

Chapitre 4

LA PARTICULE LIBRE ET LA MARCHE DE POTENTIEL.

4.1 La particule libre

Considérons une particule libre, de masse m , à une dimension. Son énergie se réduit à l'énergie cinétique. L'opérateur hamiltonien est donc $\hat{H} = \hat{E}_c = \frac{\hat{p}^2}{2m}$.

4.1.1 Solution de l'équation aux valeurs propres de l'hamiltonien

L'équation aux valeurs propres de l'énergie s'écrit $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ soit :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = E \psi(x)$$

On distingue deux cas :

1. $E < 0$. La solution de l'équation s'écrit sous la forme

$$\psi(x) = Ae^{\gamma x} + Be^{-\gamma x}$$

avec $\gamma = \frac{1}{\hbar} \sqrt{-2mE}$. Les coefficients A et B sont des constantes d'intégration.

Lorsque $x \rightarrow +\infty$, la fonction $Be^{-\gamma x}$ s'annule tandis que $|Ae^{\gamma x}|$ devient infini, sauf pour $A = 0$. Les fonctions d'onde étant bornées nous devons poser $A = 0$.

Lorsque $x \rightarrow -\infty$, la fonction $Ae^{\gamma x}$ s'annule tandis que $|Be^{-\gamma x}|$ devient infini, sauf pour $B = 0$. Les fonctions d'onde étant bornées nous devons poser $B = 0$.

La seule fonction d'onde convenable est donc la fonction d'onde $\psi(x) = 0$. Une telle fonction d'onde ne représente pas une particule qui serait présente quelque part sur Ox . On en déduit que $E < 0$ n'appartient pas au spectre de l'hamiltonien.

Ce résultat est conforme au résultat classique qui donne une valeur positive ou nulle à l'énergie cinétique.

2. $E > 0$. La solution se met sous la forme

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

avec $k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}$ tandis que A et B sont des constantes d'intégration arbitraires.

La solution la plus générale apparaît comme la superposition des deux solutions $u_D(x)$ et $u_G(x)$:

$$u_D(x) := Ae^{ikx} \quad \text{et} \quad u_G(x) = Be^{-ikx}.$$

On constate que E étant positif arbitraire il existe toujours deux fonctions propres indépendantes u_D et u_G , admettant E pour valeur propre. Le spectre de \hat{H} est donc continu et dégénéré d'ordre 2 pour $E > 0$. En anticipant sur l'interprétation de

$u_D(x)$ et $u_G(x)$ donnée au paragraphe suivant, soulignons que cette dégénérescence est liée à la possibilité de disposer de deux sources de particules : l'une située en $x = -\infty$, produit un flux de particules se dirigeant vers les x positifs, l'autre source située en $x = +\infty$ produit un flux de particules se dirigeant vers les x négatifs (voir aussi la discussion paragraphe 5.1.3, page 68).

Une base orthonormalisée de fonctions propres de \hat{H} peut être prise sous la forme $u_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}$, la valeur propre correspondante de l'énergie est $E = p^2/2m$. Remarquons que $u_p(x)$ est aussi une fonction propre de l'impulsion, $\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$. Nous en déduisons que \hat{p} et \hat{H} commutent, ce que l'on peut vérifier directement.

4.1.2 Interprétation des états propres de l'énergie

a) Interprétons les fonctions $u_D(x) := Ae^{ikx}$:

$u_D(x)$ satisfait la relation $\hat{p} u_D(x) := -i\hbar \frac{d}{dx} u_D(x) = \hbar k u_D(x)$. C'est une fonction propre de l'impulsion. Cette fonction d'onde représente donc des particules d'impulsion $p_D = \hbar k = \sqrt{2mE}$; la longueur d'onde de de Broglie associée est $\lambda = \frac{2\pi\hbar}{|p_D|} = \frac{2\pi}{k}$

L'interprétation hydrodynamique permet d'associer à la fonction d'onde $u_D(x) := Ae^{ikx}$ un fluide de particules, indépendantes et dans le même état physique d'impulsion $\sqrt{2mE}$. La densité linéaire des particules est $|A|^2$; la répartition des particules est donc uniforme. Dans ce modèle, le flux de particules en un point est $\Phi_D = |A|^2 \frac{\hbar k}{m}$ où $\frac{\hbar k}{m} = \sqrt{\frac{2E}{m}}$ représente la vitesse des particules. Ce flux se dirige vers les $x > 0$.

b) Interprétons $u_G(x) = Be^{-ikx}$ de la même façon.

La fonction $u_G(x)$ représente des particules d'impulsion $p_G = -\hbar k = -\sqrt{2mE}$; la longueur d'onde de de Broglie associée est $\lambda = \frac{2\pi\hbar}{|p_G|} = \frac{2\pi}{k}$

Le fluide correspondant de l'interprétation hydrodynamique présente une densité linéaire uniforme, $|B|^2$ et un flux de particule, Φ_G , dirigé vers les $x < 0$, égal à

$$\Phi_G = -|\Phi_G| = -|B|^2 \sqrt{\frac{2E}{m}}.$$

On peut faire le bilan du flux de particules en un point. $\Phi = \Phi_D + \Phi_G = |\Phi_D| - |\Phi_G|$ soit

$$\Phi = \sqrt{\frac{2E}{m}} (|A|^2 - |B|^2)$$

Nous pouvons calculer le courant J en un point quelconque :

$$J := \frac{-i\hbar}{2m} \left(\bar{\psi} \frac{d\psi}{dx} - \frac{d\bar{\psi}}{dx} \psi \right) = \hbar k (\bar{A}A - \bar{B}B) = \Phi$$

On retrouve un résultat déjà mentionné : dans les problèmes à une dimension, le flux de particule est identique au courant J (voir page 15).

Etant donnée une fonction d'onde, remarquons que l'expression du flux (du courant) en un point se calcule sans qu'il soit nécessaire de connaître la fonction d'onde partout. Par contre, pour affirmer que l'impulsion est bien définie, il faut connaître la fonction d'onde partout. Toute référence à une particule qui aurait une impulsion précise dans telle région limitée de l'espace est dénuée de sens en mécanique ondulatoire car la particule qui a une impulsion précise, p , occupe tout l'espace : sa fonction d'onde est $Ae^{ipx/\hbar}$. Par contre tout état présente un courant bien défini en chaque point.

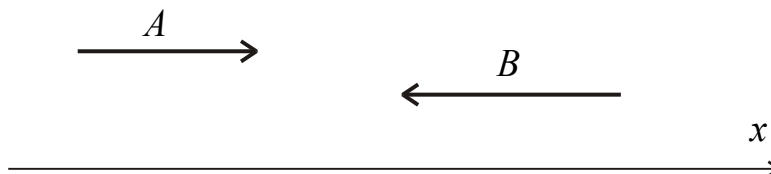


Figure 4-1.

Sur la figure 4-1, on a schématisé les ondes et leur courant

4.1.3 Interférences

Considérons l'expression $\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$. Cette fonction d'onde est la superposition de deux fonctions d'onde dont les courants sont de sens opposés. Chacune des ondes $u_D(x) = Ae^{ikx}$ et $u_G(x) = Be^{-ikx}$ présente une densité linéaire uniforme mais leur superposition fait apparaître une figure d'interférences. Nous posons $A\bar{B} = |AB|e^{i\theta}$. La densité de présence associée à l'onde $\psi(x)$ est $\rho = |\psi(x)|^2 = |A|^2 + |B|^2 + 2|AB|\cos(2kx + \theta)$. La présence du terme d'interférences, $2|AB|\cos(2kx + \theta)$, est caractéristique du comportement ondulatoire des phénomènes étudiés. Ses effets sont bien connus, en optique par exemple.

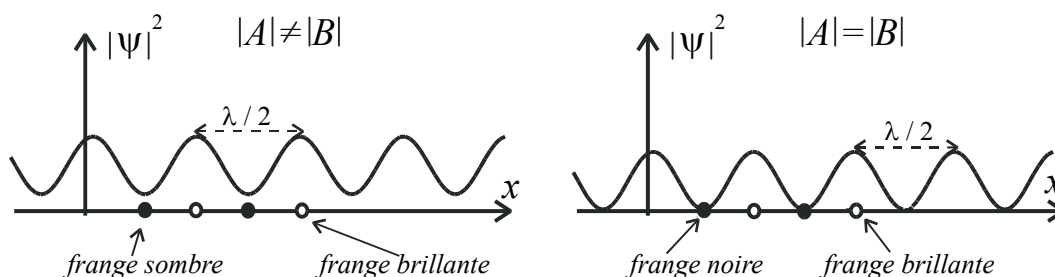


Figure 4-2.

Pour des corpuscules, on pourrait s'attendre à ce que les densités s'additionnent comme pour les automobiles sur une autoroute où le nombre de voiture par kilomètre, ρ_c , est égale à la somme du nombre de voiture par kilomètre qui se dirigent dans un sens et du nombre de voitures par kilomètre qui se dirigent en sens contraire ($\rho_c = |A|^2 + |B|^2$). Ce n'est pas le cas. La mécanique ondulatoire nous enseigne ainsi que le concept de corpuscule est un modèle dont la pertinence est limitée. Remarquons que le terme d'interférence est nul en moyenne sur une longueur $\lambda/2$. Par conséquent, il ne peut pas être observé si le pouvoir séparateur des instruments disponibles n'est pas suffisant : le terme d'interférence ne modifie pas le nombre moyen de particule par unité de longueur, il modifie seulement la répartition des particules qui se retrouvent de préférence sur une frange brillante, aux points d'abscisse x , tels que $\cos(2kx + \theta) = 1$.

4.1.4 Evolution d'un paquet d'onde

Considérons la fonction d'onde d'une particule qui à l'instant $t = 0$ est donnée sous la forme $\psi(0, x) = \psi_0(x)$. Nous décomposons $\psi_0(x)$ sur la base des fonctions $u_p(x)$,

fonctions propres de \hat{H} pour la valeur propre $\frac{p^2}{2m}$:

$$\psi_0(x) = \int f(p) u_p(x) dp$$

La relation d'orthonormalisation, $\langle u_p | u_q \rangle = \delta(p - q)$, permet de calculer $f(p)$:

$$f(p) = \int \bar{u}_p(x) \psi_0(x) dx = \int \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ipx} \psi_0(x) dx$$

A l'instant t , quelconque, la fonction d'onde a pour expression :

$$\psi(t, x) = \int f(p) e^{-iE_p t/\hbar} u_p(x) dp = \int f(p) e^{-i\frac{p^2}{2m\hbar}t} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx} dp$$

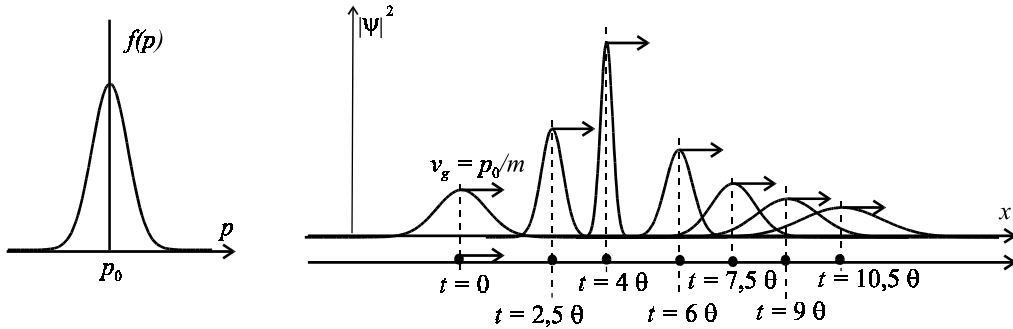


Figure 4-3.

Sur la figure 4-3 nous avons représenté l'évolution d'un paquet d'onde : la fonction $f(p)$ ainsi que la densité de présence à divers instants. On constate que le centre du paquet d'onde se déplace ; en termes classique cela signifie que la particule se déplace. La vitesse correspondante est la "**vitesse de groupe**" du paquet d'ondes.

L'étalement du paquet d'ondes varie aussi avec le temps. Dans un premier temps le paquet se ressert pour atteindre un étalement minimal à l'instant 4θ . Il commence alors à s'étaler, ce qui n'aura plus de cesse.

Bien que la figure 4-3 ne concerne qu'un paquet d'ondes particulier les résultats mis en évidence sont très généraux.

Considérons le cas d'un paquet d'ondes dont l'expression est de la forme $\psi(t, x) = \int |f(p)| e^{i\Phi(p,t,x)} dp$. Nous supposons que $|f(p)|$ présente un maximum très net pour la valeur $p = p_0$. La contribution principale à l'intégrale qui définit $\psi(t, x)$ provient donc des valeurs $p \approx p_0$. La phase Φ varie rapidement avec p sauf lorsque t et x prennent des valeurs telles que $\frac{d\Phi}{dp} = 0$; dans un tel cas la phase est dite "**stationnaire**". La contribution à l'intégrale est négligeable si p est très différent de p_0 ; elle est également négligeable si la phase n'est pas stationnaire pour $p = p_0$. Dans ce cas, en effet, intégrer $|f(p)| e^{i\Phi(p,t,x)}$ au voisinage de p_0 revient à supposer que $|f(p)| \simeq |f(p_0)| \simeq$ constante, tandis que l'intégrale de l'exponentielle est négligeable dans la mesure où elle se réduit à l'intégrale d'un sinus et d'un cosinus sur plusieurs périodes. La fonction $|\psi(t, x)|$ présente donc un maximum

pour $\left(\frac{d\Phi}{dp}\right)_{p_0} = 0$. Cette condition définit une relation entre x et t que l'on écrit sous la forme $x = x(t)$. Le point géométrique dont l'abscisse est $x = x(t)$ à chaque instant t est situé dans la région où la densité de présence est maximale. **La vitesse de ce point est la vitesse de groupe v_g .**

Dans le cas de la particule libre il vient $f(p) = |f(p)| e^{i\xi}$ et $\Phi = -\frac{p^2}{2m\hbar}t + \frac{px}{\hbar} + \xi$. On en déduit $\left(\frac{d\Phi}{dp}\right)_{p_0} = -\frac{p_0}{m\hbar}t + \frac{x}{\hbar} + \left(\frac{d\xi}{dp}\right)_{p_0} = 0$ soit $x = \frac{p_0}{m}t - \left(\frac{d\xi}{dp}\right)_{p_0}$. La vitesse de groupe est donc

$$v_g = \frac{p_0}{m}$$

La quantité p_0 est ce que l'on croyait être l'impulsion de la particule avant l'introduction de la théorie quantique. v_g est donc ce que l'on croyait être la vitesse de la particule. Effectivement, si la région où l'on a des chances de trouver la particule est assez petite pour qu'on puisse l'assimiler à un point, la vitesse de déplacement de ce point est assimilé à la vitesse de la particule et c'est précisément v_g .

