

I- Barrière d'extension illimitée1. Situation étudiée et modélisation.

cf. Figure 1, partie supérieure.

mécanique classique :  $\vec{F} = - \frac{dU}{dx} \vec{u}_x$

Le mouvement serait rectiligne uniforme dans les zones où  $U$  est constant.

On imagine que la particule arrive de la gauche avec une vitesse  $v_1$  et donc une énergie  $E = \frac{1}{2} m v_1^2$

• si  $E < U_0$  :

la particule s'approche, fait demi-tour et repart en reprenant la même vitesse (valeur abs).

à cause de la force

• si  $E > U_0$  :

la particule franchit la barrière mais est ralentie

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

$$v_2 = \sqrt{\frac{2}{m} (E - U_0)} \quad p_2 = \sqrt{2m (E - U_0)}$$

cf. Figure 1, partie inférieure on simplifie en prenant un potentiel constant par morceaux.

2. Recherche d'états stationnaires

\*  $x \leq 0$  :  $U = 0$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \phi = E \phi \quad \Rightarrow \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \phi'' = E \phi$$

$$\phi'' + \underbrace{\frac{2mE}{\hbar^2}}_{k_1^2} \phi = 0$$

$k_1^2$

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = \frac{p_1}{\hbar} = \frac{mv_1}{\hbar}$$



$$\phi = \underbrace{A e^{ik_1 x}}_{\text{onde incidente}} + \underbrace{B e^{-ik_1 x}}_{\text{onde réfléchie}}$$

onde incidente  
associée à une  
particule de  
 $\vec{p}_1 = \hbar k_1 \vec{u}_x$

onde réfléchie  
 $-\vec{p}_1' = -\hbar k_1 \vec{u}_x$

\*  $x \geq 0$

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

$$\phi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0) \phi(x) = 0$$

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

Posons  $k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0)$

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

$$\phi = \underbrace{C e^{ik_2 x}}_{\text{particule transmise de}} + \underbrace{D e^{-ik_2 x}}_{\text{ce terme décrirait des particules venant de } +\infty, \text{ il n'y en a pas dans notre contexte}}$$

particule  
transmise de  
 $\vec{p}_2 = \hbar k_2 \vec{u}_x$

ce terme décrirait des particules venant  
de  $+\infty$ , il n'y en a pas dans notre  
contexte

conditions de continuité :

$$\bullet \phi(0^-) = \phi(0^+)$$

$$A + B = C$$

$$\bullet \phi'(0^-) = \phi'(0^+)$$

$$ik_1 A - ik_1 B = ik_2 C$$

Ici on se donne  $A$  et on cherche  $B, C$

On trouve :

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

$$\text{et } C = A \frac{2k_1}{k_1 + k_2}$$

coef de réflexion :

$$r = \frac{B}{A} = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}$$

coef de transmission :

$$t = \frac{C}{A} = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}$$

cf. Figure 2

$x \neq 0$ ,  $B \neq 0$  la particule incidente peut être réfléchie alors que la



mécanique classique prédit qu'elle doit traverser.

2

Quand elle traverse, sa quantité de mouvement est celle prédite par la mécanique classique.

Courant de probabilité:  $\vec{j}_i = |A|^2 \frac{\hbar k_1}{m} \vec{u}_x$

$$\vec{j}_r = -|B|^2 \frac{\hbar k_1}{m} \vec{u}_x$$

$$\vec{j}_t = |C|^2 \frac{\hbar k_2}{m} \vec{u}_x$$

coef en flux de probabilité:

coef de réflexion:

$$\begin{aligned} R &= \frac{|\vec{j}_r|}{|\vec{j}_i|} = \frac{|B|^2}{|A|^2} = r^2 \\ &= \left( \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2 \\ &= \left( \frac{\sqrt{2mE'} - \sqrt{2m(E - U_0)'}}{\sqrt{2mE'} + \sqrt{2m(E - U_0)'}} \right)^2 \\ &= \left( \frac{\sqrt{E'} - \sqrt{E - U_0}'}{\sqrt{E'} + \sqrt{E - U_0}'} \right)^2 \end{aligned}$$

coef de transmission:

$$\begin{aligned} T &= \frac{|\vec{j}_t|}{|\vec{j}_i|} = \frac{k_2 |C|^2}{k_1 |A|^2} = \frac{k_2}{k_1} t^2 \\ &= \frac{4 k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2} \end{aligned}$$

$R + T = 1$  traduit la conservation du flux de probabilité.

cf. Figure 4 (partie droite  $E > U_0$ )

Plus  $E$  est grand, plus la réflexion quantique est rare.

