

Chapitres II-III: Equation de Schrödinger et ses Applications

I. Introduction

- 1925, HEISENBERG/ **invention de la mécanique des matrices/ reformulation par Paul DIRAC**
- Evolution conduite par BOHR, BORN, JORDAN et HEISENBERG fera naître la mécanique ondulatoire
- Utilisation par ERWIN SCHRÖDINGER, en 1925, pour déterminer l'équation à laquelle la forme ondulatoire de l'électron devait obéir pour que celui-ci puisse être l'électron de l'atome d'hydrogène: **naissance de l'Equation de Schrödinger**
- **Schrödinger:** électron ne fût pas une particule mais une onde de matière/ Groupe de **SCHRÖDINGER, MAX PLANCK et EINSTEIN/ Restauration du déterminisme**
- **Rejet par le groupe de Göttingen** dirigé par MAX BORN: la fonction d'onde de BROGLIE et SCHRÖDINGER représente la probabilité de trouver l'électron en un point donné de l'espace
- **le groupe de Göttingen:** la fonction d'onde de SCHRÖDINGER spécifie la probabilité pour un atome d'avoir tel ou tel niveau d'énergie, de même que la théorie du jeu de cartes spécifie la probabilité d'avoir telle ou telle main. C'est pourquoi, selon ce groupe, la fonction d'onde n'a pas de signification physique
- **DIRAC:** l'équivalence entre la mécanique des matrices et la mécanique ondulatoire

$$-\frac{\hbar^2}{2 \cdot m} \Delta \Psi(r;t) + U(r) \cdot \Psi(r;t) = i\hbar \cdot \frac{\partial \Psi(r;t)}{\partial t}$$

$U(r ; t)$ est l'énergie potentielle de la particule se trouvant à la distance r du point O origine d'un repère d'espace.

Si la particule est libre, $U(r ; t) = 0$ et l'équation de SCHRÖDINGER s'écrit :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} .$$

II. LA FONCTION D'ONDE

A toute particule en mouvement peut être associée une onde représentée par la fonction d'onde qui dépend plus généralement des coordonnées d'espace et de temps $\Psi(\vec{r}; t) = \Psi(x, y, z; t)$.

La fonction d'onde est à valeurs complexes et n'a pas par elle-même, de signification physique. Elle aide à décrire simplement l'état spatial d'une particule.

Expérimentalement, la probabilité de trouver la particule dans un élément de volume $d\tau = dx \cdot dy \cdot dz$ entourant la position de la particule $M(x, y, z)$ est donnée par l'expression

$$dP = \left| \Psi(\vec{r}; t) \right|^2 \cdot d\tau \text{ ou encore } dP = \left| \Psi(x, y, z; t) \right|^2 \cdot dx dy dz .$$

Le rapport $\frac{dP}{d\tau} = \left| \Psi^2(x, y, z; t) \right|^2$ est appelé densité de probabilité de présence de l'électron au point considéré.

Plus précisément, si l'on cherche à localiser expérimentalement la particule, la probabilité de la trouver à l'instant t dans un volume V est donnée par la relation :

$$P = \frac{\int_V |\Psi(\vec{r}; t)|^2 d\tau}{\int_{(D)} |\Psi(\vec{r}; t)|^2 d\tau}$$

(D) : domaine de définition de la fonction d'onde.

Propriétés de la fonction d'Onde

Propriétés de la fonction d'onde

1- $\int_{\text{espace}} |\Psi(\vec{r};t)|^2 d\tau = 1$. Les bornes d'intégration correspondent à :

- en coordonnées cartésiennes : $-\infty \leq x \leq +\infty, -\infty \leq y \leq +\infty$ et $-\infty \leq z \leq +\infty$;
- en coordonnées polaires dotées de la base $(\vec{e}_\rho, \vec{e}_\theta, \vec{e}_z)$, on a : $\rho \geq 0, 0 \leq \theta \leq 2 \cdot \pi$ et $-\infty \leq z \leq +\infty$
- en coordonnées sphériques utilisant la base $(\vec{e}_r, \vec{e}_\theta, \vec{e}_\varphi)$, on a :
$$\begin{cases} r \geq 0 \\ 0 \leq \theta \leq \pi \\ 0 \leq \varphi \leq 2\pi \end{cases}$$

Cette première propriété représente la condition de normalisation des fonctions d'onde ; la fonction d'onde doit être de carré sommable.

2- Si $\Psi(\vec{r};t)$ est une fonction d'onde, λ un complexe alors $\lambda \cdot \Psi(\vec{r};t)$ est une fonction d'onde.

3- Si $\Psi(\vec{r};t)$ et $\Phi(\vec{r};t)$ sont deux fonctions d'onde, $\varphi(\vec{r};t) = a \cdot \Psi(\vec{r};t) + b \cdot \Phi(\vec{r};t)$ est une fonction d'onde.

