

CHAPITRE 4 : ETATS NON STATIONNAIRES D'UNE PARTICULE QUANTIQUE

Dans ce chapitre, on étudie la superposition d'états stationnaires d'une particule quantique qui engendre une évolution au cours du temps de l'état de cette particule. Les cas de deux exemples où la particule est confinée sont abordés : le puits de potentiel infini et le double puits de potentiel.

1. Etats non stationnaires dans le cas du puits de potentiel infini

1.1. Fonction d'onde non stationnaire

Considérons une particule quantique, confinée dans un puits de potentiel infiniment profond, et qui est à l'instant initial $t = 0$ dans un état quantique normalisable formé par une superposition d'états stationnaires :

$$\psi(x, t = 0) = \sum_n c_n(t = 0) \varphi_n(x) \text{ avec } \sum_{n=1}^{+\infty} |c_n|^2(t = 0) = 1.$$

Cette expression étant une combinaison linéaire de solutions de l'équation de Schrödinger qui est une équation différentielle linéaire constitue une solution acceptable de l'équation de Schrödinger.

Pour déterminer l'expression de la fonction d'onde $\psi(x, t)$ de la particule quantique à un instant ultérieur $t > 0$, on recherche une solution de l'équation de Schrödinger sous la forme :

$$\psi(x, t) = \sum_n c_n(t) \varphi_n(x) \text{ avec } \sum_{n=1}^{+\infty} |c_n|^2(t) = 1.$$

En injectant cette expression dans l'équation de Schrödinger, et l'on obtient :

$$\frac{dc_n(t)}{dt} + i \frac{E_n}{\hbar} c_n(t) = 0.$$

La solution s'écrit : $c_n(t) = c_n(t = 0) \exp\left(-i \frac{E_n}{\hbar} t\right)$ et à $t > 0$ la fonction d'onde est :

$$\psi(x, t) = \sum_n c_n(t = 0) \varphi_n(x) \exp\left(-i \frac{E_n}{\hbar} t\right)$$

Les états stationnaires représentent ainsi une base des fonctions d'ondes que la particule peut avoir. La connaissance de cette base de solutions et les énergies associées permet donc de déterminer les états possibles d'une particule quantique. On retiendra donc ce résultat :

Toute fonction d'onde non stationnaire peut être écrite comme une combinaison linéaire des fonctions d'onde stationnaires :

$$\psi(x, t) = \sum_n c_n \varphi_n(x) \exp\left(-i \frac{E_n}{\hbar} t\right) \quad \text{avec} \quad \sum_{n=1}^{+\infty} |c_n|^2 = 1$$

1.2. Combinaison linéaire de deux états stationnaires

La fonction d'onde de la combinaison linéaire de deux fonctions d'onde stationnaires $\varphi_1(x)$ et $\varphi_3(x)$ d'une particule quantique de masse m , confinée dans un puits de potentiel infini de largeur a , à l'instant $t = 0$ peut s'écrire :

$$\psi(x, t = 0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \varphi_1(x) + \frac{1}{\sqrt{2}} \varphi_3(x)$$

A un instant quelconque ultérieur, cette fonction d'onde s'écrit alors :

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \varphi_1(x) \exp\left(-i \frac{E_1}{\hbar} t\right) + \frac{1}{\sqrt{2}} \varphi_3(x) \exp\left(-i \frac{E_3}{\hbar} t\right) \\ \Rightarrow \psi(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \exp\left(-i \frac{E_1}{\hbar} t\right) \left(\varphi_1(x) + \varphi_3(x) \exp\left(-i \frac{E_3 - E_1}{\hbar} t\right) \right) \end{aligned}$$

La densité de probabilité de présence est donc :

$$P(x, t) = |\psi(x, t)|^2 = \frac{1}{2} \left(\varphi_1^2(x) + \varphi_3^2(x) + 2\varphi_1(x)\varphi_3(x) \cos\left(\frac{E_3 - E_1}{\hbar} t\right) \right)$$

Ainsi, la densité de probabilité de présence dépend explicitement du temps : il s'agit bien d'un état non stationnaire. Elle oscille périodiquement dans le temps à la fréquence :

