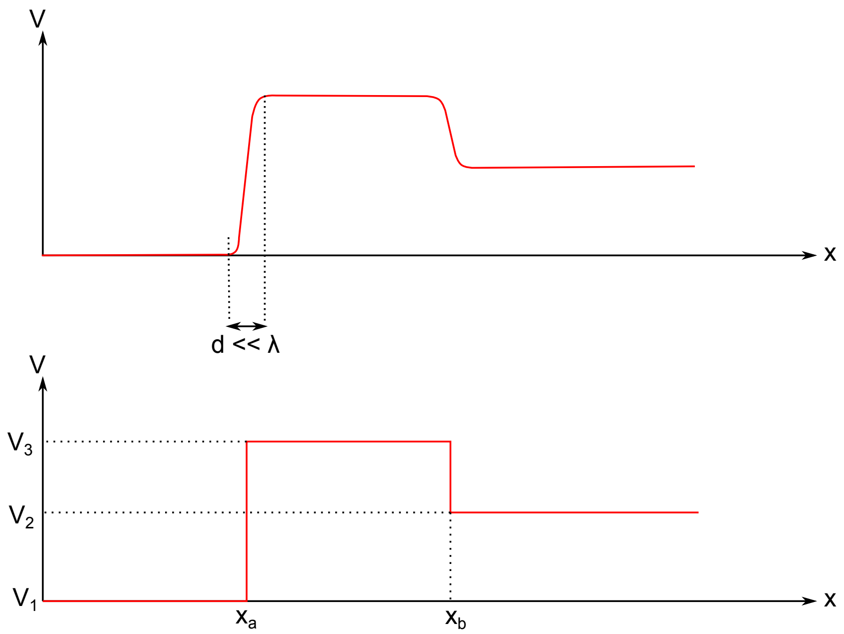
Particule dans un potentiel constant par morceaux

1. Introduction

On s'intéresse au mouvement d'une particule matérielle (et non relativiste) dans un problème unidirectionnel. L'interaction de cette particule avec les autres particules de son environnement est représentée par une énergie potentielle $V(x)$. L'état quantique de la particule est décrit par la fonction d'onde $\psi(x,t)$, qui obéit à l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + V(x)\psi \tag{1}$$

On se limite à des problèmes où l'énergie potentielle est pratiquement constante sur de larges intervalles de x. Ses variations se font sur des régions petites par rapport à la longueur d'onde de la particule. Dans ces conditions, on peut représenter le potentiel par une fonction constante par morceaux, qui présente des points de discontinuité.



La fonction d'onde est solution d'une équation différentielle du second ordre par rapport à x. Lorsque le potentiel a une valeur finie, elle doit donc être continue et dérivable deux fois en tout point. En un point de discontinuité du potentiel, tel que le point x_a, on impose les deux conditions de continuité :

$$\psi(x_a^-,t) = \psi(x_a^+,t) \tag{2}$$
$$\frac{\partial\psi}{\partial x}(x_a^-,t) = \frac{\partial\psi}{\partial x}(x_a^+,t) \tag{3}$$

Pour obtenir une solution de l'équation de Schrödinger pouvant représenter l'état d'une particule, on commence par rechercher une solution donnant un état stationnaire, c'est-à-dire un état d'énergie E bien définie :

$$\psi(x,t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t}\phi(x) \tag{4}$$

La fonction d'onde $\phi(x)$ doit vérifier l'équation de Schrödinger indépendante du temps :

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} + \frac{2m(E-V(x))}{\hbar^2}\phi = 0 \tag{5}$$

Pour chaque intervalle où le potentiel est constant, il s'agit d'une équation linéaire à coefficients constants dont la solution analytique est connue. La fonction $\phi(x)$ et sa dérivée doivent être continues en tout point où le potentiel est fini.

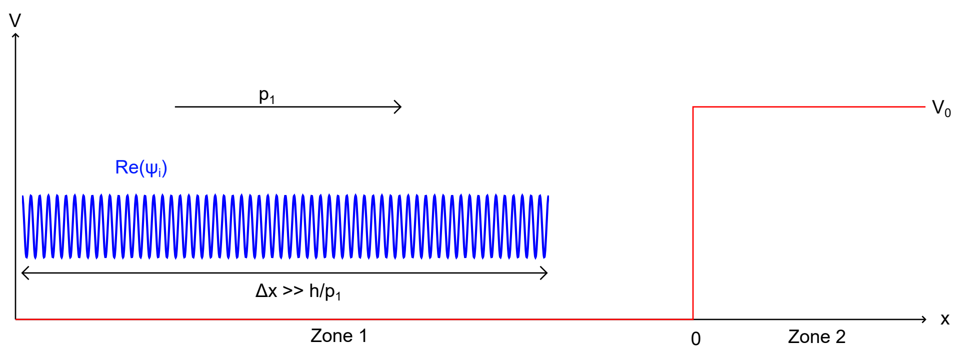
2. Marche de potentiel

2.a. Hypothèses

On considère une particule matérielle se propageant à l'état libre ($V = 0$) dans le sens de x croissant et rencontrant en $x = 0$ une marche de potentiel de hauteur V_0. Une particule doit être en principe représentée par un paquet d'ondes. On suppose néanmoins que la largeur Δx de ce paquet est très grande par rapport à la longueur d'onde h/p. D'après l'inégalité d'Heisenberg, l'impulsion de la particule a une indétermination Δp très faible par rapport à l'impulsion moyenne p. Avant de rencontrer la marche, la particule libre peut donc être représentée par un état stationnaire d'impulsion p_1 et d'énergie $E = p_1^2/(2m)$ dont la fonction d'onde est (onde incidente) :

$$\psi_i(x,t) = Ae^{i\left(\frac{p_1}{\hbar}x - \frac{E}{\hbar}t\right)} \tag{6}$$

On ne perdra pas de vue que cette fonction d'onde correspond en toute rigueur à une particule non localisée, dont la densité de probabilité de position ne dépend pas de x. L'hypothèse faite ici est analogue à celle que l'on fait en optique, lorsqu'on assimile une onde quasi monochromatique à une onde parfaitement monochromatique. En tout état de cause, la solution obtenue pour une particule incidente non localisée pourra servir pour développer une solution plus réaliste, c'est-à-dire un paquet d'ondes formé d'une somme d'ondes de ce type (de différentes impulsions).



