

Quantification de l'énergie dans un puits de potentiel harmonique.

① Eq de Schrödinger stationnaire:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 f(x)}{dx^2} + \frac{1}{2} k x^2 f(x) = E f(x)$$

(A état lié)

②  $\alpha = x \left( \frac{mk}{\hbar^2} \right)^{1/4}$

$$\frac{df}{dx} = \frac{df}{d\alpha} \times \frac{d\alpha}{dx} = \left( \frac{mk}{\hbar^2} \right)^{1/4} \frac{df}{d\alpha}$$

$$\frac{d^2 f}{dx^2} = \left( \frac{mk}{\hbar^2} \right)^{1/4} \frac{d}{d\alpha} \left( \frac{df}{d\alpha} \right) = \left( \frac{mk}{\hbar^2} \right)^{1/2} \frac{d^2 f}{d\alpha^2}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{mk}{\hbar^2} \right)^{1/2} \frac{d^2 f}{d\alpha^2} + \frac{1}{2} k \alpha^2 \left( \frac{\hbar^2}{mk} \right)^{1/2} f(\alpha) = E f(\alpha)$$

$$-\left( \frac{\hbar^2 k}{4m} \right)^{1/2} \frac{d^2 f}{d\alpha^2} + \alpha^2 \left( \frac{\hbar^2 k}{4m} \right)^{1/2} f(\alpha) = E f(\alpha)$$

$$-\frac{d^2 f}{d\alpha^2} + f(\alpha) = \left( \frac{4mE^2}{\hbar^2 k} \right)^{1/2} f(\alpha)$$

$$\frac{d^2 f}{d\alpha^2} + (\gamma - \alpha^2) f(\alpha) = 0$$

③ Pour  $\alpha^2 \gg \gamma$   $\frac{d^2 f}{d\alpha^2} - \alpha^2 f(\alpha) = 0$

On vérifie bien que  $f(\alpha) = e^{+\frac{\alpha^2}{2}}$  est solution de l'éq. diff.

$$\frac{d^2 f}{d\alpha^2} = \alpha^2 e^{\alpha^2/2} \Rightarrow \alpha^2 e^{\alpha^2/2} - \alpha^2 e^{\alpha^2/2} = 0$$

Idem pour la solution en  $e^{-\alpha^2/2}$

④  $\frac{df}{d\alpha} = \frac{d}{d\alpha} \left( g(\alpha) e^{-\alpha^2/2} \right) = e^{-\alpha^2/2} \frac{dg}{d\alpha} - g(\alpha) \alpha e^{-\alpha^2/2}$

$$\frac{d^2 f}{d\alpha^2} = -\alpha e^{-\alpha^2/2} \frac{dg}{d\alpha} + e^{-\alpha^2/2} \frac{d^2 g}{d\alpha^2} - \frac{dg}{d\alpha} \alpha e^{-\alpha^2/2}$$

$$-g e^{-\alpha^2/2} + \alpha^2 g e^{-\alpha^2/2}$$

$$\frac{d^2 f}{d\alpha^2} = e^{-\alpha^2/2} \left[ \frac{d^2 g}{d\alpha^2} - \frac{dg}{d\alpha} (2\alpha) + g(\alpha^2 - 1) \right]$$

$$\frac{d^2 g}{d\alpha^2} - 2\alpha \frac{dg}{d\alpha} + g(\alpha^2 - 1) + (\gamma - \alpha^2)g = 0 \quad \text{①}$$

$$\frac{d^2 q}{d\alpha^2} - 2\alpha \frac{dq}{d\alpha} + q(\gamma - 1) = 0$$

$$(5) \quad q(\alpha) = \sum_{p=0}^{+\infty} b_p \alpha^p$$

$$\frac{dq}{d\alpha} = \sum_{p=1}^{+\infty} b_p p \alpha^{p-1} = \sum_{p=0}^{+\infty} b_{p+1} (p+1) \alpha^p$$

$$\frac{d^2 q}{d\alpha^2} = \sum_{p=2}^{+\infty} b_p p(p-1) \alpha^{p-2} = \sum_{p=0}^{+\infty} b_{p+2} (p+2)(p+1) \alpha^p$$

$$\sum_{p=0}^{+\infty} b_{p+2} (p+2)(p+1) \alpha^p - 2\alpha \sum_{p=0}^{+\infty} b_{p+1} (p+1) \alpha^p + (\gamma - 1) \sum_{p=0}^{+\infty} b_p \alpha^p = 0$$

$$b_{p+2} (p+2)(p+1) + (\gamma - 1 - 2p) b_p = 0$$

$$b_{p+2} = \frac{2p + 1 - \gamma}{(p+1)(p+2)} b_p$$

(6) On choisit  $n$  tel que  $b_n \neq 0$  mais  $b_{n+2} = 0$

$$\hookrightarrow 2n + 1 - \gamma = 0 \Rightarrow \gamma = 2n + 1$$

$$\left( \frac{4m\bar{E}_n^2}{\hbar^2 k} \right)^{1/2} = 2n + 1$$

$$\frac{4m\bar{E}_n^2}{\hbar^2 k} = (2n + 1)^2$$

$$\bar{E}_n^2 = \frac{\hbar^2 k}{4m} (2n + 1)^2$$

$$\bar{E}_n = (2n + 1) \frac{\hbar}{2} \sqrt{\frac{k}{m}}$$

$$\bar{E}_n = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \quad \text{avec} \quad \omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

# Radioactivité et effet tunnel

①  $d\rho = |\psi(x,t)|^2 dx$      $[\psi(x,t)] = L^{-1/2}$

② la particule se trouve de manière certaine entre  $-\infty$  et  $\infty$  ( $P=1$ ) la fonction d'onde est normalisée.

