

Exercice 1 : Emission d'un photon

La différence des énergies des niveaux $n = 2$ et $n = 1$ est :

$$\Delta E = E_2 - E_1 = \frac{3\pi^2 \hbar^2}{2m_e^* a^2}.$$

La longueur λ d'onde de l'onde électromagnétique émise lorsque l'électron passe du niveau $n = 2$ au niveau $n = 1$ est telle que :

$$\frac{hc}{\lambda} = E_2 - E_1 = \frac{3\pi^2 \hbar^2}{2m_e^* a^2} \implies \lambda = \frac{4m_e^* ca^2}{3\pi \hbar} = 3,3 \times 10^{-6} \text{ m}$$

Il s'agit d'un rayonnement infrarouge.

Exercice 2 : Colorants organiques et modèle de Kuhn

1. Les électrons délocalisés correspondent aux électrons π des $p + 1$ liaisons doubles et au doublet non liant de l'atome d'azote : $N = 2p + 4$.

2. L'analogie avec la corde vibrante se base sur une représentation graphique de la fonction d'onde propre. On en déduit ensuite le lien entre la longueur d'onde de de Broglie et la largeur du puits. C'est l'objet du premier exercice dont nous utilisons directement les résultats :

$$E_n = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_e L^2}.$$

3. Selon la règle de Pauli, on peut placer au plus deux électrons par niveaux d'énergie. Le nombre d'électrons $N = 2p + 4$ est pair : ils remplissent $p + 2$ niveaux d'énergie. Le dernier électron est placé sur le niveau $p + 2$. Le niveau d'énergie occupé le plus haut est repéré par l'indice $p + 2$ et le niveau d'énergie libre le plus bas correspond à l'indice $p + 3$.

4. On considère la transition électronique entre ces deux niveaux. La longueur d'onde λ_p du rayonnement électromagnétique associé à cette transition vérifie la relation :

$$\frac{hc}{\lambda_p} = E_{p+3} - E_{p+2} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_e L^2} ((p+3)^2 - (p+2)^2) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_e L^2} (2p+5).$$

D'où :

$$\lambda_p = \frac{4m_e c L^2}{(2p+5)\pi \hbar} = \frac{8m_e c \ell^2}{h} \frac{N^2}{N+1}.$$

5. Le tableau ci-dessous reprend les valeurs fournies dans l'énoncé et on y a rajouté dans la dernière ligne les valeurs des longueurs d'onde calculées à partir de la relation établie à la question précédente :

| p | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 |
|------------------------------|-----|-----|-----|-----|-----|
| λ_{exp} (nm) | 313 | 416 | 519 | 625 | 735 |
| λ_{Kuhn} (nm) | 328 | 453 | 579 | 706 | 833 |

Compte tenu de la simplicité des arguments invoqués, l'accord entre les valeurs mesurées et les valeurs théoriques est satisfaisant.

Exercice 3 : Butée sur une marche de potentiel de hauteur supérieure à E

- a) Les solutions dans les deux domaines s'écrivent pour $x \leq 0$ et $x > 0$ respectivement :

$$\begin{cases} \varphi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x} \\ \varphi_2(x) = A_2 e^{\frac{x}{\delta}} + B_2 e^{-\frac{x}{\delta}} \end{cases}$$

- b) Lorsque $x \rightarrow +\infty$ dans le milieu 2, $e^{\frac{x}{\delta}} \rightarrow +\infty$, il est donc nécessaire que $A_2 = 0$.
- c) La hauteur de la marche étant finie, il y a continuité de φ et de φ' en $x = 0$, donc

$$\begin{cases} A_1 + B_1 = B_2 \\ ik_1(A_1 - B_1) = -\frac{B_2}{\delta} \end{cases}$$

- d) Pour $x > 0$,

$$\psi(x, t) = B_2 e^{-i\omega t} e^{-\frac{x}{\delta}}$$

$$\text{donc } \rho(x, t) = \psi(x, t) \psi^*(x, t) = |B_2|^2 e^{-\frac{2x}{\delta}}$$

Cette densité décroît exponentiellement avec x mais n'est pas nulle, il est donc possible de trouver une particule dans le domaine $x > 0$, alors que c'est interdit par la mécanique classique car l'énergie potentielle $V(x) = V_0$ étant supérieure à l'énergie mécanique E , l'énergie cinétique serait négative.

Exercice 4 : Réflexion et transmission sur une marche de potentiel de hauteur inférieure à E

- a) Les deux équations spatiales de Schrödinger sont du type oscillateur harmonique ; notons avec l'indice 1 les grandeurs pour $x < 0$ et 2 pour $x > 0$:

$$\begin{cases} \varphi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x} \\ \varphi_2(x) = A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x} \end{cases}$$

- b) La particule incidente se propage dans le milieu 1 dans le sens des x croissants ; si elle passe la marche, elle continuera à se propager dans le milieu 2 dans le sens des x croissants ; si elle rebondit sur la marche, elle se propagera dans le milieu 1 dans le sens des x décroissants ; En aucun cas, elle ne peut se propager dans le milieu 2 dans le sens des x décroissants. Voici les ondes associées aux quatre termes définissant φ_1 et φ_2 :

$$\psi_1(x, t) = \varphi_1(x) e^{-i\omega t} = A_1 e^{-i(\omega t - k_1 x)} + B_1 e^{-i(\omega t + k_1 x)}$$

$$\psi_2(x, t) = \varphi_2(x) e^{-i\omega t} = A_2 e^{-i(\omega t - k_2 x)} + B_2 e^{-i(\omega t + k_2 x)}$$

Les arguments du type $\omega t - kx$ traduisent une propagation dans le sens des x croissants, ceux du type $\omega t + kx$ dans le sens des x décroissants. L'onde d'amplitude A_1 est donc l'onde **incidente** (sens des x croissants dans 1), celle d'amplitude A_2 est l'onde **réfléchie** (sens des x décroissants dans 1), celle d'amplitude B_1 est l'onde **transmise** (sens des x croissants dans 2), et nécessairement $B_2 = 0$ (pas d'onde dans 2 dans le sens des x décroissants).