On introduit parfois "**les vitesses de phase**" du paquet d'onde. Considérons la fonction d'onde $\psi(t, x) = \int |f(p)| e^{i\Phi(p, t, x)} dp$. Cette fonction apparaît comme la superposition d'ondes $|f(p)| e^{i\Phi(p, t, x)}$ dont la phase est $\Phi(p, t, x)$. Considérons un point géométrique qui se déplace de dx pendant le temps dt . Le paramètre p étant donné, la variation de la phase est $d\Phi = \frac{\partial\Phi}{\partial x}dx + \frac{\partial\Phi}{\partial t}dt$. Imposons que la phase reste constante sur le point considéré. Cela implique $\frac{\partial\Phi}{\partial x}dx + \frac{\partial\Phi}{\partial t}dt = 0$. Les quantités dx et dt satisfont alors la relation

$$v_\Phi = \frac{dx}{dt} = -\frac{\partial\Phi}{\partial t} / \frac{\partial\Phi}{\partial x}$$

La vitesse, v_Φ , de déplacement de ce point est la "**vitesse de phase**". Dans le cas de la particule libre il vient $\Phi = -\frac{p^2}{2m\hbar}t + \frac{px}{\hbar} + \xi$ et par conséquent $v_\Phi = \frac{p}{2m}$. Remarquons qu'il n'y a qu'une seule vitesse de groupe pour un paquet d'ondes mais qu'il y a autant de vitesse de phase que de valeur de p dans le spectre de la fonction d'onde (une infinité en général).

4.2 La marche de potentiel

Considérons une particule de masse m soumise à l'énergie potentielle

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

Une telle "marche de potentiel" peut être réalisée par le montage suggéré figure 4-4 pour des électrons, à la limite où leurs longueurs d'onde de de Broglie sont très supérieures à a .

La marche de potentiel permet de décrire divers systèmes physiques en première approximation : la surface d'un métal par exemple. Dans le métal, on peut considérer, en première approximation, que les électrons de conduction sont mis en commun et constituent un gaz d'électrons susceptibles de se déplacer librement. Les électrons restent piégés dans le métal car il ne possèdent pas une énergie cinétique suffisante pour s'échapper.

La région I de la figure 4-4 représente alors le métal tandis que la région II représente l'extérieur du métal. L'énergie des électrons étant E (avec $E < V_0$), le seuil en fréquence de l'effet photoélectrique est ν_0 , tel que $E + h_P\nu_0 = V_0$.

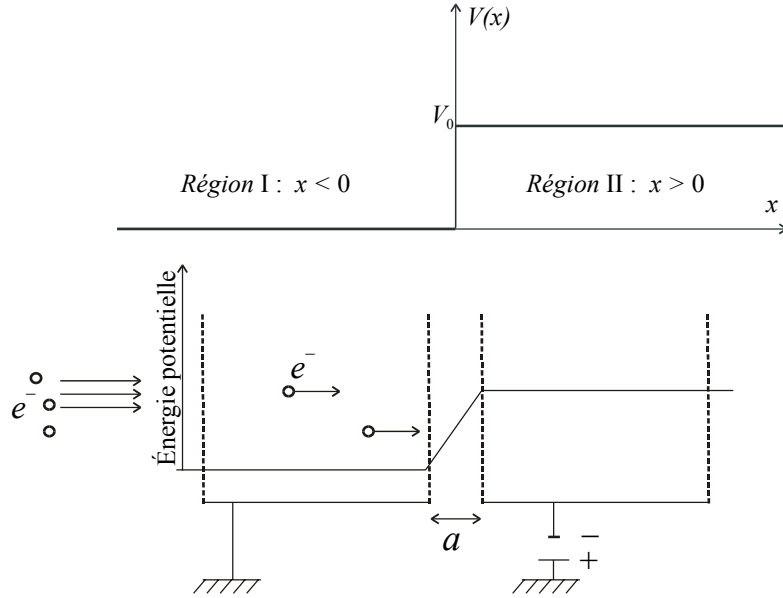


Figure 4-4.

L'hamiltonien du système est la somme de l'énergie cinétique et de l'énergie potentielle :

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x)$$

L'équation aux valeurs propres de l'énergie s'écrit $\hat{H}\psi = E\psi$. On distingue les deux cas $E > V_0$ et $E < V_0$. Pour chacun des cas il faut étudier la solution dans la région I et dans la région II et assurer le raccordement entre les expressions de la solution obtenues pour chacune des régions.

4.2.1 Le cas $E > V_0$.

a) Les solutions de l'équation aux valeurs propres de l'hamiltonien

L'équation aux valeurs propres de l'hamiltonien prend deux formes différentes selon que l'on considère la région I : $x < 0$ ou la région II : $x > 0$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi \rightarrow \begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \text{ pour } x < 0 \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V_0\psi = E\psi \text{ pour } x > 0 \end{cases}$$

Posons $k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}$ et $k' = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E - V_0)}$. Il vient

$$\psi = \begin{cases} \psi_{\text{I}}(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \text{ pour } x < 0 \\ \psi_{\text{II}}(x) = Ce^{ik'x} + De^{-ik'x} \text{ pour } x > 0 \end{cases}$$

Les diverse ondes et leur courant sont schématisés ci-dessous :

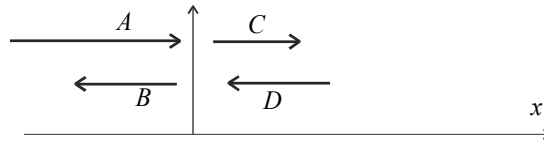


Figure 4-5.

La fonction d'onde est continue : On en déduit $\psi_I(0) = \psi_{II}(0)$ soit

$$A + B = C + D$$

La dérivée de la fonction d'onde est continue : $\left(\frac{d}{dx}\psi_I\right)_{(0)} = \left(\frac{d}{dx}\psi_{II}\right)_{(0)}$ soit

$$k(A - B) = k'(C - D)$$

Les 4 coefficients A, B, C et D sont reliés entre eux par deux équations. Les coefficients B et C peuvent donc s'exprimer en fonction de A et D . Nous définissons les fonctions u_D et u_G correspondant respectivement au cas $D = 0$ et au cas $A = 0$. On trouve

$$u_D(x) = \begin{cases} A e^{ikx} + RA e^{-ikx} & \text{pour } x < 0 \\ TA e^{ik'x} & \text{pour } x > 0 \end{cases}$$

$$u_G(x) = \begin{cases} T'D e^{-ikx} & \text{pour } x < 0 \\ D e^{-ik'x} + R'D e^{ik'x} & \text{pour } x > 0 \end{cases}$$

avec

$R = \frac{k - k'}{k + k'}$	$T = \frac{2k}{k + k'}$
$R' = \frac{k' - k}{k' + k}$	$T' = \frac{2k'}{k' + k}$

Remarquons que R et T sont réels dans le cas considéré.

Les solutions u_D et u_G sont respectivement proportionnelles aux coefficients arbitraires A et D . La solution générale est la superposition des deux fonctions : $u = u_D + u_G$ pour des valeurs de A et D a priori arbitraires, mais adaptées aux conditions physiques imposées.

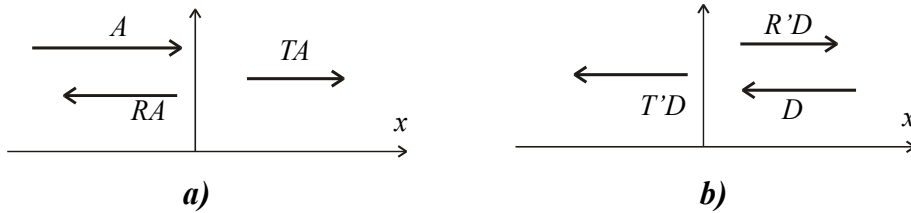


Figure 4-6.

Les courants correspondants aux diverses composantes de u_D et u_G sont représentés sur la figure 4-6. L'interprétation des solutions u_D et u_G s'en déduit.

b) *L'interprétation physique*

La fonction $u_D(x)$ représente une onde incidente issue de la région I : $\psi_i = Ae^{ikx}$. Le courant est $|A|^2 \frac{\hbar k}{m}$, il est positif. Cette onde donne naissance, dans la région I, à l'onde $\psi_R = AR e^{-ikx}$, réfléchi en $x = 0$. Le courant correspondant se dirige vers les x négatifs, il vaut $-|AR|^2 \frac{\hbar k}{m}$. Une onde est transmise dans la région II : $\psi_T = AT e^{ik'x}$. Le courant correspondant est positif : $|AT|^2 \frac{\hbar k'}{m}$.

Les coefficients R et T sont les "**coefficients de réflexion et de transmission en amplitude**".

L'état physique décrit par u_D est engendré par une source de particules (un canon à électrons par exemple) située dans la région $x < 0$.

L'interprétation hydrodynamique nous permet d'assimiler le système décrit par u_D à un fluide dont la densité linéaire moyenne de particule est $|A|^2$ dans le courant incident, $|AR|^2$ dans le courant réfléchi et $|AT|^2$ dans le courant transmis. Le nombre de particules incidentes qui atteint le point d'abscisse $x = 0$ pendant l'unité de temps est le courant associé au flux incident : $\Phi_i = |A|^2 \frac{\hbar k}{m}$. Le nombre de particules qui quitte le point d'abscisse $x = 0$ pendant l'unité de temps est $\Phi_T = |AT|^2 \frac{\hbar k'}{m}$ dans le courant transmis et $\Phi_R = |AR|^2 \frac{\hbar k}{m}$ dans le courant réfléchi. On vérifie directement la relation $1 = |R|^2 + \frac{k'}{k} |T|^2$. On en déduit $\Phi_i = \Phi_R + \Phi_T$. Cette relation signifie que le nombre de particules reste constant : il n'y a pas de particules qui disparaissent ni de particules qui apparaissent en $x = 0$, car toutes les particules qui y parviennent en repartent : il y a **conservation du nombre de particules**.

Dans le cadre classique, la particule possède l'énergie cinétique E dans la région I. Cette énergie cinétique est suffisante pour que la particule passe dans la région II où l'énergie cinétique de la particule est $E - V_0 > 0$. Aucune particule n'est réfléchi. Le phénomène de réflexion est donc un phénomène typiquement ondulatoire.

Il est possible de mettre en évidence une **analogie avec l'optique**. Dans chacune des régions on peut définir une longueur d'onde : $\lambda_I = \frac{2\pi}{k}$ et $\lambda_{II} = \frac{2\pi}{k'}$. L'indice du milieu II par rapport au milieu I est défini comme en optique : $n := \frac{\lambda_I}{\lambda_{II}} = \frac{k'}{k}$. On en déduit $R = \frac{1-n}{1+n}$ et $T = \frac{2}{1+n}$. Ces coefficients sont précisément les coefficients de réflexion et de transmission en amplitude d'une onde lumineuse au passage d'un dioptré sous l'incidence normale.

L'analogie avec l'optique se poursuit lorsqu'on étudie la densité linéaire moyenne de particules décrites par la fonction d'onde u_D (voir la figure 4-7)

$$\rho = |u_D|^2 = |A|^2 (1 + R^2 + 2R \cos(2kx)).$$

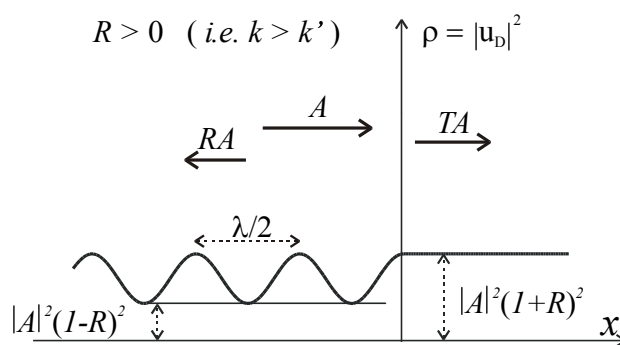


Figure 4-7.

La superposition des ondes incidente et réfléchie construit une figure d'interférences sur fond sombre, d'interfrange $\lambda/2 = \pi/k$.

La fonction $u_G(x)$ représente une onde incidente issue de la région II : $\psi'_i = De^{-ik'x}$. Le courant est $-|D|^2 \frac{\hbar k'}{m}$, il est négatif. Cette onde donne naissance, dans la région II, à l'onde $\psi'_R = DR' e^{ik'x}$, réfléchie en $x = 0$. Le courant correspondant se dirige vers les x positifs, il vaut $|DR'|^2 \frac{\hbar k'}{m}$. Une onde est transmise dans la région I : $\psi'_T = DT' e^{-ik'x}$. Le courant correspondant est négatif : $-|DT'|^2 \frac{\hbar k}{m}$.

L'état physique décrit par u_G est engendré par une source de particules située dans la région $x > 0$.

Ici encore on vérifie la conservation du nombre de particules, tandis que l'analogie avec l'optique peut-être établie comme dans le cas précédent de la fonction u_D .

4.2.2 Le cas $0 < E < V_0$.

a) Les solutions de l'équation aux valeurs propres de l'hamiltonien

L'équation aux valeurs propres de l'hamiltonien prend deux formes différentes selon que l'on considère la région I : $x < 0$ ou la région II : $x > 0$.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E \psi \rightarrow \begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E \psi \text{ pour } x < 0 \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V_0\psi = E \psi \text{ pour } x > 0 \end{cases}$$

Posons $k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}$ et $\gamma = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)}$. Il vient

$$\psi = \begin{cases} \psi_I(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \text{ pour } x < 0 \\ \psi_{II}(x) = \alpha e^{\gamma x} + \beta e^{-\gamma x} \text{ pour } x > 0 \end{cases}$$

La fonction d'onde est bornée. Cela implique $\alpha = 0$; en effet si ce n'était pas le cas $|\psi|$ deviendrait infini pour $x \rightarrow \infty$.

