

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE « Dr. TAHAR MOULAY » DE SAIDA

FACULTE DES SCIENCES



MEMOIRE

Présenté en vue de l'obtention du diplôme de

MASTER

Spécialité : PHYSIQUE

Option : Physique Computationnelle

Par

Bouzar Cheikh

Sur le thème

**Détermination du coefficient de transmission d'un système
physique *via* un potentiel constant**

Soutenu le 24/06/2018 devant le jury composé de :

Sahabi Toufik	Président	M.C	U . Saida
Smail Kouidri	Rapporteur	M.C	U . Saida
Abada Ahmed	Examineur r	M.C	U . Saida
Boudali Abedlkader	Examineur	M.C	U . Saida

Année Universitaire 2017 - 2018

Dédicace

A ma chère mère

*Pour son grand amour, ses sacrifices et toute l'affection
qu'elle m'a*

Toujours offerte.

A mon cher père

*Pour sa patience et son soutien moral pour arriver à ce
niveau.*

A mes sœurs, mes frères et leurs familles.

A mes chers amis.

Je dédie ce modeste travail.

Remerciements

Je remercie dieu le tout puissant de nous avoir donné la santé et la volonté d'entamer et de terminer ce mémoire.

Tout d'abord, ce travail ne serait pas aussi riche et n'aurait pas pu avoir le jour sans l'aide et l'encadrement de Dr. Smail Kouidri. Je le remercie pour la qualité de son encadrement exceptionnel, pour sa patience, sa rigueur et sa disponibilité durant notre préparation de ce mémoire.

Je remercie infiniment le président de jury ainsi que ces membres d'avoir accepté d'examiner ce travail.

Mes remerciements s'adressent également à tous mes professeurs pour leurs générosités et la grande patience dont ils ont su faire preuve malgré leurs charges académiques et professionnelles.

Je remercie profondément toutes les personnes qui m'ont aidé et soutenue de près ou de loin.

SOMMAIRE:

Introduction générale	1
Chapitre I Traitement classique de l'équation ondulatoire	3
I.1.Introduction.....	4
I.2.Les idées fondamentales de la mécanique quantique.....	4
I.3. Expérience de Young	5
I.4 Effet photoelectrique.....	9
I.5 Spectres atomiques.....	11
I.5.1 Modele de Bohr (1913).....	12
I.5.2 Onde de De Broglie.....	15
I.6 L'équation de Schrödinger.....	18
I.7 Conclusion.....	20
Références.....	21
Chapitre II Traitement quantique de l'équation de Schrödinger	22
II.1 Introduction.....	23
II.1 L'origine de l'équation de Schrödinger.....	23
II.3 Barrière de potentiel.....	26
II.4 Marches de potentiel.....	33
II.5 Puits potentiel.....	38
II.6 Conclusion.....	43
Références	44

Chapitre III Résolution numérique de l'équation de Schrödinger	45
III.1 Introduction.....	46
III.2 Méthode des différences finies.....	46
III.3 Organigramme de calcul.....	47
III.4 Résultats.....	49
III.5 Résultats et discussions.....	50
III.6 Conclusion.....	55
III.7 Les fonctions d'ondes.....	56
III.8 Comparaison avec d'autres travaux.....	62
III.8 Conclusion.....	63
Références.....	63
Conclusion général	64
Résumé	

Introduction générale

Ce travail entre dans le cadre de la préparation d'un diplôme en Master physique option physique computationnelle où nous nous intéresserons en premier lieu de déterminer le coefficient de transmission d'un système physique soumis à un potentiel de la forme barrière.

Toutes ces catégories de système s'étudient avec la mécanique quantique une mécanique qui est valable jusqu'à maintenant et qui se restreint à étudier ce merveilleux monde microscopique, c'est-à-dire à l'échelle des atomes et des particules élémentaires où la longueur d'onde doit parcourir tous l'axe sans aucune limitation c'est à dire de $-\infty$ à $+\infty$ contrairement au visible ou elle est limitée entre deux bornes $0.4\mu m$, ultraviolette et $0.7\mu m$, infrarouge.

Ce merveille monde qui est complexe se base sur les notions de la physique classique. Une physique qui présente un handicap vis-à-vis les merveilleuses expériences telles que les interférences des fentes de Young, l'effet photoélectrique, l'effet Compton etc..... Elle aura besoin d'une autre théorie extraordinaire qui joue le rôle du complémentaire dite ici mécanique quantique. Cette dernière accumule des succès considérables tant dans le domaine de la physique générale que dans le domaine de chimie théorique.

On ne va pas entamer toute la mécanique quantique mais on va prendre le fruit de cette mécanique nommé équation de Schrödinger, cette équation qui a été établie en 1925, ne prend pas en compte la théorie de la relativité, qui est pourtant alors bien connue à l'époque. Dans cette équation, l'espace et le temps n'interviennent pas de la même manière le terme du temps est linéaire alors que celui de l'espace est quadratique.

Sa forme mathématique est déduite du principe d'équivalence avec la mécanique ondulatoire qui repose sur l'équation de l'onde électromagnétique. Sa résolution est basée sur la connaissance de la forme analytique de l'énergie potentielle. Or cette fonction potentielle pose un grand problème aux physiciens du fait qu'elle est déterminée qu'à une constante près.

Dans ce travail nous allons établir la résolution de l'équation de Schrödinger via une énergie potentielle de la forme barrière où nous nous intéresserons à déterminer les différents coefficients qui expriment la réflexion et la transmission analogue à un problème en optique géométrique où un rayon qui provient d'un milieu d'indice de réfraction n_1 vient frapper un milieu d'indice de réfraction n_2 .

Mais notre objectif sera la détermination du coefficient de transmission pour une particule qui provienne de $-\infty$ vient frapper la barrière de hauteur V_0 avec une énergie inférieure à celui-ci ce qui donne lieu à un fameux effet dit Effet Tunnel.

Cet effet qui peut être étudié classiquement qu'on un ballon de football ne peut pas passer par-dessus une colline si on ne lui donne pas une énergie initiale suffisante : il montera jusqu'à une certaine hauteur puis redescendra en rebroussant le chemin.

Mais selon les lois de la mécanique quantique, en revanche, il y a une petite probabilité qu'une particule franchisse la colline même si son énergie initiale est insuffisante : il peut passer de l'autre côté de la colline comme s'il avait trouvé un tunnel : c'est l'effet tunnel. [1].

Notre mémoire de master est composé de trois chapitres.

Le premier est consacrée à donner l'aspect classique de la physique et son insuffisance vis-à-vis les expériences de l'époque.

Le deuxième chapitre traite le formalisme quantique de la physique via l'équation de Schrödinger et sa résolution théorique vis-à-vis une barrière de potentiel.

Le troisième chapitre consiste à nous donner résolution numérique de l'équation de Schrödinger via une barrière de potentiel inspiré par la détermination du coefficient de Transmission dans le cas de l'effet Tunnel

[1] S. Koudri polycopie OPU exercice résolus de mécanique quantique 2013.

Chapitre I

Traitement classique de l'équation ondulatoire

Chapitre I

I.1 Introduction

La physique classique ou physique de Newton, Gallilé, Maxwell ...atteint sa limite à la fin du XIXe siècle. Elle était principalement basée sur deux disciplines fondamentales nommées mécanique rationnelle et la théorie électromagnétique de Maxwell dont la première est associée à la mécanique statistique classique donnant naissance à la thermodynamique et la seconde construit ce qu'on appelle l'électricité et l'optique ondulatoire. Sa limite est atteinte suivant les insuffisances interprétations des expériences de l'époque telle que l'effet photoélectrique....

D'ailleurs le comportement macroscopique des particules a laissé incompréhensible devant les nouvelles expériences. Elle repose sur le vecteur position qui suivant sa variation on peut déduire la vitesse et l'accélération de n'importe quelle corps de masse m .

En grosso modo on dit que la physique classique est liée à tous les phénomènes qu'on peut les voir à l'œil nu.

Nous allons dans ce chapitre montre les insuffisances de la physique classique via les nouvelles idées dite aussi idée fondamentale de la mécanique quantique [1] .

I.2 Les idées fondamentales de la mécanique quantique

Parmi les idées qui ont poussé les physiciens à réfléchir à une nouvelle mécanique capable d'interpréter les expériences de l'époque avec succès, on cite l'expérience de Young, l'effet photoélectrique, l'effet Compton et l'expérience Franck et Hertz.

Chapitre I

Ces expériences ont confirmé aussi que la mécanique classique présente des lacunes au niveau de certains phénomènes. Nous en donnerons ici un bref aperçu.

I.3 Expérience de Young

Cette expérience a été faite vers les années 1800 avec l'utilisation d'une source lumineuse qui émette une lumière monochromatique, cette lumière va traverser deux ouvertures S_1 et S_2 séparés par une distance de l'ordre de $a = S_1 S_2$.

Après l'émission de cette lumière à travers S_1 et S_2 on les interfère dans un écran distance de D des sources.

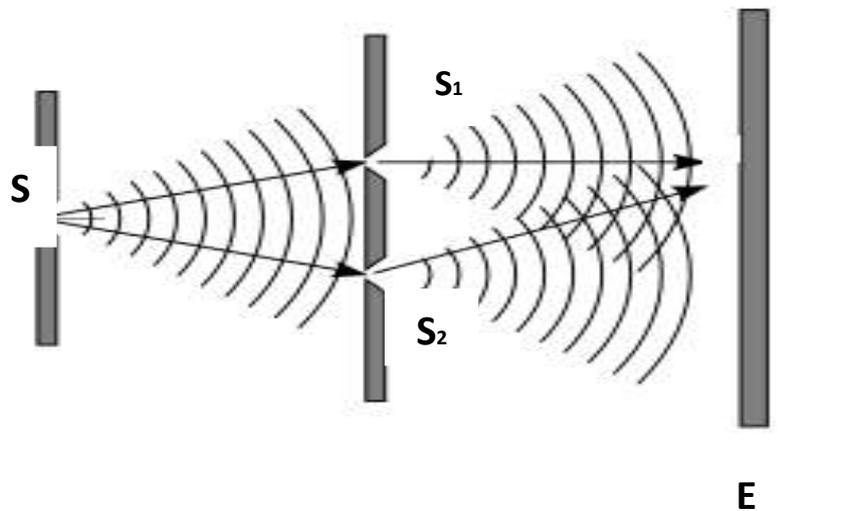


Figure I-1: Expérience d'interférences des fentes d'Young

On éclaire deux fentes S_1 et S_2 par une source lumineuse S et à une distance D on récupère les interférences ainsi observés. En se basant sur la nature ondulatoire décrite par Maxwell en électrodynamique classique on écrit [2].

Chapitre I

La source S émet une lumière de la forme : $Ae^{i\omega t}$

En fermant S_2 et en laissant S_1 ouverte la lumière passe par S_1 alors M oscille après un retard.

de $\frac{S_1M}{c}$ par rapport à la source S_1 son élongation y_1 s'écrit :

$$y_1 = Ae^{i\omega(t - \frac{S_1M}{c})} \quad (\text{I} - 1)$$

Maintenant on ferme S_1 et en laissant S_2 ouverte la lumière passe par S_2 alors M oscille après un retard de $\frac{S_2M}{c}$ par rapport à la source S_2 son élongation y_2 s'écrit :

$$y_2 = Ae^{i\omega(t - \frac{S_2M}{c})} \quad (\text{I} - 2)$$

En ouvrant les deux fentes simultanément M oscille avec l'élongation y résultante de y_1 et y_2 (conséquence du théorème de superposition) :

$$y = y_1 + y_2 \quad (\text{I} - 3)$$

L'intensité lumineuse est proportionnelle au carré du module de y :

$$I \propto yy^* \quad (\text{I} - 4)$$

Après substitution des expressions de y_1 et y_2 dans I on obtient :

$$I \propto (y_1 + y_2)(y_1 + y_2)^* \quad (\text{I} - 5)$$

Avec $\omega = \frac{2\pi}{T}$ et $\lambda = cT$

$$I \propto (|A|^2 + |A|^2 + |A|^2 e^{i\frac{2\pi}{\lambda}(S_2M - S_1M)} + |A|^2 e^{-i\frac{2\pi}{\lambda}(S_2M - S_1M)}) \quad (\text{I} - 6)$$

$$I \propto 2|A|^2 \left(1 + \cos \frac{2\pi}{\lambda} (S_2M - S_1M) \right) \quad (\text{I} - 7)$$

Chapitre I

Distinguons deux cas extrêmes relatifs aux franges brillantes et aux franges obscurs.

Pour le cas des franges brillantes :

$$\cos \frac{2\pi}{\lambda} (S_2M - S_1M) = 1 \quad (\text{I} - 8)$$

$$\frac{2\pi}{\lambda} (S_2M - S_1M) = 2k\pi \quad (\text{I} - 9)$$

$$(S_2M - S_1M) = k\lambda \quad (\text{I} - 10)$$

On dit que la différence de marche $(S_2M - S_1M)$ est un nombre entier de λ .

Pour le cas des franges brillantes :

$$\cos \frac{2\pi}{\lambda} (S_2M - S_1M) = -1 \quad (\text{I} - 11)$$

$$\frac{2\pi}{\lambda} (S_2M - S_1M) = (2k + 1)\pi \quad (\text{I} - 12)$$

$$(S_2M - S_1M) = (2k + 1)\frac{\lambda}{2} \quad (\text{I} - 13)$$

On dit que la différence de marche $(S_2M - S_1M)$ est un nombre impair de $\frac{\lambda}{2}$.

