

$$R = \frac{|A_1^-|^2}{|A_1^+|^2}$$

$$T = \frac{R_2 |A_2^+|^2}{R_1 |A_1^+|^2}$$

(13)

R et T vérifient $R+T=1$.

La fonction d'onde associée à un état quelconque de la particule est

$$\Psi(x,t) = \int F(k) \exp i(kx - E_k t) dk$$

La diffusion d'un tel paquet d'ondes par une marche de potentiel est illustrée sur la figure 6-9.

$E < V_0$

Étudions à présent le cas où l'énergie de la particule incidente est inférieure à V_0 .

→ Dans la région (I) nous avons, comme pour le cas $E > V_0$, une solution générale de la forme

$$\Psi(x) = A_1^+ e^{ikx} + A_1^- e^{-ikx} \quad \text{avec}$$

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

→ Dans la région (II), $(E - V_0)$ étant négatif il vient

$$\Psi(x) = A_2^+ e^{Kx} + A_2^- e^{-Kx} \quad \text{avec } K = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

Le terme $(A_2^+ e^{Kx})$ n'est pas physiquement acceptable car la densité de probabilité de présence associée diverge avec x . On impose donc $A_2^+ = 0$.

La forme générale d'une fonction d'onde associée à un état stationnaire est donc

$$\begin{cases} \psi(x) = A_1^+ e^{ikx} + A_1^- e^{-ikx} & x \leq 0 \\ \psi(x) = A_2^- e^{-kx} & x \geq 0 \end{cases}$$

Si l'on applique la condition de continuité de $\psi(x)$ et $\psi'(x)$ en $x=0$, il vient :

$$\begin{cases} A_1^- = \frac{k-ik}{k+ik} A_1^+ \\ A_2^- = \frac{2k}{k+ik} A_1^+ \end{cases} \quad R = \left| \frac{A_1^-}{A_1^+} \right|^2 = 1$$

On a donc bien réflexion de la particule par la barrière de potentiel mais, à la différence du cas classique, la particule a une probabilité de présence non nulle dans la région où $V > E$. La pénétration de la particule dans la zone classiquement interdite ne concerne qu'une distance de l'ordre de $\frac{1}{k}$.

La marche de potentiel ayant un effet de localisation de la particule ($x < 0$), cela se traduit par un élargissement de la distribution en quantité de mouvement. Cela peut être mis en évidence par le calcul de la TF de $\psi(x)$, $F(k)$.

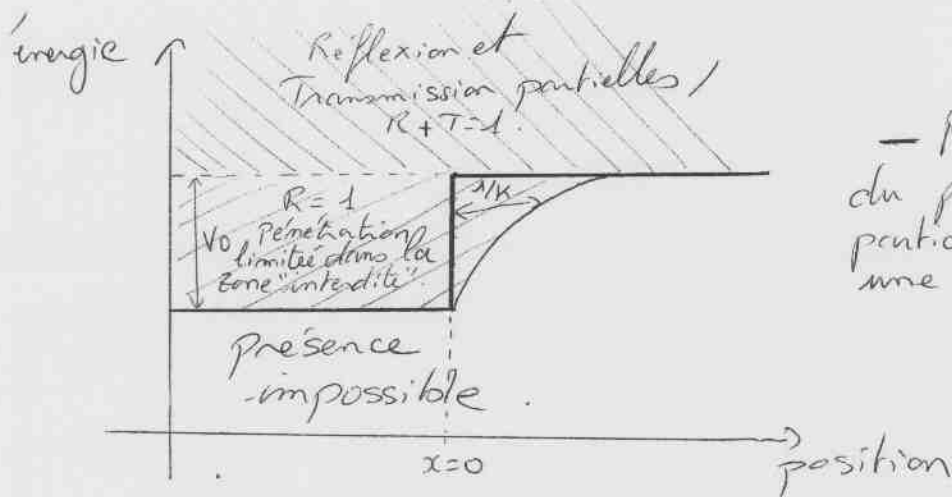
$$\begin{aligned} F(k) &= A \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) e^{-ikx} dx \\ &= \frac{cte}{k-ik} \end{aligned}$$

$$\mathcal{S}(k) = |F(k)|^2 = \frac{|C_0|^2}{k^2 + k^2} \quad \text{fit Lorentzienne. } (15)$$

Ceci est illustré sur la figure 6.10-

$E < V_{\min}$

Pour finir, il est aisé de vérifier que l'on ne peut pas définir de fonction d'onde dans le cas où $E < \text{valeur minimale du potentiel}$ (ici ϕ).