- c) La hauteur de la marche étant finie, il y a continuité de φ et de φ' en $x = 0$, donc

$$\begin{cases} A_1 + B_1 = A_2 \\ ik_1 A_1 - ik_1 B_1 = ik_2 A_2 \end{cases} \text{ donc } \begin{cases} 1 + \frac{B_1}{A_1} = \frac{A_2}{A_1} \\ 1 - \frac{B_1}{A_1} = \frac{k_2}{k_1} \frac{A_2}{A_1} \end{cases}$$

En posant $r = \frac{B_1}{A_1}$ et $t = \frac{A_2}{A_1}$, on obtient le système

$$\begin{cases} 1 + r = t \\ 1 - r = \frac{k_2}{k_1} t \end{cases} \text{ donc } \begin{cases} r = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \\ t = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} \end{cases}$$

Les vecteurs densité de courant de probabilité associés aux trois ondes sont respectivement

$$\begin{cases} \vec{J}_i = |\psi_i|^2 \frac{\hbar k_1}{m} \vec{u}_x = A_1^2 \frac{\hbar k_1}{m} \vec{u}_x \\ \vec{J}_r = -B_1^2 \frac{\hbar k_1}{m} \vec{u}_x \\ \vec{J}_t = A_2^2 \frac{\hbar k_2}{m} \vec{u}_x \end{cases}$$

- d) On en déduit les rapports des densités de courant de probabilité :

$$R = \frac{\|\vec{J}_r\|}{\|\vec{J}_i\|} = \left(\frac{B_1}{A_1}\right)^2 \cdot \frac{k_1}{k_1} = \frac{(k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2}$$

$$T = \frac{\|\vec{J}_t\|}{\|\vec{J}_i\|} = \left(\frac{A_2}{A_1}\right)^2 \cdot \frac{k_2}{k_1} = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}$$

- e) R est la probabilité de réflexion et T celle de transmission d'une particule incidente sur la marche de potentiel. On remarque que

$$R + T = \frac{k_1^2 + 2k_1 k_2 + k_2^2 + 4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2} = 1$$

ce qui prouve que la somme des probabilités vaut 1.

- f) Exprimons les deux termes :

$$k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \text{ et } k_2 = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}} = \sqrt{\frac{2m\left(E - \frac{E}{2}\right)}{\hbar^2}} = \sqrt{\frac{mE}{\hbar^2}}$$

donc $k_1 = k_2 \sqrt{2}$. On en déduit

$$R = \frac{(k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2} = \frac{(k_2 \sqrt{2} - k_2)^2}{(k_2 \sqrt{2} + k_2)^2} = \frac{3 - 2\sqrt{2}}{3 + 2\sqrt{2}} \approx 0,029$$

$$T = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2} = \frac{4k_2^2 \sqrt{2}}{(k_2 \sqrt{2} + k_2)^2} = \frac{4\sqrt{2}}{3 + 2\sqrt{2}} \approx 0,971$$

Par définition du coefficient de transmission, la probabilité de transmission d'une particule est de 0,971. Statistiquement, sur 1000 particules incidentes, 971 sont transmises.

Exercice 5 : Conservation locale de la densité de probabilité

1. On se place à une dimension suivant l'axe (Ox). Par analogie avec l'électromagnétisme, on cherche une équation locale de conservation du type $\frac{\partial}{\partial t} \rho(x,t) + \frac{\partial}{\partial x} J(x,t) = 0$. On ne connaît pas l'expression de $J(x,t)$ mais on connaît celle de $\rho(x,t)$: la probabilité de trouver la particule à l'instant t entre x et $x + dx$ est donnée par : $\rho(x,t) = |\Psi(x,t)|^2 = \Psi(x,t)\Psi^*(x,t)$, où $\Psi^*(x,t)$ désigne le complexe conjugué de $\Psi(x,t)$.

Ainsi $\frac{\partial}{\partial t} \rho(x,t) = \frac{\partial}{\partial t} [\Psi(x,t)\Psi^*(x,t)] = \Psi^*(x,t) \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x,t) + \Psi(x,t) \frac{\partial}{\partial t} \Psi^*(x,t)$.

$\frac{\partial}{\partial t} \Psi(x,t)$ est donné par l'équation de Schrödinger à une dimension :

$$\frac{\partial}{\partial t} \Psi(x,t) = -\frac{\hbar}{2mi} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x,t) + \frac{1}{i\hbar} V(x)\Psi(x,t), \text{ notée équation (1).}$$

En la multipliant membre à membre par $\Psi^*(x,t)$ on obtient :

$$\Psi(x,t) \frac{\partial}{\partial t} \Psi^*(x,t) = \frac{\hbar}{2mi} \Psi(x,t) \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi^*(x,t) - \frac{1}{i\hbar} V(x)\Psi(x,t)\Psi^*(x,t) \quad (1).$$

En en prenant le complexe conjugué on obtient :

$$\Psi^*(x,t) \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x,t) = -\frac{\hbar}{2mi} \Psi^*(x,t) \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x,t) + \frac{1}{i\hbar} V(x)\Psi^*(x,t)\Psi(x,t) \quad (2)$$

