

## CHAPITRE 3 :      **ETATS STATIONNAIRES D'UNE PARTICULE DANS DES POTENTIELS CONSTANTS PAR MORCEAUX**

Dans ce chapitre, nous étudions une particule quantique en interaction avec un système physique dans un référentiel  $\mathcal{R}$ , contrairement au cas de la particule libre. Cette interaction est modélisée par une énergie potentielle (ou potentiel par abus de langage), supposée stationnaire  $V(x)$ .

L'évolution de la fonction d'onde d'une telle particule est régie par l'équation de Schrödinger :

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

L'énergie potentielle  $V(x)$  de la particule étant indépendante du temps, des solutions de cette équation sont à rechercher sous la forme d'état stationnaire  $\psi(x, t) = \varphi(x)e^{-i(E/\hbar)t}$  par la résolution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps :

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

La résolution de cette équation dans des régions où l'énergie potentielle est constante permet de trouver les fonctions d'onde propres  $\varphi(x)$  dans chacune de ces régions. On « raccorde » ensuite ces fonctions en imposant la continuité de  $\varphi(x)$  et de sa dérivée  $\frac{d\varphi(x)}{dx}$  aux points où  $V(x)$  est discontinue.

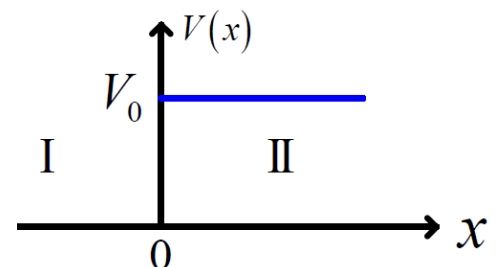
### **1. Etats stationnaires d'une particule dans le cas d'une marche de potentiel**

Une marche de potentielle modélise une particule "incidente" de masse  $m$ , d'énergie  $E$  venant d'une région des  $x$  négatifs et se dirigeant vers une région des  $x$  positifs et qui est soumise à une énergie potentielle présentant une discontinuité en  $x = 0$  (interface où l'énergie potentielle prend deux valeurs constantes différentes) telle que :

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{pour } x < 0 \text{ (région I)} \\ V_0 & \text{pour } x > 0 \text{ (région II)} \end{cases} \text{ avec } V_0 > 0$$

Marche de potentiel de hauteur  $V_0$ .

Nous devons considérer deux cas :  $E > V_0$  et  $E < V_0$ .



➤ **Exemples physiques pratiques**

Les électrons de conduction dans un métal constituent un gaz de particules quantiques libres, à ceci près que l'énergie cinétique d'un électron est insuffisante pour lui permettre de s'extraire du métal. Seul un apport d'énergie extérieur permet d'arracher un électron au métal (c'est ce que montre l'effet photoélectrique). Il existe donc au voisinage de la surface du métal une interaction qui s'oppose à la sortie des électrons. Cette interaction peut être modélisée par une marche de potentiel.

On peut aussi citer le cas de la surface de contact entre deux métaux qui seraient portés à des potentiels électriques différents (ou entre une région métallique et le vide).

➤ **Cas de la mécanique classique**

La situation est assez simple : une particule arrivant sur la marche de potentiel avec une énergie  $E$  inférieure à la hauteur de la marche ( $E < V_0$ ) est forcément réfléchi et fait demi-tour sans avoir la possibilité de passer du côté  $x > 0$  (réflexion totale). Si son énergie  $E$  est supérieure à la hauteur de la marche de potentiel ( $E > V_0$ ), alors elle poursuit son mouvement (transmission totale), avec une énergie cinétique réduite et égale à  $E - V_0$ .

➤ **Qu'en est-il de la situation quantique ?**

## 1.1. Cas $E > V_0$ : probabilité de transmission et de réflexion

### 1.1.1. Expression des fonctions d'onde propres

La fonction d'onde propre  $\varphi(x)$ , associée à un état stationnaire d'énergie  $E$ , est solution de

l'équation  $\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x)]\varphi(x) = 0$  qui prend la forme suivante dans chacune

des deux régions :

$$\text{Région I : } \varphi''(x) + k_1^2\varphi(x) = 0 \quad \text{avec } k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$\text{Région II : } \varphi''(x) + k_2^2\varphi(x) = 0 \quad \text{avec } k_2 = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}$$

La résolution de ces équations différentielles donne les solutions mathématiques suivantes :

$$\text{Région I : } \varphi(x) = A_1 \exp(ik_1x) + B_1 \exp(-ik_1x),$$

$$\text{Région II : } \varphi(x) = A_2 \exp(ik_2x) + B_2 \exp(-ik_2x).$$

➤ **Interprétation des solutions :**

- Région I : la fonction d'onde propre apparaît sous la forme de la superposition d'une onde plane progressant dans le sens des  $x$  croissants (terme  $A_1 \exp(ik_1x)$ ) qui représente *l'onde incidente*, et d'une onde plane progressant dans le sens des  $x$  décroissants (terme  $B_1 \exp(-ik_1x)$ ) qui représente *l'onde réfléchi*.

- Région II : la fonction d'onde propre apparaît également sous la forme d'une superposition de deux ondes planes progressives : le terme  $A_2 \exp(ik_2x)$  correspond à **l'onde transmise** et le terme  $B_2 \exp(-ik_2x)$  à une onde réfléchi.

➤ **Détermination des constantes**

On prend  $B_2 = 0$  car aucune source du côté positif n'émet des particules quantiques vers les  $x$  décroissants.

Le potentiel  $V(x)$  présentant une discontinuité d'amplitude finie en  $x = 0$ , la fonction d'onde propre doit être continue en  $x = 0$  ainsi que sa dérivée première.

- Continuité de  $\varphi(x)$  en  $x = 0 \Rightarrow A_1 + B_1 = A_2$
- Continuité de  $\varphi'(x)$  en  $x = 0 \Rightarrow k_1(A_1 - B_1) = k_2A_2$

En choisissant d'exprimer  $B_1$  et  $A_2$  en fonction de  $A_1$ . On obtient :

$$B_1 = A_1 \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \quad \text{et} \quad A_2 = A_1 \frac{2k_1}{k_1 + k_2}$$

Ces expressions sont valables quelles que soient les valeurs de  $k_1$  et  $k_2$ , dès lors que  $E > V_0$ . Toutes les valeurs de  $E$  pour lesquelles  $E > V_0$  sont alors possibles et donnent une solution physiquement acceptable. Il n'y a donc pas de quantification de l'énergie  $E$  de la particule quantique.

