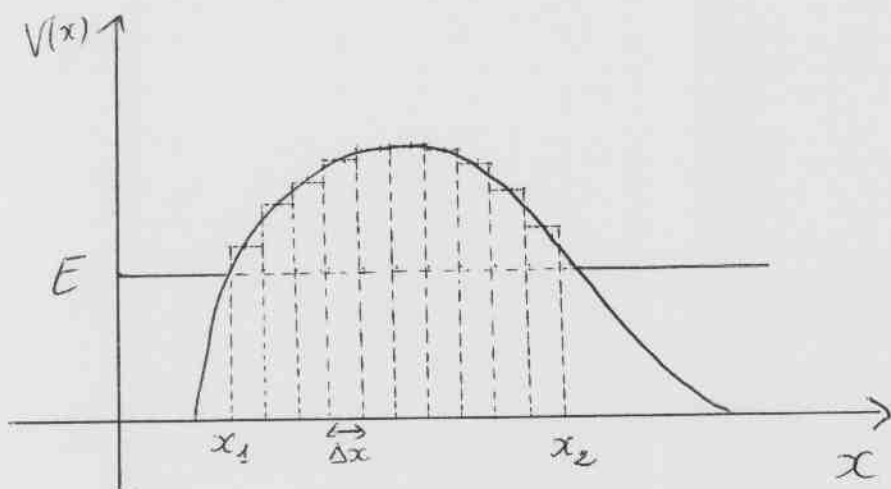
Le facteur $\frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2}$ est maximum pour $E = \frac{1}{2} V_0$; il est alors égal à 4. Ses variations sont faibles par rapport à celles de e^{-2Ka} . Aussi le résultat de la transmission d'une barrière de potentiel, dans le cadre de l'approximation de la barrière épaisse ($aK \gg 1$), est connu sous la forme

$$T \approx e^{-2Ka} \quad \text{avec} \quad K = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

a et V_0 sont respectivement la largeur et la hauteur de la barrière.

(26)

Coefficient de transmission d'une barrière épaisse quelconque.



$$V(x_1) = V(x_2) = E$$

$$\Delta x K_i = \Delta x \frac{\sqrt{2m(V(x_i) - E)}}{\hbar}$$

$$\Delta x K_i \gg 1.$$

On découpe la barrière de forme quelconque en barrières épaisses élémentaires de longueur Δx (on considère que l'on peut appliquer le résultat précédent à chaque barrière élémentaire).

La transmission de la barrière est le produit des transmissions élémentaires. Il vient :

$$T = \prod_i e^{-2 K_i \Delta x} \quad \text{avec } K_i = \frac{\sqrt{2m(V(x_i) - E)}}{\hbar}$$

$$\ln T = \sum \frac{-2}{\hbar} \sqrt{2m(V(x_i) - E)} \Delta x$$

Remplaçant les éléments finis Δx par les éléments différentiels dx , on obtient :

$$\ln T = \frac{-2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(V(x) - E)} dx$$

Et donc,

$$T = \exp \left[-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(V(x) - E)} dx \right]$$

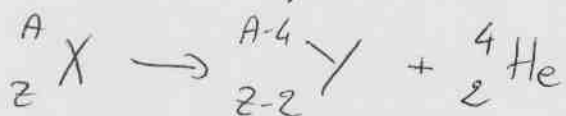
(27)

La démonstration ci-dessus n'est pas rigoureuse. Entre autres réserves, on peut noter que la formule $T \sim e^{-2K\alpha a}$ ne peut pas être appliquée au voisinage de x_1 et x_2 où $V(x)$ est proche de E . Mais il s'avère tout de même que la formule obtenue par la transmission T rend compte d'une manière très satisfaisante des résultats expérimentaux dans différents domaines, comme par exemple celui de la radioactivité α des noyaux lourds.

Application à la radioactivité α .

La particule α est un noyau d'hélium (constitué de 2 protons et 2 neutrons). Sa masse M est de l'ordre de 7000 fois celle de l'électron, et sa charge est égale à $2e$.

La radioactivité α correspond à l'émission d'une particule α par un noyau ${}^A_Z X$ (noyau constitué de A nucléons dont Z protons):



Le produit de la réaction est le noyau ${}^{A-4}_{Z-2} Y$.

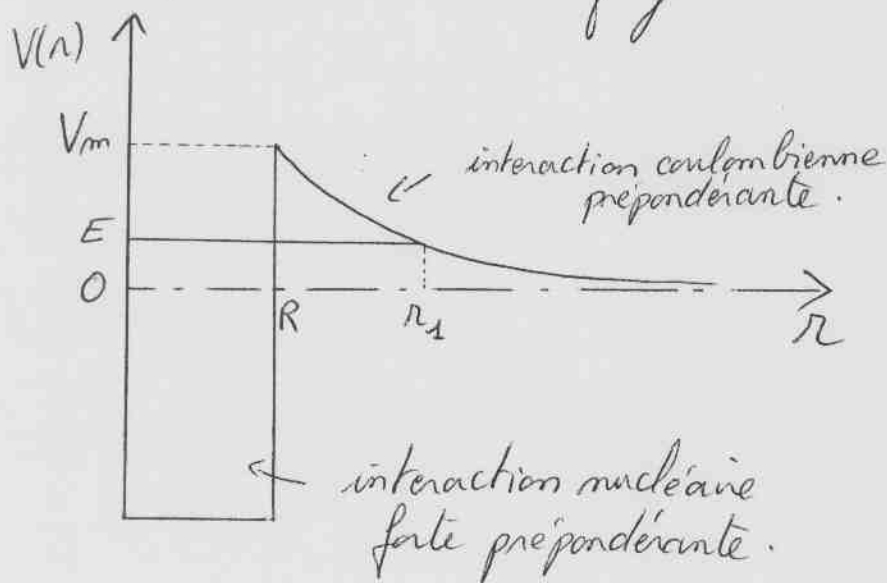
Les particules α sont émises avec des énergies E comprises entre 4 et 9 MeV, ce qui correspond à

(28)

des longueurs d'onde de de Broglie de même
l'ordre de grandeur que les rayons nucléaires :

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2ME}} \approx 7 \cdot 10^{-15} \text{ m} \approx \text{rayon du noyau.}$$

On peut schématiser la situation en considérant que la particule α est retenue dans le noyau par des forces nucléaires fortes qui dominent la répulsion coulombienne proton-proton. Une fois que la particule α a quitté le noyau, son énergie potentielle est simplement le terme de Coulomb. Ceci est résumé sur la figure suivante :



L'expérience montre que des particules d'énergie $E < V_m$ sont émises; ceci s'explique par effet tunnel. Nous allons calculer la transmission T de cette barrière de potentiel en utilisant le résultat obtenu pour une barrière épaisse quelconque.

