

Chapter 1

L'équation de Schrödinger - Suite

1.1 Equation de Schrödinger en potentiel carré

Dans cette sections nous traitons plusieurs cas de potentiels, qui ont pour point commun de répondre à la définition de "potentiel carré" présentée à la section suivante. Nous pouvons les organiser de la sorte :

- Puits de potentiel : on mettra en évidence la présence **d'états liés**
 - Infini
 - Fini
- Marche de potentiel : on verra l'effet tunnel

1.1.1 Définition d'un potentiel carré

Un potentiel carré est un potentiel présentant des discontinuités sous la forme de "marches" ¹. Une grandeur physique ne pouvant pas présenter de discontinuité en réalité, le potentiel carré en est néanmoins souvent une excellente **approximation**.

Un puits de potentiel est une région de l'espace où le potentiel atteint un minimum. Cette notion existe en mécanique classique, alors nous pourrions parler ici de puits quantique pour parler d'un puits dont les dimensions sont si petites qu'elles ne peuvent nous protéger d'entrer dans la mécanique quantique (cf. début de section). Mais nous garderons la dénomination de "puits de potentiel" car ce document ne concerne que la mécanique quantique.

¹Synonymes : potentiel en marche d'escalier, potentiels continus par morceaux

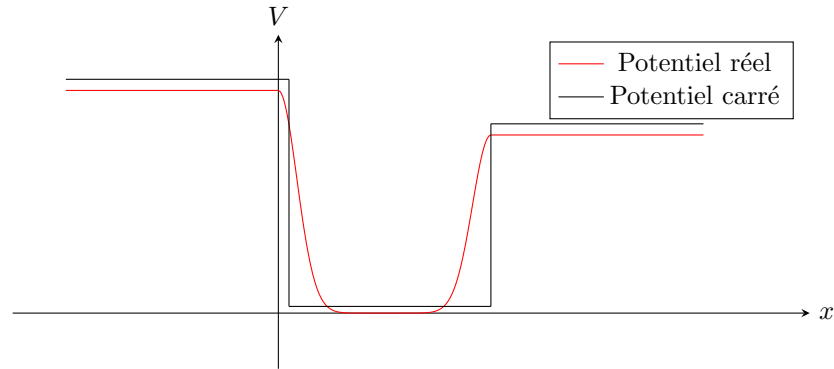


Figure 1.1: Illustration d'un puits de potentiel carré en comparaison avec un puits de potentiel réel.

1.1.2 Puits de potentiel infini

Un puits de potentiel infini a des discontinuités tendant vers l'infini. Il peut s'apparenter à une "boîte", c'est pourquoi on parle souvent de "particule dans une boîte". Par ailleurs, intuitivement, comme une particule ne peut pas exister dans une région où règne un potentiel infini, la particule sera **confinée dans une boîte**.

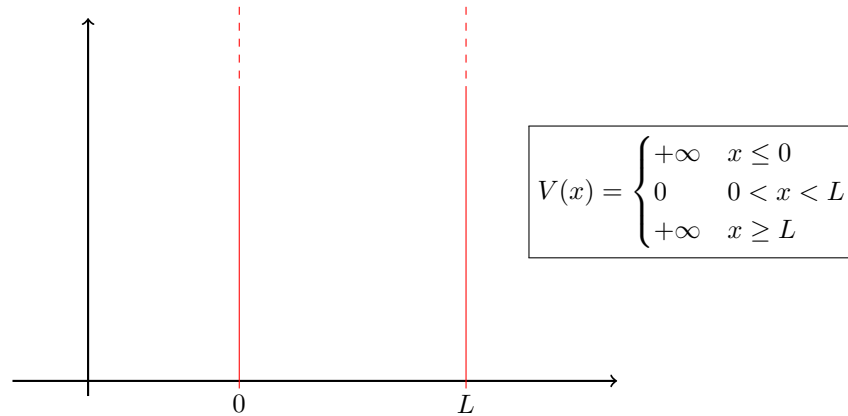


Figure 1.2: Puits de potentiel.

Résolution de l'équation (??) dans un puits en 1D

L'équation de Schrödinger se réécrit encore

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) + V(x) \psi(x, t) \quad (1.1)$$

où $V(x)$ suit la figure 1.2. La séparation des variables s'écrit :

$$\psi(x, t) = \chi(t)\varphi(x)$$

et la partie temporelle se résout facilement.

$$\chi(t) = \chi_0 e^{-iE t/\hbar}$$

La partie spatiale elle s'écrit :

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

Le problème du puits de potentiel ne demande pas que de résoudre cette équation différentielle. En effet, c'est un problème avant tout **physique**, et il impose naturellement des conditions aux bords. Nous savons que la particule ne peut pas se trouver aux murs du potentiel ($x = 0$ ou $x = L$) ni à l'intérieur des murs (en dehors de $]0, L[$) car elle ne peut pas exister dans une zone où le potentiel est infini. Alors, nous avons les conditions aux bords suivantes :

$$\text{Conditions aux bords : } \begin{cases} \varphi(0) = 0 \\ \varphi(L) = 0 \end{cases}$$

Quantification de l'énergie

De manière complète, l'équation différentielle pour la partie spatiale de l'équation s'écrit

$$\begin{cases} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) \varphi(x) = E \\ \text{Conditions au bord : } \varphi(0) = \varphi(L) = 0 \end{cases}.$$

Nous allons nous intéresser qu'au cas où la particule est entre 0 et L , car elle ne peut pas exister dans une zone où le potentiel est infini. **Dans le cas où** $0 < x < L$, nous avons donc un potentiel nul et les conditions aux bords à respecter, d'où :

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \varphi(x) &= E \varphi(x) \\ \text{(en posant) } k &= \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \\ \Leftrightarrow \varphi(x) &= \alpha \sin(kL) + \beta \cos(kL) \end{aligned} \tag{1.2}$$

$$\text{CB : } \begin{cases} \varphi(0) = 0 \Rightarrow \beta = 0 \\ \varphi(L) = 0 \Rightarrow kL = n\pi \end{cases}$$

$$\Rightarrow k_n = \frac{n\pi}{L}$$

Les conditions aux bords imposent donc une condition sur k_n , et *a fortiori* sur l'énergie aussi, par la définition de k_n . Ainsi, par la définition du problème

du puits de potentiel, la particule confinée au sein du puits ne peut avoir que certains états d'énergie. L'énergie est alors dite quantifiée.

