

TD n°2 : Équation de Schrödinger Paquets d'ondes et relation de Heisenberg Potentiels constants par morceaux – Effet tunnel

1 Évolution libre

A. Évolution libre et ondes planes

Nous considérons une particule libre de masse m . L'état quantique de la particule est caractérisé par une fonction d'onde $\psi(x, t)$ (pour simplifier nous considérons un problème unidimensionnel).

1/ Rappeler l'équation de Schrödinger qui gouverne l'évolution de $\psi(x, t)$ dans le cas libre.

2/ Nous considérons l'état quantique décrit par une onde plane

$$\psi(x, t) = A e^{i(kx - \omega t)}. \quad (1)$$

À quelle condition sur k et ω l'onde plane est-elle solution de l'équation de Schrödinger? Que devient cette relation si l'on utilise les relations d'Einstein-Planck et de de Broglie?

3/ Quelle est la densité de probabilité ρ_ψ associée à cet état? Calculer également le courant de probabilité

$$J_\psi = \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im} \left[\psi^*(x; t) \frac{\partial \psi(x; t)}{\partial x} \right]. \quad (2)$$

Interpréter le résultat.

4/ **Superposition.**— Soit $\psi_1(x, t) = A_1 e^{i(k_1 x - \omega(k_1)t)}$ et $\psi_2(x, t) = A_2 e^{i(k_2 x - \omega(k_2)t)}$, où $\omega(k)$ désigne la relation de dispersion obtenue plus haut.

a) Justifier que $\Psi(x, t) = \psi_1(x, t) + \psi_2(x, t)$ est encore solution. À quelle condition les courants associés aux deux solutions s'ajoutent-ils, $J_\Psi = J_{\psi_1} + J_{\psi_2}$?

b) Discuter le cas $k_1 = -k_2 \equiv k$ et $A_1 = A_2$. Comment qualifier $\Psi(x, t)$ dans ce cas particulier? Que vaut le courant J_Ψ ?

c) On considère maintenant le cas de deux solutions évanescentes de même énergie $\psi_1(x, t) = A_1 e^{qx - i\omega t}$ et $\psi_2(x, t) = A_2 e^{-qx - i\omega t}$ où $E = \hbar\omega = -\frac{\hbar^2 q^2}{2m}$ (une telle solution pourrait exister dans une barrière de potentiel plus haute que E). Calculer le courant $J_\Psi = J_{\psi_1} + J_{\psi_2}$ dans cette situation.

B. Paquet d'ondes

On considère la fonction d'onde

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dk \tilde{\Psi}(k; 0) e^{i(kx - \omega(k)t)}, \quad (3)$$

où $\omega(k)$ est la pulsation fonction de k obtenue à la question **A.2**.

1/ Vérifier que $\Psi(x, t)$ est solution de l'équation de Schrödinger libre.

2/ **Vitesse du paquet d'ondes.**— On considère que la fonction $\tilde{\Psi}(k; 0)$ est une fonction « étroite », centrée sur $k = k_0$. En introduisant le développement de la pulsation au premier ordre autour de k_0 dans (3), analyser le mouvement du paquet d'ondes. Pouvez-vous décrire qualitativement ce qui serait changé dans cette analyse si l'on avait pris en compte le terme quadratique en $(k - k_0)$ dans le développement de $\omega(k)$?

3/ On considère maintenant un paquet d'ondes tel que

$$\tilde{\Psi}(k; 0) = \frac{\psi_0}{\delta k} \times \begin{cases} 1 & \text{si } |k - k_0| < \delta k/2 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (4)$$

On se limitera à l'étude du paquet d'ondes au temps $t = 0$ (l'analyse est plus lourde à $t > 0$). Tracer $\tilde{\Psi}(k; 0)$. Calculer explicitement $\Psi(x, 0)$. Tracer la *soigneusement*.

4/ **Largeurs.**

a) Calculer la largeur $\Delta k = \sqrt{\langle k^2 \rangle_{\Psi} - \langle k \rangle_{\Psi}^2}$ en fonction de δk .

b) Analyser la largeur de la fonction d'onde $\Psi(x, 0)$, que l'on notera δx . Comparer à δk . Discuter la limite $\delta k \rightarrow 0$.