③  $\rho$  est la densité de probabilité de présence.

$(d\rho = \rho dx)$      $\text{div } \vec{j} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$

④  $v_g \ll c \Rightarrow$  particule non relativiste.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} f(t) \frac{d^2 \phi}{dx^2} + V(x) \phi(x) f(t) = i\hbar \phi(x) \frac{df}{dt}$$

$\left( \because \phi(x)/f(t) \right)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \phi}{dx^2} \times \frac{1}{\phi(x)} + V(x) = i\hbar \frac{1}{f(t)} \frac{df}{dt}$$

$F(x) = G(t) \quad \psi(x,t) \text{ vraissi } F(x) = C$

$$i\hbar \frac{df}{dt} \times \frac{1}{f} = C \quad \int \frac{df}{f} = -\frac{iC}{\hbar} \int dt$$

$f(t) = f_0 e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \quad C = E \text{ et } \int \frac{df}{f} = 1$

$$\hookrightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \phi}{dx^2} + (V(x) - E) \phi(x) = 0$$

$\frac{d^2 \phi}{dx^2} + \frac{(E - V(x))}{\hbar^2} \phi(x) = 0$

$d\rho$  ne dépend pas du temps pour un état stationnaire.

⑤ Pour une particule libre  $\frac{d^2 \phi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \phi = 0$

$\phi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$  avec  $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$

$\psi(x) = A e^{i(kx - \omega t)} + B e^{-i(kx + \omega t)}$

onde progressive      onde régressive.      ①

⑥  $\vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda_{DB}} \vec{u}$  → direction de propagation  
 $\lambda_{DB}$  → longueur d'onde de Broglie

$$\vec{p} = \hbar \vec{k}$$

⑦ Reflection en  $x=0$

Relation de De Broglie ..

⑧  $\phi_I(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$   
 $\phi_{II}(x) = \alpha e^{qa} + \beta e^{-qa}$   
 $\phi_{III}(x) = C e^{ikx} + D e^{-ikx}$

⑨ Continuité de  $\phi(x)$  et  $\frac{d\phi}{dx}$  en  $x=0$  et  $x=a$ .

pas d'onde régressive dans III

$$\left. \begin{aligned} A + B &= \alpha + \beta \\ ik(A - B) &= q(\alpha - \beta) \end{aligned} \right\} \text{en } x=0$$

$$\left. \begin{aligned} C e^{ika} &= \alpha e^{qa} + \beta e^{-qa} \\ ik C e^{ika} &= q(\alpha e^{qa} - \beta e^{-qa}) \end{aligned} \right\} \text{en } x=a$$

⑩  $\vec{J}_{III} = \frac{i\hbar}{2m} (C e^{ikx} \times fik / C e^{-ikx} - C e^{-ikx} \times (ik) / C e^{ikx}) / \vec{u}_x$   
 $\vec{J}_{II} = \frac{i\hbar}{2m} |C|^2 (-ik - ik) / \vec{u}_x$

$$\vec{J}_{III} = + \frac{\hbar k}{m} |C|^2 \vec{u}_x \quad \text{On de transmission}$$

$$\vec{J}_{II} = \frac{\hbar k}{m} (|A|^2 - |B|^2) \vec{u}_x \quad \text{onde réfléchie}$$

⑪

a	qa	T
0,50nm	2,57	$2,32 \cdot 10^{-2}$
1nm	5,14	$1,37 \cdot 10^{-4}$
2nm	10,3	$4,52 \cdot 10^{-9}$

⑫ Normalisation de la fonction d'onde pour la Barrière épaisse,  $\frac{1}{q} \ll a \ll \frac{1}{q}$   
 définir complètement. Dans ce cas,  $T \approx \frac{(V_0 - E)E}{V_0^2 \text{sh}^2(qa)}$  ⑫

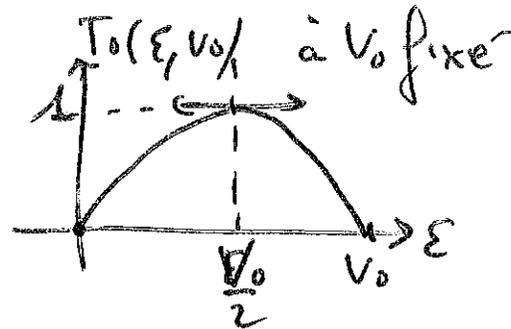
De plus  $\sin^2 qa = \left( \frac{e^{qa} - e^{-qa}}{2} \right)^2 \approx \frac{e^{2qa}}{4}$