En sommant les équations (1) et (2) on élimine le terme en $V(x)$:

$$\Psi^*(x,t) \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x,t) + \Psi(x,t) \frac{\partial}{\partial t} \Psi^*(x,t) = -\frac{\hbar}{2mi} \left[\Psi^*(x,t) \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x,t) - \Psi(x,t) \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi^*(x,t) \right].$$

Or $\Psi^*(x,t) \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x,t) + \Psi(x,t) \frac{\partial}{\partial t} \Psi^*(x,t) = \frac{\partial}{\partial t} \rho(x,t)$, et en remarquant que

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \left[\Psi^* \frac{\partial}{\partial x} \Psi - \Psi \frac{\partial}{\partial x} \Psi^* \right] &= \frac{\partial}{\partial x} \Psi^* \frac{\partial}{\partial x} \Psi + \Psi^* \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi - \frac{\partial}{\partial x} \Psi \frac{\partial}{\partial x} \Psi^* - \Psi \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi^* \\ &= \Psi^* \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi - \Psi \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi^*, \text{ il vient :} \end{aligned}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x,t) = -\frac{\hbar}{2mi} \frac{\partial}{\partial x} \left[\Psi^*(x,t) \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x,t) - \Psi(x,t) \frac{\partial}{\partial x} \Psi^*(x,t) \right], \text{ soit encore :}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x,t) + \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\hbar}{2mi} \left(\Psi^*(x,t) \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x,t) - \Psi(x,t) \frac{\partial}{\partial x} \Psi^*(x,t) \right) \right] = 0 \quad (3).$$

En posant $\vec{J}(x,t) = \frac{\hbar}{2mi} \left(\Psi^*(x,t) \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x,t) - \Psi(x,t) \frac{\partial}{\partial x} \Psi^*(x,t) \right) \vec{e}_x$ la densité linéique de

courant de probabilité, on obtient bien : $\frac{\partial}{\partial t} \rho(x,t) + \frac{\partial}{\partial x} J(x,t) = 0$ qui est l'équation locale de

conservation de la probabilité recherchée.

2. Dans le cas particulier d'une particule libre où la fonction d'onde a la forme d'une onde plane, on a : $\Psi(x,t) = \Psi_0 \exp(i(kx - \omega t))$ et $\Psi^*(x,t) = \Psi_0^* \exp(-i(kx - \omega t))$, il vient :

$\Psi^*(x,t) \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x,t) - \Psi(x,t) \frac{\partial}{\partial x} \Psi^*(x,t) = 2ik |\Psi_0|^2$, de sorte qu'avec $\vec{k} = k \vec{e}_x$ le vecteur d'onde

associé, il vient : $\vec{J}(x,t) = |\Psi_0|^2 \frac{\hbar \vec{k}}{m}$.

D'autre part la vitesse de groupe associée au paquet d'onde décrivant la particule est $V_g = \frac{d\omega}{dk}$.

La relation de dispersion de l'onde plane étant $\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, on obtient $\vec{V}_g = \frac{\hbar \vec{k}}{m}$, de sorte que :

$$\vec{J}(x,t) = \rho(x,t) \vec{V}_g.$$

3. On peut faire l'analogie formelle avec la relation $\vec{j} = \rho \vec{V}$ dans un conducteur, où ρ est la densité volumique de charge et \vec{V} la vitesse d'ensemble des porteurs de charge dans le conducteur.

Exercice 6 : (*) Diffusion par un potentiel attractif, effet Ramsauer

1. Situation physique associée : Une particule provenant de $x \rightarrow -\infty$ subit au voisinage du puits, l'effet d'un potentiel attractif $-V_0$ de portée a . Cela modélise la diffusion d'une particule par un centre diffusif. Les particules diffusées repartent à l'infini en partie vers $-\infty$ et en partie vers $+\infty$: il s'agit d'un état de diffusion.

2. On est dans le cas où $E > V$. On pose dans les régions (1) et (3) $K = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ et

$k = \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar}$ dans la région (2).

La résolution de l'équation de Schrödinger conduit alors à la forme de la fonction d'onde dans les trois domaines, dans les régions (1), (2) et (3) on écrit respectivement :

$$\begin{cases} \varphi_1(x) = A_1 e^{iKx} + B_2 e^{-iKx} \\ \varphi_2(x) = A_2 e^{ikx} + B_2 e^{-ikx} \\ \varphi_3(x) = A_3 e^{iKx} + B_3 e^{-iKx} = A_3 e^{iKx} \end{cases}$$

⇒ Méthode 18.1

Pour tenir compte de l'absence de source en $+\infty$ on a posé $B_3 = 0$.

