

# MQ2 – Equation de Schrödinger dans un potentiel $V(x)$

6.5.3. Équation de Schrödinger dans un potentiel $V(x)$ uniforme par morceaux		
Quantification de l'énergie dans un puits de potentiel rectangulaire de profondeur infinie.	Établir les expressions des énergies des états stationnaires. Retrouver qualitativement l'énergie minimale à partir de l'inégalité de Heisenberg spatiale.	
Énergie de confinement quantique.	Associer le confinement d'une particule quantique à une augmentation de l'énergie cinétique.	
Évolution temporelle d'une particule confinée dans une superposition d'états.	Mettre en évidence les oscillations d'une particule dont la fonction d'onde s'écrit comme la superposition de deux états stationnaires et relier la fréquence d'oscillation à la différence des énergies.	
Quantification de l'énergie des états liés dans un puits de profondeur finie. Élargissement effectif du puits par les ondes évanescentes.	Décrire la forme des fonctions d'onde dans les différents domaines. Utiliser les conditions aux limites admises : continuité de $\phi$ et $d\phi/dx$ . Associer la quantification de l'énergie au caractère lié de la particule. Mener une discussion graphique. Interpréter qualitativement, à partir de l'inégalité de Heisenberg spatiale, l'abaissement des niveaux d'énergie par rapport au puits de profondeur infinie.	
6.5.4. Effet tunnel		
Effet tunnel. Coefficient de transmission associé à une particule libre incidente sur une barrière de potentiel.	Citer quelques applications de l'effet tunnel. Définir le coefficient de transmission comme un rapport de courants de probabilités. Utiliser une expression fournie du coefficient de transmission à travers une barrière de potentiel.	

## I – Puits de potentiel rectangulaire de profondeur infinie

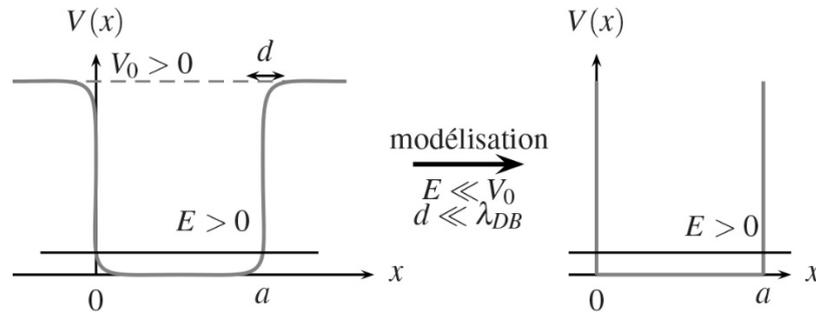
### I-1) Modélisation

Il n'est pas rare qu'en physique, les objets étudiés soient piégés dans un volume délimité :

- Les molécules d'une phase gazeuse ou liquide peuvent être contenues dans un récipient clos.
- Les électrons de conduction sont confinés dans l'échantillon conducteur.

Afin d'étudier théoriquement de tels systèmes, on considère une

situation modèle : le puits de potentiel infiniment profond, en se limitant à une approche unidimensionnelle. La particule quantique est supposée soumise à un champ de force qui dérive du potentiel ayant l'allure représentée sur la figure. La région comprise entre 0 et  $a$  est appelée puits de potentiel.



Lorsque l'énergie de la particule  $E$  est très inférieure à la profondeur réelle du puits  $V_0$  et lorsque le potentiel varie rapidement à l'échelle de la longueur d'onde de de Broglie de la particule, on peut modéliser le potentiel par un puits de potentiel infiniment profond comme celui qui est représenté sur la figure.

On considère alors le potentiel suivant :

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

## I-2) Fonctions d'onde propres

### a) En dehors du puits

L'équation d'onde de Schrödinger indépendante du temps s'écrit :

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

Or  $V(x) \rightarrow \infty$  donc nécessairement  $\varphi(x) \rightarrow 0$

Les régions de l'espace où le potentiel est infiniment élevé sont interdites à la particule quantique :  $\varphi_{\text{ext}} = 0$

b) Dans le puits

L'équation d'onde de Schrödinger indépendante du temps s'écrit :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \varphi(x)}{\partial x^2} = E \varphi(x)$$

$$\Leftrightarrow \frac{\partial^2 \varphi(x)}{\partial x^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \varphi(x) = 0$$

- 1<sup>er</sup> cas  $E < 0$  :

On pose  $k = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}$  et la solution s'écrit :

$$\varphi(x) = Ae^{kx} + Be^{-kx}$$

Or :

$$\varphi(0) = \varphi(a) = 0 \Rightarrow \begin{cases} A + B = 0 \\ Ae^{ka} - Ae^{-ka} = 0 \end{cases}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} A = -B \\ 2A \operatorname{sh}(ka) = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} A = 0 \\ \text{ou } ka = 0 \text{ (impossible)} \end{cases}$$

Par conséquent :  $\varphi(x) = 0$ .

