

Première partie

L'équation de Schrödinger

Commençons par rappeler les relations de **Plank-Einstein** :

$$E = h\nu = \hbar\omega \quad (\text{I.1})$$

$$\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k} \quad (\text{I.2})$$

Où $\lambda = \frac{2\pi}{\|\mathbf{k}\|} = \frac{h}{\|\mathbf{p}\|}$: il s'agit de la relation de L. de Broglie, reflétant la dualité onde-corpusculaire de la matière.

Rappelons également l'équation d'onde :

$$\left(\frac{1}{c^2} \partial_t^2 - \partial_x^2 - \partial_y^2 - \partial_z^2 \right) A(t, \mathbf{x}) = 0 \quad (\text{I.3})$$

En particulier, une onde plane¹ s'exprime par le champ scalaire

$$A(t, \mathbf{x}) = A_0 e^{-i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{x})} \quad (\text{I.4})$$

Appliquons l'équation d'une onde plane ?? à l'équation de D'Alembert I.3. En particulier, notons que

$$\frac{1}{c^2} \partial_t A(t, \mathbf{x}) = \frac{-iA_0\omega}{c^2} e^{-i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{x})} \quad \frac{1}{c^2} \partial_t^2 A(t, \mathbf{x}) = -A_0 \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 e^{-i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{x})}$$

Rappelons que nous considérons une onde plane : supposons que celle-ci se déplace dans la direction des x. Alors,

$$\partial_x A(t, x) = iA_0 k_x e^{-i(\omega t - x k_x)} \quad \partial_x^2 A(t, x) = -A_0 k_x^2 e^{-i(\omega t - x k_x)}$$

Où k_x est la composante en x du vecteur $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$. En combinant ces résultats (et en gardant l'hypothèse d'une onde se dirigeant selon l'axe des x), nous obtenons que

$$\left(\frac{1}{c^2} \partial_t^2 - \partial_x^2 - \partial_y^2 - \partial_z^2 \right) A(t, x) = 0 \quad (\text{I.5})$$

$$-A_0 \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 e^{-i(\omega t - x k_x)} + A_0 k_x^2 e^{-i(\omega t - x k_x)} = 0 \quad (\text{I.6})$$

$$\left(\frac{\omega}{c} \right)^2 - k_x^2 = 0 \quad (\text{I.7})$$

A partir de là², nous pouvons montrer que

$$\omega = \frac{i}{A} \partial_t (A) \quad (\text{I.8})$$

$$k_x = -\frac{i}{A} \partial_x (A) \quad (\text{I.9})$$

Ce qui implique les relations

$$k_x^2 = -\frac{1}{A} \partial_x^2 A \quad \text{et} \quad k^2 = -\frac{1}{A} \Delta A$$

On pose également les quelques relations suivantes

$$E = \frac{i\hbar}{\Psi} \partial_t \Psi \quad p_x = -\frac{i\hbar}{\Psi} \partial_x \Psi \quad p^2 = -\frac{\hbar^2}{\Psi} \Delta \Psi$$

Dans le cas d'une particule relativiste, l'énergie respecte la relation de dispersion. En particulier, cela implique

$$-\hbar \partial_t \Phi + c^2 \hbar^2 \Delta \Phi - c^4 m^2 \Phi = 0 \quad (\text{I.10})$$

Il s'agit de l'équation de Klein-Gordon. Nous pouvons obtenir une relation similaire dans le cas non-relativiste. Effectivement, nous avons alors que l'énergie est donnée par la relation

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{r}, t) \quad (\text{I.11})$$

Dès lors, nous obtenons l'équation de Schrödinger pour une particule :

$$i\hbar \partial_t \Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + V(\mathbf{r}, t) \Psi \doteq H \Psi \quad (\text{I.12})$$

1. Une onde est dite plane si et seulement si elle ne s'exprime que dans une seule direction.
2. Demander à Prof. d'élaborer les détails.

Note. Nous avons alors que l'opérateur $H \doteq -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{r}, t)$. Remarquons que :

- L'équation de Schrödinger est linéaire³ et satisfait les relations de Broglie.
- L'opérateur H est hermitien ; cela garantit la conservation de la probabilité, que ses valeurs propres sont réelles et que ses vecteurs propres constituent une base de l'espace considéré.