5/ **Paquet d'ondes gaussien** (plus difficile).— On considère maintenant un paquet d'onde de la forme

$$\tilde{\Psi}(k; 0) = \psi_0 a \exp \left\{ -a^2 \frac{(k - k_0)^2}{2} \right\}. \quad (5)$$

Quelle est la largeur $\Delta k = \sqrt{\langle k^2 \rangle_{\Psi} - \langle k \rangle_{\Psi}^2}$ de $|\tilde{\Psi}(k; 0)|^2$?

a) En utilisant l'intégrale

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\frac{1}{2}ax^2 + ikx} = \sqrt{\frac{2\pi}{a}} e^{-k^2/(2a)} \quad \text{pour } \text{Re } a \geq 0,$$

calculer $\Psi(x, 0)$. Comparer les largeurs de $\tilde{\Psi}(k; 0)$ et $\Psi(x, 0)$.

b) Montrer que l'on peut également calculer $\Psi(x, t)$. Dédurre $|\Psi(x, t)|^2$. Analyser sa largeur (on définira la largeur $\Delta x(t)$ comme l'écart type de la gaussienne $|\Psi(x, t)|^2$). Comparer à la largeur de la transformée de Fourier de la fonction d'onde, $\tilde{\Psi}(k; t) = \tilde{\Psi}(k; 0) e^{-i\omega(k)t}$. Calculer le produit $\Delta x(t)\Delta k$. Commenter.

c) L'équation de diffusion classique (qui décrit par exemple la diffusion d'un colorant dans l'eau) est $\partial_t P(x; t) = D\partial_x^2 P(x; t)$. Une solution initialement « étroite » voit sa largeur évoluer au cours du temps comme $\Delta x_{\text{class}}(t) \simeq \sqrt{2Dt}$. Comparer au cas quantique.

2 Potentiel indépendant du temps – Analyse spectrale

Nous discutons le principe général de la résolution de l'équation de Schrödinger pour un potentiel indépendant du temps

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x, t). \quad (6)$$

1/ Équation de Schrödinger stationnaire.— Lorsque le problème est indépendant du temps, l'énergie E est conservée. Puisqu'énergie et pulsation sont liées par la relation de Planck-Einstein, il est donc possible de chercher des solutions caractérisées par une unique pulsation $\omega = E/\hbar$, de la forme

$$\boxed{\psi(x, t) = \phi(x) e^{-iEt/\hbar}} \quad (7)$$

On appellera un tel état un **état stationnaire**. Pouvez-vous justifier cette dénomination? À quelle équation obéit la fonction $\phi(x)$?

2/ Puits infini.— Nous illustrons le principe général de la résolution de (6) dans le cas particulier du puits infini, i.e. $V(x) = 0$ sur $[0, a]$ et $V(x) = +\infty$ hors de l'intervalle.

a) Quelle est la solution générale de l'équation de Schrödinger stationnaire sur $[0, a]$? Quelles sont les solutions, notées $\phi_n(x)$, satisfaisant les conditions aux limites $\phi(0) = \phi(a) = 0$? Préciser l'énergie E_n associée. Normaliser ces solutions.

b) **Orthonormalisation des états stationnaires.**— On définit le produit scalaire entre deux fonctions d'onde $\varphi(x)$ et $\chi(x)$ par

$$\boxed{\langle \varphi | \chi \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \int dx \varphi^*(x) \chi(x) = \langle \chi | \varphi \rangle^*} \quad (8)$$

Montrer que les solutions obtenues à la question précédente satisfont la condition d'orthonormalisation $\langle \phi_n | \phi_m \rangle = \delta_{n,m}$ où $\delta_{n,m} = 1$ si $n = m$ et 0 sinon est le symbole de Kronecker.