Quantification de l'énergie :

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2m L^2} \quad (1.3)$$

Normalisation des solutions ψ_n

De retour à l'équation de Schrödinger avec la forme générale de $\varphi(x)$, avec $\beta = 0$ et α indéterminé, la solution à (1.1) s'écrit pour un niveau d'énergie E_n comme produit de $\varphi_n(x)$ et de $\chi_n(t)$:

$$\psi_n(x, t) = A \underbrace{e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t}}_{\chi_n(t)} \underbrace{\sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right)}_{\varphi_n(x)},$$

avec un coefficient $A \in \mathbb{C}$. Ce coefficient multiplie la fonction d'onde et nous permettra d'avoir une fonction d'onde ψ_n **normée** pour chaque état d'énergie E_n , et ce en tout temps t . Ceci est d'une importance particulière qui sera rappelée au chapitre 4. La fonction ψ_n étant à valeurs complexes, la norme utilisée sera celle des fonctions à valeurs complexes. Ainsi, avoir $|\psi_n|^2 = 1$ revient à imposer, vu que la fonction prend des valeurs nulles en dehors de $]0, L[$,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_n(x)|^2 dx = \int_0^L \left| A e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t} \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right) \right|^2 dx = 1.$$

Or, le module d'une exponentielle purement imaginaire est égal à 1, et le module d'un produit est égal au produit des modules : ainsi, vu que A est indépendant de x , il peut sortir de l'intégrale. Nous avons alors

$$\int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi}{L} x\right) dx = \frac{1}{|A|^2}$$

Ce qui peut s'évaluer en utilisant la formule de Carnot :

$$\sin^2(\alpha) = \frac{1}{2}(1 - \cos(2\alpha))$$

en

$$\begin{aligned} \int_0^L \frac{1}{2} \left(1 - \cos\left(2 \frac{n\pi}{L} x\right)\right) dx &= \frac{1}{|A|^2} \\ \iff |A| &= \sqrt{\frac{2}{L}} \end{aligned}$$

Nous avons donc que la solution d'énergie E_n a la forme

$$\psi_n(x, t) = A e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t} \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right),$$

avec A un coefficient complexe de norme $(2/L)^{1/2}$. Nous pouvons, sans perdre de généralité, *choisir* A comme étant **réel et positif**, c'est-à-dire *choisir sa phase*. Un choix de phase différent n'impacte en rien les propriétés physiques de l'état.

$$\psi_n(x, t) = \sqrt{\frac{2}{L}} e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t} \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right),$$

Solution générale

Pour obtenir la solution générale, il convient de sommer sur les états d'énergie :

$$\psi(x, t) = \sum_{n=1}^{+\infty} c_n \psi_n(x, t) = \sum_{n=1}^{+\infty} c_n \sqrt{\frac{2}{L}} e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t} \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right) \quad (1.4)$$

où les coefficients c_n sont tels que

$$\sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 = 1$$

pour que la solution générale soit normée.

Lien avec les séries de Fourier

Notons que la solution (1.4) ressemble à un développement en série de Fourier sur l'espace des fonctions φ_n (la partie spatiale de ψ_n) si ces dernières forment une base orthonormée. Pour cela, il faut que pour deux niveaux d'énergie différents $n, n' \in \mathbb{N}$:

$$\int_0^L \varphi_{n_1}(x) \varphi_{n_2}^*(x) dx = \delta_{n \ n'}.$$

Notons bien qu'ici on évalue le fait que les φ_n soient orthonormées, car on veut qu'elles constituent notre base pour le développement en série de Fourier. Nous ne nous intéressons pas aux χ_n ! Evaluons le membre de gauche. Les φ_n sont réelles, donc la conjugaison peut se retirer.

$$\int_0^L \varphi_n(x) \varphi_{n'}(x) dx = \int_0^L \frac{2}{L} \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right) \sin\left(\frac{n'\pi}{L} x\right) dx = \delta_{n \ n'}$$

car le système de fonctions $\left\{ \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right) ; n \in \mathbb{N}_0 \right\}$ est orthogonal sur $[0, L]$ (voir un cours sur les Séries de Fourier pour la justification).

Conclusion

Les conclusions que nous pouvons tirer pour la résolution de l'équation de Schrödinger dans le cas d'un puits de potentiel de largeur L sont :

- Commencer par une séparation des variables : l'énergie de chaque état est contenue dans l'**évolution temporelle** χ_n .

- La physique du problème impose des conditions aux bords sur la partie spatiale, et ceci mène à une **quantification de l'énergie** (1.3).
- Une fois les deux parties obtenues, spatiale et temporelle, les multiplier donne la solution pour un état d'énergie. Cette solution est à **normer** (voir chapitre 4).
- Une fois normées, les fonctions peuvent se sommer pour constituer la solution générale. Ici, la chose importante à remarquer est que l'espace des fonctions φ_n calculées lors de la séparation des variables constitue en fait un **système orthonormé** et donc la solution générale (1.4) peut se comprendre comme le **développement en série de Fourier** de ψ .

1.1.3 Puits de potentiel fini

Un puits de potentiel fini est un cas assez basique de potentiel carré. Une image vaut mieux que mille mots :

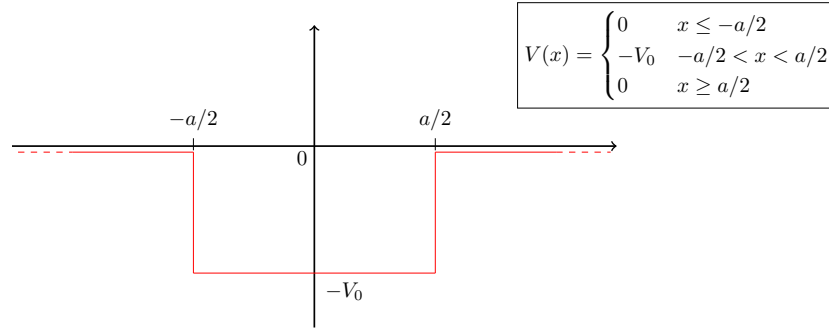


Figure 1.3: Illustration d'un puits de potentiel fini de largeur a et de profondeur V_0 .

Écrivons la partie spatiale de l'équation de Schrödinger et observons qu'une équation avec V fonction de x peut se réécrire en 3 équations avec V constant : les 3 zones $x \leq -a/2$, $-a/2 \leq x \leq a/2$, et $a/2 \leq x$.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 \varphi = (E - V(x)) \varphi \Rightarrow \begin{cases} \text{Zone I} & V = 0 & -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 \varphi = E \varphi \\ \text{Zone II} & V = -V_0 & -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 \varphi = (E + V_0) \varphi \\ \text{Zone III} & V = 0 & -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 \varphi = E \varphi \end{cases} \quad (1.5)$$

Ces équations sont simples à résoudre, et donnent :

$$\varphi_{\text{I}}(x) = B_1 e^{\rho x} + B'_1 e^{-\rho x} \quad (1.6)$$

$$\varphi_{\text{II}}(x) = A_2 e^{ikx} + A'_2 e^{-ikx} \quad (1.7)$$

$$\varphi_{\text{III}}(x) = B_3 e^{\rho x} + B'_3 e^{-\rho x} \quad (1.8)$$

où

$$\rho = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar}} \in \mathbb{C} \quad (1.9)$$

$$k = \sqrt{\frac{2m(E + V_0)}{\hbar}} \in \mathbb{R} \quad (1.10)$$

$$(1.11)$$

Les coefficients apparaissant dans la forme de la fonction d'onde doivent être déterminés. C'est la physique du problème qui nous les offrira. Les conditions que doit remplir une fonction d'onde sont :

- φ de carré sommable
- φ continue
- φ' continue

Et ce, même si le potentiel est discontinu. Dans le cas d'un puits de potentiel fini, il n'y a pas d'autres conditions particulières à imposer. La première impose $B'_1 = B_3 = 0$. En effet, il ne peut pas y avoir un terme dans la fonction d'onde qui tend vers l'infini quand x tend vers l'infini vers la gauche (nous élimine B'_1) ni vers la droite (nous élimine B'_3).