29
 Au-delà de $r = R$, le potentiel est donné par

$$V(r) = \frac{z(z-2)e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$
 (interaction coulombienne).

r_1 est défini comme étant la valeur de r pour laquelle l'énergie potentielle est égale à l'énergie totale E de la particule α :

$$\frac{z(z-2)e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} = V(r_1) = E.$$

Soit $\gamma = \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{2Mz(z-2)e^2 r_1}{4\pi\epsilon_0}}$. D'après le

résultat obtenu au paragraphe précédent, on peut écrire:

$$T = \exp\left[-\frac{2\gamma}{\sqrt{r_1}} \int_R^{r_1} \sqrt{\frac{1}{r} - \frac{1}{r_1}} dr\right]$$

Posons $\cos^2 u = \frac{r}{r_1}$ et $\cos^2 u_0 = \frac{R}{r_1}$. $dr = -2r_1 \sin u \cos u du$

Pour $\begin{cases} r = R, & u = u_0 \\ r = r_1, & u = 0 \end{cases}$

Il vient :

$$\begin{aligned} \int_R^{r_1} \sqrt{\frac{1}{r} - \frac{1}{r_1}} dr &= 2\sqrt{r_1} \int_0^{u_0} \sin^2 u du \\ &= \frac{1}{2}\sqrt{r_1} (2u_0 - \sin 2u_0) \end{aligned}$$

Si $R \ll r_1$, alors $\cos^2 u_0 \ll 1$ et u_0 est de la forme

$$u_0 = \frac{\pi}{2} - \epsilon.$$

En utilisant le développement en série de Taylor de $\cos x$ au voisinage de $x = \frac{\pi}{2}$, il vient :

au deuxième
 ordre

$$\cos x = \cos\left(\frac{\pi}{2} + \varepsilon\right) = \cos\frac{\pi}{2} + \cos'(x)\Big|_{x=\frac{\pi}{2}} \times \varepsilon + \frac{1}{2} \cos''(x)\Big|_{x=\frac{\pi}{2}} \times \varepsilon^2 + \dots$$

$$= 0 - \varepsilon + 0 + \dots \simeq -\varepsilon$$

$$\cos \mu_0 = \sqrt{\frac{R}{r_1}} \Rightarrow \mu_0 \simeq \frac{\pi}{2} - \sqrt{\frac{R}{r_1}}$$

$$\text{Et donc } \sqrt{r_1} (2\mu_0 - \sin 2\mu_0)/2 \simeq \sqrt{r_1} \left(\frac{\pi}{2} - 2\sqrt{\frac{R}{r_1}}\right)$$

D'où l'expression du coefficient de transmission:

$$T = \exp\left[-\gamma\left(\pi - 4\frac{R}{r_1}\right)\right]$$

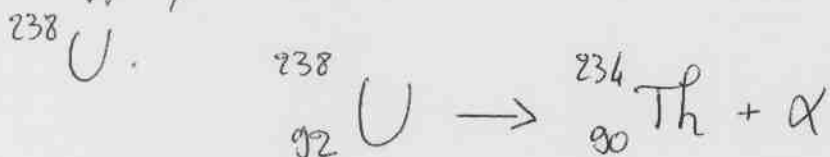
Si on remplace γ par son expression en fonction de r_1 , et si on exprime r_1 en fonction de E , énergie de la particule α , on obtient une loi de la forme

$$\boxed{\ln T = A + B E^{-1/2}}$$

$$\text{avec } A = \frac{4}{\hbar} \sqrt{\frac{R^2 \pi^2 (z-2)^2 e^2}{4\pi \varepsilon_0}} \quad \text{et } B = -\frac{\pi}{\hbar} \frac{2(z-2)e^2}{4\pi \varepsilon_0} \sqrt{2\pi}$$

Cette loi, donnant la probabilité d'émission d'une particule α en fonction de son énergie, est connue sous le nom de loi de Gamow-Condor-Gurney.

Appliquons ce résultat au cas de l'isotope de l'uranium



Pour ^{238}U , $R \approx 8 \cdot 10^{-15} \text{ m}$

$$E \approx 4,2 \text{ MeV}$$

$$r_1 \approx 7R$$

$$V_{\text{max}} \approx 40 \text{ MeV}$$

On trouve alors $\gamma \approx 55$, ce qui donne un coefficient de transmission $T \approx e^{-89} \approx 2 \cdot 10^{-39}$.

Une particule α d'énergie 4,2 MeV a une vitesse voisine de 10^7 m/s . Elle effectue des aller-retour dans le noyau dont le rayon est de l'ordre de 10^{-14} m . Elle effectue donc aux environs de 10^{21} "traversées" par seconde, avec à chaque fois une probabilité T de franchir la barrière de potentiel. La probabilité de désintégration α par seconde est donc

$$p \approx 10^{21} T = 2 \cdot 10^{-18} \text{ s}^{-1}$$

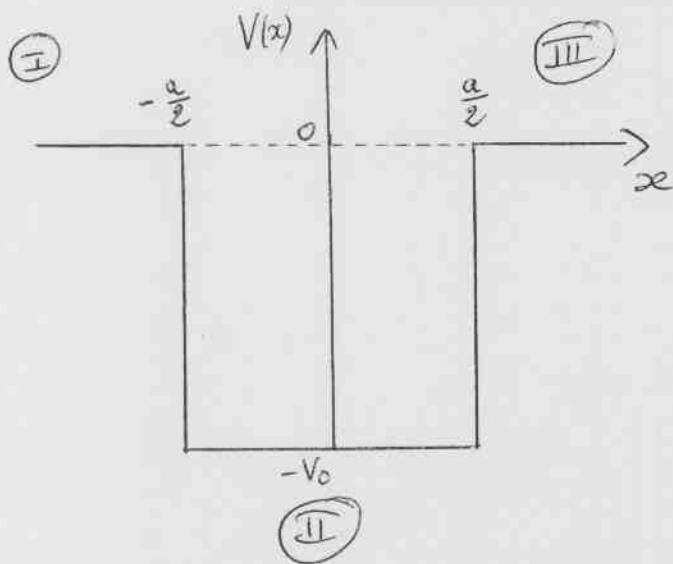
Supposons qu'à $t=0$ il y ait N_0 noyaux d' ^{238}U . A l'instant t il y en a $N(t)$. La variation dN pendant dt est donnée par $dN = -Np dt$, d'où :

$$N(t) = N_0 e^{-pt}$$

p représente le temps au bout duquel N_0 est divisé par e .