$T = \frac{4E(V_0 - E)}{V_0^2 e^{2qa}} = \boxed{T_0(E, V_0) e^{-2qa} = T}$

$T_0(E, V_0) = \frac{4E(V_0 - E)}{V_0^2} = \frac{4E}{V_0} - \frac{4E^2}{V_0^2}$

$\frac{\partial T_0}{\partial E} = \frac{4}{V_0} \left( 1 - \frac{2E}{V_0} \right)$

$\frac{\partial T_0}{\partial E} = 0$  pour  $E = \frac{V_0}{2}$



Pour  $V_0 = 200 \text{ eV}$  et  $E = 100 \text{ eV}$   $T_0(E, V) \approx 1$

Donc  $\ln T \approx -2qa$

(12)  $K = q_{\text{noyau}} q_d = \boxed{2(Z-2)e^2 = K}$

$\epsilon_p = \frac{2(Z-2)e^2}{4\pi\epsilon_0 \kappa_0}$

$\epsilon_p = \frac{2 \times 80 \times (1,6 \cdot 10^{-19})^2 \times 9,98 \cdot 10^9}{3,5 \cdot 10^{-15}}$

$V_0 = \epsilon_p = 1,31 \cdot 10^{-11} \text{ V} \approx \underline{8,2 \text{ MeV}}$

$\epsilon = \frac{2(Z-2)e^2}{4\pi\epsilon_0 x_m} \Rightarrow \boxed{x_m = \frac{2(Z-2)e^2}{4\pi\epsilon_0 \epsilon}}$

$x_m = \frac{2 \times 80 \times (1,6 \cdot 10^{-19})^2 \times 9,98 \cdot 10^9}{1,6 \cdot 10^{-19} \times 4 \cdot 10^6}$

$x_m \approx \underline{7,29 \text{ fm}}$

largeur de la barrière

$x_m - x_0 = 7,29 - 3,5 = \underline{3,8 \text{ fm}}$

$qa = \frac{\sqrt{2m_d(V_0 - E)}}{\hbar} \times (x_m - x_0)$

$qa = \frac{0,83 \cdot 10^{-15}}{1,05 \cdot 10^{-34}} \times \sqrt{2 \times 6,64 \cdot 10^{-27} \times 78}$   
 $\times 10^6 \times 1,6 \cdot 10^{-19}$   $q = 264 \gg 1$

Barrière épaisse (OK)

(13)  $\boxed{T(x+dx) = T(x) e^{-2qdx}}$

avec  $q = q(x) = \frac{\sqrt{2m_d(V(x) - E)}}{\hbar}$  (3)

$$T(x+dx) = T(x) (1 - \lambda q dx)$$

$$\frac{T(x+dx) - T(x)}{T(x)} = -\lambda q dx = -\frac{dT}{T}$$

$$\int_{x_0}^{x_m} \frac{dT}{T} = -\int_{x_0}^{x_m} \frac{\lambda}{h} \sqrt{2m_d \left( \frac{K}{4\pi\epsilon_0 x} - \epsilon \right)} dx$$

$$\ln T = -\frac{\lambda}{h} \int_{x_0}^{x_m} \sqrt{2m_d \left( \frac{K}{4\pi\epsilon_0 x^2} - \epsilon \right)} dx$$

$$(14) x_m = \frac{K}{4\pi\epsilon_0 \epsilon}$$

$$\ln T = -\frac{\lambda}{h} \sqrt{2m_d \epsilon} \int_{x_0}^{x_m} \sqrt{\frac{K}{4\pi\epsilon_0 \epsilon x} - 1} dx$$

$$= -\frac{\lambda}{h} \sqrt{2m_d \epsilon} \int_{x_0}^{x_m} \sqrt{\frac{x_m}{x} - 1} dx$$

$$\ln T = -\frac{2}{h} \sqrt{2m_d \epsilon} x_m \left( \frac{\pi}{2} - 2\sqrt{\frac{x_0}{x_m}} \right)$$

$$= -\frac{2}{h} \sqrt{2m_d \epsilon} \frac{K}{4\pi\epsilon_0 \epsilon} \left( \frac{\pi}{2} - 2\sqrt{2x_0} \sqrt{\frac{4\pi\epsilon_0 \epsilon}{K}} \right)$$

$$\ln T = a - \frac{b}{\sqrt{\epsilon}} \quad \text{avec} \quad a = \frac{4}{h} \sqrt{\frac{K}{4\pi\epsilon_0}} 2m_d x_0$$

$$b = \frac{K}{h \times 4\epsilon_0} \sqrt{2m_d}$$

$$(15) v = \sqrt{\frac{2\epsilon}{m_d}}$$

$$t_m = \frac{2x_0}{v} = x_0 \sqrt{\frac{2m_d}{\epsilon}}$$

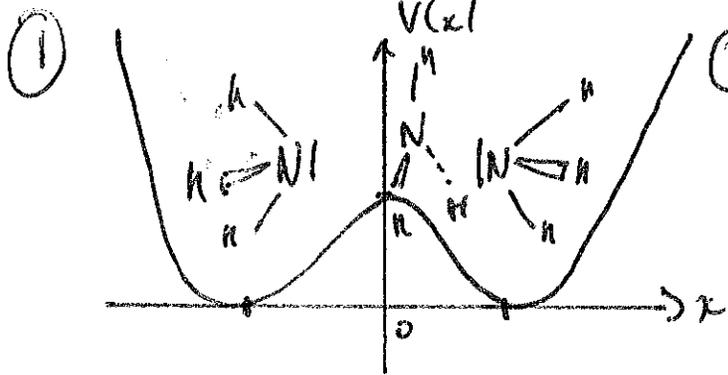
Soit  $n$  le nombre moyen de rebonds par seconde  $n = \frac{1}{t_m} = \frac{1}{x_0} \sqrt{\frac{\epsilon}{2m_d}}$