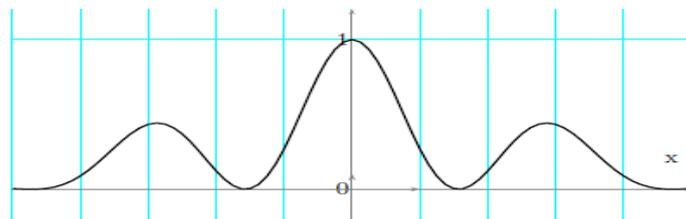


Figure I-2 : Représentation de l'intensité lumineuse en fonction de la distance

Chapitre I

Les interférences constructives ($A_T = 2A$) sont définies par :

$$\delta = m\lambda (m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots) \quad (I - 14)$$

Les interférences destructives ($A_T = 0$) sont données par :

$$\delta = \left(m + \frac{1}{2}\right)\lambda (m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots) \quad (I - 15)$$

Pour mieux éclaircir cette interprétation les figures I(a) et I(b) montrent certaines causes induites par la différence de phase entre 2 ondes harmoniques.

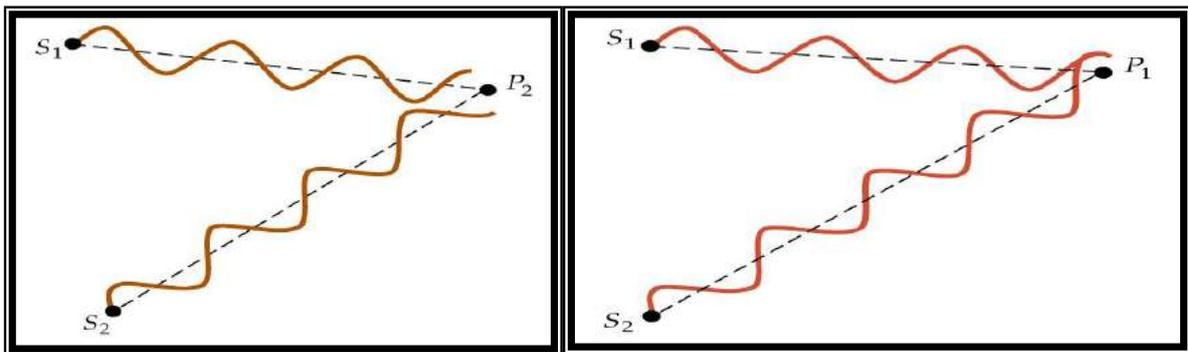


Figure I-2: Différence de marche de parcours δ

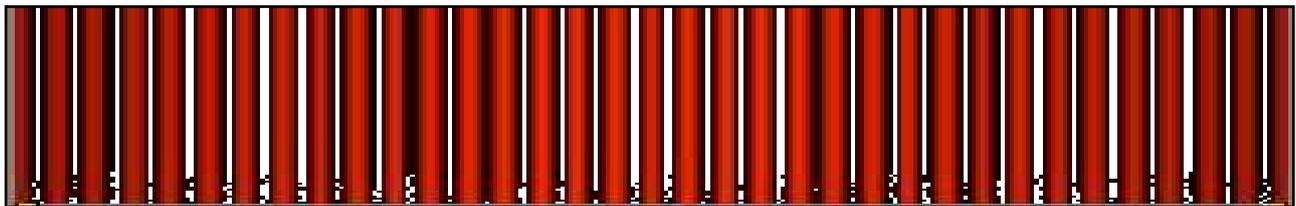


Figure I-3 écran d'observation

Position des maxima: $d \sin\theta = m\lambda$ (ou $m = 0, 1, 2, 3, \dots$) $(I - 16)$

Position des minima: $d \sin\theta = \left(m + \frac{1}{2}\right)\lambda$ (ou $m = 1, 2, 3, \dots$) $(I - 17)$

Chapitre I

I.4 Effet photoélectrique

L'effet photoélectrique est l'émission d'électrons par un matériau généralement métallique lorsque celui-ci est exposé à une lumière c ultraviolette, où le bombardement induit par cette fréquence est le résultat de ce fameux phénomène.

Alors en éclairant une plaque métallique généralement construite d'un filament de tungstène (Tn) métal de transition celle-ci émet des électrons.



D'ailleurs ce phénomène se produit aussi avec d'autres matériaux si la longueur d'onde est assez courte c'est-à-dire plus la longueur d'onde est courte, plus l'intensité de l'onde est importante et donc plus elle est énergique.

La figure 2 illustre ce que nous avons dit auparavant.

Longueur d'onde $\lambda = c / \nu$

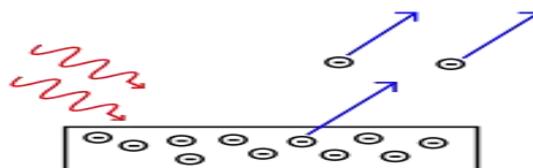


Figure I-4: Un schéma montrant l'émission d'électrons depuis une plaque métallique.

L'émission de chaque électron (ligne bleue) requiert une quantité minimale d'énergie, laquelle est apportée par un photon (ligne rouge).

Chapitre I

Avant la lumière était une onde électromagnétique de longueur d'onde λ où l'interprétation de l'expérience de Young a été faite avec succès par le Grand physicien C. Maxwell selon ces quatre équations fondamentales.

L'expérience de l'effet photoélectrique a bouleversé la physique via la nature ondulatoire de la lumière. Les physiciens cherchent à construire un modèle accessible à mieux expliquer ce phénomène d'une manière rigoureuse.

Maxwell a construit un modèle pour expliquer l'expérience mais lors de son exécution une divergence ultra violette apparaît au niveau de la densité lumineuse.

Ce qui a laissé le maître de la physique A. Einstein de trouver la bonne explication de cette effet via une autre nature de la lumière dite nature corpusculaire en affirmant que l'absorption d'un photon, permettait d'expliquer parfaitement toutes les caractéristiques de ce phénomène. Les photons de la source lumineuse possèdent une énergie caractéristique déterminée par la fréquence de la lumière. Lorsqu'un électron du matériau absorbe un photon et que l'énergie de celui-ci est suffisante, l'électron est éjecté; sinon l'électron ne peut s'échapper du matériau. [3]

Après l'absorption du photon par l'atome, le photoélectron émet une énergie.

$$E_e = E_g - E_b \quad (I - 18)$$

où E_b est l'énergie de liaison du photoélectron et E_g l'énergie du photon absorbé.

Chapitre I

À des énergies et des numéros atomiques où ce processus est important, l'électron émis est absorbé sur une distance très courte de telle manière que toute son énergie est enregistrée dans le détecteur. Les rayons X qui sont émis dans la réorganisation du cortège électronique suite à l'émission de l'électron sont également absorbés dans le milieu.

L'énergie d'un photon est caractérisée par la formule

$$E = h \cdot \nu \quad (I - 19)$$

Une relation fondamentale découverte par A. Einstein sur les travaux de Planck.

Exprimant la proportionnalité de l'énergie à la fréquence.

I.5 Spectres atomiques

L'étude du spectre atomique selon qu'il est absorbant ou émissif met un fait fondamental que la physique classique ne permettait pas de le comprendre d'une façon rigoureuse. Ces spectres sont constitués de raies très fines signalant la signature de chaque atome. Ceci est lié au fait qu'un morceau de Fer chauffé à une température très grande présente des couleurs allant du bleu au rouge, on dit ici que les électrons commencent à se transiter d'un niveau à autre. Ce fait s'interprète que si on admet l'hypothèse de N. Bohr disant que l'énergie est quantifiée [4].

Chapitre I

I.5.1 Modèle de Bohr (1913)

Pour expliquer ces observations expérimentales et ces formulations empiriques, Bohr a été amené à admettre deux postulats nouveaux : 1- Les électrons ne s'observent que dans des orbites "permises" dans lesquelles ils ont des énergies bien déterminées : ces orbites sont définies par la condition de quantification :

$$\int \vec{p} \cdot d\vec{l} = nh \quad (I - 20)$$

Où n est un nombre entier positif appelé nombre quantique.

Cette condition se simplifie lorsqu'on admet un mouvement circulaire des électrons autour du noyau supposé immobile, et donne :

$$m v_n r_n = n \frac{h}{2\pi} \quad (I - 21)$$

2- Quand l'électron décrit une orbite stationnaire, l'atome ne met (ni n'absorbe) aucun rayonnement. L'émission (ou l'absorption) est déterminée uniquement par le passage de l'électron d'une orbite d'énergie E_n à une orbite d'énergie plus petite (ou plus grande)

E_m (fig I.4). La fréquence ν_{nm} du rayonnement émis (ou absorbé) est donnée par :

$$\nu_{nm} = \frac{1}{h} (E_n - E_m) \quad (I - 22)$$

Chapitre I

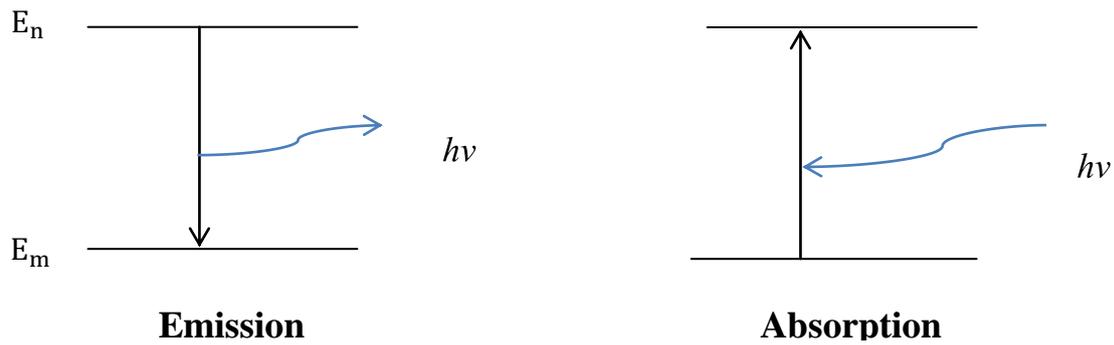


Figure I-5 : Emission et absorption d'un photon par un atome

Les conséquences de ces postulats vont nous permettre, en principe, de rendre compte des faits expérimentaux observés dans l'hydrogène :

L'équilibre entre la force centrifuge et l'attraction coulombienne exercée par le noyau sur l'électron de charge $-q$ donne :

$$m \frac{v_n^2}{r_n} = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r_n^2} \quad (\text{I} - 23)$$

En combinant les relations (I-21) et (I-23) on obtient

$$r_n = \frac{\epsilon_0 h^2}{\pi m q^2} n^2 = a_0 n^2 \quad (\text{I} - 24)$$

Et

$$V_n = \frac{1}{2} \frac{q^2}{\epsilon_0 h} \frac{1}{n} = \frac{V_0}{n} \quad (\text{I} - 23)$$

r_n est le rayon de l'orbite d'ordre n et V_n la vitesse de l'électron dans cette orbite.

a_0 est le rayon de Bohr qui correspond à $n = 1$, $a_0 = 0,529 \text{ \AA}$.

Chapitre I

En admettant que le proton est au repos dans le référentiel atomique, l'énergie de l'atome d'hydrogène est égale à l'énergie totale de l'électron, qui est la somme de son énergie potentielle et de son énergie cinétique, soit : [5]

$$E_n = E_p + E_C = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q^2}{r_n} + \frac{1}{2} m V_n^2 \quad (\text{I} - 24)$$

d'après (I-24) on a :

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q^2}{r_n} = \frac{1}{2} m V_n^2 \quad (\text{I} - 25)$$

ce qui donne pour E_n :

$$E_n = -\frac{1}{2} \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r_n} \quad (\text{I} - 26)$$

et en remplaçant r_n par sa valeur on obtient :

$$E_n = -\frac{1}{2} \frac{m q^4}{4\pi\epsilon_0^2 h^2 n^2} = -\frac{R_\infty}{n^2} \quad (\text{I} - 27)$$

avec $R_\infty = \frac{m q^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \quad (\text{I} - 28)$

La fréquence du rayonnement émis est d'après (I.28) :

$$\nu_{nm} = \frac{1}{h} \left(-\frac{R_\infty}{n^2} + \frac{R_\infty}{m^2} \right) = \frac{R_\infty}{h} \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (\text{I} - 29)$$

avec $m < n$

et sa longueur d'onde λ est telle que :

Chapitre I

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (\text{I} - 30)$$

Où

$$R_H = \frac{R_\infty}{hc} = \frac{mq^4}{8\varepsilon_0^2 ch^3} \quad (\text{I} - 31)$$

On retrouve ainsi la formule empirique de Balmer et on atteint une valeur de R_H identique à la valeur de la constante de Rydberg pour l'hydrogène mesurée par Balmer ($R_H = 109677 \text{ cm}^{-1}$). Avec ce résultat, les différentes raies de l'hydrogène peuvent s'ordonner et sont en bonne conformité avec le spectre expérimental.