Les propriétés 2 et 3 font que les fonctions d'onde constituent un espace vectoriel \mathbf{L}^2 , espace vectoriel construit sur le corps des complexes \mathbf{C} .

III. EQUATION DE SCHRÖDINGER A PARTIR DU PAQUET D'ONDE

III1. Paquet d'onde

A une dimension, l'équation de l'onde plane s'écrit :

$$\Psi(x; t) = a \cdot \exp [i \cdot (kx - \omega \cdot t)] \quad a \text{ est une constante complexe.}$$

$$\frac{dP}{dx} = |\Psi(x; t)|^2 = |a|^2 \quad dx : \text{élément de longueur.}$$

$p = \hbar k$ est la quantité de mouvement de la particule, elle est exactement déterminée.

La densité de probabilité de présence de la particule est partout la même sur l'axe ox . La particule n'est pas localisable car d'après cette approche, on voit que la particule peut être n'importe où. Il y a une grande incertitude sur sa position. La description faite de la particule libre par la fonction d'onde ne convient donc pas.

III21. Paquet d'Onde / Particule libre

$$\Psi(\vec{r}; t) = \int \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}; t) \cdot d\vec{k}$$

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}; t) = a(\vec{k}) \cdot \exp \left[i \cdot (\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega(\vec{k}) \cdot t) \right]$$

$a(\vec{k})$ amplitude réelle de l'onde et $\hbar \cdot \omega = \frac{\hbar^2 \cdot k^2}{2 \cdot m}$.

Paquet d'onde pour localiser la particule matérielle libre.

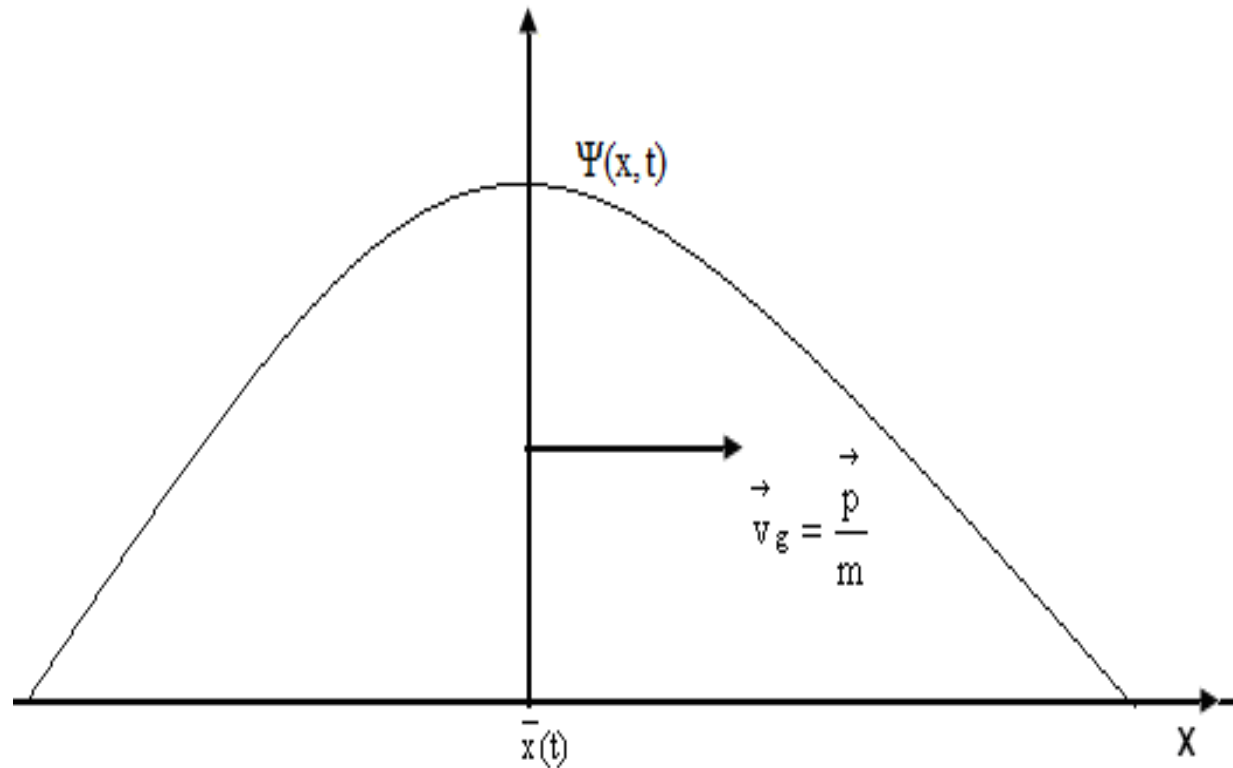
III21. Vitesse de phase V_ϕ

On appelle vitesse de phase, la vitesse de propagation au sens courant du terme, elle est notée :

$$V_\phi = \frac{\omega}{k} = v \cdot \lambda = \frac{\hbar \cdot k}{2 \cdot m} = \frac{p}{2 \cdot m}$$