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

Posons  $-q^2 = \frac{2m(U_0 - E)'}{\hbar^2}$

$$q = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)'}}{\hbar}$$

$$\phi'' - q^2 \phi = 0$$

$$\phi = C e^{-qz} + D e^{+qz}$$

$\rightarrow \infty$  qd  $z \rightarrow \infty$  on le rejette



conditions de continuité :

$$\bullet \phi(0^-) = \phi(0^+)$$

$$A + B = D$$

$$\bullet \phi'(0^-) = \phi'(0^+)$$

$$ik_1 A - ik_1 B = -qD$$

même calcul que 3) en remplaçant  $k_2$  par  $-iq$  (et  $C$  par  $D$ .)

on obtient :  $B = A \frac{k_1 - iq}{k_1 + iq}$

$$D = A \frac{2k_1}{k_1 + iq}$$

coef en flux de probabilité :

coef de réflexion :

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left| \frac{B}{A} \right|^2 = |r|^2 = 1$$

coef de transmission :

$$R + T = 1 \Rightarrow T = 0$$

Dans tous les cas, la particule est réfléchie comme le prédit la mécanique classique.

en utilisant  
la formule  
(HP)

$$\vec{j}_t = -\frac{i\hbar^2}{2m} (\phi^* \vec{\nabla} \phi - \phi \vec{\nabla} \phi^*) = \vec{0}$$

cf. Figure 3.

L'onde évanescente ne transporte pas de flux de probabilité.

Pour  $x \geq 0$ ,  $\phi$  est évanescente mais non nulle. On peut détecter la particule dans la zone classiquement interdite.

La portée de l'onde évanescente est  $\delta = \frac{1}{q} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(U_0 - E)}}$

Plus  $E_0$  s'approche de  $U_0$  par valeur inférieure, plus  $\delta$  augmente la zone explorée est plus profonde.

cf. Figure 4 (partie gauche  $U_0 > E$ )

## 5. Analyse en termes de paquets d'ondes.

Une onde de de Broglie n'est pas réaliste, un paquet d'onde l'est davantage.

Localisée dans l'espace, la particule a potentiellement une variété de  $q$  de moment ( $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$ ) ce qui explique que les prédictions de la mécanique classique ne se réalisent pas.



L'équation de Schrödinger dépendant du temps

3.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + U \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

expliquerait mieux le phénomène.

cf. résolution  
eq de la chaleur.

Elle peut se résoudre par la méthode des différences finies.

## 6. Analogie avec les ondes électromagnétiques.

cf. Table 1.

## II- Effet tunnel

### 1. Situation étudiée.

cf. Figure 5

En mécanique classique :

venant de  
la gauche

- si  $E < U_0$  : la particule est freinée par la barrière, fait demi-tour et reprend sa vitesse initiale
- si  $E > U_0$  : elle est localement ralentie, traverse la barrière et reprend sa vitesse initiale

On étudie dans la suite le cas  $E < U_0$ .

Par onde évanescente, la particule explore en profondeur la barrière.

Si ces ondes atteignent l'extrémité droite de la barrière le franchissement est possible.

C'est l'effet tunnel.



mini-golf.

### 2. Recherche d'états stationnaires

\*  $x < 0$  :

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

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



$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$\phi = \underbrace{Ae^{ik_1x}}_{\text{incidente}} + \underbrace{Be^{-ik_1x}}_{\text{réfléchi}}$$

\*  $0 \leq x \leq d$

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

$$\phi'' + \underbrace{\frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0)}_{-q^2} \phi = 0$$

$$q = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}$$

$$\phi = Ce^{-qx} + De^{+qx}$$

\*  $x \geq d$

$$\phi = Ge^{ik_1x} + \cancel{Fe^{-ik_1x}}$$

← "parce qu'il n'y a personne avec un flux d'électrons à droite"

L'onde incidente étant donnée, en particulier  $k_1$  et  $E$ , on s'intéresse surtout à l'onde transmise.