La particule peut être soit réfléchie dans la zone 1, soit transmise dans la zone 2. Au cours de ce processus, l'énergie E reste constante. On peut donc rechercher une solution de l'équation de Schrödinger sous forme d'état stationnaire d'énergie E, comme définie ci-dessus. On a donc pour la particule incidente (loin de la marche), une fonction d'onde de la forme :

$$\phi_i(x) = A_1 e^{ik_1 x} \tag{7}$$

On utilise ici le nombre d'onde k_1, pour bien voir l'analogie avec un problème de réflexion d'onde électromagnétique. La relation de de Broglie s'écrit :

$$k_1 = \frac{p_1}{\hbar} \tag{8}$$

La particule incidente est libre car le potentiel est constant pour $x < 0$. De plus, ce potentiel est nul donc :

$$p_1 = \hbar k_1 = \sqrt{2mE} \tag{9}$$

Lorsque cette onde rencontre la barrière, il apparaît une onde réfléchie de la forme :

$$\phi_r(x) = B_1 e^{-ik_1 x} \tag{10}$$

Cette onde correspond à une particule libre réfléchie par la marche. Dans la zone 1, la solution de l'équation de Schrödinger est donc la superposition d'une onde incidente et d'une onde réfléchie :

$$\phi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x} \tag{11}$$

La solution générale de l'équation de Schröndinger dans la zone 1 est donc la superposition de deux ondes se propageant en sens inverse. Cela signifie que le sens de l'impulsion est indéterminée. Une mesure de la composante de l'impulsion sur l'axe x peut donc donner ces deux impulsions, avec une probabilité proportionnelle respectivement à $|A_1|^2$ et $|B_1|^2$. Nous avons vu cependant que les fonctions d'onde de ce type doivent en réalité être combinées pour former des paquets d'onde de taille Δx fini. En conséquence, la zone de recouvrement des deux termes, dans laquelle le sens de déplacement de la particule est indéterminé, est en fait une zone finie située juste à gauche de la marche, de largeur Δx.

2.b. Onde transmise

On considère tout d'abord le cas où l'énergie de la particule incidente est supérieure à la hauteur de la marche :

$$E > V_0 \tag{12}$$

En mécanique classique, la particule poursuivrait son mouvement dans le sens de x croissant, avec une énergie cinétique :

$$\frac{1}{2}mv_2^2 = \frac{1}{2}mv_1^2 - V_0 \tag{13}$$

Dans la zone 2, l'équation de Schrödinger est :

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} + \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}\phi = 0 \tag{14}$$

La solution générale dans cette zone est donc :

$$\phi_2(x) = A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x} \tag{15}$$

avec :

$$p_2 = \hbar k_2 = \sqrt{2m(E - V_0)} \tag{16}$$

L'énergie est conservée alors que l'impulsion (donc la longueur d'onde) est modifiée.

Dans l'hypothèse où la zone 2 est semi-infinie, on élimine l'onde se propageant dans le sens de x décroissant, qui correspond à une particule venant de la droite. Il reste alors :

$$\phi_2(x) = A_2 e^{ik_2 x} \tag{17}$$

La constante A_1 pour la particule incidente est arbitraire. Puisque l'onde incidente n'est pas de carré sommable, cette constante ne peut être déterminée par une condition de normalisation. On définit les coefficients de réflexion et de transmission :

$$r = \frac{B_1}{A_1} \tag{18}$$

$$\tau = \frac{A_2}{A_1} \tag{19}$$

Pour les déterminer, il faut écrire la continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée :

$$\phi_1(0) = \phi_2(0) \tag{20}$$

$$\frac{d\phi_1}{dx}(0) = \frac{d\phi_2}{dx}(0) \tag{21}$$

Les deux équations sont :

$$1 + r = \tau \tag{22}$$

$$ik_1(1 - r) = ik_2 \tau \tag{23}$$

Le calcul conduit à

$$r = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} = \frac{\sqrt{E} - \sqrt{E - V_0}}{\sqrt{E} + \sqrt{E - V_0}} \tag{24}$$

$$\tau = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} = \frac{2\sqrt{E}}{\sqrt{E} + \sqrt{E - V_0}} \tag{25}$$

Pour interpréter ces résultats en terme probabiliste, on doit considérer la densité de courant de probabilité de l'onde incidente, de l'onde réfléchie et de l'onde transmise (composantes du vecteur sur l'axe). Ces trois ondes considérées séparément sont celles de particules libres et on peut donc écrire :

$$J_i = \frac{\hbar k_1}{m}|A_1|^2 \tag{26}$$

$$J_r = -\frac{\hbar k_1}{m}|B_1|^2 \tag{27}$$

$$J_\tau = \frac{\hbar k_2}{m}|A_2|^2 \tag{28}$$

Considérons une expérience dans laquelle les particules sont émises à partir d'un point d'abscisse $x < 0$ à une distance de la barrière grande devant la largeur Δx du paquet d'ondes. Un détecteur est placé au même endroit pour détecter la particule si elle revient à son point de départ. Cette éventualité est imprévisible mais la répétition de l'expérience avec un grand nombre de particules permet d'obtenir une probabilité de réflexion.

La probabilité pour que la particule soit réfléchie est égale au rapport du courant de probabilité incident sur le courant de probabilité réfléchi. C'est l'analogue du coefficient de réflexion en intensité des ondes électromagnétiques.

$$R = \frac{|J_r|}{|J_i|} = |r|^2 = \left(\frac{\sqrt{E}-\sqrt{E-V_0}}{\sqrt{E}+\sqrt{E-V_0}}\right)^2 \tag{29}$$

