CHAPITRE 27 : BARRIERES DE POTENTIELS

I. Barrière d'extension illimitée

1. Situation étudiée et modélisation

(cf. FIGURE 1)

N.B. : en mécanique classique

Depuis la gauche, envoyons une particule à une vitesse $\vec{v} = v_1 \vec{u_x}$
La vitesse reste d'abord constante avec une énergie $E = \frac{1}{2} m v_1^2$.
Ensuite la particule est freinée,

* si $E < U_0$, elle s'arrête là où $E = U(x)$ et fait demi-tour.
  Elle repart finalement avec une vitesse $-v_1 \vec{u_x}$.
* si $E > U_0$, elle traverse et alors, $E = U_0 + E_c$.

N.B. : $E = E_{initiale}$
$E_c = E_{finale}$.

$$\frac{1}{2} m v_1^2 = U_0 + \frac{1}{2} m v_2^2 .$$

$$\text{donc} \quad v_2 = \sqrt{\frac{2}{m}\left(\frac{1}{2} m v_1^2 - U_0\right)}$$

$$\text{donc} \quad p_2 = \sqrt{2m(E - U_0)}$$

2. Recherche d'états stationnaires

Une fonction d'onde dans un état stationnaire est de la forme :

$$\Psi(x,t) = \phi(x) e^{-iEt/\hbar} .$$

N.B. : E est l'énergie de la particule qu'on lance sur la barrière.

L'équation de Schroedinger donne :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \phi + U(x) \phi = E \phi .$$

i.e. $\dfrac{d^2\phi}{dx^2} + \dfrac{2m}{\hbar^2}(E - U(x))\phi = 0$.

* $x \geq 0$: $\dfrac{d^2\phi}{dx^2} + \dfrac{2mE}{\hbar^2}\phi = 0$

* $x \leq 0$: $\dfrac{d^2\phi}{dx^2} + \dfrac{2m}{\hbar^2}(E - U_0)\phi = 0$

Soit $k_1 = \dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$.

N.B. : p_1 est la quantité de mouvement de la particule incidente.

donc $p_1 = \hbar k_1 = \sqrt{2mE}$.

Soit $k_2 = \dfrac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{\hbar}$. Soit $q = \dfrac{\sqrt{2m(U_0-E)}}{\hbar}$.

N.B. : p_2 est la quantité de mouvement de la particule transmise.

donc $p_2 = \hbar k_2 = \sqrt{2m(E-U_0)}$.

Alors,

* $x \leq 0$: $\phi = \overbrace{Ae^{ik_1x}}^{\text{incidente}} + \overbrace{Be^{-ik_1x}}^{\text{réfléchie}}$

* $x \geq 0$ (si $E > U_0$) : $\phi = \underbrace{Ce^{ik_2x}}_{\text{transmise}} + \cancel{De^{-ik_2x}}$ = 0

(on exclut un flux de particule venant de l'infini)

N.B. : $A, B, C, D \in \mathbb{C}$

* $x \geq 0$ (si $E < U_0$) : $\phi = \underbrace{Fe^{-qx}}_{\text{évanescente}} + \cancel{Ge^{qx}}$ = 0

3. Cas où le passage est permis classiquement ($E > U_0$)

(cf. FIGURE 2)

N.B. : Ce sont les conditions de bords en $x = 0$.

Par continuité de ϕ : $A + B = C$.

Par continuité de $\dfrac{d\phi}{dt}$: $ik_1A - ik_1B = ik_2C$.

Ici, la particule n'est pas confinée et l'énergie n'est pas quantifiée, on se la donne.

On se donne A et on cherche B et C.

On reprend :

$$A - B = \frac{k_2}{k_1} C$$

donc $2A = (1 + \frac{k_2}{k_1}) C$.

Ainsi, $C = \frac{2Ak_1}{k_1 + k_2}$ et $B = \frac{A(k_1 - k_2)}{k_1 + k_2}$.

On définit les coefficient de réflexion et le coefficient de transmission pour la fonction d'onde :

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

Les coefficients concernant le flux de probabilité sont davantage pertinents.