- 2<sup>ème</sup> cas  $E=0$  :

L'équation de Schrödinger s'écrit :

$$\frac{\partial^2 \varphi(x)}{\partial x^2} = 0 \Rightarrow \varphi(x) = Ax + B$$

Or :

$$\varphi(0) = \varphi(a) = 0 \Rightarrow \varphi(x) = 0$$

A l'intérieur du puits, la situation où  $E \leq 0$  n'admet pas de solutions.

- 3<sup>ème</sup> cas  $E > 0$  :

On pose  $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$  et la solution s'écrit :

$$\varphi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx)$$

Or :

$$\begin{aligned} \varphi(0) = \varphi(a) = 0 &\Rightarrow \begin{cases} B = 0 \\ A \sin(ka) = 0 \end{cases} \\ &\Rightarrow \begin{cases} A = 0 \text{ (inintéressant)} \\ \text{ou } \sin(ka) = 0 \end{cases} \end{aligned}$$

Afin d'éviter la solution  $A = B = 0$ , on impose  $\sin(ka) = 0$ .  
Les seules valeurs permises pour le vecteur d'onde sont les valeurs :

$$\begin{aligned} k_n &= \frac{n\pi}{a} \text{ où } n \in \mathbb{N}^* \\ \Rightarrow \varphi_n(x) &= A_n \sin(k_n x) = A_n \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right) \end{aligned}$$

La constante  $A_n$  doit être déterminée par la condition de normalisation :

$$\begin{aligned} \int_0^a |\varphi_n(x)|^2 dx &= 1 \\ \Leftrightarrow \int_0^a A_n^2 \sin^2\left(\frac{n\pi}{a} x\right) dx &= 1 \\ \Leftrightarrow A_n^2 \int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi}{a} x\right) dx &= 1 \\ \Leftrightarrow A_n^2 \times \frac{a}{2} &= 1 \\ \Leftrightarrow A_n &= \sqrt{\frac{2}{a}} \\ \Rightarrow \varphi_n(x) &= \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right) \end{aligned}$$

À partir de la relation  $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ , on obtient les valeurs possibles de l'énergie de la particule quantique :

$$\begin{aligned} E_n &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2m a^2} \\ \Rightarrow E_n &= n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m a^2} \end{aligned}$$

On se limite à des valeurs strictement positives de  $n$  car  $k > 0$ .

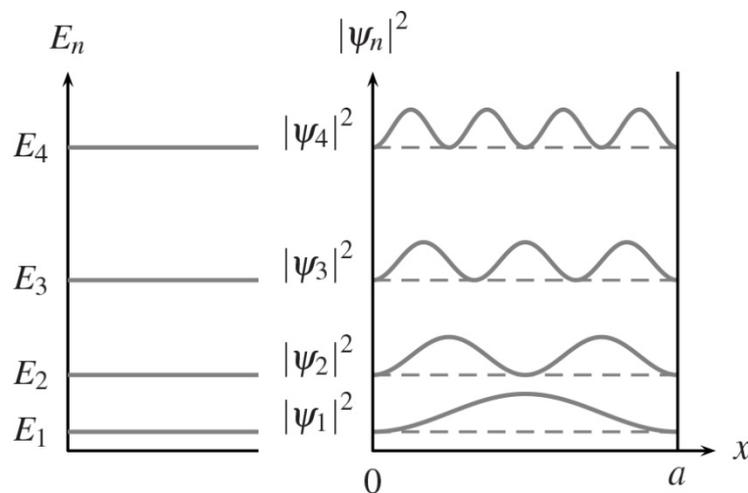
L'expression complète des fonctions d'onde obtenues est la suivante :

$$\psi_n(x, t) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} \text{ où } E_n = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$$

### I-3) Niveaux d'énergie

Nous avons obtenu une suite discrète de valeurs de l'énergie : les énergies possibles sont quantifiées et l'entier  $n$  est un nombre quantique. Cette suite discrète est appelée spectre d'énergie de la particule quantique.

