Référence:

Quantum mechanics : Concepts and Applications. Nouredine Zettili.

Chapitre 1

Etude quantique de quelques systèmes unidimensionnels(rappels)

Introduction:

L'équation de Schrödinger décrivant la dynamique d'une particule de masse m dans un potentiel unidimensionnel indépendant du temps $V(x)$ est donnée par

$$\frac{p^2}{2m}\psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

où E est l'énergie totale de la particule. Les solutions de cette équation donnent les valeurs propres d'énergie autorisées E_n et les fonctions d'onde correspondantes $\psi_n(x)$. Pour résoudre cette équation différentielle aux dérivées partielles, il faut spécifier le potentiel $V(x)$ ainsi que les conditions aux limites. Les conditions aux limites peuvent être obtenues à partir des exigences physiques du système.

On se limitera à des formes de potentiel très simplifiées afin de pouvoir résoudre sans difficulté l'équation de Schrödinger. Bien que les formes du potentiel que nous allons étudier soient simples, ils correspondent à des applications très intéressantes. A savoir;

1) Saut de potentiel.

2) Barrière de potentiel.

3) Oscillateur harmonique à une dimension

1) **Saut de potentiel**: Il est défini par:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si} \quad x < 0 \quad \text{(région I)} \\ V_0 & \text{si} \quad x > 0 \quad \text{(région II)} \end{cases}$$

L'énergie E de la particule doit être positive afin que l'onde incidente soit une onde de propagation. On supposera que la particule vient du coté négatif de l'axe des abscisses x. Nous allons distinguer deux cas: $E > V_0$ et $E < V_0$.

a) $E > V_0$:

i) Région $x < 0$: l'équation de Schrodinger s'écrit :

$$\frac{p^2}{2m}\psi_I(x) = E\psi_I(x) \quad \text{avec } p = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$$

c'est-à-dire

$$\frac{\partial^2 \psi_I(x)}{\partial x^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi_I(x) = 0$$

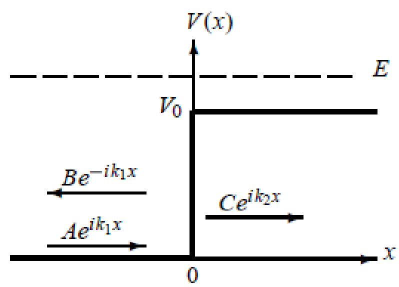
on pose $\frac{2mE}{\hbar^2} = k_1^2$

$$\frac{\partial^2 \psi_I(x)}{\partial x^2} + k_1^2 \psi_I(x) = 0$$

La solution générale est alors donnée par:

$$\psi_I(x) = Ae^{ik_1 x} + Be^{-ik_1 x}$$

L'onde incidente est représentée par le terme $e^{ik_1 x}$ et qui correspond à une onde plane allant de gauche vers la droite. Lorsque la particule arrive en $x = 0$, elle peut soit être réfléchie, soit être transmise. L'onde réfléchie est représentée par le terme $e^{-ik_1 x}$.



i) Région $x > 0$: l'équation de Schrodinger s'écrit :

$$\frac{p^2}{2m}\psi_{II}(x) + V_0 \psi_{II}(x) = E\psi_{II}(x) \quad \text{avec } p = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$$

c'est-à-dire

$$\frac{\partial^2 \psi_{II}(x)}{\partial x^2} + \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}\psi_{II}(x) = 0$$

on pose $\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2} = k_2^2$

$$\frac{\partial^2 \psi_{II}(x)}{\partial x^2} + k_2^2 \psi_{II}(x) = 0,$$

la solution générale est :

$$\psi_{II}(x) = Ce^{ik_2 x} + De^{-ik_2 x}$$

Le premier terme en $e^{ik_2 x}$ correspond à une onde plane allant de gauche vers la droite: il représente donc l'onde transmise.

