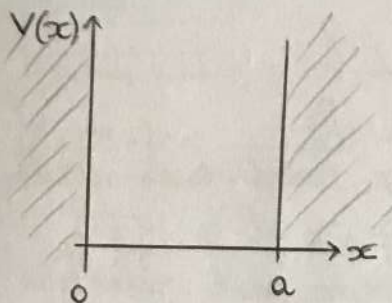
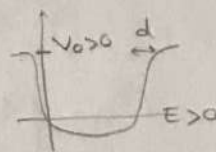


## Évolution d'une particule quantique dans un potentiel.

### \* Puits de potentiel infini



modélisation si  $E \ll V_0$   
 $d \ll \lambda_{dB}$



$$V(x) = \begin{cases} +\infty & \text{pour } x < 0 \\ 0 & \text{pour } 0 \leq x \leq a \\ +\infty & \text{pour } x > a. \end{cases}$$

Lorsque  $V(x) \rightarrow \infty$ ,  $\psi(x) \rightarrow 0$ . Les régions de l'espace où le potentiel est élevé sont interdites à la particule quantique.

Pour  $0 \leq x \leq a$  :

$$\boxed{\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x) = 0.}$$

a) si  $E \leq 0$ .  $\kappa^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2}$   $\kappa = \frac{\sqrt{2m(-E)}}{\hbar}$

$$\psi(x) = A \exp(\kappa x) + B \exp(-\kappa x).$$

Continuité de  $\psi(x)$  en 0 et a impose:  $\psi(0) = \psi(a) = 0$ .

on obtient  $A = B = 0$ .

$E < 0$  sans intérêt.

si  $E = 0 \rightarrow \psi(x) = Ax + B$ . Conditions aux limites imposent:

$A = B = 0$ .  $E = 0$  pas d'intérêt.

b) car  $E > 0$ .  $\kappa = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$

$$\psi(x) = A \sin(\kappa x) + B \cos(\kappa x)$$

$$\psi(0) = 0 \rightarrow B = 0$$

$$\psi(a) = 0 \rightarrow A \sin(\kappa a) = 0$$

$$\sin(\kappa a) = 0 \rightarrow \boxed{\kappa_n = \frac{n\pi}{a}} \quad \text{où } n \in \mathbb{N}^*$$

$$\frac{h\nu}{\lambda} = \frac{h\nu}{a} \rightarrow a = \frac{\lambda}{2} n$$



$$\psi_n = A_n \cdot \sin(k_n x) = A_n \cdot \sin\left(n\pi \frac{x}{a}\right)$$

$A_n$  peut être déterminée par la condition de normalisation:  $\int_0^a |\psi_n(x)|^2 dx = 1$

$$\int_0^a A_n^2 \sin^2\left(n\pi \frac{x}{a}\right) dx = 1$$

$$\int_0^a A_n^2 \left( \frac{1 - \cos\left(\frac{2n\pi x}{a}\right)}{2} \right) dx = 1 \rightarrow \frac{A_n^2 a}{2} - \frac{A_n^2 a}{2n\pi} \sin\left(\frac{2n\pi x}{a}\right) \Big|_0^a = 1$$

$$= \frac{A_n^2 a}{2} = 1 \rightarrow A_n = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

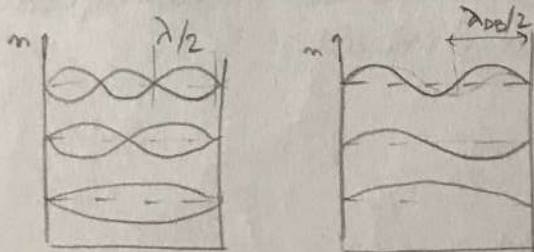
$$\boxed{\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(n\pi \frac{x}{a}\right)}$$