Les deux suivantes imposent ensembles :

$$\left(\frac{\rho - ik}{\rho + ik} \right)^2 = e^{2ika} \quad (1.12)$$

Proof. Nous devons avoir φ et $\partial_x \varphi$ continues, donc particulièrement en $x = -a/2$ et $x = a/2$. En $x = -a/2$, c'est la continuité entre les zones I et II qui est sollicitée, tandis que pour $x = a/2$, c'est entre les zones II et III.

$$\begin{aligned}
x = -a/2 : \quad & \begin{cases} \varphi_I(-a/2) &= \varphi_{II}(-a/2) \\ \varphi'_I(-a/2) &= \varphi'_{II}(-a/2) \end{cases} \\
\iff & \begin{cases} B_1 e^{-\rho a/2} &= A_2 e^{-ik a/2} + A'_2 e^{ik a/2} \\ \rho B_1 e^{-\rho a/2} &= ik (A_2 e^{-ik a/2} - A'_2 e^{ik a/2}) \end{cases} \\
\iff & \begin{cases} A_2 &= e^{(-\rho+ik)a/2} \frac{\rho+ik}{2ik} B_1 \\ A'_2 &= e^{-(\rho+ik)a/2} \frac{\rho-ik}{2ik} B_1 \end{cases}
\end{aligned}$$

De l'autre côté, pour $x = a/2$:

$$x = a/2 : \quad \begin{cases} B'_3 e^{-\rho a/2} &= A_2 e^{ik a/2} + A'_2 e^{-ik a/2} \\ -\rho B'_3 e^{-\rho a/2} &= ik (A_2 e^{ik a/2} - A'_2 e^{-ik a/2}) \end{cases}$$

En multipliant la première équation du système par ρ et en sommant par la deuxième, nous pouvons éliminer B'_3 et se retrouver avec une équation seulement de A_2 et A'_2 . En utilisant les résultats trouvés pour $x = -a/2$ pour ces deux constantes, nous pouvons remplacer dans le système ci-dessus et éliminer B'_3 . Cela donnera :

$$\begin{aligned}
\frac{B_1}{2ik} ((\rho+ik)e^{ika} - (\rho-ik)^2 e^{-ika}) &= 0 \\
B_1 \neq 0 \Rightarrow \left(\frac{\rho-ik}{\rho+ik} \right)^2 &= e^{2ika}
\end{aligned}$$

□

La condition (1.12) possède deux solutions.

$$1. \quad \frac{\rho-ik}{\rho+ik} = -e^{ika}$$

Nous avons dans le membre de gauche un quotient de deux nombres complexes z_1/z_2 . Le module de ce nombre est \bar{z}_1/\bar{z}_2 (soit 1 ici) et sa phase est $\phi(z_1) - \phi(z_2)$ où $\phi(z) = b/a$. Alors, le membre de gauche est de module 1 et de phase $-2 \times \arctan(k/\rho)$. Grâce à ça nous pouvons écrire :

$$\begin{aligned}
1 \times e^{-2i \arctan(k/\rho)} &= -e^{ika} \\
\iff \frac{k}{\rho} &= \tan\left(\frac{ka}{2}\right)
\end{aligned}$$

Posons à présent

$$k_0 = \sqrt{k^2 + \rho^2} = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar}}$$

et exploitons la relation trigonométrique

$$\frac{1}{\cos^2(x)} = \tan^2(x) + 1$$

en l'appliquant à $ka/2$. Il vient :

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

La solution s'obtient donc en résolvant le système d'équations suivant :

$$\begin{cases} \left| \cos\left(\frac{ka}{2}\right) \right| = \frac{k}{k_0} \\ \tan\left(\frac{ka}{2}\right) > 0 \end{cases} \quad (1.13)$$

qui peut se résoudre graphiquement en traçant les intersections de la droite k/k_0 avec des arcs de cosinusoides.

$$2. \frac{\rho - ik}{\rho + ik} = e^{ika}$$

Par une démarche similaire à la précédente, les résultats sont aussi similaires. Nous avons :

$$\begin{cases} \left| \sin\left(\frac{ka}{2}\right) \right| = \frac{k}{k_0} \\ \tan\left(\frac{ka}{2}\right) < 0 \end{cases} \quad (1.14)$$

La résolution de cette équation de Schrödinger passe par l'obtention de ces coefficients. Comme on vient de le voir, il est possible de ne pas en obtenir une expression directe (résolution analytique), mais une résolution **graphique** permet d'obtenir les états liés sous le potentiel en question. Par exemple, ici, il suffit d'observer les intersections entre les arcs de (co-)sinusoïdes et la droite k/k_0 , et ne considérer que celles qui ont un k tel que la tangente est positive (pour les cosinusoides) ou négative (sinusoïdes).

Nous pouvons interpréter la figure 1.4 en mentionnant plusieurs observations :

- Dépendant de la pente $1/k_0$, un certain nombre d'états liés peuvent exister. Particulièrement, lorsque $1/k_0 \geq A/(\pi a)$ (autrement dit $k_0 \leq \pi a$), alors la particule n'a qu'un seul état lié au potentiel. De manière générale, si $(n-1)\pi/a \leq k_0 \leq n\pi/a$, la particule aura n états liés.
- La pente est $1/k_0$ et ne dépend donc pas de l'énergie. Seules les arcs de (co-)sinusoïdes contiennent une dépendance en énergie.

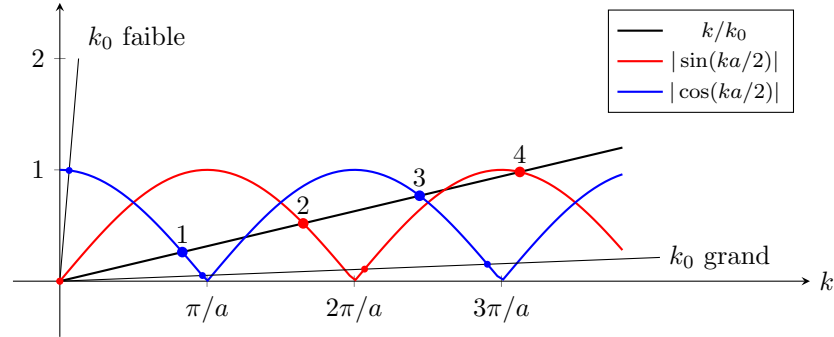


Figure 1.4: Résolution graphique d'une équation de Schrödinger pour plusieurs valeurs de potentiel. Partant de l'équation, une séparation a été faite en 3 zones, donnant des états d'énergie possibles au sein de la barrière (états **liés**) caractérisés par le nombre k . Les énergies des états liés sont ceux dont le k donne un point d'intersection **numéroté** sur la figure. Deux autres exemples sont illustrés : le cas d'une particule n'ayant qu'un seul état lié (étant plongée dans un grand potentiel – grand k_0), et celui d'une particule en ayant beaucoup en raison d'un faible potentiel – faible k_0 .