⇒ Méthode 18.3

3. Les conditions de raccordement, qui ici impliquent la continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée, s'écrivent en $x = -a/2$:

$$\begin{cases} A_1 e^{-iKa/2} + B_1 e^{iKa/2} = A_2 e^{-ika/2} + B_2 e^{ika/2} \\ K A_1 e^{-iKa/2} - K B_1 e^{iKa/2} = k A_2 e^{-ika/2} - k B_2 e^{ika/2} \end{cases}$$

et en $x = a/2$:

$$\begin{cases} A_3 e^{iKa/2} = A_2 e^{ika/2} + B_2 e^{-ika/2} \\ K A_3 e^{iKa/2} = k B_1 e^{ika/2} - k B_2 e^{-ika/2} \end{cases}$$

⇒ Méthode 18.3

4. Les coefficients de réflexion R et de transmission T sont donnés par :

→ $R = \frac{J_r}{J_i}$ où $J_i = |A_1|^2 \frac{\hbar K}{m}$ est la densité de courant de probabilité associée à l'onde plane

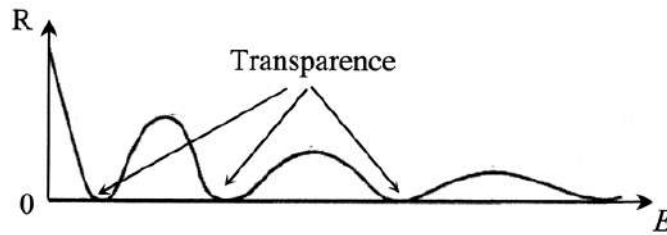
incidente $A_1 e^{iKx}$ dans la zone (1), $J_r = |B_1|^2 \frac{\hbar K}{m}$ est la densité de courant de probabilité associée à l'onde plane réfléchie $B_1 e^{-iKx}$ dans la zone (1).

→ $T = \frac{J_t}{J_i}$ où $J_t = |A_3|^2 \frac{\hbar K}{m}$ est la densité de courant de probabilité associée à l'onde plane transmise $A_3 e^{iKx}$ dans la zone (3).

⇒ Méthode 18.3

5. a) La structure électronique des gaz rares, dont la couche de valence est complète, se traduit par un potentiel d'interaction à faible portée, limitée à une zone centrée sur l'atome (faible affinité pour les électrons puisque la couche externe est complète) et chutant très rapidement vers zéro en dehors de cette zone, ce qui correspond assez bien à notre modèle de puits plat fini.

b) On vérifie tout d'abord que $R + T = 1$. Le coefficient de réflexion R s'annule pour $k = \frac{n\pi}{a}$ où n est un entier, on a alors $T = 1$. Les valeurs correspondantes de l'énergie correspondent ainsi au cas où toutes les particules passent à travers la zone d'interaction comme si elle était « transparente ».



La condition $k = \frac{n\pi}{a}$ où $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ correspond au cas où la largeur a du puits est un multiple entier de $\lambda/2$, où λ est la longueur d'onde de De Broglie de l'électron dans le puits. Ainsi, lorsque l'onde réfléchi en $x = -a/2$ vers $x \rightarrow -\infty$ est en interférence destructive avec toutes des ondes subissant des réflexions multiples dans le puits, ce dernier devient transparent à l'onde incidente.

Exercice 7 : (*) Oscillations par effet tunnel dans un puits double

① Le système évolue dans un puits de potentiel de profondeur nulle dans les régions ① et ③. Son comportement est décrit par une fonction d'onde de type exponentielle complexe, caractérisée par le vecteur d'onde :

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}.$$

Entre les deux puits se dresse une barrière de potentiel de hauteur V_0 . Le système rencontre donc une marche de potentiel aux points de raccordement avec la région ①. Imaginons qu'initialement il ait été préparé dans le puits de droite (région ③) de telle sorte qu'il se propage vers la gauche (donc dans le sens des x décroissants), à l'interface entre les régions ③ et ②, il y a apparition d'une onde réfléchi dans la région ③ et d'une onde évanescence dans la région ②. La probabilité de passage par effet tunnel étant non nulle, une fonction d'onde apparaît donc par suite dans la région ①. Le passage par effet tunnel est gouverné par le paramètre :

$$\kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} = \sqrt{(k_0^2 - k^2)}.$$

Le système peut donc « osciller » entre les deux puits de potentiel par effet tunnel.

- ② Le potentiel $V(x)$ est clairement symétrique par rapport à x (fonction paire). Écrivons l'équation de Schrödinger stationnaire sous sa forme compacte :

$$H(x)\phi(x) = E\phi(x), \text{ avec } H(x) \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x),$$

l'opérateur hamiltonien du système. Il apparaît clairement que l'hamiltonien du système est symétrique : $H(-x) = H(x)$.

L'équation aux valeurs propres implique :

$$H(x)\phi(x) = E\phi(x) \Rightarrow H(-x)\phi(-x) = E\phi(-x) \Rightarrow H(x)\phi(-x) = E\phi(-x).$$

On déduit de ce qui précède que $\phi(x)$ et $\phi(-x)$ sont toutes deux associées à la même énergie (même valeur propre de l'hamiltonien). Elles sont proportionnelles. Soit C la constante de proportionnalité entre les deux fonctions d'onde :

$$\phi(x) = C\phi(-x) \Rightarrow \phi(-x) = C\phi(-(-x)) = C\phi(x) = C \times C\phi(-x)$$

$$\Rightarrow C^2 = 1 \Rightarrow C = \pm 1.$$

Cette dernière équation nous indique donc que : $\phi(x) = \pm \phi(-x)$, la fonction d'onde est donc de parité déterminée : soit ϕ est paire (solution symétrique correspondant au signe (+)), soit ϕ est impaire (solution anti-symétrique correspondant au signe (-)).

- ③ Les conditions de raccordement sont :

• en $x = b + \frac{a}{2}$: $\phi_3 = 0$,

• en $x = b - \frac{a}{2}$: $\phi_2 = \phi_3$,

• en $x = b - \frac{a}{2}$: $\phi'_2 = \phi'_3$,

en désignant par $\phi'(x)$ la dérivée par rapport à x de la fonction d'onde : $\phi'(x) = d\phi/dx(x)$. Les mêmes conditions s'appliquent aux positions symétriques par rapport à l'origine.

