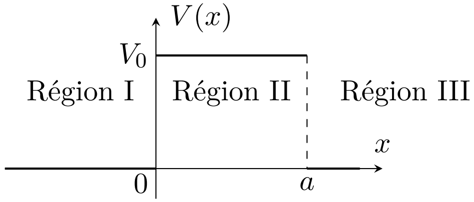
II. Barrière de potentiel

1) Définition

Étudions maintenant une *barrière d'énergie potentielle* modélisée comme ci-dessous :



$$V(x) = \begin{cases} V_0 > 0 & \text{si } x \in [0, a] \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

Nous supposons que le quanton est préparé dans un état tel qu'il parte de la **Région I** et se dirige vers la barrière d'énergie potentielle.

Comme le quanton possède une probabilité non nulle de pénétrer dans la zone $x > 0$, il existe peut-être une chance de traverser cette barrière si celle-ci est suffisamment petite, même si $E < V_0$. Ce phénomène est appelé *effet Tunnel*. Voyons cela ...

2) État stationnaire d'énergie $0 < E < V_0$

On cherche un état stationnaire $\Psi_{\text{stat}}(x,t)$ associé à une énergie E vérifiant $0 < E < V_0$:

$$\Psi_{\text{stat}}(x,t) = \varphi(x)\, e^{-i\frac{Et}{\hbar}}$$

et nous imposons à la partie spatiale $\varphi(x)$ d'être solution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\,\varphi''(x) + V(x)\,\varphi(x) = E\,\varphi(x)$$

ce qui donne les équations différentielles :

Région I : $-\dfrac{\hbar^2}{2m}\,\varphi''(x) = E\,\varphi(x)$ donc :

$$\boxed{\varphi''(x) + k^2\varphi(x) = 0 \quad \text{avec} \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}}$$

Région II : $-\dfrac{\hbar^2}{2m}\,\varphi''(x) = (E - V_0)\,\varphi(x)$ donc :

$$\varphi''(x) - \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}\,\varphi(x) = 0$$

c'est à dire :

$$\boxed{\varphi''(x) - q^2\,\varphi(x) = 0 \quad \text{en posant} \quad q = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}}$$

Région III : $-\dfrac{\hbar^2}{2m}\,\varphi''(x) = E\,\varphi(x)$ donc à nouveau :

$$\boxed{\varphi''(x) + k^2\varphi(x) = 0 \quad \text{avec} \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}}$$

Les solutions de ces équations différentielles sont donc, selon les différentes régions :

Région I : $\varphi(x) = A_1\, e^{ikx} + B_1\, e^{-ikx}$
Région II : $\varphi(x) = A_2\, \text{ch}(qx) + B_2\, \text{sh}(qx)$
Région III : $\varphi(x) = A_3\, e^{ikx} + B_3\, e^{-ikx}$

Compte tenu de la situation, on impose $\boxed{B_3 = 0}$ car s'il est dans la **Région III**, le quanton ne peut pas se déplacer vers la barrière d'énergie potentielle.

Comme on doit assurer la continuité de φ et de φ' en $x=0$ et en $x=a$, cela conduit à 4 équations reliant les 5 grandeurs : A_1, B_1, A_2, B_2 et A_3, à savoir :

$$\begin{cases} A_1 + B_1 & = & A_2 & (1) \\ A_2\,\mathrm{ch}(qa) + B_2\,\mathrm{sh}(qa) & = & A_3\,e^{ika} & (2) \\ ik\,(A_1 - B_1) & = & q\,B_2 & (3) \\ q\,A_2\,\mathrm{sh}(qa) + q\,B_2\,\mathrm{ch}(qa) & = & ik\,A_3\,e^{ika} & (4) \end{cases}$$

On peut donc exprimer B_1, A_2, B_2 et A_3 en fonction de A_1. Nous définissons alors les *coefficients de réflexion et de transmission en amplitude* pour *toute la barrière* par :

$$\boxed{r_b = \frac{B_1}{A_1} \quad \text{et} \quad t_b = \frac{A_3}{A_1}}$$

3) Coefficients de réflexion et de transmission en probabilité

Reprenons l'expression des états stationnaires dans les **Régions I** et **III** et calculons les densités de courant de probabilité associées.