Par contre le second terme représente une onde venant de $+\infty$ allant vers la gauche. Comme nous n'avons pas de particule qui provient dans ce sens, nous poserons $D = 0$, c-à-d:

$$\psi_{II}(x) = Ce^{ik_2 x}$$

Conditions aux limites: La fonction $\psi(x)$ et sa première dérivée $\psi'(x)$ doivent être continues en $x = 0$. C'est-à-dire:

$$\begin{cases} \psi_I(0^-) = \psi_{II}(0^+) \\ \psi'_I(0^-) = \psi'_{II}(0^+) \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} A + B = C \\ A - B = \frac{k_2}{k_1} C \end{cases}$$

d'où on tire les rapports:

$$\frac{B}{A} = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \quad \text{et} \quad \frac{C}{A} = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}$$

Nous montrons (voir TD) que le courant de Schrodinger à une dimension est donné par:

$$j = \frac{\hbar}{2im}\left(\psi^* \frac{d\psi}{dx} - \psi \frac{d\psi^*}{dx}\right)$$

le courant incident:

$$\begin{aligned} j_{inc} &= \frac{\hbar}{2im}\left(\psi^*_{inc} \frac{d\psi_{inc}}{dx} - \psi_{inc} \frac{d\psi^*_{inc}}{dx}\right), \qquad \psi_{inc} = Ae^{ik_1 x} \\ &= \frac{\hbar}{2im}\left(ik_1 |A|^2 + ik_1 |A|^2\right) \\ &= \frac{\hbar k_1}{m} |A|^2 \end{aligned}$$

le courant réfléchi:

$$\begin{aligned} j_r &= \frac{\hbar}{2im}\left(\psi^*_r \frac{d\psi_r}{dx} - \psi_r \frac{d\psi^*_r}{dx}\right), \qquad \psi_r = Be^{-ik_1 x} \\ &= \frac{\hbar}{2im}\left(-ik_1 |B|^2 - ik_1 |B|^2\right) \\ &= -\frac{\hbar k_1}{m} |B|^2 \end{aligned}$$

le courant transmis:

$$\begin{aligned} j_t &= \frac{\hbar}{2im}\left(\psi^*_t \frac{d\psi_t}{dx} - \psi_t \frac{d\psi^*_t}{dx}\right), \qquad \psi_t = Ce^{ik_2 x} \\ &= \frac{\hbar}{2im}\left(ik_2 |C|^2 + ik_2 |C|^2\right) \\ &= \frac{\hbar k_2}{m} |C|^2 \end{aligned}$$

Le coefficient (la probabilité) de réfléxion s'exprime par:

$$R = \left|\frac{j_r}{j_{inc}}\right| = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left|\frac{B}{A}\right|^2$$

c-à-d:

$$R = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2 = \left(\frac{1 - \sqrt{1 - \frac{V_0}{E}}}{1 + \sqrt{1 - \frac{V_0}{E}}}\right)^2.$$

Le coefficient de transmission s'exprime par:

$$T = \left|\frac{j_t}{j_{inc}}\right| = \frac{k_2}{k_1}\left|\frac{C}{A}\right|^2 = \frac{k_2}{k_1}\left(\frac{2k_1}{k_1 + k_2}\right)^2,$$

c-à-d:

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

On remarque que:

$$\boxed{R + T = 1}$$

Dans une situation analogue en mécanique classique, la particule serait toujours transmise, alors qu'en mécanique quantique elle a une probabilité non nulle d'être réfléchie.

b) $E < V_0$:

i) Région $x < 0$: l'équation de Schrodinger reste la même, c-à-d la solution est toujours

$$\psi_I(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$$

ii) Région $x > 0$: l'équation de Schrodinger s'écrit dans ce cas

$$\frac{\partial^2 \psi_{II}(x)}{\partial x^2} - k_2^2 \psi_{II}(x) = 0$$

avec $\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} = k_2^2$ et donc la solution générale est :

$$\psi_{II}(x) = Ce^{k_2x} + De^{-k_2x}$$

L'exponentielle e^{k_2x} diverge et ne représente donc pas une solution physique. On doit poser $C = 0$. La solution dans cette region est donc

$$\psi_{II}(x) = De^{-k_2x}$$

$\psi_{II}(x) \to 0$ à l'infini ; c'est une onde évanescente. Il n'y a pas d'onde transmise.