- Récapitulatif du problème d'une particule arrivant sur une marche de potentiel -

* $E > V_0$

Pour $x > x_0$, fonction d'onde propagative de la forme e^{ikx} . Réflexion partielle de l'onde incidente.

* $E < V_0$

Pour $x > x_0$, fonction d'onde évanescente de la forme e^{-kx} . Pas de propagation ($R=1$) mais pénétration limitée.

* Il n'existe pas d'état de la particule tel que $E < V_{\text{minimum}}$.

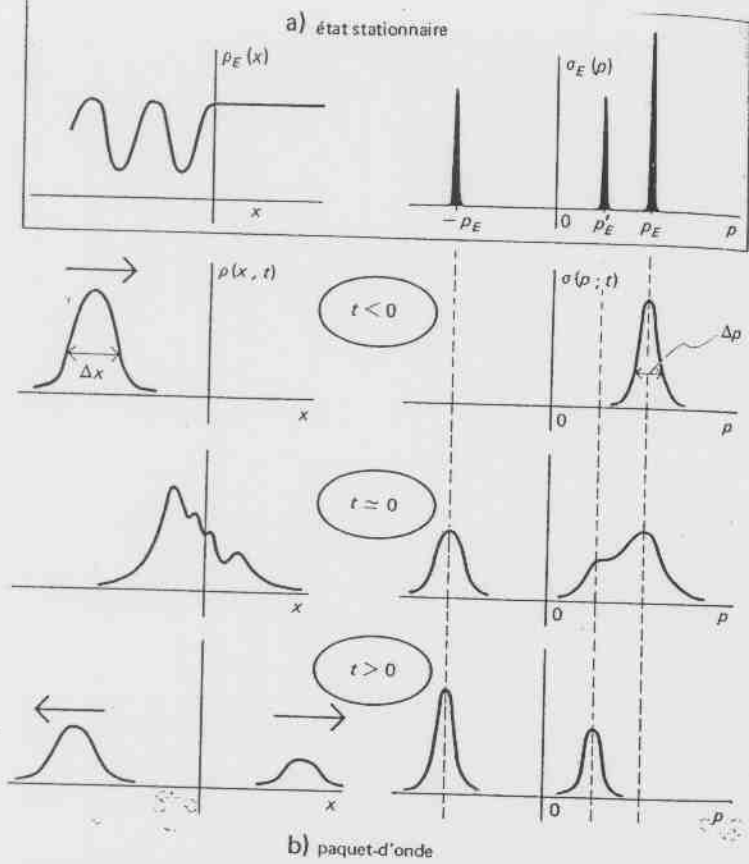


Figure 6.9 La diffusion d'un quanton par une marche de potentiel pour $E > V_0$
 a) Les densités de probabilité en position $\rho_E(x) = |\varphi(x)|^2$ et en quantité de mouvement $\sigma_E(p) = |\hat{\varphi}_E(p)|^2$ pour un état stationnaire de fonction d'onde (indépendante du temps) φ_E .
 b) Les densités de probabilité en position et quantité de mouvement pour un état (non-stationnaire) caractérisé par un paquet-d'onde initial, avant, pendant et après la rencontre avec la discontinuité de potentiel.