I.5.2 Onde de De Broglie

D'après De Broglie, la matière comme la lumière doit posséder la double entité corpusculaire et ondulatoire : les relations d'Einstein valables pour le photon doivent l'être également pour la particule. Ainsi une particule dont les grandeurs dynamiques sont l'énergie E et l'impulsion \vec{p} , correspond une onde plane de pulsation ω et de vecteur d'onde \vec{k} . De Broglie démontra de façon très séduisante que les couples (E, \vec{p}) et (ω, \vec{k}) [3]

$$E = \hbar\omega \quad (\text{I} - 33)$$

$$\vec{p} = \hbar\vec{k} \quad (\text{I} - 34)$$

soit encore en module

Chapitre I

$$\lambda = \frac{\hbar}{p} \quad (\text{I} - 35)$$

Qui est la célèbre relation de De Broglie et qui exprime la longueur d'onde associée à une particule de masse m se déplaçant à la vitesse V .

Lorsque les particules se déplacent à une vitesse V voisine de celle de la lumière on montre que la relation devient:

$$\lambda = \frac{h}{mc} \frac{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}{\frac{v}{c}} \quad (\text{I} - 36)$$

Avec la relation de De Broglie on comprend mieux la signification de la condition de quantification de Bohr. En effet, dans le cas d'une orbite électronique circulaire, la circulation de \vec{p} est :

$$\int \vec{p} \cdot d\vec{l} = 2\pi r p = nh \quad (\text{I} - 37)$$

Soit:

$$\frac{h}{\lambda} 2\pi r p = nh \quad (\text{I} - 38)$$

Ou encore:

$$2\pi r = n\lambda \quad (\text{I} - 39)$$

Cette relation exprime simplement l'établissement d'un système d'ondes stationnaires sur l'orbite (fig.I-6) comme c'est le cas pour une corde vibrante.

Chapitre I

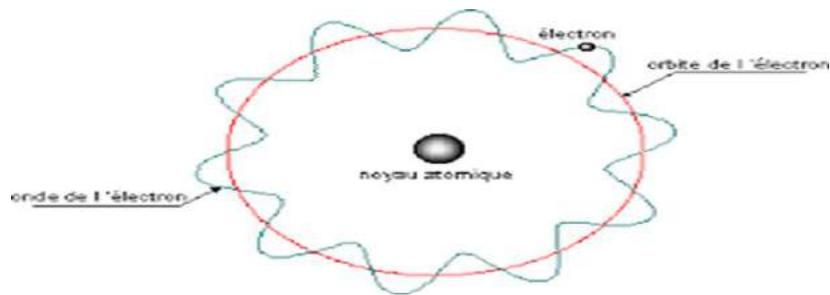


Figure I-6: Onde stationnaire de De Broglie pour l'électron de l'atome d'hydrogène

Mise en évidence expérimentale de l'onde de De Broglie dans une expérience d'optique, pour mettre en évidence les propriétés ondulatoires de la lumière et donc pour déterminer la longueur d'onde λ , il faut s'arranger pour que les dimensions des instruments de mesure (largeur de fentes, pas du réseau,...) soient comparables à λ .

C'est à ce moment que l'on peut observer des déviations par rapport à l'optique géométrique sous forme d'effets d'interférences ou de diffraction. Pour un électron de quantité de mouvement \vec{p} et donc d'énergie cinétique.[4]

$$E_c = \frac{p^2}{2m} \quad (\text{I} - 40)$$

la longueur d'onde associée λ est :

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{E_c \text{ (eV)}}} \quad (\text{I} - 41)$$

$$\lambda(\text{\AA}) \approx \sqrt{\frac{150}{E_c \text{ (eV)}}} \quad (\text{I} - 42)$$

Chapitre I

Ainsi, pour une énergie raisonnable de l'ordre de 100 eV correspondant à une tension accélératrice de 100 V et à une vitesse de l'ordre de 5.106 m/s , la longueur d'onde associée à l'électron serait de l'ordre de 1 \AA . Il est donc impossible de concevoir un réseau de diffraction ayant ce pas ou une fente ayant cette largeur. Davisson et Germer

(1927) détournèrent cette difficulté en utilisant un réseau naturel : le cristal. En effet, dans un cristal la distance des plans réticulaires est d'environ $1 \text{ à } 3 \text{ \AA}$ et on peut effectuer des expériences de diffraction des électrons comme on effectue des expériences de diffraction des rayons X. [6]

I.6 l'équation de Schrödinger:

L'équation de Schrödinger résulte du principe de correspondance entre la mécanique ondulatoire de la mécanique quantique c'est-à-dire en partant des équations de Maxwell qui induisent une expression fondamentale de l'onde :

$$\Delta \vec{E} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = \vec{0} \quad (\text{I} - 43)$$

$$\Delta \vec{B} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{B}}{\partial t^2} = \vec{0} \quad (\text{I} - 44)$$

Et en partant de l'écriture de l'onde:

$$E = E_0 e^{i(\omega t - kx)} \quad (\text{I} - 45)$$

La fonction d'onde aura la même expression que (I-45)

Chapitre I

$$\psi(x, t) = \psi_0 e^{i(kx - \omega t)} \quad (\text{I} - 46)$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = i \frac{p\psi}{\hbar} \text{ avec } k = \frac{p}{\hbar} \quad (\text{I} - 47)$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -i\omega\psi = -i \frac{E}{\hbar} \psi \quad (\text{I} - 48)$$

D'où :

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x} = p\psi \quad (\text{I} - 49)$$

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = E\psi \quad (\text{I} - 50)$$

Or pour une particule de masse m soumise à un potentiel V l'énergie totale est:

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x) \leftrightarrow E\psi = \frac{p^2}{2m} \psi + V(x)\psi \quad (\text{I} - 51)$$

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x)\psi \quad (\text{I} - 52)$$

Qui exprime le mouvement d'une particule dans un espace à une dimension via sa fonction $\psi(x, t)$:

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V)\psi = 0 \quad (\text{I} - 53)$$

Chapitre I

I.7 Conclusion

Après avoir interprète des points obscures de la mécanique classique et ses insuffisances via les expériences de l'époque. Nous allons maintenant aller au-delà de cette physique qui présente un handicap où nous abordons une nouvelle équation qui décrit n'importe quel système physique en présence d'un potentiel quelconque en général dite aussi Equation de Schrodinger ce qui est l'objectif du deuxième chapitre.

Chapitre I

Référence

- [1] S. Kouidri polycopie OPU exercice résolus de mécanique quantique 2013.

- [2] Introduction à la mécanique quantique Cours d'ouverture, EPF 3eme année
Fabien Besnard 6 février 2013

- [3] Cours S8 Introduction au monde quantique David Malka MPSI – 2017-2018

- [4] HABIB BOUCHRIHA Introduction à la mécanique physique cours et applications 2002.

- [5] Introduction à la mécanique quantique Cours d'ouverture, EPF 3eme année
Fabien Besnard 6 février 2013

- [6] Introduction la mécanique quantique Nots de Coure de L3 Eecole Normale Supérieure de Cachan. Jérérny Neveu Etudiant au département de physique de L'ENS de Cachan P12-13 03 AV

Chapitre II

Traitement

quantique de

l'équation de

Schrödinger

Chapitre II

II.1 Introduction

Nous avons vu au chapitre précédent que la lumière était considérée comme étant une onde électromagnétique en premier lieu et en second est formée de corpuscules d'énergie $h\nu$ de ce fait l'histoire de la physique moderne commence de ce point de la considération de A. Einstein en 1905 suite à ces travaux de recherche justifiant le concept des photons et la célèbre interprétation de l'effet photoélectrique en assimilant son modèle par analogie avec la distribution des molécules dans un gaz discret [1].

Ces travaux ont permis aussi à l'explication du rayonnement des corps noirs et le concept quantique commence à se dérouler. Cette démarche a mené les physiciens pas à pas dans un monde étrange durant toute une décennie de 1905 à 1913 et le phénomène des transitions électroniques entre les orbites prend axe dans ce domaine.

Après 10 ans plus tard L. De Broglie a donné une interprétation plus profonde aux orbites de Bohr en suggérant même que les électrons sont aussi des ondes et la condition de quantification revient à dire qu'il y a un nombre entier de λ qui est présent dans le cercle. Nous en donnerons ici l'origine de la fameuse équation dite Equation de Schrodinger [1].

II.2 L'origine de l'équation de Schrodinger

Erwin Schrödinger expose les idées de Louis de Broglie les ondes de matière en posant des questions : Qu'est-ce que c'est que cette onde qui n'a pas d'équation ? En effet, en général, les physiciens normalement posent d'abord des équations, puis ils cherchent à les

Chapitre II

résoudre mais dans ce cas, au contraire, de Broglie avait d'abord postulé l'existence d'une onde sans en avoir posé d'équation.

Alors à la suite de son réflexion, Schrödinger entame sa recherche et trouve en 1925 une équation valable pour les ondes de Louis de Broglie, justifiant bien ainsi les fondamentales bases de la mécanique ondulatoire reposant sur le principe d'équivalence entre la mécanique ondulatoire et la nouvelle mécanique dite aussi mécanique quantique et déduisant avec l'utilisation des 4 équations essentiels de Maxwell sa nouvelle équation nommé sur son nom.

Alors avec l'électromagnétisme et suite au mouvement ondulatoire de la lumière dans un milieu d'indice de réflexion n l'équation ondulatoire s'écrit:

$$\Delta \vec{E} - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = \vec{0} \quad (\text{II} - 1)$$

$$\Delta \vec{B} - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \vec{B}}{\partial t^2} = \vec{0} \quad (\text{II} - 2)$$

Avec ces équations qui décrivent l'évolution de l'onde électromagnétique dans le vide et pour un champ électrique de la forme:

$$\vec{E} = E_0 e^{i(\omega t - kx)} \quad (\text{II} - 3)$$

on obtient :

$$\Delta \vec{E} - \frac{1}{v^2} (-\omega^2) \vec{E} = \vec{0} \quad (\text{II} - 4)$$

Chapitre II

qui devienne:

$$\Delta \vec{E} + \frac{\omega^2}{v^2} \vec{E} = \vec{0} \quad (\text{II} - 5)$$

Avec $\frac{\omega^2}{v^2} = k^2$ est le carré du vecteur d'onde.

Arrivé à ce point, la même équation est valable en mécanique quantique à la place de \vec{E} on substitue la fonction d'onde $\psi(x)$ toute en remplaçant $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ où E est l'énergie cinétique.

Seulement ici on devrait préciser ce point, pour une particule libre on est d'accord de remplacer k^2 par $\frac{2mE}{\hbar^2}$ mais pour une particule liée l'énergie cinétique est $(E - V(x))$ avec $V(x)$ l'énergie potentielle le nouveau vecteur d'onde s'écrit alors comme:

$$k^2 = \frac{2m(E - V(x))}{\hbar^2} \quad (\text{II} - 6)$$

Maintenant la nouvelle équation trouvée est:

$$\Delta \psi + \psi \frac{2m(E - V(x))}{\hbar^2} = 0 \quad (\text{II} - 7)$$

nommée équation de Schrödinger pour une particule liée.

Etudions maintenant les différents cas possible:

L'équation de l'onde dans un milieu

$$\Delta \vec{E} + \frac{\omega^2}{v^2} \vec{E} = \vec{0} \quad (\text{II} - 8)$$

Chapitre II

$$\frac{\omega^2}{v^2} = k^2 n^2 \quad (\text{II} - 9)$$

Où $n = \frac{c}{v}$ est l'indice de réfraction

Qui donne pour des énergies $E > V(x)$ un indice de réfraction positif et par conséquent la particule franchit le potentiel et continue son mouvement sans aucune atténuation

$$n = \frac{1}{\hbar k} \sqrt{2m(E - V(x))} \quad (\text{II} - 10)$$

Mais pour des énergies $E < V(x)$ l'équation donne un indice de réfraction imaginaire pur car n^2 est négatif et on dit que la particule interagit avec le potentiel et son mouvement subit une atténuation ; onde évanescente c'est le cas de la propagation d'une onde électromagnétique dans un milieu métallique et c'est ça la vraie physique.