### 1.1.2. Probabilité de réflexion et de transmission

Les expressions des fonctions d'onde de la particule quantique dans chaque région sont :

$$\text{Région I :} \quad \psi(x, t) = A_1 \left( \exp(ik_1x) + \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \exp(-ik_1x) \right) \exp\left(-i \frac{E}{\hbar} t\right)$$

$$\text{Région II :} \quad \psi(x, t) = A_1 \frac{2k_1}{k_1 + k_2} \exp\left(i \left( k_2x - \frac{E}{\hbar} t \right)\right)$$

On en déduit alors l'expression des vecteurs densité de courant de probabilité ( $\vec{J} = |\psi|^2 \frac{\hbar \vec{k}}{m}$ ) correspondant aux ondes incidentes, réfléchies et transmises :

$$\text{Onde incidente :} \quad \vec{J}_i(x) = |A_1|^2 \frac{\hbar k_1}{m} \vec{u}_x$$

$$\text{Onde réfléchi :} \quad \vec{J}_r(x) = |A_1|^2 \left( \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2 \frac{\hbar k_1}{m} \vec{u}_x$$

$$\text{Onde transmise :} \quad \vec{J}_t(x) = |A_1|^2 \left( \frac{2k_1}{k_1 + k_2} \right)^2 \frac{\hbar k_2}{m} \vec{u}_x$$

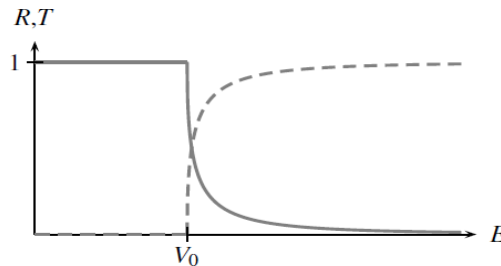
On peut alors définir et exprimer les coefficients de probabilités de réflexion  $R$  et de transmission  $T$  :

$$R = \frac{\|\vec{J}_r(x)\|}{\|\vec{J}_i(x)\|} = \left( \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2 \quad \text{et} \quad T = \frac{\|\vec{J}_t(x)\|}{\|\vec{J}_i(x)\|} = \frac{4k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2}$$

En remplaçant  $k_1$  et  $k_2$  par leurs valeurs en fonction de  $E$  et  $V_0$ , il vient :

$$R = \left( \frac{1 - \sqrt{1 - V_0/E}}{1 + \sqrt{1 - V_0/E}} \right)^2 \quad \text{et} \quad T = \frac{4\sqrt{1 - V_0/E}}{(1 + \sqrt{1 - V_0/E})^2}$$

Le graphe représentant les variations de  $R$  (en trait plein) et de  $T$  (en tirets) en fonction de  $E$  (pour toutes les valeurs de  $E$ , voir section suivante pour le cas  $E < V_0$ ) est donné ci-dessous.

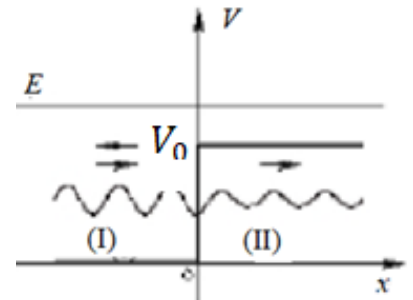


- La probabilité de réflexion  $R$  n'est jamais nulle : Il y a toujours une possible réflexion de la particule quantique incidente. Une particule quantique incidente sur une marche de potentiel est donc partiellement réfléchi sans déphasage contrairement au cas classique. C'est donc un effet purement quantique.

- On peut vérifier que :

$$R + T = 1$$

Cette relation qui est un résultat général et qui exprime une conservation du flux incident de particules quantiques traduit le fait certain que la particule quantique incidente est soit réfléchi, soit transmise sans autres possibilités.



- Dans la limite où  $E \gg V_0$ , on obtient  $R \rightarrow 0$  et  $T \rightarrow 1$ . On retrouve alors la transmission totale prévue par la mécanique classique.

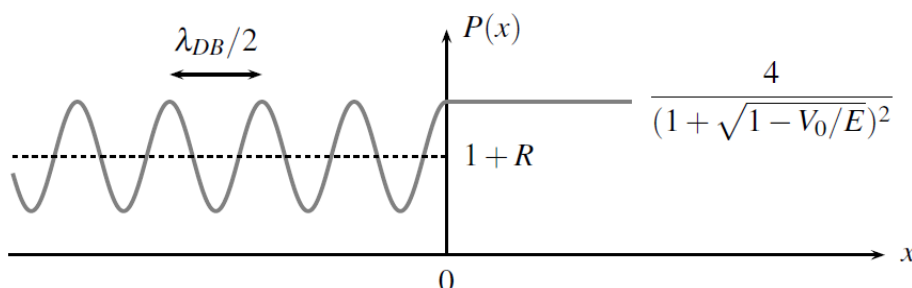
### 1.1.2. Densité de probabilité de présence

La densité de probabilité de présence  $P(x) = |\psi(x, t)|^2$  s'écrit dans les deux régions :

Région I :  $P(x) = |A_1|^2 (1 + R + 2\sqrt{R}\cos(2k_1x)) \Rightarrow P(x) = 1 + R + 2\sqrt{R}\cos(2k_1x)$  si on fixe  $A_1 = 1$

Région II :  $P(x) = \frac{4|A_1|^2}{(1 + \sqrt{1 - V_0/E})^2} \Rightarrow P(x) = \frac{4}{(1 + \sqrt{1 - V_0/E})^2}$  si on fixe  $A_1 = 1$

Le graphe de  $P(x)$  en fonction de  $x$  est représenté ci-dessous.



- Du côté  $x < 0$ , les oscillations de la densité de probabilité de présence résultent de l'interférence entre l'onde incidente et l'onde réfléchi. Cet effet est purement quantique.

La distance entre deux maxima consécutifs de  $P(x)$  est égale à  $\lambda_{DB}/2$ , où  $\lambda_{DB} = 2\pi/k_1 = h/\sqrt{2mE}$  est la longueur d'onde de de Broglie de la particule quantique incidente.

- La particule quantique n'est pas confinée dans une région de l'espace et la densité de probabilité de présence s'étend à l'infini : on dit que la particule est dans un état de diffusion ou un état non lié ou état libre. De tels états sont associés à des spectres continus d'énergie (pas de quantification) et la fonction d'onde n'est en général pas normalisable.

### Remarque

Lorsque  $E$  est très proche de  $V_0$ ,  $k_2 \rightarrow 0$  et  $R \rightarrow 1 \Rightarrow P(x) \simeq 2(1 + \cos(2k_1x))$ : dans la région I, les oscillations dans la partie  $x < 0$  présentent des points de probabilité de présence nulle espacés de  $\pi/k_1$ .

## 1.2. Cas $E < V_0$ : évanescence

### 1.2.1. Expression des fonctions d'onde propres

La résolution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps dans chacune des deux régions :

$$\text{Région I : } \varphi''(x) + k^2\varphi(x) = 0 \quad \text{avec } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$\text{Région II : } \varphi''(x) - q^2\varphi(x) = 0 \quad \text{avec } q = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

fournit la fonction d'onde propre dans ces régions :

$$\text{Région I : } \varphi(x) = A_1 \exp(ikx) + B_1 \exp(-ikx),$$

$$\text{Région II : } \varphi(x) = A_2 \exp(-qx) + B_2 \exp(qx).$$

#### ➤ Interprétation des solutions et détermination des constantes

- Région I : comme dans le cas précédent, la fonction d'onde propre apparaît sous la forme de la superposition d'une onde plane progressant incidente dans le sens des  $x$  croissants et d'une onde plane progressant réfléchi dans le sens des  $x$  décroissants.

- Région II : la fonction d'onde propre n'est physiquement acceptable que si elle ne diverge pas lorsque  $x \rightarrow +\infty$ . Cela impose  $B_2 = 0$ . On remarque alors que l'expression de la fonction d'onde dans la région II peut être déduite de celle du cas précédent en y remplaçant  $k_2$  par  $iq$ .

La continuité de  $\varphi(x)$  et de  $\varphi'(x)$  en  $x = 0$  permet ainsi d'obtenir :

$$B_1 = A_1 \frac{k - iq}{k + iq} \quad \text{et} \quad A_2 = A_1 \frac{2k}{k_1 + iq}$$

### Remarque

Dans le cas où  $E = 0$ ,  $k = 0$  d'où  $A_2 = 0$  et  $B_1 = -A_1$ . La fonction d'onde propre est donc nulle. La

situation où l'énergie cinétique de la particule incidente est nulle n'a donc aucun intérêt physique.