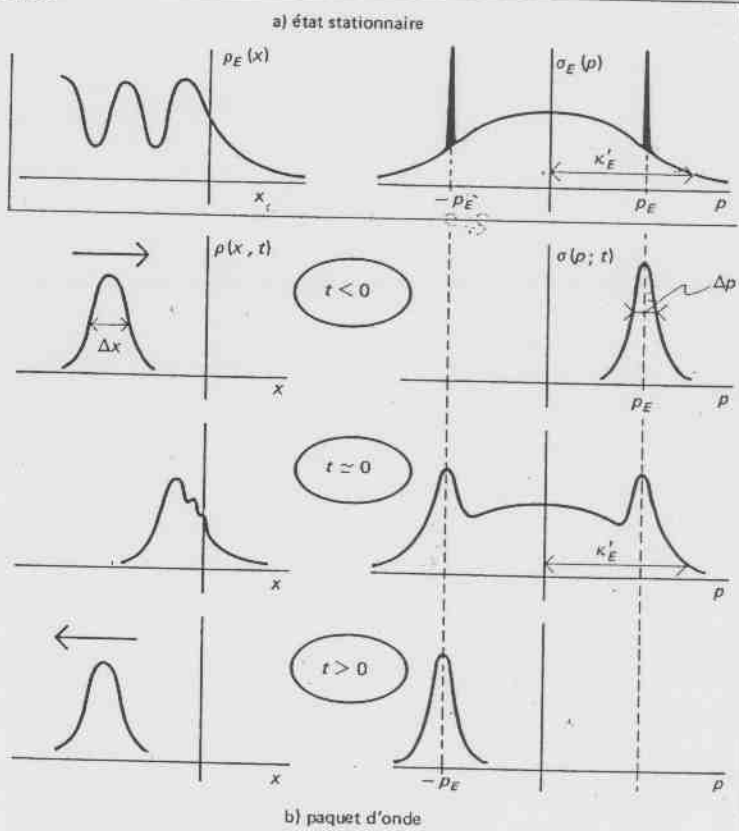
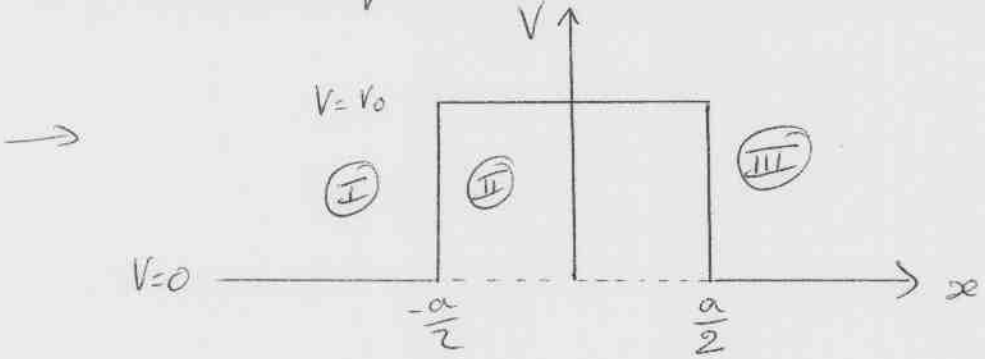


Figure 6.10 La réflexion d'un quanton par une marche de potentiel pour $(0 < E < V_0)$
 a) Les densités de probabilité en position $\rho_E(x) = |\varphi_E(x)|^2$ et en quantité de mouvement $\sigma_E(p) = |\hat{\varphi}_E(p)|^2$ pour un état stationnaire de fonction d'onde (indépendante du temps) φ_E .
 b) Les densités de probabilité en position et quantité de mouvement pour un état (non-stationnaire) caractérisé par un paquet-d'onde initial avant

Barrière de potentiel - Effet tunnel.



Nous considérons, comme dans le cas précédent, que les particules arrivent exclusivement de la gauche.

Essayons, dans un premier temps, de traiter qualitativement le problème à partir des résultats obtenus pour la marche de potentiel.

* Dans le cas où l'énergie totale E de la particule est supérieure à V_0 , on peut s'attendre à ce qu'il y ait propagation de l'onde associée dans les trois régions de l'espace I, II et III. L'énergie potentielle n'étant pas la même en II qu'en I et III, l'énergie cinétique et donc le ^{module du} vecteur d'onde \vec{k} prendront également des valeurs différentes.

Tout comme pour le cas de la marche de potentiel, il devrait y avoir réflexion partielle de l'onde incidente par la barrière.