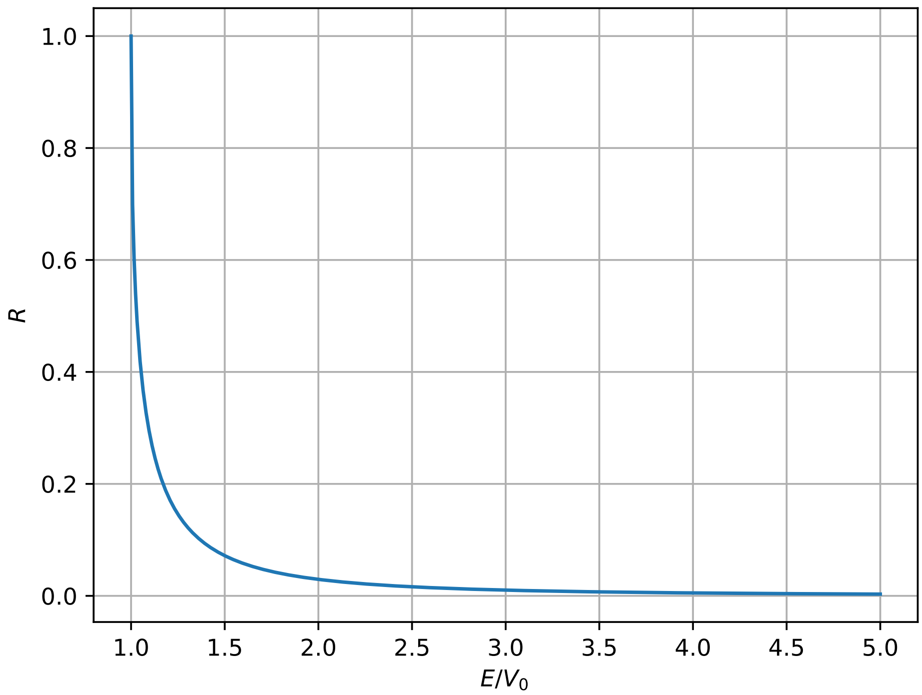
La probabilité pour que la particule continue son mouvement dans la zone 2 est égale au coefficient de transmission des densités de courant de probabilité :

$$T = \frac{|J_\tau|}{|J_i|} = \frac{k_2}{k_1}|\tau|^2 = \frac{4k_1k_2}{(k_1+k_2)^2} = \frac{4\sqrt{E(E-V_0)}}{(\sqrt{E}+\sqrt{E-V_0})^2} \tag{30}$$

Contrairement à une particule classique qui continue son chemin dans la même direction avec une baisse de sa vitesse, la particule quantique a une probabilité non nulle d'être réfléchie.

On trace la probabilité de réflexion en fonction du rapport $u = E/V_0$, qui est supérieur à 1.

```
import numpy
from matplotlib.pyplot import *

def R(u):
    u1 = numpy.sqrt(u)
    u2 = numpy.sqrt(u-1.0)
    return numpy.square(u1-u2)/numpy.square(u1+u2)

u = numpy.linspace(1.0,5.0,500)
figure()
plot(u,R(u))
xlabel(r"$E/V_0$")
ylabel(r"$R$")
grid()
```



Lorsque l'énergie de la particule ne dépasse pas le double de la hauteur de la marche, la probabilité de réflexion n'est pas négligeable. Si l'énergie est juste au dessus de la hauteur de la marche, la probabilité de transmission est très faible et celle de réflexion est pratiquement égale à 1. Ce phénomène est de nature quantique ; une particule classique serait toujours transmise dans la zone 2.

L'animation Réflexion d'une onde de matière sur une marche de potentiel montre l'évolution de la fonction d'onde.

On remarque que la particule transmise a une impulsion p_2 inférieure à p. Autrement dit, la longueur d'onde augmente lors de la transmission.

2.c. Onde évanescente

Considérons à présent le cas où l'énergie de la particule est inférieure à la hauteur de la marche :

$$E < V_0 \tag{31}$$

Pour une particule classique, il y a réflexion sur la marche de potentiel.

Dans la zone 2, l'équation de Schrödinger s'écrit :

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} - \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}\phi = 0 \tag{32}$$

On pose donc :

$$\hbar\alpha_2 = \sqrt{2m(V_0 - E)} \tag{33}$$

La solution dans la zone 2 s'écrit :

$$\phi_2(x) = A_2 e^{-\alpha_2 x} + B_2 e^{\alpha_2 x} \tag{34}$$

La zone 2 étant semi-infinie, on doit éliminer le terme qui tend vers l'infini et on a donc $B_2 = 0$. L'onde dans la zone 2 est une onde évanescente. La continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée s'écrit :

$$1 + r = \tau \tag{35}$$

$$ik_1(1 - r) = -\alpha_2 \tau \tag{36}$$

On obtient :

$$r = \frac{ik_1 + \alpha_2}{ik_1 - \alpha_2} \tag{37}$$

$$\tau = \frac{2ik_1}{ik_1 + \alpha_2} \tag{38}$$

La probabilité de réflexion est :

$$R = |r|^2 = 1 \tag{39}$$

La particule est toujours réfléchie, comme en mécanique classique.

Il n'y a pas de propagation dans le milieu 2. La probabilité de détecter une particule à grande distance de la marche est nulle. Il y a néamoins une probabilité de présence non nulle au voisinage de la marche, sous la forme d'une onde évanescente. La densité de probabilité est :

$$\rho_2(x) = A|\tau|^2 e^{-2\alpha_2 x} \tag{40}$$

Cette onde évanescente est similaire à l'onde évanescente dans un plasma lorsque la fréquence est inférieure à la fréquence de coupure. On peut définir une profondeur de pénétration dans la zone 2 :

$$\delta = \frac{1}{2\alpha_2} = \frac{\hbar}{2\sqrt{2m(V_0 - E)}} \tag{41}$$

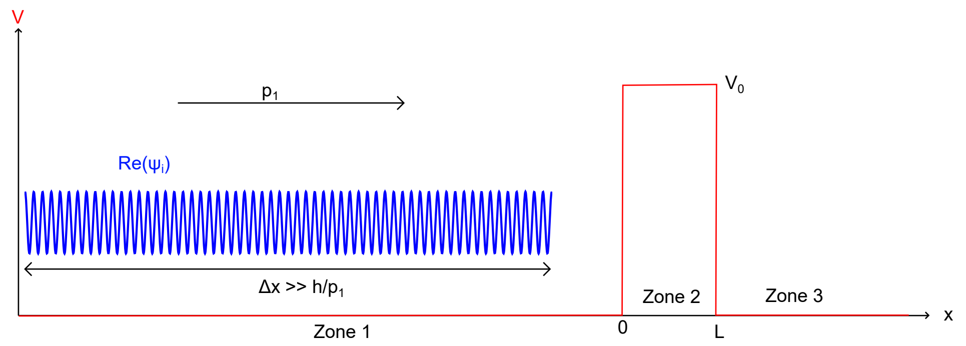
Par exemple, lorsque $E = V_0/2$, la profondeur de pénétration est égale à la moitié de la longueur d'onde de l'onde incidente. Lorsque l'énergie s'approche de la hauteur de la marche, la profondeur de pénétration augmente.