À chaque valeur du nombre quantique  $n$ , correspond une valeur précise de l'énergie  $E_n$ , associée à une fonction d'onde  $\Psi_n(x, t)$ . Chacune de ces valeurs définit un niveau d'énergie.



Le niveau d'énergie le plus bas, appelé niveau fondamental, est obtenu pour  $n = 1$  : (Les autres niveaux sont dits excités)

$$E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$$

Ainsi, alors qu'une particule classique piégée dans un puits de potentiel infiniment profond peut avoir une énergie arbitrairement petite, nous constatons que l'énergie d'une particule quantique ne

peut pas être inférieure au niveau d'énergie fondamental  $E_1$ .

Pour une particule quantique :

$$E_n > E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$$

#### I-4) Energie de confinement quantique

Nous avons montré ci-dessus que la fonction d'onde pouvait s'écrire comme la somme de deux ondes harmoniques planes progressant dans des sens opposés, caractérisées par des vecteurs d'onde :

$$\vec{k}_n = \pm k_n \vec{u}_x \Rightarrow \vec{p}_n = \pm p_n \vec{u}_x$$

On conclut que la quantité de mouvement moyenne de la particule quantique est nulle, quel que soit le niveau d'énergie considéré :

$$\begin{aligned} \langle p_x \rangle &= 0 \\ \Rightarrow \Delta p_x &= \sqrt{\langle p_x^2 \rangle - \langle p_x \rangle^2} = \sqrt{\langle p_x^2 \rangle} \end{aligned}$$

Or dans le puits :

$$\begin{cases} \Delta x \leq a \\ \Delta p_x \Delta x \geq \frac{\hbar}{2} \end{cases} \\ \Rightarrow \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2a} \Rightarrow \langle p_x^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4a^2}$$

Dans ce même puits :

$$\begin{cases} V(x) = 0 \\ E = E_c = \frac{p_x^2}{2m} \end{cases}$$

On en déduit que l'énergie cinétique de la particule quantique confinée dans le puits est bornée par une valeur minimale :

$$E_c \geq \frac{\hbar^2}{4a^2} \times \frac{1}{2m}$$

$$\Rightarrow E \geq E_{c,min} = \frac{\hbar^2}{8ma^2}$$

On vérifie :  $E_1 \geq E_{c,min}$

On appelle cette énergie cinétique minimale dans un domaine d'extension spatiale  $a$ , énergie de confinement.

L'énergie de confinement (ou de localisation) s'exprime par :

$$E_{c,min} = \frac{\hbar^2}{8ma^2}$$

Elle est d'autant plus élevée que la particule est piégée dans un domaine d'extension spatiale réduite.

Ainsi si «  $a$  » est petit l'énergie cinétique de confinement augmente. On peut ainsi dire :

« Le confinement d'une particule quantique augmente avec son énergie cinétique »

### I-6) Superposition d'états stationnaires

L'équation de Schrödinger est linéaire ; la solution la plus générale peut être écrite comme une superposition d'états stationnaires :

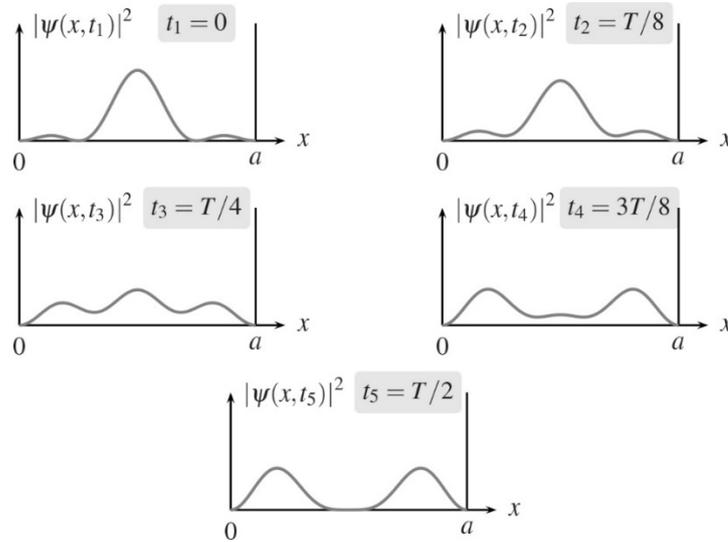
$$\psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \times \varphi_n(x) e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}$$

Envisageons la fonction d'onde suivante :

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1(x, t) + \psi_2(x, t))$$

La figure représente l'évolution temporelle d'une fonction d'onde construite comme une combinaison linéaire de fonctions d'onde stationnaires, et représentant une particule quantique plutôt localisée à l'instant initial au centre du puits de potentiel. La

fonction d'onde s'étale sur toute la largeur du puits, et suite aux réflexions sur les deux bords, vient reprendre sa forme initiale au centre du puits.