Les conditions aux limites:

$$\begin{cases} \psi_I(0^-) = \psi_{II}(0^+) \\ \psi_I'(0^-) = \psi_{II}'(0^+) \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} A + B = D \\ A - B = i\frac{k_2}{k_1}D \end{cases}$$

d'où on tire le rapport:

$$\frac{B}{A}=\frac{k_1-ik_2}{k_1+ik_2}$$

Le coefficient (la probabilité) de réfléxion s'exprime par:

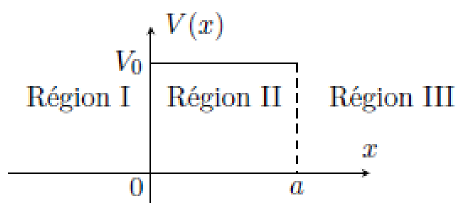
$$R=\left|\frac{j_r}{j_{inc}}\right|=\left|\frac{B}{A}\right|^2=\left|\frac{k_1-ik_2}{k_1+ik_2}\right|^2\Rightarrow\boxed{R=1}$$

Remarque: le coefficient de réfléxion R dépend de la valeur de E par rapport à V_0

$$R=\begin{cases}1 & \text{si} \quad E<V_0\\ \left(\frac{1-\sqrt{1-\frac{V_0}{E}}}{1+\sqrt{1-\frac{V_0}{E}}}\right)^2 & \text{si} \quad E>V_0\end{cases}$$

2) **Barrière de potentiel:** Il est défini par:

$$V(x)=\begin{cases}0 & \text{si} \quad x<0 \quad \text{(région I)}\\ V_0 & \text{si} \quad 0<x<a \quad \text{(région II)}\\ 0 & \text{si} \quad x>a \quad \text{(région III)}\end{cases}$$



Du point de vu de la physique classique: la traversée de la barrière est possible si $E>V_0$. Par contre pour $E<V_0$, il est impossible. Qu'en est il en mécanique quantique ?

Pour fixer les idées, on va considérer uniquement le cas $E<V_0$.

i) Région (I) $x<0$: comme dans le cas du saut de potentiel, la solution de l'équation de Schrodinguer dans est:

$$\psi_I(x)=Ae^{ik_1x}+Be^{-ik_1x}$$

avec $\frac{2mE}{\hbar^2}=k_1^2$

ii) Région (II) $0<x<a$: l'équation de Schrodinger s'écrit :

$$-\hbar^2\frac{\partial^2\psi_{II}(x)}{\partial x^2}+V_0\psi_{II}(x)=E\psi_{II}(x)$$

la solution est:

$$\psi_{II}(x)=Ce^{k_2x}+De^{-k_2x}$$

où $\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2} = k_2^2$

iii) Région (III) $x > a$: la solution est:

$$\psi_{III}(x) = Fe^{ik_1x} + Ge^{-ik_1x}$$

Puisque on n'a pas d'onde venant de $+\infty$ allant vers la gauche (il y pas d'obstacle à $+\infty$) on pose $G = 0$.

Conditions aux limites: $\psi(x)$ et $\psi'(x)$ doivent être continues en $x = 0$ et $x = a$.

Continuité en $x = 0$:

$$\begin{cases} \psi_I(0) = \psi_{II}(0) \\ \psi'_I(0) = \psi'_{II}(0) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} A + B = C + D \\ i\frac{k_1}{k_2}(A - B) = C - D \end{cases},$$

ainsi on peut obtenir C et D en fonction de A et B

$$C = \frac{1}{2}\left[\left(1 + i\frac{k_1}{k_2}\right)A + \left(1 - i\frac{k_1}{k_2}\right)B\right] \qquad (1)$$

$$D = \frac{1}{2}\left[\left(1 - i\frac{k_1}{k_2}\right)A + \left(1 + i\frac{k_1}{k_2}\right)B\right] \qquad (2)$$