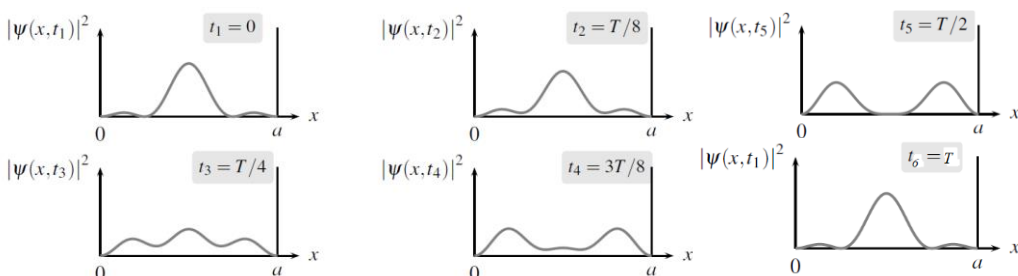
$$\nu = \frac{E_3 - E_1}{h}$$

La période correspondante est $T = \frac{1}{\nu} = \frac{h}{E_3 - E_1}$ avec $E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$ et $E_3 = \frac{9\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \Rightarrow T = \frac{ma^2}{h}$.

D'où ce résultat général :

La superposition de deux états stationnaires d'énergie E_1 et $E_2 > E_1$ conduit à une probabilité de présence qui oscille à la fréquence ν vérifiant la relation : $\boxed{h\nu = E_3 - E_1}$

Ci-dessous une représentation de la densité de probabilité de présence pour le cas $\varphi_1(x)$ et $\varphi_3(x)$.

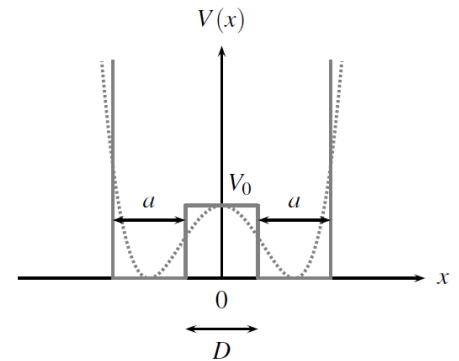


La fonction d'onde initiale permet de représenter une particule quantique plutôt localisée au centre du puits de potentiel. On obtient ensuite une évolution non stationnaire : la fonction d'onde s'étale

sur toute la largeur du puits, et suite aux réflexions sur les deux bords, vient reprendre sa forme initiale au centre du puits.

2. Double puits de potentiel symétrique

On se propose ici d'étudier le cas d'une particule quantique dans un profil d'énergie potentielle qui présente deux positions d'équilibres stables symétriques (potentiel tracé en tirets sur la figure ci-contre). Le profil d'énergie potentielle simplifié est tracé en trait continu. Les résultats obtenus suffisent pour analyser quelques situations physiques réelles. Commençons par le cas simplifié des états stationnaires dans un double puits infini et dans un double puits symétrique.

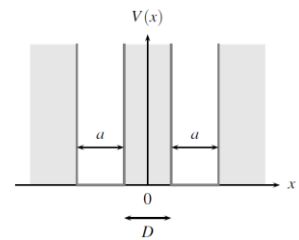


2.1. États stationnaires dans un double puits infini et dans un double puits symétrique

2.1.1. États stationnaires dans un double puits infini

Pour le double puits infini représenté sur la figure ci-contre, $V_0 \rightarrow \infty$

On a vu au chapitre précédent que les fonctions d'onde propres sont sinusoïdales dans les régions où le potentiel est nul, et partout ailleurs, elles



sont nulles. Comme les fonctions d'ondes propres des deux puits, pris séparément, satisfont à ces conditions, on en déduit que les états stationnaires d'une particule quantique correspondent à la réunion des états stationnaires de chacun des deux puits. On note :