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \rightarrow k_n^2 = \frac{2mE_n}{\hbar^2} \quad \text{donc} \quad \boxed{E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{n^2 \pi^2}{a^2}}$$

$$\boxed{\Psi(x,t) = \sqrt{\frac{2}{a}} \exp\left(-i \frac{E_n}{\hbar} t\right) \sin\left(n\pi \frac{x}{a}\right)} \quad \text{avec } E_n =$$

\* Rq: Les dérivées  $\frac{d\psi_n(x)}{dx}$  ne sont pas continues en  $x=0$  et  $x=a$ , en raison de la discontinuité d'amplitude infinie du potentiel en ces points.

comparaison corde:

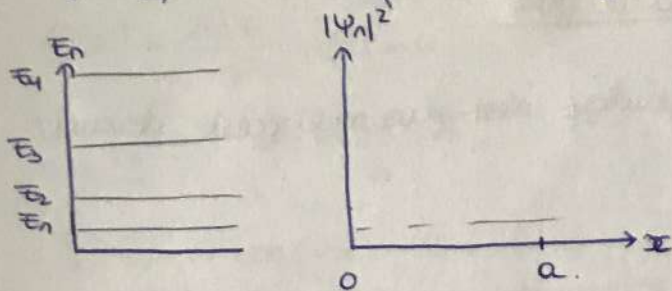


Il existe des points où la densité de probabilité de présence est max (ventre) et nulle (nœuds)

Différences: relation de dispersion. Propagation d'un paquet d'ondes par une particule quantique: dispersion. Corde: pas de dispersion. Particule dans puits quantification de l'énergie tandis que pour la corde  $E_n$  choisie arbitrairement.



Energies quantifiées : spectre d'énergie.



niveau fondamental  $E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$

L'énergie d'une particule quantique ne peut pas être inférieure à  $E_1$ .  
Autres : niveaux excités.

Inégalité de Heisenberg :

$\Psi_n(x,t)$  s'écrit comme la somme de deux ondes  $\vec{p}_n$  et  $-\vec{p}_n$   
 $\vec{p}_n$  et  $-\vec{p}_n$

$$\langle p_x \rangle = 0.$$

$$\Delta p_x = \sqrt{\langle p_x^2 \rangle} \quad \text{et} \quad \Delta x \leq a.$$

$$\Delta p_x \cdot \Delta x \geq \frac{\hbar}{2} \quad \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{a}.$$

$$E_{\min} = \frac{\langle p_x^2 \rangle_{\min}}{2m} \approx \frac{\hbar^2}{8ma^2} \quad \text{à un facteur près}$$

$$E_{\min} \approx \frac{\hbar^2}{ma^2}$$

Densité de probabilité de présence  $|\Psi_n(x)|^2$  est symétrique par à  $x = \frac{a}{2}$  conséq. directe de la symétrie du potentiel  $V(x)$ .

Pour une particule classique :  $P(x) = \frac{1}{a}$ .

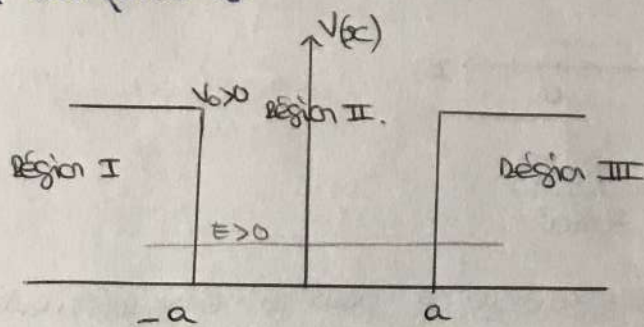
Pour une particule quantique, pour nombreuses oscillations  $\sin^2(\frac{n\pi x}{a})$  tend vers  $\frac{1}{2}$  (valeur moyenne). donc  $P \approx \frac{1}{a}$ .