Conditions de passage

$$\phi(0^-) = \phi(0^+)$$

$$A + B = C + D$$

$$\phi(d^-) = \phi(d^+)$$

$$Ce^{-qd} + De^{qd} = Ge^{ik_1d}$$

$$\phi'(0^-) = \phi'(0^+)$$

$$ik_1A - ik_1B = -qC + qD$$

$$\phi'(d^-) = \phi'(d^+)$$

$$-qCe^{-qd} + qDe^{qd} = Gik_1e^{ik_1d}$$

cf. Interlude calculatoire pour l'effet tunnel.

$$\frac{G}{A} = \frac{4e^{-ik_1d}}{\left(2 + i\left(\frac{q}{k_1} - \frac{k_1}{q}\right)e^{qd} + \left(2 + i\left(\frac{k_1}{q} - \frac{q}{k_1}\right)\right)e^{-qd}\right)}$$



#### 4. Coefficient de transmission

4.

$$T = \frac{G}{A} = \frac{4k_1 q e^{-ik_1 d}}{(2qk_1 + i(q^2 - k_1^2))e^{qd} + (2qk_1 + i(k_1^2 - q^2))e^{-qd}}$$

$$= \frac{2k_1 q e^{-ik_1 d}}{2k_1 q \cosh(qd) + i(q^2 - k_1^2) \sinh(qd)}$$

flux de probabilité:

$$\vec{j}_i = |A|^2 \frac{\hbar k_1}{m} \vec{u}_x$$

$$\vec{j}_t = |G|^2 \frac{\hbar k_1}{m} \vec{u}_x$$

Coefficient de transmission en flux de probabilité:

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

$$= \frac{4k_1^2 q^2}{4k_1^2 q^2 \cosh^2(qd) + (q^2 - k_1^2) \sinh^2(qd)}$$

$$= \frac{4E(U_0 - E)}{4E(U_0 - E) + U_0^2 \sinh^2\left(\frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}d}{\hbar}\right)}$$

on simplifie  
 $k_1$  et  $q$   
 et  $\cosh^2 = \frac{1}{1 + \sinh^2}$

AN:  $U_0 = 10 \text{ eV}$   $E = 5 \text{ eV}$

$$\frac{\hbar}{q} = 87 \text{ pm}$$

$$* d = 100 \text{ pm}$$

$$* d = 500 \text{ pm}$$

$$T = 0,33$$

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

portée de l'onde évanescente

T est d'abord élevé (proche de 1) puis

diminue très vite quand  $d$  dépasse  $\frac{\hbar}{q}$

Conformément à l'intuition énoncée dans 1).

cf. Figure 6

#### 5. Approximation de la barrière épaisse.

si  $qd \geq 3$   $\sinh^2(qd)$  est gros alors que  $\frac{4E}{U_0} \left(1 - \frac{E}{U_0}\right) \leq 2$

$$T = \frac{\frac{4E}{U_0} \left(1 - \frac{E}{U_0}\right)}{\frac{4E}{U_0} \left(1 - \frac{E}{U_0}\right) + \sinh^2(qd)}$$



donc  $T \approx \frac{4 \frac{E}{U_0} (1 - \frac{E}{U_0})}{\sinh^2(qd)}$

numérateur  $\approx 1$   
 $e^{-qd}$  négligeable  
 dans  $\sinh$

En OdeG grossier :

$$T \approx e^{-2qd}$$

Approximation qui convient si  $qd \gg \frac{1}{q}$

C'est l'approximation de la barrière épaisse

## 6. Barrière de forme quelconque

cf. Figure 8

Pour la portion d'indice  $i$ ,  $T_i \approx e^{-2q_i d}$

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

↳ Relation à appliquer dans la zone classiquement interdite ( $U(x) \geq E$ )

la probabilité de franchir toute cette zone est  $T = \prod_{i=1}^N T_i$

$$= \prod_{i=1}^N e^{-2q_i d}$$

$$= e^{-\sum_i 2q_i d}$$

ici  $d$  est à interpréter comme  $\Delta x$   
 (l'épaisseur de chaque barrière)

donc  $\sum_i 2q_i d = 2 \sum_i \frac{\sqrt{2m(U(x_i) - E)}}{\hbar} \Delta x \approx 2 \int_a^b \frac{\sqrt{2m(U(x) - E)}}{\hbar} dx$

pas par  
 pas  $T \approx e^{-2 \int_a^b \frac{\sqrt{2m(U(x) - E)}}{\hbar} dx}$

Approximation pas très bien contrôlée, en particulier près des bords,  $q \rightarrow 0$  et l'approximation de la barrière épaisse n'est pas valide

Applications classiques:

\* radioactivité  $\alpha$

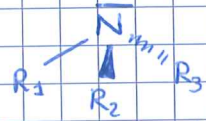


les particules  $\alpha$  s'échappent du noyau par effet tunnel.

5

\* microscope à effet tunnel

\* inversion de  $\text{NH}_3$  et des amines.



La molécule inverse sa configuration par effet tunnel en franchissant une barrière d'énergie