Combinaison linéaire de  $\psi_1$  et  $\psi_2$ . De  $T/2$  à  $T$ , on repasse, à l'envers, par les mêmes étapes que celles représentées ici.

Intéressons-nous à la période d'oscillation entre les différents états de la particule :

$$\begin{aligned}\psi(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \varphi_1(x) e^{-\frac{iE_1 t}{\hbar}} + \varphi_2(x) e^{-\frac{iE_2 t}{\hbar}} \right) \\ \Rightarrow |\psi(x, t)|^2 &= \frac{1}{2} \left( |\varphi_1(x)|^2 + |\varphi_2(x)|^2 + \varphi_1(x) e^{-\frac{iE_1 t}{\hbar}} \varphi_2(x) e^{+\frac{iE_2 t}{\hbar}} \right. \\ &\quad \left. + \varphi_1(x) e^{+\frac{iE_1 t}{\hbar}} \varphi_2(x) e^{-\frac{iE_2 t}{\hbar}} \right) \\ \Rightarrow |\psi(x, t)|^2 &= \frac{1}{2} \left( |\varphi_1(x)|^2 + |\varphi_2(x)|^2 + 2\varphi_1(x)\varphi_2(x) \cos\left(\frac{E_2 - E_1}{\hbar} t\right) \right)\end{aligned}$$

On pose :  $\Omega = \frac{E_2 - E_1}{\hbar} \Rightarrow \nu = \frac{\Omega}{2\pi} = \frac{E_2 - E_1}{h}$  Fréquence d'oscillation

La particule décrit par la fonction d'onde  $\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1(x, t) + \psi_2(x, t))$  oscille à la fréquence  $\nu = \frac{E_2 - E_1}{h}$  dans le puits infini.

## II – Puits de profondeur finie

### II-1) Modélisation

On envisage maintenant la situation où l'énergie  $E$  de la particule quantique n'est plus négligeable devant la profondeur du puits  $V_0$ . C'est le modèle du puits de potentiel de profondeur finie. Il correspond à la situation où la particule quantique est soumise à un champ de force qui dérive du potentiel :

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{si } x \leq -\frac{a}{2} \\ 0 & \text{si } |x| \leq a/2 \\ V_0 & \text{si } x \geq \frac{a}{2} \end{cases}$$

Comme pour le puits de potentiel infini, les discontinuités du potentiel modélisent des variations du potentiel réel sur des distances caractéristiques très inférieures à la longueur d'onde de de Broglie de la particule quantique.

### II-2) Etats symétriques et antisymétriques

Nous avons choisi une origine des abscisses telle que le potentiel soit pair :  $V(x) = V(-x)$ .

Supposons que l'on connaisse une fonction d'onde propre  $\varphi(x)$  solution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps, et correspondant à une valeur  $E$  de l'énergie :

$$\frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) \varphi(x) = 0$$

Lorsqu'on transforme  $x$  en  $-x$ , cette équation se transforme comme suit :

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \varphi(-x)}{d(-x)^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(-x)) \varphi(-x) &= 0 \\ \Rightarrow \frac{d^2 \varphi(-x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) \varphi(-x) &= 0 \end{aligned}$$

On constate que  $\varphi(x)$  et  $\varphi(-x)$  sont toutes deux des fonctions d'onde propres associées à la même valeur de l'énergie  $E$ . On peut alors construire, deux nouvelles fonctions d'onde propres :

$$\begin{cases} \varphi_s(x) = \gamma(\varphi(x) + \varphi(-x)) \\ \varphi_a(x) = \gamma(\varphi(x) - \varphi(-x)) \end{cases}$$

- $\varphi_s(x)$  est une fonction paire de  $x$  (fonction d'onde propre symétrique)
- $\varphi_a(x)$  est impaire (fonction d'onde propre antisymétrique).