Lorsque la hauteur de la barrière tend vers l'infini, la profondeur de pénétration tend vers zéro. Pour $x >= 0$, la fonction d'onde est donc nulle.

3. Barrière de potentiel

3.a. Hypothèses

On considère une barrière de potentiel de largeur L et de hauteur V_0.



Comme pour l'exemple précédent, une particule d'impulsion p_1 et d'énergie E vient de la gauche. La fonction d'onde dans le milieu 1 est

$$\phi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x} \tag{42}$$

avec

$$p_1 = \hbar k_1 = \sqrt{2mE} \tag{43}$$

Le première terme correpond à la particule qui se dirige vers la barrière, dans le sens de x croissant. Le second terme correspond à la particule réfléchie par la barrière.

En réalité, l'impulsion comporte une indétermination Δp, ce qui fait que la particule est localisée dans un paquet de largeur Δx, conformément à l'inégalité d'Heisenberg. On suppose que l'indétermination sur l'impulsion est grande devant l'impulsion moyenne, ce qui revient à dire que la largeur du paquet d'ondes et grande devant la longueur d'onde moyenne.

3.b. Effet tunnel

On se place dans le cas où l'énergie de la particule est inférieure à la hauteur de la barrière :

$$E < V_0 \tag{44}$$

Pour la zone 2, on pose

$$\hbar\alpha_2 = \sqrt{2m(V_0 - E)} \tag{45}$$

La solution dans la zone 2 s'écrit :

$$\phi_2(x) = A_2 e^{-\alpha_2 x} + B_2 e^{\alpha_2 x} \tag{46}$$

Dans le milieu 3, le nombre d'onde k_1 est le même que dans le milieu 1. On garde seulement une onde se propageant dans le sens de x croissant, car la particule transmise ne revient pas.

$$\phi_3(x) = A_3 e^{ik_1 x} \tag{47}$$

Cette onde représente la particule lorsqu'elle a franchi la barrière.

La continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée en $x = 0$ et $x = L$ s'écrivent :

$$A_1 + B_1 = A_2 + B_2 \tag{48}$$

$$ik(A_1 - B_1) = \alpha_2(-A_2 + B_2) \tag{49}$$

$$A_2 e^{-\alpha_2 L} + B_2 e^{\alpha_2 L} = A_3 e^{ik_1 L} \tag{50}$$

$$\alpha_2(-A_2 e^{-\alpha_2 L} + B_2 e^{\alpha_2 L}) = ik_1 A_3 e^{ik_1 L} \tag{51}$$

Il y a 4 équations pour 5 constantes inconnues, mais on s'intéresse en fait aux rapports des constantes par A_1. On peut donc considérer que A_1 est donnée (ou bien tout diviser par A_1), ce qui conduit à 4 équations linéaires pour les 4 constantes B_1, A_2, B_2, A_3. La résolution formelle de ces équations étant laborieuse, nous donnerons seulement les résultats.

La probabilité de transmission de la particule entre la zone 1 et la zone 3 est le rapport des densités de courant de probabilité :

$$T = \frac{J_3}{J_1} = \frac{k_1 |A_3|^2}{k_1 |A_1|^2} \tag{52}$$

Posons $u = E/V_0$, qui est inférieur à 1. La calcul conduit à :

$$T = \frac{1}{1 + \frac{(e^{\alpha_2 L} - e^{-\alpha_2 L})^2}{16u(1-u)}} \tag{53}$$

avec

$$\alpha_2 L = \frac{L\sqrt{2mV_0}}{\hbar}\sqrt{1-u} \tag{54}$$

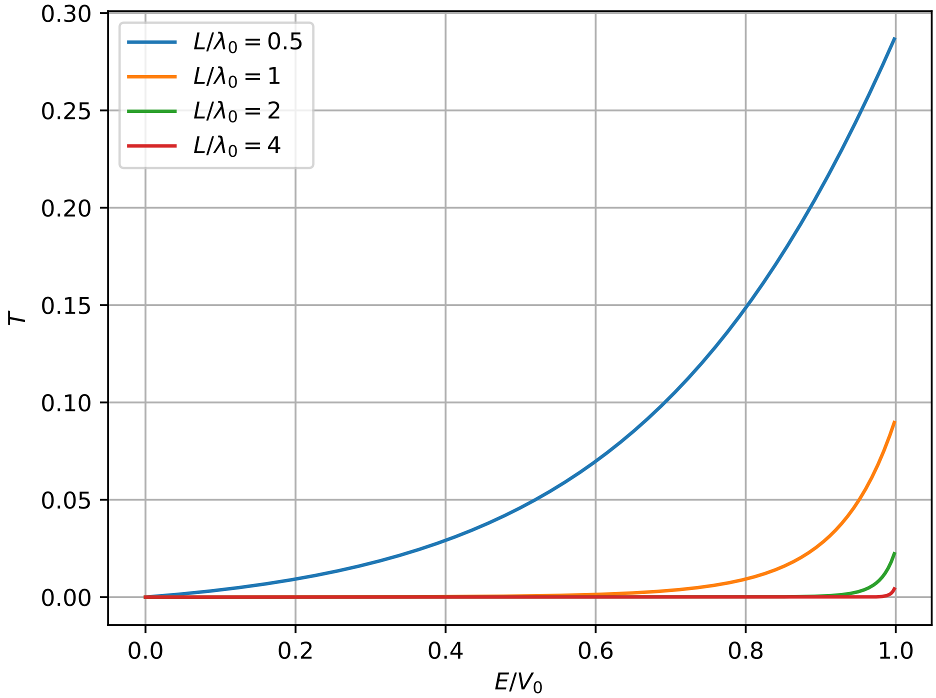
La probabilité de réflexion est $R = 1 - T$.