### 1.2.3. Densité de probabilité de présence

La fonction d'onde  $\psi(x, t)$  de la particule quantique dans chacune des deux régions s'écrit :

$$\text{Région I : } \quad \psi(x, t) = A_1 \left( \exp(ikx) + \frac{k - iq}{k + iq} \exp(-ikx) \right) \exp\left(-i \frac{E}{\hbar} t\right)$$

$$\text{Région II : } \quad \psi(x, t) = A_1 \frac{2k}{k_1 + iq} \exp(-qx) \exp\left(-i \frac{E}{\hbar} t\right)$$

Remarquons que  $\left| \frac{k - iq}{k + iq} \right| = 1$ , on peut donc écrire  $\frac{k - iq}{k + iq} = \exp(-i\theta)$  avec

$$\theta = 2 \arctan\left(\frac{q}{k}\right) = 2 \sqrt{\frac{V_0}{E} - 1} \quad \text{et} \quad 0 \leq \theta \leq \pi. \quad \text{D'où :}$$

$$\text{Région I : } \quad \psi(x, t) = A_1 \left( \exp(ikx) + \exp(-i(kx + \theta)) \right) \exp\left(-i \frac{E}{\hbar} t\right)$$

$$\text{Région II : } \quad \psi(x, t) = A_1 \frac{2k}{k_1 + iq} \exp(-qx) \exp\left(-i \frac{E}{\hbar} t\right)$$

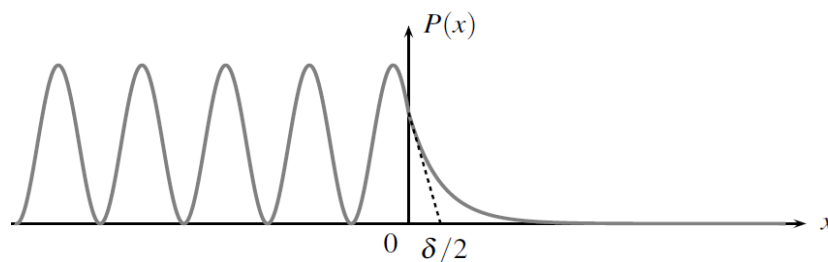
La densité de probabilité de présence  $P(x) = |\psi(x)|^2$  dans les deux régions s'en déduit :

$$\text{Région I : } \quad P(x) = |A_1|^2 (2 + 2 \cos(2kx + \theta)) \Rightarrow P(x) = 2 + 2 \cos(2kx + \theta) \quad \text{si } A_1 = 1$$

$$\text{Région II : } \quad P(x) = \frac{4k^2}{k^2 + q^2} |A_1|^2 \exp(-2qx) = \frac{4E}{V_0} |A_1|^2 \exp(-2qx)$$

$$\Rightarrow P(x) = \frac{4E}{V_0} \exp(-2qx) \quad \text{si } A_1 = 1$$

La représentation de la probabilité de présence en fonction de  $x$  est la suivante :



#### Interprétation

Dans la région I, on observe le phénomène d'interférence quantique déjà évoqué.

Dans la région II qui est une région interdite au sens de la mécanique classique, la fonction d'onde de par son expression, ne correspond pas à une onde plane progressive mais à une **onde évanescence** (onde stationnaire atténuée qui s'efface peu à peu). La densité de probabilité de présence de la particule quantique n'est pas nulle et s'étend sur une distance caractéristique  $\delta/2$ .

Ainsi en mécanique quantique, la particule d'énergie  $E < V_0$  pénètre dans la zone interdite par la

mécanique classique sous forme d'onde évanescente dont la portée, de l'ordre de  $\delta$  appelée **profondeur de pénétration** est :

$$\delta = \frac{1}{q} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}$$

### Remarques

- $\delta$  est proportionnelle à  $\hbar$ , l'effet étudié ici étant purement quantique.
- La profondeur de pénétration  $\delta$  est d'autant plus grande que l'énergie  $E$  de la particule quantique est proche de  $V_0$  et d'autant plus faible que la masse  $m$  de la particule quantique est élevée : les effets quantiques sont toujours plus marqués pour les particules quantiques de faible masse.  $\delta$  est également d'autant plus faible que la barrière est haute : elle devient infranchissable, cas classique.
- L'atténuation de la densité de probabilité de présence dans la région II est tout à fait analogue à l'effet de peau étudié en électromagnétisme.

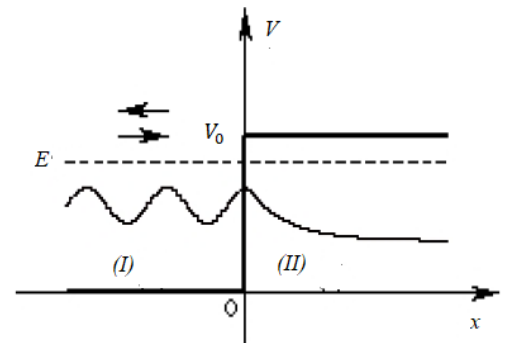
### 1.2.4. Probabilités de réflexion et de transmission

Dans la région I les ondes incidente et réfléchi étant des ondes planes progressives, le calcul de la probabilité de réflexion se fait comme précédemment :

$$R = \frac{\|\vec{J}_r\|}{\|\vec{J}_i\|} = \left| \frac{k - iq}{k + iq} \right|^2 = 1. \quad \text{D'où une réflexion totale.}$$

Par contre le calcul de la probabilité de transmission se faire en utilisant la relation  $R + T = 1$  (on ne peut pas utiliser les courants de probabilité puisque dans la région II l'onde transmise n'est pas une onde plane progressive) et donne  $T = 0$ .

La particule quantique est donc forcément réfléchi par la marche de potentiel. Le fait qu'elle puisse néanmoins pénétrer à l'intérieur de la marche de potentiel avant d'en ressortir explique la présence du retard de phase  $\theta$  dans l'expression de la fonction d'onde propre de l'onde réfléchi.



## 1.3. Résumé

Les principaux résultats pour la marche de potentiel sont résumés dans le tableau suivant :

Cas	$E > V_0$	$E < V_0$
Classique	Transmission totale	Réflexion totale
Quantique	Réflexion et transmission partielle	Réflexion mais onde évanescente dans la région interdite (par le cas classique)
Passage quantique-classique	Si $E \gg V_0$ , $R \rightarrow 0$ et $T \rightarrow 1$	Si $V_0 \rightarrow \infty$ , plus d'onde évanescente.

## 2. Barrière de potentiel et effet tunnel

Une barrière de potentiel est une marche de potentiel d'extension limitée. Soit une particule quantique d'énergie  $E$ , provenant de  $x \rightarrow -\infty$  et se dirigeant vers une barrière de potentiel modélisée par une énergie potentielle discontinue aux deux points d'abscisse  $x = 0$  et  $x = a$  et décrite par :

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

Barrière de potentiel, de largeur  $a$  et de hauteur  $V_0$ .

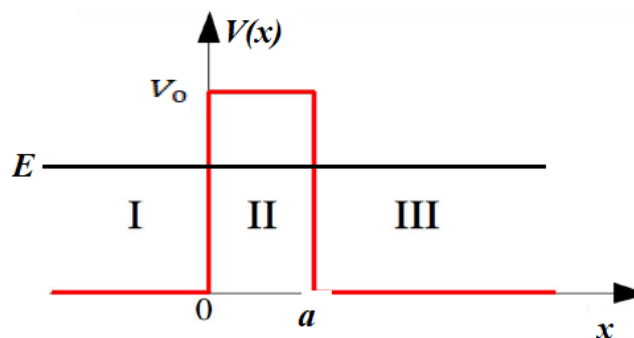
### ➤ Point de vue de la mécanique classique

Une particule classique incidente d'énergie  $E$  supérieure à  $V_0$  peut aller au-delà de la barrière de potentiel et atteindre  $x \rightarrow +\infty$ . Dans le cas inverse (pour  $E < V_0$ ), elle ne peut pas aller au-delà de  $x = 0$  et rebrousse chemin.