III21. Vitesse de groupe V_g

Soit la figure suivante:



Au maximum de la fonction d'onde:

$$d(k \cdot \bar{x} - w(k) \cdot t) = 0 \Rightarrow \bar{x} dk - t \cdot dw(k) = 0 \Rightarrow \bar{x} = \frac{dw(k)}{dk} \cdot t$$

Lorsque le paquet d'onde évolue au cours du temps, son barycentre se déplace à la vitesse $\frac{d\bar{x}}{dt}$

-La grandeur $\frac{d\bar{x}}{dt}$ est la vitesse de groupe V_g de l'onde :

$$V_g = \frac{d\bar{x}}{dt}$$

\bar{x} est défini par :

$$\bar{x} = \frac{d}{dk} (\omega(k) \cdot t)$$

Ainsi :

$$V_g = \frac{d\omega(k)}{dk}$$

III23 Etablissement de l'équation de SCHRÖDINGER à partir du paquet d'onde

Partons du paquet d'onde :

$$\psi(\vec{r}, t) = \int_{\vec{k}} a(\vec{k}) \cdot \exp \left[-i \cdot \left(\omega \cdot t - \vec{k} \cdot \vec{r} \right) \right] \cdot d\vec{k}$$

\vec{k} : Vecteur d'onde ; \vec{r} : Vecteur position ; $\vec{P} = \hbar \vec{k}$, $E = \hbar \omega$, $\omega = \frac{E}{\hbar}$ et $\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$

$$\vec{p} \cdot \vec{r} = x \cdot p_x + y \cdot p_y + z \cdot p_z$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \int_{\vec{k}} \left(\frac{-iE}{\hbar} \right) a(\vec{k}) \cdot \exp \left[-\frac{i}{\hbar} (Et - \vec{p} \cdot \vec{r}) \right] \cdot d\vec{k}$$

$$i\hbar \cdot \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(\int_{\vec{k}} E \cdot a(\vec{k}) \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} (Et - \vec{p} \cdot \vec{r})} \cdot d\vec{k} \right)$$

Calculons $\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}$, $\frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2}$ et $\frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2}$.

Ceci donne respectivement :

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = - \int_{\mathbf{k}} \frac{a(\mathbf{k})}{\hbar^2} p_x^2 e^{-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{E}t - \vec{p} \cdot \vec{r})} \cdot d\mathbf{k}$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = - \int_{\mathbf{k}} \frac{a(\mathbf{k})}{\hbar^2} p_y^2 e^{-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{E}t - \vec{p} \cdot \vec{r})} \cdot d\mathbf{k}$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = - \int_{\mathbf{k}} \frac{a(\mathbf{k})}{\hbar^2} p_z^2 e^{-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{E}t - \vec{p} \cdot \vec{r})} \cdot d\mathbf{k}$$

Le Laplacien appliqué à la fonction d'onde donne :

$$\Delta\psi = -\int_{\mathbf{k}} a(\mathbf{k}) \frac{\mathbf{p}^2}{\hbar^2} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{E}t - \vec{\mathbf{p}} \cdot \vec{\mathbf{r}})} \cdot d\mathbf{k}$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\psi = -\int_{\mathbf{k}} \frac{\mathbf{p}^2}{2m} a(\mathbf{k}) \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{E}t - \vec{\mathbf{p}} \cdot \vec{\mathbf{r}})} \cdot d\mathbf{k}$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\psi + i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial t} = \int_{\Omega} \left(\mathbf{E} - \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \right) a(\mathbf{k}) \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{E}t - \vec{\mathbf{p}} \cdot \vec{\mathbf{r}})} \cdot d\mathbf{k}$$

$$\text{Comme } \mathbf{E} - \frac{\mathbf{p}^2}{2m} = 0 \Rightarrow \frac{\hbar^2}{2m} \Delta\psi + i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial t} = 0$$

Ce qui donne :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\psi(\vec{\mathbf{r}}, t) = i\hbar \frac{\partial\psi(\vec{\mathbf{r}}, t)}{\partial t}$$

Equation de SCHRÖDINGER dépendant du temps d'une particule libre dans un état quelconque d'énergie.

Le paquet d'onde peut donc décrire le mouvement de la particule libre parce que son expression permet de retrouver l'équation de SCHRÖDINGER.

La résolution de l'équation de SCHRÖDINGER a permis de:

- mettre en évidence toutes les lois atomiques, elle a évalué dès son établissement les niveaux quantifiés d'énergie de l'électron dans l'atome d'hydrogène, car elle permet d'expliquer les raies d'émission de l'hydrogène : séries de LYMAN, BALMER, BRACKETT, PASCHEN, etc.
- d'établir les lois auxquelles se plient les électrons dans les cristaux métalliques;
- prouver l'existence dans le noyau et dans les molécules de niveaux d'énergie ...
- déterminer, dans le cas des gaz d'électrons quasi libres, les fonctions propres et des énergies propres de l'électron dans le cristal. C'est le même traitement que l'on fait pour les métaux nobles, alcalins, l'aluminium etc.
- déterminer, dans le cadre de l'électronique, la position des niveaux confinés et les énergies de transitions dans un puits quantique;
- etc.