Toute fonction d'onde non stationnaire peut être écrite comme une combinaison linéaire des fct. d'ondes stationnaires.

$$\Psi(x,t) = \sum_{n=1}^{+\infty} c_n \Psi_n(x) \exp(-i \frac{E_n}{\hbar} t) \quad \text{avec} \quad \sum_{n=1}^{+\infty} |c_n|^2 = 1.$$

## \* Puits de potentiel de profondeur finie

Énergie  $E$  de la particule incidente n'est plus négligeable devant la prof. du puits  $V_0$ .



$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{par } x < -a \quad (\text{région I}) \\ 0 & \text{par } -a \leq x \leq a \quad (\text{région II}) \\ V_0 & \text{par } x > a \quad (\text{région III}). \end{cases}$$

Par  $E < V_0$ .

$$\psi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) \psi(x) = 0$$

C.L: continuité en  $x = \pm a$

$$\psi_I(-a) = \psi_{II}(-a)$$

$$\psi_{II}(a) = \psi_{III}(a)$$

continuité de la dérivée

$$\psi'_I(-a) = \psi'_{II}(-a)$$

$$\psi'_{II}(a) = \psi'_{III}(a)$$

zones I et III.

$$\psi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2} \underbrace{(E - V_0)}_{< 0} \psi(x) = 0.$$

$$\psi_I(x) = A \cdot e^{Kx} + B e^{-Kx}$$

$$K^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E) > 0.$$

$$\psi_I(x) = A e^{Kx} \quad -\infty < x \leq -a$$

$$\psi_{III}(x) = B e^{-Kx} \quad a \leq x < +\infty$$



## Zone II

$$\psi''(x) + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x) = 0.$$

$$E > 0.$$

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

$$\psi_{II}(x) = A \cos(kx) + B \sin(kx)$$

car on a creusé le puits à  $x=0$ .

états pairs		
I	II	III
$Be^{Kx}$	$A \cos(kx)$	$Be^{-Kx}$
états impairs		
I	II	III
$-Be^{Kx}$	$A \sin(kx)$	$Be^{-Kx}$

$$V(x) = V(-x)$$

$$\psi(x) \rightarrow \psi(-x)$$

car je veux que ça soit pair!

impair.

## ÉTATS PAIRS.

$$x = -a.$$

$$Be^{-Ka} = A \cos(ka) \quad (1)$$

$$K Be^{-Ka} = -A k \sin(-ka).$$

$$= KA \sin(ka) \quad (2)$$

→ continuité de la dérivée

on refait pas en  $x=a$  car on obtient la même chose.

$$\frac{(2)}{(1)} \quad \tan(ka) = \frac{Ka}{k}$$

$$K^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)$$

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

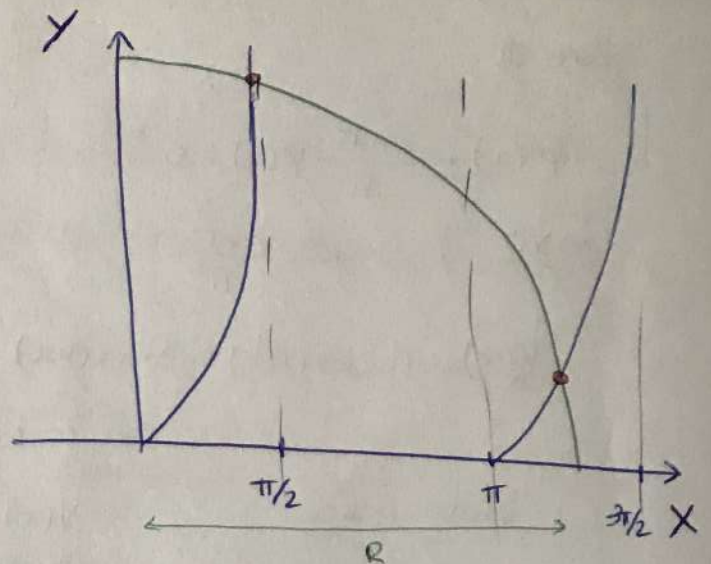
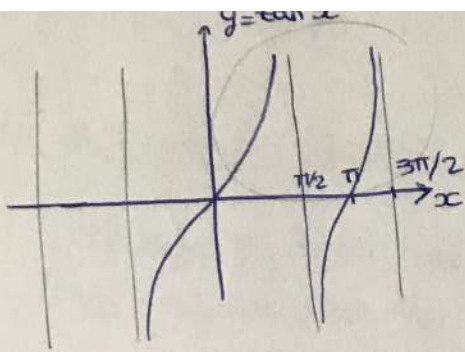
$$\text{on additionne : } Ka^2 + ka^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} a^2$$