1.1.4 Marche de potentiel

Une marche de potentiel est similaire au puits fini mais avec un potentiel positif. Ce potentiel s'oppose donc à l'énergie de la particule et c'est pour cette raison qu'on parle souvent de "barrière de potentiel".

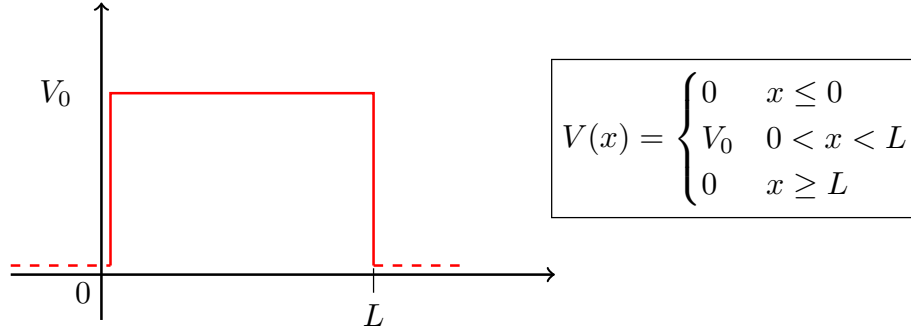


Figure 1.5: Illustration d'un puits de potentiel fini de largeur a et de profondeur V_0 .

Comparaison avec la mécanique classique

Etudier ce cas est très intéressant car une marche de potentiel en physique quantique donne un résultat extrêmement différent de la physique classique. En effet,

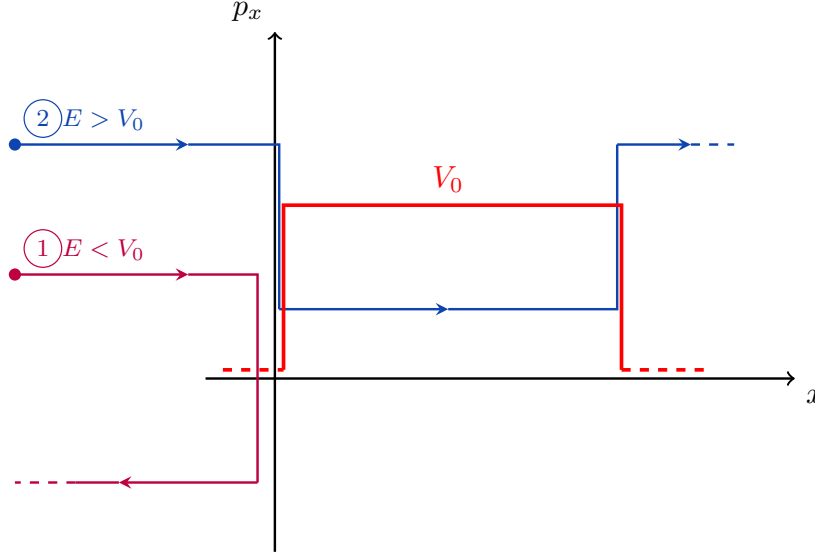


Figure 1.6: Impact sur la trajectoire dans l'espace des phases (axes : position et impulsion, vitesse constante = ligne droite) d'une particule qui passe à travers une marche de potentiel.

en physique classique (cf. figure 1.6), une particule arrivant avec une énergie inférieure à V_0 rebondira. Avec une énergie supérieure à V_0 , elle sera ralentie dans le potentiel (potentiel constant veut dire "force nulle" donc la particule a quoi qu'il arrive une vitesse constante) et repart avec sa vitesse initiale. Le cas $E = V_0$ en mécanique classique est un cas particulier que nous aborderons pas ². Ces discussions sont reprises sur la figure ci-contre.

Pour ce qui est de la physique quantique, il faut passer par une résolution de l'équation de Schrödinger. Comme pour le puits de potentiel, écrivons l'équation dans les différentes zones et écrivons les conditions de raccordement. Notons que la forme des solutions obtenues diffère selon si $E >$ ou $< V_0$, mais dans les deux cas, nous pouvons poser

$$k_1 = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar}} \in \mathbb{C}.$$

Résolution lorsque $E > V_0$

Nous pouvons poser le nombre

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

²Il est siège d'une *singularité* : même si nous sommes tentés, nous pouvons pas affirmer que la particule s'arrête.

de sorte à ce qu'il soit réel, et séparer en zones comme fait pour le puit de potentiel fini.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\varphi = (E-V(x))\varphi \Rightarrow \begin{cases} \text{Zone I} & V = 0 & -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\varphi = E\varphi \\ \text{Zone II} & V = V_0 & -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\varphi = (E - V_0)\varphi \\ \text{Zone III} & V = 0 & -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\varphi = E\varphi \end{cases} \quad (1.15)$$

Ces équations sont simples à résoudre, et donnent :

$$\varphi_I(x) = A_1 e^{ik_1 x} + A'_1 e^{-ik_1 x} \quad (1.16)$$

$$\varphi_{II}(x) = A_2 e^{ik_2 x} + A'_2 e^{-ik_2 x} \quad (1.17)$$

$$\varphi_{III}(x) = A_3 e^{ik_1 x} + A'_3 e^{-ik_1 x} \quad (1.18)$$

D'entrée nous pouvons éliminer des termes que nous ne devons pas avoir dans la solution : ici, seul A'_3 est à éliminer, car $e^{-ik_1 x}$ en troisième zone correspond à une particule incidente venant de $x = -\infty$ (pas possible en troisième zone).

Les considérations physiques et les conditions de raccord impliquent encore des relations entre les autres coefficients. Notamment, la continuité de la fonction et de sa dérivée en $x = 0$ et $x = L$.

$$\begin{aligned} x = 0 : \quad & \begin{cases} \varphi_I(0) &= \varphi_{II}(0) \\ \varphi'_I(0) &= \varphi'_{II}(0) \end{cases} \\ \Leftrightarrow \quad & \begin{cases} A_2 e^{ik_2 L} + A'_2 e^{-ik_2 L} &= A_3 e^{ik_1 L} \\ ik_2 (A_2 e^{ik_2 L} - A'_2 e^{-ik_2 L}) &= ik_1 A_3 e^{ik_1 L} \end{cases} \\ \Leftrightarrow \quad & \begin{cases} A_2 &= \frac{k_2 + k_1}{2k_2} e^{i(k_1 - k_2)L} A_3 \\ A'_2 &= \frac{k_2 - k_1}{2k_2} e^{i(k_1 + k_2)L} A_3 \end{cases} \\ x = L : \quad & \begin{cases} A_1 + A'_1 &= A_2 + A'_2 \\ ik_1 (A_1 - A'_1) &= ik_2 (A_2 - A'_2) \end{cases} \\ \Leftrightarrow \quad & \begin{cases} A_1 = \frac{k_1 + k_2}{2k_1} A_2 + \frac{k_1 - k_2}{2k_1} A'_2 \\ A'_1 = \frac{k_1 - k_2}{2k_1} A_2 + \frac{k_1 + k_2}{2k_1} A'_2 \end{cases} \end{aligned}$$