Introduisons la longueur d'onde λ_0 d'une particule qui aurait l'énergie V_0 :

$$\alpha_2 L = 2\pi \frac{L}{\lambda_0}\sqrt{1-u} \tag{55}$$

On trace la courbe de transmission en fonction de u pour différentes valeurs du rapport L/λ_0 :

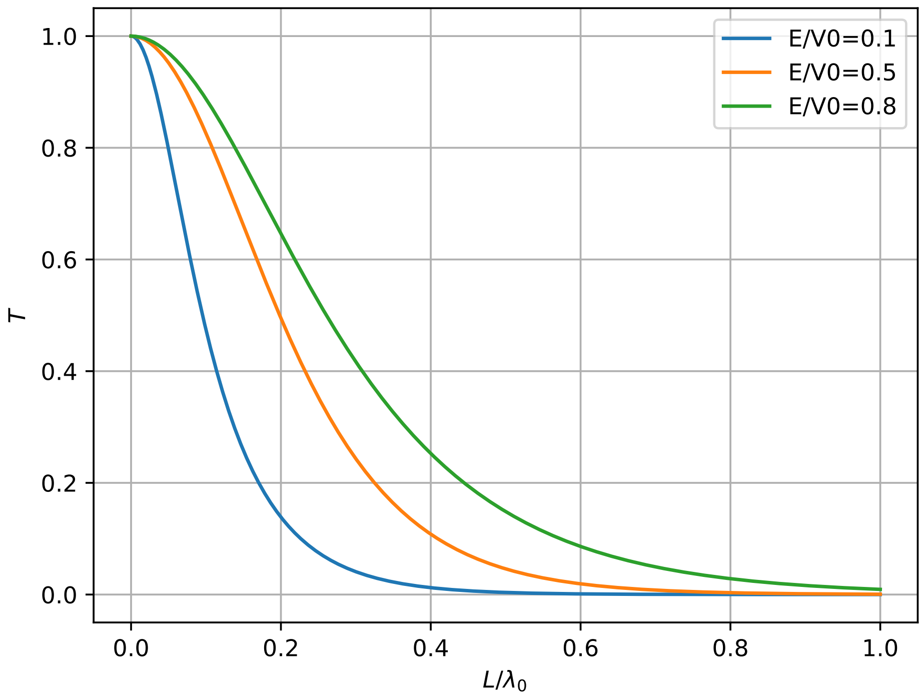
```
def T(L,u):
    e = numpy.exp(2*numpy.pi*L*numpy.sqrt(1-u))
    return 1.0/(1.0+numpy.square(e-1.0/e)/(16*u*(1.0-u)))

u = numpy.linspace(0.0,1.0,500)
figure()
plot(u,T(0.5,u),label=r"$L/\lambda_0 = 0.5$")
plot(u,T(1,u),label=r"$L/\lambda_0 = 1$")
plot(u,T(2,u),label=r"$L/\lambda_0 = 2$")
plot(u,T(4,u),label=r"$L/\lambda_0 = 4$")
xlabel(r"$E/V_0$")
ylabel(r"$T$")

legend(loc="upper left")
grid()
```



La probabilité de transmission est forte lorsque la largeur de la barrière est du même ordre de grandeur ou plus grande que la longueur d'onde λ_0. Cette probabilité augmente avec l'énergie de la particule. Lorsque celle-ci est proche de la hauteur de la barrière, la longueur d'onde de la particule est proche de λ_0.

Il est aussi intéressant de tracer la probabilité de transmission en fonction du rapport L/λ_0, pour des valeurs fixées du rapport E/V_0 :

```
L = numpy.linspace(0.0,1,500)
figure()
plot(L,T(L,0.1),label="E/V0=0.1")
plot(L,T(L,0.5),label="E/V0=0.5")
plot(L,T(L,0.8),label="E/V0=0.8")
xlabel(r"$L/\lambda_0$")
ylabel(r"$T$")
grid()
legend(loc="upper right")
```



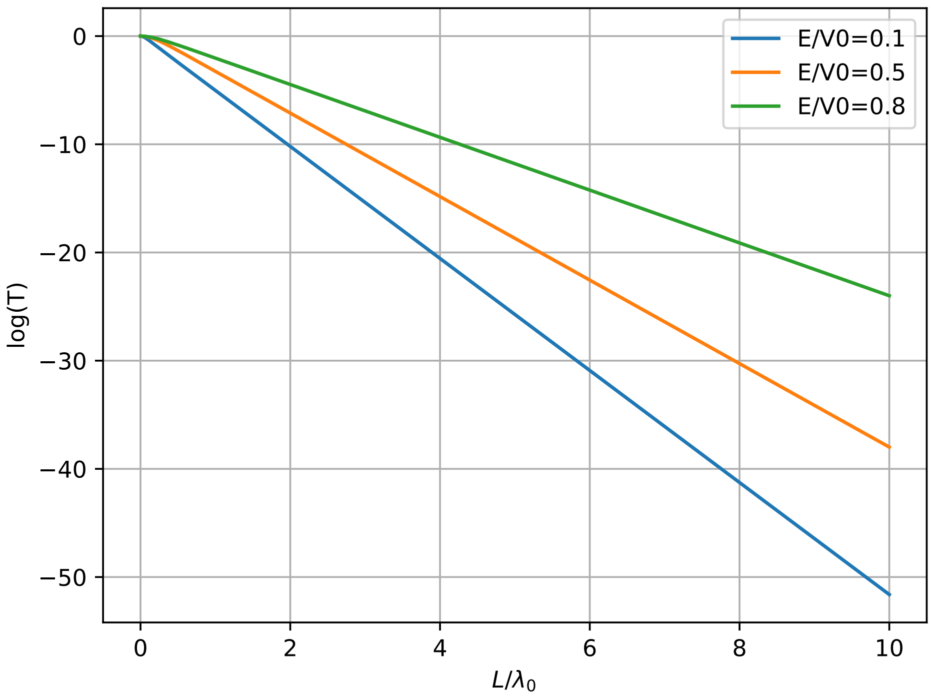
Contrairement au cas de la mécanique classique newtonienne, la particule a une probabilité non nulle de franchir la barrière, bien que son énergie soit inférieure à la hauteur de celle-ci. Ce phénomène est appelé *effet tunnel*. Il se manifeste lorsque la largeur de la barrière est de l'ordre de grandeur de la longueur d'onde λ_0. Une particule peut donc pénétrer dans la zone 3 et poursuivre son mouvement, avec une probabilité d'autant plus forte que la largeur de la barrière est faible et que l'énergie est proche de la hauteur de la barrière.