### ➤ Quel est le comportement prévu par la théorie quantique ?

Pour le cas  $E > V_0$ , à traiter par les étudiants, l'onde harmonique incidente donne naissance en  $x = 0$  à une onde harmonique réfléchie dans la région I et une onde transmise évanescence dans la région II qui à son tour, en  $x = a$ , se réfléchit partiellement et est partiellement transmise en onde harmonique dans la région III. Cette transmission étant optimale lorsqu'il s'établit dans la région II une onde stationnaire.

- ❖ L'étude de la barrière de potentielle se limitera ici au cas où l'énergie  $E$  de la particule quantique est inférieure à  $V_0$  :  $E < V_0$



### 2.1. Expression de la fonction d'onde propre

L'équation de Schrödinger indépendante du temps dans les différentes régions du potentiel s'écrit :

$$\text{Région I et III : } \varphi''(x) + k^2\varphi(x) = 0 \quad \text{avec } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$\text{Région II : } \varphi''(x) - q^2\varphi(x) = 0 \quad \text{avec } q = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

Les solutions stationnaires physiquement acceptables de ces équations en supposant qu'il n'existe, dans



la région III, aucune source émettant des particules quantiques vers la barrière, sont les suivantes :

$$\text{Région I : } \varphi(x) = A_1 \exp(ikx) + B_1 \exp(-ikx),$$

$$\text{Région II : } \varphi(x) = A_2 \exp(qx) + B_2 \exp(-qx).$$

$$\text{Région III : } \varphi(x) = A_3 \exp(ikx)$$

➤ **Interprétation des solutions et détermination des constantes**

- Région I : la fonction d'onde propre est la somme d'une onde plane harmonique progressant dans le sens des  $x$  croissants (onde incidente) et d'une onde plane harmonique progressant dans le sens des  $x$  décroissants (onde réfléchie).

- Région III : la fonction d'onde propre est une onde plane progressant dans le sens des  $x$  croissants : onde transmise.

- Région II : la fonction d'onde peut être écrite sous la forme d'une superposition de deux ondes évanescentes.

Le potentiel  $V(x)$  présente des discontinuités d'amplitude finie en  $x = 0$  et en  $x = a$ , d'où :

- Continuité de  $\varphi(x)$  en  $x = 0$  :  $A_1 + B_1 = A_2 + B_2$  (1)

- Continuité de  $\varphi(x)$  en  $x = a$  :  $A_3 \exp(ika) = A_2 \exp(qa) + B_2 \exp(-qa)$  (2)

- Continuité de  $\varphi'(x)$  en  $x = 0$  :  $ik(A_1 - B_1) = q(A_2 - B_2)$  (3)

- Continuité de  $\varphi'(x)$  en  $x = a$  :  $ikA_3 \exp(ika) = q(A_2 \exp(qa) + B_2 \exp(-qa))$  (4).

Exprimons toutes les autres constantes en fonction de  $A_3$  :

$$(2) \text{ et } (4) \Rightarrow \frac{A_2}{A_3} = \left( \frac{q + ik}{2q} \right) \exp((-q + ik)a) \text{ et } \frac{B_2}{A_3} = \left( \frac{q - ik}{2q} \right) \exp((q + ik)a)$$

En injectant ensuite ces relations dans (1) et (3), il vient :

$$\frac{A_1}{A_3} = \frac{1}{2ikq} \left( 2ikq \left( \frac{\exp(qa) + \exp(-qa)}{2} \right) + (k^2 - q^2) \left( \frac{\exp(qa) - \exp(-qa)}{2} \right) \right) \exp(ika)$$

$$\text{Soit } \frac{A_1}{A_3} = \left( ch(qa) - i \frac{k^2 - q^2}{2kq} sh(qa) \right) \exp(ika)$$

$$\frac{B_1}{A_3} = \frac{1}{2ikq} (k^2 + q^2) \left( \frac{\exp(qa) - \exp(-qa)}{2} \right) \exp(ika)$$

$$\text{Soit } \frac{B_1}{A_3} = -i \frac{k^2 + q^2}{2kq} sh(qa) \exp(ika)$$

Expressions valables quelles que soient les valeurs de  $k$  et  $q$ . Il n'y a donc pas de quantification de l'énergie. La particule quantique n'est pas confinée, elle est dans un état de diffusion.

## 2.2. Probabilités de réflexion et de transmission. Effet tunnel

Les expressions des fonctions d'onde des ondes incidente, réfléchi et transmise, en posant  $\omega = E/\hbar$  sont les suivantes :

$$\text{Onde incidente : } \psi_i(x, t) = A_1 \exp(i(kx - \omega t))$$

$$\text{Onde réfléchi : } \psi_r(x, t) = B_1 \exp(-i(kx + \omega t))$$

$$\text{Onde transmise : } \psi_t(x, t) = A_3 \exp(i(kx - \omega t))$$

Les vecteurs densité de courant de probabilité s'en déduisent :

$$\vec{J}_i = |\psi_i(x, t)|^2 \frac{\hbar \vec{k}}{m} = |A_1|^2 \frac{\hbar \vec{k}}{m}$$

$$\vec{J}_r = -|\psi_r(x, t)|^2 \frac{\hbar \vec{k}}{m} = -|B_1|^2 \frac{\hbar \vec{k}}{m}$$

$$\vec{J}_t = |\psi_t(x, t)|^2 \frac{\hbar \vec{k}}{m} = |A_3|^2 \frac{\hbar \vec{k}}{m}$$

On obtient alors les probabilités de réflexion et de transmission :

$$R = \frac{\|\vec{J}_r(x)\|}{\|\vec{J}_i(x)\|} = \left| \frac{B_1}{A_1} \right|^2 \quad \text{et} \quad T = \frac{\|\vec{J}_t(x)\|}{\|\vec{J}_i(x)\|} = \left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2$$

Les expressions des rapports  $\frac{B_1}{A_1}$  et  $\frac{A_3}{A_1}$  en fonction de  $k$ ,  $q$  et  $a$  permettent finalement d'obtenir les résultats suivants :

$$R = \frac{1}{1 + \frac{4k^2 q^2}{(k^2 + q^2)^2} \cdot \frac{1}{sh^2(qa)}} \quad \text{et} \quad T = \frac{1}{1 + \frac{(k^2 + q^2)^2}{4k^2 q^2} sh^2(qa)}$$

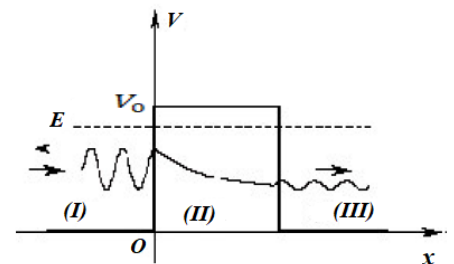
En remplaçant  $k$  et  $q$  par leurs valeurs en fonction de  $E$  et  $V_0$ , il vient :

$$R = \frac{1}{1 + \frac{4E(V_0 - E)}{V_0^2} \cdot \frac{1}{sh^2\left(\frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} a\right)}} \quad \text{et} \quad T = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} sh^2\left(\frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} a\right)}$$

### ➤ Conclusion :

- On vérifie bien que  $R + T = 1$ . Ce résultat, comme nous l'avons déjà signifié, exprime la conservation de la probabilité de présence : une particule quantique est soit réfléchi par la barrière, soit transmise, sans autre possibilité.