$$X = Ka$$

$$Y = ka$$

$$X^2 + Y^2 = R^2$$

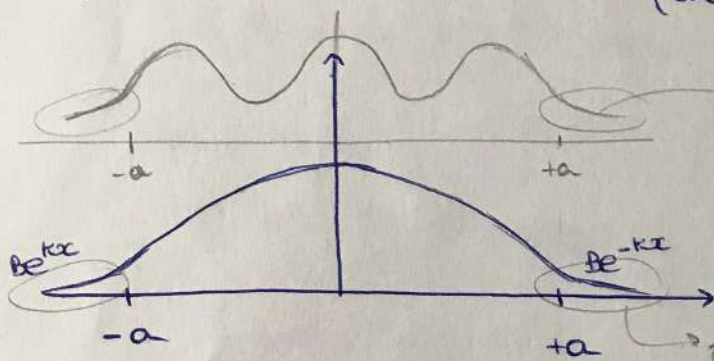
$$\text{on a } \left| \begin{array}{l} X^2 + Y^2 = R^2 \\ Y = X \tan X \end{array} \right.$$



cerce rayon  $R$ .

Le nb d'états accessibles dépend du rayon. Plus  $R$  est grand, plus il y a des intersections.

Il y a toujours au moins 1 état possible solution.