A présent, développons l'expression de A_1 en remplaçant dedans les expressions de A_2 et A'_2 précédemment calculées (pour $x = 0$) : cela nous donnera A_1 en

fonction de A_3 . Nous avons :

$$\begin{aligned}
A_1 &= \frac{k_1 + k_2}{2k_1} A_2 + \frac{k_1 - k_2}{2k_1} A'_2 \\
&= \frac{k_1 + k_2}{2k_1} \frac{k_2 + k_1}{2k_2} e^{i(k_1 - k_2)L} A_3 + \frac{k_1 - k_2}{2k_1} \frac{k_2 - k_1}{2k_2} e^{i(k_1 + k_2)L} A_3 \\
&= \left[\left(\frac{k_2 + k_1}{2k_2} \right) \left(\frac{k_1 + k_2}{2k_1} \right) e^{-ik_2L} + \left(\frac{k_1 - k_2}{2k_1} \right) \left(\frac{k_2 - k_1}{2k_2} \right) e^{ik_2L} \right] \\
&= \frac{[(k_1 + k_2)^2 + (k_1 - k_2)^2] \cos(k_2L) + i[(k_1 + k_2)^2 - (k_1 - k_2)^2] \sin(k_2L)}{4k_1k_2} e^{ik_1L} A_3 \\
&= \left[\cos(k_2L) - i \frac{k_1^2 + k_2^2}{2k_1k_2} \sin(k_2L) \right]
\end{aligned}$$

Avec un raisonnement très similaire, nous pouvons également obtenir une expression pour A'_1 . Ainsi :

$$A_1 = \left[\cos(k_2L) - i \frac{k_1^2 + k_2^2}{2k_1k_2} \sin(k_2L) \right] e^{ik_1L} A_3 \quad (1.19)$$

$$A'_1 = i \frac{k_2^2 - k_1^2}{2k_1k_2} \sin(k_2L) e^{ik_1L} A_3 \quad (1.20)$$

Une manière d'interpréter la physique du système est d'observer les ainsi nommés **coefficients de transmission et de réflexion**. Comme leur nom l'indique, ces coefficients quantifient la probabilité que la particule traverse la barrière et la probabilité qu'elle soit réfléchi en la rencontrant. Ainsi, ces coefficients seront toujours exprimés comme un rapport où le dénominateur est A_1 : le coefficient de la partie de la fonction d'onde qui symbolise une particule se dirigeant vers les $x > 0$ avec un nombre d'onde k_1 , soit l'état initial de la particule.

De là, la réflexion de la particule sera lue dans le coefficient A'_1 , qui correspond à une fonction d'onde dans la zone 1 de nombre d'onde k_1 se propageant vers la gauche.

$$R = \left| \frac{A'_1}{A_1} \right|^2$$

La transmission sera caractérisée par le coefficient A_3 , qui multiplie une fonction d'onde dans la zone 3 se déplaçant avec un nombre d'onde k_1 vers la droite.

$$T = \left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2$$

Les calculs dans ce cas précis montrent que :

$$R = \frac{(k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2(k_2 L)}{4k_1^2 k_2^2 + (k_1^2 - k_2^2)^2 \sin(k_2 L)} \quad (1.21)$$

$$T = \frac{4k_1^2 k_2^2}{4k_1^2 k_2^2 + (k_1^2 - k_2^2)^2 \sin(k_2 L)} \quad (1.22)$$

Chose remarquable :

$$R + T = 1 .$$

Lien avec le courant de probabilité

En effet, ceci n'est pas étonnant et est en réalité imposé par la **conservation du courant de probabilité**

$$\text{div} \vec{J} = 0 ,$$

où le courant s'exprime, en partant de la définition, par la forme suivante :

$$\begin{aligned} \vec{J} &= \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left[\varphi^* (\vec{\nabla} \varphi) \right] \\ &= \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left[(A_1^* e^{-ik_1 x} + A_1'^* e^{ik_1 x}) \, ik_1 (A_1 e^{ik_1 x} - A_1' e^{-ik_1 x}) \right] \vec{1}_x \\ &= \frac{\hbar}{m} k_1 (|A_1|^2 - |A_1'|^2) \vec{1}_x + \text{terme oscillant} \\ &\approx v_1 (|A_1|^2 - |A_1'|^2) \vec{1}_x \end{aligned}$$

où

$$v_1 = \frac{\hbar k_1}{m}$$

Le courant de probabilité est donc bien constant.

Compte tenu des définitions des k_i , le coefficient de transmission peut se réécrire en fonction de E sous la forme suivante :

$$T = \frac{4E(E - V_0)}{4E(E - V_0) + V_0^2 \sin^2 \left[\sqrt{2m(E - V_0)} L / \hbar \right]} \quad (1.23)$$

On voit que le coefficient de transmission est périodique en E et que sa valeur maximale est 1, lorsque le sinus s'annule. Ceci est le phénomène de **résonance** et arrive lorsque $k_2 L = n\pi$, $n \in \mathbb{Z}$.

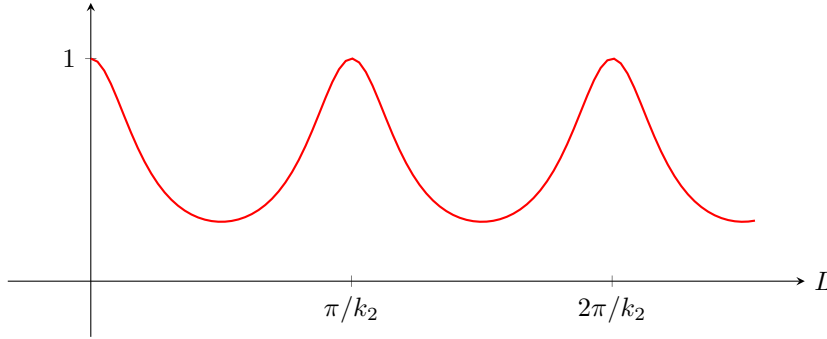


Figure 1.7: Variation du coefficient de transmission de la barrière de potentiel en fonction de sa largeur. Résonnances aux multiples de π/k_2 .

Résolution lorsque $E < V_0$

Une résolution similaire, voire même identique, s'obtient en posant

$$k_2 \longrightarrow -i\rho_2 \quad \rho_2 = \sqrt{2m(V_0 - E)/\hbar^2} \in \mathbb{R}$$

aux résultats déjà obtenus. Ainsi :

$$T = \left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2 = \frac{-4k_1^2 \rho_2^2}{-4k_1^2 \rho_2^2 + (k_1^2 + \rho_2^2)^2 \sin(-i\rho_2 L)} \quad (1.24)$$

$$= \frac{4E(V_0 - E)}{4E(V_0 - E) + V_0^2 \sinh^2(\rho_2 L)} \quad (1.25)$$

Observons ce qui se passe lorsque la barrière est très imposante par rapport à l'énergie de la particule : $\rho_2 L \gg 1$. Le sinus hyperbolique peut subir une approximation et la fraction peut se simplifier largement.

$$\sinh(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{2} \Rightarrow \sinh^2(x)_{|x \gg 1} \sim e^{2x}/4 \quad (1.26)$$

$$\Rightarrow T \approx \frac{16(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-2\rho_2 L} \quad (1.27)$$

Nous voyons que lorsque la barrière est imposante (large et à haut potentiel), la particule a tout de même une probabilité non-nulle de la franchir. Ceci est propre à la mécanique quantique et ne serait jamais arrivé en mécanique classique. Ce phénomène porte le nom d'**Effet Tunnel** et possède comme application notable le microscope à effet tunnel.