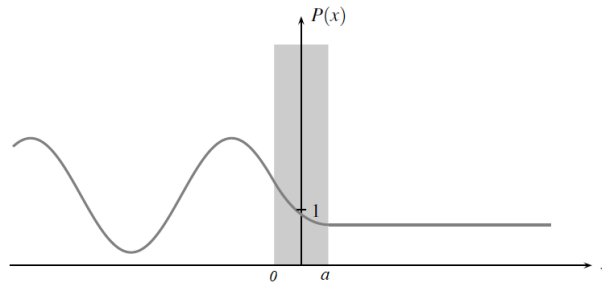
- La probabilité de transmission  $T$  n'est jamais nulle : une particule quantique incidente d'énergie  $E$  arrivant sur une barrière de potentiel de largeur  $a$  et de hauteur  $V_0 > E$  a donc toujours la possibilité de traverser cette barrière qui lui est classiquement interdite.



Cet effet purement quantique porte le nom d'*effet tunnel*. Il est dû à l'existence d'ondes évanescentes dans la barrière de potentiel.

### 2.3. Densité de probabilité de présence

On peut exprimer tous les coefficients en fonction de  $A_1$  et déterminer la fonction d'onde propre puis la densité de probabilité de présence  $P(x) = |\psi(x, t)|^2$  représentée sur la figure ci-dessous :



**Région I :** 
$$P(x) = |A_1|^2 (1 + R + 2\sqrt{R} \cos(2kx - \theta))$$
  

$$\Rightarrow P(x) = 1 + R + 2\sqrt{R} \cos(2kx - \theta) \text{ si on choisit } A_1 = 1$$

où  $\theta$  désigne l'argument du rapport  $B_1/A_1$ . La densité de probabilité n'est pas uniforme à cause du phénomène d'interférences quantique de l'onde incidente et de l'onde réfléchie, déjà évoqué lors de l'étude de la marche de potentiel. La distance séparant deux maxima ou deux minima consécutifs de  $P(x)$  est  $\lambda_{dB}/2$  où  $\lambda_{dB} = 2\pi/k$  est la longueur d'onde de de Broglie de la particule quantique (déterminée par l'énergie cinétique  $E$  de la particule quantique incidente).

**Région II :** la densité de probabilité de présence décroît à l'intérieur de la barrière de potentiel sur une distance caractéristique d'évanescence égale à :

$$\delta = \frac{1}{q} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}.$$

A la sortie de la barrière de potentiel la densité de probabilité de présence n'est pas nulle.

**Région III :** la densité de probabilité de présence est uniforme et égale à  $T$ .

### 2.4. Approximation de la barrière haute et épaisse

Lorsque  $qa \gg 1$  c'est-à-dire  $a \gg \delta$  soit  $a \gg \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}$  (barrière épaisse)  $\Rightarrow E \ll V_0$  (barrière très haute), l'expression de  $T$  peut être simplifiée :

En effet  $sh(qa) \approx \frac{e^{qa}}{2}$  et 1 est négligeable devant le terme  $\frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} sh^2(qa)$  d'où :

$$T \approx \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} \exp\left(-\frac{2a}{\delta}\right)$$

Ainsi même pour des barrières de potentiel très hautes et très épaisses, la probabilité de transmission  $T$  reste différente de zéro. La particule a donc une probabilité non nulle de franchir la barrière de potentiel. C'est ce qui caractérise l'effet tunnel. Cependant  $T$  diminue quand la hauteur énergétique  $V_0$  de la barrière augmente.

Pour  $E$  variant de 0 à  $V_0$ , le préfacteur  $f\left(\frac{E}{V_0}\right) = 16 \frac{E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0}\right)$  s'annule pour  $\frac{E}{V_0} = 0$  ou 1 et

a une valeur moyenne proche de 3. La probabilité de transmission  $T$  à travers la barrière évolue en exponentielle décroissante avec la largeur de barrière pour  $a$  supérieur à quelques  $\delta$  :

$$T \approx f\left(\frac{E}{V_0}\right) \exp\left(-\frac{2a}{\delta}\right)$$

avec  $f\left(\frac{E}{V_0}\right)$  un facteur de moyenne de l'ordre de 3 dépendant de  $E/V_0$ .

#### ❖ Quelques données numériques

Pour une barrière de hauteur  $V_0 = 4 \text{ eV}$ .

Particule	$m$ (kg)	$a$ (nm)	$\delta$ (nm)	$T$
Electron	$10^{-30}$	0,3	0,1	$10^{-2}$
Electron		3	0,1	$10^{-20}$
Proton	$10^{-27}$	0,3	$4 \cdot 10^{-3}$	$10^{-63}$
Proton		3	$2 \cdot 10^{-3}$	$10^{-628}$

## 2.5. Interprétation qualitative de l'effet tunnel

Une interprétation qualitative de l'effet tunnel peut être donné en utilisant la relation d'indétermination temporelle  $\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$ . Une particule quantique étant représentée par un paquet d'ondes dont l'état est non stationnaire, a une énergie  $E$  qui peut fluctuer autour d'une valeur moyenne. Supposons que  $E + \Delta E \geq V_0$  ( $\Delta E$ : fluctuation de l'énergie) ; la particule quantique peut passer au-dessus de la barrière avec une vitesse de l'ordre de :

$$v = \sqrt{\frac{2(E + \Delta E - V_0)}{m}}$$

L'indétermination temporelle vaut :  $\Delta t \geq \frac{\hbar}{2\Delta E}$

La particule quantique parcourt, pendant cette durée, la longueur :

$$\ell = v\Delta t = \sqrt{\frac{2(E + \Delta E - V_0)}{m}} \frac{\hbar}{2\Delta E}$$

Cette longueur est maximale pour  $\Delta E = 2(V_0 - E)$  et vaut :

$$\ell_{max} = \frac{\hbar}{2\sqrt{2m(V_0 - E)}} \approx \delta$$

On retrouve ainsi, à un facteur numérique près, la profondeur de pénétration de la fonction d'onde dans la barrière de potentiel.

## 2.6. Applications de l'effet tunnel

L'effet tunnel est une réalité physique qui intervient dans l'interprétation de nombreux phénomènes : radioactivité  $\alpha$ , microscope à effet tunnel, etc. les deux exemples cités sont abordés ici.

### 2.6.1. La radioactivité $\alpha$

La radioactivité résulte de l'instabilité d'un noyau atomique qui se désintègre. Une particule  $\alpha$  est un noyau d'hélium  ${}^4_2\text{He}$  composé de deux protons et deux neutrons. La Radioactivité  $\alpha$  correspond à l'émission, par un noyau instable, d'une particule  $\alpha$  qui permet aux noyaux lourds ( ${}^A_Z\text{X}$ ), contenant un nombre  $Z$  important de protons, de diminuer la répulsion électrostatique des protons et ainsi d'emporter deux protons suivant la réaction :  ${}^A_Z\text{X} \rightarrow {}^{A-4}_{Z-2}\text{Y} + {}^4_2\text{He}$ .