IV. CONSERVATION DE LA PROBABILITÉ

Rappelons l'équation de SCHRÖDINGER : $-\frac{\hbar^2}{2 \cdot m} \Delta \Psi(\mathbf{r}, t) + U(\mathbf{r}) \cdot \Psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \cdot \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t}$. Son

expression conjuguée a la forme : $-\frac{\hbar^2}{2 \cdot m} \Delta \overline{\Psi(\mathbf{r}, t)} + U(\mathbf{r}) \cdot \overline{\Psi(\mathbf{r}, t)} = -i\hbar \cdot \frac{\partial \overline{\Psi(\mathbf{r}, t)}}{\partial t}$. Si nous

multiplions la première équation par $\overline{\Psi(\mathbf{r}, t)}$ et la deuxième par $\Psi(\mathbf{r}, t)$, en soustrayant les deux équations obtenues, nous avons :

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\Psi(\mathbf{r}, t) \cdot \overline{\Psi(\mathbf{r}, t)} \right) + \frac{i \cdot \hbar}{2 \cdot m} \cdot \left(\Psi(\mathbf{r}, t) \nabla^2 \overline{\Psi(\mathbf{r}, t)} - \overline{\Psi(\mathbf{r}, t)} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, t) \right) = 0$$

Nous savons que : $\Psi(\mathbf{r}, t) \vec{\nabla} \overline{\Psi(\mathbf{r}, t)} - \overline{\Psi(\mathbf{r}, t)} \vec{\nabla} \Psi(\mathbf{r}, t) = \vec{\nabla} \left(\Psi(\mathbf{r}, t) \overline{\Psi(\mathbf{r}, t)} - \overline{\Psi(\mathbf{r}, t)} \Psi(\mathbf{r}, t) \right)$

Ainsi nous réécrivons l'équation sous la forme:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\Psi(\mathbf{r}, t) \cdot \overline{\Psi(\mathbf{r}, t)} \right) + \frac{i \cdot \hbar}{2 \cdot m} \cdot \vec{\nabla} \left(\Psi(\mathbf{r}, t) \overline{\Psi(\mathbf{r}, t)} - \overline{\Psi(\mathbf{r}, t)} \Psi(\mathbf{r}, t) \right) = 0.$$

Nous posons :

- $\rho = \Psi(\mathbf{r}, t) \cdot \overline{\Psi(\mathbf{r}, t)} = \|\Psi(\mathbf{r}, t)\|^2$: densité de probabilité de présence de la particule,
- $\vec{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{i \cdot \hbar}{2 \cdot m} \cdot \left(\Psi(\mathbf{r}, t) \overline{\Psi(\mathbf{r}, t)} - \overline{\Psi(\mathbf{r}, t)} \Psi(\mathbf{r}, t) \right)$: vecteur densité de courant de particule.

L'équation se présente alors sous la forme :

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0$$

C'est l'équation de conservation de la probabilité

V.1 Règle de correspondance

a- Particule libre

Pour une particule libre, les expressions de l'équation de SCHRÖDINGER et de l'énergie totale s'écrivent :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} \quad \text{si } U_0 = 0 \text{ et } \frac{p^2}{2m} = E$$

Par identification, nous déduisons :

$$\begin{cases} -\hbar\Delta = (-i\hbar\vec{\nabla})^2 \Rightarrow \vec{p} = -i\hbar\vec{\nabla} \\ E \rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \end{cases}$$

L'hamiltonien H est tel que: $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$ pour une particule libre (si $U_0 = \text{cte} = 0$)

b-Cas général :

Si la particule n'est pas libre, elle est soumise à un ensemble de forces. Soit $U(\vec{r};t)$ son énergie potentielle, l'énergie totale de la particule se présente alors sous la forme :

$$E = \frac{p^2}{2m} + U(\vec{r};t)$$

Tenant compte de l'énergie potentielle $U(\vec{r};t)$ dans l'équation générale de SCHRÖDINGER, nous donnons l'Hamiltonien de la particule non libre :

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(-\frac{p^2}{2m} \Delta + U(\vec{r};t) \right) \psi \quad \Rightarrow \quad H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\vec{r};t)$$

V.2. ETAT STATIONNAIRE : Equation de SCHRÖDINGER indépendante du temps

V.2.1. Equation aux valeurs propres.