* Dans le cas $0 < E < V_0$, l'onde associée devrait se propager en I et III, mais pas en II. Dans la ~~barrière~~ cette région elle devrait être évanescente, c'est-à-dire présenter une décroissance exponentielle de son amplitude en fonction

de la distance de pénétration dans la zone ⁽¹³⁾
classiquement interdite (caractérisée par une énergie
totale de la particule inférieure à l'énergie potentielle,
on peut intuitivement s'attendre à ce que la profondeur
de pénétration de l'onde associée dans la région II
dépende de $(V_0 - E)$, ainsi que le coefficient de
transmission de l'onde incidente qui doit également
dépendre de l'épaisseur de la barrière (une barrière
haute et large ne devrait laisser passer que peu
de particules...).

Passons à présent à un traitement du problème
par la résolution de l'équation de Schrödinger
des états stationnaires.

Soit donc ~~un état~~ un état $\Psi(x, t) = \Psi(x) e^{-i \frac{E}{\hbar} t}$ un état
stationnaire de la particule d'énergie totale
 E . $\Psi(x)$ vérifie

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

$\Psi(x)$ est définie par parties, comme la fonction potentiel
 $V(x)$.

* $E > V_0$

$(E - V)$ étant partout positif, les solutions sont partout
de la forme e^{ikx} (physiquement, cela correspond à
une onde propagative).

$$\Psi(x) = \begin{cases} \Psi_1(x) = A_1^+ e^{ik_1 x} + A_1^- e^{-ik_1 x} & x \leq -\frac{a}{2} \\ \Psi_2(x) = A_2^+ e^{ik_2 x} + A_2^- e^{-ik_2 x} & -\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2} \\ \Psi_3(x) = A_3^+ e^{ik_3 x} & x \geq \frac{a}{2} \end{cases} \quad (15)$$

avec $k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ et $k_2 = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$

Remarques :

- L'énergie cinétique de la particule $\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ est plus faible en II qu'en I et III.
- L'onde associée subit une réflexion partielle à chaque discontinuité de potentiel, ce qui se traduit par des aller-retour dans la zone $-\frac{a}{2}$ et $\frac{a}{2}$. La solution générale $\Psi(x)$ ci-dessus rend compte d'une manière globale de toutes ces réflexions.

Imposons à présent la continuité de $\Psi(x)$ et $\Psi'(x)$ en $x = -\frac{a}{2}$ et $x = \frac{a}{2}$, il vient :

en $x = -\frac{a}{2}$

$$\textcircled{1} \begin{cases} A_1^+ e^{-ik_1 \frac{a}{2}} + A_1^- e^{ik_1 \frac{a}{2}} = A_2^+ e^{-ik_2 \frac{a}{2}} + A_2^- e^{ik_2 \frac{a}{2}} \\ A_1^+ e^{-ik_1 \frac{a}{2}} - A_1^- e^{ik_1 \frac{a}{2}} = \frac{k_2}{k_1} A_2^+ e^{-ik_2 \frac{a}{2}} - \frac{k_2}{k_1} A_2^- e^{ik_2 \frac{a}{2}} \end{cases}$$

en $x = \frac{a}{2}$

$$\textcircled{2} \begin{cases} A_2^+ e^{ik_2 \frac{a}{2}} + A_2^- e^{-ik_2 \frac{a}{2}} = A_3^+ e^{ik_1 \frac{a}{2}} \\ A_2^+ e^{ik_2 \frac{a}{2}} - A_2^- e^{-ik_2 \frac{a}{2}} = \frac{k_1}{k_2} A_3^+ e^{ik_1 \frac{a}{2}} \end{cases}$$

Le but est de calculer les coefficients de réflexion R et de transmission T de la barrière de potentiel - $(A_1^+ e^{-ik_1 x})$ représente la partie incidente, $(A_1^- e^{-ik_1 x})$ la partie réfléchiée et $(A_3^+ e^{-ik_3 x})$ la partie transmise de l'onde associée. Aussi R et T sont donnés par

$$R = \left| \frac{A_1^-}{A_1^+} \right|^2 \quad \text{et} \quad T = \left| \frac{A_3^+}{A_1^+} \right|^2$$