$$dp = n T dt = \frac{T}{t_m} dt$$

Décroissance radioactive  $\Rightarrow$  loi d'ordre 1  
 $\frac{dp}{p} = \frac{dt}{t_m} \rightarrow \ln p = -\frac{t}{t_m} + \ln p_0$

(4)

# Conformation de la molécule de $\text{NH}_3$



(2)  $k_B T = \frac{8,314}{6,02 \cdot 10^{23}} \times 293$   
 $k_B T = 4,7 \cdot 10^{-21} \text{ J}$   
 $= \underline{2,9 \cdot 10^{-2} \text{ eV}}$

$k_B T < V_0 \Rightarrow$  Pas d'inversion possible.

Possible si  $k_B T \geq V_0 \Rightarrow T \geq \frac{V_0}{k_B} = \frac{0,25 \cdot 4,6 \cdot 10^{-19}}{8,314 / 6,02 \cdot 10^{23}}$

$T \geq 2,9 \cdot 10^3 \text{ K}$

$\mu = \frac{m_A m_B}{m_A + m_B} = \frac{3 \times 14}{3 + 14} = 2,47 \rightarrow \text{d'où } m = 2,5 m_H$

(3)  $\frac{d^2 \phi}{dx^2} + \sqrt{\frac{2m(\bar{E} - V_0)}{\hbar^2}} \phi = 0$

(4)  $|\phi(x)|$  est nulle en dehors du domaine.  
 $\int_{-\infty}^{\infty} |\phi(x)|^2 dx = 1$

(5) En dehors du puits,  $V = +\infty$   
 la seule solution possible est  $\phi(x) = 0$

(6) CL: 0 =  $\phi_A(x = -x_0 - L) = \phi_A(x = -\infty)$   
 $= \phi_B(x = x_0)$   
 $= \phi_B(x = x_0 + L)$

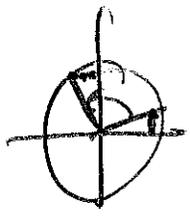
(7)  $\int_{-\infty}^{-x_0-L} \phi_A(x) dx + \int_{x_0}^{+\infty} \phi_B(x) dx = 1$

(8) Changement de variable  
 $x = x' + x_0$   
 $\phi(x) = A \cos kx + B \sin kx$   
 $\phi(x=0) = 0 = A$

$\phi(x) = B \sin kx$   
 $\int_{-L}^0 |\phi(x)|^2 dx = 1 \Rightarrow B = \sqrt{\frac{L}{2}}$   
 $\phi(x) = \sqrt{\frac{L}{2}} \sin\left(\sqrt{\frac{2m(\bar{E} - V_0)}{\hbar^2}} x\right)$  et  $k = \frac{\sqrt{2m(\bar{E} - V_0)}}{\hbar}$

$$\psi_A(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\sqrt{\frac{2mE_n^A}{\hbar^2}} (x-x_0)\right)$$

$$E_n^A = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$$



$$\psi_B(x) = \beta \cos\left(k(x-x_0-l) + \frac{\pi}{2}\right)$$

$$= -\beta \sin(k(x-x_0-l))$$

$$\beta \Rightarrow |\psi_B(x)| = \beta \sin(k(x-x_0-l))$$

9

$$\psi_B(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\sqrt{\frac{2mE_n^B}{\hbar^2}} (x+x_0)\right)$$

$$E_n^B = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$$

le puits de potentiel est symétrique donc  $|\psi|^2$  doit être pair. Donc

$$\psi_B(x) = \pm B \sin(k(x-x_0-l))$$

$$|\psi_A(x)| = A \sin(k(x+x_0+l)) \text{ avec } A = \pm B$$

10  $P=0 \Rightarrow$  Nœuds de  $L$  puits  $x_0$  ne permet pas de comprendre l'oscillation observée.