Lorsque la largeur de la barrière est grande devant la longueur d'onde λ_0, et lorsque u n'est pas proche de 1, on peut donner une forme approximative de la probabilité de transmission :

$$T = 16u(1-u)\exp\left(-\frac{2L}{\lambda_0}\sqrt{1-u}\right) \tag{56}$$

On a alors une variation exponentielle avec la largeur de la barrière. Cette loi peut être mise en évidence en traçant le logarithme (décimal) du coefficient de transmission :

```
L = numpy.linspace(0.0,10.0,500)
figure()
plot(L,numpy.log10(T(L,0.1)),label="E/V0=0.1")
plot(L,numpy.log10(T(L,0.5)),label="E/V0=0.5")
plot(L,numpy.log10(T(L,0.8)),label="E/V0=0.8")
xlabel(r"$L/\lambda_0$")
ylabel("log(T)")
grid()
legend(loc="upper right")
```



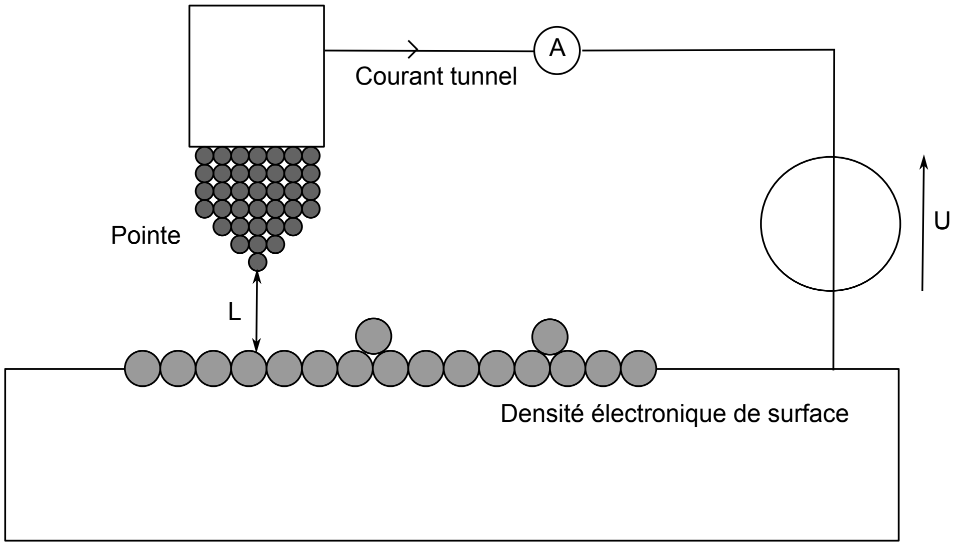
On constate que cette dépendance exponentielle est valable dès que $L > 2\lambda_0$. Lorsque la barrière est large (devant λ_0), le coefficient de transmission est très faible. Cependant, si le nombre de particules envoyées vers la barrière est très grand, le nombre de particules la franchissant peut être suffisant pour être détecté.

Pour une particule dont l'indétermination de position Δx est plus faible, on doit faire le calcul avec un paquet d'ondes. Un paquet d'ondes est défini par un spectre d'impulsions. Pour chaque composante spectrale, le calcul précédent fournit l'onde réfléchie et l'onde transmise. Une autre approche consiste à effectuer une intégration numérique de l'équation de Schrödinger, qui est analogue à l'intégration numérique de l'équation de diffusion. La simulation Équation de Schrödinger à une dimension permet de voir l'effet tunnel pour un paquet d'ondes. Lorsque la paquet d'ondes touche la barrière, on remarque la formation d'interférences dans la zone 1. Dans le calcul ci-dessus pour un paquet de taille infinie, ces interférences viennent de la superposition de l'onde incidente et de l'onde réfléchie.

La vidéo suivante montre le résultat du calcul numérique pour un paquet d'ondes à deux dimensions. La hauteur de la barrière est $1,5$ fois l'énergie moyenne de la particule. Les couleurs permettent de mieux visualiser la densité de probabilité, croissante dans l'ordre bleu-vert-jaune-rouge.

3.c. Application : microscope à effet tunnel

Le microscope à effet tunnel a été inventé en 1981. Il permet d'explorer la densité électronique à la surface d'un métal, avec une résolution de l'ordre de la taille d'un atome. La figure suivante montre le principe.

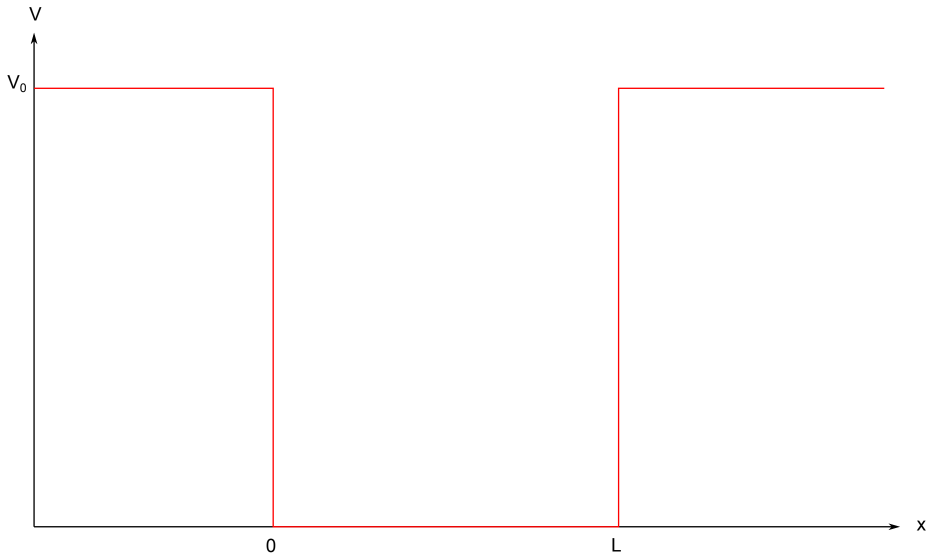


Une pointe métallique très fine est approchée à quelques nanomètres de la surface du métal à explorer. Pour les électrons de conduction du métal, il y a une barrière d'énergie potentielle à franchir pour passer du métal à la pointe. La largeur L de cette barrière est la distance entre la pointe et la surface. Les électrons n'ont pas assez d'énergie pour franchir cette barrière en grand nombre. Néanmoins, si la distance entre la pointe et la surface est assez faible, et si une petite différence de potentiel est appliquée entre les deux, il y a une probabilité de passage par effet tunnel, qui est détectée par une mesure du courant électrique dans la pointe. Ce courant électrique varie de manière exponentielle avec la distance L, ce qui le rend très sensible à cette dernière. En pratique, la pointe est déplacée parallèlement à la surface et un dispositif d'asservissement fait varier la distance pour maintenir le courant constant. Le signal d'asservissement donne accès à la distance, avec une résolution de l'ordre de la taille des atomes. Le balayage de la surface permet de reconstituer une topographie de sa structure atomique, plus précisément de sa densité électronique.