Si l'on détermine expérimentalement p à partir du taux de désintégration α , on trouve $p = 5 \cdot 10^{-18} \text{ s}^{-1}$. Ce résultat est en très bon accord avec la valeur que nous avons estimée à partir de notre modèle.

Puits de potentiel



Considérons un puits de potentiel plat et cherchons, d'une manière qualitative, la forme des états stationnaires dans les régions I, II et III.

- * Si l'énergie totale E de la particule considérée est positive, alors $(E - V(x))$ est partout positif. La fonction d'onde sera donc partout propagative, avec réflexion partielle aux discontinuités de potentiel.
- * Si $-V_0 < E < 0$, la fonction d'onde ^{peut} se propager dans la région II. Les régions I et III sont classiquement interdites. D'après les résultats obtenus pour la marche et la barrière de potentiel, on peut s'attendre à ce que la particule, principalement localisée dans la région II, ait tout de même une probabilité non nulle de se trouver en I ou III (fonction d'onde évanescente).

On peut également prévoir que la propagation de la fonction d'onde "dans le puits" sera soumise à des conditions aux limites, d'une manière similaire

au problème de l'instauration de modes de vibration stationnaires entre les extrémités d'une corde.

Passons à présent à la résolution de l'équation de Schrödinger des états stationnaires. Soit donc $\Psi(x,t) = \Psi(x) e^{-i \frac{E}{\hbar} t}$ un état stationnaire de la particule d'énergie totale E . $\Psi(x)$ vérifie

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

* $E > 0$

Ce cas se traite de la même manière que le cas $E > V_0$ de la barrière de potentiel. $(E - V(x))$ étant partout positif, les solutions sont partout de la forme e^{ikx} .

$$\Psi(x) = \begin{cases} \Psi_1(x) = A_1^+ e^{ik_1 x} + A_1^- e^{-ik_1 x} & x \leq -\frac{a}{2} \\ \Psi_2(x) = A_2^+ e^{ik_2 x} + A_2^- e^{-ik_2 x} & -\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2} \\ \Psi_3(x) = A_3^+ e^{-ik_3 x} & x \geq \frac{a}{2} \end{cases}$$

$$\text{avec } k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad \text{et} \quad k_2 = \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar}$$

En appliquant la condition de continuité de $\Psi(x)$ et $\Psi'(x)$, on retrouve

$$\begin{aligned} T &= \left| \frac{A_3^+}{A_1^+} \right|^2 = \frac{4 k_1^2 k_2^2}{4 k_1^2 k_2^2 + (k_1^2 - k_2^2) \sin^2 k_2 a} \\ &= \frac{4E(E-V_0)}{4E(E-V_0) + V_0^2 \sin^2 k_2 a} \end{aligned}$$

(34)

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

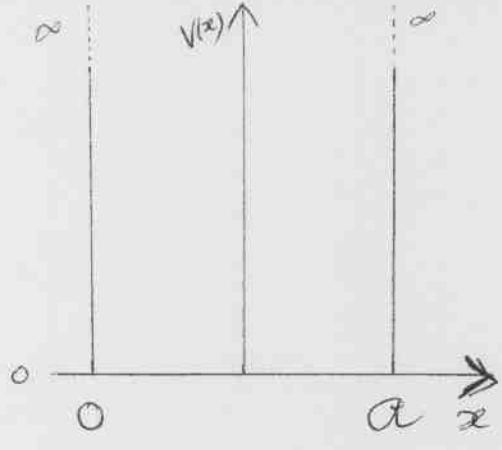
$$= \frac{V_0^2 \sin^2 k_2 a}{4E(E - V_0) + V_0^2 \sin^2 k_2 a} = 1 - T$$

R et T sont donc ici aussi périodiques en fonction de la largeur du puits de potentiel.

Les particules, arrivant de la gauche du puits (choix arbitraire mais conditionnant $A_3^- = 0$), sont soumises à un potentiel attractif. Elles ne sont pas piégées par ce potentiel, mais sont diffusées (on parle d'états de diffusion de la particule). Dans la région \textcircled{II} , les particules ont une vitesse plus rapide qu'en \textcircled{I} et \textcircled{IV} (et donc une longueur d'onde plus courte), l'énergie potentielle étant plus faible.

* $-V_0 < E < 0$

Cas du puits de profondeur infinie



Nous avons montré que la profondeur de pénétration dans une marche de potentiel de hauteur V , de l'onde évanescente associée à une particule d'énergie $E < V$, est donnée par

$$\frac{1}{K} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V-E)}}$$

Il en résulte que si V est infini, la profondeur de pénétration est nulle. $\Psi(x)$ étant continue, elle doit donc s'annuler en $x=0$ et $x=a$, points en lesquels est totalement réfléchi.

Dans le puits, $E > V$ donc la particule peut se propager. Sa fonction d'onde associée est donc de la forme :

$$\Psi(x) = A^+ e^{ikx} + A^- e^{-ikx}$$

avec $k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$

$$\Psi(0) = \Psi(a) = 0$$

$$\Rightarrow \begin{cases} A^+ + A^- = 0 \\ A^+ e^{ika} + A^- e^{-ika} = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} A^+ = -A^- \\ ka = m \cdot \pi \text{ entier} \end{cases}$$

Rq Cela revient à chercher les modes de vibration qui peuvent s'établir entre les extrémités fixes d'une corde: la longueur d'onde doit vérifier:

$$a = m \times \frac{\lambda}{2} \Leftrightarrow k = m \times \frac{\pi}{a}$$

Les différentes ondes réfléchies successivement en 0 et a interfèrent destructivement si cette condition n'est pas vérifiée.

(36)

La particule peut donc se propager dans le puits de potentiel, mais sa longueur d'onde et donc son énergie ne peuvent prendre que certaines valeurs. On dit qu'elles sont quantifiées.

$$\lambda_m = \frac{2a}{m} \quad \left\| \quad E_m = m^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \quad \right\| \quad \text{avec } m=1,2,3,\dots$$

$$\Psi_m(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(m\pi \frac{x}{a}\right) \quad \left\| \right.$$

Le facteur $\sqrt{\frac{2}{a}}$ est déterminé de manière à ce que la probabilité de présence de la particule entre $-\frac{a}{2}$ et $\frac{a}{2}$ soit égale à 1.

Un point important à noter est que le niveau fondamental ~~du~~ est $E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \neq 0$. Il apparaît ainsi qu'une particule confinée ne peut avoir une énergie nulle; cette énergie est d'autant plus élevée que le confinement se fait dans une petite région de l'espace. Ce résultat est à rapprocher du principe d'incertitude de Heisenberg.