Si l'Hamiltonien H est indépendant du temps, en procédant par la méthode de séparation des

variables, nous pouvons poser $\psi(r; t) = \Phi(r) \cdot e^{-\frac{iE}{\hbar} \cdot t}$. Ainsi, nous avons :

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \Phi(r) \left(-\frac{iE}{\hbar}\right) e^{-\frac{iE}{\hbar} \cdot t} = -\frac{iE}{\hbar} \cdot \Phi(r) e^{-\frac{iE}{\hbar} \cdot t}$$

En multipliant par $i\hbar$, nous trouvons :

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = E \cdot \Phi(r) \cdot e^{-\frac{iE}{\hbar} \cdot t}$$

L'équation de SCHRÖDINGER devient dans ce cas :

$$H\Phi(r) = E \cdot \Phi(r)$$

Cette équation est appelée équation aux valeurs propres de H indépendant du temps.

V.2.2. Propriétés

➤ $E < 0$, l'équation n'a de solution que pour certaines valeurs particulières de E qui forment un spectre discret.

La fonction $\Phi(r)$ associée à E du spectre s'annule à l'infini ($+\infty$) ; la probabilité de trouver la particule à l'infini ($+\infty$) est donc nulle. Celle-ci reste donc pratiquement localisée dans un domaine fini de l'espace. On dit que la particule se trouve dans un état lié ; c'est le cas par exemple de l'électron de l'atome d'hydrogène à l'état fondamental.

➤ $E > 0$, l'équation peut être résolue pour n'importe quelle valeur positive de E .

On dit que les énergies forment un spectre continu. Les fonctions correspondantes à E ne s'annulent pas à l'infini ($+\infty$), elles oscillent indéfiniment.

Leur comportement asymptotique est analogue à celui d'une onde plane. La particule ne reste donc pas localisée dans un domaine fini ; on dit qu'elle se trouve dans un état non lié ou encore dans un état de diffusion.

VI. APPLICATIONS DE L'EQUATION DE SCHRODINGER

VI1 MARCHE DE POTENTIEL

VI.1.1 Description classique

Soit la pente de hauteur h formant une marche de potentiel classique de gravitation. La différence d'énergie potentielle entre l'axe des abscisses et la partie supérieure de la marche est égale à $U_0 = mgh$, m est la masse de la particule.

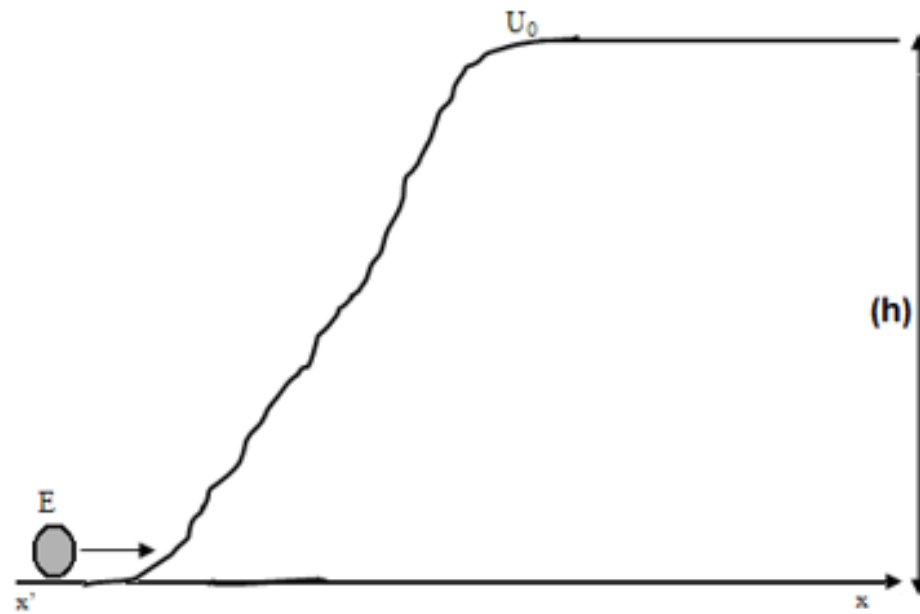


Figure.1 : Marche de potentiel classique

Faisons rouler une bille de masse m , d'énergie totale E . L'énergie potentielle est prise égale à zéro sur le plan de roulement et les frottements sont nuls.

Faisons une description classique de la particule dans les deux cas suivants :

$E > U_0$ et $E < U_0$.

Solution :

Comme il y a conservation de l'énergie mécanique : $E_i = E_f$.

$$E = E_c + U_0 \text{ donc } E_c = E - U_0$$

❖ Si $E > U_0$, $E_c > 0$: la particule pourra franchir la marche de potentiel

❖ Si $E < U_0$, $E_c < 0$, ceci est impossible. La bille rebrousse chemin. Donc impossible pour elle de gravir la pente.