Maintenant nous distinguons les différents cas possibles de l'équation de Schrödinger par l'analyse de la fonction potentielle toute en étudiant le comportement des solutions de l'équation de Schrödinger. [2]

II.3 Barrière de potentiel

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

$$V(x) = 0 \text{ pour } x < 0$$

$$V(x) = V_0 \text{ pour } 0 \leq x \leq a$$

$$V(x) = 0 \text{ pour } x > a$$

Chapitre II

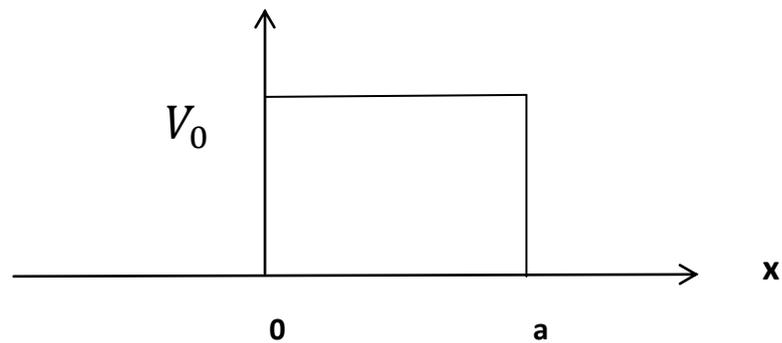


Figure II-1 Barrière de potentiel

Les équations s'écrivent comme :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = E\psi \quad \text{pour } x < 0 \quad \text{et} \quad x > a \quad (\text{II} - 11)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x)\psi = E\psi \quad \text{pour } 0 \leq x \leq a \quad (\text{II} - 12)$$

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

Le cas $E > V_0$

Transfert résonnant

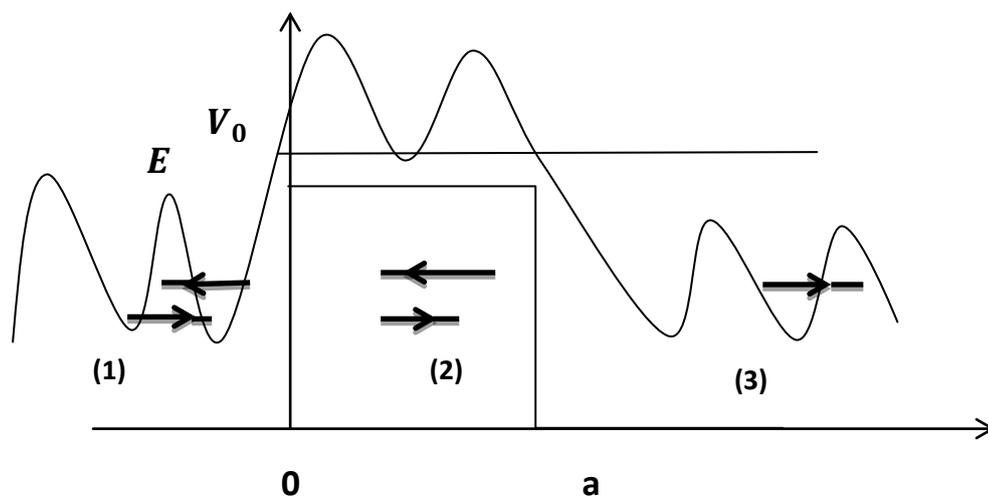


Figure II-2 Transfert résonnant

Chapitre II

La solution de l'équation aux valeurs propres de l'énergie est donnée ci-dessous pour chacune des trois régions indiquées figure (II.2)

pour $x < 0$

$$\psi_1 = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad \text{avec } k = \sqrt{2mE}/\hbar \quad (\text{II} - 13)$$

pour $0 \leq x \leq a$

$$\psi_2 = Ce^{ik'x} + De^{-ik'x} \quad \text{avec } k' = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar \quad (\text{II} - 14)$$

pour $x > a$

$$\psi_3 = Fe^{ikx} + Ge^{-ikx} \quad \text{avec } k = \sqrt{2mE}/\hbar \quad (\text{II} - 15)$$

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

k et k' ont leur signification précédente et doit être nul car toute réflexion à l'infini est impossible.

Les conditions de continuité $x = 0$ et $x = a$

$$\psi_1(0) = \psi_2(0) \quad (\text{II} - 16)$$

$$\psi_2(a) = \psi_3(a) \quad (\text{II} - 17)$$

$$\frac{d\psi_1(0)}{dx} = \frac{d\psi_2(0)}{dx} \quad (\text{II} - 18)$$

$$\frac{d\psi_2(a)}{dx} = \frac{d\psi_3(a)}{dx} \quad (\text{II} - 19)$$

Alors :

Chapitre II

$$A + B = C + D \quad (\text{II} - 20)$$

$$Ce^{k'a} + De^{-k'a} = Fe^{ika} \quad (\text{II} - 21)$$

$$ik(A + B) = -k'(C - D) \quad (\text{II} - 22)$$

$$k'Ce^{k'a} - k'De^{-k'a} = ikFe^{ika} \quad (\text{II} - 23)$$

Prenons $F = 0$ (particule incidente venant de $x = -\infty$). Les conditions de raccordement en $x = a$ donnent alors C et D en fonction de F, celles de raccordement en $x = 0$ A et B en fonction de C et D et par suite de F ; on trouve ainsi :

$$A = \left[\cos k'a - \frac{ik^2 + k'^2}{2kk'} \sin k'a \right] e^{ika} F \quad (\text{II} - 24)$$

$$B = i \frac{k'^2 - k^2}{2kk'} \sin k'a e^{ika} F \quad (\text{II} - 25)$$

Le coefficient de réflexion et transmission:

$$\vec{j} = |\psi|^2 = \frac{\hbar k}{m} \quad (\text{II} - 26)$$

$$\vec{j}_i = |A|^2 = \frac{\hbar k}{m} \quad (\text{II} - 27)$$

$$\vec{j}_r = |B|^2 = \frac{\hbar k}{m} \quad (\text{II} - 28)$$

$$\vec{j}_t = |F|^2 = \frac{\hbar k}{m} \quad (\text{II} - 29)$$

Le coefficient de réflexion :

Chapitre II

$$R = \frac{\vec{j}_r}{\vec{j}_i} = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left| \frac{B}{A} \right|^2 \quad (\text{II} - 30)$$

$$R = \frac{k^2 - k' \sin k' a}{4k^2 k'^2 + (k^2 - k'^2)^2 \sin^2(k' a)} \quad (\text{II} - 31)$$

Le coefficient de transmission:

$$T = \frac{\vec{j}_t}{\vec{j}_i} = \frac{|F|^2}{|A|^2} = \left| \frac{F}{A} \right|^2 \quad (\text{II} - 32)$$

$$T = \frac{4k^2 k'^2}{4k^2 k'^2 + (k^2 + k'^2)^2 \sin^2(k' a)} \quad (\text{II} - 33)$$

On vérifie facilement que $R + T = 1$. En remplaçant k et k' par leur valeur il vient :

$$T = \frac{4E(E - V_0)}{4E(E - V_0) + V_0^2 \sin^2 \left[\sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar}} a \right]} \quad (\text{II} - 34)$$

T oscille de manière périodique du fait de la présence de la fonction sinus entre sa valeur minimale $\frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(E - V_0)}}$ sa valeur maximal $T=1$ [2].

Cas où $E < V_0$

Effet Tunnel:

Chapitre II

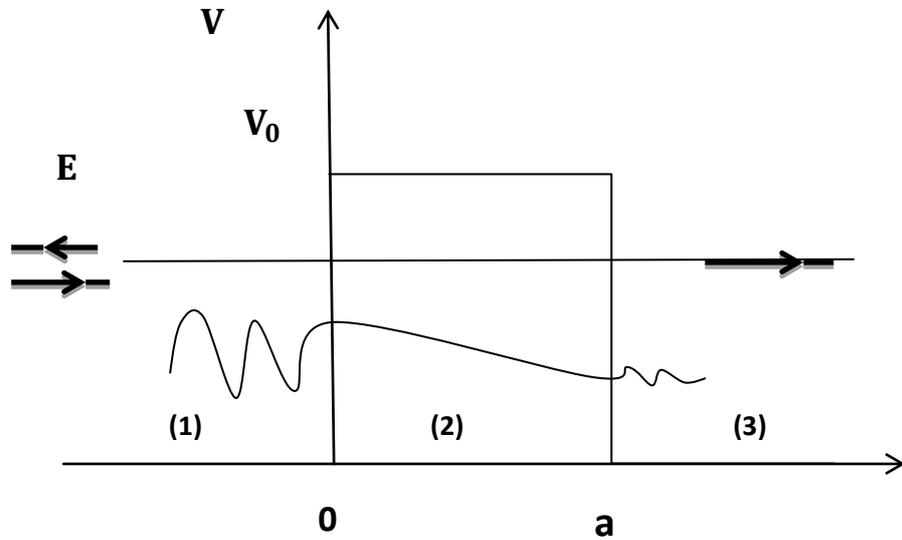


Figure II-3 : Effet tunnel

La barrière de potentiel est infranchissable pour la particule classique qui est toujours réfléchie dans la région (1)

En écrivant l'équation de Schrödinger dans les trois régions (1), (2) et (3) on montre facilement que les fonctions d'onde de la particule dans ces régions s'écrivent:

pour $x < 0$

$$\psi_1 = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad \text{avec } k = \sqrt{2mE}/\hbar \quad (\text{II} - 36)$$

pour $0 \leq x \leq a$

$$\psi_2 = He^{k''x} + Je^{-k''x} \quad \text{avec } k'' = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar \quad (\text{II} - 37)$$

pour $x > a$

$$\psi_3 = Fe^{ikx} + Ge^{-ikx} \quad \text{avec } k = \sqrt{2mE}/\hbar \quad (\text{II} - 38)$$

La fonction d'onde de la particule est exponentiellement décroissante dans la région (2):

Chapitre II

$$\psi_2 = J e^{-k''x} \quad (\text{II} - 39)$$

Il suffit donc de remplacer k' par k'' dans les calculs du paragraphe précédent pour obtenir l'expression du coefficient de transmission:

$$T = \frac{4E(E-V_0)}{4E(E-V_0) + V_0^2 \sinh^2 \left[\sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar}} a \right]} \quad (\text{II} - 40)$$

Avec: $R = T - 1$

$$R = \frac{V_0^2 \sinh^2 \left[\sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar}} a \right]}{4E(E-V_0) + V_0^2 \sinh^2 \left[\sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar}} a \right]} \quad (\text{II} - 41)$$

Donc, contrairement aux prévisions classiques, la particule a une probabilité non nulle de franchir la barrière de potentiel : c'est l'effet Tunnel (fig.II.3) Cet effet est une réalité physique et intervient dans l'interprétation de beaucoup de phénomènes : radioactivité α , passage des électrons d'un atome à un autre.....,

Équivalent optique de la barrière est une lame métallique plongée dans un milieu transparent (n_1 et n_3 sont réels et n_2 imaginaire). Si la largeur de la lame n'est pas très grande devant la portée $\frac{1}{k''}$ de l'onde évanescente de la région centrale, l'onde peut être transmise dans la région (3) (fig. II.3) [3].

Chapitre II

$$T = \begin{cases} \frac{4E(E-V_0)}{4E(E-V_0)+V_0^2 \sin^2 \left[\sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar}} a \right]} & \text{pour } E > V_0 \\ \frac{4E(E-V_0)}{4E(E-V_0)+V_0^2 \sinh^2 \left[\sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar}} a \right]} & \text{pour } E < V_0 \end{cases} \quad (\text{II} - 42)$$

II.4 Marches de potentiel

Soit une particule "incidente" d'énergie E venant des x négatifs et se dirigeant vers les positifs. Cette particule rencontre en $x = 0$ une marche de potentiel V_0 (fig.II.3) définie par:

$$V(x) = 0 \text{ pour } x < 0$$

$$V(x) = V_0 \text{ pour } x > a$$

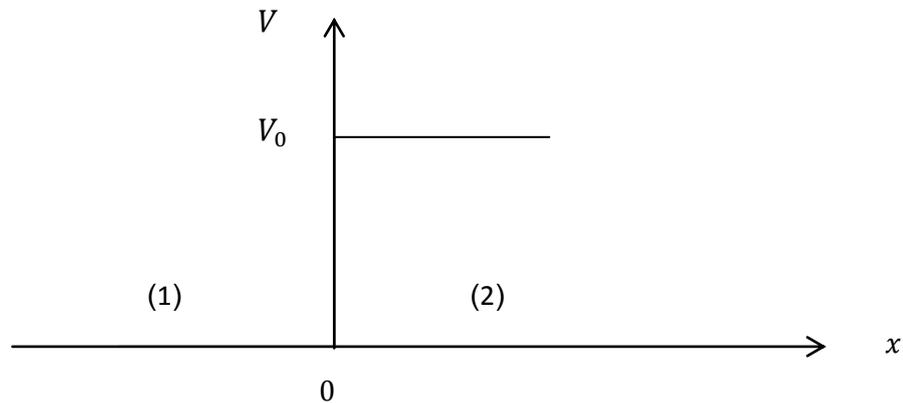


Figure II-3 : Marches de potentiel

Nous devons considérer deux cas, suivant que E est supérieure ou inférieure à la hauteur de la marche V_0 .

Chapitre II

Cas où $E > V_0$

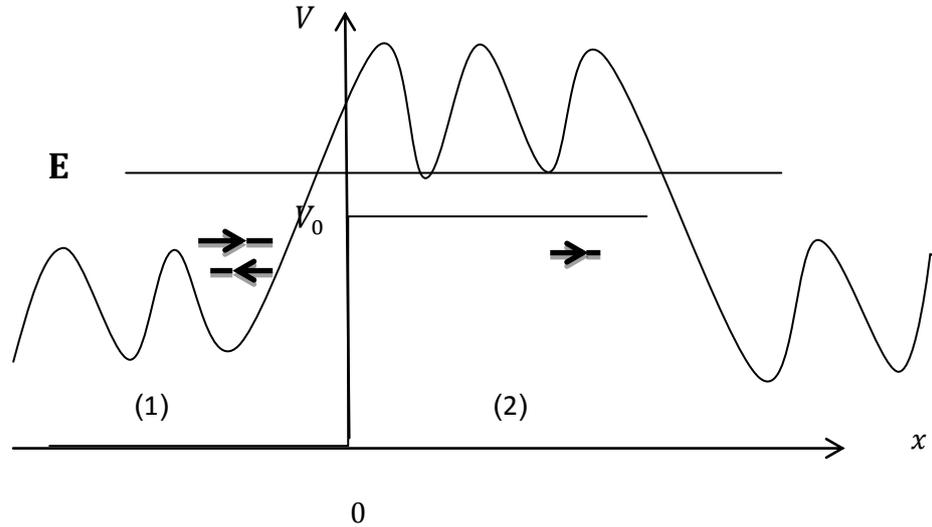


Figure II-4 : Marches de potentiel $E > V_0$

L'équation de Schrödinger peut s'écrire :

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar} (E - V) \psi = 0 \quad (\text{II} - 43)$$

On a alors dans les deux régions (1) et (2):

$$\text{Région (1):} \quad \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar} E \psi = 0 \quad (\text{II} - 44)$$

soit

$$\psi_1 = A e^{ikx} + B e^{-ikx} \quad \text{avec } k = \sqrt{2mE}/\hbar \quad (\text{II} - 45)$$

$$\text{Région (2):} \quad \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar} (E - V) \psi = 0 \quad (\text{II} - 46)$$

Soit

Chapitre II

$$\psi_2 = Ce^{ik'x} + De^{-ik'x} \quad \text{avec } k' = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar \quad (\text{II} - 47)$$

Ae^{ikx} représente l'onde incidente et Be^{-ikx} l'onde réfléchie par le saut de potentiel.