La fonction d'onde est continue : On en déduit $\psi_I(0) = \psi_{II}(0)$ soit

$$A + B = \beta$$

La dérivée de la fonction d'onde est continue : $\left(\frac{d}{dx}\psi_I\right)_{(0)} = \left(\frac{d}{dx}\psi_{II}\right)_{(0)}$ soit

$$ik(A - B) = -\gamma\beta$$

De ce qui précède on déduit l'expression de ψ :

$$\boxed{\psi_I(x) = Ae^{ikx} + RAe^{-ikx}, \quad \psi_{II}(x) = \tau Ae^{-\gamma x}} \text{ avec}$$

$$\boxed{R = \frac{ik + \gamma}{ik - \gamma}}, \quad \boxed{\tau = \frac{2ik}{ik - \gamma}}$$

b) *L'interprétation physique*

Dans la région I, la fonction d'onde est la superposition de l'onde $\psi_i = Ae^{ikx}$ et de l'onde $\psi_r = RAe^{-ikx}$.

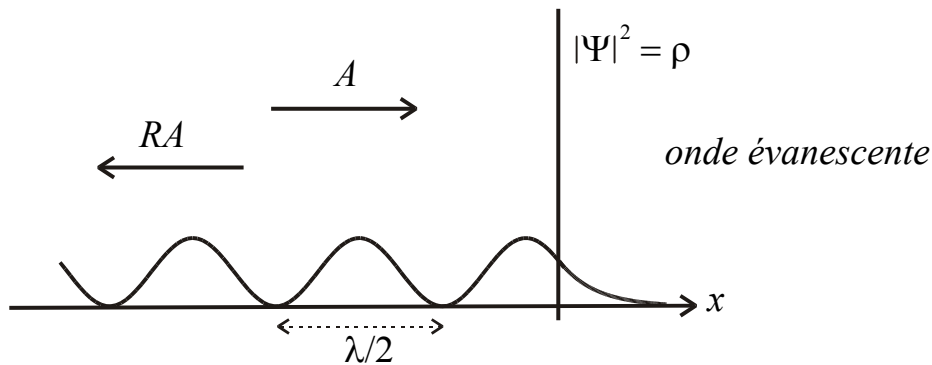
L'onde ψ_i décrit un flux de particules de courant positif $|A|^2 \frac{\hbar k}{m}$, venues de la région $x = -\infty$ et se dirigeant vers la marche de potentiel. Une telle onde représente l'onde "incidente".

L'onde ψ_r représente un flux de particule de courant $-|B|^2 \frac{\hbar k}{m}$ négatif et se dirigeant donc vers la région $x = -\infty$; l'onde ψ_r est l'onde "réfléchie". Le coefficient R est le **coefficient de réflexion en amplitude**. Le coefficient de réflexion en nombre de particules est le rapport du nombre de particules réfléchies au nombre de particules incidentes dans le même temps. Ici, c'est le rapport $\left|\frac{B}{A}\right|^2 = |R|^2$. Calculons $|R|^2$ en

utilisant l'expression de R ; il vient $\boxed{|R|^2 = 1}$. L'onde subit donc une réflexion totale dans la mesure où toute particule incidente est réfléchie.

Les ondes incidente et réfléchie construisent une figure d'interférences dans la région I. La densité de présence est $\rho_I = |\psi_I|^2$. Posons $R = |R|e^{i\theta}$, il vient $\rho_I = 2(1 + \cos(2kx - \theta))$. La réflexion étant totale, le minimum de ρ_I correspond à une frange noire. Dans la région $x < 0$ on observe donc une alternance de franges brillantes et

de frange noires. L'interfrange est $\boxed{\frac{\lambda}{2} = \frac{\pi}{k}}$



Dans la région II, la fonction d'onde est $\psi_{II} = \tau Ae^{-\gamma x}$. En utilisant l'expression 1.5 (voir aussi page 15) on vérifie aisément que le courant est nul. La densité de présence décroît de façon exponentielle quand $x \rightarrow \infty$. L'onde présente dans la région II est appelée "**onde évanescente**".

Dans la théorie classique, aucune particule ne peut passer dans la région II si son énergie cinétique dans la région I est inférieure à V_0 (soit $E < V_0$). Ici la situation est différente et ressemble à la situation que l'on rencontre en optique où le mécanisme de réflexion totale sur un dioptré engendre une onde évanescente dans le milieu le plus réfringent.

On peut aussi remarquer la relation $e^{-\gamma x} = e^{i(i\gamma x)}$ et définir l'indice $n = \frac{i\gamma}{k}$. Lorsqu'une onde électromagnétique tombe sur un métal, celui-ci peut être décrit au moyen d'un indice complexe. L'onde électromagnétique pénètre dans le métal où son amplitude décroît exponentiellement avec de la profondeur de pénétration. L'onde dans le métal est une onde évanescente. On retrouve ici un résultat similaire.

Remarques

1. Les particules produites avec l'énergie $E < V_0$ ne peuvent être produites que dans la région I: $x < 0$.
2. Considérons la densité de présence en $x > 0$. On vérifie que celle-ci tend vers zéro à la limite $V_0 \rightarrow \infty$. Ainsi dans la région II, la fonction d'onde est elle nulle dans ce cas.

Dans ces conditions la continuité de la fonction d'onde peut être assurée en posant $A + B = 0$. Par contre si on impose aussi la continuité de la dérivée il vient $A - B = 0$. La fonction d'onde serait alors identiquement nulle. Pour traiter "le mur" de potentiel correspondant à $V_0 = \infty$, on abandonne donc cette dernière condition pour privilégier la continuité de la fonction d'onde. La solution s'écrit $\psi_I = cte \times \sin kx$ avec $\psi_{II} = 0$.

3. Le cas $E < 0$ peut être étudié sans difficulté. La seule solution est $\psi = 0$. Aucune particule ne peut donc présenter une énergie négative.

4.2.3 Conclusion

Le spectre de l'hamiltonien est donc un spectre continu borné inférieurement ; les valeurs propres sont arbitraires dans l'intervalle $[0, \infty]$. Elles ne sont pas dégénérées pour $E \in [0, V_0]$. Les valeurs propres de \hat{H} sont dégénérées d'ordre 2 pour $E > V_0$.

A l'instar de la mécanique classique, la mécanique ondulatoire prévoit que les particules d'énergie assez grande ($E > V_0$) peuvent passer de la région I à la région II.

Dans le cas contraire ($E < V_0$), la mécanique ondulatoire prévoit, conformément à la mécanique classique, que les particules issues de la région I sont toutes réfléchies par la marche de potentiel et n'engendrent aucun courant dans la région II.

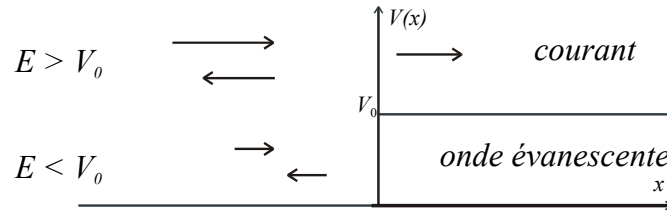
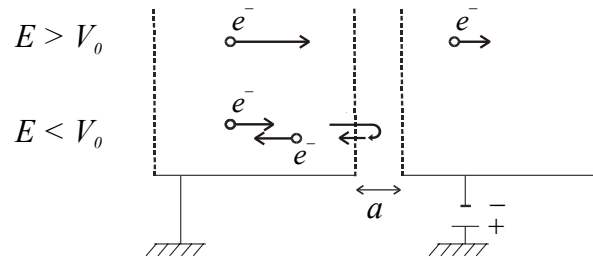
mécanique ondulatoiremécanique classique

Figure 4-8.

A la différence de ce que prévoit la mécanique classique, dans le cas $E > V_0$, toutes les particules issues de la région I (resp. II) ne sont pas transmises dans la région II (resp. I) : certaines d'entre-elles sont réfléchies. La proportion de particules réfléchies est le rapport du courants de particules réfléchies au courant de particules incidentes, soit $|R|^2$. La proportion de particules transmises est le rapport des courants correspondants, soit $|T|^2 k'/k$. La relation $|R|^2 + |T|^2 \frac{k'}{k} = 100\% := 1$ peut être vérifiée directement. Elle exprime la conservation du nombre de particules au passage de l'une des régions à l'autre.

Dans le cas $E < V_0$, il n'est pas impossible de trouver des particules dans la région II où existe une onde évanescente que ne prévoit pas la mécanique classique.

La mécanique ondulatoire apparaît donc comme compatible avec la mécanique classique du point matériel ; elle présente cependant de fortes analogies avec l'optique (on utilise parfois l'expression "optique électronique", pour décrire le fonctionnement d'un microscope électronique par exemple).

Chapitre 5 LA BARRIÈRE ET LE Puits DE POTENTIEL.

5.1 La barrière de potentiel

Considérons une particule à une dimension de masse m soumise à l'énergie potentielle $V(x)$:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{pour } |x| > a \\ V_0 & \text{pour } |x| < a \end{cases}$$

avec $V_0 > 0$.

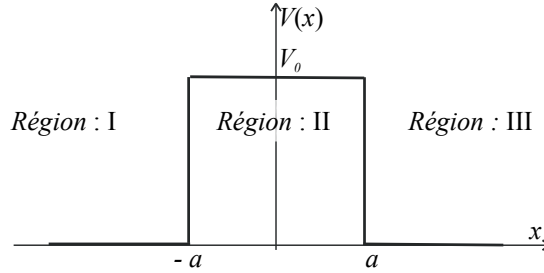


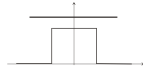
Figure 5-1.

Les fonctions propres de l'énergie satisfont l'équation

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} &= E\psi && \text{pour } |x| > a \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V_0\psi &= E\psi && \text{pour } |x| < a \end{aligned}$$

Nous distinguons les deux cas $E > V_0$ et $E < V_0$.

5.1.1 Le cas $E > V_0$.



a) Les solutions de l'équation aux valeurs propres de l'hamiltonien

La solution de l'équation aux valeurs propres de l'énergie est donnée ci-dessous pour chacune des trois régions indiquées figure 5-1

$$\begin{aligned} x < -a : & \quad \psi_{\text{I}} = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} && \text{avec } k = \sqrt{2mE} / \hbar \\ -a < x < a : & \quad \psi_{\text{II}} = Ce^{ik'x} + De^{-ik'x} && \text{avec } k' = \sqrt{2m(E - V_0)} / \hbar \\ x > a : & \quad \psi_{\text{III}} = Fe^{ikx} + Ge^{-ikx} && \text{avec } k = \sqrt{2mE} / \hbar \end{aligned}$$

La fonction ainsi définie est bornée. Nous devons nous assurer de sa continuité et de celle de sa dérivée.

La continuité de la fonction d'onde impose $\psi_I(-a) = \psi_{II}(-a)$ (continuité en $x = -a$) et $\psi_{II}(a) = \psi_{III}(a)$ (continuité en $x = a$) :

$$\begin{aligned} Ae^{-ika} + Be^{ika} &= Ce^{-ik'a} + De^{ik'a} \\ Ce^{ik'a} + De^{-ik'a} &= Fe^{ika} + Ge^{-ika} \end{aligned}$$

La continuité de la dérivée impose $\left. \frac{d\psi_I}{dx} = \frac{d\psi_{II}}{dx} \right]_{x=-a}$ et $\left. \frac{d\psi_{II}}{dx} = \frac{d\psi_{III}}{dx} \right]_{x=a}$:

$$\begin{aligned} k(Ae^{-ika} - Be^{ika}) &= k'(Ce^{-ik'a} - De^{ik'a}) \\ k'(Ce^{ik'a} - De^{-ik'a}) &= k(Fe^{ika} - Ge^{-ika}) \end{aligned}$$

Les six constantes d'intégration A, B, C, D, F et G sont reliées entre elles par 4 équations. Il est possible d'exprimer B, C, D et F en fonction de A et G . La solution générale est la superposition des deux fonctions u_D et u_G correspondant respectivement aux valeurs $G = 0$ et $A = 0$.

On trouve

$$\begin{aligned} u_D(x) &= \begin{cases} A e^{ikx} + RA e^{-ikx} & \text{pour } x < -a \\ TA e^{ik'x} & \text{pour } x > a \end{cases} \\ u_D(x) &= A\alpha e^{ik'x} + A\beta e^{-ik'x} & \text{pour } -a < x < a \\ u_G(x) &= \begin{cases} T'G e^{-ikx} & \text{pour } x < -a \\ G e^{ik'x} + R'G e^{-ik'x} & \text{pour } x > a \end{cases} \\ u_G(x) &= G\alpha' e^{ik'x} + G\beta' e^{-ik'x} & \text{pour } -a < x < a \end{aligned}$$

Les quatre équations de raccordement permettent de calculer les coefficients R, T, R' et T' ainsi que les coefficients α, β, α' et β' . On trouve par exemple

$$T = \frac{e^{-2ika}}{\cos(2k'a) - i \frac{k^2 + k'^2}{2k k'} \sin(2k'a)} \quad (5.1)$$

La solution générale, fonction propre de l'énergie pour la valeur propre $E > V_0$, est $\psi(x) = u_D(x) + u_G(x)$ pour des valeurs de A et B arbitraires, *a priori*, mais adaptées aux conditions physiques imposées.

b) Interprétation physique

La fonction d'onde $u_D(x)$ représente une onde incidente, issue de la région I. Cette onde est partiellement réfléchie et partiellement transmise dans la région III. La fonction d'onde u_G représente une onde issue de la région III qui est partiellement réfléchie et partiellement transmise dans la région I. Les coefficients R et T sont les coefficient de réflexion et de transmission en amplitude de l'onde u_D , tandis que R' et T' sont les coefficients de réflexion et de transmission associés à l'onde u_G (voir la figure 5-2)

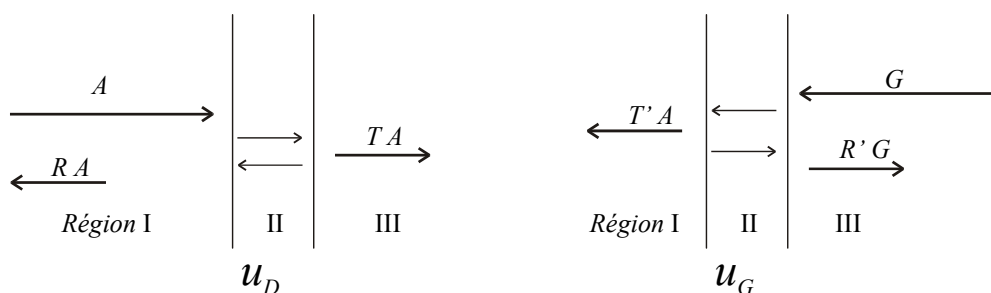


Figure 5-2.