### II-3) Etats liés

Les états liés de la particule quantique correspondent à  $0 \leq E \leq V_0$ .

Les fonctions d'ondes doivent vérifier :

$$\begin{cases} \text{Région II} : \frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \varphi(x) = 0 \\ \text{Région I et III} : \frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \underbrace{(E - V_0)}_{<0} \varphi(x) = 0 \end{cases}$$

Posons :

$$\begin{cases} k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E} \\ q = \sqrt{-\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0)} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \text{Région II} : \frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} + k^2 \varphi(x) = 0 \\ \text{Région I et III} : \frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} - q^2 \varphi(x) = 0 \end{cases}$$

$$\Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \text{Région I : } \varphi_s(x) = A_1 e^{qx} + B_1 e^{-qx} \\ \quad \text{et } \varphi_a(x) = C_1 e^{qx} + D_1 e^{-qx} \\ \text{Région III : } \varphi_s(x) = A_1 e^{-qx} + B_1 e^{qx} \\ \quad \text{et } \varphi_a(x) = -C_1 e^{-qx} - D_1 e^{qx} \\ \text{Région II : } \varphi_s(x) = A_2 \cos(kx) = \varphi_s(-x) \\ \quad \text{et } \varphi_a(x) = C_2 \sin(kx) = -\varphi_a(-x) \end{array} \right.$$

La fonction d'onde propre ne peut pas diverger :

- En  $x \rightarrow -\infty$ , dans la région I
- En  $x \rightarrow +\infty$ , dans la région III

D'où :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Région I : } \varphi_s(x) = A_1 e^{qx} \text{ et } \varphi_a(x) = C_1 e^{qx} \\ \text{Région III : } \varphi_s(x) = A_1 e^{-qx} \text{ et } \varphi_a(x) = -C_1 e^{-qx} \\ \text{Région II : } \varphi_s(x) = A_2 \cos(kx) \text{ et } \varphi_a(x) = C_2 \sin(kx) \end{array} \right.$$

On admet la continuité de  $\varphi$  et  $\frac{d\varphi}{dx}$  aux limites qui provient de l'équation de Schrödinger d'où :

$$\left\{ \begin{array}{l} \varphi_s\left(-\frac{a}{2}\right) = A_1 e^{-\frac{qa}{2}} = A_2 \cos\left(\frac{ka}{2}\right) \\ \left.\frac{d\varphi_s}{dx}\right|_{-\frac{a}{2}} = qA_1 e^{-\frac{qa}{2}} = -kA_2 \sin\left(-\frac{ka}{2}\right) \end{array} \right.$$

On fait le rapport d'où :

$$q = k \tan\left(\frac{ka}{2}\right)$$

Avec  $\varphi_a(x)$  on obtient :

$$\left\{ \begin{array}{l} \varphi_a\left(-\frac{a}{2}\right) = -C_1 e^{-\frac{qa}{2}} = C_2 \sin\left(-\frac{ka}{2}\right) \\ \left.\frac{d\varphi_a}{dx}\right|_{-\frac{a}{2}} = -qC_1 e^{-\frac{qa}{2}} = kA_2 \cos\left(-\frac{ka}{2}\right) \end{array} \right.$$

On fait le rapport d'où :

$$q = -k \cotan\left(\frac{ka}{2}\right)$$

Posons :

$$\begin{cases} X = \frac{ka}{2} \\ Y = \frac{qa}{2} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} Y = X \tan(X) \\ Y = -X \cotan(X) \end{cases}$$