0.20 pas de points car continuité de la dérivée

→ fondamental

### ETATS IMPAIRS

$$x = -a$$

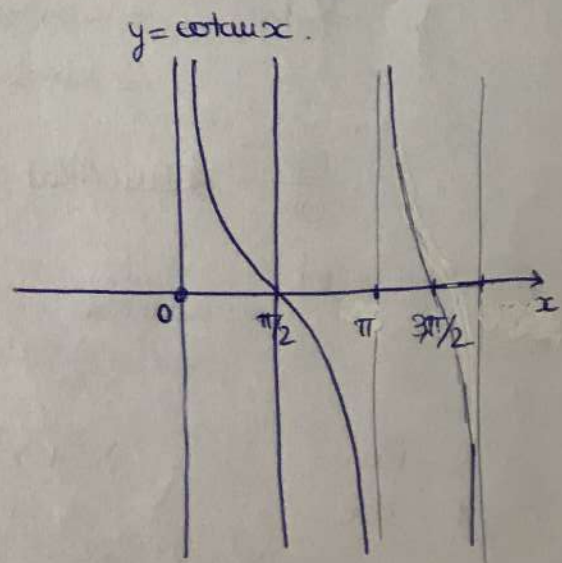
$$Be^{-Ka} = A \sin(+Ka) \quad (1)$$

$$-BKe^{-Ka} = KA \cos(Ka) \quad (2)$$

$$\frac{(2)}{(1)} \quad -Ka = Ka \cotan(Ka)$$

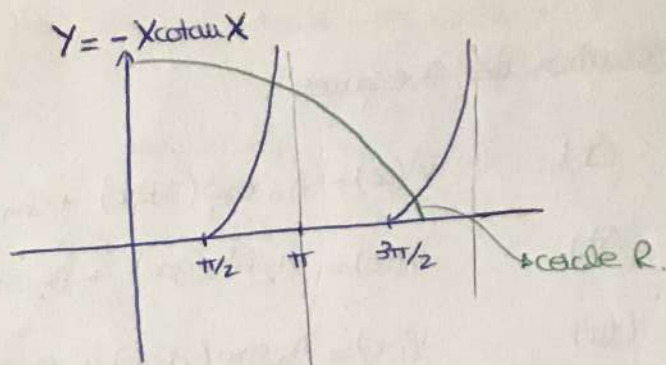
$$Y = -X \cotan X$$

$$X^2 + Y^2 = R^2$$





j'ai besoin de  $-\cotan X$



Les états impaires n'existent pas toujours, si  $R < \pi/2$  il n'y a pas d'état impair.

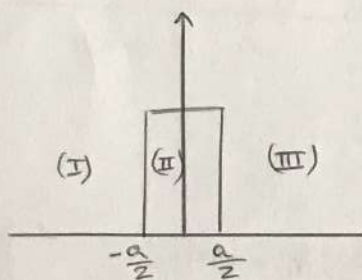
Donc état impair si  $R > \pi/2$ .

Dans les zones I et III:  $\exp(-Rx)$  et  $\exp(Rx)$  où  $R = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V-E)}$

Donc la profondeur de pénétration de la particule dans les régions interdites par la méca classique est:

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

### \* Effet tunnel.



$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{pour } x < -\frac{a}{2} & \text{(I)} \\ V_0 > 0 & \text{pour } -\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2} & \text{(II)} \\ 0 & \text{pour } x > \frac{a}{2} & \text{(III)} \end{cases}$$

Régions I et III:  $\psi''(x) + k^2 \psi(x) = 0$

Région II:  $\psi''(x) + q^2 \psi(x) = 0$

$$E \leq V_0$$

$$\begin{aligned} \text{où } k &= \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \\ q &= \frac{\sqrt{2m(V-E)}}{\hbar} \end{aligned}$$

Solution des 3 espaces:

(I):  $\psi(x) = \overset{\text{onde incidente}}{A_1 \exp(ikx)} + \overset{\text{onde réfléchi}}{B_1 \exp(-ikx)}$

(II):  $\psi(x) = A_2 \operatorname{ch}(qx) + B_2 \operatorname{sh}(qx)$

(III):  $\psi(x) = \underset{\text{onde transmise}}{A_3 \exp(ikx)} + B_3 \exp(-ikx)$

$B_3 = 0$  (car pas d'onde qui arrive vers la barrière)

C.L: continuité de  $\psi$  en  $x = \pm \frac{a}{2}$  et continuité de  $\psi'$  en  $x = \pm \frac{a}{2}$ .

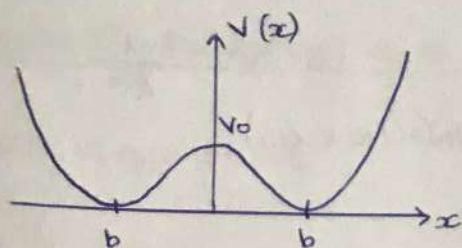
4 éqts  $\rightarrow$  5 inconnues.

pas de quantification de  $E$  car poutille pas confinée.

Barrière épaisse ! pag. 1254.



molécule d'ammoniac



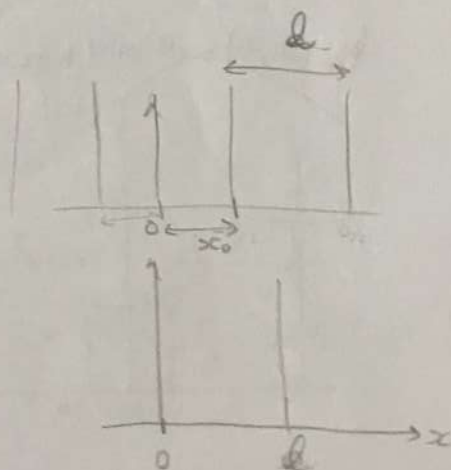
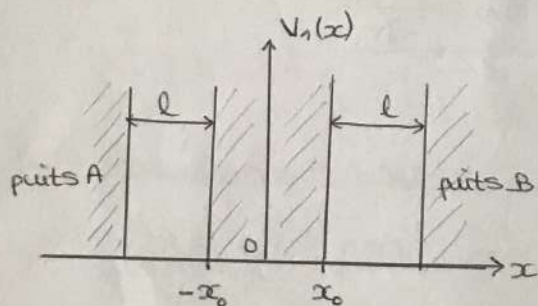
$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V(x,t) \Psi(x,t)$$