1 Particule libre

Dans une première approximation, supposons que le potentiel $V(\mathbf{r}, t)$ soit nul. L'équation de Schrödinger (I.12) se réduit alors à

$$i\hbar\partial_t\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi$$

Où $\omega = \frac{\hbar\mathbf{k}^2}{2m}$. Cela correspond à $E = \frac{p^2}{2m}$.

Cette équation différentielle admet visiblement des solutions de la forme

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = Ce^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}-\omega t)} \quad (\text{I.13})$$

Où C est une constante. Par la principe de superposition, toute combinaison linéaire d'ondes planes vérifiant l'expression de ω sera également une solution de I.13. La solution générale est alors donnée par

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int d^3k g(\mathbf{k}) e^{-i\omega t + \mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (\text{I.14})$$

Où $g(\mathbf{k})$ est la transformation de Fourier de $\Psi(\mathbf{r}, t=0)$:

$$g(\mathbf{k}, t=0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \Psi(\mathbf{r}, 0) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} d\mathbf{x} \quad (\text{I.15})$$

2 Interprétation probabiliste

Soit $\Psi(\mathbf{r}, t)$ une solution de (I.12). Nous pouvons vérifier que Ψ est normalisée : effectivement, $\int d\mathbf{r} \|\Psi(\mathbf{r}, t)\|^2 = 1$. Il est possible de montrer que si c'est le cas à un instant donné, ça l'est à tout moment.

Posons donc que $\rho(\mathbf{r}, t) = \|\Psi(\mathbf{r}, t)\|^2 = \bar{\Psi}\Psi$ la densité de probabilité de trouver la particule en \mathbf{r} à l'instant t .

Proposition 2.1. *La densité de probabilité telle que nous venons de la définir respecte l'équation de continuité*

$$\partial_t \rho(\mathbf{r}, t) + \nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (\text{I.16})$$

Où $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) \doteq \frac{\hbar}{2mi} \left\{ \bar{\Psi} \nabla \Psi - \Psi \nabla \bar{\Psi} \right\} = \frac{\hbar}{m} \text{Im} [\bar{\Psi} (\nabla \Psi)]$ est un courant de probabilité.

Démonstration. Puisque Ψ est hermitique,

$$\hat{H}\Psi = \hat{H}\bar{\Psi} \quad (\text{I.17})$$

$$i\hbar\partial_t\bar{\Psi} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\bar{\Psi} + V\bar{\Psi} \quad i\hbar\partial_t\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + V\Psi \quad (\text{I.18})$$

De plus, par définition,

$$\rho = \|\Psi\|^2 = \Psi\bar{\Psi} \quad (\text{I.19})$$

En dérivant ρ par rapport à au temps et en multipliant par $i\hbar$,

$$i\hbar\partial_t\rho = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi \right] \bar{\Psi} - \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\bar{\Psi} \right] \Psi \quad (\text{I.20})$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}(\bar{\Psi}\Delta\Psi - \Psi\Delta\bar{\Psi}) \quad (\text{I.21})$$

$$\rightarrow 0 = \partial_t\rho + \frac{\hbar}{2mi} \nabla \cdot (\bar{\Psi} \nabla \Psi - \Psi \nabla \bar{\Psi}) \quad (\text{I.22})$$

3. Si Ψ_1 et Ψ_2 sont des solutions de I.12, alors $\Psi_1 + \Psi_2$ est également une solution de I.12.

Nous pouvons alors définir

$$\mathbf{J} \doteq \frac{\hbar}{2mi} \left\{ \bar{\Psi} \nabla \Psi - \Psi \nabla \bar{\Psi} \right\} = \frac{\hbar}{m} \text{Im} [\bar{\Psi} (\nabla \Psi)] \quad (\text{I.23})$$

le courant de probabilité. Nous pouvons alors écrire l'équation de probabilité, ce qui conclut la preuve. ■

L'équation de continuité (I.16) explique que rien ne se perd, rien ne se crée et tout se conserve : en effet, si nous intégrons sur une région A, nous aurons

$$\int_A \frac{\partial \rho}{\partial t} dV + \int_A \nabla \cdot \mathbf{J} dv = \frac{d}{dt} \int_A \rho dV + \int_{\partial A} \mathbf{J} \cdot d\mathbf{s}$$

$$\frac{d}{dt} P_A = -F_A \quad (\text{I.24})$$

Où P_A est la probabilité de trouver une particule dans la région A, et F est le flux de cette particule à travers le bord de la région. L'équation (I.24) décrit la conservation des particules à travers la surface A.