Le flux incident est $|A|^2 \frac{\hbar k}{m}$, le flux transmis dans la région III est $|TA|^2 \frac{\hbar k}{m}$. Le coefficient de transmission en intensité est le rapport de ces deux flux, il vaut $|T|^2$. De même, le coefficient de réflexion en intensité est $|R|^2$. La relation $|R|^2 + |T|^2 = 1$ peut être vérifiée à partir de l'expression de R et T . Elle assure la conservation du nombre de particules : le nombre de particules qui pénètrent dans la barrière est égal aux nombre de particules qui en sortent pendant le même temps.

De même, on peut démontrer la conservation du nombre de particules à l'interface entre deux régions voisines. Entre les régions I et II par exemple, on écrit que le nombre de particules qui atteignent le point d'abscisse $x = -a$ pendant le temps dt est égal au nombre de particules qui s'éloignent de ce même point pendant le même temps : $|A|^2 \frac{\hbar k}{m} + |\beta|^2 \frac{\hbar k'}{m} = |RA|^2 \frac{\hbar k}{m} + |\alpha|^2 \frac{\hbar k'}{m}$.

Nous donnons ci-dessous (figure 5-3) la représentation de la densité de présence d'une particule dont la fonction d'onde est $u_D(x) : \rho(x) = |u_D(x)|^2$.

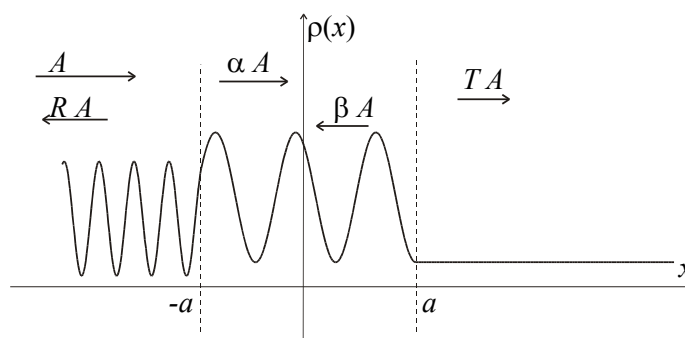
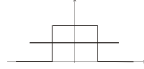


Figure 5-3.

On remarquera la continuité de ρ et de sa dérivée, conséquences des conditions de passage en $x = -a$ et $x = a$. Dans la région II la densité de présence maximale est supérieure à la densité maximale dans la région I, cependant le courant y est inférieur au courant incident car $k' < k$.

L'expression 5.1 du coefficient de transmission montre que celui-ci est toujours inférieur ou égal à l'unité. Pour $|T|^2 = 1$ la transmission est totale; le coefficient de réflexion est alors nul. Ceci se produit pour $2k'a = N\pi$, où N est un entier. En introduisant λ' , longueur d'onde de de Broglie dans la région II, il vient $2a = N \frac{\lambda'}{2}$. C'est une condition semblable que l'on impose aux couches antireflet ; dans ce cas ce sont des ondes lumineuses qui sont concernées et non des ondes de matière mais l'analogie méritait d'être soulignée.

Lorsque la transmission est totale, la barrière introduit, sur l'onde incidente, un déphasage en $x = a$, mais n'en modifie pas l'amplitude.

5.1.2 Le cas $0 < E < V_0$. 

a) Les solutions de l'équation aux valeurs propres de l'hamiltonien

La solution de l'équation aux valeurs propres de l'énergie est donnée ci-dessous pour chacune des trois régions indiquées figure 5-1

$$\begin{aligned} x < -a : & \quad \psi_{\text{I}} = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & \text{avec } k = \sqrt{2mE} / \hbar \\ -a < x < a : & \quad \psi_{\text{II}} = Ce^{\gamma x} + De^{-\gamma x} & \text{avec } \gamma = \sqrt{2m(V_0 - E)} / \hbar \\ x > a : & \quad \psi_{\text{III}} = Fe^{ikx} + Ge^{-ikx} & \text{avec } k = \sqrt{2mE} / \hbar \end{aligned}$$

La fonction ainsi définie est bornée. Nous devons nous assurer de sa continuité et de celle de sa dérivée. Les équations de passage sont

$$\begin{aligned} Ae^{-ika} + Be^{ika} &= Ce^{-\gamma a} + De^{\gamma a} \\ Ce^{\gamma a} + De^{-\gamma a} &= Fe^{ika} + Ge^{-ika} \\ ik(Ae^{-ika} - Be^{ika}) &= \gamma a(Ce^{-\gamma a} - De^{\gamma a}) \\ \gamma a(Ce^{\gamma a} - De^{-\gamma a}) &= ik(Ae^{ika} - Be^{-ika}) \end{aligned}$$

Ici encore nous distinguons les deux solutions u_D correspondant à $G = 0$ et u_G correspondant à $A = 0$.

La solution générale, fonction propre de l'énergie pour la valeur propre $E > V_0$, est $\psi(x) = u_D(x) + u_G(x)$ pour des valeurs de A et B arbitraires, *a priori*, mais adaptées aux conditions physiques imposées.

La fonction d'onde $u_D(x)$ décrit un courant positif, de particules incidentes issues de la région I tandis que $u_G(x)$ décrit des particules issues de la région III :

$$\boxed{u_D(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + AR e^{-ikx} & \text{pour } x < a \\ AT e^{ikx} & \text{pour } x > a \end{cases}}$$

$$u_D(x) = A\alpha e^{\gamma x} + A\beta e^{-\gamma x}$$

Le coefficient de transmission, T , se déduit de l'expression 5.1 ci-dessus en effectuant la substitution $ik' \rightarrow \gamma$ et en utilisant la relation $\cos(i\theta) = \cosh \theta := \frac{1}{2}(e^\theta + e^{-\theta})$ ainsi que $\sin(i\theta) = i \sinh \theta = \frac{i}{2}(e^\theta - e^{-\theta})$:

$$T = \frac{e^{-2ika}}{\cosh(2\gamma a) - i \frac{k^2 - \gamma^2}{2k\gamma} \sinh(2\gamma a)}$$

b) L'effet tunnel

Dans le cadre de la théorie classique, l'énergie cinétique des particules dans la région I est E . Cette valeur est insuffisante pour que les particules issues de la région I passent dans la région II où leur énergie potentielle, V_0 , serait supérieure à E . Les particules sont toutes réfléchies. La situation est différente dans le cadre de la mécanique

ondulatoire où la barrière de potentiel présente un coefficient de transmission non nul. Cet effet est appelé "*effet tunnel*".

L'image véhiculée par cette dénomination est la suivante. Pour qu'un véhicule passe un col de montagne sur son élan, il faut qu'il possède, au pied de la montagne, une énergie cinétique, E , supérieure (ou égale) à l'énergie potentielle, V_0 , qu'il aura au sommet du col. A cette seule condition le véhicule pourra passer sur l'autre versant de la montagne. Si ce n'est pas le cas (pour $E < V_0$), le véhicule peut atteindre l'autre versant de la montagne en empruntant un tunnel.

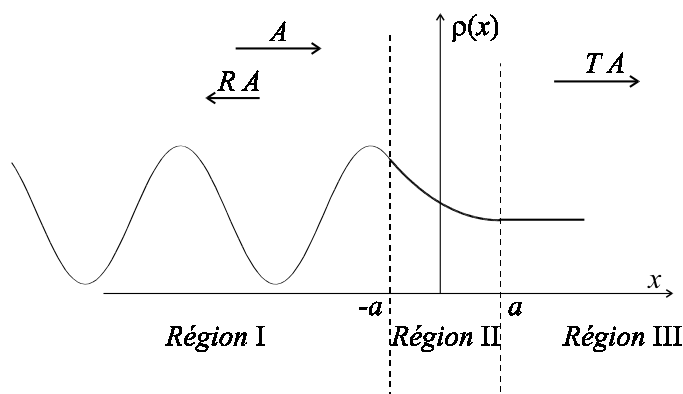


Figure 5-4.

La figure 5-4 donne une représentation de la densité de présence, $\rho(x)$, d'une particule décrite par la fonction d'onde $u_D(x)$. Dans la région I, l'onde est la superposition d'une onde incidente dont le courant est $|A|^2 \frac{\hbar k}{m}$ et d'une onde réfléchie de courant $-|AR|^2 \frac{\hbar k}{m}$, le courant transmis dans la région III est alors $|AT|^2 \frac{\hbar k}{m}$. La conservation du nombre de particules s'écrit encore $|R|^2 + |T|^2 = 1$.

Dans la région II, intermédiaire, règne une onde évanescence. On vérifie aisément l'absence de tout courant.

c) *Microscopie à effet tunnel*[†]

Nous avons vu qu'une marche de potentiel est susceptible de décrire la surface d'un métal (voir page 56). Deux solides métalliques voisins peuvent être décrits par deux marches de potentiel qui se raccordent. L'ensemble constitue une barrière de potentiel. On applique une différence de potentiel entre les deux solides métalliques de façon à créer un courant électrique (figure 5-5 b). Le courant traverse la barrière par effet tunnel. Son intensité est très sensible à l'épaisseur, $2a$, de la barrière.

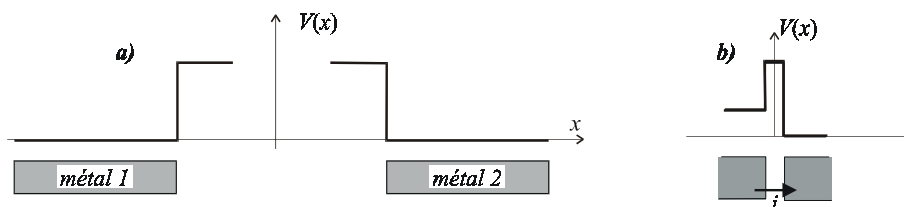


Figure 5-5.

[†]STM ou "scanning tunneling microscopy" en Anglais.

Dans le microscope à effet tunnel, l'un des conducteurs (ou semiconducteur)[†] est une surface horizontale à étudier tandis que le second conducteur est une pointe verticale, en or, platine ou tungstène, dont l'extrémité est constituée par un atome (dans le cas idéal).

Cette pointe est solidaire de céramiques piézoélectriques qui peuvent lui faire subir des déplacements verticaux de très faible amplitude ainsi qu'un balayage horizontal dont l'amplitude peut être de l'ordre de quelques nanomètres à quelques micromètres.

La pointe est située à une distance de l'ordre de quelques angströms de la surface métallique que l'on souhaite étudier.

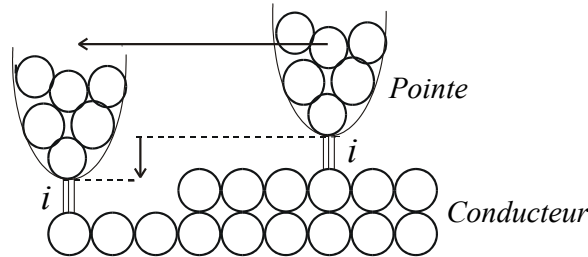


Figure 5-6.

Entre la pointe et la surface on applique une différence de potentiel de l'ordre de quelques millivolts à quelques volts. Il apparaît un très faible courant électrique (de l'ordre de ou inférieur au nanoampère). Dans le mode de fonctionnement le plus courant, on balaye alors la zone à étudier en déplaçant verticalement la pointe pour maintenir le courant constant. La position horizontale de la pointe étant résolue avec une précision de l'ordre de 10^{-2} nm et les déplacements verticaux avec une précision de l'ordre de 10^{-3} nm, on obtient une topographie précise de la surface étudiée.

Les précautions à prendre sont nombreuses : il faut amortir les vibrations mécaniques du microscope, prévenir l'oxydation de la pointe, éviter le dépôt d'un film d'eau sur la pointe et la surface à étudier, etc. La réalisation de la pointe, le contrôle de sa position à la précision requise (mieux que le nanomètre), l'amplification et la mesure de très faibles intensités (etc.) sont des opérations techniquement délicates aussi, bien que l'idée en fut plus ancienne[‡], ce n'est qu'en 1983 que le premier appareil a été réalisé par G. Binning et H. Rohrer au laboratoire de recherche d'IBM à Zürich, ce qui leur valut le prix Nobel de physique en 1986.

Le microscope à effet tunnel permet la construction d'objets atome par atome. C'est le microscope à effet tunnel qui, en 1990, permit à des chercheurs d'IBM d'ouvrir l'histoire des "*nanotechnologies*" en dessinant les trois lettres I B M avec 35 atomes de xénon sur une surface de nickel.

5.1.3 Conclusion

On peut démontrer qu'aucune solution n'existe pour $E < 0$.

Le spectre de l'hamiltonien est donc un spectre continu. Les valeurs propres sont positives et dégénérées d'ordre 2. Cette dégénérescence d'ordre 2 est directement liée à la possibilité de disposer de deux sortes de sources différentes :

la première, située dans la région I, produit des particules d'énergie E se dirigeant vers les x positifs (courant incident positif),

la seconde, située dans la région III, engendre un courant incident négatif (particules se dirigeant vers les x négatifs).

[†]Pour étudier la surface d'un isolant, on utilise le microscope à forces atomiques.

[‡]La première observation de l'effet tunnel entre deux métaux séparés par du vide fut rapporté par Young and al. en 1971. Cependant, les problèmes techniques ne permirent pas, à l'époque, la construction d'images à l'échelle atomique.

Pour la marche de potentiel, dans le cas étudié page 59, aucune source dans la région $x > 0$ ne peut produire des particules d'énergie $E < V_0$ se dirigeant vers les x négatifs. La valeur, E , de l'énergie n'est donc pas dégénéré dans ce cas.

5.2 Le puits de potentiel

Considérons une particule à une dimension de masse m soumise à l'énergie potentielle $V(x)$:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{pour } |x| > a \\ V_0 & \text{pour } |x| < a \end{cases} \quad (5.2)$$

avec $V_0 < 0$.

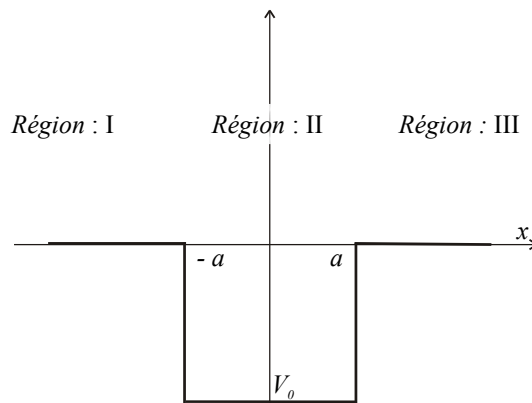


Figure 5-7.

Comme pour la barrière de potentiel, notre but est l'étude du spectre de l'hamiltonien et des fonctions propres associés.

On distingue deux cas selon que E est supérieur ou inférieur à 0.