$Ce^{ik'x}$ représente l'onde transmise et $De^{-ik'x}$ est une onde réfléchie qui reviendrait de l'infini, ce qui est impossible, donc $D = 0$.

Les solutions dans les deux régions sont en définitive:

$$\psi_1 = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad (\text{II} - 48)$$

$$\psi_2 = Ce^{ik'x} \quad (\text{II} - 49)$$

Les conditions de continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée

$$\psi_1(0) = \psi_2(0) \text{ et } \frac{\partial \psi_1(0)}{\partial x} = \frac{\partial \psi_2(0)}{\partial x} \text{ donnent :}$$

$$\begin{cases} A + B = C \\ ikA + ikB = ik'C \end{cases} \quad (\text{II} - 50)$$

$$\begin{cases} \frac{B}{A} = \frac{k - k'}{k + k'} \\ \frac{C}{A} = \frac{2k}{k + k'} \end{cases} \quad (\text{II} - 51)$$

$$R = \left| \frac{B}{A} \right|^2 \quad \text{et pour } T = \frac{k'}{k} \left| \frac{C}{A} \right|^2$$

On reviendra sur le bienfondé de ces définitions de R et de T lors de l'étude du courant de probabilité.

Chapitre II

On a alors:

$$R = \frac{k-k'}{k+k'} = 1 - \frac{4kk'}{(k+k')^2} \quad (\text{II} - 52)$$

$$T = \frac{4kk'}{(k+k')^2} \quad (\text{II} - 53)$$

On vérifie bien que l'on a $R+T = 1$

Cette relation signifie qu'on a conservation du flux incident de particules:

Chaque particule incidente ne peut être que réfléchié ou transmise.

Cette situation est similaire à la conservation de l'énergie en mécanique classique.

En conclusion on peut dire que contrairement aux prévisions classiques la particule a une probabilité non nulle de revenir en arrière voir Fig. II-4

Ce qui est aussi justifié par l'optique pour deux milieux d'indices n_1 et n_2 réels (réflexion vitreuse) l'onde incidente donne naissance à une onde réfléchié et à une onde transmis.[3]

Cas $E < V_0$

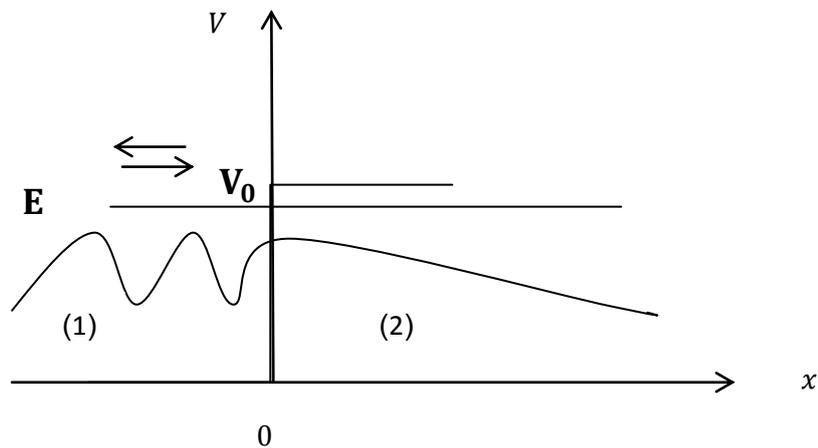


Figure II-5 : Marches de potentiel $E < V_0$

Chapitre II

Les fonctions d'onde de la particule dans les deux régions sont données par :

pour $x < 0$

$$\psi_1 = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad \text{avec } k = \sqrt{2mE}/\hbar \quad (\text{II} - 54)$$

pour $x > 0$

$$\psi_2 = He^{k''x} + Je^{-k''x} \quad \text{avec } k'' = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar \quad (\text{II} - 55)$$

Pour que ψ_2 reste bornée lorsque tend vers l'infini il faut que $H = 0$ ce qui conduit à :

$$\psi_1 = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad (\text{II} - 56)$$

$$\psi_2 = Je^{-k''x} \quad (\text{II} - 57)$$

$\psi(x)$ est continue en $x = 0$

$A + B = J$ on utilise le fait que $\psi(x)$ devant rester finie pour $x \rightarrow \infty$, $B = 0$

$\frac{\partial\psi(x)}{\partial x}$ est continue en $x = 0$

$$kA + ikB = -k''J \quad (\text{II} - 58)$$

On trouve:

$$\frac{B}{A} = \frac{k-ik''}{k+ik''} \quad \text{et} \quad \frac{J}{A} = \frac{2k}{k+ik''} \quad (\text{II} - 59)$$

Cette fois les rapports sont complexes et il apparaît un déphasage à la réflexion.

$R = \left| \frac{B}{A} \right|^2 = 1$ et donc $T = 0$ (il n'y a pas de flux transmis)

Chapitre II

Cependant $\left|\frac{J}{A}\right|^2$ est différent de zéro ce qui implique que la vitesse de groupe du paquet d'ondes est nulle dans la région (2).

Comme en mécanique classique, la particule est toujours réfléchié néanmoins il existe une onde du type évanescence $e^{ik''x}$ qui montre que la particule a une probabilité non nulle de se trouver dans la région (2) probabilité qui décroît exponentiellement en fonction de x et devient négligeable lorsque x est supérieure l'apportée $\frac{1}{k''}$ voir Figure (II-5)

Avec analogie optique si un milieu a un indice n_1 qui est réel et si n_2 est imaginaire alors on tombe sur d'une réflexion métallique. L'onde incidente est réfléchié intégralement et on a une onde évanescence dans le milieu métallique [3-4]

II.4 Puits potentiel

L'expérience acquise précédemment dans l'étude d'une marche de potentiel nous permet de traiter n'importe quel problème à potentiel plat par morceau.

Pour trouver les fonctions d'onde des états stationnaires, il suffit d'écrire, dans chaque région où le potentiel est constant, une combinaison linéaire de fonctions exponentielles d'argument réel ou imaginaire suivant que l'énergie est inférieure ou supérieure au potentiel puis de raccorder la fonction d'onde d'une région à l'autre en imposant les conditions de continuité de la fonction et de sa dérivée.

Chapitre II

Illustrons cette technique en traitant le cas du « puits plat fini » ou puits à fond plat, de profondeur finie ; ce modèle de puits de potentiel est un peu plus réaliste que le puits plat infini. Le puits de potentiel de profondeur V_0 et de largeur a est décrit par[3-4]

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

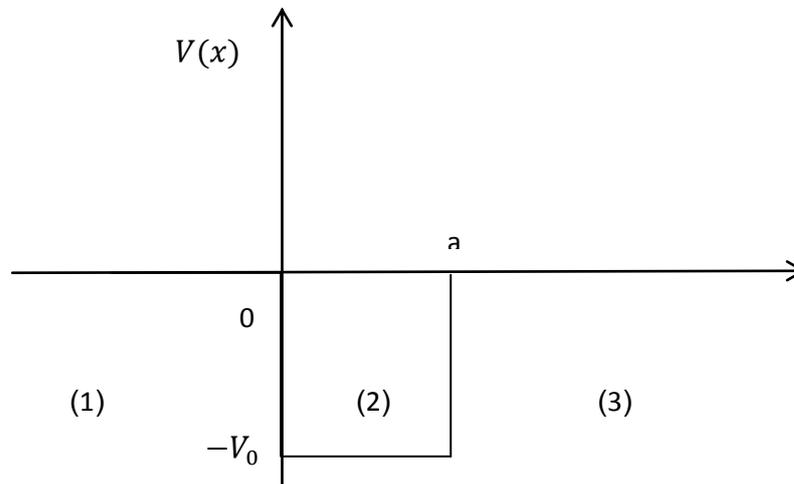


Figure II-6 : Puits de potentiel

Dans chacune des régions de potentiel constant, la fonction d'onde $\psi(x)$ d'un état stationnaire de la particule prend la forme générale:

pour $x < 0$

$$\psi_1 = ae^{ikx} + be^{-ikx} \quad \text{avec } k = \sqrt{2mE}/\hbar \quad (\text{II} - 60)$$

Chapitre II

pour $0 \leq x \leq a$

$$\psi_2 = ce^{k'x} + de^{-k'x} \quad \text{avec } k' = \sqrt{2m(E + V_0)}/\hbar \quad (\text{II} - 61)$$

pour $x > a$

$$\psi_3 = fe^{ikx} + ge^{-ikx} \quad \text{avec } k = \sqrt{2mE}/\hbar \quad (\text{II} - 62)$$

Ces expressions valent nous le savons maintenant quelle que soit la valeur de $E > -V_0$ (Puisqu'il n'existe pas d'état stationnaire d'énergie inférieure à la valeur minimale du potentiel).

En particulier, si $-V_0 < E < 0$ les expressions précédentes restent valables, la valeur de k étant imaginaire pure. Il suffira de poser alors:

$$E < 0 \quad k = ip, \quad p = \sqrt{-2mE}/\hbar \quad (\text{Réal})$$

Apparaîtront ainsi dans l'expression de $\psi(x)$ des quantités réelles exponentielles. Cependant, même si les calculs formels sont analogues, nous allons voir maintenant que la fonction d'onde décrit des situations physiques tout à fait différentes suivant que $E < 0$ ou $E > 0$

Considérons maintenant les états stationnaires d'énergie $E > 0$ Il s'agit par exemple d'une particule émise par un accélérateur qui lui communique sous forme cinétique son énergie E , venant par exemple de la gauche du puits, là où ne règne aucun potentiel.

Chapitre II

Dans la région $[0, a]$ cette particule est soumise à un potentiel attractif $-V_0$, il s'agit donc d'une expérience de diffusion (à une dimension) par un potentiel attractif de portée a .

C'est la raison pour laquelle, on donne souvent le nom d'états de diffusion aux états non liés. La fonction d'onde d'un tel état a pour expression où, comme pour la marche, on posera $g=0$ pour signifier qu'il n'y a pas de source de particules à droite. [3]

Les valeurs des autres coefficients sont fixées par des conditions de continuité imposées à la fonction d'onde et sa dérivée aux points $x = 0, x = a$

de discontinuité du potentiel ; soit:

$$\begin{cases} ae^{-ika} + be^{+ika} = ce^{-k'a} + de^{+k'a} \\ kae^{-ika} - kbe^{+ika} = k'ce^{-k'a} - k'de^{+k'a} \\ ce^{-k'a} + de^{+k'a} = fe^{ika} \\ k'ce^{-k'a} - k'de^{+k'a} = kfe^{ika} \end{cases} \quad (\text{II} - 63)$$

On dispose ainsi d'un système de quatre équations linéaires et homogènes à cinq inconnues, ce qui permet d'exprimer quatre des inconnues en fonction de la cinquième, quelles que soient les valeurs des coefficients numériques du système, en d'autres termes, quelle que soit la valeur propre de l'énergie E considérée liés, celles des états de diffusion ne sont pas quantifiées...ce qui est normal puisque la particule n'est pas confinée dans une région de l'espace Sont particulièrement intéressants les coefficients a et b et f des ondes réfléchies et transmises.[2-3]

Chapitre II

Comme ils sont proportionnels à a il est commode de définir les facteurs de transmission A_t

et de réflexion A_r par:
$$\begin{cases} a = A_r b \\ f = A_t b \end{cases}$$

Un calcul (un peu laborieux) donne :

$$\begin{cases} A_r = \frac{i \frac{k'^2 - k^2}{2kk'} \sin k'a}{\cos k'a - i \frac{k'^2 - k^2}{2kk'} \sin k'a} e^{-ika} \\ A_t = \frac{1}{\cos k'a - i \frac{k'^2 - k^2}{2kk'} \sin k'a} e^{-ika} \end{cases} \quad (\text{II} - 64)$$

D'où les coefficients de réflexion et de transmission:

$$\begin{cases} R = |A_r|^2 = \frac{\left(\frac{k_0^2}{2kk'}\right)^2 \sin^2 k'a}{1 + \left(\frac{k_0^2}{2kk'}\right)^2 \sin^2 k'a} \\ T = |A_t|^2 = \frac{1}{1 + \left(\frac{k_0^2}{2kk'}\right)^2 \sin^2 k'a} \end{cases} \quad (\text{II} - 65)$$

Avec
$$\begin{cases} k = \sqrt{2mE}/\hbar \\ k' = \sqrt{2m(E + V_0)}/\hbar \\ k_0 = \sqrt{2mV_0}/\hbar \end{cases} \quad (\text{II} - 66)$$

C'est le coefficient R qui caractérise l'efficacité de la diffusion par le potentiel.