Il faut donc chercher à éliminer les coefficients A_2^+ et A_2^- pour obtenir des relations entre A_1^+ , A_1^- et A_3^+ .

$$\textcircled{2} \Rightarrow \begin{cases} A_2^+ = \frac{1}{2} e^{-ik_2 \frac{a}{2}} A_3^+ \left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right) e^{ik_1 \frac{a}{2}} \\ \quad = \frac{1}{2} A_3^+ \left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right) e^{i(k_1 - k_2) \frac{a}{2}} \\ A_2^- = \frac{1}{2} e^{ik_2 \frac{a}{2}} A_3^+ \left(1 - \frac{k_1}{k_2}\right) e^{ik_1 \frac{a}{2}} \\ \quad = \frac{1}{2} A_3^+ \left(1 - \frac{k_1}{k_2}\right) e^{i(k_1 + k_2) \frac{a}{2}} \end{cases}$$

$$\textcircled{1} \Rightarrow \begin{cases} A_1^+ = \frac{1}{2} e^{ik_1 \frac{a}{2}} \left[A_2^+ e^{-ik_2 \frac{a}{2}} \left(1 + \frac{k_2}{k_1}\right) + A_2^- e^{-ik_2 \frac{a}{2}} \left(1 - \frac{k_2}{k_1}\right) \right] \\ A_1^- = \frac{1}{2} e^{-ik_1 \frac{a}{2}} \left[A_2^+ e^{-ik_2 \frac{a}{2}} \left(1 - \frac{k_2}{k_1}\right) + A_2^- e^{-ik_2 \frac{a}{2}} \left(1 + \frac{k_2}{k_1}\right) \right] \end{cases}$$

$$\textcircled{c} \text{ et } \textcircled{d} \Rightarrow \begin{cases} A_1^+ = \frac{1}{4} A_3^+ e^{ik_1 a} \left[\left(2 + \frac{k_1}{k_2} + \frac{k_2}{k_1}\right) e^{-ik_2 a} + \left(2 - \frac{k_1}{k_2} - \frac{k_2}{k_1}\right) e^{ik_2 a} \right] \\ \quad = \frac{1}{2} A_3^+ e^{ik_1 a} \left[2 \cos k_2 a - i \left(\frac{k_1^2 + k_2^2}{k_1 k_2} \right) \sin k_2 a \right] \\ A_1^- = \frac{1}{4} A_3^+ \left[\left(\frac{k_1}{k_2} - \frac{k_2}{k_1} \right) e^{-ik_2 a} + \left(\frac{k_2}{k_1} - \frac{k_1}{k_2} \right) e^{ik_2 a} \right] \\ \quad = \frac{1}{2} A_3^+ i \left(\frac{k_2}{k_1} - \frac{k_1}{k_2} \right) \sin k_2 a \end{cases}$$

Il vient donc

$$R = \frac{A_1^- (A_1^-)^*}{A_1^+ (A_1^+)^*} = \frac{(k_2^2 - k_1^2)^2 \sin^2 k_2 a}{4 k_1^2 k_2^2 \cos^2 k_2 a + (k_1^2 + k_2^2)^2 \sin^2 k_2 a}$$

$$= \frac{(k_2^2 - k_1^2)^2 \sin^2 k_2 a}{4 k_1^2 k_2^2 + (k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2 k_2 a}$$

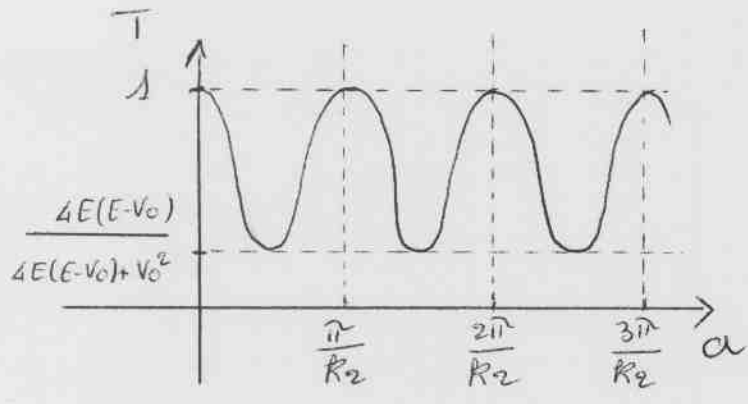
$$T = \frac{A_3^+ (A_3^+)^*}{A_1^+ (A_1^+)^*} = \frac{4 k_1^2 k_2^2}{4 k_1^2 k_2^2 + (k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2 k_2 a}$$

On vérifie bien $R + T = 1$.