E_n : l'énergie d'un état stationnaire, $\varphi_n^g(x)$: la fonction d'onde propre $\varphi_n(x)$ associée au puits de gauche et $\varphi_n^d(x)$: la fonction d'onde propre $\varphi_n(x)$ associée au puits de droite. On a alors :

$$\varphi_n(x) = \varphi_n^g(x) = \begin{cases} 0 & \text{pour } |x| > a + \frac{D}{2} \text{ ou pour } |x| < \frac{D}{2} \\ \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(n\pi \frac{x + a + \frac{D}{2}}{a}\right) & \text{pour } -a - \frac{D}{2} \leq x \leq -\frac{D}{2} \\ 0 & \text{pour } \frac{D}{2} \leq x \leq a + \frac{D}{2} \end{cases}$$

ou

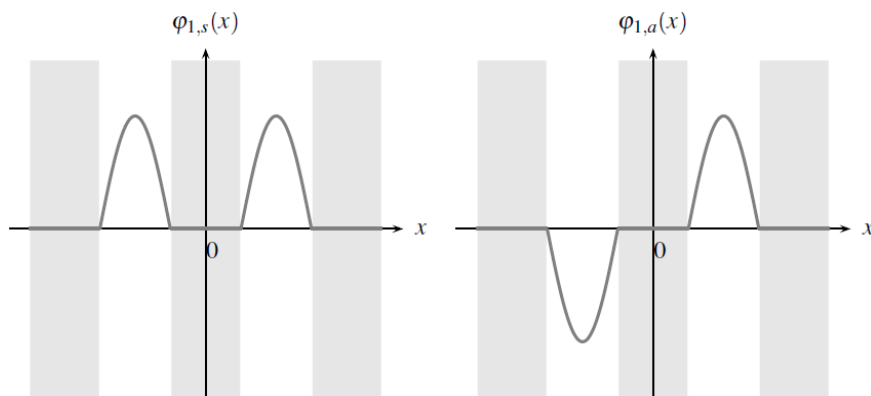
$$\varphi_n(x) = \varphi_n^d(x) = \begin{cases} 0 & \text{pour } |x| > a + \frac{D}{2} \text{ ou pour } |x| < \frac{D}{2} \\ 0 & \text{pour } -a - \frac{D}{2} \leq x \leq -\frac{D}{2} \\ \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(n\pi \frac{x - a - \frac{D}{2}}{a}\right) & \text{pour } \frac{D}{2} \leq x \leq a + \frac{D}{2} \end{cases}$$

Chaque état stationnaire d'énergie E_n est donc dédoublé : il lui correspond deux fonctions d'onde linéairement indépendantes. Le niveau d'énergie E_n est dit doublement **dégénéré**. Partant des fonctions d'onde propres $\varphi_n^g(x)$ et $\varphi_n^d(x)$ on peut définir deux nouvelles fonctions d'onde propres, linéairement indépendantes, symétrique qui est une fonction paire et antisymétrique qui est une fonction impaire :

$$\varphi_{n,s}(x) = \frac{\varphi_n^d(x) + \varphi_n^g(x)}{\sqrt{2}}$$

$$\varphi_{n,a}(x) = \frac{\varphi_n^d(x) - \varphi_n^g(x)}{\sqrt{2}}$$

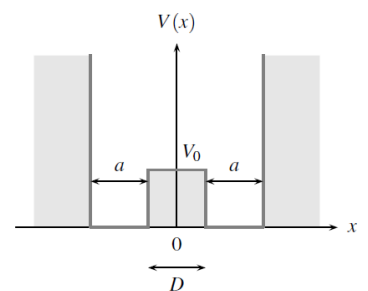
représentées sur les figures ci-dessous pour le niveau fondamental $n = 1$.