Illustrations

Voici à présent plusieurs illustrations tirées d'une application développée par l'Université du Colorado, dont le lien est ci-dessous

<https://phet.colorado.edu/sims/cheerpj/quantum-tunneling/latest/quantum-tunneling.html?simulation=quantum-tunneling> .

Nous pouvons placer les paramètres du système pour illustrer l'exemple que l'on veut, par exemple sur la figure 1.8 un potentiel tel que $E > V_0$, ou illustrer l'effet Tunnel en augmentant le potentiel pour qu'il devienne tel que $E < V_0$, comme sur la figure 1.9.

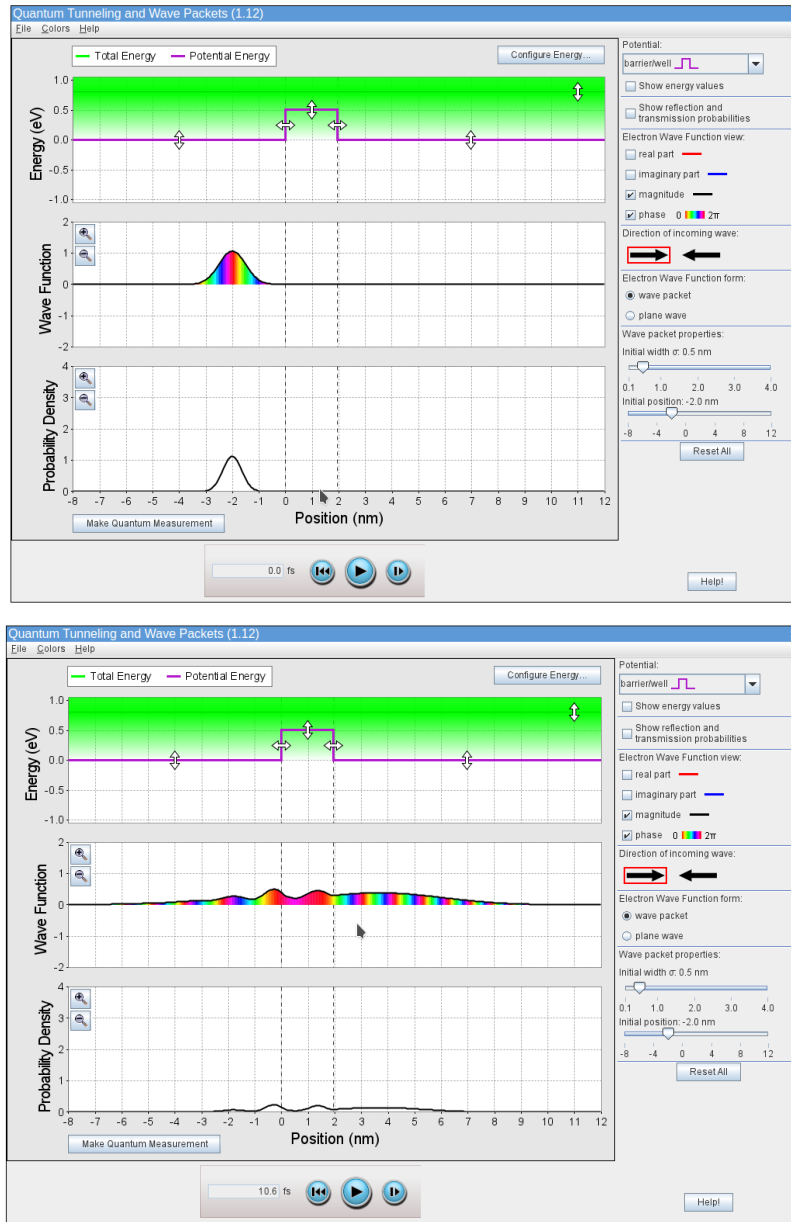


Figure 1.8: Illustration de la propagation d'un paquet gaussien à travers une marche de potentiel avec $E > V_0$.

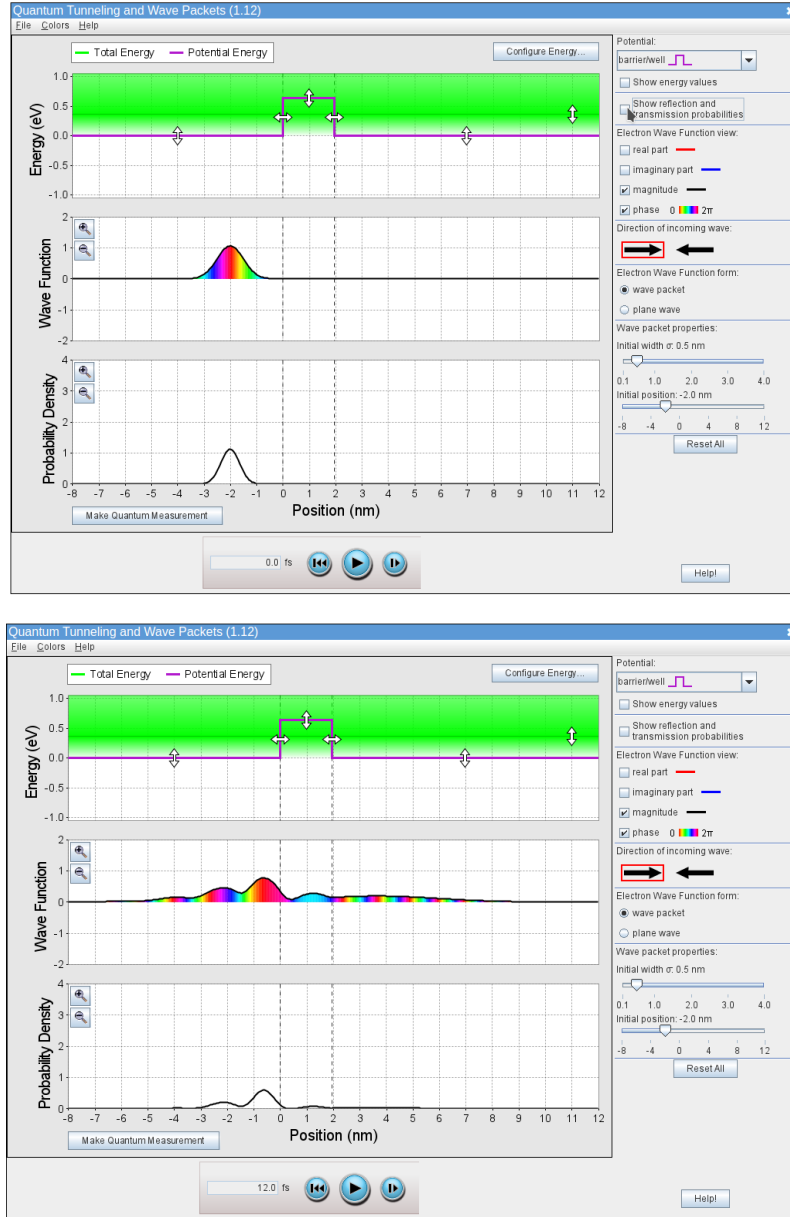


Figure 1.9: Illustration de la propagation d'un paquet gaussien à travers une marche de potentiel avec $E < V_0$ (Effet tunnel).