Remplaçons k_1 et k_2 par leurs expressions en fonction de m , E et V_0 : $k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ et $k_2^2 = \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}$

Il vient :

$$T = \frac{4E(E - V_0)}{4E(E - V_0) + V_0^2 \sin^2 k_2 a}$$



Pour une énergie donnée de la particule $E > V_0$, le coefficient de transmission est périodique en fonction de l'épaisseur de la barrière.

La condition $a = m \frac{\pi}{k_2}$ avec m entier est équivalente à $a = m \cdot \frac{\lambda_2}{2}$ où $\lambda_2 = \frac{2\pi}{k_2}$ est la longueur d'onde dans la région II.

*** $E < V_0$**

La fonction d'onde sera propagative dans les régions I et III où $(E - V) > 0$, et évanescente dans la région II où $(E - V) < 0$.

$$\Psi(x) = \begin{cases} \Psi_1(x) = A_1^+ e^{ik_2 x} + A_1^- e^{-ik_2 x} & x \leq \frac{a}{2} \\ \Psi_2(x) = A_2^+ e^{\kappa x} + A_2^- e^{-\kappa x} & -\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2} \\ \Psi_3(x) = A_3^+ e^{ik_2 x} & x \geq \frac{a}{2} \end{cases}$$

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

$$K = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

A partir des conditions de continuité de $\Psi(x)$ et $\Psi'(x)$ en $x = -\frac{a}{2}$ et $x = \frac{a}{2}$, on peut calculer le coefficient de transmission $T = \left| \frac{A_3^+}{A_1^+} \right|^2$, d'une manière similaire au cas $(E > V_0)$. Les résultats se déduisent des résultats précédents en remplaçant k_2 par $(-iK)$.

\vec{p} orient :

$$A_1^+ = \frac{1}{4} A_3^+ \left[e^{a(ik-k)} \left(1 + \frac{ik}{k}\right) \left(1 + \frac{k}{ik}\right) + e^{a(ik+k)} \left(1 - \frac{ik}{k}\right) \left(1 - \frac{k}{ik}\right) \right]$$

$$A_1^- = \frac{1}{4} A_3^+ \left[e^{-ka} \left(1 + \frac{ik}{k}\right) \left(1 - \frac{k}{ik}\right) + e^{ka} \left(1 - \frac{ik}{k}\right) \left(1 + \frac{k}{ik}\right) \right]$$

$$T = \left| \frac{A_3^+}{A_1^+} \right|^2 = \left| \frac{4}{e^{-ka} \left(2 + \frac{ik}{k} - \frac{k}{k}\right) + e^{ka} \left(2 - \frac{ik}{k} + \frac{k}{k}\right)} \right|^2$$

$$= \frac{16}{\left| 4 \operatorname{ch} ka - 2i \left(\frac{k}{k} - \frac{k}{k} \right) \operatorname{sh} ka \right|^2}$$

$$= \frac{16}{4k^2 k^2 + 4 \left(\frac{k^2 - k^2}{k \cdot k} \right)^2 \operatorname{sh}^2 ka}$$

$$= \frac{4k^2 k^2}{4k^2 k^2 + (k^2 + k^2)^2 \operatorname{sh}^2 ka}$$

$$T = \frac{4E(V_0 - E)}{4E(V_0 - E) + V_0^2 \operatorname{sh}^2 ka} \quad \text{avec } k = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