$$\Psi(x,t) = \varphi(x) \exp(-iEt/\hbar)$$

III. B.1  $i\hbar \left(-i\frac{E}{\hbar}\right) \cdot \varphi(x) \exp(\dots) = -\frac{\hbar^2}{2m} \varphi''(x) \exp(\dots) + V(x,t) \varphi(x) \exp(\dots)$

$$E\varphi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \varphi''(x) + V(x,t) \varphi(x)$$

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



III. B.2

b) c.l.  $\varphi_B(x_0) = \varphi_B(x_0 + l) = 0$   
 $\varphi_A(x_0) = \varphi_A(x_0 + l) = 0$

c)  $\int_{x_0}^{x_0+l} |\varphi_B|^2(x) dx = 1$  et  $\int_{-x_0}^{-x_0-l} |\varphi_A|^2(x) dx = 1$

$$y = x - x_0$$

$$y = x - x_0$$

puits A  
 $x = y + x_0$

III. B.3  $\psi''(x) + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x) = 0.$

$E > 0.$   $\psi(x) = A \cdot \cos(kx) + B \sin(kx)$   $\text{au } k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}.$

$\psi_A(x) = A' \cos(k(x+x_0)) + B' \sin(k(x+x_0))$

$\psi_A(x = -x_0) = 0 \Rightarrow \boxed{A' = 0}$

$\psi_A(x) = B' \sin(k(x+x_0))$

$\psi_A(-x_0 - l) = B' \sin(k(-l)) = 0.$

$= -B' \sin(kl) = 0$

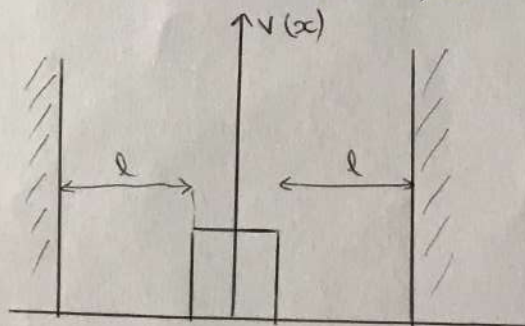
$kl = n\pi.$  denn  $k_n = \frac{n\pi}{l}$

$\frac{2mE_n}{\hbar^2} l^2 = n^2 \pi^2 \rightarrow \boxed{E_n^A = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m l^2} = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \cdot k_n^2}{2m}}$

$\psi_A(x) = B' \sin(k(x+x_0))$

$\psi_B(x) = B'' \sin(k(x-x_0))$   $\boxed{E_m^B = \frac{\hbar^2 \cdot k_m^2}{2m}}$

$\psi_A(x, t) = B' \sin(k(x+x_0)) e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}}$





Partie II. Radioactivité  $\alpha$  et effet tunnel

## II.A. Le quanton libre

(18)  $\underline{\Psi}(x,t)$ .

$$dP = \int_x^{x+dx} |\underline{\Psi}(x,t)|^2 dx$$

$$[\underline{\Psi}] = L^{-1/2}$$

(19)  $\int_{-\infty}^{\infty} |\underline{\Psi}(x,t)|^2 dx$ . La probabilité de trouver la particule entre  $-\infty$  et  $+\infty$  est de 1. Condition de normalisation.