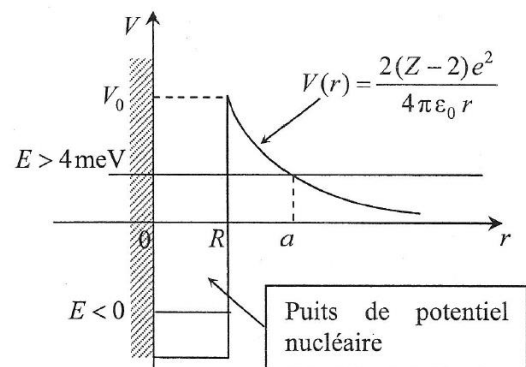
La particule  $\alpha$  dont la masse est  $m = 6,4 \cdot 10^{-27}$  kg et de charge  $2e$  existe dans le noyau de rayon  $R$  où elle est confinée par interaction forte bien plus attractive que la répulsion électrostatique.

L'émission  $\alpha$  est due au franchissement de la barrière de potentiel nucléaire d'une particule  $\alpha$  par effet tunnel. Les particules  $\alpha$  sont émises avec des énergies  $E$  comprises entre 4 et 9 meV. La particule fait des allers-retours dans le noyau, assimilé à un demi-puits de potentiel de hauteur  $V_0$  de l'ordre de quelques dizaines de meV. Pour  $r > R$  la particule est soumise à un potentiel répulsif lié à la force coulombienne répulsive électrostatique entre la charge  $2e$  de la particule  $\alpha$  et celle  $(Z - 2)e$  du reste du noyau :

$$V(r) = \frac{2(Z - 2)e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Potentiel à une dimension représenté à la figure ci-contre.

Pour  $E < 4$  meV, la barrière est tellement épaisse que la particule  $\alpha$  ne peut la franchir par effet tunnel (elle est confinée dans le puits de potentiel nucléaire attractif et ne peut quitter le noyau) ; pas d'émission donc de particule  $\alpha$  d'énergie inférieure à 4meV. Pour  $E > 4$  meV, la particule « voit » une barrière de potentiel épaisse. Elle a une probabilité (donnée par la probabilité de transmission  $T$ ) de franchir cette barrière par effet tunnel.



Pour  $E > 4$  meV, la particule « voit » une barrière de potentiel épaisse. Elle a une probabilité (donnée par la probabilité de transmission  $T$ ) de franchir cette barrière par effet tunnel.

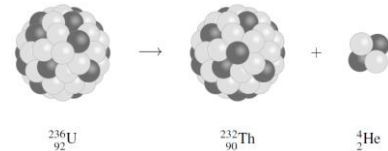
L'épaisseur de la barrière est  $a - R$  où  $a$  est tel que  $E = V(a) = \frac{2(Z-2)e^2}{4\pi\epsilon_0 a} \Rightarrow a = \frac{2(Z-2)e^2}{4\pi\epsilon_0 E}$ .

La probabilité de transmission  $T$  se calcule selon le modèle de Garmov par la formule :

$$T \approx \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_R^a \sqrt{2m(V(r) - E)}\right)$$

Le calcul donne :  $T \approx \exp\left(-\frac{\pi R V_m}{\hbar} \sqrt{\frac{2m}{E} + \frac{2R}{\hbar} \sqrt{m V_m}}\right)$  avec  $V_m = V(R) = \frac{2(z-2)e^2}{4\pi\epsilon_0 R}$

Par exemple pour l'Uranium 236 :  ${}^{236}_{92}\text{U}$ , dont le mode de désintégration est schématisé ci-contre, les données numériques et le calcul fournissent  $T \approx 2 \cdot 10^{-39}$ .

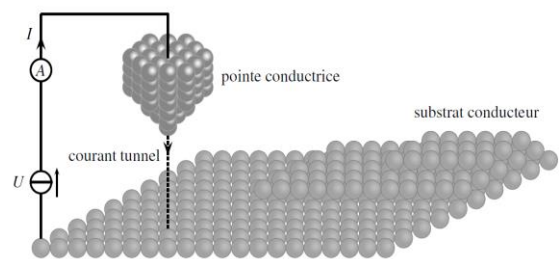


Le lien entre  $T$  et la constante radioactive  $\lambda$ , liée à la période radioactive (ou demi-vie)  $\tau_{1/2}$  par  $\tau_{1/2} = \ln 2 / \lambda$  est tel que  $\lambda = T / \tau_0$  où  $\tau_0$  est la durée de traversé du noyau. La vitesse de la particule dans le puits est de l'ordre de  $10^7 \text{ m.s}^{-1}$ , elle effectue donc chaque seconde de l'ordre de  $10^{21}$  allers-retours dans le noyau dont le rayon  $R$  est de l'ordre de  $10^{-14} \text{ m}$ . A chaque choc sur la paroi du puits, la probabilité d'émission de la particule  $\alpha$  correspond à la probabilité  $T$  de passage de la barrière. Ainsi la probabilité de passer la barrière par unité de temps qui n'est autre que  $\lambda$  est donnée par  $\lambda \approx 10^{21} \times T \approx 2 \cdot 10^{-18} \text{ s}^{-1}$ .

Expérimentalement la loi de désintégration radioactive  $N(t) = N_0 \exp(-\lambda t)$ , où  $N(t)$  est le nombre d'atomes restant à  $t$  sur un nombre initial de  $N_0$  fournit  $\lambda \approx 5 \cdot 10^{-18} \text{ s}^{-1}$ . Le modèle donne donc un bon ordre de grandeur et montre bien que la radioactivité  $\alpha$  résulte d'un effet purement quantique : l'effet tunnel.

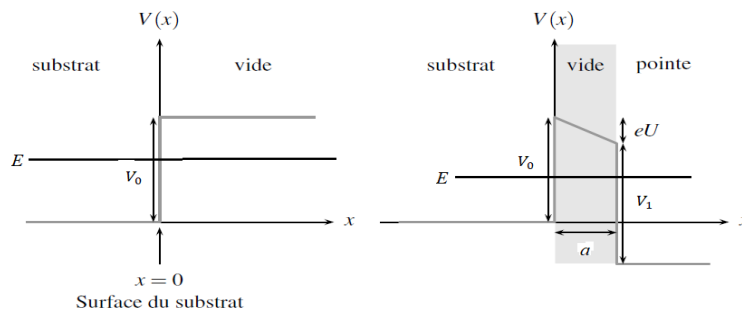
### 2.6.2. Le microscope à effet tunnel

Un microscope à effet tunnel sert à sonder diverses propriétés de la matière à l'échelle atomique. Dans ce microscope, une pointe métallique très fine, placée à proximité de la surface d'un substrat conducteur est approchée de cette surface dans le but de l'explorer comme schématisé ci-contre. L'espace vide entre la pointe du palpeur et la surface du conducteur à sonder est assimilé à une barrière de potentiel de largeur  $a$  de l'ordre de quelques angströms. En appliquant une



ddp entre la pointe et l'échantillon, les électrons à la surface la franchissent par effet tunnel faisant apparaître un courant tunnel  $I_{tun}$  dont la mesure permet de cartographier la surface du conducteur.

Son principe de fonctionnement est basé sur le fait que les électrons de conduction contenus dans le substrat métallique dont la surface est exposée au vide, « voient » un profil d'énergie potentielle qui peut être modélisé par une marche de potentiel dont la hauteur  $V_0$ , appelée travail d'extraction du métal, représente l'énergie minimale à fournir pour extraire les électrons du métal.



Lorsqu'on approche un second conducteur (la pointe) à proximité du premier (le substrat sondé), et qu'on applique une différence de potentiel électrique  $U$  entre les deux conducteurs, il apparaît une barrière de potentiel que les électrons du substrat peuvent franchir par effet tunnel. Il en résulte un flux d'électrons entre le substrat et la pointe, c'est-à-dire un courant électrique, appelé courant tunnel. Son intensité est proportionnelle à la probabilité de transmission  $T$  d'un électron à travers la barrière dont on peut rappeler l'expression approchée :

$$T \approx \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} \exp\left(-\frac{2a}{\delta}\right) \text{ pour } a \gg \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}} = \delta$$

où  $E$  est l'énergie des électrons qui franchissent la barrière.