1.2 Approximation semi-classique (WKB)

Toujours dans le cadre de l'étude de l'équation de Schrödinger, nous allons dans cette section étudier une solution **approximative** de cette équation, valable dans la limite $\hbar \rightarrow 0$. Cette approximation est nommée en l'honneur de Léon Brillouin, Hendrik Anthony Kramers et Gregor Wentzel. L'idée est la suivante : en poussant \hbar vers zéro, nous devrions retrouver des résultats de la mécanique classique. Abordons donc cela en écrivant premièrement l'équation de Schrödinger. Ensuite, interprétons la solution obtenue.

1.2.1 Résolution de l'équation de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\phi + V(x)\psi = E\psi \quad (1.28)$$

Posons $\psi(x) = A(x)e^{iS(x)/\hbar}$. Pour remplacer dans 1.28, calculons d'abord les dérivées de ψ en fonction de A et S et écrivons ce que donne l'équation de Schrödinger.

$$\psi' = \left[A' + \frac{i}{\hbar} S' A \right] e^{iS/\hbar} \quad (1.29)$$

$$\psi'' = \left[A'' + \frac{i}{\hbar} (S'' A + S' A') - \frac{1}{\hbar^2} S'^2 A + \frac{i}{\hbar} S' A' \right] e^{iS/\hbar} \quad (1.30)$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \left[A'' + \frac{i}{\hbar} (S'' A + S' A') - \frac{1}{\hbar^2} S'^2 A + \frac{i}{\hbar} S' A' \right] e^{iS/\hbar} + V A e^{iS/\hbar} = E A e^{iS/\hbar} \quad (1.31)$$

En séparant les parties réelle et imaginaire de l'équation 1.31, on obtient le système suivant. Ce système est l'équivalent de 1.28.

$$2S' A' + A S'' = 0 \quad (1.32)$$

$$\frac{S'^2}{2m} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{A''}{A} + V = E \quad (1.33)$$

L'équation 1.32 a une solution exacte. Elle est donnée par

$$A(x) = \frac{A_0}{\sqrt{S'(x)}} \quad (1.34)$$

L'équation 1.33 peut être modifiée par notre approximation $\hbar \rightarrow 0$, car alors $\hbar^2/2m \rightarrow 0$. L'équation obtenue est l'**équation de Hamilton-Jacobi**³.

$$\frac{S'^2}{2m} + V(x) = E \quad (1.35)$$

En posant $p(x) = \sqrt{2m[E - V(x)]}$, on obtient aisément

$$S(x) = \pm \int^x dx' p(x') \quad (1.36)$$

³Retenez bien ce nom car il m'a valu 4 points sur 20 à l'examen de Mécanal

Et la fonction d'onde prend alors la forme suivante :

$$\psi(x) = \pm \frac{A_0}{\sqrt{p(x)}} e^{\pm i \int^x dx' p(x')/\hbar} \quad (1.37)$$

1.2.2 Interprétation de la solution

La vitesse de groupe du paquet d'onde est la vitesse classique

L'impulsion de la particule est donnée par la fonction p . Calculons le nombre d'onde par la relation de De Broglie pour le nombre d'onde. Ce résultat sera important pour obtenir la vitesse de groupe. Il est important de saisir ici que le nombre d'onde dépend de la position.

$$k(x) = \frac{p(x)}{\hbar}$$

La vitesse de groupe v_g est donnée par $d\omega/dk$. Alors on fait les physiciens et on renverse la fraction pour dériver k par rapport à ω qu'on exprime comme E/\hbar . Alors :

$$\frac{1}{v_g} = \frac{dk}{d\omega} = \frac{d(p/\hbar)}{E/\hbar} = \frac{dp}{dE} = \frac{m}{p(x)} = \frac{1}{v_{\text{classique}}}$$

Ainsi, nous voyons que l'approximation semi-classique mène à une solution de l'équation de Schrödinger qui, une fois utilisée pour construire des paquets d'onde pour constituer une particule, donne une vitesse de groupe égale à la vitesse classique de la particule.

Région classiquement permise et région classiquement interdite

La région classiquement permise est définie par l'ensemble des x où $V(x) < E$. Dans cette région, on peut voir par la forme 1.37 de la fonction d'onde que la probabilité de présence de la particule est inversement proportionnelle à l'impulsion. Ceci est le cas car pour $E > V$, $p \in \mathbb{R}$ donc l'exponentielle dans 1.37 reste imaginaire donc son module reste 1. On voit alors que la probabilité de présence diminue quand l'impulsion de la particule augmente, ce qui rejoint notre intuition⁴.

$$\text{Région classiquement permise : } E > V(x) \quad \Rightarrow \quad |\psi|^2 \propto \frac{1}{p}$$

Dans la zone interdite, $E < V$ et l'impulsion devient alors imaginaire. L'exponentielle devient réelle et la probabilité de présence devient proportionnelle à une exponentielle négative, mais pas nulle ! On retrouve ici l'effet tunnel déjà discuté, mais ici pour un potentiel quelconque qui est supérieur à l'énergie. Attention : on ne retrouve que l'exponentielle négative car les considérations physiques (fonction d'onde bornée) imposent un coefficient nul à l'exponentielle croissante (pour éviter qu'elle explose à l'infini).

⁴De toute façon quand ça parle de mécanique classique, tout rejoint un peu notre intuition.

Région classiquement interdite : $E < V(x) \Rightarrow |\psi|^2 \propto e^{-\int^x p(x') dx'}$

Les figures ci-dessous reprennent un cas de potentiel et l'allure de la fonction d'onde correspondante. On voit aux lignes verticales pointillées, qui correspondent aux frontières entre les régions permise et interdite, que la probabilité devient exponentiellement décroissante mais non nulle (effet tunnel).

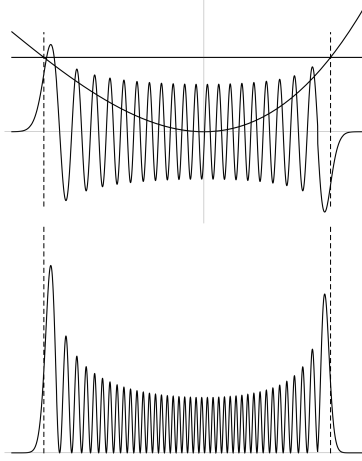


Figure 1.10: Graphe d'une fonction d'onde d'une particule et de sa densité de probabilité de présence sous l'approximation WKB.