Alors,

$$\vec{j_i} = |\phi_i|^2 \vec{v_i} = |A|^2 \frac{\hbar k_1}{m} \vec{u_x}$$

$$\vec{j_r} = |\phi_r|^2 \vec{v_r} = -|B|^2 \frac{\hbar k_1}{m} \vec{u_x}$$

$$\vec{j_t} = |C|^2 \frac{\hbar k_2}{m} \vec{u_x}.$$

On définit les coefficient de réflexion et coefficient de transmission pour le flux de probabilité

$$R = \frac{|\vec{j_r}|}{|\vec{j_i}|} = |r|^2 = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2 = \left(\frac{1 - \sqrt{1 - V_0/E}}{1 + \sqrt{1 - V_0/E}}\right)^2$$

$$T = \frac{|\vec{j_t}|}{|\vec{j_i}|} = |\tau|^2 \frac{k_2}{k_1} = \frac{4k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2}$$

R et T sont des probabilités de réflexion et transmission de la particule.

On vérifie que : $R + T = 1$.

$R \neq 0$ montre que la particule peut être réfléchie contrairement dans le cadre de la mécanique classique.

Si $E \gg U_0$, $R \to 0$, ce phénomène est donc rare.

Si $E \to U_0^+$, $R \to 1$, ce phénomène est très probable.

4. Cas où le passage est interdit classiquement ($E < U_0$)

(cf. FIGURE 3 et FIGURE 4)

N.B. : conditions de bords en $x = 0$.

Par continuité de ϕ : $A + B = F$.

Par continuité de $\frac{d\phi}{dt}$: $ik_1 A - ik_1 B = -Fq$.

Alors, $r = \frac{B}{A} = \frac{k_1 - iq}{k_1 + iq}$

et $\tau = \frac{C}{A} = \frac{2k_1}{k_1 + iq}$

Alors, $R = |r|^2 = \left| \frac{k_1 - iq}{k_1 + iq} \right|^2 = 1$.

donc $T = 0$

Avec une formule du chapitre précédent, $\vec{j_t} = \vec{0}$.

On retrouve, comme en mécanique classique, que la particule est réfléchie de façon certaine.

Néanmoins, la particule pénètre la zone interdite sur une zone $\delta = 1/q$.

5. Analyse en termes de paquets d'onde

(cf. vidéos)

Pour un paquet d'onde de largeur Δx, on a : $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$.

p est mal connue

La vitesse de la particule peut sembler insuffisante pour traverser la barrière et être en réalité assez grande.

6. Analogie avec les ondes électromagnétiques

(cf. TABLE 1)

II. Effet tunnel

1. Situation étudiée

(cf. FIGURE 5)

En mécanique classique, la particule qui traverse retrouve sa vitesse initiale. Celle qui ne traverse pas, en raison d'une énergie trop basse, fait demi-tour. (elle est réfléchie).

Dans la suite, on étudie uniquement le cas $E < U_0$ dans le cadre de la mécanique quantique.

On devine la suite : la particule pénètre la barrière en une onde évanescente et la particule peut ressortir de l'autre côté.
Ce que la mécanique classique interdit, la mécanique quantique le permet : on parle d'**effet tunnel**.

2. Recherche d'états stationnaires

* $x < 0$, $V = 0$

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\Delta\phi + 0 \times \phi = E\phi$$

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\phi = 0$$

$$\phi = \underbrace{Ae^{ik_1x}}_{\text{incidente}} + \underbrace{Be^{-ik_1x}}_{\text{réfléchie}} \quad \text{où } k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}.$$

* $0 < x < d$, $V = U_0$

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\Delta\phi + U_0\phi = E\phi$$

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} + \frac{2m(E-U_0)}{\hbar^2}\phi = 0.$$

$$\phi = Ce^{-qx} + De^{qx} \quad \text{où } -q^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E-U_0).$$

* $x > d$, $V = 0$:

$$\phi = Fe^{-ik_1x} + \underbrace{Ge^{ik_1x}}_{\text{transmise}}$$

situation non étudiée

$p_1 = \hbar k_1$.

Conditions de passage :

* ϕ continue en $x = 0$: $A + B = C + D$
* ϕ' continue en $x = 0$: $ik_1 A - ik_1 B = -qC + Dq$
* ϕ continue en $x = d$: $Ce^{-qd} + De^{qd} = Ge^{ik_1 d}$
* ϕ' continue en $x = d$: $-qCe^{-qd} + qDe^{qd} = ik_1 Ge^{ik_1 d}$

E ou k_1 étant donnés, on cherche G & A.