5.2.1 Le cas $E > 0$.

Lorsque l'énergie est positive, on étudie les fonctions propres de l'énergie comme pour la barrière. Les résultats sont similaires. La seule différence réside dans le fait que k' est maintenant supérieur à k .

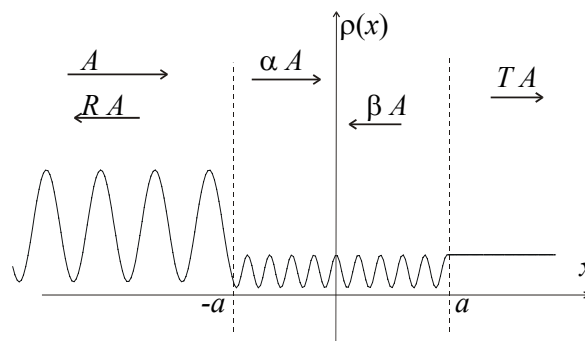
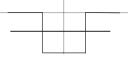


Figure 5-8.

La solution générale, fonction propre de l'énergie pour la valeur propre $E > 0$, est $\psi(x) = u_D(x) + u_G(x)$ pour des valeurs de A et B arbitraires, *a priori*, mais adaptées aux conditions physiques imposées.

5.2.2 Le cas $V_0 < E < 0$. 

La forme de la fonction d'onde dans les diverses régions est la suivante

$$\begin{aligned} x < -a : & \quad \psi_{\text{I}} = Ae^{\gamma x} + Be^{-\gamma x} & \text{avec } \gamma = \sqrt{-2mE} / \hbar \\ -a < x < a : & \quad \psi_{\text{II}} = Ce^{ikx} + De^{-ikx} & \text{avec } k = \sqrt{2m(E - V_0)} / \hbar \\ x > a : & \quad \psi_{\text{III}} = Fe^{\gamma x} + Ge^{-\gamma x} & \text{avec } \gamma = \sqrt{-2mE} / \hbar \end{aligned}$$

La fonction d'onde est bornée. Cette condition impose $B = F = 0$. On en déduit

$$\psi_{\text{I}} = Ae^{\gamma x}, \quad \psi_{\text{II}} = Ce^{ikx} + De^{-ikx}, \quad \psi_{\text{III}} = Ge^{-\gamma x} \quad (5.3)$$

Les conditions de continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée fournissent 4 équations :

$$\begin{aligned} \text{en } x = -a : & \quad Ae^{-\gamma a} = Ce^{-ika} + De^{ika}, \quad \gamma Ae^{-\gamma a} = ik(Ce^{-ika} - De^{ika}) \\ \text{en } x = a : & \quad Ge^{-\gamma a} = Ce^{ika} + De^{-ika}, \quad -\gamma Ge^{-\gamma a} = ik(Ce^{ika} - De^{-ika}) \end{aligned}$$

Nous sommes en présence d'un système linéaire de 4 équations à 4 inconnues (A, C, D et G). En règle général la solution est $A = C = D = G = 0$ sauf si le déterminant, Δ , associé au système est nul. Dans ce cas, les quatre équations ne sont pas indépendantes. La solution $A = C = D = G = 0$ n'est pas acceptable dans la mesure où elle décrit une particule qui n'est nulle part ! Les solutions acceptables existent donc dans le seul cas $\Delta = 0$:

$$\Delta = \begin{vmatrix} e^{-ika} & e^{ika} & -e^{-\gamma a} & 0 \\ ik e^{-ika} & -ik e^{ika} & -\gamma e^{-\gamma a} & 0 \\ e^{ika} & e^{-ika} & 0 & -e^{-\gamma a} \\ ik e^{ika} & -ik e^{-ika} & 0 & \gamma e^{-\gamma a} \end{vmatrix} = 0$$

Les quantités γ et k sont des fonctions de E . La condition $\Delta = 0$ peut donc être considérée comme une équation que E doit satisfaire. Ainsi seules certaines valeurs de E seront éventuellement acceptables. Le cas échéant, dans la région $V_0 < E < 0$, le spectre de l'énergie sera discret.

Pour étudier le spectre de l'énergie nous pourrions expliciter l'équation $\Delta = 0$, en chercher les solutions et étudier les fonctions propres correspondantes. Nous emploierons cependant une méthode différente.

5.2.3 L'opérateur parité.

Définissons l'opérateur parité \mathcal{P} : $\boxed{\mathcal{P}\psi(x) := \psi(-x)}$

a) \mathcal{P} est hermitique

On vérifie que \mathcal{P} est un opérateur hermitique.

En effet $\langle \varphi | \mathcal{P}\psi \rangle := \int_{-\infty}^{\infty} \overline{\varphi(x)} \mathcal{P}\psi(x) dx := \int_{-\infty}^{\infty} \overline{\varphi(x)} \psi(-x) dx$. Effectuons le changement de variable $x = -u$. Il vient

$$\langle \varphi | \mathcal{P}\psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \overline{\varphi(-u)} \psi(u) du = \int_{-\infty}^{\infty} \overline{(\mathcal{P}\varphi(u))} \psi(u) du = \langle \mathcal{P}\varphi | \psi \rangle.$$

Nous avons donc démontré l'hermiticité de \mathcal{P} , c'est-à-dire la relation $\langle \varphi | \mathcal{P}\psi \rangle = \langle \mathcal{P}\varphi | \psi \rangle$.

b) \mathcal{P} est une observable

Pour vérifier que \mathcal{P} est un opérateur observable, il faut vérifier que toute fonction d'onde est une somme de fonctions propres de \mathcal{P} . L'équation aux valeurs propres de \mathcal{P} s'écrit : $\mathcal{P}\psi(x) = \lambda \psi(x)$. En utilisant la définition de \mathcal{P} il vient $\psi(-x) = \lambda \psi(x)$ soit encore $\mathcal{P}[\psi(-x)] = \lambda \mathcal{P}[\psi(x)]$ ce qui s'écrit $\psi(x) = \lambda \psi(-x)$. On en déduit

$$\psi(x) = \lambda \psi(-x) = \lambda^2 \psi(x) \Rightarrow \lambda^2 = 1$$

L'opérateur \mathcal{P} étant hermitique, ses valeurs propres sont réelles ; par conséquent $\lambda = \pm 1$.

Pour $\lambda = 1$ l'équation aux valeurs propres de \mathcal{P} s'écrit $\psi(-x) = \psi(x)$: les fonctions paires sont donc les fonctions propres de l'opérateur parité pour la valeur propre $\lambda = 1$.

Pour $\lambda = -1$ l'équation aux valeurs propres de \mathcal{P} s'écrit $\psi(-x) = -\psi(x)$: les fonctions impaires sont donc les fonctions propres de l'opérateur parité pour la valeur propre $\lambda = -1$.

Soit $\psi(x)$ une fonction quelconque : $\psi(x) = \frac{1}{2} \{\psi(x) + \psi(-x)\} + \frac{1}{2} \{\psi(x) - \psi(-x)\}$.

La fonction $\frac{1}{2} \{\psi(x) + \psi(-x)\}$ est une fonction paire tandis que $\frac{1}{2} \{\psi(x) - \psi(-x)\}$ est une fonction impaire. Toute fonction d'onde est donc la somme de une ou deux fonctions propres de l'opérateur \mathcal{P} : celui-ci est donc un opérateur observable.

c) Calcul de $[\mathcal{P}, \hat{H}]$

Considérons l'hamiltonien d'une particule de masse m soumise à l'énergie potentielle quelconque $V(x)$: $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)$. Pour calculer le commutateur $[\mathcal{P}, \hat{H}]$, nous formons $\mathcal{P}\hat{H}\psi(x) - \hat{H}\mathcal{P}\psi(x)$.

La fonction dérivée de ψ est notée ψ' et sa dérivée seconde est notée ψ'' .

$$\mathcal{P}\hat{H}\psi(x) = \mathcal{P}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + V(x)\psi(x)\right) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''\right)_{(-x)} + V(-x)\psi(-x).$$

Pour calculer $\hat{H}\mathcal{P}\psi(x)$ nous utilisons la relation $\frac{d\psi(-x)}{dx} = -1 \times (\psi')_{(-x)}$ d'où on déduit $\frac{d^2\psi(-x)}{dx^2} = (\psi'')_{(-x)}$.

$$\hat{H}\mathcal{P}\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(-x) + V(x)\psi(-x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''\right)_{(-x)} + V(x)\psi(-x).$$

De ce qui précède on déduit $\mathcal{P}\hat{H}\psi(x) - \hat{H}\mathcal{P}\psi(x) = [V(-x) - V(x)]\psi(-x)$ quelle que soit ψ .

Dans le cas particulier où $V(x)$ est une fonction paire, $V(x) = V(-x)$, il vient $[\mathcal{P}, \hat{H}] = 0$. Dans ce cas, il existe une base de l'espace des états formée de vecteurs propres communs à \hat{H} et \mathcal{P} .

L'énergie potentielle $V(x)$, donnée par l'expression 5.2 est une fonction paire de x . Nous nous proposons donc d'étudier les fonctions propres de \hat{H} qui sont soit paires, soit impaires.

5.2.4 Etats propres de l'énergie dans cas $V_0 < E < 0$: fonctions paires

La fonction cherchée est de la forme donnée par les expressions 5.3 avec $\psi_I(-x) = \psi_{III}(x)$ et $\psi_{II}(-x) = \psi_{II}(x)$. On en déduit

$$\psi_I(x) = Ae^{\gamma x}, \quad \psi_{II}(x) = B \cos(kx), \quad \psi_{III}(x) = Ae^{-\gamma x}$$

où A et B sont des coefficients, arbitraires *a priori*. La fonction ainsi définie étant paire, il suffit d'imposer les conditions de continuité en $x = a$; dès lors les conditions de continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée seront assurées en $x = -a$:

$$B \cos(ka) = Ae^{-\gamma a}, \quad -Bk \sin(ka) = -\gamma Ae^{-\gamma a}$$

La solution de ces équations est $A = B = 0$ sauf pour $\cos(ka) = \frac{k}{\gamma} \sin(ka)$.

On définit

$$\boxed{\xi := ka := \frac{a}{\hbar} \sqrt{2m(E - V_0)}} \quad \text{et} \quad \boxed{\theta := \frac{a}{\hbar} \sqrt{-2mV_0}}$$

On en déduit $\gamma a = \frac{a}{\hbar} \sqrt{-2mE} = \sqrt{\theta^2 - \xi^2}$ et $\frac{k}{\gamma} = \frac{\xi}{\sqrt{\theta^2 - \xi^2}}$.

La relation $\cos(ka) = \frac{k}{\gamma} \sin(ka)$ s'écrit encore

$$\frac{1}{\tan \xi} = \frac{\xi}{\sqrt{\theta^2 - \xi^2}} := \eta_p(\xi) \quad (5.4)$$

Nous résolvons graphiquement cette équation. Sur la figure 5-9 nous avons représenté le graphe des deux fonctions $\xi \mapsto 1/\tan \xi$ et $\xi \mapsto \eta_p(\xi)$. L'intersection de ces deux courbes détermine les valeurs de ξ , solutions de l'équation 5.4 et par conséquent les valeurs de $E = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \xi^2 + V_0$.

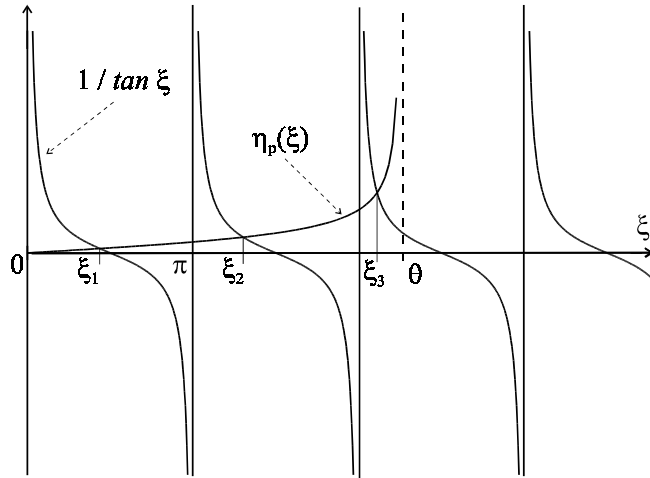


Figure 5-9.

Remarquons que les solutions sont en nombre fini (trois solutions apparaissent sur la figure 5-9). Quelle que soit la valeur de θ , il y a toujours une solution ; il n'y en a qu'une seule pour $\theta < \pi$ et au moins 2 pour $\theta > \pi$.

Pour une valeur propre de l'énergie, E , la solution paire est de la forme

$$\psi_{\text{I}}(x) = A \cos(ka) e^{\gamma x}, \quad \psi_{\text{II}}(x) = A e^{-\gamma a} \cos(kx), \quad \psi_{\text{III}}(x) = A \cos(ka) e^{-\gamma x}$$

A chaque valeur de l'énergie correspond une fonction propre de l'hamiltonien, définie à un facteur multiplicatif près (ici c'est A). L'énergie n'est donc pas dégénérée.

La densité de présence de la particule est représentée sur la figure 5-10.

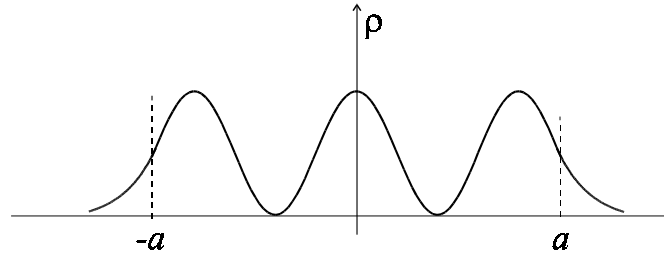


Figure 5-10.

Dans les régions I et III l'onde est évanescente. Dans la région II l'onde est une superposition de deux ondes de courants opposés qui donnent lieu à une figure d'interférences sur fond noir. A l'origine, $x = 0$, se trouve une frange brillante.

5.2.5 Etats propres de l'énergie dans cas $V_0 < E < 0$: fonctions impaires

Le cas des fonctions impaires se traite de façon semblable au cas des fonctions paires. On trouve

$$\psi_I(x) = -Ae^{\gamma x}, \quad \psi_{II}(x) = B \sin(kx), \quad \psi_{III}(x) = Ae^{-\gamma x}$$

avec

$$B \sin(ka) = Ae^{-\gamma a} \text{ et } kB \cos(ka) = -\gamma Ae^{-\gamma a}$$

La condition d'existence d'une fonction d'onde non nulle s'écrit $\sin(ka) = -\frac{k}{\gamma} \cos(ka)$.