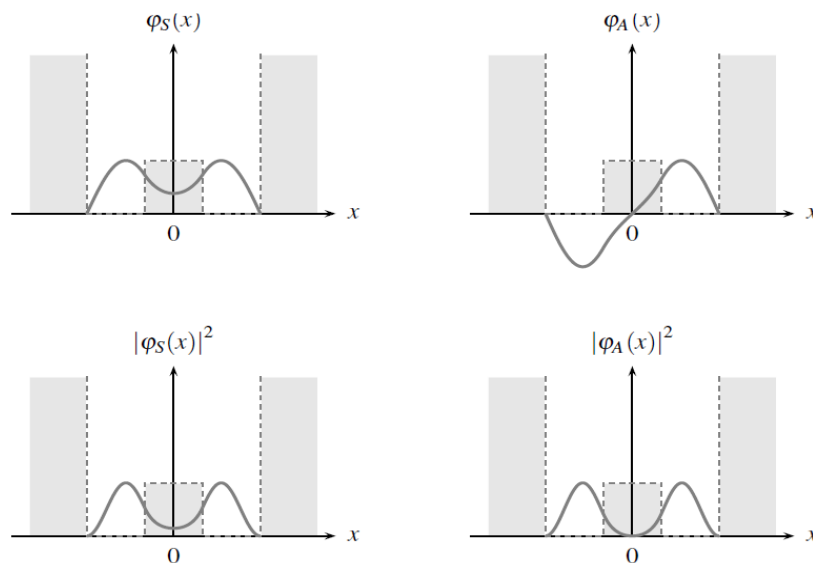
Une particule localisée dans un des deux puits y reste piégée puisque la barrière de potentiel qui sépare les deux puits est de hauteur infinie.

2.1.2. Etats stationnaires dans un double puits symétrique

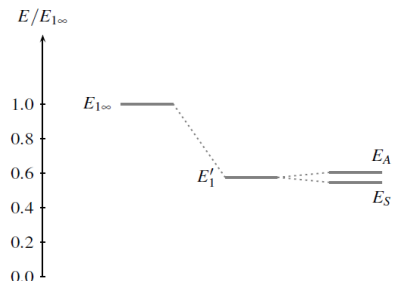
Pour le double puits symétrique représenté sur la figure ci-contre, on cherche les états stationnaires d'une particule quantique d'énergie $E < V_0$. La barrière de potentiel séparant les deux puits étant de hauteur et de largeur finie, il faut s'attendre à ce que la particule puisse franchir cette barrière par effet tunnel. Les deux puits de potentiel sont ainsi couplés par effet tunnel. Les niveaux d'énergie s'abaissent par rapport au cas du double puits infini de largeur a puisque le confinement de la particule quantique est moindre du fait d'une largeur effective du puits plus grande. On présente ici directement les résultats obtenus par résolution numérique de l'équation de Schrödinger indépendante du temps.



Ci-dessous sont représentées les fonctions d'onde propres ainsi que les densités de probabilité de présence associées correspondant aux deux états de plus faible énergie. Les fonctions d'onde propres obtenues ont des parités bien définies : l'une est paire, c'est la fonction d'onde propre symétrique ($\varphi_S(x)$), l'autre est impaire, c'est la fonction d'onde propre antisymétrique ($\varphi_A(x)$).



La fonction d'onde propre de l'état stationnaire antisymétrique présente, en $x = 0$, un nœud de plus que pour l'état symétrique. On en déduit que l'énergie associée à l'état antisymétrique est plus élevée que l'énergie de l'état symétrique. L'on peut le constater sur la figure ci-contre représentant les niveaux d'énergie correspondant à ces deux premiers états stationnaires où $E_{1\infty}$ est le niveau



fondamental du double puits infini, E_S et E_A les niveaux des états symétrique et antisymétrique respectives du double puits symétrique et E'_1 leur valeur moyenne. On peut ainsi remarquer que :

- l'énergie moyenne E'_1 des deux premiers niveaux d'énergie est plus faible que l'énergie du niveau fondamental du double puits infini. En effet, l'effet tunnel contribue à un élargissement effectif du puits de potentiel : la particule, en franchissant la barrière de potentiel centrale par effet tunnel, explore un puits de potentiel élargi.
- alors que pour le double puits de potentiel infini, les deux niveaux d'énergie symétrique et antisymétrique sont de même valeur, on constate qu'une autre conséquence du couplage des deux puits de potentiel par effet tunnel est la séparation des deux niveaux d'énergie des états symétrique et antisymétrique. Le couplage par effet tunnel lève donc la dégénérescence des niveaux d'énergie.