Continuité en $x = a$.

$$\text{et} \begin{cases} \psi_{II}(a) = \psi_{III}(a) \\ \psi'_{II}(a) = \psi'_{III}(a) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} Ce^{k_2a} + De^{-k_2a} = Fe^{ik_1a} & (3) \\ k_2Ce^{k_2a} - k_2De^{-k_2a} = ik_1Fe^{ik_1a} & (4) \end{cases},$$

remplaçons (1) et (2) dans (3) et (4) on obtient

$$\left\{\left(1 + i\frac{k_1}{k_2}\right)e^{k_2a} + \left(1 - i\frac{k_1}{k_2}\right)e^{-k_2a}\right\}A + \left\{\left(1 - i\frac{k_1}{k_2}\right)e^{k_2a} + \left(1 + i\frac{k_1}{k_2}\right)e^{-k_2a}\right\}B = 2Fe^{ik_1a}$$

$$\left\{\left(1 + i\frac{k_1}{k_2}\right)e^{k_2a} - \left(1 - i\frac{k_1}{k_2}\right)e^{-k_2a}\right\}A + \left\{\left(1 - i\frac{k_1}{k_2}\right)e^{k_2a} - \left(1 + i\frac{k_1}{k_2}\right)e^{-k_2a}\right\}B = 2i\frac{k_1}{k_2}Fe^{ik_1a}$$

On pourra ainsi déterminer les rapports $\frac{B}{A}$ et $\frac{F}{A}$ et par suite calculer les coefficients de réfléxion et de transmission, on obtient (exercice)

$$R = \left|\frac{j_r}{j_{inc}}\right| = \left|\frac{B}{A}\right|^2 = \frac{1}{1 + \frac{4k_1^2k_2^2}{\left(k_1^2+k_2^2\right)^2\sinh^2(k_2a)}}$$

$$T = \left|\frac{j_t}{j_{inc}}\right| = \left|\frac{F}{A}\right|^2 = \frac{1}{1 + \frac{\left(k_1^2+k_2^2\right)^2\sinh^2(k_2a)}{4k_1^2k_2^2}} \quad \text{avec } R + T = 1.$$

On remarque ici que même pour $E < V_0$, la particule à une certaine probabilité d'être transmise, ce qui est contraire à la physique classique. Ce phénomène est appelé **effet tunnel**.

3) **Oscillateur harmonique à une dimension**

Considérons une particule de masse m soumise à un oscillateur harmonique:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

introduisons l'opérateur de création:

$$a^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}p \qquad (1)$$

et son transposé, l'opérateur d'annihilation:

$$a = \left(a^+\right)^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}p \qquad (2)$$

l'opérateur $N = a^+a$ est donc

$$\begin{aligned} N &= \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}p\right)\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}p\right) \\ &= \frac{m\omega}{2\hbar}x^2 + \frac{1}{2m\hbar\omega}p^2 + \frac{i}{2\hbar}(xp - px) \\ &= \frac{1}{\hbar\omega}\left(\frac{1}{2}m\omega^2x^2 + \frac{1}{2m}p^2\right) - \frac{1}{2} \end{aligned}$$

Donc

$$\boxed{H = \hbar\omega\left(N + \tfrac{1}{2}\right)} \qquad (3)$$

La recherche des valeurs propres de l'Hamiltonien H se réduit donc à la recherche de valeurs propres n et les vecteurs propres $|n\rangle$ de N

$$N|n\rangle = n|n\rangle$$

L'opérateur N est hermitique puisque $N = (a^+a)^+ = a^+a$ donc les valeurs propres n de N sont réelles:

$$n^* = n = \langle n| N |n\rangle = \langle n| a^+a |n\rangle$$

le bras $\langle n| a^+$ est le transposé de $a|n\rangle$ donc n représente la norme (positive ou nulle) du vecteur $a|n\rangle$:

$$\boxed{n = \|a|n\rangle\| \geq 0 \quad (4)}$$

Utilisons les relations (1) et (2), on peut montrer (exercice):