VI.1.2 Description Quantique

VI.1.2.1 Position du problème

Soit une marche réelle de potentiel

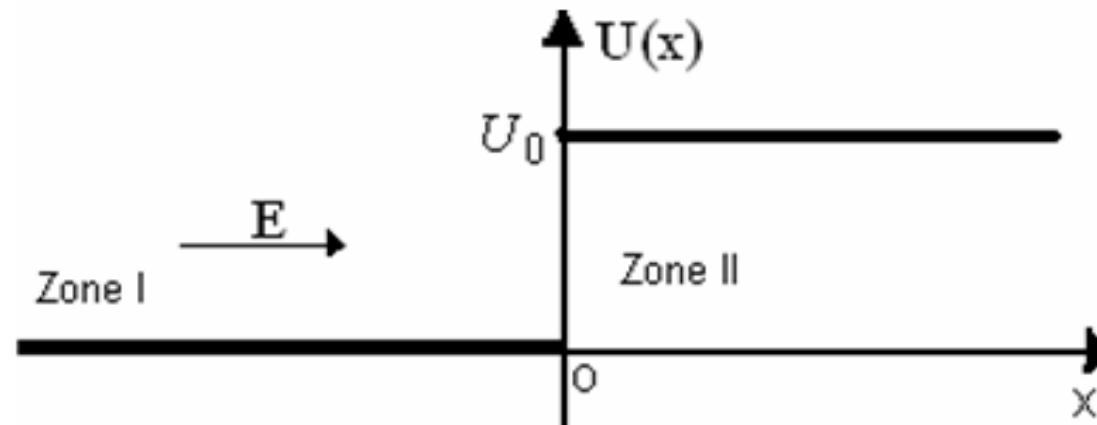


Figure.2 : Marche réelle de potentiel.

C'est le cas des électrons de conduction arrivant à la surface d'un métal à l'intérieur duquel, ils se déplacent librement.

Choisissons arbitrairement une valeur nulle pour le potentiel à l'intérieur du métal. Les électrons libres ont des énergies E déterminées par la nature du métal. Elles sont inférieures à U_0 puisque les électrons sont confinés naturellement à l'intérieur de la matière. On se trouve dans le cas $E < U_0$.

Y aura-t-il réflexion totale des électrons sur la marche de potentiel comme pour les particules classiques ?

VI.1.2.2 Détermination des fonctions d'Onde

Equation de SCHRÖDINGER :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x) \right) \Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t}$$

$\Psi(x, t)$ est la fonction d'onde de la particule dans les zones **(I)** et **(II)**.

L'électron est en état stationnaire :

$$\Psi(x; t) = \phi(x) \cdot \exp\left(-\frac{iE}{\hbar} t\right)$$

L'équation de SCHRÖDINGER devient :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x) \right) \phi(x) = E \cdot \phi(x)$$

Région I, $x < 0$, $U(x) = 0$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2 \phi(x)}{\partial x^2} = E \cdot \phi(x)$$

On obtient l'équation différentielle suivante :

$$\ddot{\phi}(x) + \frac{2mE}{\hbar^2} \cdot \phi(x) = 0$$

La solution $\phi_I(x)$ de cette équation différentielle est de la forme :

$$\phi_I(x) = A \cdot \exp(ikx) + B \exp(-ikx)$$

$$\text{avec } k^2 = \frac{2 \cdot m \cdot E}{\hbar^2}$$

- ❖ Le premier terme du second membre représente une onde incidente qui se propage dans le sens des x croissants.
- ❖ L'autre terme est une onde se propageant dans le sens des x négatifs ; c'est une onde réfléchiée par la barrière de potentiel et elle détermine une certaine probabilité pour l'électron de revenir en arrière après avoir « rebondi » sur la marche de potentiel.

Région II, $x > 0$, $U(x) = U_0$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U_0 \right) \phi(x) = E \cdot \phi(x)$$

Cette équation devient :

$$\ddot{\phi}(x) - \frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2} \cdot \phi(x) = 0$$

La solution mathématique de cette équation est :

$$\phi_{II}(x) = A^1 \cdot \exp(\lambda \cdot x) + B^1 \cdot \exp(-\lambda x)$$

$$\text{Avec } \lambda^2 = \frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}.$$

Si x tend vers l'infini, la fonction tend elle aussi vers l'infini. Ceci est paradoxal car la fonction d'onde devant être de carré sommable, ne doit pas tendre vers l'infini. Pour que $\phi_{II}(x)$ soit normalisable, on impose à A' une valeur nulle.

La solution physique est alors:

$$\phi_{II}(x) = B' \exp(-\lambda x)$$

Les expressions des différentes fonctions ainsi déterminées, nous déterminons à présent le flux de particules ou densité de courant de particules $j(x,t)$ dans les deux régions caractéristiques de la marche réelle de potentiel.

Flux de particules ou densité de courant de particules $j(x,t)$.