2.2. Évolution temporelle d'une superposition de deux états : états non stationnaires

En superposant les fonctions d'onde symétrique et antisymétrique, on déduit deux nouveaux états :

$$\psi_+(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} ((\psi_S(x, t) + \psi_A(x, t))),$$

$$\psi_-(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} ((\psi_S(x, t) - \psi_A(x, t))),$$

En posant $E_m = (E_S + E_A)/2$ et $E_d = (E_A - E_S)/2$, on peut expliciter $\psi_+(x, t)$ et $\psi_-(x, t)$:

$$\psi_+(x, t) = \left(\varphi_S(x) \exp\left(i \frac{E_d}{\hbar} t\right) + \varphi_A(x) \exp\left(-i \frac{E_d}{\hbar} t\right) \right) \frac{e^{-iE_m/\hbar}}{\sqrt{2}}$$

$$\psi_-(x, t) = \left(\varphi_S(x) \exp\left(i \frac{E_d}{\hbar} t\right) - \varphi_A(x) \exp\left(-i \frac{E_d}{\hbar} t\right) \right) \frac{e^{-iE_m/\hbar}}{\sqrt{2}}$$

Chacune de ces fonctions d'onde représentent un état non stationnaire puisqu'elle est obtenue par combinaison linéaire de deux fonctions d'onde d'énergies différentes.

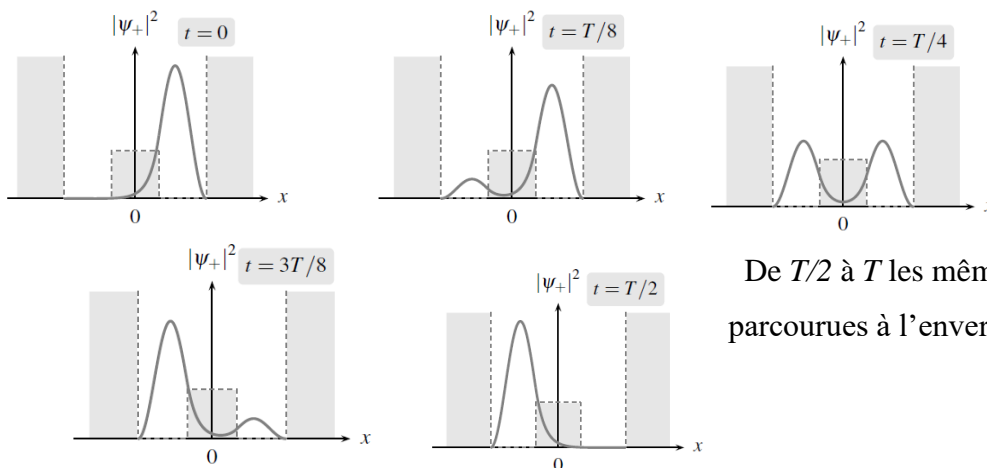
Les densités de probabilité de présence associées, qui varient dans le temps s'en déduisent :

$$|\psi_+(x, t)|^2 = \frac{1}{2} (|\varphi_S(x)|^2 + |\varphi_A(x)|^2 + 2|\varphi_S(x)\varphi_A(x)|\cos(\Omega t))$$

$$|\psi_-(x, t)|^2 = \frac{1}{2} (|\varphi_S(x)|^2 + |\varphi_A(x)|^2 - 2|\varphi_S(x)\varphi_A(x)|\cos(\Omega t))$$

où l'on a posé $\Omega = 2E_d/\hbar = (E_A - E_S)/\hbar$ avec comme période correspondante $T = h/(E_A - E_S)$.

La figure ci-dessous représente l'évolution dans l'espace et dans le temps de la densité de probabilité de présence $|\psi_+(x, t)|^2$ à partir de l'état initial défini par $\psi_+(x, t = 0)$ à l'instant $t = 0$.



De $T/2$ à T les mêmes étapes sont parcourues à l'envers.

L'état $\psi_+(x, t = 0)$ correspond à une situation où la particule est localisée dans le puits de droite.

Mais on constate qu'elle n'y reste pas : elle oscille d'un puits à l'autre à la fréquence de Bohr ν

donnée par $\nu = \frac{E_A - E_S}{h}$

L'état représenté par $\psi_-(x, t)$, pour lequel $\psi_-(x, t = 0)$ correspond à une situation où la particule est localisée dans le puits de gauche, est aussi caractérisé par une oscillation de la densité de probabilité de présence à la même fréquence.