3. Interlude calculatoire

(cf. annexe)

4. Coefficient de transmission

(cf. FIGURE 6 et FIGURE 7)

Par définition, $\tau = \dfrac{G}{A}$.

donc $$\tau = \frac{4k_1 q e^{-ik_1 d}}{(2k_1 q + i(q^2 - k_1^2))e^{qd} + (2k_1 q + i(k_1^2 - q^2))e^{-qd}}$$

Exprimons les courants de probabilité.

$$\vec{j_i} = |A|^2 \frac{\hbar k_1}{m} \vec{u_x} \quad \text{et} \quad \vec{j_t} = |G|^2 \frac{\hbar k_1}{m} \vec{u_x}$$

On définit le coefficient de transmission du flux de probabilité :

$$T = \frac{|\vec{j_t}|}{|\vec{j_i}|} = \frac{|G|^2}{|A|^2} = |\tau|^2$$

$$= \frac{16 k_1^2 q^2}{16 q^2 k_1^2 ch^2(qd) + (q^2 - k_1^2) \times 4 sh^2(qd)} = \frac{4 E/V_0 (1 - E/V_0)}{4 E/V_0 (1 - E/V_0) + sh^2\Big(\underbrace{\frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}}_{q = 1/\delta} d\Big)}$$

N.B. : on a utilisé $ch^2 - sh^2 = 1$.

A.N. $U_0 = 10$ eV

$E = 5$ eV.

$\delta = 0{,}9 \cdot 10^{-10}$ m.

δ est la portée de l'onde évanescente dans la zone classiquement interdite.

* $d = 1 \cdot 10^{-10}$ m

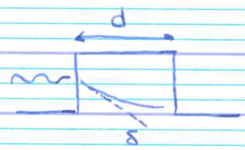
$T = 0{,}33$.

* $d = 5 \cdot 10^{-10}$ m

$T = 4 \cdot 10^{-5}$

* si $d \ll \delta$, $sh^2\left(\frac{d}{\delta}\right) \to 0$ et $T \to 1$.

N.B. :



La décroissance est rapide à cause de $sh^2\left(\frac{d}{\delta}\right)$.

$sh^2\left(\frac{d}{\delta}\right) \approx \left(\frac{e^{d/\delta}}{2}\right)^2$ pour $d \gg \delta$.

T est sensible à la profondeur de l'onde évanescente qui est dans la barrière.

La figure 6 montre aussi l'influence de E : plus E augmente, plus la transmission est possible.

5. Approximation de la barrière épaisse

$\frac{E}{V_0} \in \,]0;1[$.

Pour $d \gtrsim$ quelques fois δ :

$\frac{E}{V_0}(1 - E/V_0) \in \,]0;1/2[$.

$$T \approx \frac{4E/V_0\,(1 - E/V_0)}{e^{2d/\delta}/4}$$

En OdG : $\underline{T \approx e^{-2d/\delta} = e^{-2qd}}$ où $q = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$.

6. Barrière de forme quelconque

(cf. FIGURE 8)

Sur chaque intervalle, on applique le résultat de II.5.

$$q_i = \frac{\sqrt{2m(U(x_i)-E)}}{\hbar}.$$

$$T_i = e^{-2q_i \Delta x}.$$

Dans l'hypothèse où les tranches sont indépendantes, la probabilité de franchissement est :

$$T = \prod_{i=1}^{N} T_i = \exp\left(-\sum_{i=1}^{N} 2q_i \Delta x\right)$$

$$= \exp\left(-2\int_a^b q(x)\,dx\right) \quad \text{si } \Delta x \text{ petit devant } d.$$

N.B. : a et b sont les extrémités du tunnel.

$$T \simeq \exp\left(-2\int_{\text{tunnel}} \frac{\sqrt{2m(U(x)-E)}}{\hbar}\,dx\right).$$

Approximation sujette à cautions.
En particulier, il faut $\Delta x \gg \frac{1}{q_i}$, ce qui est faux aux extrémités.

Deux applications classiques :

* microscope à effet tunnel.
  → Résolution de l'ordre de 10^{-10} m.
  → Les électrons passent d'une surface à une pointe par effet tunnel.

* radioactivité α
  → des particules piégées dans un noyau atomique peuvent en sortir par effet tunnel.

* Inversion de l'ammoniac par effet tunnel.