

Introduction

Le chapitre précédent nous a permis de nous familiariser avec l'interprétation probabiliste associée à la mécanique quantique, ainsi qu'à la résolution de l'équation de Schrödinger dans le cas d'une particule libre. Nous allons maintenant aborder l'évolution dans un potentiel constant par morceaux, ou une barrière de potentiel. Ces potentiels idéaux permettent de simuler des situations physiques plus complexes dans lesquelles le potentiel vu par un système quantique varie rapidement sur des échelles de l'ordre de sa longueur d'onde. Les prédictions de la mécanique quantique sont alors très différentes de celles de la physique classique ce que nous illustrerons particulièrement avec l'**effet tunnel**.

Table des matières

I - Équation de Schrödinger dans un potentiel uniforme par morceaux	1
1) Forme générale des solutions	1
2) Puits de potentiel de profondeur infinie ; quantification de l'énergie.	2
3) Puits de potentiel de profondeur finie	3
II - Barrière de potentiel et effet tunnel	7
1) Approche qualitative d'une barrière de potentiel	7
2) Coefficient de transmission de la barrière et effet tunnel	7

I - Équation de Schrödinger dans un potentiel uniforme par morceaux

1) Forme générale des solutions

Nous avons vu au chapitre précédent que dans le cas où l'énergie potentielle du système est nulle, il est possible de séparer les dépendances temporelle et spatiale de la fonction d'onde $\psi(x, t)$ selon :

$$\psi(x, t) = \phi(x)e^{-i\frac{Et}{\hbar}}$$

où la fonction d'onde spatiale $\phi(x)$ est solution de l'équation de Schrödinger stationnaire. Considérons maintenant le cas où l'énergie potentielle a une valeur constante que nous noterons V ou V_0 dans la suite. D'un point de vue physique cela signifie que l'énergie potentielle n'a pas de variation significative dans un domaine de variation $[x_1, x_2]$ où évolue le système.

L'équation de Schrödinger stationnaire se ramène dans ce cas à :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\phi}{dx^2}(x) + V_0\phi(x) = E\phi(x)$$

soit

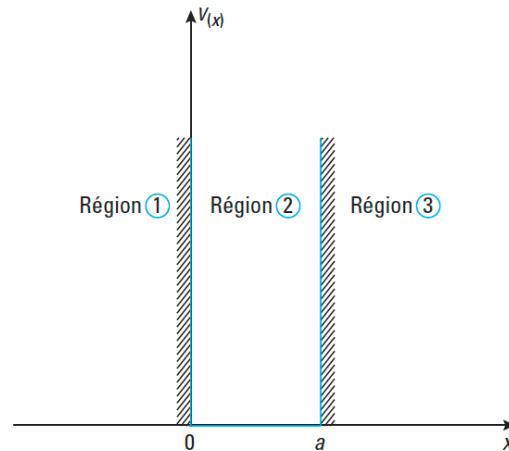
$$\frac{d^2\phi}{dx^2}(x) = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)\phi(x)$$

D'un point de vue technique l'équation précédente est différentielle, homogène, à coefficients constants. Elle ne présente pas de difficulté particulière.

On posera pour la suite des calculs : $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)$. Notons que le paramètre k est complexe puisque la quantité $(E - V_0)$ peut être positive ou négative. Pour résoudre l'équation différentielle, on trouve l'équation caractéristique associée :

2) Puits de potentiel de profondeur infinie ; quantification de l'énergie.

Dans ce paragraphe nous allons nous intéresser au comportement d'un système quantique à l'intérieur d'un puits de potentiel carré de profondeur infinie représenté ci-dessous.