- ④ De manière générale, et compte-tenu des considérations développées dans les questions précédentes, on peut écrire la fonction d'onde sous la forme générale :

$$\phi_1(x) = A_1 e^{ikx} + A'_1 e^{-ikx},$$

$$\phi_2(x) = A_2 e^{-\kappa x} + A'_2 e^{\kappa x},$$

$$\phi_3(x) = A_3 e^{ikx} + A'_3 e^{-ikx}.$$

Les propriétés de symétrie nous permettent d'écrire directement :

$$\phi_1(x) = \pm \phi_3(-x),$$

$$A_2 = \pm A'_2, \text{ soit } \phi_2(x) = A_2 (e^{-\kappa x} \pm e^{\kappa x}).$$

Le signe (+) correspond au cas symétrique, le signe (-) correspond au signe anti-symétrique. Il n'est donc pas nécessaire de considérer le cas des x négatifs.

- ⑤ Considérons tout d'abord le cas symétrique. Nous avons trois inconnues A_1 , A'_1 et A_2 et trois conditions de raccordement possibles. Le système est donc complètement déterminé. Nous écrivons donc :

$$\phi_3\left(x = b + \frac{a}{2}\right) = A_1 e^{ik\left(\frac{b+a}{2}\right)} + A'_1 e^{-ik\left(\frac{b+a}{2}\right)} = 0,$$

$$\phi_2\left(x = b - \frac{a}{2}\right) = A_2 \left(e^{-\kappa\left(\frac{b-a}{2}\right)} + e^{\kappa\left(\frac{b-a}{2}\right)} \right)$$

$$= \phi_3\left(x = b - \frac{a}{2}\right) = A_1 e^{ik\left(\frac{b-a}{2}\right)} + A'_1 e^{-ik\left(\frac{b-a}{2}\right)}$$

$$\begin{aligned}\Phi_2' \left(x = b - \frac{a}{2} \right) &= -\kappa A_2 \left(e^{-\kappa \left(b - \frac{a}{2} \right)} - e^{\kappa \left(b - \frac{a}{2} \right)} \right) \\ &= \Phi_3' \left(x = b - \frac{a}{2} \right) = ikA_1 e^{ik \left(b - \frac{a}{2} \right)} - ikA_1' e^{-ik \left(b - \frac{a}{2} \right)}.\end{aligned}$$

Le système précédent se simplifie après réarrangement des termes :

$$\begin{cases} A_1' = -A_1 e^{ik(2b+a)} \\ A_2 \left(2 \cosh \left(\frac{\kappa l}{2} \right) \right) = A_1 e^{ik \left(b - \frac{a}{2} \right)} - A_1' e^{ik(2b+a)} e^{-ik \left(b - \frac{a}{2} \right)} = A_1 e^{\frac{ikl}{2}} (1 - e^{i2ka}) \\ -\kappa A_2 \left(-2 \sinh \left(\frac{\kappa l}{2} \right) \right) = ikA_1 e^{ik \left(b - \frac{a}{2} \right)} + ikA_1' e^{ik(2b+a)} e^{-ik \left(b - \frac{a}{2} \right)} = A_1 e^{\frac{ikl}{2}} (1 + e^{i2ka}). \end{cases}$$

Les deux dernières équations s'écrivent :

$$\begin{cases} A_2 \left(2 \cosh \left(\frac{\kappa l}{2} \right) \right) = A_1 e^{\frac{ikl}{2}} (1 - e^{i2ka}) \\ \kappa A_2 \left(2 \sinh \left(\frac{\kappa l}{2} \right) \right) = ikA_1 e^{\frac{ikl}{2}} (1 + e^{i2ka}). \end{cases}$$

En identifiant membre à membre, on trouve l'équation donnant la quantification de l'énergie :

$$\begin{aligned}\frac{\cosh \left(\frac{\kappa l}{2} \right)}{\kappa \sinh \left(\frac{\kappa l}{2} \right)} &= \frac{1}{ik} \times \frac{1 - e^{i2ka}}{1 + e^{i2ka}} = \frac{1}{ik} \times \frac{e^{-ika} - e^{ika}}{e^{-ika} + e^{ika}}, \\ \frac{\cosh \left(\frac{\kappa l}{2} \right)}{\sinh \left(\frac{\kappa l}{2} \right)} &= \frac{\kappa}{ik} \times \frac{(-2i) \sin(ka)}{2 \cos(ka)},\end{aligned}$$

que l'on peut réécrire sous la forme proposée dans l'énoncé :

$$\frac{\kappa}{k} \tan(ka) = -\coth \frac{\kappa l}{2}.$$

Bien évidemment les mêmes raisonnements s'appliquent pour le cas de la solution anti-symétrique. Nous laissons le lecteur vérifier que dans ce cas l'équation de quantification de l'énergie s'écrit :

$$\frac{\kappa}{k} \tan(ka) = -\tanh \frac{\kappa l}{2}.$$

⑥ La résolution des équations précédentes se fait graphiquement. L'intersection des courbes

$\frac{\kappa}{k} \tan(ka)$ et $-\coth \frac{\kappa l}{2}$ donnent les valeurs autorisées pour l'énergie. La quantification vient encore du fait que le système est confiné à l'intérieur du puits de potentiel. Les deux équations à résoudre pour déterminer l'énergie étant différentes, on doit a priori distinguer les énergies des états symétriques de celles des états antisymétriques.