Avec les définitions déjà posées de ξ et θ , il vient

$$\frac{1}{\tan \xi} = -\frac{\sqrt{\theta^2 - \xi^2}}{\xi} := \eta_i(\xi)$$

La solution graphique de cette équation est donnée sur la figure 5-11.

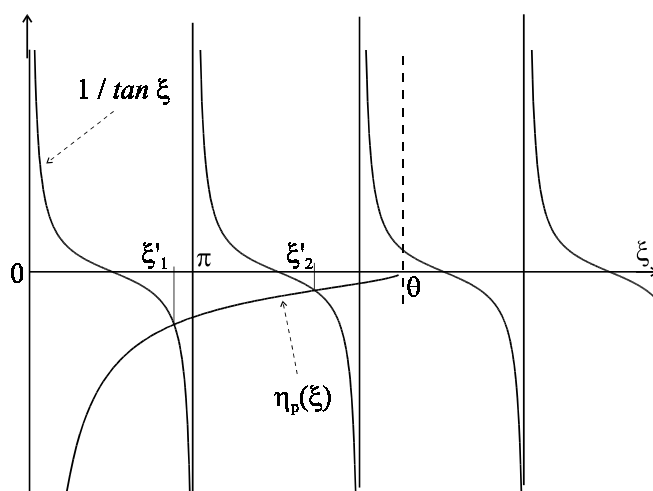


Figure 5-11.

Remarquons qu'il n'existe aucune solution impair pour $\theta < \pi/2$.

Pour une valeur propre de l'énergie, E , la solution impaire est de la forme

$$\psi_I(x) = -A \sin(ka) e^{\gamma x}, \quad \psi_{II}(x) = Ae^{-\gamma a} \sin(kx), \quad \psi_{III}(x) = A \sin(ka) e^{-\gamma x}$$

Ici encore, les énergies ne sont pas dégénérées.

La densité de présence de la particule est représentée sur la figure 5-12.

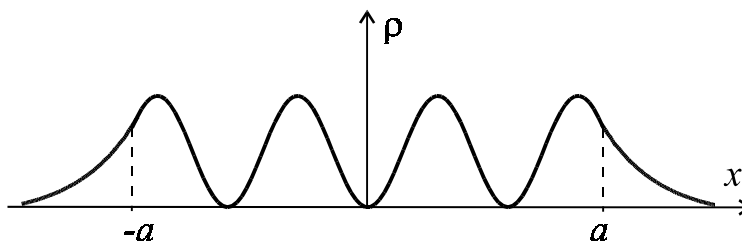


Figure 5-12

Dans les régions I et III l'onde est évanescente. Dans la région II l'onde est une superposition de deux ondes de courants opposés qui donnent lieu à une figure d'interférences sur fond noir. A l'origine, $x = 0$, se trouve une frange noire.

5.2.6 Conclusion

Le spectre de l'énergie est continu et dégénéré d'ordre 2 pour $E > 0$. Il est discret et non dégénéré pour $V_0 < E < 0$.

Dans le cas des solutions $V_0 < E < 0$, les fonctions propres de l'énergie décroissent rapidement lorsqu'on s'éloigne du puits. Cela signifie que la probabilité de trouver la particule loin de l'origine est très faible. On dit que ces états sont des "*états liés*". Par opposition, les états correspondant à des flux non nuls vers $x = \pm\infty$ sont appelés "*états libres*".

5.3 Conclusion en forme de synthèse

Dans l'étude de la marche, de la barrière et du puits de potentiel nous avons souligné le caractère continu ou discret, dégénéré ou non du spectre de l'hamiltonien. Ces résultats se généralisent au cas où l'énergie potentielle cesse d'être constante par morceau. Le diagramme de la figure 5-13 résume les propriétés générales des modèles à une dimension.

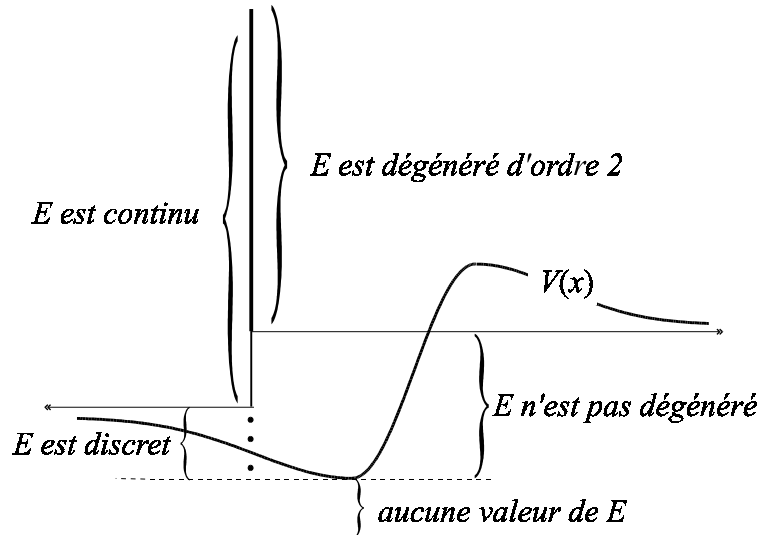


Figure 5-13.

Une question se pose, concernant la valeur précise de l'énergie potentielle. Dans le cadre de la théorie classique l'énergie potentielle est définie à une constante additive près. Qu'en est-il dans le cadre de la théorie quantique ?

Nous savons que deux fonctions d'onde proportionnelles décrivent le même état physique (voir page 26). Ainsi $\psi(t, \vec{r})$ et $\varphi(t, \vec{r}) = f(t) \psi(t, \vec{r})$ décrivent le même état physique. Cependant la forme du produit scalaire est en général modifiée sauf dans le cas où $f(t) = e^{i\theta(t)}$, la fonction $\theta(t)$ étant une fonction réelle du temps t . En effet, dans ce cas $\psi(t, \vec{r}) = e^{-i\theta(t)} \varphi(t, \vec{r})$, on en déduit

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle := \iiint \bar{\psi}_1 \psi_2 d^3x = \iiint \overline{(e^{-i\theta(t)} \varphi_1)} e^{-i\theta(t)} \varphi_2 d^3x = \iiint \bar{\varphi}_1 \varphi_2 d^3x$$

Le même état physique est décrit aussi bien par $\psi(t, \vec{r})$ que par $\varphi(t, \vec{r})$, et en outre, les expressions mathématiques des diverses grandeurs physiques sont formellement les mêmes : expression et spectre d'une observable, probabilités des divers résultats possibles d'une mesure, valeur moyenne d'un opérateur, etc... Une seule différence subsiste, elle concerne l'hamiltonien qui régit l'évolution de la fonction d'onde. L'équation

d'évolution de ψ s'écrit $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi$. En remplaçant $\psi(t, \vec{r})$ par $e^{-i\theta(t)}\varphi(t, \vec{r})$ il vient $i\hbar \left(-i \frac{d\theta}{dt} e^{-i\theta(t)}\varphi + \frac{\partial \varphi}{\partial t} e^{-i\theta(t)} \right) = \hat{H} (e^{-i\theta(t)}\varphi)$. Pour $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r})$, on vérifie aisément la relation $\hat{H} (e^{-i\theta(t)}\varphi) = e^{-i\theta(t)}\hat{H}\varphi$. On en déduit $i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \hat{H}\varphi - \hbar \frac{d\theta}{dt}\varphi$. Les équations d'évolution de φ et ψ sont régies par des hamiltoniens différents

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r}) \right] \psi, \quad i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r}) - \hbar \frac{d\theta}{dt} \right] \varphi$$

Les énergies potentiels diffèrent d'une constante additive arbitraire dans le cas où θ est choisi de telle sorte que $\frac{d^2\theta}{dt^2} = 0$. Ici encore, l'énergie potentielle est définie à une constante additive près. Cette constante peut même être choisie fonction du temps. Les conventions généralement respectées consiste à poser $\lim_{\|\vec{r}\| \rightarrow \infty} V(\vec{r}) = 0$ quand c'est possible. *Dans ces conditions les états liés présentent une énergie négative.*

Chapitre 6 LE POTENTIEL PÉRIODIQUE

6.1 Le double puits de potentiel

Considérons une particule de masse m soumise à l'énergie potentielle $V(x)$ dont le graphe est représenté sur la figure 6-1.

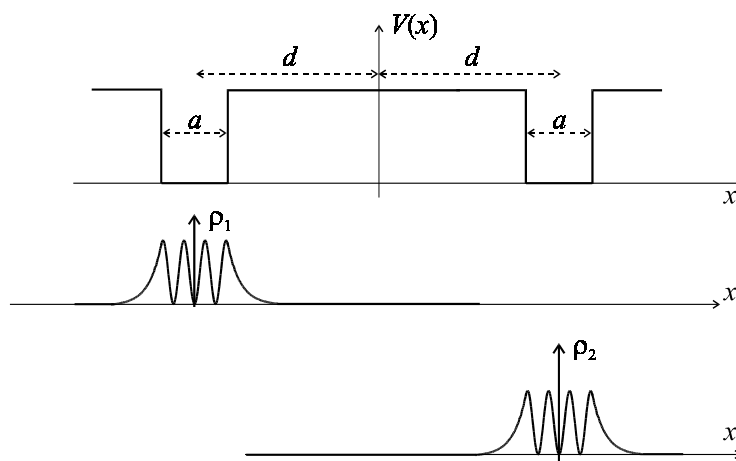


Figure 6-1.

Si d est assez grand, chacun des puits peut être étudié indépendamment de l'autre. Les puits étant identiques, ils présentent des spectres d'énergie identiques. Soit E l'une des valeurs du spectre. Une particule piégée dans le premier puits avec l'énergie E a pour fonction d'onde $u_1(x)$. La particule piégée dans le second puits avec la même énergie E est décrite par la fonction d'onde $u_2(x)$. Les fonctions u_1 et u_2 représentent deux états de même énergie. Elles se déduisent de l'étude générale des fonctions $u_E(x)$ du paragraphe 5.2. Les densités de présence, ρ_1 et ρ_2 , correspondant à deux solutions de même énergie E , sont représentées sur la figure 6-1. Toute combinaison linéaire de u_1 et u_2 est une fonction propre de l'hamiltonien \hat{H} pour la valeur propre E . Cette valeur propre se trouve donc dégénérée d'ordre 2^\dagger .

Lorsque la distance $2d$, entre les deux puits diminue le potentiel se présente sous la forme d'un puits de potentiel unique présentant en son milieu une barrière de potentiel (voir la figure 6-2 a). Nous assimilons cette barrière de potentiel à la fonction $W_0 \delta(x)$ où l'on a posé $W_0 = \int_{-d-\varepsilon}^{d+\varepsilon} V(x) dx = 2d V_0$, tandis que $\delta(x)$ est la fonction généralisée de Dirac.

[†]Les résultats généraux du paragraphe 5.3 page 74 ne sont pas remis en cause car, en toute rigueur, il n'y a dégénérescence que pour $d \rightarrow \infty$.

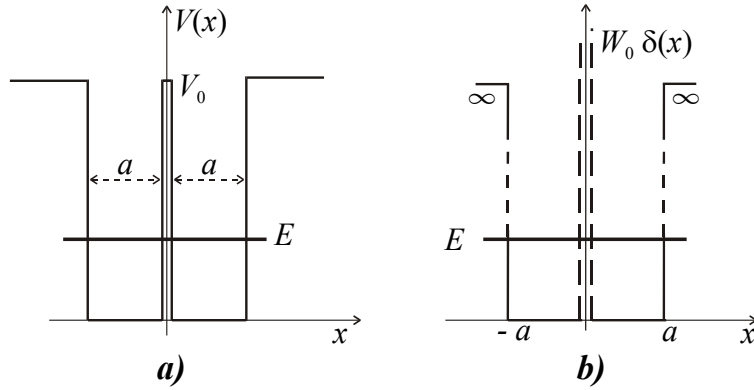


Figure 6-2.

Nous considérons le cas où l'énergie E satisfait la relation $0 < E \ll V_0$. Dans ces conditions, par souci de simplification, nous admettons que V_0 est pratiquement infini. L'énergie potentielle est alors la fonction $V(x)$ de la figure 6-2 b), telle que

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{pour } |x| > a \\ W_0 \delta(x) & \text{pour } |x| < a \end{cases}$$

Soit $u_E(x)$ une fonction propre de l'hamiltonien pour la valeur propre E . La fonction u_E satisfait l'équation

$$-\frac{\hbar^2}{2m} u_E''(x) + V(x) u_E(x) = E u_E(x) \quad (6.1)$$

Les conditions de continuité en $x = \pm a$ imposent la condition $u_E(\pm a) = 0$. Aucune condition de continuité n'est imposée sur la dérivée de u_E pour les raisons déjà évoquées page 35 (§2).

En $x = 0$ on impose la continuité de la fonction u_E . Pour obtenir la condition imposée sur la dérivée de u_E on intègre l'équation 6.1 entre $-\varepsilon$ et ε où ε est une quantité positive arbitrairement petite :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (u_E'(\varepsilon) - u_E'(-\varepsilon)) + W_0 u_E(0) = 0 \Rightarrow u_E'(\varepsilon) - u_E'(-\varepsilon) = \frac{2mW_0}{\hbar^2} u_E(0) \quad (6.2)$$

Les solutions de l'équation 6.1 s'écrivent sous la forme

$$u_E(x) = \begin{cases} 0 & \text{pour } |x| > a \\ u_{\text{I}}(x) & \text{pour } -a < x < 0 \\ u_{\text{II}}(x) & \text{pour } 0 < x < a \end{cases}$$

avec

$$\begin{aligned} u_{\text{I}}(x) &= Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \\ u_{\text{II}}(x) &= Ce^{ikx} + De^{-ikx} \end{aligned} \quad (6.3)$$

où l'on a posé $k := \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$, tandis que A, B, C et D sont des constantes arbitraires, reliées entre elles par les conditions de passage.

La fonction $\delta(x)$ est une fonction paire, par conséquent l'opérateur parité commute avec l'hamiltonien. Nous cherchons donc les fonctions u_E qui sont soit paires soit impaires.

Solutions impaires : α et φ étant des constantes arbitraires, nous posons $u_{II}(x) = \alpha \sin(kx + \varphi)$, ce qui est l'expression la plus générale de $u_{II}(x)$, écrite sous une forme différente de l'expression 6.3. La fonction cherchée étant impaire, on en déduit par symétrie $u_I(x) = \alpha \sin(kx - \varphi)$

Les conditions de continuité en $x = \pm a$ s'écrivent $\sin(ka + \varphi) = 0$. En $x = 0$, il vient

$$u_{II}(0) = \alpha \sin(\varphi) = u_I(x) = \alpha \sin(-\varphi)$$

On peut donc poser $\varphi = 0$, la constante α étant de signe arbitraire. On vérifie alors que la condition 6.2 est satisfaite.