Mathématiquement, il est défini par :

$$V(x) = \begin{cases} +\infty & \text{si } x < 0 \\ 0 & \text{si } 0 < x < a \\ +\infty & \text{si } x > a \end{cases}$$

Dans les régions externes du potentiel (région 1 et 3 sur la figure) la probabilité de présence est nulle. Par continuité de la fonction d'onde (propriété admise), on doit donc vérifier les conditions suivantes :

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

$$\phi(x = a^-) = 0$$

A RETENIR

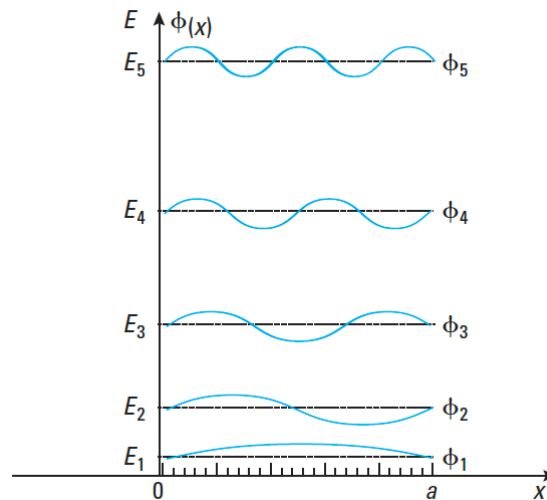
Fonctions d'onde du puits de potentiel infini

Les fonctions d'onde stationnaires d'un système dans un puits de potentiel infini de largeur a s'écrivent :

$$\phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$

L'énergie du système dans un état décrit par la fonction d'onde $\phi_n(x)$ est *quantifiée* :

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



Sur la figure ci-dessus, on a représenté les fonctions d'onde des 5 premiers niveaux d'énergie. Pour les besoins de la figure, les fonctions d'onde ont été translatées d'une valeur proportionnelle à l'énergie (donc variant comme n^2).

Rappelons que le niveau de plus basse énergie est appelé **niveau fondamental**.

Remarque :

- Notion de *confinement* : plus une particule est confinée dans une zone étroite : a petit, plus les énergies E_n augmentent, et plus l'écart entre les niveaux d'énergie augmente ; on associe le confinement d'une particule quantique à une augmentation de son énergie cinétique (car $E_p = V$ est nulle dans le puits).
- L'onde dans ce genre de puits est une onde stationnaire (comme classiquement) : on peut voir ce point comme le "rebond" de la particule sur chaque paroi du potentiel, donnant lieu à la superposition de deux OPPH se propageant dans des sens opposés.

Comment retrouver l'énergie minimale à partir de l'inégalité de Heisenberg (qualitatif) ?

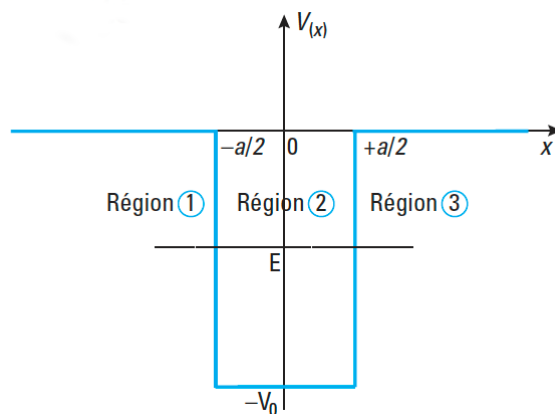
À la fin du I du chapitre 6, pour une particule confinée entre $x = 0$ et $x = a$ (comme ici), nous avons estimé l'*énergie cinétique minimale* à l'aide de l'inégalité de Heisenberg :

$$E_{c,min} = E_{min} = \frac{\hbar^2}{2ma^2}$$

qui correspond approximativement à l'énergie au niveau $n = 1$: $E_1 = \pi^2 E_{min}$

3) Puits de potentiel de profondeur finie**a) Présentation et conditions de continuité**

Certaines expériences nécessitent de confiner des particules comme des électrons. On utilise pour cela des puits de potentiel. Sur la figure ci-dessous on a représenté un tel puits, symétrique, de profondeur finie $-V_0$ et de largeur a . Il est évident que les discontinuités de ce potentiel ne sont pas physiques, mais ce modèle est une approximation réaliste d'une situation dans laquelle le potentiel varie brusquement sur des échelles de l'ordre de la longueur d'onde du système.