Déterminons la fonction d'onde du système dans le cas symétrique pour une énergie donnée. On peut exprimer tous les coefficients de la fonction d'onde suivant le seul paramètre A_1 . En effet :

$$\begin{aligned}
\phi_3(x) &= A_1 e^{ikx} + A_1' e^{-ikx} = A_1 (e^{ikx} - e^{ik(2b+a)} e^{-ikx}) \\
&= A_1 e^{ik\left(b+\frac{a}{2}\right)} \left(e^{-ik\left(b+\frac{a}{2}\right)} e^{ikx} - e^{ik\left(b+\frac{a}{2}\right)} e^{-ikx} \right) \\
&= 2iA_1 e^{ik\left(b+\frac{a}{2}\right)} \sin\left(k\left(x - b - \frac{a}{2}\right)\right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\phi_2(x) &= A_2 e^{-\kappa x} + A_2' e^{\kappa x} \\
&= 2A_2 \cosh(\kappa x) \\
&= -2iA_1 e^{ik\left(b+\frac{a}{2}\right)} \frac{\sin(ka)}{\cosh\left(\frac{\kappa l}{2}\right)} \cosh(\kappa x).
\end{aligned}$$

En posant $A = 2iA_1 e^{ik\left(b+\frac{a}{2}\right)}$, on trouve :

$$\begin{aligned}
\phi_3(x) &= A \sin\left(k\left(x - b - \frac{a}{2}\right)\right) \\
\phi_2(x) &= -A \sin(ka) \frac{\cosh(\kappa x)}{\cosh\left(\frac{\kappa l}{2}\right)} \\
\phi_1(x) &= -A \sin\left(k\left(x + b + \frac{a}{2}\right)\right).
\end{aligned}$$

La détermination de A se complète en exigeant que la probabilité de trouver la particule dans le puits de potentiel est égale à 1, soit :

$$\int_{-b-\frac{a}{2}}^{-b+\frac{a}{2}} |\phi_1(x)|^2 dx + \int_{-b+\frac{a}{2}}^{b-\frac{a}{2}} |\phi_2(x)|^2 dx + \int_{b-\frac{a}{2}}^{b+\frac{a}{2}} |\phi_3(x)|^2 dx = 1.$$

On montrerait de même que la fonction d'onde anti-symétrique s'écrit :

$$\begin{aligned}
\phi_3(x) &= A \sin\left(k\left(x - b - \frac{a}{2}\right)\right) \\
\phi_2(x) &= -A \sin(ka) \frac{\sinh(\kappa x)}{\cosh\left(\frac{\kappa l}{2}\right)} \\
\phi_1(x) &= A \sin\left(k\left(x + b + \frac{a}{2}\right)\right)
\end{aligned}$$

⑦ En préparant le système dans un état qui est une superposition des deux états précédents, donc décrit par une fonction d'onde :

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\phi_A(x) e^{-\frac{iE_A t}{\hbar}} + \phi_S(x) e^{-\frac{iE_S t}{\hbar}} \right),$$

on aurait une densité de probabilité de présence de la forme :

$$\rho(x,t) = |\psi(x,t)|^2 = \frac{1}{2} \left(|\phi_A(x)|^2 + |\phi_S(x)|^2 + 2\phi_A(x)\phi_S(x) \cos\left(\frac{(E_A - E_S)t}{\hbar}\right) \right).$$

Quand le cosinus est égal à 1, on a $\rho = \frac{1}{2}(|\phi_A(x) + \phi_S(x)|^2)$ ce qui correspond à un état où la probabilité de trouver la particule dans le puits de gauche est nulle. Quand le cosinus est égal à -1 , on a $\rho = \frac{1}{2}(|\phi_A(x) - \phi_S(x)|^2)$ ce qui correspond à un état où la probabilité de trouver la particule dans le puits de droite est nulle. L'oscillation entre ces deux états extrêmes se fait à la fréquence :

$$\nu_{AS} = \frac{(E_A - E_S)}{h} \Rightarrow \omega_{AS} = \frac{(E_A - E_S)}{\hbar}.$$

Le problème étudié ici correspond à la situation de la molécule d'ammoniac NH_3 qui a la forme d'une pyramide dont le sommet est occupé par l'atome d'azote. Celui-ci peut-être « au-dessus » ou « en-dessous » du plan formé par les trois atomes d'hydrogène. Il va passer d'un état à l'autre par effet tunnel. L'énergie potentielle de ce système pourrait se schématiser par un double puits séparé par une barrière comme celui que nous venons d'étudier. La fréquence d'oscillation de la molécule d'ammoniac est utilisée dans des systèmes d'horloges atomiques.

On a représenté sur la figure 8 comment la probabilité de présence, initialement concentrée dans la partie « gauche » du puits de potentiel ($x < a/2$), s'équilibre, puis bascule dans la partie « droite » du potentiel ($x > a/2$) avant de revenir à sa valeur initiale. Le cycle se reproduit à la période suivante. On remarquera que la probabilité de présence totale, $\int_0^a \rho(x, t) dx$ est bien égale à 1 quel que soit t . Nous laissons au lecteur le soin de le vérifier.