$$\left[a, a^+\right] = aa^+ - a^+a = 1$$

Cela donne les relations suivantes

$$\begin{aligned} Na &= \left(a^{+}a\right)a = \left(aa^{+}-1\right)a = aa^{+}a - a \\ &= a\left(a^{+}a-1\right) \\ &\Rightarrow Na = a\left(N-1\right) \quad (5) \end{aligned}$$

ce qui correspond à la relation de commutation

$$[N, a] = -a$$

de même pour l'opérateur de création:

$$Na^{+} = a^{+}\left(aa^{+}\right) = a^{+}\left(a^{+}a+1\right) = a^{+}\left(N+1\right)$$

ce qui correspond à la relation de commutation

$$\left[N, a^{+}\right] = a^{+}$$

Appliquons maintenant la realation (5) au vecteur $|n\rangle$, il vient:

$$\begin{aligned} N\left(a\left|n\right\rangle\right) &= a\left(N-1\right)\left|n\right\rangle = a(n-1)\left|n\right\rangle \\ N\left(a\left|n\right\rangle\right) &= \left(n-1\right)\left(a\left|n\right\rangle\right) \quad (6) \end{aligned}$$

ainsi le vecteur $a\left|n\right\rangle$ est un vecteur propre de N correspondant à la valeur propre $(n-1)$. D'autre part, on a:

$$N\left|n-1\right\rangle = \left(n-1\right)\left|n-1\right\rangle \qquad (7)$$

Comparons (6) et (7), on obtient:

$$a\left|n\right\rangle = c\left|n-1\right\rangle \;\; (8)$$

or $\langle n \left|n'\right\rangle = \delta_{n,n'}$ on peut écrire alors:

$$\left\langle n\right| a^{+}a\left|n\right\rangle = \left\langle n-1\right| c^{*}c\left|n-1\right\rangle = \left|c\right|^{2} \quad (9)$$

de (4) et (9), on déduit:

$$c = \sqrt{n}$$

la relation (8) s'écrit donc comme:

$$\boxed{a\left|n\right\rangle = \sqrt{n}\left|n-1\right\rangle \quad (10)}$$

Alors:

$$a^2 |n\rangle = aa|n\rangle = \sqrt{n}a|n-1\rangle = \sqrt{n(n-1)}|n-2\rangle$$
$$\vdots$$
$$a^p |n\rangle = \sqrt{n(n-1)....n(n-p+1)}|n-p\rangle$$

si $n = 0$, alors suivant (4) la norme $\|a|0\rangle\| = 0$, ainsi :

$$\boxed{a|0\rangle = 0} \quad (11)$$

on suppose que n peut prendre des valeurs entière positives $n = 0, 1, 2, ...$

On montre d'une façon analogue (exercice):

$$\boxed{a^+ |n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \quad (12)}$$

Le spectre d'énergie est obtenu d'aprés (3):

$$H|n\rangle = \hbar\omega\left(N + \frac{1}{2}\right)|n\rangle = E_n|n\rangle$$
$$\Rightarrow E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

Les fonctions propres se déduisent les une des autres par application de l'opérateur de création a^+ ou l'opérateur d'annihilation a;

$$|0\rangle$$
$$|1\rangle = a^+|0\rangle$$
$$|2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}a^+|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(a^+\right)^2|0\rangle$$
$$\vdots$$
$$\boxed{|n\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{n!}}\left(a^+\right)^n|0\rangle \quad (13)}$$

Les valeurs propres de N constituent une base complète dans laquelle nous pouvons représenter l'oscillateur harmonique; ceci est la représentation du nombre d'occupation $\{N\}$ ou l'espace de Fock.

L'espace de Fock, pour cet exemple, est donc engendré par les vecteurs $|n\rangle$ états propres de N :

$$\begin{cases} N|n\rangle = n|n\rangle, & n = 0, 1, 2, ... \\ \langle n|n'\rangle = \delta_{n,n'} \\ \sum_n |n\rangle\langle n| = 1 \end{cases}$$