Puits de potentiel \longleftrightarrow confinement de la particule

\Rightarrow

- * quantification de l'énergie de la particule
- * énergie minimale non nulle.

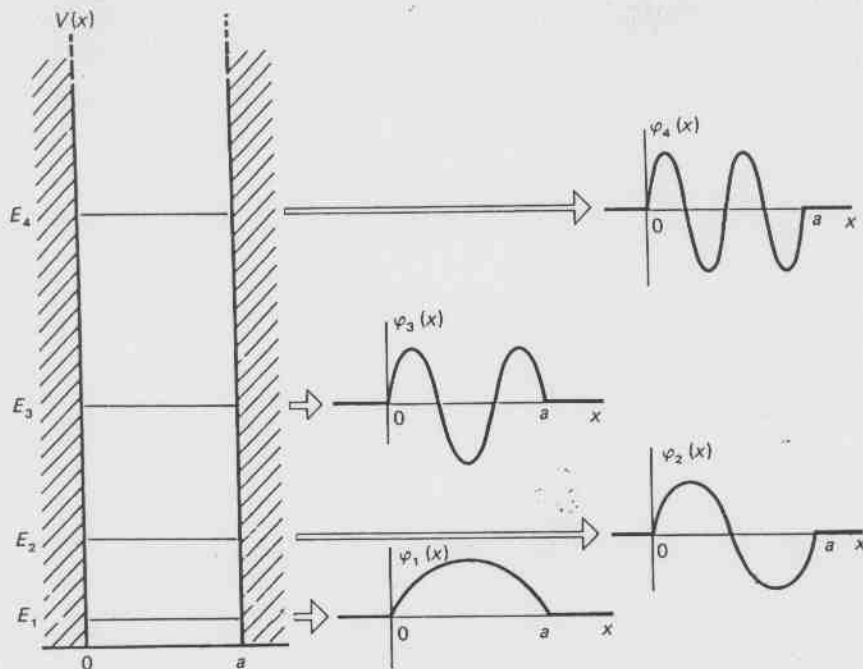


Figure 6.3 Le puits plat infiniment profond

Un puits de potentiel infiniment profond à fond plat représente le confinement d'un quanton, par ailleurs libre, sur un segment aux extrémités infranchissables. Les niveaux d'énergie quantifiée sont indiqués sur le diagramme et, en regard, sont esquissées les fonctions-d'onde des états stationnaires correspondants.

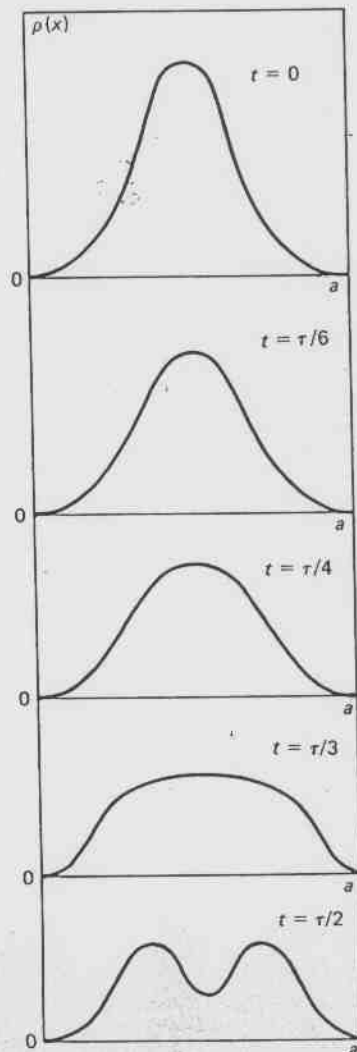


Figure 6.4 Une fonction-d'onde non stationnaire

La fonction-d'onde d'un quanton dans un puits plat infini, est à l'instant $t = 0$, donnée par

$$\psi(x; 0) = C \sin^3 \pi x/a .$$

Les graphes suivants illustrent l'évolution de la densité de probabilité $\rho(x; t) = |\psi(x; t)|^2$ aux temps $t = \tau/6, \tau/4, \tau/3, \tau/2$, où $\tau = ma^2/2\pi$.

L'évolution se poursuit en repassant, à l'envers par les mêmes phases (aux temps $t = 2\tau/3, 3\tau/4, 5\tau/6$) et l'on retrouve la fonction d'onde initiale à l'instant $t = \tau$.

Que l'évolution soit ici périodique (de période τ) est dû à ce que les énergies propres des états stationnaires sont entre elles dans des rapports rationnels. C'est une particularité du puits plat infini.

Etat quelconque, non stationnaire.

La connaissance complète des états stationnaires, c'est à dire de leurs énergies et de leurs fonctions d'onde, permet d'exprimer l'évolution temporelle de n'importe quel état.

Considérons par exemple un état de fonction d'onde à $t=0$

$$\Psi(x, t=0) = \frac{4}{\sqrt{5a}} \sin^3\left(\pi \frac{x}{a}\right) \quad (\text{fonction normée}).$$

On peut remarquer que

$$\sin^3 \alpha = \frac{3}{4} \sin \alpha - \frac{1}{4} \sin 3\alpha,$$

ce qui permet de développer $\Psi(x, t=0)$ sur les fonctions d'onde stationnaires $\Psi_m(x)$:

$$\Psi(x, t=0) = \frac{3}{\sqrt{10}} \Psi_1(x) - \frac{1}{\sqrt{10}} \Psi_3(x)$$

et donc, pour t quelconque :

$$\Psi(x, t) = \frac{3}{\sqrt{10}} \Psi_1(x) e^{-i \frac{E_1}{\hbar} t} - \frac{1}{\sqrt{10}} \Psi_3(x) e^{-i \frac{E_3}{\hbar} t}$$

Puits plat infini à 3 dimensions.