(20)  $\rho = |\underline{\Psi}(x,t)|^2$  : densité de probabilité de présence  
densité linéique de probabilité de présence  $\rho = \frac{dP}{dx}$

$$\vec{J}(x,t) = |\underline{\Psi}(x,t)|^2 \frac{\hbar \vec{k}}{m}$$

(21) Particule non relativiste : se déplace à  $v_g < c$ .

$$\underline{\Psi}(x,t) = \psi(x) \cdot f(t) = \psi(x) \cdot \exp(-i \frac{E}{\hbar} t)$$

~~$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) \exp(-i \frac{E}{\hbar} t) + V(x) \cdot \psi(x) \exp(-i \frac{E}{\hbar} t) = i \hbar \left(-i \frac{E}{\hbar}\right) \psi(x) \exp(-i \frac{E}{\hbar} t)$$
  
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) + (V - E) \psi(x) = 0 \quad (= + E \psi(x))$$~~

~~$$\boxed{\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) + (E - V) \psi(x) = 0}$$~~

$$dP = \int |\psi(x)|^2 dx \text{ car } f(t) \text{ est une constante car stationnaire}$$

$$\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\psi''(x)}{\psi(x)}}_{\text{ne dépend que de } x} + \underbrace{V(x,t)}_{\text{ne dépend que de } t} = \underbrace{\frac{i \hbar f'(t)}{f(t)}}_{\text{ne dépend que de } t}$$

ça doit être vrai pour  $\forall x, \forall t$ .donc  $= E$  (de énergie).

$$\frac{f'(t)}{f(t)} = \frac{-E}{i \hbar} \rightarrow f(t) = A e^{-i \frac{E}{\hbar} t} = A e^{-i \omega t}$$



(22)

$$\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) + \varepsilon \psi(x) = 0$$

$$K^2 = -\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2};$$

si  $\varepsilon > 0$ :

$$\varepsilon > 0 \rightarrow K = \pm \sqrt{\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}}$$

$$\psi(x) = A \exp(+iKx) + B \exp(-iKx)$$

$$\Psi(x,t) = A \cdot e^{i(Kx - \omega t)} + B \exp(-i(Kx + \omega t))$$

(23)

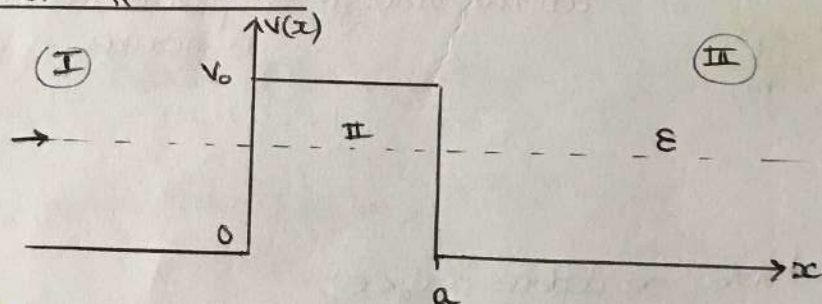
$$\vec{K} = \pm \sqrt{\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}} \vec{u}_x$$

relation entre  $\vec{p}$  et  $\vec{K}$ :

$$\varepsilon = \frac{1}{2} m v^2 \rightarrow \varepsilon \cdot m = \frac{1}{2} \underbrace{m^2 v^2}_{p^2} \rightarrow p = \sqrt{2m\varepsilon}$$

donc  $p = \hbar \cdot K$  relation de de Broglie

## II.B. Effet tunnel.



$$V(x) = 0$$

(24)

méca classique: la particule a une énergie  $< V_0$  donc elle ne pourra pas traverser la barrière de potentiel en  $x=0$ .  
 $E_m = E_c + E_p = \text{cte}$   $E_c > 0$   $E_m - E_p \geq 0$   $E_p \leq E_m$