Ainsi la solution cherchée est de la forme

$$\boxed{u_E = \alpha_i \sin(kx)} \text{ pour } -a < x < a \text{ avec } \sin(ka) = 0$$

Le coefficient constant est ici noté α_i .

De la relation $\sin(ka) = 0$ on déduit les valeurs possibles de E associées aux solutions impaires de l'équation aux valeurs propres de l'hamiltonien :

$$\boxed{E_{n \text{ i}} = n^2 \times \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}}$$

où n est un entier arbitraire.

Solutions paires : Nous posons ici $u_{II}(x) = \alpha \cos(kx + \varphi)$ et, pour des raisons de parité, $u_I(x) = \alpha \cos(kx - \varphi)$. On peut toujours considérer que φ appartient à l'intervalle $[-\pi/2, \pi/2]$ et que α est une constante arbitraire car deux fonctions d'ondes proportionnelles décrivent le même état physique.

Les conditions de continuité en $x = \pm a$ s'écrivent : $\cos(ka + \varphi) = 0$. Les conditions de continuité en $x = 0$ s'écrivent $u'_{II}(0) - u'_I(0) = \frac{2mW_0}{\hbar^2} u_E(0)$, soit $-2\alpha k \sin \varphi = \frac{2mW_0}{\hbar^2} \alpha \cos \varphi$. On obtient

$$\tan \varphi = -\frac{mW_0}{\hbar^2 k}$$

Supposons la relation $\frac{mW_0}{\hbar^2 k} \gg 1$. On en déduit $\varphi \simeq -\pi/2$, plus précisément $\varphi = -\frac{\pi}{2} + \theta$ avec $\theta \ll \pi$.

$$\tan \theta = \boxed{\frac{\hbar^2 k}{mW_0} \simeq \theta}$$

et donc

$$u_I(x) = -\alpha_p \sin(kx - \theta) \text{ , } u_{II}(x) = \alpha_p \sin(kx + \theta) \text{ avec } \sin(ka + \theta) = 0$$

Ici, la constante α est notée α_p .

De la relation $\sin(ka + \theta) = 0$, on déduit $E_{n \text{ p}} = n^2 \times \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \left(1 - \frac{2\theta}{n\pi}\right)$ où nous avons négligé les termes de l'ordre de θ^2 . Dans les mêmes conditions on trouve

$$\theta = n \frac{\pi \hbar^2}{maW_0} \text{ et } \boxed{E_{n \text{ p}} = n^2 \times \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \left(1 - \frac{2\hbar^2}{maW_0}\right)}$$

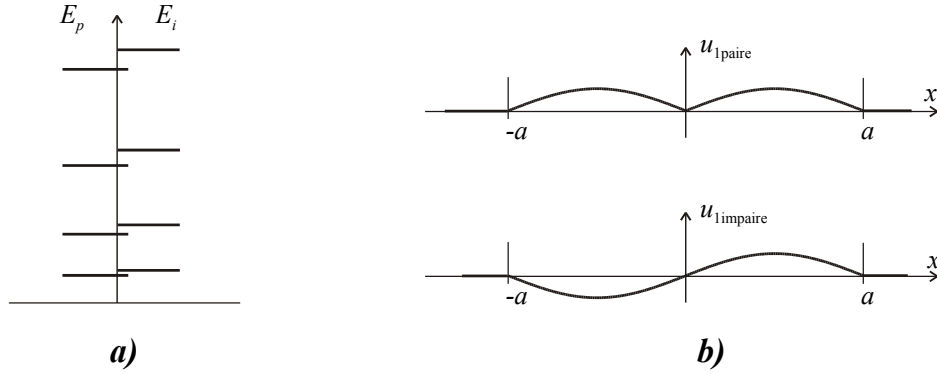


Figure 6-3.

Le spectre de l'hamiltonien est représenté sur la figure 6-3 a). Pour les solutions impaires, le spectre est celui du puits infini. C'est presque le même spectre pour les solutions paires; cependant, la dégénérescence qui serait présente pour $\theta = 0$ est levée ($\theta = 0$ signifie $W_0 = \infty$ ou encore $d = \infty$).

Sur la figure 6-3 b) nous avons représenté les fonctions u_{1paire} et $u_{1impaire}$, fonctions d'onde paire et impaire de plus basse énergie ($n = 1$) pour $\alpha_p = \alpha_i$, en supposant θ négligeable.

Considérons le cas où la particule est initialement décrite, à l'instant $t = 0$, par la fonction d'onde $\psi_0 = u_{1paire} + u_{1impaire}$. Au cours du temps ψ_0 évolue :

$$\begin{aligned} \psi(t, x) &= e^{-iE_{1p} t/\hbar} u_{1paire}(x) + e^{-iE_{1i} t/\hbar} u_{1impaire}(x) \\ &= e^{-iE_{1i} t/\hbar} \left(e^{-i(E_{1p}-E_{1i}) t/\hbar} u_{1paire}(x) + u_{1impaire}(x) \right). \end{aligned}$$

Il est toujours loisible de multiplier la fonction d'onde par une constante (indépendante de x); la nouvelle fonction d'onde ainsi obtenue décrit le même état physique. Nous considérons donc la fonction d'onde

$$\Psi(t, x) = e^{i\Omega t} u_{1paire}(x) + u_{1impaire}(x) \quad (6.4)$$

avec $\hbar\Omega = (E_{1i} - E_{1p}) = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^4}{2m^2 a^3 W_0}$ avec, ici, $n = 1$. A l'instant $t = \pi/\Omega$ la fonction d'onde est $\Psi = -u_{1paire}(x) + u_{1impaire}(x)$.

Les fonctions $\Psi(0, x)$ et $\Psi(\pi/\Omega, x)$ sont représentées sur la figure 6-4 pour $\alpha_p = \alpha_i$:

$$\Psi(0, x) = u_{1paire}(x) + u_{1impaire}(x) \text{ et } \Psi(\pi/\Omega, x) = -u_{1paire}(x) + u_{1impaire}(x)$$

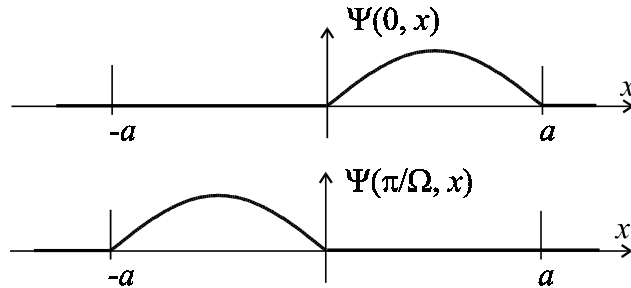


Figure 6-4.

Initialement la particule est dans le puits de droite. La théorie classique prédit que la particule reste à droite car elle ne peut pas traverser la barrière $W_0\delta(x)$ qui est infiniment haute. La théorie quantique prévoit que la particule peut passer dans le puits de gauche par effet tunnel. C'est effectivement ce qui se passe. On vérifie aisément que la fonction d'onde 6.4 est une fonction périodique de période $2\pi/\Omega$. Le passage d'un puits à l'autre s'effectue en un temps $\frac{\pi}{\Omega} = \frac{\pi\theta \hbar^2}{ma^2}$.

Le modèle précédent décrit qualitativement la molécule d'ammoniac NH_3 .

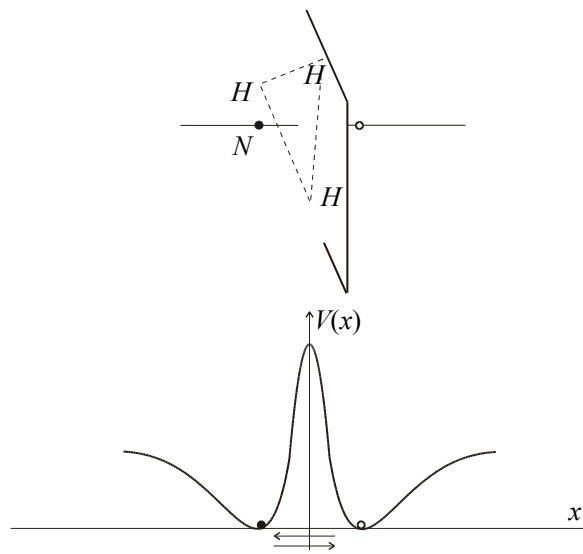


Figure 6-5.

Dans la position d'équilibre stable, les trois noyaux d'hydrogène, H , forment un triangle équilatéral qui définit un plan P . Par raison de symétrie, la théorie classique prévoit l'existence de deux positions d'équilibre stables sur axe perpendiculaire à P , de part et d'autre de P . Cette propriété se traduit par l'existence de deux puits de potentiel séparés par une barrière dans le plan P .

La fréquence d'oscillation par effet tunnel d'une position d'équilibre à l'autre est une caractéristique de la molécule d'ammoniac. Celle-ci peut donc servir de référence pour asservir un oscillateur micro-ondes qui définit un étalon de temps précis.

Considérons de nouveau la figure 6-1. Le cas particulier qui vient d'être étudié conduit aux résultats suivants. Lorsque $d = \infty$ (c'est à dire $\theta = 0$) les spectres de l'énergie des solutions paires et impaires sont les mêmes. Par contre, la dégénérescence se lève lorsque d décroît (c'est à dire lorsque la barrière devient quelque peu transparente).

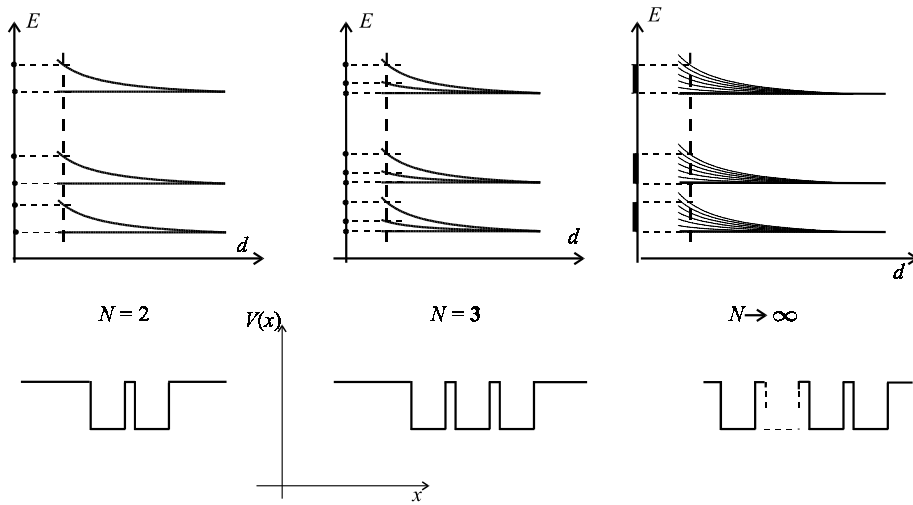


Figure 6-6.

La figure 6-6 représente l'allure du spectre de l'hamiltonien en fonction de d dans le cas de 2, 3, N puits de potentiels. On constate alors l'apparition de bandes d'énergie. Lorsque $N \rightarrow \infty$, l'énergie potentielle est périodique. Chacune des bande est alors constitué de niveaux d'énergie si proches que l'on peut considérer qu'elle forme un continuum.

6.2 Le potentiel périodique

Nous allons étudier un modèle simple de réseau périodique à une dimension dont nous pourrons cependant tirer quelques informations générales.

Nous considérons une particule de masse m soumis à une énergie potentielle périodique : $V(x) = V(x + a)$.

Une telle énergie potentielle est, par exemple, celle d'un électron dans le réseau périodique d'un cristal.

L'énergie potentielle est prise sous la forme

$$V(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} W_0 \delta(x - na) \text{ avec } n \in \mathbb{Z}$$

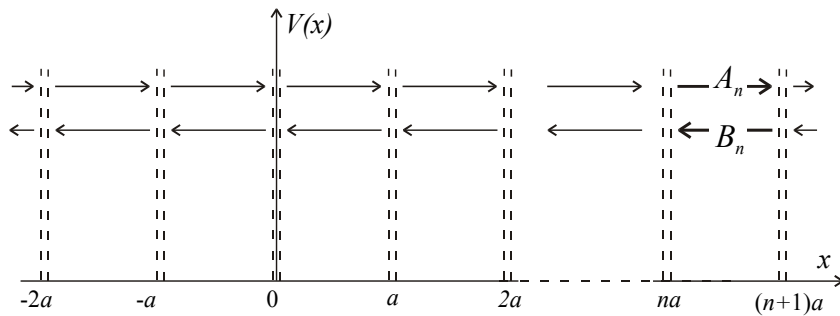


Figure 6-7.

L'équation aux valeurs propres de l'hamiltonien s'écrit

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} u(x) + V(x) u(x) = E u(x)$$

La solution est de la forme

$$u(x) = u_n(x) := A_n e^{ikx} + B_n e^{-ikx} \text{ pour } na < x < (n+1)a \text{ avec } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (6.5)$$

Les conditions de raccordement en $x = na$ sont celles que nous avons rencontrées précédemment : $u_n(na) = u_{n-1}(na)$ et $u'_n(na) - u'_{n-1}(na) = \frac{2mW_0}{\hbar^2} u_n(na)$ (voir la relation 6.2 ci-dessus).

$$(A_n - A_{n-1}) e^{inka} + (B_n - B_{n-1}) e^{-inka} = 0 \quad (6.6)$$

$$(A_n - A_{n-1}) e^{inka} - (B_n - B_{n-1}) e^{-inka} = -i \frac{2mW_0}{\hbar^2 k} (A_n e^{inka} + B_n e^{-inka}) \quad (6.7)$$

Etant donné un nombre réel, a , donné, définissons l'**opérateur de translation** T_a défini par la relation $T_a \psi(x) = \psi(x+a)$ où ψ est une fonction d'onde arbitraire.

On vérifie aisément que T_a n'est pas un opérateur hermitique. Plus précisément on démontre les relations

$$T_a^\dagger = T_{-a} \text{ ainsi que } T_a T_a^\dagger = T_a^\dagger T_a = 1$$

Cependant toute fonction d'onde se décompose sur la base des fonctions $u_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}$,

fonctions propres de l'opérateur impulsion : $\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f(p) u_p(x) dp$. Or les fonctions $u_p(x)$ sont des fonctions propres de l'opérateur T_a . En effet $T_a u_p(x) = e^{ipa/\hbar} \times u_p(x)$. L'opérateur T_a fournit l'exemple d'un opérateur qui n'est pas observable mais qui dispose d'un ensemble de vecteurs propres qui forment une base de l'espace des états.