Etats liés

Si nous sommes dans le cas d'une solution qui décroît exponentiellement à grande distance, en notant b et a les points de rebroussement de la trajectoire classique, les états liés, dans la région permise donc, sont décrits par les fonctions suivantes, selon si on est proche de la frontière gauche avec la région interdite ou la frontière droite :

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \cos \left[\int_b^x k(x') dx' - \pi/4 \right] & x > b \\ \psi(x) &= \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \cos \left[\int_x^a k(x') dx' + \pi/4 \right] & x < a \end{aligned} \quad (1.38)$$

Une condition de quantification est que la somme des phases des cosinus soit égale à un multiple de $\pi/2$ **confirmation needed, source wikipedia**. En sommant sur le domaine d'intégration, on obtient l'intégrale du nombre d'onde entre les deux points de rebroussement (les points de frontière).

Condition de quantification semi-classique :

$$\frac{1}{\hbar} \int_b^a dx \sqrt{2m(E - V(x))} = \left(n + \frac{1}{2} \right) \pi$$

1.2.3 Application de l'approximation WKB en physique nucléaire

Par la section précédente, nous avons compris que l'approximation WKB consistait à prendre la limite $\hbar \rightarrow 0$, mais dans quel cas pouvons-nous réellement passer à une application de cette approximation?

Tentative d'explication mais le paragraphe en entier est à vérifier : Il se trouve que cette approximation peut être valable lorsque l'on veut considérer des effets quantiques qui s'appliquent sur un système, pendant que ce dernier peut également être décrit d'un point de vue classique, ainsi que lorsqu'il n'est pas possible de trouver de solution analytique sans faire aucune approximation.

Nous allons ici illustrer un exemple d'application de l'approximation WKB qui est celui de la désintégration- α , et qui en particulier met en avant la loi de Geiger-Nuttal.

Nous allons prendre en compte le fait que des particules α vont s'échapper d'un noyau par *effet tunnel*, et notre description fera apparaître des *interprétations probabilistes* sur l'émission de ces particules, tout en utilisant les relations données par l'approximation WKB afin d'en tirer une conclusion cohérente avec des données expérimentales.

Avant de rentrer dans les détails, rappelons brièvement ce que sont la désintégration alpha et un temps de demi-vie $t_{1/2}$:

- Désintégration $\alpha \equiv$ (wikipédia **à vérifier**) forme de désintégration radioactive où un noyau atomique éjecte une particule α ($= He^{++}$) et se transforme en un noyau plus léger ;
- Demi-vie $t_{1/2}$ d'un isotope radioactif \equiv (wikipédia) c'est le temps au bout duquel la moitié des noyaux de cet isotope initiaux se sont désintégrés.

Notons qu'il est important de reconnaître la différence entre cette définition et celle d'un temps moyen : 2 fois le temps de demi-vie \neq la vie complète!!

Rentrons à présent dans des détails de calculs.

Considérons un noyau de rayon R qui contient des particules α possédant une énergie E . Les particules α sont confinées dans le noyau, autrement dit leur énergie est plus faible que le potentiel qui les retient. Or, nous avons déjà vu qu'une particule pouvait traverser une zone classiquement interdite par effet tunnel, et se propage comme une onde "évanescence" (qui décroît exponentiellement) dans cette zone.

C'est en fait ce qu'il va se passer ici pour les particules α ; on peut, analogiquement, imaginer que les particules sont confinées dans une boîte, faisant des allers-retours. C'est à ces points de rebroussement que peut se produire la transmission de particules par effet tunnel.

Une fois sorti du noyau, le potentiel ressenti par les particules α est simplement le potentiel coulombien créé par les charges du noyau. Ainsi, pour tout $r > R$, le potentiel s'écrit comme suit :

$$V(r) = \frac{z_\alpha z e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (1.39)$$

où $z_\alpha, z \equiv$ charges du noyau.

Notons R_α la distance à partir de laquelle l'énergie E de la particule devient plus grande que le potentiel coulombien ressenti $V(r)$, autrement dit, R_α est la distance au noyau à partir de laquelle la particule devient libre et peut se propager de manière semi-classique (c'est-à-dire tel que la longueur d'onde varie très peu sur une distance égale à la longueur d'onde même).

L'énergie de la particule étant considérée comme une constante dans ce cas-ci, et puisque l'on considère également que la particule α émise peut se propager au moins jusqu'à une distance R_α du noyau, notons son énergie E :

$$E = \frac{z_\alpha z e^2}{4\pi\epsilon_0 R_\alpha}$$

Ensuite, il se trouve que la probabilité d'émission de particule alpha par unité de temps se trouve approximativement par l'inverse du temps de demi-vie. Cela illustre bien le fait que plus ce temps de demi-vie est long, moins il n'y a de probabilité qu'une particule alpha soit émise en une seconde. En utilisant les relations de la fonction d'onde obtenues grâce à l'approximation WKB, nous avons en particulier que :

$$\frac{P(\text{émission})}{\text{temps}} \approx \frac{1}{t_{1/2}} \approx e^{-2\gamma} \quad (\approx |\psi(r)|^2 \text{ effet tunnel}) \quad (1.40)$$

où

$$\begin{aligned} \gamma &= \frac{1}{\hbar} \int_R^{R_\alpha} \sqrt{2m_\alpha(V(r) - E)} dr \\ &= \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_\alpha} \sqrt{\frac{z_\alpha z e^2}{4\pi\epsilon_0}} \int_R^{R_\alpha} \sqrt{\frac{1}{r} - \frac{1}{R_\alpha}} dr \\ &= \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_\alpha} \sqrt{\frac{z_\alpha z e^2}{4\pi\epsilon_0}} \int_R^{R_\alpha} \frac{1}{\sqrt{R_\alpha}} \sqrt{\frac{R_\alpha}{r} - 1} dr \\ &= \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_\alpha} \sqrt{\frac{z_\alpha z e^2}{4\pi\epsilon_0}} \sqrt{R_\alpha} \int_0^1 \sqrt{\frac{1-z}{z}} dz \quad (\text{grâce au changement de variable : } z = \frac{r}{R_\alpha}) \\ &\approx \frac{\pi}{2} \sqrt{R_\alpha} \quad (\text{intégrale calculée par un changement de variable comme } z = \cos^2(x) \text{ par exemple}) \end{aligned}$$

Enfin, en utilisant le fait que $R_\alpha = \frac{z_\alpha z e^2}{4\pi\epsilon_0 E}$, on a :

$$\gamma = \frac{\pi}{2\hbar} \sqrt{2m_\alpha} \left(\frac{z_\alpha z e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{1}{\sqrt{E}}$$

$$\Rightarrow \log(t_{1/2}) = a \frac{z}{\sqrt{E}} + b \quad \text{Loi de Geiger-Nuttal} \quad (1.41)$$

Remarque :

- Nous pouvons voir que cette équation 1.41 met en relation l'inverse de la racine de l'énergie au logarithme du temps de demi-vie. Cela signifie qu'une grande augmentation du temps $t_{1/2}$ est équivalent à une légère diminution de l'énergie. On peut donc considérer que des isotopes qui émettent des particules alpha, à un temps de demi-vie d'ordres de grandeur assez variés, ont approximativement la même énergie ;
- Cette loi est bien vérifiée expérimentalement ;
- Elle explique également pourquoi la désintégration en noyau plus lourd est impossible (dépendance en m_α et z_α) **Pourquoi???**