Nous pouvons également définir les coefficients de **réflexion** et de **transmission** comme suit :

$$R = \frac{J_-[\leftarrow]}{J_-[\rightarrow]}, \quad T = \frac{J_+[\rightarrow]}{J_-[\rightarrow]} \quad (\text{I.25})$$

Où $J_-[\leftarrow]$ est défini comme étant "le courant de probabilité dans la région négative allant vers la gauche.

Dans le cas d'une onde plane, nous pouvons tautologiquement réécrire (I.13) sous la forme

$$\Psi = C e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} e^{-i\omega t} \quad (\text{I.26})$$

Dès lors, $\rho = \|\Psi\|^2 = C^2$ est une constante. Nous pouvons utiliser le résultat (I.23) pour voir que, dans le cas d'une **onde plane**,

$$\mathbf{J} = \frac{\mathbf{p}}{m} C^2 = \rho \mathbf{v} \quad (\text{I.27})$$

Nous voyons donc bien qu'une onde plane décrit une particule se déplaçant à une vitesse \mathbf{v} .

2.1 Born : étude des collisions. Origine de l'interprétation probabiliste

Que se passe-t-il si une onde plane arrive sur un atome ? Nous allons essayer de trouver une approximation à cette question.

La fonction d'onde d'une particule dont l'énergie potentielle $V(\mathbf{r})$ ne dépend pas du temps doit vérifier l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \partial_t \Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + V(\mathbf{r}) \Psi \quad (\text{I.28})$$

La solution de cette équation est donnée par

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \phi(\mathbf{r}) - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \phi + V(\mathbf{r}) \phi = E \phi \quad (\text{I.29})$$

Conditions au bord : pour $x \rightarrow -\infty$, $\phi = C e^{ikx}$.

- Une partie de l'onde est construite tout droite.
- Une partie est diffusée.

A grande distance de l'atome, nous avons que

$$\phi(\mathbf{r}) \approx C e^{ikx} + \int d^3k \alpha(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \quad (\text{I.30})$$

$$\text{Avec } \frac{\hbar^2 \|\mathbf{k}\|^2}{2m} = \hbar \omega.$$

La Mécanique Quantique décrit simultanément **toutes** les diffusions possibles. Or, en laboratoire, nous n'observons qu'une seule direction : Max-Born en déduit que la Mécanique Quantique décrit les **possibilités** de diffusions dans les directions \mathbf{k} .

$$P(\text{diffusion dans la direction } \mathbf{k}) \approx \|\alpha(\mathbf{k})\|^2 \quad (\text{I.31})$$

3 Paquet d'onde à une dimension

3.1 Vitesse de phase et vitesse de groupe

Une onde est une perturbation se déplaçant dans le milieu. Il est possible de lui associer deux vitesses : soit la *vitesse de phase* (ou *célérité*), et la *vitesse de groupe*. Elle peuvent être différentes, sous certaines conditions.

Revenons au cas particulier d'une particule libre, dont l'état est décrit par le paquet d'onde à une dimension (I.14). Une onde plane (I.26), respectant la relation de dispersion $w(k)$, se propage avec la vitesse

$$V_\phi(k) = \frac{\omega}{Re\{k\}} \quad (\text{I.32})$$

Il s'agit de la **vitesse de phase**. En particulier, prenons l'exemple d'une particule quantique, c'est à dire une particule respectant les équations

$$\omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{p^2}{2m\hbar} = \hbar \frac{k^2}{2m} \quad (\text{I.33})$$

$$k = \frac{p}{\hbar} \quad (\text{I.34})$$

Dans cet exemple, la vitesse de phase s'écrit alors

$$V_\phi(k) = \frac{\hbar k}{2m} = \frac{p}{2m} \quad (\text{I.35})$$

Nous savons que dans le cas d'une onde électromagnétique se propageant dans le vide, $V_\phi(k)$ est indépendante de k et se propage à la vitesse de la lumière c . Notons que toutes les ondes composant un paquet d'ondes se déplacent à la même vitesse, de sorte que le paquet se déplace à la vitesse de la lumière c dans le vide. **Ce n'est pas le cas dans un milieu dispersif.**