$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < -\frac{a}{2} \\ -V_0 & \text{si } -\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2} \\ 0 & \text{si } x > \frac{a}{2} \end{cases}$$

CONDITIONS DE CONTINUITÉ (ADMISES)

On admet que lorsqu'un système quantique est incident sur un potentiel discontinu en un point $x = x_0$, la discontinuité restant bornée (contrairement à la partie précédente, donc), sa fonction d'onde ϕ et sa dérivée première $\frac{d\phi}{dx}$ sont continues au point $x = x_0$.

Si la discontinuité du potentiel est infinie (exemple du puits de potentiel infini) seule la fonction d'onde ϕ est continue au point $x = x_0$.

Dans cette partie, on ne va également étudier que des *états liés* (conformément au programme), donc la particule possède une énergie E telle que $-V_0 < E < 0$, et l'on cherche à déterminer sa fonction d'onde et son énergie partout dans l'espace. Ce potentiel est bien un potentiel "uniforme par morceaux", et nous allons résoudre l'équation de Schrödinger sur chaque morceau.

b) Quantification de l'énergie pour des états liés

Pour déterminer les coefficients A_1 , A_2 , B_2 et B_3 on a donc 4 équations à disposition. On isole A_1 dans (1), que l'on injecte dans (3) :

$$\kappa e^{\frac{\kappa a}{2}} \left(A_2 e^{-i \frac{\kappa a}{2}} + B_2 e^{i \frac{\kappa a}{2}} \right) \cdot e^{-\frac{\kappa a}{2}} = i k \left(A_2 e^{-i \frac{\kappa a}{2}} - B_2 e^{i \frac{\kappa a}{2}} \right)$$

On obtient alors un lien entre A_2 et B_2 :

$$A_2 e^{-i \frac{\kappa a}{2}} (\kappa - i k) = B_2 e^{i \frac{\kappa a}{2}} (-\kappa - i k) \quad (1)$$

De même on peut isoler B_3 dans (2) que l'on injecte dans (4) :

$$A_2 e^{i \frac{\kappa a}{2}} (-\kappa - i k) = B_2 e^{-i \frac{\kappa a}{2}} (\kappa - i k) \quad (2)$$

Les équations (5) et (6) permettent d'affirmer :

$$\begin{aligned} A_2 &= B_2 e^{i k a} \frac{-\kappa - i k}{\kappa - i k} \\ A_2 &= B_2 e^{-i k a} \frac{\kappa - i k}{-\kappa - i k} \end{aligned}$$

Ces deux équations devant être COHÉRENTES entre elles, on impose

$$e^{i k a} \frac{-\kappa - i k}{\kappa - i k} = e^{-i k a} \frac{\kappa - i k}{-\kappa - i k}$$

soit

$$e^{2 i k a} = \left(\frac{\kappa - i k}{\kappa + i k} \right)^2$$

que l'on simplifie en

$$e^{i k a} = \pm \frac{\kappa - i k}{\kappa + i k}$$

Comme les coefficients k et κ dépendent de E , la relation précédente ne peut être satisfaite que pour des valeurs particulières de E . L'énergie se retrouve **quantifiée**. Ceci est une conséquence du fait que l'on a imposé que $\phi(x)$ devait être bornée partout.

On transforme cette expression :

$$\frac{\kappa}{i k} = \frac{1 \pm e^{i k a}}{1 \mp e^{i k a}}$$

ou encore

$$\frac{\kappa}{i k} = \frac{e^{-\frac{i k a}{2}} \pm e^{\frac{i k a}{2}}}{e^{-\frac{i k a}{2}} \mp e^{\frac{i k a}{2}}}$$

qui est équivalent à

$$\frac{\kappa}{k} = -\cotan\left(\frac{k a}{2}\right) \quad \text{ou} \quad \frac{\kappa}{k} = +\tan\left(\frac{k a}{2}\right)$$