Lorsque a est une quantité infinitésimale, notée ε , il vient $T_\varepsilon \psi(x) = \psi(x+\varepsilon) \simeq \psi(x) + \varepsilon \frac{d}{dx} \psi(x)$. On écrit cette relation sous la forme $T_\varepsilon \psi(x) = \psi(x) + i\varepsilon \frac{1}{\hbar} \hat{p} \psi(x)$ avec $\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$. Dans ces conditions T_ε s'exprime sous la forme

$$T_\varepsilon = 1 + i\varepsilon \frac{\hat{p}}{\hbar}$$

On désigne \hat{p} comme le "**générateur des translations infinitésimales**".

Supposons que la particule de masse m soit soumise à une énergie potentielle périodique de période a , c'est-à-dire telle que $V(x+a) = V(x)$. On vérifie alors que l'hamiltonien, \hat{H} , commute avec l'opérateur translation, T_a :

$$\begin{aligned} \hat{H} T_a \psi(x) &: = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x+a) + V(x) \psi(x+a) \\ &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi \right)_{(x+a)} + V(x+a) \psi(x+a) := T_a \hat{H} \psi(x) \end{aligned}$$

On peut déduire de ce qui précède que toute fonction d'onde se décompose sous la forme d'une somme de fonctions propres de \hat{H} et T_a .

Nous cherchons donc les fonctions propres de l'hamiltonien qui satisfont les équations

$$\hat{H} \psi = E \psi \text{ et } T_a \psi = F \psi$$

L'équation aux valeurs propres de T_a s'écrit $\psi(x+a) = F \psi(x)$ et plus généralement $\psi(x+na) = F^n \psi(x)$ pour $n \in \mathbb{Z}$. La fonction d'onde reste bornée lorsque

$x \rightarrow \pm\infty$; ceci n'est possible que pour $|F| = 1$ soit $F = e^{i\theta}$. Nous cherchons donc les solutions de l'équation aux valeurs propres de l'hamiltonien satisfaisant la relation

$$\psi(x+a) = e^{i\theta}\psi(x) \quad (6.8)$$

où θ est un nombre réel arbitraire.

Explicitons cette condition pour la solution 6.5 considérée. On obtient

$$A_n e^{ika} = e^{i\theta} A_{n-1} \quad \text{et} \quad B_n e^{-ika} = e^{i\theta} B_{n-1}$$

Nous exprimons A_{n-1} et B_{n-1} en fonction de A_n , B_n et θ dans les conditions de passage 6.6 et 6.7 :

$$\begin{aligned} A_n (1 - e^{i(ka-\theta)}) e^{inka} + B_n (1 - e^{-i(ka+\theta)}) e^{-inka} &= 0 \\ A_n (1 - e^{i(ka-\theta)}) e^{inka} - B_n (1 - e^{-i(ka+\theta)}) e^{-inka} &= -i \frac{2mW_0}{\hbar^2 k} (A_n e^{inka} + B_n e^{-inka}) \end{aligned}$$

Un tel système implique $A_n = B_n = 0$ sauf si le déterminant, D ci-dessous, est nul :

$$D := \begin{vmatrix} (1 - e^{i(ka-\theta)}) & (1 - e^{-i(ka+\theta)}) \\ (1 - e^{i(ka-\theta)}) + i \frac{2mW_0}{\hbar^2 k} & - (1 - e^{-i(ka+\theta)}) + i \frac{2mW_0}{\hbar^2 k} \end{vmatrix} = 0$$

On en déduit

$$\cos \theta = \cos(ka) + \frac{mW_0}{k\hbar^2} \sin(ka)$$

Pour que cette relation soit satisfaite l'énergie ne peut être arbitraire mais doit satisfaire la condition

$$-1 < \cos(ka) + \frac{maW_0}{\hbar^2} \frac{\sin(ka)}{ka} < 1$$

Les valeurs possibles de k , et par conséquent celles de E , se trouvent limitées par cette condition. Seules certaines bandes d'énergie sont permises (figure 6-8).

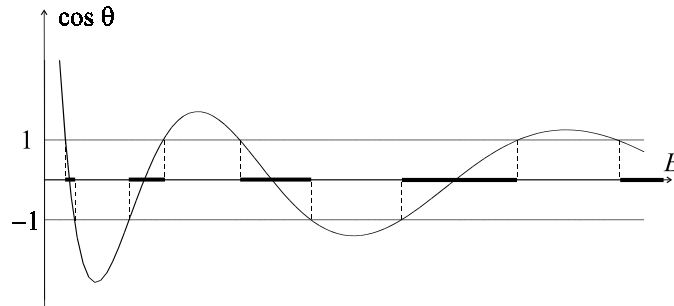


Figure 6-8.

Les bandes d'énergie permises sont séparées par des bandes interdites.

6.3 Le modèle des électrons libres

Nous considérons des électrons d'hamiltonien \hat{H} . Celui-ci commute avec l'opérateur translation T_a . Cette propriété suggère de déterminer les fonctions propres de l'énergie, $u(x)$ qui satisfont la relation $u(x+a) = e^{i\theta}u(x)$.

Posons $\theta := Ka$ et $u(x) := e^{iKx}U(x)$. Il vient

$$e^{iK(x+a)}U(x+a) := u(x+a) = e^{iKa}u(x) = e^{iKa}e^{iKx}U(x)$$

On en déduit $U(x+a) = U(x)$.

Lorsque l'énergie potentielle est périodique, de période a , toute fonction propre de l'énergie est une superposition de fonctions $\varphi_K(x) = e^{iKx}U(x)$ où U est une fonction périodique de période a .

Cette affirmation constitue le **théorème de Floquet**, souvent appelé "théorème de Bloch".

Sur la figure 6-9, on représente l'énergie en fonction de $\theta = Ka$. On distingue diverses zones :

$\theta \in [-\pi, \pi]$ constitue la première "**zone de Brillouin**". Celle-ci correspond à la valeur $|K| \in \left[0, \frac{\pi}{a}\right]$. La seconde zone de Brillouin correspond à $|K| \in \left[\frac{\pi}{a}, \frac{2\pi}{a}\right]$.

En première approximation, les électrons de conduction d'un métal peuvent être assimilés à des électrons libres dans un puits de potentiel. Dans ce cas U est une constante et K est le nombre d'onde de la solution considérée. Un tel modèle est un modèle d'électrons libres dont l'énergie est $\frac{\hbar^2 K^2}{2m}$.

Dans le cas général, on peut considérer $e^{iKx}U(x)$ comme une onde de nombre d'onde K , dont l'amplitude $U(x)$ est modulée selon la position.

Les discontinuités apparaissent pour $|K| = \frac{N\pi}{a}$ où N est un entier positif (c'est à dire pour $\theta := Ka = N\pi$ et donc $\cos \theta = \pm 1$, voir la figure 6-8). Introduisons la longueur d'onde de de Broglie $\lambda = \frac{2\pi}{|K|}$ du modèle d'électron libre.

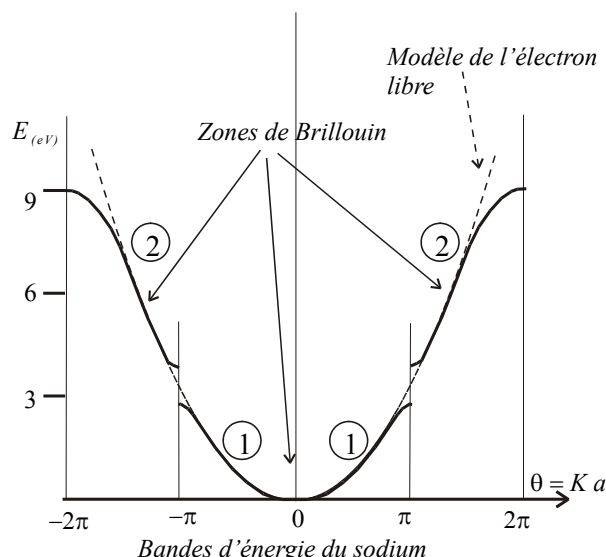
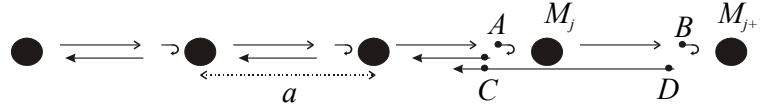


Figure 6-9

Les discontinuités apparaissent pour $a = N\frac{\lambda}{2}$. Ces conditions sont "les conditions de Bragg". Pour interpréter ces conditions, remarquons que a représente la période de

l'énergie potentielle de l'électron. Pour fixer les idées nous considérons une chaîne d'ions distants de a . Une onde électronique subit sur chaque ions une réflexion (figure 6-10).



$$AM_j C = BM_{j+1} D, \quad AB=a, \quad DC=a$$

$$ABM_{j+1} DC - AM_j C = 2a$$

Interférences constructives entre ondes réfléchies pour $2a = N\lambda$

Figure 6-10.

Les ondes réfléchies par l'ion n° j et l'ion n° $j+1$ sont en phase pour $2a = N\lambda$ à N est un entier. Ces conditions sont précisément les conditions de Bragg, elles assurent ici la réflexion optimale des ondes électroniques par le réseau d'ions.

6.4 Conducteurs et isolants

Dans un milieu cristallin, un métal par exemple, les bandes d'énergie sont peuplées par des électrons fournis par chacun des atomes. Ces électrons sont mis en commun sur l'ensemble de la structure. Ils ne sont pas localisés et passent d'un atome à l'autre par effet tunnel.

Une bande d'énergie autorisée n'est pas un vrai continuum mais est constituée de niveaux très proches (voir la figure 6-6). Le nombre de niveaux étant finis, égal au nombre d'atomes constituant le cristal, le nombre d'électrons susceptibles d'être accueillis dans une bande d'énergie est lui-même fini car le principe d'exclusion de Pauli interdit la présence de plus de deux électrons (de spins différents) sur un même niveau d'énergie. Ainsi une bande d'énergie peut-elle être pleine, ce qui ne serait pas le cas si l'énergie était vraiment continue.

Le sodium (Na) a pour configuration électronique $1s^2 2s^2 2p^6 3s$. Les couches $1s, 2s, 2p, 3s$ correspondent à quatre niveau d'énergie différents qui donnent quatre bandes d'énergie lorsque N atomes de sodium forment un cristal. Le niveau $2p$ d'un atome isolé, est susceptible d'accueillir 6 électrons ; il donnera naissance à une bande contenant N niveaux d'énergie dont chacun peut accueillir 6 électrons, soit $6N$ électrons au total[†]. Cependant le niveau $2p$ de l'atome de sodium est saturé, c'est à dire que chaque atome de sodium possède effectivement 6 électrons qu'il met en commun pour peupler la bande d'énergie correspondant au niveau $2p$. C'est donc $6N$ électrons qui vont peupler la bande d'énergie considérée, c'est le nombre maximum que celle-ci peut accueillir : cette bande est donc pleine.

La situation est différente pour les électrons $3s$. Si le cristal contient N atomes, il dispose de N niveaux d'énergie dans la bande susceptible d'accueillir ces électrons. Celle-ci pourrait en fait accueillir $2N$ électrons (l'introduction du spin multiplie par 2 l'ordre de dégénérescence de tous les niveaux d'énergie). La bande est donc seulement à moitié pleine. Les électrons peuvent y acquérir une énergie cinétique qui assure leur mobilité. Par conséquent les alcalins sont des conducteurs.

[†]Si il n'y avait pas de dégénérescence, le niveau $2p$ correspondrait à 6 niveaux d'énergie différents dont chacun fournirait une bande susceptible d'accueillir N électrons soit au total $6N$ électrons pour la (les) bande(s) correspondant au niveau $2p$.

Lorsque la bande d'énergie maximale est partiellement vide on l'appelle "**bande de conduction**" car ce sont les électrons de cette bande d'énergie qui assurent la conduction de l'électricité. Si cette bande est pleine, on l'appelle "**bande de valence**".

La bande de valence étant pleine, les électrons ne peuvent y acquérir de l'énergie cinétique car tous les niveaux sont occupés. C'est une conséquence du principe d'exclusion de Pauli. Pour assurer le passage d'un courant, il faut donc chasser un (ou plusieurs) électrons vers la bande de conduction, d'énergie supérieure, qui est vide. Si le saut entre les deux bandes est important, cette opération est impossible. Le milieu est alors un isolant.

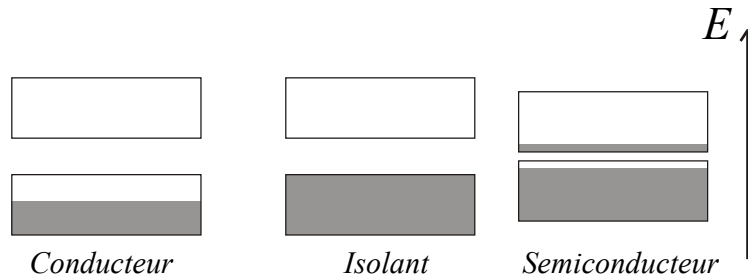


Figure 6-10.

Le germanium (*Ge*) est un semiconducteur dont la bande de valence est pleine à basse température. La bande de conduction est donc vide, le saut énergétique est 0,65 eV. A la température ordinaire, les électrons peuvent acquérir une énergie de l'ordre de $k_B T \sim 2,5 \times 10^{-2}$ eV. Le saut énergétique n'est pas assez important pour éviter qu'une faible proportion d'électrons ne quitte la bande de valence pour la bande de conduction. Ainsi le germanium très pur[‡] montre-t-il une certaine conductivité intrinsèque qui dépend de la température. Par contre le diamant est caractérisé par un saut de 5 eV de la bande de valence vers la bande de conduction. Il est exclu que l'acquisition d'énergie thermique permette ce saut. Le diamant reste donc un bon isolant à la température ordinaire.

La situation est compliquée par le fait que la maille du cristal considéré peut-être formée de plusieurs sortes d'atomes dont les bandes d'énergie peuvent se recouvrir. C'est aussi le cas de certains métaux (ou semi-métaux) comme le magnésium qui dispose de deux électrons de valence $3s^2$ et devrait être un isolant s'il n'y avait pas recouvrement des bandes d'énergie.

[‡]Les semiconducteurs sont généralement dopés par des impuretés qui leur confèrent des propriétés intéressantes.