Région I :

$$\Psi_{\text{stat}}(x,t) = e^{-i\frac{Et}{\hbar}}\,A_1\left(e^{ikx} + r_b\,e^{-ikx}\right) = \Psi_i(x,t) + \Psi_r(x,t)$$

avec :

Onde	**Densité de courant de probabilité**
$\Psi_i(x,t) = A_1\,e^{-i\frac{Et}{\hbar}}\,e^{ikx}$	$\vec{j}_i = A_1\,\dfrac{\hbar k}{m}\,\vec{u}_x$
$\Psi_r(x,t) = r_b\,A_1\,e^{-i\frac{Et}{\hbar}}\,e^{-ikx}$	$\vec{j}_r = r_b\,A_1\,\dfrac{-\hbar k}{m}\,\vec{u}_x$

Région III : $\Psi_{\text{stat}}(x,t) = e^{-i\frac{Et}{\hbar}}\,t_b\,A_1\,e^{ikx} = \Psi_t(x,t)$ avec :

Onde	**Densité de courant de probabilité**
$\Psi_t(x,t) = t_b\,A_1\,e^{-i\frac{Et}{\hbar}}\,e^{ikx}$	$\vec{j}_t = t_b\,A_1\,\dfrac{\hbar k}{m}\,\vec{u}_x$

On introduit alors les coefficients de reflexion et de transmission en probabilité en posant :

$$R_b = \frac{\|\,\vec{j}_r\,\|}{\|\,\vec{j}_i\,\|} = |\,r_b\,|^2 \quad \text{et} \quad T_b = \frac{\|\,\vec{j}_t\,\|}{\|\,\vec{j}_i\,\|} = |\,t_b\,|^2$$

Tous calculs faits, on obtient les expressions :

$$\boxed{R_b = \frac{\dfrac{V_0^2}{4E(V_0-E)}\,\mathrm{sh}^2(qa)}{1 + \dfrac{V_0^2}{4E(V_0-E)}\mathrm{sh}^2(qa)} \quad \text{et} \quad T_b = \frac{1}{1 + \dfrac{V_0^2}{4E(V_0-E)}\,\mathrm{sh}^2(qa)}}$$

Remarques :

- $R_b + T_b = 1$: il y a conservation de la probabilité.
- $T_b \neq 0$: il existe une probabilité non nulle pour que le quanton franchisse la barrière de potentiel !

4) Approximation de la barrière épaisse

Prenons maintenant le cas particulier où $qa \gg 1$: il s'agit de l'*approximation de la barrière épaisse.*

Dans ce cas : $\mathrm{sh}(qa) \gg 1$ et donc :

$$\boxed{T_b \approx \frac{4E(V_0-E)}{V_0^2\,\mathrm{sh}^2(qa)} = \frac{16E(V_0-E)}{V_0^2(e^{qa} - e^{-qa})^2} \approx \frac{16E(V_0-E)}{V_0^2}\,e^{-2qa}}$$

Application : dans le cas particulier où $E = 5{,}0$ eV, $V_0 = 10$ eV et $a = 0{,}50$ nm :

1. Le quanton est un électron de masse $m = 9{,}1 \times 10^{-31}$ kg. Calculer T.
2. Si on envoie un faisceau d'électrons correspondant à un courant incident $I = 10$ mA à travers une surface S = 1 cm^2, estimer la proportion d'électrons qui franchissent la barrière d'énergie potentielle par unité de temps ainsi que l'intensité I_t associée.
3. Même question pour des protons de masse $m = 1{,}67 \times 10^{-27}$ kg.