Revenons à présent aux cas des états stationnaires et intéressons-nous au cas du puits plat infini à trois dimensions :

$$V=0 \quad \text{si} \quad \begin{cases} -\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2} \\ -\frac{b}{2} < y < \frac{b}{2} \\ -\frac{c}{2} < z < \frac{c}{2} \end{cases}, \quad V \infty \text{ sinon.}$$

Les états stationnaires sont de la forme

$$\Psi_{m_x, m_y, m_z}(x) = A \sin(m_x \pi \frac{x}{a}) \sin(m_y \pi \frac{y}{b}) \sin(m_z \pi \frac{z}{c}),$$

l'énergie correspondante étant donnée par

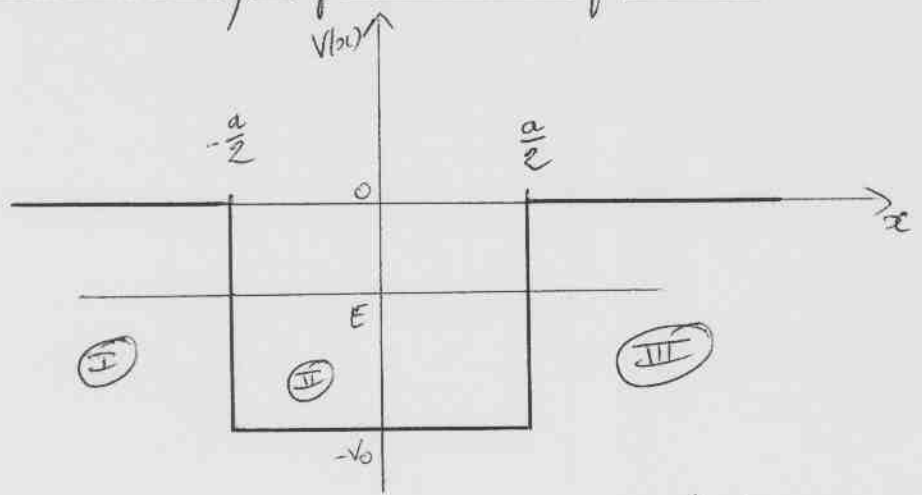
$$E_{m_x, m_y, m_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{m_x^2}{a^2} + \frac{m_y^2}{b^2} + \frac{m_z^2}{c^2} \right) \quad m_x, m_y, m_z \text{ entiers non nuls}$$

On appelle dégénérescence d'un niveau d'énergie E le nombre d'états stationnaires de la particule (caractérisés par m_x, m_y et m_z) dont l'énergie est égale à E.

Par exemple, dans le cas d'un puits cubique ($a=b=c$),

$$E_{1,0,0} = E_{0,1,0}$$
$$E_{1,1,1} = E_{3,3,3} \dots$$

Puits de profondeur finie (à une dimension)



Les régions I et III sont "classiquement" interdites. La fonction d'onde ψ sera donc évanescente. Mais elle sera propagative dans la région II ($E > -V_0$).

Considérations sur la symétrie des fonctions d'onde.

Le profil de potentiel étant symétrique $V(x)=0$, il est raisonnable d'imposer que la probabilité de présence $|\Psi(x)|^2$ le soit également.

$$\Psi(x) \Psi^*(x) = \Psi(-x) \Psi^*(-x)$$

$$\Rightarrow \Psi(-x) = e^{i\alpha} \Psi(x)$$

$$\Rightarrow \Psi(-(-x)) = e^{2i\alpha} \Psi(x) = \Psi(x)$$

$$\text{Donc } e^{2i\alpha} = 1$$

$$\Rightarrow e^{i\alpha} = \pm 1$$

$$\text{et donc } \Psi(-x) = \pm \Psi(x).$$

Les fonctions d'onde stationnaires du puits de potentiel sont donc paires ou impaires.

La solution générale de l'équation de Schrödinger des états stationnaires, pour le profil de potentiel ci-dessus, est :

$$\Psi(x) = \begin{cases} \Psi_1(x) = A_1^+ e^{kx} + A_1^- e^{-kx} & x < \frac{a}{2} \\ \Psi_2(x) = A_2^+ e^{ikx} + A_2^- e^{-ikx} & \frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2} \\ \Psi_3(x) = A_3^+ e^{kx} + A_3^- e^{-kx} & x > \frac{a}{2} \end{cases}$$

$$\text{avec } k = \frac{\sqrt{2m(V_0 + E)}}{\hbar} \quad \text{et } K = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$$

Il est physiquement inacceptable d'avoir une probabilité de présence de la particule qui diverge pour $x \rightarrow \pm \infty$. On doit donc imposer $A_1^- = A_3^+ = 0$.

Nous allons à présent traiter séparément le cas des fonctions paires et impaires.

α) fonctions paires.

$$\Psi(x) = \Psi(-x) \Rightarrow$$

$$\begin{cases} A_1^+ e^{kx} = A_3^- e^{-kx} & |x| \geq \frac{a}{2} \\ A_2^+ e^{ikx} + A_2^- e^{-ikx} = A_2^+ e^{-ikx} + A_2^- e^{ikx} & -\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2} \end{cases}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} A_1^+ = A_3^- \\ A_2^+ = A_2^- \end{cases}$$

La fonction d'onde est donc de la forme :

$$\Psi(x) = \begin{cases} \Psi_1(x) = A_1 e^{kx} & x \leq \frac{a}{2} \\ \Psi_2(x) = A_2 (e^{ikx} + e^{-ikx}) & -\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2} \\ \Psi_3(x) = A_1 e^{-kx} & x \geq \frac{a}{2} \end{cases}$$

Imposons à présent les conditions de continuité de $\Psi(x)$ et $\Psi'(x)$ en $x = -\frac{a}{2}$ ($\Psi(x)$ étant paire, il est inutile de considérer le cas $x = \frac{a}{2}$).

$$\begin{cases} A_1 e^{-k\frac{a}{2}} = A_2 (e^{-ik\frac{a}{2}} + e^{ik\frac{a}{2}}) \\ kA_1 e^{-k\frac{a}{2}} = ikA_2 (e^{-ik\frac{a}{2}} - e^{ik\frac{a}{2}}) \end{cases}$$

$$\Rightarrow \tan\left(k \frac{a}{2}\right) = \frac{k}{K}$$

(41)

k et K dépendant de E , cette égalité ne sera vérifiée que pour certaines valeurs de l'énergie.

On retrouve ainsi, comme dans le cas du puits infini, la quantification des niveaux d'énergie. Quantitativement, les résultats seront différents, les conditions aux limites étant différentes. Dans le cas du puits fini, la fonction d'onde ne s'annule pas en $x = \pm \frac{a}{2}$; l'existence d'une onde évanescente hors du puits entraîne un déphasage à l'occasion de la réflexion de la fonction d'onde sur les "parois" du puits.

De tels états, dont l'énergie est quantifiée de par le confinement de la particule, sont dits des états liés, par opposition aux états de diffusion.