INDICATION : On rappelle les relations trigonométriques $2 \cos a \cos b = \cos(a - b) + \cos(a + b)$ et $2 \sin a \sin b = \cos(a - b) - \cos(a + b)$.

c) On cherche la solution de (6) sous la forme

$$\psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n(t) \phi_n(x). \quad (9)$$

En utilisant l'orthonormalisation des $\phi_n(x)$, déduire une équation différentielle pour $c_n(t)$. La résoudre.

d) Si l'état quantique de la particule est décrit par la fonction d'onde (9), quelle est la probabilité pour que l'énergie soit E_n ?

e) On considère la condition initiale $\psi(x, 0) = [\phi_1(x) - \phi_2(x)]/\sqrt{2}$. Déduire $\psi(x, t)$. Tracer l'allure de la fonction d'onde à $t = 0$ et $t = \pi\hbar/E_1$.

3/ Retour sur le problème libre.— Rappeler quels sont les états stationnaires du problème libre. Comparer l'éq. (3) avec la forme générale obtenue à la question 2.c.

4/ Cas général en une dimension.— Dans le cas où le potentiel $V(x)$ est « confinant » (i.e. $V(x) \rightarrow \infty$ pour $x \rightarrow \pm\infty$), on admet que l'équation de Schrödinger admet une base de solutions $\{\phi_n(x), E_n\}$ orthonormées, i.e. $\langle \phi_n | \phi_m \rangle = \delta_{n,m}$. Vérifier que le principe de la résolution de l'équation de Schrödinger temporelle n'est pas changé. Exprimer les valeurs initiales $c_n(0)$ en fonction de $\psi(x, 0)$ et des fonctions $\phi_n(x)$.

5/ Oscillateur harmonique.— On étudie l'équation de Schrödinger (6) pour un potentiel d'oscillateur harmonique

$$V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2. \quad (10)$$

- a) Décrire brièvement la dynamique *classique* d'une particule d'énergie E .
 b) Écrire l'équation de Schrödinger stationnaire dans ce cas. Vérifier que deux solutions stationnaires possibles sont

$$\phi_0(x) = C_0 e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \quad \text{et} \quad \phi_1(x) = C_1 x e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \quad (11)$$

Vérifier que $m\omega/\hbar$ a la bonne dimension. Quelles sont les énergies E_0 et E_1 associées à ces deux états ?

- c) Normaliser ces deux états et vérifier l'orthogonalité $\langle \phi_0 | \phi_1 \rangle = 0$

INDICATION : On donne les intégrales

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{-\frac{1}{2}at^2} = \sqrt{\frac{2\pi}{a}} \quad \text{et} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} dt t^{2n} e^{-\frac{1}{2}at^2} = \frac{\sqrt{2\pi}}{a^{n+1/2}} (2n-1)!!$$

où $(2n-1)!! = (2n-1) \times (2n-3) \times \dots \times 3 \times 1$.

Pour simplifier les calculs, on pourra introduire la variable $\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$ (ou faire $m = \omega = \hbar = 1$).

- d) L'état quantique initial est $\psi(x, 0) = C [\phi_0(x) + i\phi_1(x)]$. Donner la valeur de C (faire $m = \omega = \hbar = 1$ pour alléger). Exprimer $\psi(x, t)$ en appliquant le résultat obtenu au 2.c. Tracer l'allure de $|\psi(x, t)|^2$ à $t = 0$, $t = \pi/2\omega$, $t = \pi/\omega$ et $t = 3\pi/2\omega$.

3 Barrière de potentiel et effet tunnel

Nous étudions la solution de l'équation de Schrödinger décrivant la diffusion d'une particule par une barrière de potentiel. Nous choisirons un potentiel constant par morceaux (Figure 1).

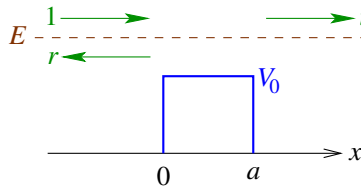


FIGURE 1 – Barrière de potentiel. On a indiqué les amplitudes associées aux ondes planes.

- 1/ Écrire l'équation de Schrödinger stationnaire pour la barrière rectangulaire de hauteur V_0 et de largeur a . Donner la forme de la solution générale de l'équation différentielle dans chacune des régions de l'espace. Introduire les notations $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = V_0 + \frac{\hbar^2 K^2}{2m}$, où $k, K \in \mathbb{R}^+$, lorsque $E > V_0$.