En effet, l'onde émergente vers l'avant d'amplitude F peut être considérée comme étant une somme de l'onde incidente d'amplitude A et de l'onde diffusée vers l'avant .

Chapitre II

Le coefficient T qui mesure la probabilité de particules transmises, fait intervenir à la fois l'intensité de l'onde incidente, celle de l'onde diffusée et un terme d'interférence. Il est donc impossible de distinguer, vers l'avant, les particules "vraiment" diffusées par le puits, de celles qui proviendraient, sans interaction avec le potentiel, du faisceau incident.

Par contre la diffusion vers l'arrière, dont le coefficient de réflexion R mesure l'importance est purement due à l'action du puits de potentiel sur les particules.[3]

Conclusion

Maintenant que nous avons étudié toutes les cas possibles de résolution de l'équation de Schrödinger via un potentiel constant que ce soit : barrière, marche ou puits et connaître la vraie formule du coefficient de transmission qui n'est autre que la probabilité pour qu'une particule soit transmise nous allons convertir nos équations théoriques à des équations numériques ce qui est l'objectif du dernier chapitre III.

Chapitre II

Référence

- [1] S. Koudri Livre Les fondements de la mécanique quantique en preparation 2018.
- [2] C. Cohen-Tannoudji, B.Diu et F.Laloe Mécanique quantique - Tome 1 Edition Hermann édition 1977
- [3] HABIB BOUCHRIHA Introduction `a la mécanique physique cours et applications 2002
- [4] Mécanique Quantique Licence de Sciences Physiques et Chimiques Université de Lorraine Christophe Chatelain, 2016

Chapitre III

Résolution

numérique de

l'équation de

Schrödinger via un

potentiel constant

Chapitre III

III-1 Introduction

Maintenant nous arrivons à la partie la plus laborieuse de notre travail où on convertit toutes nos équations théoriques vues précédemment aux chapitre I et II à des équations numériques basées sur un organigramme de calcul

III.2 Méthode des différences finies

Pour résoudre numériquement l'équation de Schrödinger, il semble pertinent d'appliquer la méthode de discrétisation de l'espace et des opérateurs.

Sous les hypothèses que $\Psi(x)$ est au moins de classe C^2 , un développement de Taylor nous permet d'écrire les deux égalités suivantes :

$$\Psi(x+h) - \Psi(x) = h \frac{d\Psi}{dx}(x) + \frac{h^2}{2!} \frac{d^2\Psi}{dx^2}(x) + O(h^3) \quad (\text{III} - 1)$$

$$\Psi(x-h) - \Psi(x) = -h \frac{d\Psi}{dx}(x) + \frac{h^2}{2!} \frac{d^2\Psi}{dx^2}(x) + O(h^3) \quad (\text{III} - 2)$$

Le somme de ces deux égalités :

$$\frac{\Psi(x+h) + \Psi(x-h) - 2\Psi(x)}{h^2} = \frac{d^2\Psi}{dx^2}(x) + O(h^2) \quad (\text{III} - 3)$$

Apparaît alors équivalent discret de l'opérateur Δ (à une dimension, mais le cas à trois dimensions s'en déduit aisément). La précision de cette expression est en $O(h^2)$.

En discrétisant l'espace d'un pas "h" et en injectant le résultat précédent dans l'équation de Schrödinger, il vient :

Chapitre III

$$\frac{\Psi(x+h) + \Psi(x-h) - 2\Psi(x)}{h^2} + (E - V(x))\Psi(x) + O(h^2) = 0 \quad (\text{III} - 4)$$

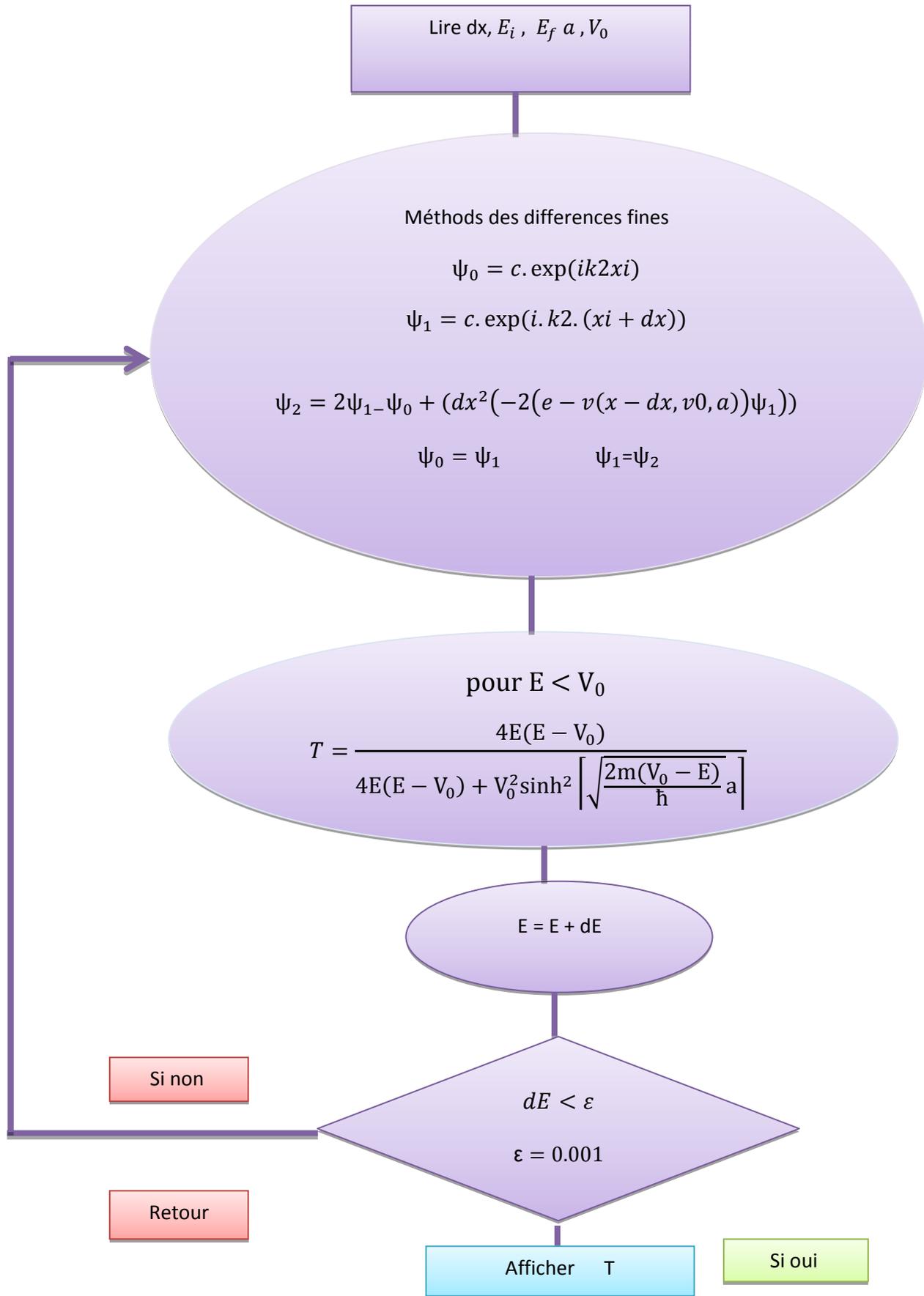
$$\Psi(x+h) + \Psi(x-h) - 2\Psi(x) + h^2(E - V(x))\Psi(x) + O(h^4) = 0 \quad (\text{III} - 5)$$

Cette équation peut être réécrite de façon à faire apparaître une relation de récurrence entre les valeurs de Ψ aux nœuds du maillage. Le pas de la discrétisation est fixé à h et l'origine est définie par le point O .

Lors de la résolution numérique, l'algorithme débute à $x = -2h$. La connaissance des deux premières valeurs de Ψ_n (il s'agit de l'onde plane écrite précédemment) permet d'initier la récurrence qui donne accès à tous les Ψ_n .

3III. L'organigramme de calcul:

Chapitre III



Chapitre III

III.4 Résultats:

La résolution de notre équation de Schrödinger à potentiel constant nous a permis de déterminer en premier lieu le coefficient de transmission T d'une manière générale tout en se basant sur les conditions aux limites aux points de raccordement d'abscisse $x=0$ et $x=a$.

Nous en donnerons ici un bref aperçu de ce que nous avons fait au niveau du chapitre II.

Alors en partant de la fameuse relation donnant T en fonction de a et V_0 et pour des énergies inférieures à la hauteur de la barrière de potentiel pour pouvoir effectuer le célèbre effet : nommé Effet Tunnel:

pour $E < V_0$

$$T = \frac{4E(E-V_0)}{4E(E-V_0) + V_0^2 \sinh^2 \left[\sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar}} a \right]} \quad (\text{III} - 6)$$

pour $E > V_0$

$$T = \frac{4E(E-V_0)}{4E(E-V_0) + V_0^2 \sin^2 \left[\sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar}} a \right]} \quad (\text{III} - 7)$$

Chapitre III

III.5 Résultats et discussions

Nous présentons dans les figures au-dessous nos résultats qui portent sur ce que nous avons étudié numériquement selon notre organigramme inspiré sur un code en Fortran 77 qui calcule le coefficient de transmission ainsi que les fonctions d'ondes correspondantes.

Dans un premier temps, nous allons commencer par étudier le cas où l'énergie E est inférieur à la hauteur de la barrière de potentiel. Pour cela nous allons entamer un nouveau phénomène très utilisé en physique et a beaucoup d'application en technologie moderne **c'est l'effet Tunnel**

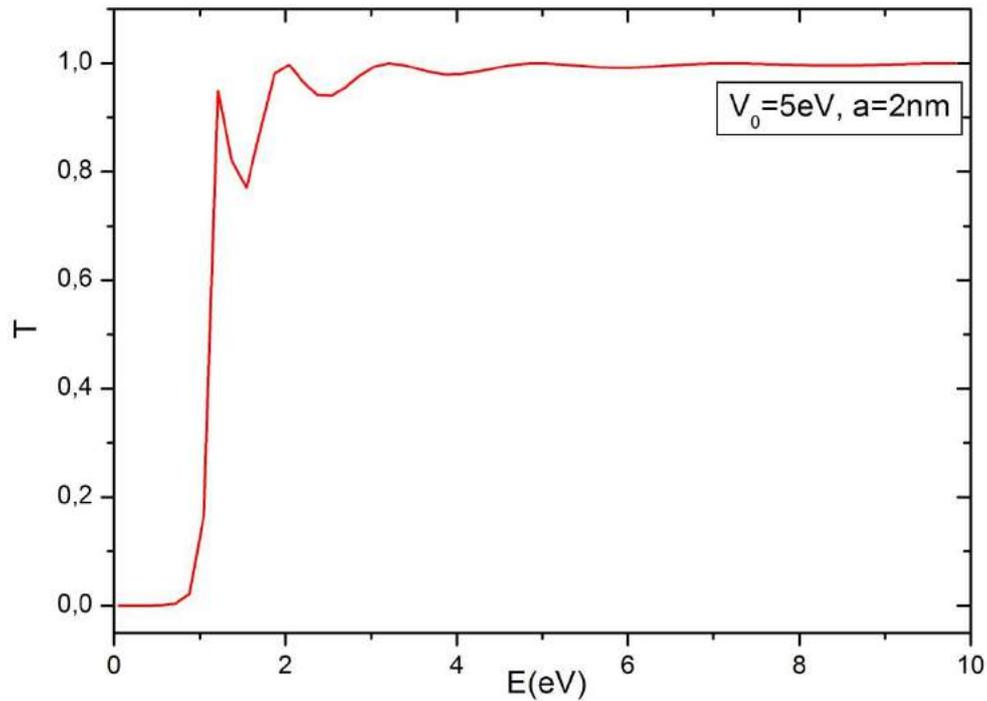


Figure III-1 : Variation du coefficient de transmission en fonction du rapport E

La figure III-1 indique la variation du coefficient de transmission T en fonction du rapport d'énergie E . Nous remarquons qu'au fur à mesure que le rapport augmente le coefficient de transmission augmente d'une façon variable jusqu'à ce que le rapport atteigne la valeur critique 3, une fois que le rapport dépasse cette valeur le coefficient T commence à se saturer vers la valeur 1.00.