Reprenons le cours de nos calculs dans le but de trouver les "valeurs permises" de l'énergie de la particule.

$$\tan\left(k \frac{a}{2}\right) = \frac{k}{K}$$

$$\text{Posons } k_0 = \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar} = \sqrt{k^2 + K^2}$$

Il vient :

$$\frac{1}{\cos^2\left(\frac{ka}{2}\right)} = 1 + \tan^2\left(\frac{ka}{2}\right) = \left(\frac{k_0}{k}\right)^2$$

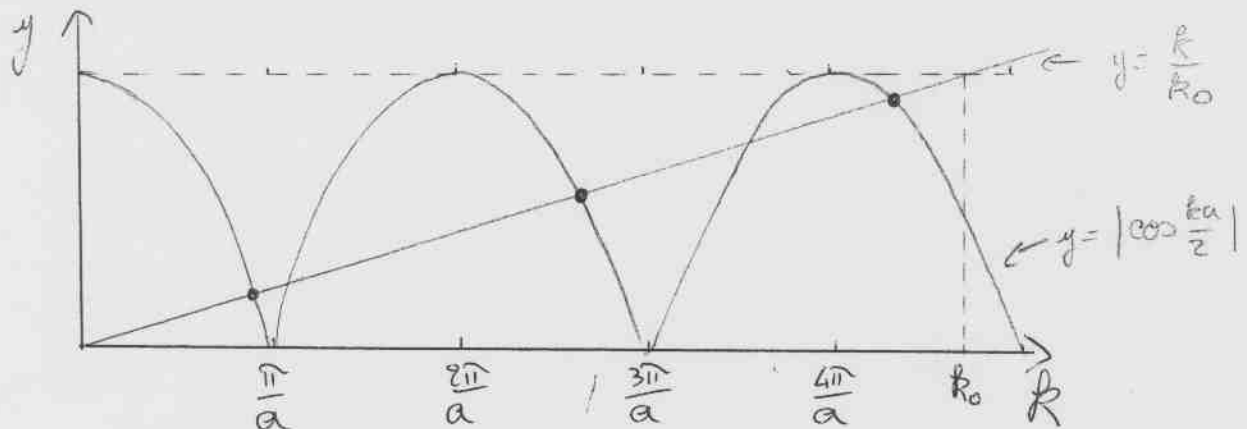
On doit donc rechercher les solutions du système

$$\begin{cases} \left| \cos\left(\frac{ka}{2}\right) \right| = \frac{k}{k_0} \\ \tan\left(\frac{ka}{2}\right) > 0 \end{cases}$$

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$k_0 = \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar}$$

Les niveaux d'énergie sont ainsi déterminés par l'intersection d'une droite de pente $\frac{1}{k_0}$ avec des arcs de sinussoïde.



β) fonctions impaires

$$\Psi(x) = -\Psi(-x) \Rightarrow$$

$$\begin{cases} A_1^+ e^{kx} = -A_3^- e^{ikx} & |x| \geq \frac{a}{2} \\ A_2^+ e^{ikx} + A_2^- e^{-ikx} = (A_2^+ e^{-ikx} + A_2^- e^{ikx}) & -\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2} \end{cases}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} A_1^+ = -A_3^- \\ A_2^+ = -A_2^- \end{cases}$$

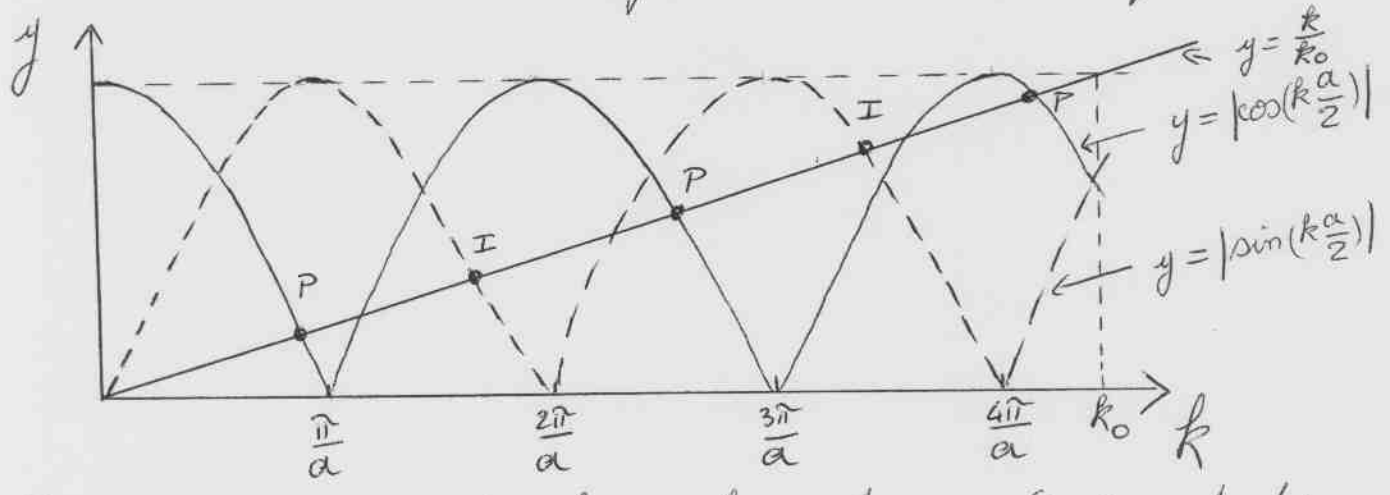
La fonction d'onde est donc de la forme :

$$\Psi_I(x) = \begin{cases} \Psi_1(x) = A_1 e^{kx} & x \leq -\frac{a}{2} \\ \Psi_2(x) = A_2 (e^{ikx} - e^{-ikx}) = B \sin kx & -\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2} \\ \Psi_3(x) = -A_1 e^{-kx} & x \geq \frac{a}{2} \end{cases}$$

Les conditions de continuité de $\Psi(x)$ et $\Psi'(x)$ impliquent :

$$\begin{cases} \left| \sin\left(\frac{ka}{2}\right) \right| = \frac{k}{k_0} & k = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} \\ \tan\left(\frac{ka}{2}\right) < 0 & k_0 = \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar} \end{cases}$$

Ainsi les niveaux d'énergie associés aux fonctions d'onde impaires se déterminent d'une manière similaire au cas des fonctions d'onde paires.



Dans ce cas particulier, il existe 5 états stationnaires liés de la particule dans le puits de potentiel, trois pairs (P) et deux impairs (I).