Par définition, le flux de particules est donné par la relation :

$$j(x,t) = -\frac{i\hbar}{2m} \cdot \left(\bar{\Psi}(x,t) \cdot \frac{d\Psi(x,t)}{dx} - \Psi(x,t) \cdot \frac{d\bar{\Psi}(x,t)}{dx} \right)$$

$\bar{\Psi}(x,t)$ est le conjugué de $\Psi(x,t)$

Région (I) $\phi_I(x) = A \cdot \exp(ikx) + B \exp(-ikx)$

Si nous tenons compte de la partie temporelle, la fonction d'onde s'écrit :

$$\Psi_I(x,t) = (A \cdot \exp(ikx) + B \cdot \exp(-i \cdot k \cdot x)) \cdot \exp\left(-\frac{i \cdot E \cdot t}{\hbar}\right)$$

⊕ Son expression conjuguée est :

$$\bar{\Psi}_I(x,t) = (\bar{A} \cdot \exp(-ikx) + \bar{B} \cdot \exp(i \cdot k \cdot x)) \cdot \exp\left(\frac{i \cdot E \cdot t}{\hbar}\right)$$

\bar{A} et \bar{B} sont les complexes conjugués de A et B.

Nous obtenons pour $j_I(x, t)$ dans cette région :

$$j_I(x, t) = -\frac{i\hbar}{2m} \cdot 2ik \cdot (|A|^2 - |B|^2)$$

Après simplification, nous avons :

$$j_I(x, t) = \frac{\hbar \cdot k}{m} (|A|^2 - |B|^2)$$

$$j_{inc}(x) = \frac{\hbar \cdot k}{m} \cdot |A|^2$$

et

$$j_{refl}(x) = \frac{\hbar \cdot k}{m} \cdot |B|^2$$

Utilisons la continuité des fonctions d'onde et de leur dérivée première pour avoir une relation entre A et B

❖ **Continuité des fonctions d'onde en $x=0$:**

$$\phi_I(0) = \phi_{II}(0)$$

❖ **Continuité des dérivées premières en $x=0$:**

$$\phi'_I(0) = \phi'_{II}(0)$$

$$A+B=B^*$$

et

$$ik(A-B) = -\lambda B^*$$

$$\stackrel{(*)}{A} (ik+\lambda) = B(ik-\lambda)$$

On trouve :

$$|A|^2 = |B|^2$$

Comme les modules des coefficients A et B sont égaux, on trouve $j_1(x,t)=0$.

Ceci signifie que tous les électrons rebondissent sur la marche de potentiel. Le flux de particules incidentes est identique aux flux de particules réfléchies.

Pour $E < U_0$, on a une réflexion totale, comme pour la particule classique.

Région (II) $\phi_{II}(x) = B' \cdot \exp(-\lambda \cdot x)$

La fonction d'onde s'écrit :

$$\Psi_{II}(x, t) = B' \cdot \exp(-\lambda \cdot x) \cdot \exp\left(-\frac{i \cdot E \cdot t}{\hbar}\right)$$

Cette fonction d'onde a pour expression conjuguée :

$$\bar{\Psi}_{II}(x, t) = \bar{B}' \cdot \exp(-\lambda \cdot x) \cdot \exp\left(\frac{i \cdot E \cdot t}{\hbar}\right)$$

Le flux de particules devient :

$$j_{II}(x, t) = 0$$

Il n'y a pas de particules dans la région (II).

Densité de probabilité dans la région II

$\frac{dP}{dx} = \Psi \cdot \bar{\Psi} = |B|^2 \cdot \exp(-2 \cdot \lambda \cdot x)$. Nous voyons que $\frac{dP}{dx} \neq 0$. La particule peut bien pénétrer

dans la zone II. Il y a donc une foncière différence avec la mécanique classique d'après qui, la particule ne peut pas accéder à la zone (II).

Cependant, nous remarquons que la probabilité décroît rapidement dans la région (II) quand x croît ; elle est importante seulement dans une épaisseur de l'ordre

$x_0 = \lambda_B = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2 \cdot m \cdot (U_0 - E)}}$. Nous avons ce qu'on appelle une onde évanescente

(figure.3).

La contradiction entre la valeur $j_{II}(x,t) = 0$ et $\frac{dP}{dx} \neq 0$ est due au fait que nous avons cherché

des solutions stationnaires de l'équation de SCHRÖDINGER.