Considérons la seconde équation. En remarquant que $1 + \tan^2\left(\frac{k a}{2}\right) = \frac{1}{\cos^2\left(\frac{k a}{2}\right)} = 1 + \frac{\kappa^2}{k^2} = \frac{\kappa^2 + k^2}{k^2}$ et que $\kappa^2 + k^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} = C^2 = cte$, on obtient

$$\left| \cos\left(\frac{k a}{2}\right) \right| = \frac{k}{C}$$

et $\tan\left(\frac{k a}{2}\right) > 0$. Les solutions k de cette équation sont déterminés par l'intersection entre des arcs de sinusoides et une droite de pente $\frac{1}{C}$. L'autre solution se détermine en recherchant les intersections des deux fonctions suivantes :

$$\left| \sin\left(\frac{k a}{2}\right) \right| = \frac{k}{C} \quad \text{et} \quad \tan\left(\frac{k a}{2}\right) < 0$$

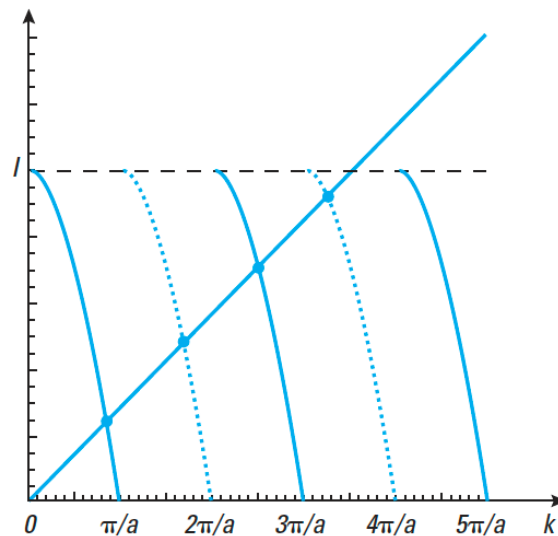
La figure montre les solutions graphiques. En traits pleins les arches de la fonction $\left| \cos\left(\frac{k a}{2}\right) \right|$ en pointillés ceux de la fonction $\left| \sin\left(\frac{k a}{2}\right) \right|$. La droite $\frac{k}{C}$ intersecte des deux courbes alternativement. L'abscisse des points d'intersection donne la valeur de k autorisée, donc la valeur de l'énergie puisque

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

On constate que lorsque V_0 augmente (et donc lorsque C augmente) la pente $\frac{1}{C}$ de la droite diminue. Le nombre de points d'intersection augmente. À la limite où $\frac{1}{C} \rightarrow \infty$, les points d'intersection se trouvent pratiquement confondus avec $k = \frac{n\pi}{a}$ ($n \in \mathbb{N}$). Dans cette limite

$$E = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} - V_0$$

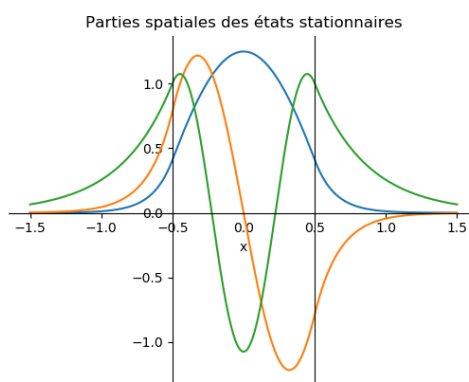
On retrouve le cas du potentiel infini.



c) Fonction d'onde et largeur "effective" du puits

Dans le cas du puits infini, la probabilité de présence en dehors du puits est strictement nulle, ce qui n'est pas le cas ici : la présence d'ondes évanescentes dans les domaines 1 et 3 du potentiel s'interprètent comme une probabilité de présence non nulle à proximité du puits.

On présente ici un exemple de potentiel fini, et de fonction d'onde spatiale pour les trois premières valeurs d'énergie. ($a = 1$, $V_0 = \frac{2,88\pi^2 \hbar^2}{ma^2}$ choix arbitraire ; pour cette largeur et cette profondeur, il existe trois états liés).



On peut qualitativement comparer les niveaux d'énergie du puits infini avec ceux du puits fini. En effet l'onde évanescente présente dans les régions 1 et 3 du puits fini élargissant la zone de probabilité de présence du système, augmente l'indétermination quantique Δx . La conséquence immédiate de l'inégalité de Heisenberg spatiale est l'abaissement des niveaux d'énergie par rapport au puits infini.