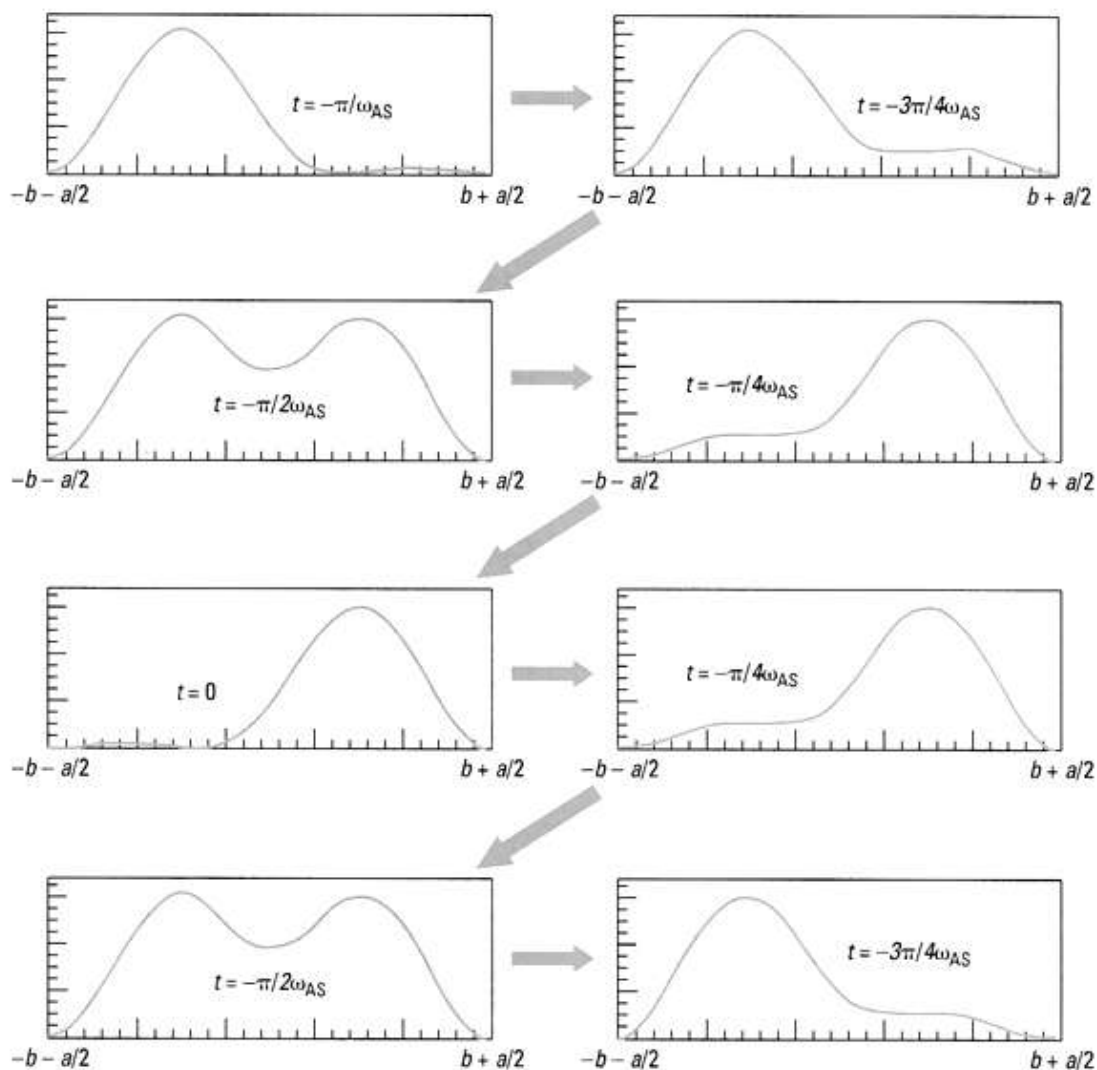


Fig 8. Évolution d'un système dans un état résultant de la superposition des deux états stationnaires symétrique S et antisymétrique A .

Exercice 8 : () Barrière de potentiel, effet tunnel**

1. Avec $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ et $q = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$, la résolution de l'équation de Schrödinger conduit à la forme de la fonction d'onde dans les trois domaines. Dans les régions (1), (2) et (3) on écrit

$$\text{respectivement : } \begin{cases} \varphi_1(x) = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx} & \text{car } E > V \\ \varphi_2(x) = A_2 e^{qx} + B_2 e^{-qx} & \text{car } E < V \\ \varphi_3(x) = A_3 e^{ikx} + B_3 e^{-ikx} & \text{car } E > V \end{cases}$$

⇒ Méthode 18.1

Pour tenir compte de l'absence de source en $+\infty$, on est conduit à poser $B_3 = 0$, ainsi : $\varphi_3(x) = A_3 e^{ikx}$.

2. Les conditions de raccordement, s'écrivent en $x = 0$: $\begin{cases} A_1 + B_1 = A_2 + B_2 \\ ik(A_1 - B_1) = q(A_2 - B_2) \end{cases}$,

$$\text{et en } x = a : \begin{cases} A_2 e^{qa} + B_2 e^{-qa} = A_3 e^{ika} \\ q(A_2 e^{ka} - B_2 e^{-ka}) = ikA_3 e^{ika} \end{cases}$$

⚡ Les discontinuités du potentiel en $x = 0$ et $x = a$ étant finies la fonction d'onde et sa dérivée sont continues.

⇒ Méthode 18.3

Ainsi, en éliminant B_1 , A_2 et B_2 , il vient : $A_1 = A_3 e^{ika} \left[\text{ch}(qa) + \frac{i}{2} \left(\frac{q}{k} - \frac{k}{q} \right) \text{sh}(qa) \right]$.

3. a) Le coefficient de transmission de la barrière est donné par $T = \frac{J_t}{J_i}$ où $J_i = |A_1|^2 \frac{\hbar k_1}{m}$ est la densité linéique de courant de probabilité associée à l'onde plane incidente $A_1 e^{ikx}$ dans la zone (1) et $J_t = |A_3|^2 \frac{\hbar k_1}{m}$ est la densité linéique de courant de probabilité associée à l'onde plane transmise $A_3 e^{ikx}$ dans la zone (3).