Soit $A(t, x) = \int dk g(k, \omega) e^{-i\omega(k)t} e^{ikx}$, où

$g(k, \omega)$: est centré sur k_0 de faible largeur Δ

$$g(k, \omega) \approx e^{-\frac{1}{2}(\frac{k-k_0}{\Delta})^2}$$

Nous voulons nous ramener à une intégrale gaussienne. Notons que

$$\omega(k) = \omega(k_0) + \partial_k \omega(k - k_0) + \frac{1}{2} \partial_k^2 \omega(k - k_0) \quad (\text{I.36})$$

Le terme $\partial_k \omega$ représente la **vitesse de groupe**, et $\partial_k^2 \omega$ représente la **dispersion**.

Nous avons dès lors que

$$A(t, x) \approx e^{-i\omega(k_0)t} e^{ik_0 x} \int dk g(k - k_0) e^{i[\omega'(k_0)t + (k - k_0)x]} \quad (\text{I.37})$$

Nous y négligeons les effets de $\partial_k^2 \omega$ car Δ est très petit.

Il s'ensuit que le centre du paquet d'onde se déplace à la vitesse

$$v_g = \text{Vitesse de groupe} = \frac{\partial \omega}{\partial k} = \omega' \quad (\text{I.38})$$

Pour une particule quantique, nous avons alors que $\frac{\partial \omega}{\partial k} = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m} = v_{\text{Classique}}$.

Note. Rappelons que la solution à l'intégrale ci-contre, dans le cas où $-\frac{\pi}{4} < \arg \alpha < +\frac{\pi}{4}$:

$$I(\alpha, \beta) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha^2(\xi+\beta)^2} d\xi = \frac{\sqrt{\pi}}{\alpha} \quad (\text{I.39})$$

Paquet d'onde Gaussien en dim 1

Nous considérons un modèle à une dimension, avec une particule libre⁴, dont la fonction d'onde à l'instant $t = 0$ s'écrit

$$\Psi(x, t = 0) = \frac{\sqrt{a}}{(2\pi)^{3/4}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{a^2}{4}(k-k_0)^2} e^{ikx} dk \quad (\text{I.40})$$

4. Le potentiel $V(x) = 0$

Ce paquet d'onde est obtenu par superposition d'ondes planes e^{ikx} avec des coefficients

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}g(k, t=0) = \frac{\sqrt{a}}{(2\pi)^{3/4}}e^{-\frac{a^2}{4}(k-k_0)^2} \quad (\text{I.41})$$

qui correspondent à une fonction de Gauss, centrée en $k = k_0$. C'est pourquoi nous appelons (I.40) onde gaussienne.

En exploitant le résultat (I.39), nous pouvons alors montrer que I.40 vaut

$$\left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{\frac{1}{4}} e^{ik_0 x} e^{-\frac{x^2}{a^2}} \quad (\text{I.42})$$

Nous pouvons en déduire la valeur de la densité de probabilité de la fonction d'onde d'une particule libre à l'instant $t = 0$:

$$\|\Psi(x, t=0)\|^2 = \sqrt{\frac{2}{\pi a^2}} e^{-2\frac{x^2}{a^2}} \quad (\text{I.43})$$

Nous pouvons vérifier que $\int dx \|\Psi\|^2$ est bien égale à 1.

Nous remarquons alors que $\Delta x \approx \frac{a}{2}$. Ainsi, $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$. Nous en déduisons en particulier que $\Delta p = \frac{\hbar}{2}$, et donc que la distribution des vitesses est donnée par $\Delta v = \frac{\Delta p}{m} = \frac{\hbar}{ma}$: nous avons un **étalement**.

4 Potentiel stationnaire

Nous nous intéressons ici au comportement d'une onde plongée dans un potentiel indépendant du temps ; $V(\mathbf{r}, t) = V(\mathbf{r})$. Cela signifie que les effets quantique doivent se produire lorsque le potentiel varie sur des distances plus courtes que la longueur d'onde : celles-ci ne peuvent alors pas être négligées. Nous allons donc étudier le comportement d'une particule placée dans différents "potentiels carrés", c'est à dire des potentiels dont les variations se font par "marche d'escaliers". Avant de passer à l'étude du potentiel, discutons des propriétés que satisfait l'équation de Schrödinger pour un potentiel indépendant du temps $V(\mathbf{r})$.