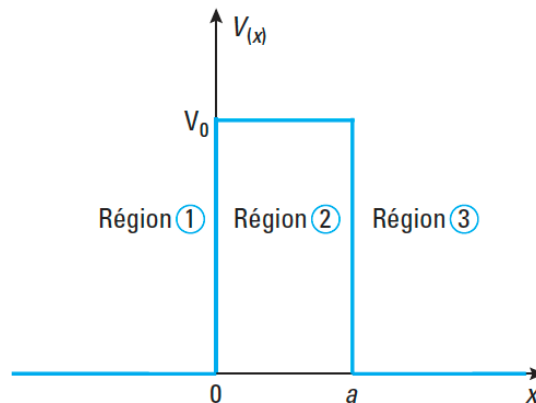
II - Barrière de potentiel et effet tunnel

1) Approche qualitative d'une barrière de potentiel

Considérons le cas "inverse" de la partie précédente, représenté sur la figure ci-dessous, d'une barrière de potentiel de hauteur V_0 et de largeur a sur laquelle arrive une particule libre d'énergie E .

L'image classique de ce type de situation physique est celle de l'alpiniste qui doit gravir une montagne. L'alpiniste doit fournir un effort contre le champ de pesanteur pour atteindre le point d'altitude maximale puis dévaler la pente et retrouver l'altitude initiale mais de l'autre côté. Cela est aussi le cas d'une bille envoyée sur une "butte" avec une vitesse v_0 et qui va essayer de passer de l'autre côté.

Il faut évidemment distinguer deux cas suivant l'énergie dont l'alpiniste dispose pour produire l'effort initial (ou l'énergie cinétique initiale de la bille) et donc comparer la valeur de l'énergie du système à V_0 .



~Si $E > V_0$, le système doit pouvoir franchir la barrière de potentiel, qu'il soit *classique* ou *quantique*. La mécanique quantique prévoit cependant qu'il y aura une onde réfléchi dans la région 1 ce qui diffère notablement du cas classique. Pour caractériser le comportement du système au passage de la barrière, on définit des coefficients de réflexion R et de transmission T à partir des courants de densité de probabilité dans les régions 1 et 3.

Définition :

Coefficients de réflexion et de transmission

Le coefficient de réflexion est égal au rapport du courant réfléchi au courant incident :

$$R = \frac{j_{1x}^{\text{réfléchi}}}{j_{1x}^{\text{incident}}}$$

Le coefficient de transmission est égal au rapport du courant transmis au courant incident :

$$R = \frac{j_{2x}^{\text{transmis}}}{j_{1x}^{\text{incident}}}$$

~Si $E < V_0$, la mécanique classique prévoit que le système ne peut pas franchir la barrière de potentiel. En effet, dans la région intermédiaire son énergie cinétique $E_c = E - V_0$ serait négative, ce qui n'est pas possible. L'alpiniste ne peut fournir l'effort nécessaire à l'ascension complète, il s'arrête au point où son énergie cinétique s'annule et rebrousse chemin (idem pour la bille). Dans le cas quantique la situation est différente. En effet, dans la région 2 nous avons vu qu'il existe une solution sous forme d'onde évanescence. **La probabilité de présence est non nulle dans la région 2, classiquement interdite.** L'amplitude de l'onde évanescence décroît exponentiellement avec la distance x parcourue. Cette onde évanescence est caractérisée par une longueur de pénétration typique δ . Que se passe-t-il si cette longueur caractéristique est du même ordre de grandeur que l'épaisseur du potentiel ? On constate alors que **la probabilité de retrouver le système de l'autre côté de la barrière n'est pas nulle**, c'est l'**effet tunnel**. On peut rattacher cette dénomination à l'image classique utilisée jusqu'ici : l'alpiniste a finalement creusé un tunnel pour franchir la montagne (ce n'est qu'une image, pas une analogie exacte...).

2) Coefficient de transmission de la barrière et effet tunnel

Les fonctions d'onde s'écrivent dans chaque région :