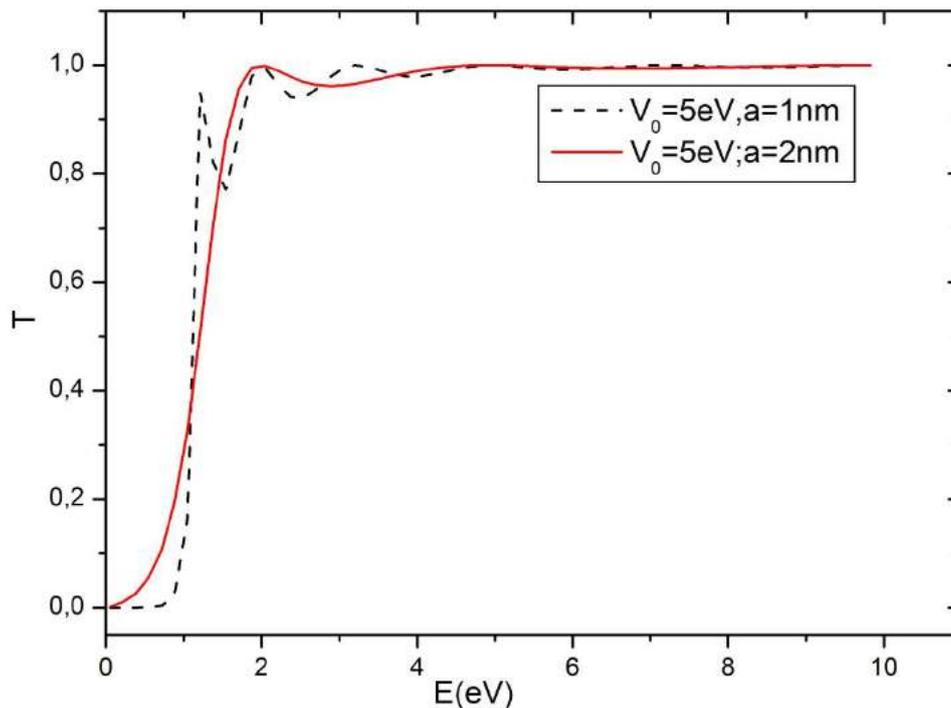


Figure III-2: Variation du coefficient de transmission pour une hauteur de barrière de 5eV et pour différents largeurs de la barrière $a=1\text{nm}$ ligne en pointillé et $a=2\text{nm}$ ligne continue

La figure III-2 indique que plus la barrière est large, plus la transmission d'un électron avec une énergie donnée sera faible. Lorsque l'épaisseur de la barrière est de 2 nm, très peu d'électrons arrivent à la traverser (coefficient proche de 0 lorsque l'énergie est inférieure à 0.9 eV).

Lorsque l'épaisseur est inférieure à 2 nm nous voyons que le coefficient de transmission n'est plus nul pour des énergies inférieures à la hauteur de barrière. La probabilité d'effet tunnel augmente même considérablement pour la barrière de 2 nm d'épaisseur. Au-delà de l'énergie de la barrière (0.9 eV), nous observons sur la barrière la

Chapitre III

plus épaisse, des oscillations liées à un phénomène de réflexion quantique (encore plus clairement visible sur la fig. I avec une barrière de 2 nm).

0eV-4.8eV u changement persiste entre les deux courbes pour des $V_0 = 5\text{eV}$ fixe

Au-delà de 4.8eV les deux courbes commencent à ce converger vers une valeur pratiquement constantes alentours de 1.00.

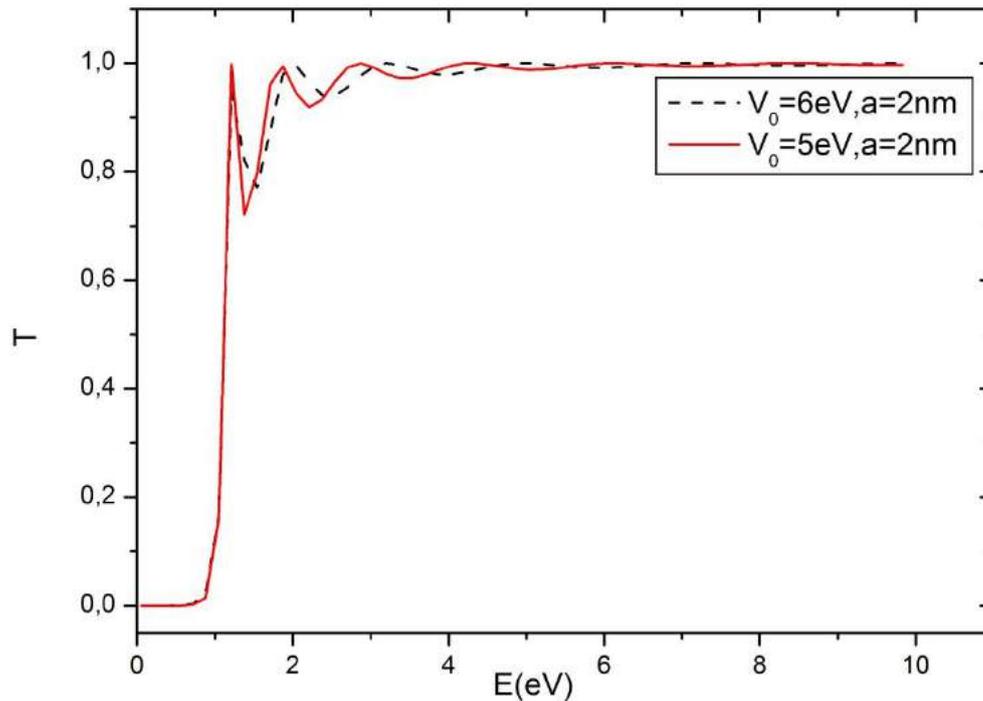


Figure III-3 : Variation du coefficient de transmission pour une largeur de barrière constante de l'ordre de 2nm et pour différents hauteurs de la barrière $V_0 = 6\text{eV}$ ligne en pointillé et $V_0 = 5\text{eV}$ ligne continue

La figure III-3 montre que plus la hauteur est grande, plus la transmission d'un électron avec une énergie donnée sera faible. Lorsque l'épaisseur de la barrière est de 2 nm, très peu d'électrons arrivent à la traverser (coefficient proche de 0 lorsque l'énergie est inférieure à 0.9 eV). Lorsque l'épaisseur est inférieure à 2 nm nous voyons que le coefficient de transmission n'est plus nul pour des énergies inférieures à la hauteur de barrière. La probabilité d'effet tunnel augmente même considérablement pour la

Chapitre III

barrière de 2 nm d'épaisseur. Au-delà de l'énergie de la barrière (0.9 eV), nous observons sur la barrière la plus épaisse, des oscillations liées à un phénomène de réflexion quantique (encore plus clairement visible avec une barrière de 2 nm).

III.6 Conclusion

Les figures III-1, III-2 et III-3 montrent bien le comportement du coefficient de transmission T via la variation de la hauteur et de la largeur de la barrière.

Sur les courbes déjà vue précédemment la diminution du coefficient de transmission persiste lorsque la hauteur de barrière augmente; dans ce cas on devrait fournir plus d'énergie à l'électron pour qu'il puisse traverser la barrière

Plus précisément, lorsque la hauteur de la barrière est de 5 eV, la probabilité d'effet tunnel est faible mais non négligeable (jusqu'à 30% des électrons peuvent passer). Elle peut cependant être doublée pour une hauteur de 0.1 eV.

Nous remarquons également des variations liées à un phénomène de réflexion quantique mais beaucoup plus faibles que précédemment (figure III-2), en parfait accord avec la faible épaisseur de barrière utilisée pour ce calcul numérique (2 nm).

Chapitre III

III.7 Les fonctions d'ondes

Nous avons tracé les fonctions d'ondes qui nous permettent de déterminer le coefficient de transmission suivant les relations fondamentales des fonctions d'ondes des trois régions correspondantes.

Pour cela nous réécrivons les trois fonctions d'ondes:

pour $x < 0$

$$\psi_1 = e^{ikx} + re^{-ikx} \quad \text{avec } k = \sqrt{2mE}/\hbar \quad (\text{III} - 8)$$

pour $0 \leq x \leq a$

$$\psi_2 = Ce^{k'x} + De^{-k'x} \quad \text{avec } k' = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar \quad (\text{III} - 9)$$

pour $x > a$

$$\psi_3 = te^{ikx} \quad \text{avec } k = \sqrt{2mE}/\hbar \quad (\text{III} - 10)$$

Nous précisons bien que les rapports entre les amplitudes :

$$r = \frac{B}{A} \quad (\text{III} - 11)$$

$$t = \frac{C}{A} \quad (\text{III} - 12)$$

Chapitre III

Dont la norme spécifie ce que nous somme entrain de l'étudier c'est-à-dire les probabilités d'être réfléchi on transmet :

Les vrais coefficients de réflexion et de transmission s'expriment *via* les relations fondamentales :

$$R = \left| \frac{B}{A} \right|^2 = |r|^2 \frac{V_0^2 \sinh^2 \left[\sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar}} a \right]}{4E(E-V_0) + V_0^2 \sin^2 \left[\sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar}} a \right]} \quad (\text{III} - 13)$$

$$T = \left| \frac{B}{C} \right|^2 = |t|^2 \frac{4E(E-V_0)}{4E(E-V_0) + V_0^2 \sinh^2 \left[\sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar}} a \right]} \quad (\text{III} - 14)$$

Chapitre III

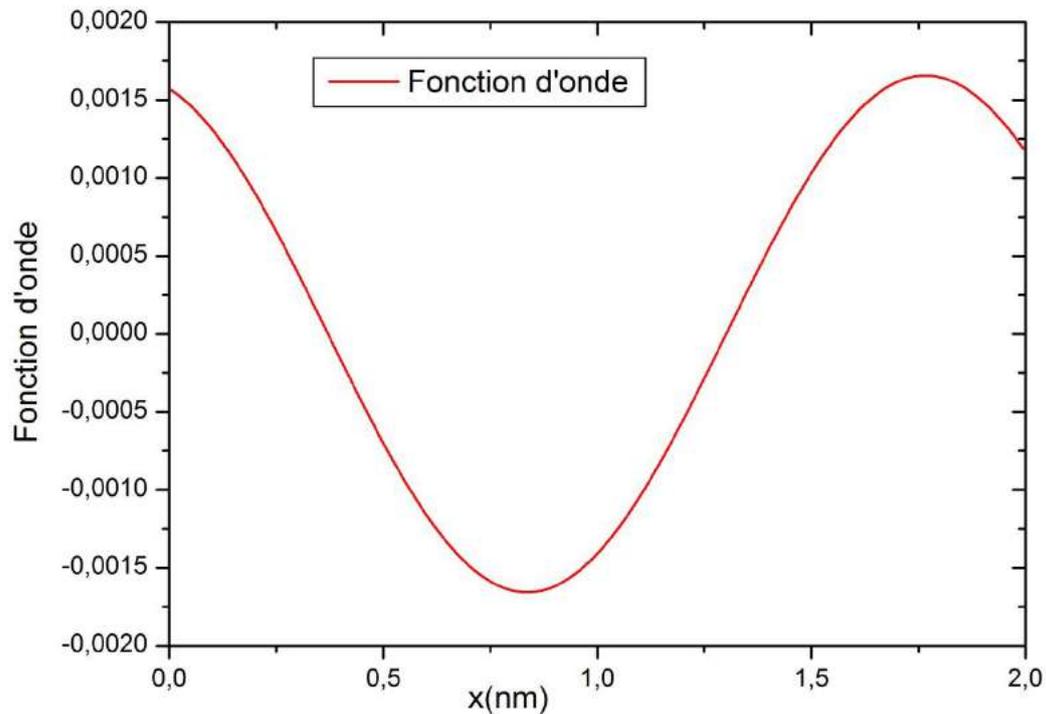


Figure III-4: Variation fonction d'onde en fonction du rapport largeur de barrière

La fonction d'onde d'une particule en présence d'une barrière de potentiel V_0 sur droite [0.2] on remarque que la longueur d'onde diminue sur l'intervalle [0.00,0.75] et augmente sur l'intervalle [0.75,1.75].

Dans un second temps, nous allons passer à étudier le cas où l'énergie E est supérieure à la hauteur de la barrière de potentiel. Pour cela nous allons entamer des phénomènes de réflexion et de transmission analogue aux phénomènes qui se passent au niveau de l'optique géométrique quant on frappe un milieu d'indice de réfraction n par un rayon lumineux.

Chapitre III

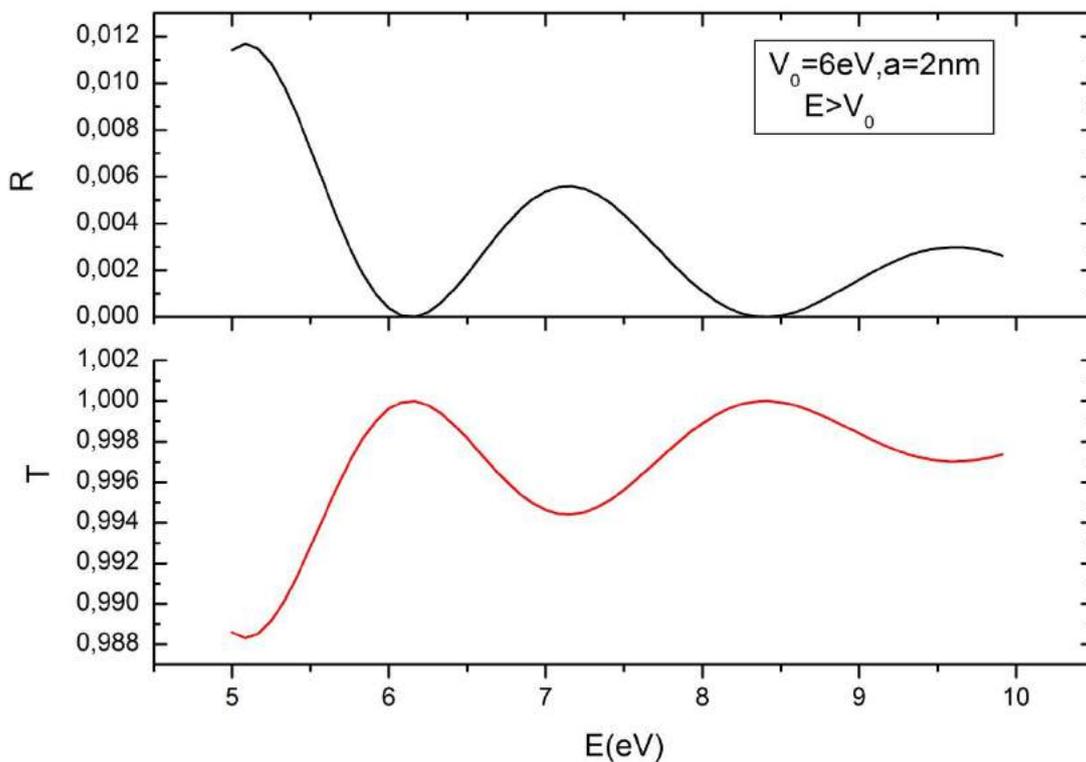


Figure III-5: Variation du coefficient de transmission et réflexion en fonction du rapport E

La figure III-5 indique la variation du coefficient de transmission T et du coefficient de réflexion R en fonction du rapport d'énergie E .