4.1 Equation de Schrödinger indépendante du temps

Recherchons les solutions de l'équation de Schrödinger (I.12). Pour ce faire, passons par une séparation des variables. Plus précisément, posons

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \varphi(\mathbf{r})\kappa(t) \quad (\text{I.44})$$

Il suffit alors de placer cette dernière équations dans (I.12) :

$$i\hbar\varphi(\mathbf{r})\partial_t\kappa(t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\kappa(t)\Delta\varphi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\kappa(t)\varphi(\mathbf{r}) \quad (\text{I.45})$$

$$\frac{i\hbar}{\kappa(t)}\partial_t\kappa(t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\varphi(\mathbf{r})}\Delta\varphi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) \quad (\text{I.46})$$

Cette équation indique l'égalité entre une fonction de t (membre de gauche) et une fonction de \mathbf{r} (membre de droite). Cette dernière n'est possible que si ils sont en fait tous les deux égales à une constante, que nous poserons (par convention) égale à $\hbar\omega$.

Dans le membre de gauche, nous obtenons une équation différentielle non-linéaire du premier ordre. Elle se résoud trivialement en

$$\kappa(t) = c_1 e^{-i\omega t} \quad \forall c_1 \in \mathbb{R} \quad (\text{I.47})$$

En développant l'égalité de droite, nous trouvons alors **l'équation de Schrödinger indépendante du temps** :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\varphi(\mathbf{r}) = \hbar\omega\varphi(\mathbf{r}) \quad (\text{I.48})$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{r}) \right] \varphi(\mathbf{r}) = E\varphi(\mathbf{r}) \quad (\text{I.49})$$

$$H\varphi(\mathbf{r}) = E\varphi(\mathbf{r}) \quad (\text{I.50})$$

En posant $c_1 = 1$ dans (I.47), nous obtenons alors la fonction

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \varphi(\mathbf{r})e^{-i\omega t} \quad (\text{I.51})$$

qui est solution de l'équation de Schrödinger, si $\varphi(\mathbf{r})$ est solution de (I.48). On dit que l'on a séparé les variables de **temps** et d'**espace**.

Note. Dans (I.49), H est un opérateur différentiel *linéaire*. Effectivement, si λ_1 et λ_2 sont des constantes, alors

$$H[\lambda_1\varphi_1(\mathbf{r}) + \lambda_2\varphi_2(\mathbf{r})] = \lambda_1 H\varphi_1(\mathbf{r}) + \lambda_2 H\varphi_2(\mathbf{r}) \quad \forall \lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{R} \quad (\text{I.52})$$

Note. L'équation (I.49) est souvent décrite comme "l'équation aux valeurs propres".

4.2 Potentiels à une dimension : description quantitative

Rappelons l'équation de Schrödinger, elle nous sera utile pour la suite :

$$i\hbar\partial_t\Psi(t, \mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\Psi(t, \mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\Psi(t, \mathbf{r})$$

Où $V(\mathbf{r})$ est constante par morceaux.

Nous allons considérer les problèmes de *puit de potentiel*, et de *barrière de potentiel*. Une question légitime est de se demander les raisons derrière cette étude : la réponse est simple. Ils s'agissent de cas théoriques possédant des solutions analytiques, et permettant d'illustrer des effets quantiques importants : l'**effet tunnel**, ainsi que les **états liés**. De plus, certaines situations physiques réelles y sont très proches : pensons notamment à la barrière de Josephson (supraconducteurs), et aux points quantiques : elles consistent dès lors en une excellente approximation de ces phénomènes.

4.2.1 Puit de potentiel infini à une dimension

Cette situation correspond à un potentiel prenant les valeurs suivantes, en fonction de sa position ⁵ :

$$V(x) = \begin{cases} -\infty \\ 0 \\ +\infty \end{cases} \quad (\text{I.53})$$

respectivement en $x < 0$, $x \in [0, L]$ et $x > L$. Appliquons ce potentiel à l'équation de Schrödinger.

Séparation des variables : $\Psi(\mathbf{r}, t) = \kappa(t)\varphi(\mathbf{r})$. Nous avons un potentiel stationnaire : reprenons le calcul à partir de (I.49).