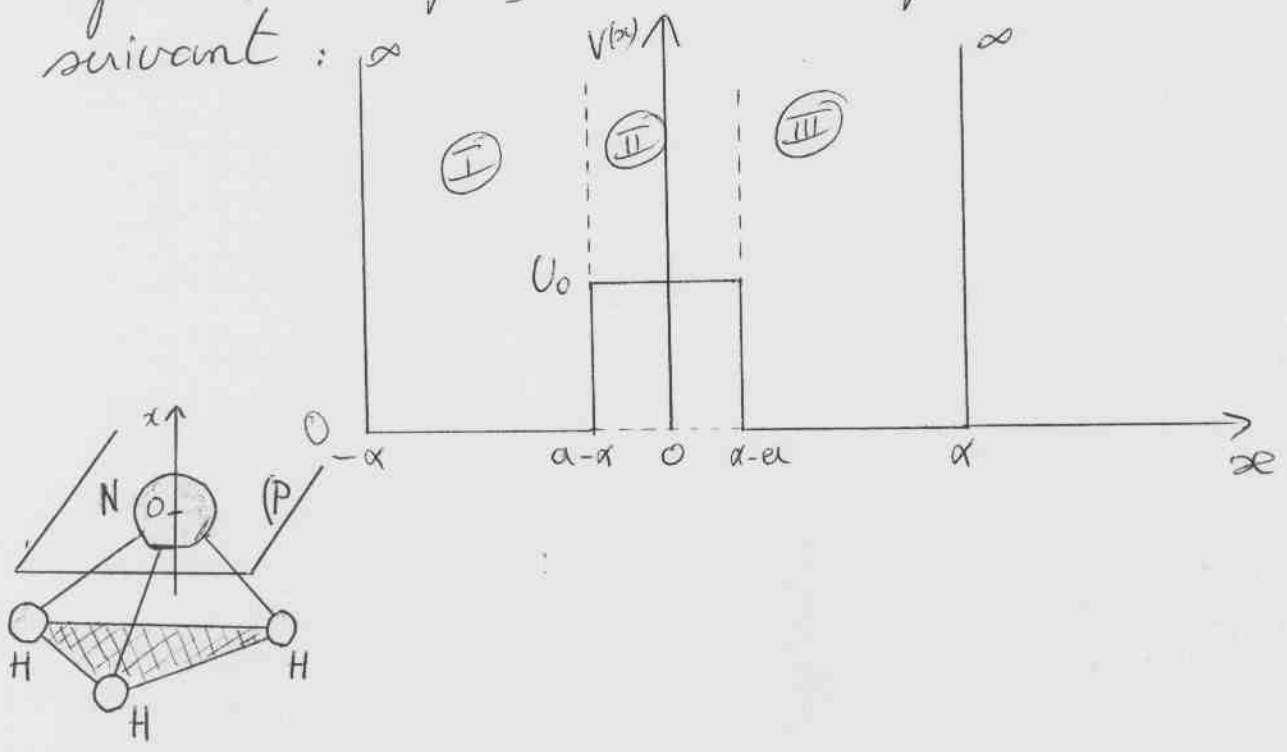
Etude d'un système quantique :
la molécule d'ammoniac NH_3 .

La molécule d'ammoniac NH_3 a la forme d'une pyramide à base triangulaire, l'atome d'azote étant situé au sommet.

Soit P un plan passant par O le centre de l'atome d'azote et parallèle au triangle de base de la molécule. Sur la perpendiculaire au plan P , passant par O , on repère par x la distance à l'origine O .

Les atomes d'hydrogène peuvent passer d'un côté à l'autre du plan P ; deux positions d'équilibre correspondent à $x = \pm a$.

Le problème se ramène à celui d'une particule effective ayant pour masse la masse réduite μ du système, se déplaçant dans le puits de potentiel suivant :



On cherche à déterminer l'expression des fonctions d'onde des états stationnaires de la particule, dans le cas où l'énergie totale E de la particule est telle que $E < U_0$.

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

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

La forme générale de $\psi(x)$ est donc :

$$\psi(x) = \begin{cases} A_1^+ e^{ikx} + A_1^- e^{-ikx} & -a \leq x \leq -a+a \\ A_2^+ e^{Kx} + A_2^- e^{-Kx} & -a+a \leq x \leq a-a \\ A_3^+ e^{ikx} + A_3^- e^{-ikx} & a-a \leq x \leq a \end{cases}$$

avec $k = \frac{\sqrt{2ME}}{\hbar}$ et $K = \frac{\sqrt{2M(U_0 - E)}}{\hbar}$

Pour raison de symétrie du profil de potentiel, comme dans le cas du puits fini, les fonctions d'onde seront paires ou impaires. De plus, le potentiel étant infini en a et $-a$, on doit imposer que la fonction d'onde s'annule en ces points.

Les solutions paires sont donc de la forme :

$$\psi_p(x) = \begin{cases} A \sin K(a+x) & -a \leq x \leq -a+a \\ B \cosh Kx & -a+a \leq x \leq a-a \\ A \sin K(a-x) & a-a \leq x \leq a \end{cases}$$

et les fonctions impaires:

$$\Psi_{\pm}(x) = \begin{cases} -A \sin k(x+a) \\ B \sinh kx \\ A \sin k(x-a) \end{cases}$$

Si nous imposons à présent la continuité de $\Psi(x)$ et $\Psi'(x)$ en $x = \pm(x-a)$, il vient:

pour les fonctions paires $\rightarrow \tan ka = -\frac{k}{K} \coth k(x-a)$

pour les fonctions impaires $\rightarrow \tan ka = -\frac{k}{K} \tanh k(x-a)$

Plaçons-nous dans le cas $E \ll U_0$.

On a alors $k = \frac{\sqrt{2\mu(U_0 - E)}}{\hbar} \approx \frac{\sqrt{2\mu U_0}}{\hbar}$

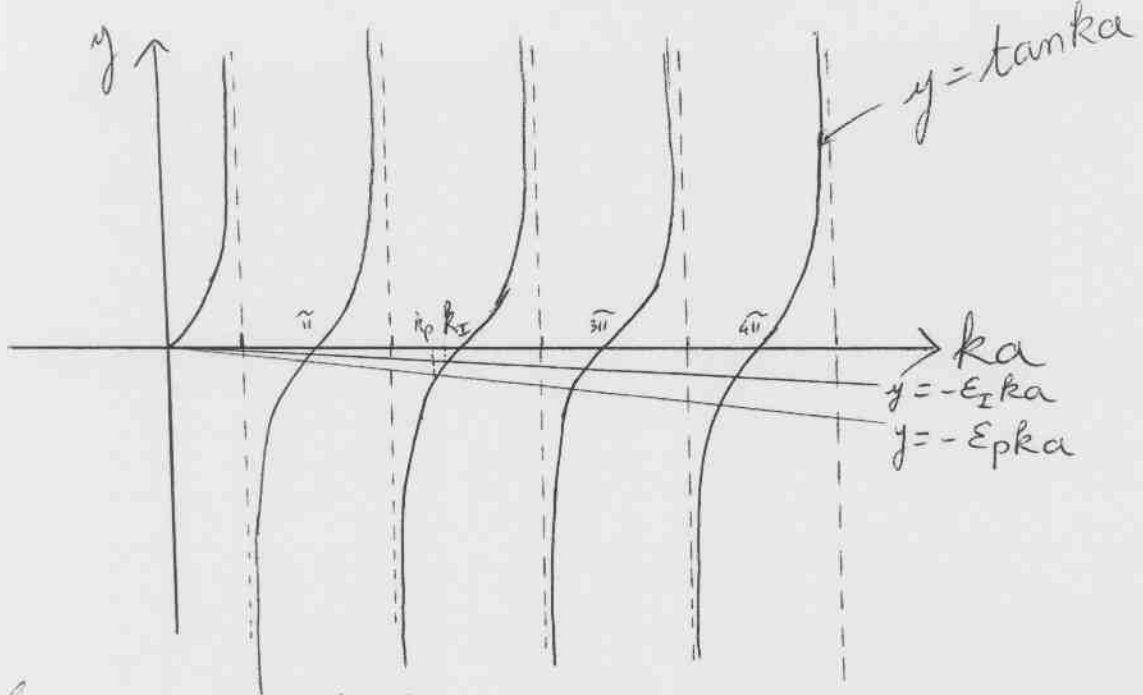
K ne dépend plus de l'énergie, et les égalités précédentes deviennent:

fonctions paires $\rightarrow \tan ka = -\epsilon_p ka$ avec $\epsilon_p = \frac{1}{ka} \coth k(x-a)$

fonctions impaires $\rightarrow \tan ka = -\epsilon_I ka$ avec $\epsilon_I = \frac{1}{ka} \tanh k(x-a)$

Les valeurs de ϵ_p et ϵ_I sont positives, petites par rapport à l'unité et $\epsilon_p > \epsilon_I$.

Les valeurs permises de l'énergie sont données par l'intersection de $y = \tan ka$ avec les deux droites $y = -\epsilon_p ka$ et $y = -\epsilon_I ka$.



Les pentes des droites $y = -\epsilon_I ka$ et $y = -\epsilon_P ka$ étant faibles, les premières intersections avec $y = \tan ka$ sont proches de $ka = \pi$. Approximons $\tan ka$ par une droite au voisinage de $ka = \pi$:

$$\tan ka = \tan \pi + (ka - \pi) \tan' \pi = ka - \pi$$

$$\Rightarrow k_P a \approx \frac{\pi}{1 + \epsilon_P} \quad \text{et} \quad k_I a \approx \frac{\pi}{1 + \epsilon_I}$$

Les deux premiers niveaux d'énergie correspondant respectivement à une fonction d'onde paire et une fonction d'onde impaire, sont donnés par :

$$E_P = \frac{\hbar^2}{2N} \left(\frac{\pi}{a(1 + \epsilon_P)} \right)^2 \quad \text{et} \quad E_I = \frac{\hbar^2}{2N} \left(\frac{\pi}{a(1 + \epsilon_I)} \right)^2$$

$$E_P < E_I$$

Aux états stationnaires d'énergie E_p et E_I sont associées des ~~pas~~ densités de probabilité de présence indépendantes du temps, et qui sont données par:

$$|\Psi_p(x)|^2 = \begin{cases} |A|^2 \sin^2 k(\alpha+x) \\ |B|^2 \cosh^2 Kx \\ |A|^2 \sin^2 k(\alpha-x) \end{cases} \quad \text{fonction d'onde paire}$$

$$|\Psi_I(x)|^2 = \begin{cases} |A|^2 \sin^2 k(\alpha+x) \\ |B|^2 \sinh^2 Kx \\ |A|^2 \sin^2 k(\alpha-x) \end{cases} \quad \text{fonction d'onde impaire}$$

Rq: La probabilité de présence de la particule dans la région II, classiquement interdite, n'est pas nulle (effet tunnel).

⇒ Oscillation de la molécule d'ammoniac.

Considérons les deux états non stationnaires

$$\Psi_I(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \Psi_p(x) e^{-i \frac{E_p t}{\hbar}} - \frac{1}{\sqrt{2}} \Psi_I(x) e^{-i \frac{E_I t}{\hbar}}$$

et

$$\Psi_{III}(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \Psi_p(x) e^{-i \frac{E_p t}{\hbar}} + \frac{1}{\sqrt{2}} \Psi_I(x) e^{-i \frac{E_I t}{\hbar}}$$

Calculons les densités de probabilité de présence associées, à $t=0$.

Il apparaît que si la particule se trouve dans l'état $\Psi_I(x,t)$, alors sa probabilité de présence ^{à $t=0$} dans la région III est nulle. Si elle est dans l'état $\Psi_{III}(x,t)$, sa

probabilité de présence à $t=0$ dans la région (49)

Ⓘ est nulle.

Supposons que la particule se trouve dans l'état $\Psi_{\text{III}}(x,t)$, et posons $E_{\text{I}} - E_{\text{P}} = \hbar \omega_0$

$$\begin{aligned}\Psi_{\text{III}}(x,t) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\Psi_{\text{P}}(x) e^{-i \frac{E_{\text{P}} t}{\hbar}} + \Psi_{\text{I}}(x) e^{-i \frac{E_{\text{I}} t}{\hbar}} \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i \frac{E_{\text{P}} t}{\hbar}} \left(\Psi_{\text{P}}(x) + \Psi_{\text{I}}(x) e^{-i \omega_0 t} \right)\end{aligned}$$

si $t = \frac{\pi}{\omega_0}$, alors il vient :

$$\begin{aligned}\Psi_{\text{III}}(x, t = \frac{\pi}{\omega_0}) &= \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i \frac{E_{\text{P}} \pi}{\hbar \omega_0}} \left(\Psi_{\text{P}}(x) - \Psi_{\text{I}}(x) \right) \\ &= C \Psi_{\text{I}}(x, t=0),\end{aligned}$$

état qui correspond à une probabilité de présence nulle dans la région III.

Ainsi la particule oscille entre les régions I et III à la fréquence $\nu_0 = \frac{\omega_0}{2\pi}$.

On trouve $\nu_0 = \frac{E_{\text{I}} - E_{\text{P}}}{\hbar} \approx 23 \text{ GHz}$.

* Cette fréquence d'inversion n'a pas d'analogue classique; son existence est liée à l'effet tunnel de la particule à travers la barrière de potentiel.

* L'atome d'azote ayant tendance à attirer vers lui les électrons des 3 atomes d'hydrogène, la molécule se comporte comme un dipôle oscillant: Elle émet un rayonnement électromagnétique de fréquence ν_0 . Le principe du maser à ammoniac repose sur l'émission stimulée de ce rayonnement.