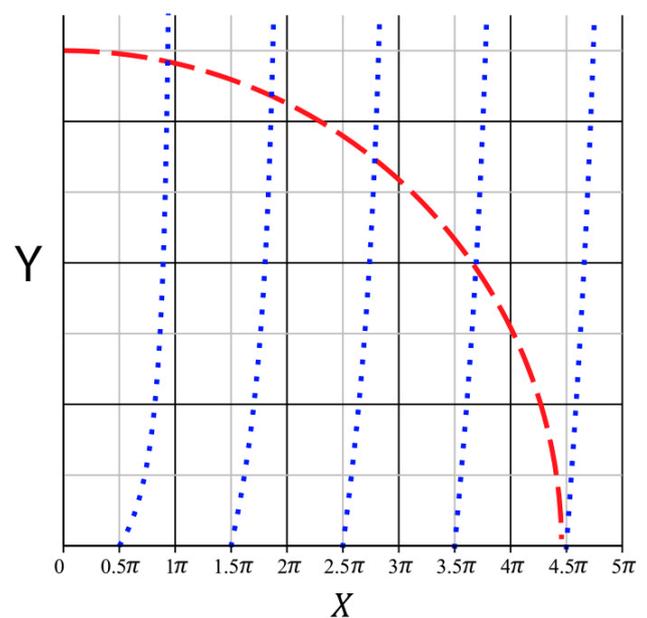
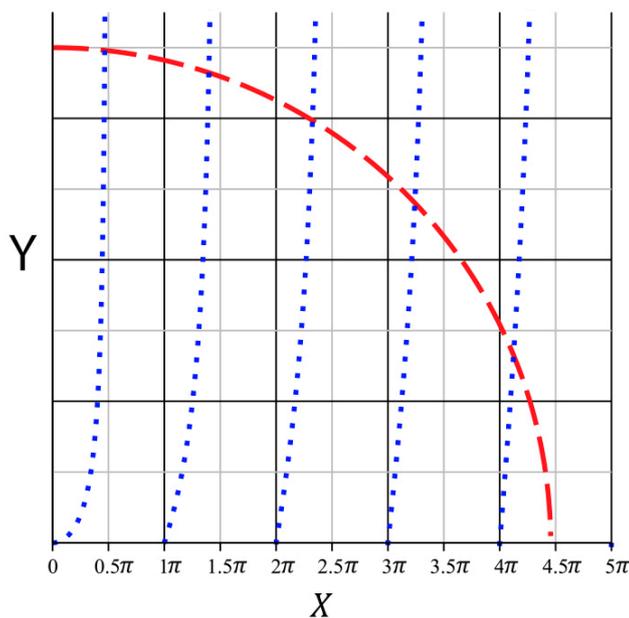
De plus :

$$k^2 + q^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}$$

$$\Rightarrow X^2 + Y^2 = R^2 = \frac{ma^2V_0}{2\hbar^2}$$

Il s'agit donc de trouver les intersections de ce cercle d'équation  $X^2 + Y^2 = R^2$  avec les courbes d'équation  $Y = X \tan(X)$  et  $Y = -X \cotan(X)$

Pour une largeur du puits « a » donnée, ces intersections sont en nombre fini.



*Solutions pour  $X = \frac{ka}{2}$  et  $Y = \frac{qa}{2}$  dans le cas des solutions symétriques à gauche et antisymétriques à droite. Sur notre exemple on a :*

$$X_n = \{0,49\pi ; 0,95\pi ; 1,4\pi ; \dots ; 4,1\pi\} \text{ soit neuf valeurs.}$$

## II-4) Etats de diffusion

Ces états correspondent à la situation où  $E \geq V_0$ . La particule quantique n'est alors pas confinée, elle est délocalisée dans tout l'espace.

Les solutions stationnaires de l'équation de Schrödinger sont des fonctions bornées (sinusoïdes) et toutes les valeurs de  $E \geq V_0$  sont permises. Il n'y a plus de quantification de l'énergie pour de tels états de diffusion.

Les énergies des états de diffusion (non liés) d'une particule dans un puits fini de potentiel de forme quelconque, peuvent prendre toutes les valeurs continues possibles avec  $E \geq V_0$ .

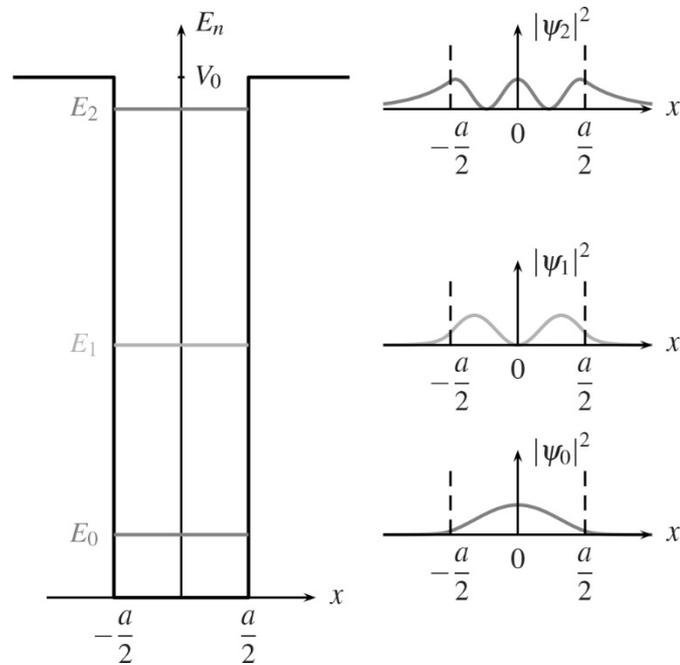
## II-5) Niveaux d'énergie

Les solutions obtenues sont en nombre fini et alternent entre solutions symétriques et antisymétriques. Aux solutions discrètes obtenues pour  $X$ , correspondent des valeurs quantifiées de  $k$  donc de l'énergie.