La solution temporelle provient de (I.46), et donne

$$\kappa(t) = \kappa_0 e^{-i\omega t} \quad (\text{I.54})$$

Il nous reste à déterminer la solution spatiale. Rappelons les conditions aux bords : $\varphi(L) = 0 = \varphi(0)$. Dès lors, nous avons que :

Pour $0 < x < L$: $-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\varphi = E\varphi$. Il s'agit d'une équation différentielle linéaire du second ordre. Sa solution *générale* est de la forme

$$\varphi(\mathbf{r}) = c_1 \cos(kx) + c_2 \sin(kx) \quad \forall c_1, c_2 \in \mathbb{C} \quad (\text{I.55})$$

Afin de respecter les conditions aux bords, nous aurons que

$$c_2 = 0 \quad kL = n\pi \quad (\text{I.56})$$

Dès lors,

$$k_n = \frac{n\pi}{L} \quad E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2 n^2}{L^2} \quad (\text{I.57})$$

Nous avons alors la solution mathématique à notre problème :

$$\Psi_n(\mathbf{r}, t) = \kappa_0 e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \quad (\text{I.58})$$

Note. Notons que cette équation implique une **quantification de l'énergie**. La solution physique sera la superposition de tous les états possible :z

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \kappa_n e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \quad (\text{I.59})$$

4.2.2 Puit de potentiel fini à une dimension

Etudions un cas similaire. Soit $I = [-\frac{a}{2}, \frac{a}{2}]$. Dans cette situation, nous avons que

$$\begin{cases} V(x > \|\frac{a}{2}\|) = 0 \\ V(x) = -V_0 \end{cases} \quad (\text{I.60})$$

La résolution de l'équation aux valeurs propres (I.49) s'effectue dans chaque zone ⁶ indépendamment, et donnera

$$\begin{cases} \varphi(x < -\frac{a}{2}) = A_1 e^{\rho x} + A'_1 e^{-\rho x} & \rho = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} \\ \varphi(x \in I) = B_2 e^{ikx} + B'_2 e^{-ikx} & k = \sqrt{\frac{2m(V_0 + E)}{\hbar^2}} \\ \varphi(x > \frac{a}{2}) = A_3 e^{\rho x} + A'_3 e^{-\rho x} \end{cases} \quad (\text{I.61})$$

5. Insistons sur le fait que le potentiel est considéré invariant par le temps : nous avons bien un potentiel stationnaire du type $V(\mathbf{r}, t) = V(x)$.

6. Nous notons I la zone tq $x < -\frac{a}{2}$, III la région tq $x > \frac{a}{2}$ et II la région entre les deux.

Conditions aux bords. Rappelons que $\varphi(x)$ est bornée en les régions I et III. Nous pouvons alors réécrire les équations sous la forme

$$\begin{cases} \varphi(x) = A_1 e^{\rho x} \\ \varphi(x \in I) = B_2 e^{ikx} + B'_2 e^{-ikx} \\ \varphi(x) = A'_3 e^{-\rho x} \end{cases} \quad (\text{I.62})$$

QUESTION. Comment avons-nous choisi le terme en A'_1 et A_3 pour la simplification ?

Conditions de continuité : $\varphi(x)$ et $\partial_x \varphi(x)$ doivent être continue. Dès lors,

— **En $x = -\frac{a}{2}$,** nous avons que :

$$\begin{cases} A_1 e^{-\frac{\rho a}{2}} = B_2 e^{-\frac{ika}{2}} + B'_2 e^{\frac{ika}{2}} \\ \rho A_1 e^{-\frac{\rho a}{2}} = ik \left[B_2 e^{-\frac{ika}{2}} - B'_2 e^{\frac{ika}{2}} \right] \end{cases} \quad (\text{I.63})$$

— **En $x = \frac{a}{2}$,** nous avons que :

$$\begin{cases} A'_3 e^{-\frac{\rho a}{2}} = B_2 e^{-\frac{ika}{2}} + B'_2 e^{\frac{ika}{2}} \\ \rho A'_3 e^{-\frac{\rho a}{2}} = ik \left[B_2 e^{-\frac{ika}{2}} - B'_2 e^{\frac{ika}{2}} \right] \end{cases} \quad (\text{I.64})$$

Note. Nous possédons 4 équations linéaires à 4 inconnues : la solution est non triviale si $\det [\text{Matrice associée}] = 0$.