4. Puits de potentiel infini

4.a. Hypothèses

Ue particule est dite *confinée*, ou dans un *état lié*, lorsque sa probabilité de présence est nulle (ou négligeable) en dehors d'un intervalle de largeur finie. Par opposition, les particules étudiées dans les deux exemples précédents (barrière et marche de potentiel) sont dans un état de *diffusion*. On s'intéresse à une particule confinée dans un puits de potentiel, défini sur la figure suivante.



Ce type de potentiel constitue un modèle simplifié pour résoudre des problèmes de particules confinées, par exemple un électron confiné dans un atome. On dit aussi que la particule est confinée dans une boîte.

Lorsque $V_0 \to \infty$, on parle de puits de potentiel infini. Dans ce cas, la probabilité de présence de la particule en dehors de l'intervalle $[0, L]$ est nulle. Il faut alors résoudre l'équation de Schrödinger

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} \tag{57}$$

Sur les bords du puits, en $x = 0$ et $x = L$, la fonction d'onde doit s'annuler (mais pas sa dérivée) :

$$\psi(0, t) = \psi(L, t) = 0 \tag{58}$$

Comme précédemment, on commence par rechercher des états stationnaires d'énergie constante, pour lesquelles l'équation de Schrödinger indépendante du temps doit être résolue, avec un potentiel nul :

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\phi = 0 \tag{59}$$

4.b. États stationnaires et quantification de l'énergie

On pose :

$$p = \hbar k = \sqrt{2mE} \tag{60}$$

L'équation de Schrodinger s'écrit :

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} + k^2\phi = 0 \tag{61}$$

Les conditions limites sont :

$$\phi(0) = \phi(L) = 0 \tag{62}$$

Ce problème est identique à celui d'une onde électromagnétique dans une cavité unidimensionnelle, étudiée dans le chapitre Ondes électromagnétiques et conducteurs. Il est aussi analogue au problème d'une corde vibrante dont les deux extrémités sont fixées.

La solution générale de l'équation de Schrödinger est :

$$\phi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \tag{63}$$

Les conditions limites en $x = 0$ et $x = L$ imposent :

$$A + B = 0 \tag{64}$$

$$Ae^{ikL} + Be^{-ikL} = 0 \tag{65}$$

On déduit de ce système la condition $\sin(kL) = 0$, qui implique :

$$kL = n\pi \tag{66}$$

où n est un entier strictement positif (pour une valeur nulle, il n'y aurait pas de particule).

Finalement la solution s'écrit :

$$\phi(x) = A' \sin(kx) \tag{67}$$

On en déduit que l'impulsion de la particule ne peut prendre que des valeurs discrètes :

$$p = n\frac{\hbar\pi}{L} \tag{68}$$

Autrement dit, la demi longueur d'onde de la particule est un sous-multiple de la largeur du puits :

$$\frac{\lambda}{2} = \frac{L}{n} \tag{69}$$

C'est exactement le résultat obtenu pour une onde électromagnétique dans une cavité, ou pour une corde vibrante de longueur L fixée à ses extrémités.

L'énergie de la particule est

$$E_n = \frac{p^2}{2m} = n^2\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2} \tag{70}$$

L'énergie d'une particule confinée dans une boîte est quantifiée : elle ne peut prendre que des valeurs discrètes, ici proportionnelles au carré du nombre entier n. Le nombre n est un *nombre* *quantique*, qui définit l'état stationnaire de la particule, donc son énergie. D'une manière générale, une particule confinée a une énergie quantifiée. Par exemple, un électron confiné dans un atome a une énergie quantifiée, comme le montrent les expériences de spectroscopie.

Considérons la fonction d'onde de l'état stationnaire défini par le nombre quantique n :

$$\psi(x,t) = \psi_0 e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}\sin(n\frac{\pi}{L}x) \tag{71}$$

Contrairement à la fonction d'onde de l'état stationnaire d'une particule libre (onde de de Broglie), le module de ψ_0 peut être déterminé par la condition de normalisation :

$$\int_0^L |\psi_0|^2\sin^2(n\frac{\pi}{L}x)\,dx = 1 \tag{72}$$

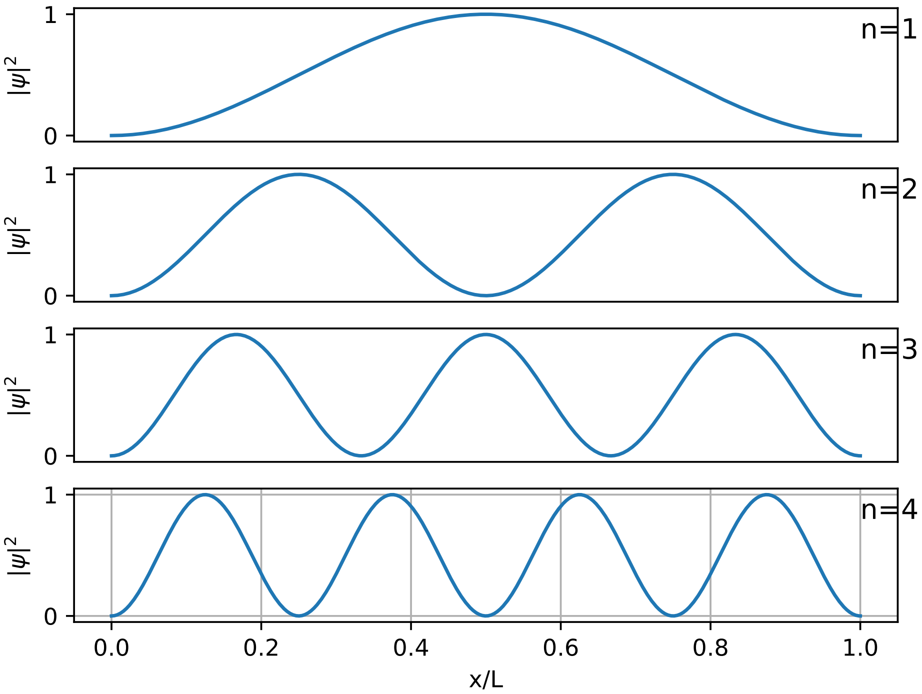
Pour l'état stationnaire de nombre quantique n, la densité de probabilité de présence de la particule s'écrit :

$$\rho_n(x) = |\psi_0|^2\sin^2(n\frac{\pi}{L}x) \tag{73}$$

Ce résultat correspond exactement à la densité d'énergie d'une onde électromagnétique stationnaire dans une cavité. L'animation Modes propres d'une cavité montre l'évolution temporelle de la fonction d'onde et la densité de probabilité, qui est indépendante du temps pour un état stationnaire.