12  $k = \sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}}$

11  $\psi_B = \beta \cos(kx + \varphi)$

$$\psi_B(x=x_0+l) = 0 = \beta \cos(kx_0 + kl + \varphi)$$

Donc  $k(x_0+l) + \varphi = \frac{\pi}{2}$

$$\psi_B(x) = \beta \cos\left(kx + \frac{\pi}{2} - k(x_0+l)\right)$$

13  $\psi_C(x_0^-) = \psi_B(x_0^+)$  et  $\frac{d\psi_C}{dx}(x_0^-) = \frac{d\psi_B}{dx}(x_0^+)$

14  $\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \psi_1^{sym} \frac{e^{-iE_1^{sym}t/\hbar}}{\hbar} + \psi_2^{anti} \frac{e^{-iE_1^{anti}t/\hbar}}{\hbar} \right)$

15  $|\psi_1|^2 = |\psi_2|^2$

16  $|\psi(x,t)|^2 = \frac{1}{2} \left( \psi_1^* e^{+iE_1^{sym}t/\hbar} + \psi_2^* e^{+iE_1^{anti}t/\hbar} \right) \psi$

$$\psi_1 e^{-\frac{i\delta E t}{\hbar}} + \psi_2 e^{-\frac{i\delta E t}{\hbar}}$$

$$T = \frac{2\pi\hbar}{\delta E}$$

$$\Rightarrow f = 2,38 \cdot 10^{10} \text{ Hz}$$

micro-ondes.

$$(\lambda \approx 1,25 \text{ cm})$$

$$|\psi(x,t)|^2 = \frac{1}{2} (|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + \psi_1^* \psi_2 e^{-\frac{i\delta E t}{\hbar}}$$

$$+ \psi_1 \psi_2^* e^{+\frac{i\delta E t}{\hbar}})$$

(17) à  $t = \frac{T}{2} \rightarrow \psi(x, \frac{T}{2}) = \psi_0(x)$

(18)  $f' \sim 10^{-70} \text{ Hz} \Rightarrow$  Jamais d'observation.

$$|\psi(x,t)|^2 = A + z + z^*$$

avec  $A = \frac{|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2}{2}$  et  $z = \psi_1 \psi_2 e^{\frac{i\delta E t}{\hbar}}$

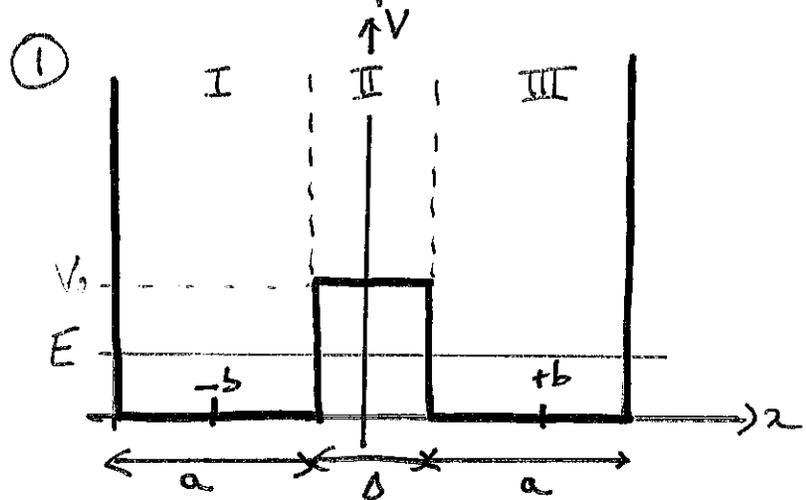
$$z z^* = a + ib + a - ib = 2 \operatorname{Re}(z)$$

$$|\psi(x,t)|^2 = A + 2 \operatorname{Re}(\psi_1 \psi_2^* e^{-\frac{i\delta E t}{\hbar}})$$

$$|\psi(x,t)|^2 = A + 2 \operatorname{Re}(\psi_1 \psi_2^* \left[ \cos\left(\frac{\delta E t}{\hbar}\right) + i \sin\left(\frac{\delta E t}{\hbar}\right) \right])$$

$$|\psi(x,t)|^2 = A + \frac{\operatorname{Re}(\psi_1 \psi_2^*)}{2} \cos\left(\frac{\delta E t}{\hbar} + \Phi\right)$$

**Ex 4** Oscillation par effet tunnel dans un puits double



Pour une particule d'énergie  $E$  l'analyse classique prévoit que la particule est strictement confinée soit dans la zone I soit dans la zone III. Classiquement la zone II est infranchissable.

D'un point de vue quantique, on a vu dans les exercices précédents que

la probabilité de présence de la particule dans la zone II est non nulle (onde évanescente) il existe donc une probabilité non nulle qu'une particule puisse occuper les 2 zones (I ET III)

On peut se représenter cette situation en imaginant qu'une particule initialement située dans la zone I traverse la zone II (classiquement interdite) et arrive dans la zone III. C'est l'effet tunnel.

le passage de la zone III à la zone I est possible également

On dit que la particule oscille entre la zone I et III par effet tunnel

② Puit symétrique donc

$|\phi(x)|^2$  est pair (principe de

Curie) donc  $\phi(-x) = +\phi(x)$

états pairs ou  $\phi(-x) = -\phi(x)$

états impairs.

$$\textcircled{3} \quad \phi_{\text{III}}\left(b + \frac{a}{2}\right) = \phi_{\text{I}}\left(-b - \frac{a}{2}\right) = 0$$

$$\phi_{\text{III}}\left(b - \frac{a}{2}\right) = \phi_{\text{II}}\left(b - \frac{a}{2}\right)$$

$$\phi_{\text{I}}\left(-b + \frac{a}{2}\right) = \phi_{\text{II}}\left(-b + \frac{a}{2}\right)$$

$$\frac{d\phi_{\text{III}}}{dx}\left(b - \frac{a}{2}\right) = \frac{d\phi_{\text{II}}}{dx}\left(b - \frac{a}{2}\right)$$

$$\frac{d\phi_{\text{I}}}{dx}\left(-b + \frac{a}{2}\right) = \frac{d\phi_{\text{II}}}{dx}\left(-b + \frac{a}{2}\right)$$