Note. Les inconnues dans nos équations sont bien A_2, A'_2, B_3 et B'_3 .

En multipliant la première équation de (I.63) par ik , et en additionnant/soustrayant les deux équations, nous pouvons obtenir

$$\begin{cases} B_2 = \frac{\rho+ik}{2ik} e^{(ik-\rho)\frac{a}{2}} A_1 \\ B'_2 = -\frac{\rho-ik}{2ik} e^{-\frac{a}{2}[\rho+ik]} A_1 \end{cases} \quad (\text{I.65})$$

Similairement, (I.64) permet de mettre en évidence les relations

$$\begin{cases} B_2 = -\frac{\rho-ik}{2ik} e^{-\frac{a}{2}(\rho+ik)} A'_3 \\ B'_2 = \frac{\rho+ik}{2ik} e^{\frac{a}{2}(ik-\rho)} A'_3 \end{cases} \quad (\text{I.66})$$

Ces deux dernières équations, ensembles, impliquent :

(...)

Les états d'énergie les plus sont alors

$$\approx k = \frac{n\pi}{a} \quad E \approx \frac{\pi^2 \hbar n^2}{2ma^2} - V_0 \quad (\text{I.67})$$

4.2.3 Potentiel en escalier

Plaçons-nous dans une région telle que le potentiel est stationnaire, c'est à dire dont la variable spatiale $\varphi(\mathbf{r})$ de la solution de l'équation de Schrödinger $\Psi(\mathbf{r}, t)$ respecte l'équation (I.48). Nous pouvons réécrire cette dernière équation sous la forme

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

Nous pouvons distinguer plusieurs cas.

— $E > V$. En introduisant le terme positif $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) \geq 0$, nous pouvons montrer que les solutions de (I.48) sont de la forme

$$\varphi = A e^{ikx} + A' e^{-ikx} \quad (\text{I.68})$$

Nous parlons d'ondes progressives.

— $E < V$. Cette condition correspond aux régions classiquement interdites : il s'agit de l'**effet tunnel**. Dans ce cas, nous introduisons la constante ρ définie par $\rho^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (V - E) \geq 0$. Nous obtenons alors que la solution est

$$\varphi = B e^{\rho x} + B' e^{-\rho x} \quad (\text{I.69})$$

— $\mathbf{E} = \mathbf{V}$. Dans ce cas, $\varphi(\mathbf{r})$ est une fonction linéaire de x .

— **Là où \mathbf{V} est discontinue.** Dans ce cas, φ est continue et $\partial_x \varphi$ l'est également.

5 Approximation semi-classique

L'approximation semi-classique permet d'obtenir une solution de l'Equation de Schrödinger lorsque \hbar tend vers 0 ; c'est à dire lorsque la longueur d'onde est beaucoup plus ptite que les autres dimensions considérées. Son idée est simple : l'équation de Schrödinger se dérive de l'équation de propagation des ondes. On doit alors retrouver la mécanique classique dans la limite \hbar tend vers 0, tout comme nous retrouvons l'optique géométrique lorsque λ tend vers 0 dans l'optique ondulatoire.

Notons φ solution stationnaire de l'équation de Schrödinger pour une particule de masse m dans un potentiel $V(R)$. Alors,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 + V(R) \right] \Psi(r) = E \Psi(r)$$

Se réécrit, en posant

$$\Psi(r) = A(r) e^{i \frac{S(r)}{\hbar}} \quad \forall A, S \in \mathbb{R} \quad (\text{I.70})$$

Nous pouvons alors montrer que les relations

$$2A'S' + AS'' = 0 \quad (\text{I.71a})$$

$$\frac{S'^2}{2m} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{A''}{A} + V = E \quad (\text{I.71b})$$

sont équivalentes à l'équation de Schrödinger (I.48). En particulier, (I.71a) peut se résoudre directement et donne

$$A(x) = \frac{A_0}{\sqrt{S'(r)}} \quad \forall A_0 \in \mathbb{R} \quad (\text{I.72})$$

Nous pouvons vérifier que (I.72) est équivalente à l'équation de continuité (I.16)

$$\partial_t \rho(\mathbf{r}, t) + \nabla \mathbf{J} = 0$$

pour une solution stationnaire : effectivement, nous avons que $\rho(x, t) = |\psi|^2$ ne dépend pas du temps.