2/ Particule incidente de la gauche. – Dans la suite de l'exercice, on s'intéresse à la situation physique représentée sur la figure où la particule est envoyée sur la barrière depuis $-\infty$. Écrire la fonction d'onde $\psi_g(x)$ dans cette situation (on utilisera les notations suggérées sur la figure pour les amplitudes ; on notera A et B les coefficients contrôlant la fonction d'onde sur $[0, a]$).

3/ Calculer le courant de probabilité J_{ψ_g} dans les trois régions de l'espace. Interpréter les différents termes et rappeler la définition des probabilités de réflexion/transmission.

4/ Raccordement.— Quelles sont les conditions de raccordement entre les différentes solutions obtenues dans les trois régions de l'espace ? Cela suffit-il à déterminer tous les coefficients ? Qu'en serait-il pour la solution générale de la question 1 ?

5/ a) Éliminer les deux coefficients A et B pour obtenir un système pour r et t . Déduire l'expression de ces deux coefficients.

b) Quelle condition doivent vérifier r et t ? Analyser des cas limites ($E \rightarrow \infty$, $E/V_0 \rightarrow 1^+$, ...).

c) Transparences.— Montrer que la probabilité de transmission est égale à 1 pour un ensemble de valeurs discrètes de l'énergie. Interpréter physiquement.

6/ Effet tunnel.— On s'intéresse maintenant à la situation où l'énergie de la particule est plus basse que la barrière, $E < V_0$.

a) Décrire la dynamique *classique* de la particule.

b) Justifier que, sans faire de calculs supplémentaires, nous pouvons déduire les nouveaux coefficients de réflexion/transmission des expressions obtenues précédemment pour $E > V_0$, en posant $K = -iq$ où on donnera l'expression de q .

c) Quelle forme prend alors la fonction d'onde dans la région $[0, a]$. Re-calculer le courant J_{ψ_g} dans cette région.

d) Analyser le comportement de la probabilité de transmission dans la limite $qa \gg 1$. Tracer l'allure de $|\psi_g(x)|^2$ dans ce cas.

e) Discuter une application pratique de l'effet qui vient d'être étudié.

4 Potentiels constants par morceaux – Matrices de transfert (facultatif)

Dans cet exercice, nous exposons une méthode très efficace pour étudier les problèmes unidimensionnels : la méthode des matrices de transfert. Dans le cas des potentiels constants par morceaux, l'approche fait intervenir des calculs très simples.

1/ Matrices de transfert (définition).— Considérons l'équation de Schrödinger stationnaire pour un potentiel $V(x)$ non nul seulement sur un intervalle $[0, a]$ (Fig.2). Hors de l'intervalle,

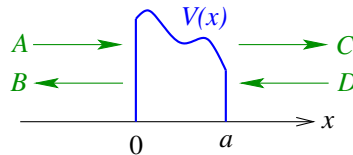


FIGURE 2 – La matrice de transfert relie les amplitudes de part et d'autre de l'intervalle.

nous écrivons un état stationnaire général sous la forme

$$\phi(x) = \begin{cases} A e^{ikx} + B e^{-ikx} & \text{pour } x < 0 \\ C e^{ik(x-a)} + D e^{-ik(x-a)} & \text{pour } x > a \end{cases} \quad (12)$$

La matrice de transfert T relie les amplitudes à gauche et à droite de l'intervalle :

$$\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = T \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \quad (13)$$

La matrice T encode l'effet du potentiel.

a) Si l'état stationnaire (12) est associé à une énergie E , rappeler la relation entre l'énergie et le vecteur d'onde k .

b) Que vaut le courant de probabilité J_ϕ associé à l'état (12) pour $x < 0$? Et pour $x > a$? Déduire une contrainte sur les quatre coefficients. Quelle propriété doit satisfaire la matrice de transfert? Vérifier en particulier que

$$|T_{22}|^2 - |T_{12}|^2 = 1 \quad (14)$$

INDICATION : On pourra s'aider en introduisant des notations matricielles

$$|A|^2 - |B|^2 = (A^* \ B^*) \sigma_z \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \quad \text{où } \sigma_z \stackrel{\text{def}}{=} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (15)$$

c) **Intérêt des matrices de transfert.**— On considère deux intervalles contigus $[0, a]$ et $[a, b]$ supportant chacun un potentiel et caractérisés par deux matrices de transfert T_1 et T_2 (Fig. 3). Quelle est la matrice de transfert reliant les amplitudes de part et d'autre de l'intervalle $[0, b]$?