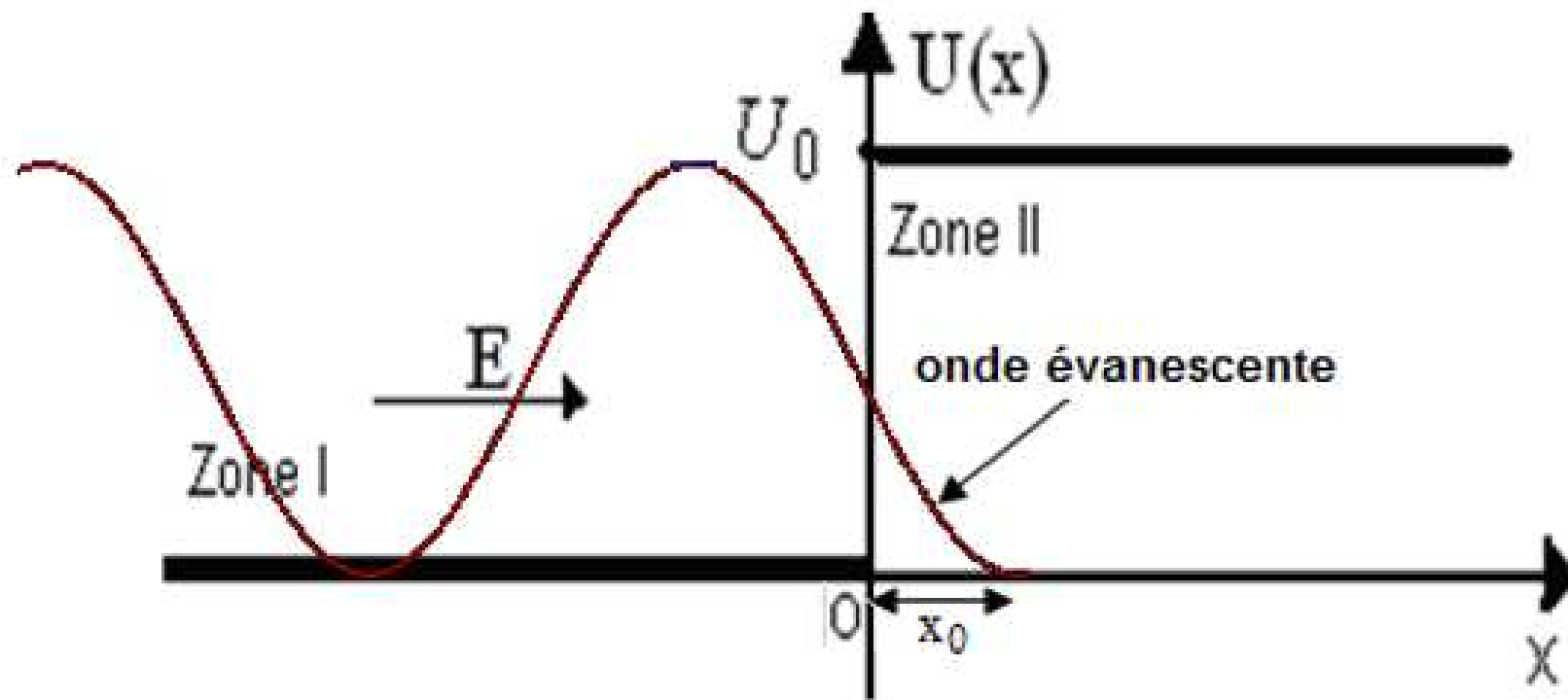


Figure.3 : Onde évanescente.

Coefficient de Réflexion

$$R = \frac{J_{ref}}{J_{inc}} = \frac{\frac{\hbar k}{m} \cdot |B|^2}{\frac{\hbar k}{m} \cdot |A|^2}$$

Comme $|A| = |B|$, nous trouvons $R = 1$.

Coefficient de Transmission T

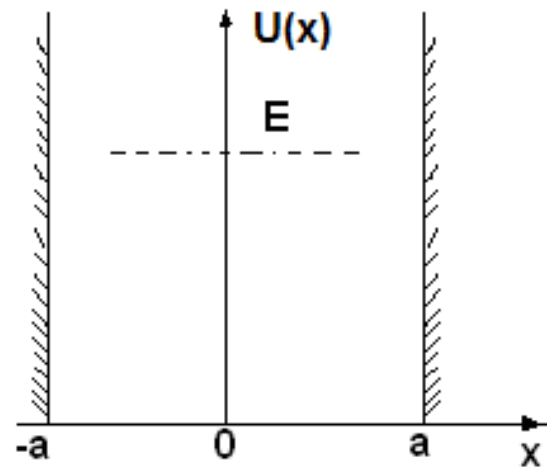
$$T = \frac{J_{trans}}{J_{inc}} = \frac{0}{\frac{\hbar k}{m} \cdot |A|^2}$$

Nous obtenons $T = 0$.

Nous vérifions $R+T = 1$.

VI. 2. PUIITS DE POTENTIEL

Le puits de potentiel quantique de profondeur infinie a la forme suivante :



$$\alpha = \frac{n \cdot \pi}{L}$$

$$E_n = \frac{\hbar^2 \cdot \pi^2}{2 \cdot m \cdot L^2} \cdot n^2$$

Figure .4 : Puits de potentiel.

L'expression de la fonction d'onde dépend de la parité de l'entier naturel n :

$$n \text{ paire} : \Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cdot \sin\left(\frac{n\pi}{L} \cdot x\right)$$

$$n \text{ impaire} : \Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cdot \cos\left(\frac{n\pi}{L} \cdot x\right)$$