(25)

$$\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) + (\varepsilon - V) \psi(x) = 0$$

Zone I

$V(x) = 0$  dans ces régions.

$$\psi(x) = A_I \exp(iKx) + B \exp(-iKx)$$

$$\text{avec } K = \pm \sqrt{\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}}$$

Zone III

$$\psi(x) = A_{III} \exp(iKx) + D \exp(-iKx) \rightarrow 0 \text{ car pas d'onde dans le sens des } x \downarrow$$



(26) Region II.  $q = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) + (E - V) \psi(x) = 0.$$

où  $E < V$ .

$$\psi''(x) + \underbrace{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V)}_{< 0} \psi(x) = 0$$

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

~~$k^2 = \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}$~~

$$\psi(x) = A \cdot e^{qx} + B e^{-qx}$$

(27)  $\psi_I(x=0) = \psi_{II}(x=0)$

$$\psi'_I(x=0) = \psi'_{II}(x=0)$$

$$\psi_{II}(x=a) = \psi_{III}(x=a)$$

$$\psi'_{II}(x=a) = \psi'_{III}(x=a)$$

L'amplitude de l'onde incidente.

(28)  $\vec{J} = |\psi|^2 \frac{\hbar \vec{k}}{m}$

(I)  $\vec{J}_i = |A_I|^2 \frac{\hbar \cdot \vec{k}_i}{m}$   $E = \frac{\hbar^2 k_i^2}{2m}$

$$\vec{J}_r = |B_I|^2 \frac{\hbar (-\vec{k}_i)}{m}$$

(III)  $\vec{J}_t = |A_{III}|^2 \frac{\hbar \vec{k}}{m}$

$$R = \frac{|\vec{J}_r|}{|\vec{J}_i|} = \frac{|B_I|^2}{|A_I|^2} = \left| \frac{B_I}{A_I} \right|^2$$

$$T = \left| \frac{\vec{J}_t}{\vec{J}_i} \right| = \left| \frac{A_{III}}{A_I} \right|^2$$

$$R + T = 1.$$

$$T = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \sinh^2(qa)}$$

29)  $m_e = 9,11 \times 10^{-31} \text{ kg}$ .

$\mathcal{E} = 1,00 \text{ eV}$

$V_0 = 2,00 \text{ eV}$

$\text{ch}^2 x - \text{sh}^2 x = 1$

Tableau de valeurs de  $qa$  et  $T$

$T = \frac{1}{1 + \text{sh}^2(qa)}$

car  $\mathcal{E} = \frac{V_0}{2}$

$T = \frac{1}{\text{ch}^2(qa)}$

$a$	0,5	1	2
$qa$	2,57	5,14	10,3
$T(qa)$			

$q = (\delta)^{-1}$

Barrière épaisse:  $qa = \frac{a}{\delta} \gg 1$ .

si barrière épaisse:

$T = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \text{sh}^2(qa)}$

$T \approx \frac{4E(V_0 - E)}{V_0^2} \cdot \frac{1}{\text{sh}^2(qa)}$

$\text{sh} x = \frac{e^x - e^{-x}}{2}$

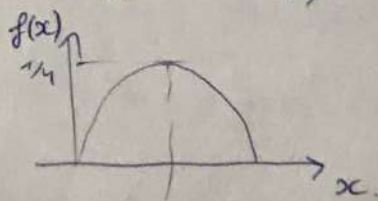
$T \approx \frac{4E(V_0 - E)}{V_0^2} \cdot \frac{4}{e^{2qa}}$

$\text{sh} x \approx \frac{e^x}{2}$  quand  $x \gg 1$ .

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

$T \approx 16 \frac{E}{V_0} \cdot \left(1 - \frac{E}{V_0}\right) e^{-2qa}$

$f(x) = x(1-x)$ , où  $x = \frac{E}{V_0}$ .



$0 \leq T_0 \leq 2$

$T_0 \sim 1$