Le courant tunnel a donc pour expression approchée :

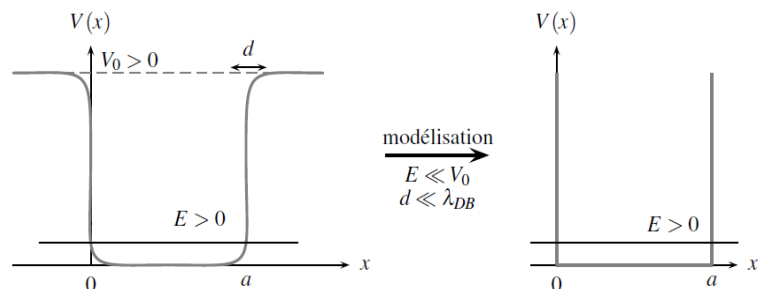
$$I_{tun} = I_0 \exp\left(-\frac{2a}{\delta}\right)$$

où le préfacteur  $I_0$  dépend, entre autres paramètres, de la dpp appliquée  $U$ . Compte tenu de l'ordre de grandeur de  $\delta$ , on comprend qu'il est nécessaire d'approcher la pointe à des distances inférieures au nanomètre si l'on veut récupérer un courant tunnel mesurable.

### 3. Etats stationnaires d'une particule dans un puits de potentiel infini

Nous étudions dans cette section le cas où la particule quantique est piégée dans un volume délimité par la modélisation d'un puits de potentiel infiniment profond, en se limitant à une approche unidimensionnelle. L'énergie de la particule  $E$  est alors très inférieure à la profondeur réelle du puits  $V_0$  et l'énergie potentielle peut être définie par :

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





### 3.1. Fonction d'onde propre et niveaux d'énergie

#### 3.1.1. Expression de la fonction d'onde propre

Pour  $V(x) \rightarrow +\infty$ , l'équation de Schrödinger indépendante du temps impose nécessairement  $\varphi(x) = 0$ . Les régions de l'espace où le potentiel est infini sont interdites à la particule quantique.

Pour  $0 \leq x \leq a$ , l'équation de Schrödinger indépendante du temps est de la forme :

$$\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \varphi(x) = 0 \quad (\text{particule libre})$$

On étudie que le cas  $E > 0$  car les cas des énergies négatives ou nulles ne présentent aucun intérêt conduisant à des fonctions d'onde identiquement nulles.

La solution générale de l'équation différentielle dans ce cas est donc de la forme :

$$\varphi(x) = A\cos(kx) + B\sin(kx) \quad \text{avec } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$A$  et  $B$  sont ici des constantes réelles. Les conditions de continuité de la fonction d'onde en  $0$  et en  $a$  :  $\varphi(0) = 0$  et  $\varphi(a) = 0$  (conditions aux limites) imposent :

$$\varphi(0) = 0 \Rightarrow A = 0$$

$$\varphi(a) = 0 \Rightarrow B\sin(ka) = 0$$

Nécessairement  $B \neq 0$  sinon  $\varphi(x) = 0$ , d'où  $\sin(ka) = 0 \Rightarrow \boxed{k_n = n\frac{\pi}{a}}$  qui sont les seules valeurs permises du vecteur d'onde ( $n$  étant un nombre entier strictement positif). La fonction d'onde propre  $\varphi_n(x)$  correspondante est :

$$\varphi_n(x) = B\sin\left(n\frac{\pi}{a}x\right)$$

La particule quantique étant confinée dans le puits de potentiel, la constante  $B$  doit être déterminée par la condition de normalisation :

$$\int_0^a |\varphi_n|^2 dx = 1 \Rightarrow B = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

La fonction d'onde propre normalisée s'écrit donc :

$$\boxed{\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(n\frac{\pi}{a}x\right), \quad n = 1, 2, 3}$$

De la relation  $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ , on obtient les valeurs possibles de l'énergie de la particule quantique :

$$\boxed{E_n = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}, \quad n = 1, 2, 3}$$

L'énergie  $E$  de la particule est donc quantifiée du fait de son confinement.



L'expression complète des fonctions d'onde obtenues est la suivante :

$$\psi_n(x, t) = \sqrt{\frac{2}{a}} \exp\left(-i \frac{E_n}{\hbar} t\right) \sin\left(n \frac{\pi}{a} x\right) \text{ avec } E_n = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}, \quad n = 1, 2, 3$$

### Remarque

- La particule quantique reste confinée dans une région finie de l'espace et son énergie est quantifiée c'est-à-dire discontinue ; on dit qu'elle se trouve dans un **état lié** (La fonction d'onde est normalisable).
- Les dérivées  $\frac{d\varphi_n}{dx}$  ne sont pas continues en  $x = 0$  et  $x = a$ , eu égard à la discontinuité d'amplitude infinie du potentiel en ces points.

### 3.1.2. Analogie avec les cordes vibrantes

Il existe une analogie formelle entre des résultats de la particule quantique confinée dans le puits unidimensionnel infini et d'autres associés à l'étude des vibrations d'une corde horizontale fixée à ses deux extrémités. Dans les deux cas, l'application des conditions aux limites conduit à la règle de quantification :

Particule quantique en puits infini 1D	Corde vibrante fixée aux extrémités
Espace accessible : $x \in [0, a]$	Abscisses des points de la corde : $x \in [0, a]$
Conditions aux limites : $\varphi_n(0) = \varphi_n(a) = 0$	Conditions aux limites : $y_n(0) = y_n(a) = 0$
Fonction d'onde propre $\varphi_n \propto \sin(n\pi x/a)$	Mode propre de vibration $y_n \propto \sin(n\pi x/a)$
Pulsation spatiale associée $k_n = n\pi/a$	Pulsation spatiale associée $k_n = n\pi/a$

Les profils des fonctions d'onde spatiales sont analogues à ceux des modes propres de vibration de la corde. Cependant, il y a des différences :

- les équations d'onde de départ ne sont pas les mêmes (équation de Schrödinger d'un côté et équation de d'Alembert de l'autre) ;
- l'énergie d'un mode propre de la corde n'est pas quantifiée contrairement au cas quantique ;
- les pulsations des états propres sont différentes ;

$$\omega_n = \frac{E_n}{\hbar} = \frac{\hbar k_n^2}{2m} \text{ pour la particule quantique}$$

$$\omega_n = k_n c_0 \text{ pour la corde. } c_0: \text{ célérité des vibrations dans le vide}$$

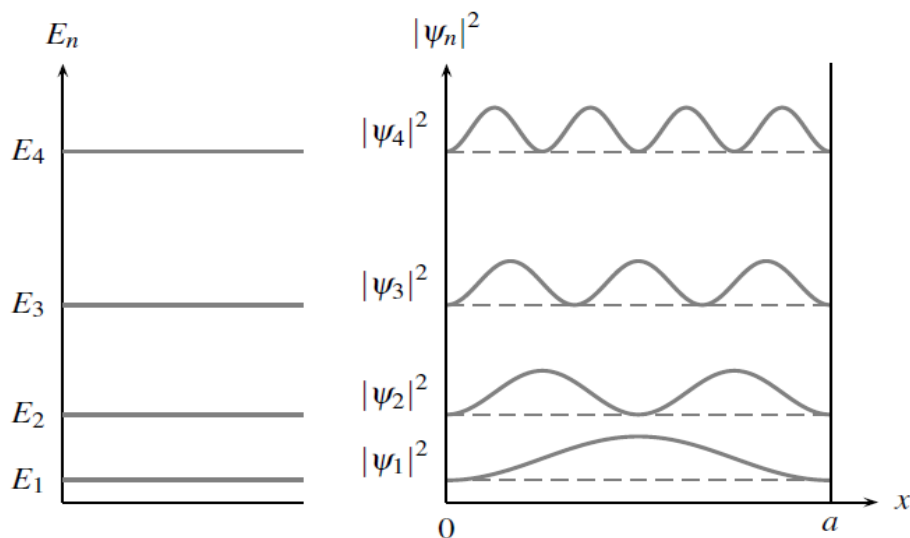
- il existe un caractère dispersif pour la particule quantique, absent pour la corde et les parties temporelles des amplitudes des ondes s'écrivent différemment.