Rappel: $\operatorname{ch} x = \frac{e^x + e^{-x}}{2}$ $\operatorname{sh} x = \frac{e^x - e^{-x}}{2}$

$$\operatorname{ch}^2 x - \operatorname{sh}^2 x = 1$$

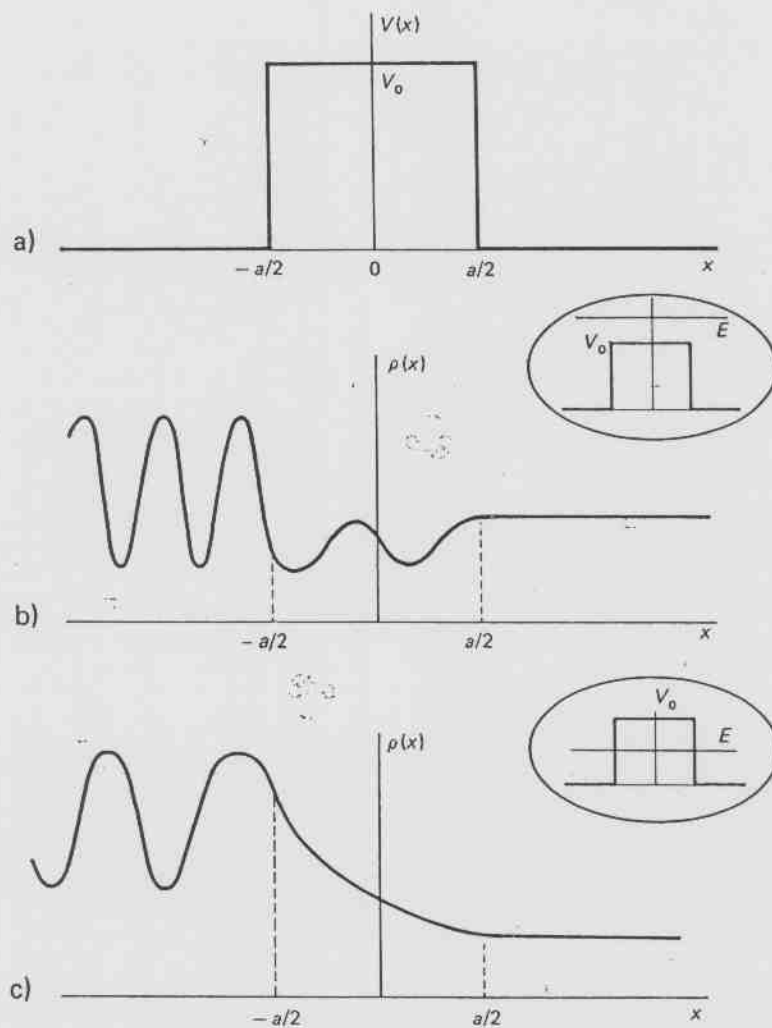


Figure 6.23 La barrière de potentiel.
 a) Le graphe de la fonction potentiel.
 b) La densité de probabilité de présence pour un état stationnaire d'énergie $E > V_0$ (quanton venant de la gauche).
 c) La densité de probabilité de présence pour un état stationnaire d'énergie $E < V_0$ (effet tunnel pour un quanton venant de la gauche).

(24)

En mécanique classique, une particule d'énergie totale E ne peut pas se trouver dans une région de l'espace dans laquelle l'énergie potentielle est supérieure à E . On devrait donc avoir $T=0$, la région III étant séparée de la région I par un domaine classiquement infranchissable.

Le résultat surprenant que nous obtenons, à savoir un coefficient de transmission non nul, est connu sous le nom d'effet tunnel.

$\frac{1}{k}$, homogène à l'inverse d'une longueur, peut être considéré comme la profondeur de pénétration dans la barrière de potentiel.

$$T = \frac{4E(V_0 - E)}{4E(V_0 - E) + V_0^2 \sinh^2 ka} \quad \text{avec} \quad \alpha k = \frac{\alpha \sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

On retrouve le critère de pertinence de la mécanique quantique : si l'action caractéristique du système (ici la particule dans la région II)

$\alpha \sqrt{2m(V_0 - E)} \gg \hbar$, alors $\alpha k \gg 1$ et le coefficient de transmission T est dominé par $e^{-2\alpha k}$, il tend vers le résultat classique $T=0$ quand αk augmente.