④ On cherche  $\phi_{\text{I}}(x)$ ,  $\phi_{\text{II}}(x)$  et  $\phi_{\text{III}}(x)$  solutions stationnaires

de l'éq. de Schrödinger.

$$\bullet \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\phi_{\text{I}}}{dx^2} = E\phi_{\text{I}}(x)$$

$$\frac{d^2\phi_{\text{I}}(x)}{dx^2} + \underbrace{\left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)}_{k^2} \phi_{\text{I}}(x) = 0$$

Solution de la forme:

$$\boxed{\phi_{\text{I}}(x) = A_1 e^{ikx} + A_1' e^{-ikx}}$$

$$\bullet \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\phi_{\text{III}}}{dx^2} = E\phi_{\text{III}}(x)$$

Même forme de solution:

$$\boxed{\phi_{\text{III}}(x) = A_3 e^{ikx} + A_3' e^{-ikx}}$$

$$\bullet \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\phi_{\text{II}}}{dx^2} + V_0 \phi_{\text{II}}(x) = E\phi_{\text{II}}(x)$$

$$\frac{d^2\phi_{\text{II}}}{dx^2} - \underbrace{\left(\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}\right)}_{K^2} \phi_{\text{II}}(x) = 0$$

$$\boxed{\phi_{\text{II}}(x) = A_2 e^{Kx} + A_2' e^{-Kx}}$$

⑤ Fonctions d'ondes pures:

$$\phi_{\text{I}}(x) = \phi_{\text{III}}(x) \Rightarrow \begin{cases} A_3' = A_1 \\ A_3 = A_1' \end{cases}$$

$$A_2 = A_2' \rightarrow \phi_{\text{II}}(x) = A_2 (e^{K_2 x} + e^{-K_2 x})$$

$$(1) A_1 e^{ik(-b-\frac{a}{2})} + A_1' e^{-ik(-b-\frac{a}{2})} = 0 \quad (\text{continuité de } \phi \text{ en } x = -b - \frac{a}{2} \rightarrow \phi_{\text{I}}(-b-\frac{a}{2}) = 0)$$

$$(2) A_1' e^{ik(b+\frac{a}{2})} + A_1 e^{-ik(b+\frac{a}{2})} = 0 \quad (\text{continuité de } \phi \text{ en } x = b + \frac{a}{2} \rightarrow \phi_{\text{III}}(b+\frac{a}{2}) = 0)$$

$$(3) A_1 e^{ik(-b+\frac{a}{2})} + A_1' e^{-ik(-b+\frac{a}{2})} = A_2 (e^{K(-b+\frac{a}{2})} + e^{-K(-b+\frac{a}{2})}) \quad \left. \begin{array}{l} \text{Continuité de } \phi \\ \text{en } -b + \frac{a}{2} \text{ et } b - \frac{a}{2}. \end{array} \right\}$$

$$(4) A_1' e^{ik(b-\frac{a}{2})} + A_1 e^{-ik(b-\frac{a}{2})} = A_2 (e^{K(b-\frac{a}{2})} + e^{-K(b-\frac{a}{2})})$$

$$(5) ikA_1 e^{ik(-b+\frac{a}{2})} - ikA_1' e^{-ik(-b+\frac{a}{2})} = KA_2 (e^{K(-b+\frac{a}{2})} - e^{-K(-b+\frac{a}{2})}) \quad \text{Continuité de } \frac{d\phi}{dx}$$

$$(6) ikA_1' e^{ik(b-\frac{a}{2})} - ikA_1 e^{-ik(b-\frac{a}{2})} = KA_2 (e^{K(b-\frac{a}{2})} - e^{-K(b-\frac{a}{2})}) \quad \text{en } -b + \frac{a}{2} \text{ et } b - \frac{a}{2}.$$

(1) et (2) correspondent aux mêmes équations.

De même (5) et (6) correspondent aux mêmes équations (simple effet de symétrie) et (3), (4) aussi.

On remarque aussi que  $b - \frac{a}{2} = \frac{l}{2}$

$$(1) \rightarrow A_1' = -A_1 e^{ik(-b-\frac{a}{2})} e^{ik(-b-\frac{a}{2})} = -A_1 e^{-ik(2b+a)} = A_1$$

$$(3) \rightarrow A_1 \begin{pmatrix} e^{-ikl/2} & -e^{-ik(2b+a)} \\ -e^{-ikl/2} & e^{-ik(2b+a)} \end{pmatrix} = 2A_2 \operatorname{ch}\left(\frac{Kl}{2}\right)$$

$$2A_2 \operatorname{ch}\left(\frac{Kl}{2}\right) = A_1 e^{-ikl/2} \left(1 - e^{-ik(2b+a)}\right)$$