### 3.1.3. Niveaux d'énergie

Le confinement de la particule quantique entraîne une suite discrète de valeurs de l'énergie : les énergies possibles sont quantifiées et l'entier  $n$  est un nombre quantique (c'est le nombre quantique principal). Cette suite discrète est appelée spectre d'énergie de la particule.

A chaque valeur du nombre quantique  $n$ , correspond une valeur précise de l'énergie  $E_n$ , associée à une fonction d'onde  $\psi_n(x, t)$ . Chacune de ces valeurs définit un niveau d'énergie.

Ci-dessous une représentation graphique de quelques niveaux d'énergie et les densités de probabilité de présence correspondantes.



Le niveau d'énergie le plus bas, appelé **niveau fondamental**, est obtenu pour  $n = 1$  :

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

Ainsi, alors qu'une particule classique piégée dans un puits de potentiel infini peut avoir une énergie presque nulle, on constate que l'énergie d'une particule quantique ne peut pas être inférieure au niveau d'énergie fondamental  $E_1$ . Cette énergie minimale de la particule quantique est d'autant plus élevée que la largeur  $a$  du puits est petite, c'est-à-dire que la particule quantique est mieux localisée.

D'autre part, le niveau d'énergie fondamental est d'autant plus faible que la masse  $m$  est élevée. Les effets quantiques ont tendance à s'estomper lorsque la masse devient plus importante.

Les niveaux d'énergie de nombre quantique strictement supérieur à 1 sont appelés **niveaux excités**.

Notons que l'énergie d'un état stationnaire lié est d'autant plus élevée que la fonction d'onde propre (réelle) présente un nombre important de nœuds (lieux de probabilité de présence nulle).

### 3.2. Energie de confinement

L'inégalité de Heisenberg spatiale  $\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$  permet d'interpréter l'existence du niveau d'énergie fondamental. En effet le confinement de la particule quantique impose  $\Delta x \leq a$ . On en déduit :

$$\Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2a} \text{ avec } \Delta p_x = \sqrt{\langle p_x^2 \rangle - \langle p_x \rangle^2}$$

Or, par raison de symétrie et quel que soit le niveau d'énergie considéré  $\langle p_x \rangle = 0$  (la fonction d'onde  $\psi_n(x, t)$  peut s'écrire comme la somme de deux ondes planes progressant dans des sens opposés, caractérisées par des quantités de mouvement opposées  $\vec{p}_n = \hbar \vec{k}_n$  et  $-\vec{p}_n$ ). D'où :

$$\langle p_x^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4a^2}$$

L'énergie cinétique de la particule quantique confinée dans le puits est donc bornée par une valeur minimale :

$$E_{c,min} = \langle E_{c,min} \rangle = \frac{\langle p_x^2 \rangle}{2m} \Rightarrow \boxed{E_{c,min} = \frac{\hbar^2}{8ma^2}}$$

A un facteur numérique près, on retrouve l'expression de l'énergie minimale de la particule quantique dans un puits de potentiel infini.

**On retiendra que l'énergie cinétique minimale d'une particule quantique confinée est d'autant plus élevée que la particule est piégée dans un domaine d'extension spatiale réduite. On l'appelle énergie de localisation ou énergie de confinement.**

Son ordre de grandeur est donné par la relation :

$$\boxed{E_{c,min} \approx \frac{\hbar^2}{ma^2}}, a \text{ étant la largeur de confinement.}$$

Cela explique en particulier pourquoi **la physique de l'infiniment petit et des particules élémentaires est aussi la physique des hautes énergies** : l'exploration de la matière à des échelles toujours plus petites nécessite des énergies toujours plus élevées.

#### ❖ Ordres de grandeur

- ✓ Electron dans un atome :  $m = 10^{-30} \text{ kg}$  et  $a = 10^{-10} \text{ m} \Rightarrow E_{c,min} = 1.10^{-18} \text{ J} = 0,7 \text{ eV}$  :  
ordre de grandeur des énergies des électrons dans les atomes
- ✓ Nucléon dans un noyau :  $m = 10^{-27} \text{ kg}$  et  $a = 10^{-15} \text{ m} \Rightarrow E_{c,min} = 1.10^{-11} \text{ J} = 70 \text{ MeV}$  :  
ordre de grandeur des énergies de liaison par nucléon dans un noyau atomique.

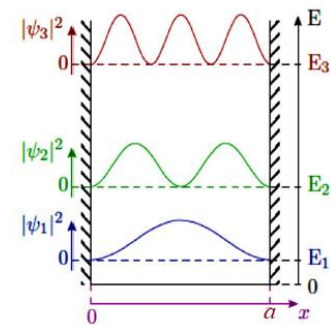
### 3.3. Densité de probabilité de présence

La densité de probabilité de présence est nulle en dehors du puits de potentiel infini et est donnée

dans le puits, pour  $0 \leq x \leq a$ , par la relation :

$$P_n = |\psi(x)|^2 = \frac{2}{a} \sin^2 \left( n\pi \frac{x}{a} \right).$$

La probabilité de présence ne prend des valeurs non nulles que dans l'intervalle  $[0; a]$  ; elle est nulle en dehors de cet intervalle. Il est donc impossible à la particule quantique de parvenir à l'infini. Cette situation correspond bien à un état lié de la particule quantique.



### ❖ Symétrie de la densité de probabilité de présence

La représentation de la densité de probabilité de présence  $|\psi_n(x)|^2$  montre qu'elle est symétrique par rapport à l'axe  $x = a/2$ . Ceci est une conséquence directe de la symétrie du potentiel  $V(x)$  par rapport à l'axe  $x = a/2$ .

D'où cette propriété importante : **les propriétés de symétrie du potentiel se retrouvent dans la fonction d'onde propre.**

### ❖ Limite classique

Pour une particule classique piégée dans un puits de potentiel infini, l'énergie cinétique et donc la vitesse gardent la même valeur, quelle que soit la position de la particule. La durée de passage d'une particule classique au voisinage d'un point donné reste la même en tout point. La particule classique a donc des probabilités égales de se trouver n'importe où entre  $x = 0$  et  $x = a$ . La densité de probabilité de présence classique vaut donc :  $P_{cl}(x) = \frac{1}{a}$ .

En ce qui concerne la particule quantique, pour de grandes valeurs du nombre quantique  $n$ , la densité de probabilité de présence  $P_n(x)$  présente de nombreuses oscillations entre  $x = 0$  et  $x = a$  du fait du facteur  $\sin^2(n\pi x/a)$ . La valeur moyenne de  $\sin^2(n\pi x/a)$  entre  $x = 0$  et  $x = a$  calculée sur de nombreuses oscillations est donc très proche de  $1/2$ . Pour des valeurs de  $n$  élevées, la probabilité quantique tend ainsi vers  $1/a$ , c'est-à-dire vers la probabilité classique. Ce résultat est conforme au principe de correspondance de Bohr.