Nous remarquons qu'au fur à mesure que le rapport E augmente le coefficient de transmission augmente et le coefficient de réflexion diminue car $R+T = 1$ et vis-vers -ça

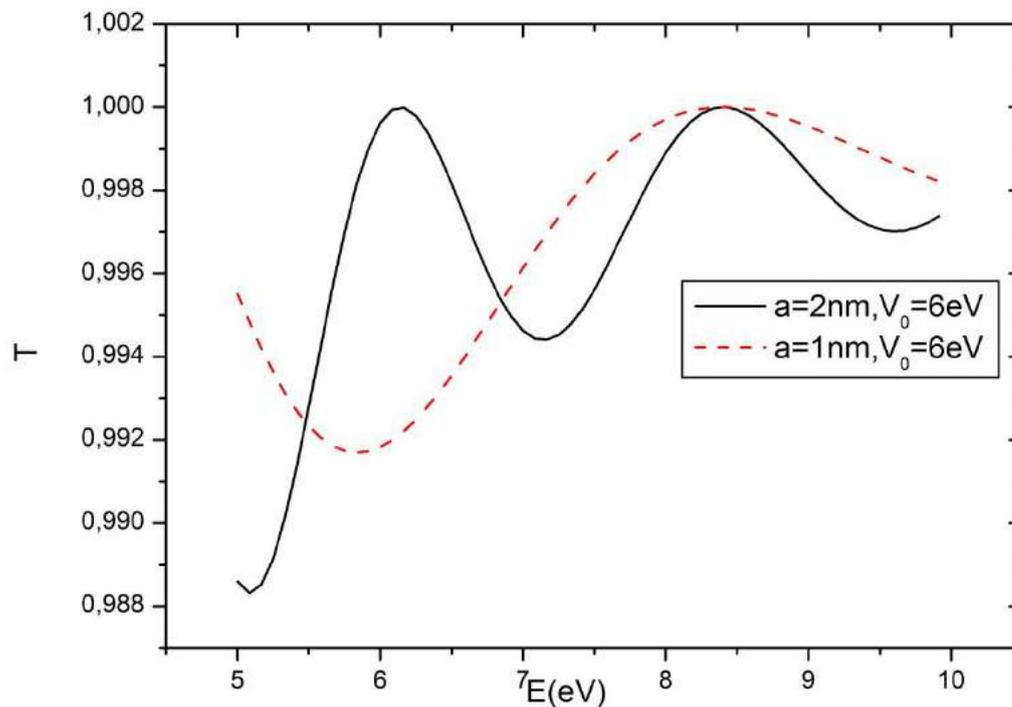


Figure III-6: Variation du coefficient de transmission pour une hauteur de barrière de 6eV et pour différents largeurs de la barrière $a=1\text{nm}$ ligne en pointillé et $a=2\text{nm}$ ligne continue

La figure III-6 indique que plus la barrière est large, plus la variation du coefficient de transmission d'un électron présente des nombres de lobes plus que celle d'une barrière de faible largeur c'est-à-dire $a=1\text{nm}$.

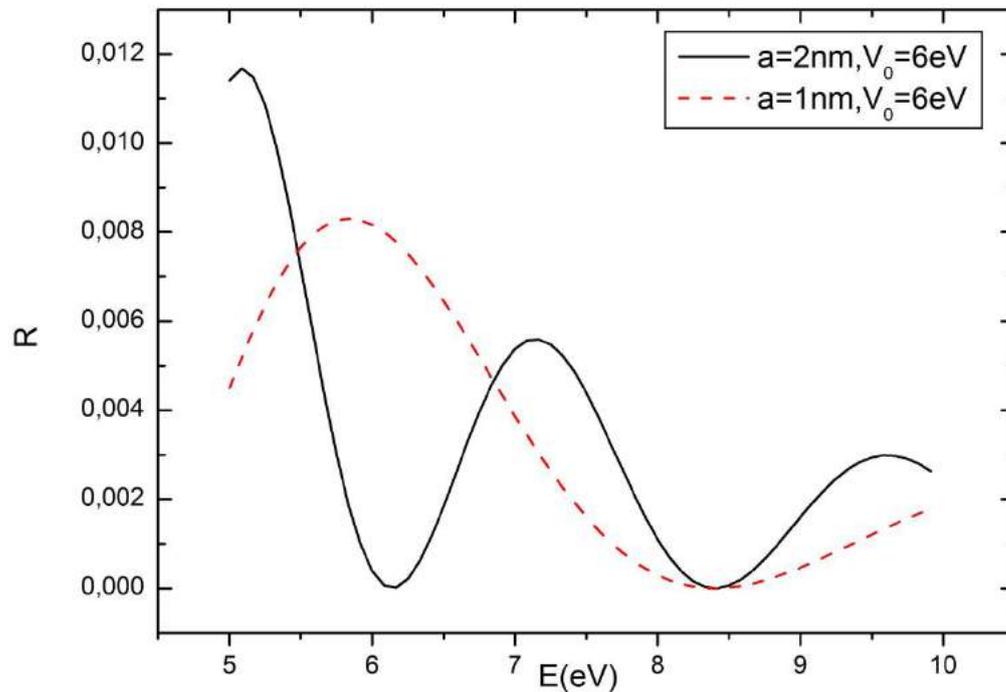


Figure III-7 : Variation du coefficient de réflexion pour une hauteur de barrière de 6eV et pour différents largeurs de la barrière $a=1\text{nm}$ ligne en pointillé et $a=2\text{nm}$ ligne continue

La figure III-7 indique que plus la barrière est large, plus la variation du coefficient de réflexion d'un électron présente des nombres de lobes plus que celle d'une barrière de faible largeur c'est-à-dire $a=1\text{nm}$.

Chapitre III

III.8 Comparaison avec d'autres travaux

La comparaison avec d'autres travaux donnés dans la réf.[1] Nous permettra de conclure que sur la gamme d'énergie 4eV-6eV nos résultats de la figure III-3 sont en bons accord avec la ref. [1]

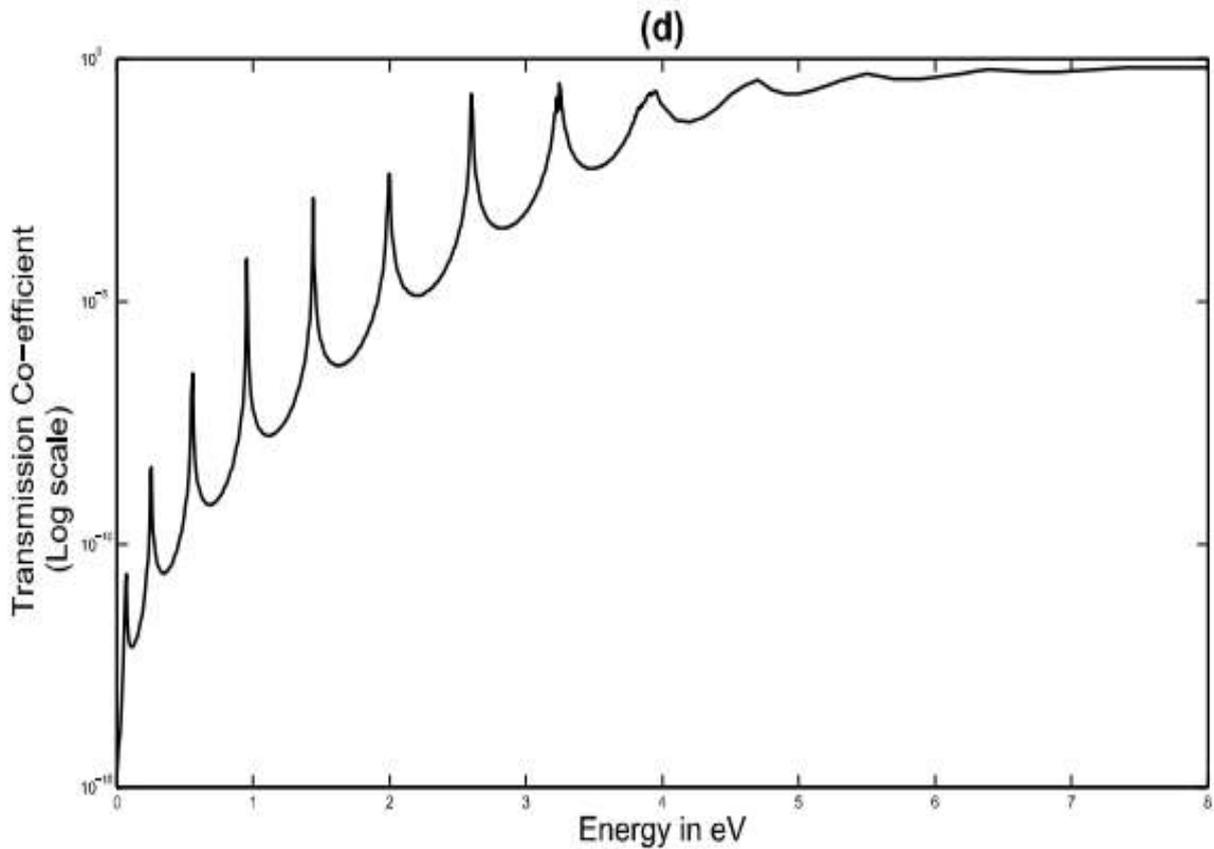


Figure III-8 Transmission probability for the potential barrier [1].

Chapitre III

III.9 Conclusion:

Nous avons calculé le coefficient de transmission en premier lieu, où nous avons résolu notre équation de Schrödinger d'une manière itérative c'est-à-dire en se basant sur la méthode des différences finies. Nos résultats pour une gamme d'énergie de [4 eV, 6eV] sont en bon accord avec les résultats d'autres auteurs cités en dessous [1].

Références

[1] Avik Dutt. And Sayan Kar. Smooth double barriers in quantum mechanics Arxiv 13 –SEP-2010 page 9 fig. (3-d).

Conclusion générale

Nous avons présenté dans ce travail un certain nombre de résultats relatif à la détermination du coefficient de transmission via la résolution de l'équation de Schrödinger pour le cas d'une barrière de potentiel. Nous avons généralisé le problème d'un point de vue théorique aux cas barrière de potentiel, marche de potentiel et puits de potentiel. Cette résolution à été basée sur la réécriture de l'hamiltonien pour les trois cas. Il est bien connu, que dans cette résolution nous traitons les fonctions d'onde comme des sinusoides. Dans un premier temps nous avons traité l'équation de Schrödinger via seulement le cas d'une barrière de potentiel où nous avons étudié avec succès le fameux Effet Tunnel.

L'objectif de ce travail était dans un premier temps de combler les lacunes de la mécanique classique vis-à-vis les merveilleuses expériences de l'époque en résolvant les équations des ondes et les équations de l'électrodynamique classique de Maxwell.

Dans un second temps nous avons écrit un langage numérique inspiré par un programme en Fortran 77. Nous avons calculé le coefficient de transmission, le coefficient de réflexion et la fonction d'onde correspondante. [1]

[1] S. Kouidri: Référence S. Kouidri polycopie OPU exercice résolu de mécanique quantique 2013.

Résumé

Dans ce travail, nous avons étudié le traitement classique de l'équation ondulatoire dans lequel nous avons traité les idées fondamentales de la mécanique quantique qui sont : Expérience de Young, Effet photoélectrique et Spectres atomiques.

Nous introduisons par la suite une méthode pour développer mathématiquement la résolution de l'équation de Schrödinger à barrière potentiel dans lequel $E < V_0$ appelée Effet Tunnel à partir de cette résolution on résulte que le coefficient de transmission d'un système physique *via* une potentielle constante

Enfin, nous avons abordé la résolution numérique en s'appuyant sur le programme nommé Fortran 77 qui calcule le coefficient de transmission, qui nous a aidé à ressortir les calculs

Mots clés: l'équation ondulatoire, mécanique quantique, l'équation de Schrödinger, Effet Tunnel, coefficient de transmission

Abstract

In this work, we have studied the classical treatment of the wave equation in which we have treated the fundamental ideas of quantum mechanics which are: Young's Experiment, Photoelectric Effect and Atomic Spectra.

We then introduce a method for mathematically developing the resolution of the potential barrier Schrödinger equation in which $E < V_0$ called Tunnel Effect from this resolution results in the transmission coefficient of a physical system via a constant potential.

Finally, we approached the numerical resolution by relying on the program named Fortran 77 which calculates the transmission coefficient, which helped us to highlight the computations

Key words: wave equation, quantum mechanics, Schrödinger equation, Tunnel effect, transmission coefficient