$$\left| 2A_2 \operatorname{ch}\left(\frac{Kl}{2}\right) = A_1 e^{-ikl/2} (1 - e^{-2ika}) \right|$$

$$(5) \rightarrow ik A_1 \begin{pmatrix} e^{ik(-b+a)} & -ik(2b+a) \\ +e^{-ik(2b+a)} & -ik(-b+a) \end{pmatrix} = K A_2 \begin{pmatrix} e^{K(-b+a)} & -K(-b+a) \\ -e^{-K(-b+a)} & K(-b+a) \end{pmatrix}$$

$$ik A_1 e^{-ikl/2} \left(1 + e^{-ik(2b+a)}\right) = -2K A_2 \operatorname{sh}\left(\frac{Kl}{2}\right)$$

$$\left| 2K A_2 \operatorname{sh}\left(\frac{Kl}{2}\right) = -ik A_1 e^{-ikl/2} (1 + e^{-2ika}) \right|$$

$$\frac{(3)}{(5)} \ominus \frac{\operatorname{ch}\left(\frac{Kl}{2}\right)}{K \operatorname{sh}\left(\frac{Kl}{2}\right) K} = \frac{1}{ik} \frac{1 - e^{-2ika}}{1 + e^{-2ika}} = \frac{1}{ik} \frac{e^{-ika} (e^{ika} - e^{-ika})}{e^{-ika} (e^{ika} + e^{-ika})}$$

$$\left| \cot \operatorname{anh}\left(\frac{Kl}{2}\right) = -\frac{K}{k} \tan(ka) \right|$$

Rq: Si ça vous tente... vous pouvez faire pareil pour les états impairs... 😊

$$(6) \phi_{II}(z) = A_1 e^{+ikz} + A_1' e^{-ikz} = A_1 \begin{pmatrix} e^{ikz} & -e^{-ik(2b+a)} \\ -e^{-ikz} & e^{-ik(2b+a)} \end{pmatrix}$$

$$\phi_{\text{I}}(x) = A_1 (e^{ikx} - e^{-ik(b+a+x)})$$

$$\phi_{\text{I}}(x) = A_1 e^{-ik(b+\frac{a}{2})} \left( e^{ik(x+b+\frac{a}{2})} - e^{-ik(b+\frac{a}{2}+x)} \right)$$

erreurs sujet

$$\phi_{\text{I}}(x) = \underbrace{2iA_1 e^{-ik(b+\frac{a}{2})}}_A \sin(k(x+b+\frac{a}{2}))$$

$$\phi_{\text{II}}(x) = A_2 (e^{Kx} + e^{-Kx}) = 2A_2 \text{ch}(Kx)$$

Or  $\phi_{\text{II}}(-b+\frac{a}{2}) = \phi_{\text{I}}(-b+\frac{a}{2})$

Donc  $A \sin(k(-b+\frac{a}{2}+b+\frac{a}{2})) = 2A_2 \text{ch}(K(-b+\frac{a}{2}))$

$$A \sin(ka) = 2A_2 \text{ch}(\frac{Kl}{2}) \Rightarrow A_2 = \frac{A \sin ka}{2 \text{ch}(\frac{Kl}{2})}$$

$$\phi_{\text{II}}(x) = \frac{A \sin ka}{\text{ch}(\frac{Kl}{2})} \text{ch}(Kx)$$

erreurs sujet

$$\phi_{\text{III}}(x) = \phi_{\text{I}}(-x) = A \sin(k(b+\frac{a}{2}-x))$$

⑦ Il s'agit de la condition de normalisation

(car pour le moment  $A$  est défini à une constante multiplicative près).

$$\int_{-b-\frac{a}{2}}^{-b+\frac{a}{2}} |\phi_{\text{I}}(x)|^2 dx + \int_{-b+\frac{a}{2}}^{b-\frac{a}{2}} |\phi_{\text{II}}(x)|^2 dx$$

$$+ \int_{b-\frac{a}{2}}^{b+\frac{a}{2}} |\phi_{\text{III}}(x)|^2 dx = 1$$

⑧ L'équation de Schrödinger est linéaire, donc toute combinaison linéaire de solution est aussi solution de l'équation

$$|\Psi(x,t)|^2 = \Psi(x,t) \Psi^*(x,t)$$

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \phi_{\text{I}}(x) e^{-i\frac{E_1 t}{\hbar}} + \phi_{\text{III}}(x) e^{-i\frac{E_1 t}{\hbar}} \right)$$

$$\begin{aligned}
|\Psi(x,t)|^2 &= \frac{1}{2} \left( \phi_A(x) e^{-\frac{iE_A t}{\hbar}} + \phi_S(x) e^{-\frac{iE_S t}{\hbar}} \right) \lambda \left( \phi_A(x) e^{+\frac{iE_A t}{\hbar}} + \phi_S(x) e^{+\frac{iE_S t}{\hbar}} \right) \\
&= \frac{1}{2} \left[ |\phi_A^2(x)| + |\phi_S^2(x)| + \phi_A(x) \phi_S(x) e^{-\frac{iE_A t}{\hbar}} e^{+\frac{iE_S t}{\hbar}} + \phi_A(x) \phi_S(x) e^{-\frac{iE_S t}{\hbar}} e^{+\frac{iE_A t}{\hbar}} \right] \\
&= \frac{1}{2} \left[ |\phi_A^2(x)| + |\phi_S^2(x)| + \phi_A(x) \phi_S(x) \left( e^{+\frac{i(E_S - E_A)t}{\hbar}} + e^{-\frac{i(E_S - E_A)t}{\hbar}} \right) \right] \\
&= \frac{1}{2} \left[ |\phi_A^2(x)| + |\phi_S^2(x)| + 2 \phi_A(x) \phi_S(x) \cos\left(\frac{(E_S - E_A)t}{\hbar}\right) \right]
\end{aligned}$$