Voici le tracé de la densité de probabilité pour les premiers modes :

```
def rho(n,x):
    return numpy.square(numpy.sin(n*numpy.pi*x))

figure()
x = numpy.linspace(0,1.0,500)
sp = [411,412,413,414]
for n in range(1,5):
    xticks([])
    subplot(sp[n-1])
    plot(x,rho(n,x))
    text(1,0.8,"n=%d"%n,fontsize=12)
    ylabel(r"$|\psi|^2$")
xlabel("x/L")
xticks()
grid()
```



Un particule confinée dans un potentiel quadratique (oscillateur harmonique) présente aussi une quantification de son énergie, mais avec des niveaux d'énergie régulièrement espacés. Voir à ce sujet Particule confinée à une dimension.

4.c. État fondamental

L'état fondamental est l'état de plus basse énergie, défini par $n = 1$. Son énergie est :

$$E_1 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2} \tag{74}$$

Contrairement à une particule classique qui peut être théoriquement au repos, une particule quantique confinée a une plus basse énergie non nulle, associée à une impulsion non nulle :

$$p_1 = \frac{\hbar\pi}{L} \tag{75}$$

Pour cette état fondamental, la fonction d'onde s'écrit :

$$\psi_1(x,t) = \frac{1}{2i}\psi_0\left(e^{i\left(\frac{p_1}{\hbar}x-\frac{E_1}{\hbar}t\right)} - e^{i\left(-\frac{p_1}{\hbar}x-\frac{E_1}{\hbar}t\right)}\right) \tag{76}$$

Il s'agit de la somme de deux ondes de de Broglie d'amplitudes opposées, l'une se propageant dans un sens et correspondant à une particule d'impulsion p_1, l'autre se propageant dans l'autre sens et correspondant à une particule d'impulsion $-p_1$. En conséquence, la direction du mouvement de la particule est indéterminée, ce qui semble logique car elle ne pourrait pas avoir une direction déterminée tout en restant confinée.

l'existence d'une impulsion et d'une énergie minimale peut être retrouvé qualitativement (raisonnement non rigoureux) avec l'inégalité d'Heisenberg, en considérant que l'indétermination sur la position vérifie :

$$\Delta x < L \tag{77}$$

L'inégalité d'Heisenberg s'écrit :

$$\Delta p > \frac{\hbar}{2\Delta x} > \frac{\hbar}{2L} \tag{78}$$

L'indétermination de l'impulsion est donc minorée par une valeur de l'ordre de $\hbar/L$, ce qui montre que l'impulsion ne peut être nulle et donne l'ordre de grandeur de l'impulsion dans l'état fondamental. On remarque par ailleurs que cette analyse simplifiée donne aussi l'ordre de grandeur de l'énergie fondamentale pour un puits de potentiel de forme non rectangulaire.

Pour conclure, ce modèle a mis en évidence deux phénomènes pour une particule quantique confinée : l'existence d'une énergie minimale non nulle et la quantification de l'énergie.

4.d. Superposition d'états stationnaires

La solution générale de l'équation de Schrödinger dans le puits infini est une combinaison linéaire d'états stationnaires :

$$\psi(x,t) = \sum_{n=1}^{N} A_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \sin\left(n\frac{\pi}{L}x\right) \tag{79}$$

Dans cette somme, le nombre quantique a une valeur maximale N, car dans la réalité les puits de potentiel ont bien sûr une hauteur finie.

La condition de normalisation s'applique alors à la fonction d'onde entière (et non aux états stationnaires) :

$$\int_0^L |\psi(x,t)|^2\, dx = 1 \tag{80}$$

Comme le montre l'animation Modes propres d'une cavité, la superposition d'états stationnaires n'est pas stationnaire car la densité de probabilité varie au cours du temps.

Pour voir plus en détail ce phénomène, considérons la superposition de deux états stationnaires :

$$\psi(x,t) = A_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \sin\left(n\frac{\pi}{L}x\right) + A_m e^{-i\frac{mE_m}{\hbar}t} \sin\left(m\frac{\pi}{L}x\right) \tag{81}$$

La densité de probabilité s'écrit :

$$\rho(x,t) = A_n^2 \sin^2\left(n\frac{\pi}{L}x\right) + A_m^2 \sin^2\left(m\frac{\pi}{L}x\right) \tag{82}$$

$$+2Re\left[A_n A_m e^{i\frac{E_n-E_m}{\hbar}t} \sin\left(m\frac{\pi}{L}x\right) \sin\left(n\frac{\pi}{L}x\right)\right] \tag{83}$$

Le dernier terme oscille à une pulsation égale à la différence d'énergie des deux états divisée par la constante de Planck. Si la particule confinée est un électron, il se produit un phénomène de résonance lorsqu'une onde électromagnétique de cette pulsation est envoyée dans le système.

Un exemple plus complexe de superposition d'états stationnaires est le paquet d'ondes, que l'on peut voir dans la simulation Équation de Schrödinger à une dimension. On observe alors la réflexion du paquet d'ondes sur les bords du puits. On voit la formation d'interférences au moment où le paquet rencontre un bord. À plus long terme, on voit aussi l'étalement du paquet d'ondes. Après un temps plus ou moins long, la particule se trouve alors complètement délocalisée dans la boîte.

La vidéo suivante montre un paquet d'ondes dans une boîte à deux dimensions.

4.e. Mesure de l'énergie

Lorsqu'on mesure l'énergie de particules confinées, par exemple l'énergie des électrons dans un atome, les seules valeurs possibles sont les énergies E_n des états stationnaires.

Supposons que la particule soit dans un état non stationnaire défini par la somme (79). La probabilité d'obtenir la valeur E_n de l'énergie lors d'une mesure est A_n^2. Le fait d'obtenir la valeur particulière E_n de l'énergie lors de la mesure a pour conséquence de placer la particule dans l'état stationnaire n. Elle peut ultérieurement quitter cet état stationnaire si elle est perturbée par une action extérieure, comme une onde électromagnétique.