⇒ Méthode 18.3

Ainsi, $T = \left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2$. Compte tenu du 2), on obtient alors :

$$\begin{aligned} \frac{1}{T} &= \left| \frac{A_1}{A_3} \right|^2 = \left| e^{ika} \left[\text{ch}(qa) + \frac{i}{2} \left(\frac{q}{k} - \frac{k}{q} \right) \text{sh}(qa) \right] \right|^2 \\ &= \text{ch}^2(qa) + \frac{1}{4} \left(\frac{q}{k} - \frac{k}{q} \right)^2 \text{sh}^2(qa) \end{aligned}$$

En tenant compte de la relation $\text{ch}^2(x) - \text{sh}^2(x) = 1$ et en remarquant que

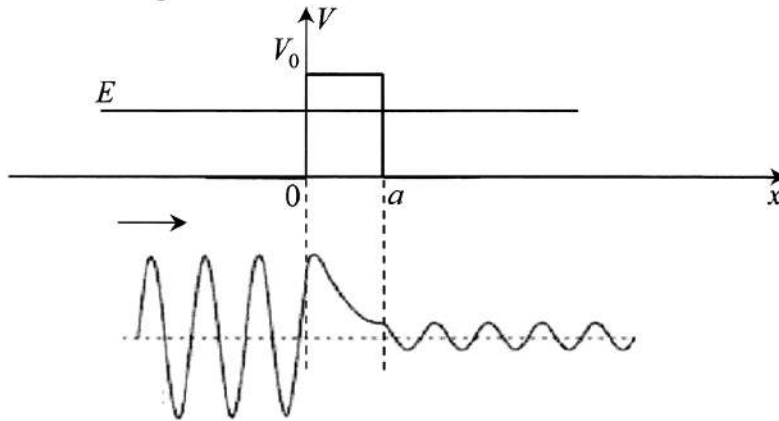
$$1 + \frac{1}{4} \left(\frac{q}{k} - \frac{k}{q} \right)^2 = \frac{1}{4} \left(\frac{q}{k} + \frac{k}{q} \right)^2, \text{ on obtient finalement : } T = \frac{1}{1 + \frac{1}{4} \left(\frac{q}{k} + \frac{k}{q} \right)^2 \text{sh}^2(qa)}$$

b) Lorsque $qa \gg 1$, ce qui correspond à une barrière dont l'épaisseur a est très grande devant $1/q$, terme homogène à une longueur puisque l'argument de l'exponentielle doit être sans dimension, $\text{sh}(qa) \approx \frac{e^{qa}}{2}$, si de plus $\lambda \gg a$, on $q \gg k$ et l'expression approchée de T est :

$$T \approx \frac{16}{(q/k)^2} e^{-2qa} = 16 \left(\frac{E}{V_0 - E} \right)^2 e^{-2qa} \propto e^{-2qa}.$$

Contrairement à ce que prévoit l'analyse classique de la situation, la probabilité de présence de la particule derrière la barrière est non nulle. Tout se passe comme si la particule avait traversé la barrière dans un « tunnel » couplant les zones (1) et (3). Dans la zone (2), classiquement interdite puisque pour $E < V_0$, la particule ne peut pas se propager, mais l'onde de matière associée a la forme d'une onde évanescgente de portée de l'ordre de $1/q$ qui permet tout de même une faible transmission dans le milieu (3) (la situation est l'analogue de la pénétration d'une onde EM dans un conducteur métallique sur une faible épaisseur de peau).

c) Pour un électron d'énergie $E = 1\text{eV}$, avec $V_0 = 2\text{eV}$ et $a = 10^{-10}\text{m}$, la portée dans la zone (2) est de l'ordre de $1/q \approx 1,9 \cdot 10^{-10}\text{m}$. On obtient alors $T \approx 0,79$. Dans le cas où la largeur a de la barrière est telle que $a \leq 1/q$ (ce qui est ici le cas puisqu'on trouve $qa \approx 1/2$), la probabilité de présence de la particule est importante derrière la barrière et la particule a une forte probabilité de traverser par effet tunnel.



Pour un proton de même d'énergie, on a $qa \gg 1$ et T varie en e^{-2qa} . Cette variation fait que le coefficient de transmission de la barrière devient très faible, en effet, il n'est plus que de l'ordre de $T \approx 5 \cdot 10^{-19}$. La probabilité pour que le proton franchisse la barrière est donc quasi-nulle.

4. Pour une barrière épaisse $qa \gg 1$ et d'après ce qui précède, la probabilité de présence $P(x+dx)$ de la particule en $x+dx$, est liée à $P(x)$ par :

$$P(x+dx) = P(x)e^{-2q(x)dx} \approx P(x)(1 - 2q(x)dx). \text{ Ainsi, } P(x+dx) - P(x) \approx -2q(x)dxP(x)$$

donc $\frac{dP(x)}{P(x)} \approx -2q(x)dx$, de sorte que $\ln P(x) \approx \int_x^{x+dx} -2q(u)du + cte$, soit

$$P(x) \approx cte' \exp\left(\int_x^{x+dx} -2q(u)du\right). \text{ En écrivant le coefficient de transmission sous la forme}$$

d'un rapport de probabilité $T = \frac{P(x_2)}{P(x_1)}$, et compte tenu de l'expression de $q(x)$, il vient :

$$T \approx \exp\left[-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(V(x) - E)} dx\right].$$