Si initialement une particule est dans un état combinaison linéaire des états stationnaires  $\phi_A$  et  $\phi_S$ , la densité de probabilité prescrite de la particule évolue au cours du temps.  $|\Psi(x,t)|^2$  oscille entre :

$$\Psi_+ = |\Psi(x,t)|^2 = \frac{1}{2} (\phi_A(x) + \phi_S(x))^2 \text{ pour } t \text{ tel que } \cos\left(\frac{(E_S - E_A)t}{\hbar}\right) = +1$$

$$\Psi_- = |\Psi(x,t)|^2 = \frac{1}{2} (\phi_A(x) - \phi_S(x))^2 \text{ pour } t \text{ tel que } \cos\left(\frac{(E_S - E_A)t}{\hbar}\right) = -1$$

$\Psi_+$  correspond à un état où la probabilité de trouver la particule dans la zone I est quasiment 1 et  $\Psi_-$  correspond au cas où la probabilité de présence de la particule est quasiment nulle dans la partie III.

l'oscillation entre ces 2 états

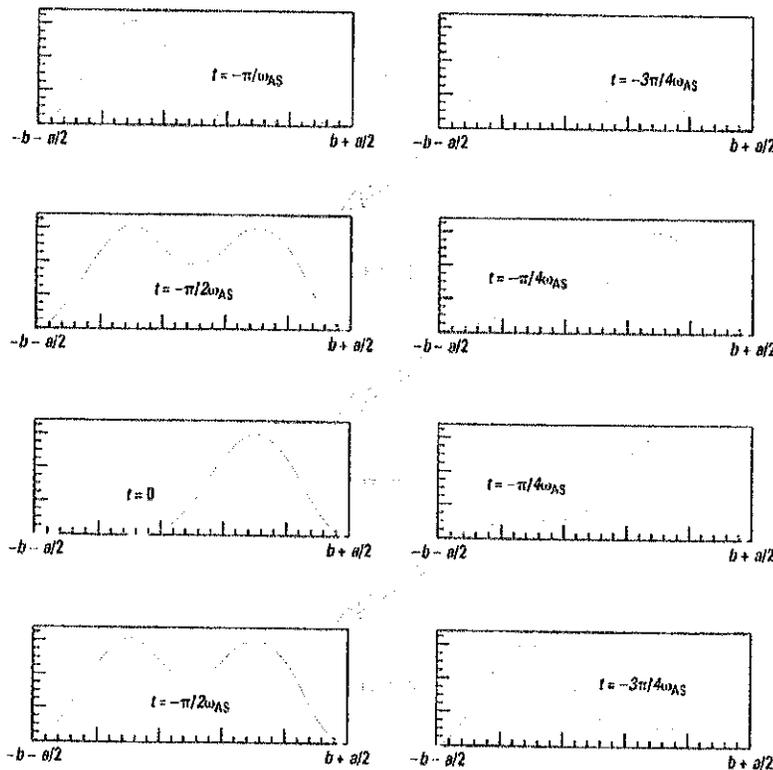
se fait à la fréquence  $f = \frac{|E_S - E_A|}{h}$

donc à la pulsation  $\omega = \frac{|E_S - E_A|}{\hbar}$

Complément d'analyse :

Le problème étudié ici correspond à la situation de la molécule d'ammoniac  $NH_3$ , qui a la forme d'une pyramide dont le sommet est occupé par l'atome d'azote. Celui-ci peut-être « au-dessus » ou « en-dessous » du plan formé par les trois atomes d'hydrogène. Il va passer d'un état à l'autre par effet tunnel. L'énergie potentielle de ce système pourrait se schématiser par un double puits séparé par une barrière comme celui que nous venons d'étudier. La fréquence d'oscillation de la molécule d'ammoniac est utilisée dans des systèmes d'horloges atomiques.

On a représenté sur la figure comment la probabilité de présence, initialement concentrée dans la partie « gauche » du puits de potentiel ( $x < a/2$ ), s'équilibre, puis bascule dans la partie « droite » du potentiel ( $x > a/2$ ) avant de revenir à sa valeur initiale. Le cycle se reproduit à la période suivante. On remarquera que la probabilité de présence totale,  $\int_0^a \rho(x, t) dx$  est bien égale à 1 quel que soit  $t$ . Nous laissons au lecteur le soin de le vérifier.



Évolution d'un système dans un état résultant de la superposition des deux états stationnaires symétrique  $S$  et antisymétrique  $A$ .