Pour résoudre (I.71b), nous faisons l'hypothèse $\frac{\hbar^2}{2m} \frac{A''}{A}$ est négligeable par rapport aux autres termes. Nous obtenons alors l'équation

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

Il s'agit d'une équation bien connue de la mécanique classique : l'équation de **Hamilton-Jacobi**. Ses solutions sont de la forme

$$S'(x) = \pm \rho(r) \quad \rho(r) = \sqrt{2m(E - V(r))} \quad (\text{I.73a})$$

$$S(x) = \pm \int^x dx' \rho(x') \quad (\text{I.73b})$$

Nous avons alors que

$$\Psi(r) = \frac{A_0}{\sqrt{\rho(r)}} e^{\pm i \int^x dx' \frac{\rho(x')}{\hbar}} \quad (\text{I.74})$$

Nous pouvons en déduire que

1. Le nombre d'onde à la position x est donnée par $\mathbf{k}(x) = \frac{p(x)}{\hbar}$.
2. La longueur d'onde à la position x est donnée par $\lambda(x) = \frac{2\pi\hbar}{p(x)}$.
3. La vitesse de groupe est donnée par

$$\frac{1}{V_g} = \frac{\partial k(r)}{\partial \omega} = \frac{\partial p(r)}{\partial E} = \frac{m}{p(r)} = \frac{1}{V_{classique}(r)}. \quad (\text{I.75})$$

La vitesse d'un paquet d'onde sera donnée, selon l'approximation semi-classique, par la vitesse $V_{classique}(r)$ de la mécanique classique.

4. Dans une région classiquement interdite,

$$\Psi(r) = \frac{1}{\sqrt{\rho(r)}} e^{\pm \int^x dx' \frac{\rho(x')}{\hbar}} \quad \text{Avec } \frac{\rho^2(x)}{2m} = V(x) - E \quad (\text{I.76})$$

[Graphique]

Nous pouvons montrer que si la solution décroît exponentiellement à grande distance (proche du point de rebroussement) :

$$\Psi(r) = \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \cos\left(\int_b^x k(x') dx' - \frac{\pi}{4}\right) \quad \forall x > b \quad (\text{I.77})$$

$$\Psi(r) = \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \cos\left(\int_x^a k(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right) \quad \forall x < a \quad (\text{I.78})$$

Nous obtenons la condition de quantification semi-classique :

$$\frac{1}{\hbar} \int_b^a dx \sqrt{2m(E - V(x))} = (n + \frac{1}{2})\pi \quad (\text{I.79})$$

(Valable uniquement pour E grand).

5.1 Application à la désintégration alpha des noyaux

La particule alpha a une énergie E. Pour $R > R_\alpha$, nous avons une énergie $V(R) < E$ et sommes alors dans une région classiquement permise. Malheureusement, la particule va devoir traverser une région classiquement interdite - entre R et R_α . La probabilité d'émission par unité de temps est approximée par $\frac{1}{T_{\frac{1}{2}}} \sim \frac{1}{e^{2\gamma}}$, où :

$$\gamma = \frac{1}{\hbar} \int_R^{R_\gamma} dr \sqrt{2m_\alpha(V(r) - E)} \quad \text{Avec } V(r) = \frac{z_\alpha z e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \text{ et } E = \frac{z_\alpha z e^2}{4\pi\epsilon_0 R_\alpha} \quad (\text{I.80})$$

$$= \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{z_\alpha z e^2}{4\pi\epsilon_0}} \int_R^{R_\alpha} \sqrt{\frac{1}{r} - \frac{1}{R_\alpha}} dr \quad (\text{I.81})$$

$$\gamma \approx \frac{\pi}{2\hbar} \sqrt{2m_\alpha} \left[\frac{z_\alpha z e^2}{4\pi\epsilon_0} \right] \frac{1}{\sqrt{E}} \quad (\text{I.82})$$

$$\rightarrow \log T_{\frac{1}{2}} = a \frac{z}{\sqrt{E}} + b \quad (\text{I.83})$$

Cette loi est bien vérifiée expérimentalement. Elle explique pourquoi il n'y a pas de désintégration des noyaux les plus lourds.