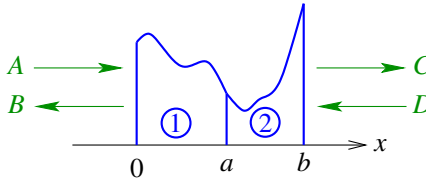


FIGURE 3 – Combinaison de deux matrices de transfert.

d) **Coefficients de réflexion et de transmission.**— On s'intéresse à la situation particulière où l'onde incidente est envoyée depuis $+\infty$. L'état (12) est alors caractérisé par les coefficients de réflexion et de transmission r et t tels que $A = 0$, $B = t$, $C = r$ et $D = 1$. Faire un dessin pour illustrer cette situation. Donner la relation entre les coefficients r et t et les éléments de la matrice T . Réécrire la condition (14) avec ces coefficients.

2/ On considère le cas trivial où le potentiel est nul sur l'intervalle $[0, a]$. Montrer que la matrice de transfert correspondante est

$$T_{ka} = \begin{pmatrix} e^{ika} & 0 \\ 0 & e^{-ika} \end{pmatrix}. \quad (16)$$

3/ **Marche de potentiel.**— On considère une marche de potentiel de hauteur V_0 (i.e. $V(x) = 0$ pour $x < 0$ et $V(x) = V_0$ pour $x > 0$), cf. Fig. 4. On écrit l'état stationnaire d'énergie $E > V_0$ comme

$$\phi(x) = \begin{cases} A e^{ikx} + B e^{-ikx} & \text{pour } x < 0 \\ C e^{iKx} + D e^{-iKx} & \text{pour } x > 0 \end{cases} \quad (17)$$

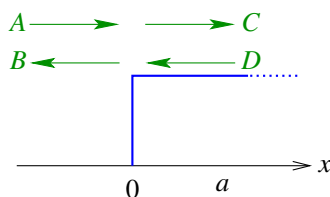


FIGURE 4 – Marche de potentiel.

Donner l'expression de k et K en fonction de E . Montrer que la matrice de transfert de la marche est

$$T_{K \leftarrow k} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \frac{k}{K} & 1 - \frac{k}{K} \\ 1 - \frac{k}{K} & 1 + \frac{k}{K} \end{pmatrix}. \quad (18)$$

4/ **Barrière de potentiel.**– Nous considérons maintenant la barrière de potentiel de hauteur V_0 (Fig. 5).

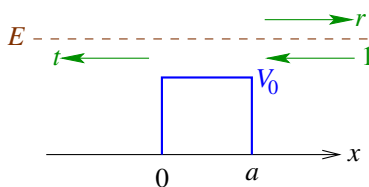


FIGURE 5 – Barrière de potentiel.

a) En combinant les résultats précédents, déduire la matrice de transfert de la barrière T_{barr} . Déduire l'expression des coefficients de transmission et de réflexion à travers la barrière.

b) **Transparences.**– Montrer que la probabilité de transmission égale 1 pour un ensemble de valeurs discrètes de l'énergie. Interpréter.

c) **Effet tunnel.**– On considère maintenant le cas où l'énergie est *inférieure* à V_0 . Décrire la dynamique *classique* de la particule dans ce cas. Nous reprenons l'analyse de la dynamique *quantique* : justifier que cette situation est simplement décrite en complexifiant le vecteur d'onde $K \rightarrow iq$ avec $q = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$ dans les résultats précédents. Déduire l'expression de la probabilité de transmission dans cette situation. Analyser son comportement lorsque la largeur de la barrière croît. Discuter physiquement.

☺ **Pour en savoir plus :**

C. Texier, « Mécanique quantique », Dunod, 2^{de} édition, 2015 (sur les matrices de transfert → annexe du chap. 5 ; sur l'effet tunnel → chapitre 2).

J. L. Basdevant et J. Dalibard, « Mécanique quantique », les éditions de l'École Polytechnique, 2004 (sur l'effet tunnel → chapitre 2)