En repérant par un indice  $n$  les solutions obtenues pour  $X$  (avec  $n$  pair pour les solutions symétriques et  $n$  impair pour les solutions antisymétriques), on obtient :

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{2\hbar^2}{ma^2} X_n^2$$

Sur la figure sont tracés les niveaux d'énergie et les densités de probabilité de présence correspondantes pour une valeur de  $V_0$  qui donne trois valeurs de  $E_n$ .



On remarque que le nombre de niveaux d'énergie est fini et que plus le nombre quantique  $n$  est élevé et plus la fonction d'onde propre présente des nœuds.

On n'obtient qu'un seul état lié, symétrique, si  $V_0$  est inférieur à une limite donnée par :

$$\begin{aligned}
 R &< \frac{\pi}{2} \\
 \Leftrightarrow \frac{ma^2V_0}{2\hbar^2} &< \left(\frac{\pi}{2}\right)^2 \\
 \Leftrightarrow V_0 &< \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}
 \end{aligned}$$

## II-6) Ondes évanescentes

La présence d'une particule classique en dehors du puits de potentiel est formellement interdite par la mécanique classique, l'énergie mécanique étant nécessairement supérieure ou égale à l'énergie potentielle. La figure précédente révèle une probabilité de présence non nulle dans les régions I et III. Il s'agit d'un effet purement quantique, qui est lié à la décroissance exponentielle de la fonction d'onde dans ces régions.

Dans la région III, par exemple, la fonction d'onde s'écrit :

$$\begin{cases} \Psi_s(x, t) = A_1 e^{-qx} e^{-i\omega t} \\ \Psi_a(x, t) = C_1 e^{-qx} e^{-i\omega t} \end{cases}$$

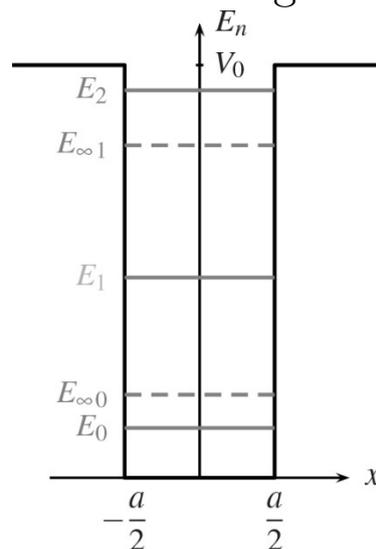
Ces fonctions d'onde ne correspondent pas à des ondes planes progressives mais à des ondes évanescentes. L'atténuation de la densité de probabilité de présence dans les régions I ou III est tout à fait analogue à l'effet de peau étudié dans le cours de physique des ondes.

On peut définir une profondeur de pénétration comme dans le cours sur les ondes telle que :

$$\delta = \frac{1}{q} = \frac{1}{\sqrt{-\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)}} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}$$

On observe que  $\delta$  est d'autant plus grande que l'énergie  $E$  de la particule quantique est proche de  $V_0$ .

## II-7) Abaissement des niveaux d'énergie



On souhaite comparer les valeurs des énergies des états stationnaires du puits de profondeur finie et du puits infiniment profond. Sur la figure, on a représenté les niveaux d'énergie d'un

puits de profondeur finie et les premiers niveaux d'énergie d'un puits de potentiel infiniment profond de même largeur.

On observe sur la figure que le niveau d'énergie du puits de profondeur finie est caractérisé par une valeur de l'énergie inférieure à celle du niveau d'énergie correspondant pour le puits infini de même largeur. L'examen de la figure révèle en outre que cette différence d'énergie est d'autant plus importante que le niveau d'énergie est élevé.

On peut interpréter ce résultat en montrant que l'effet de confinement, que nous avons discuté pour le puits de profondeur infinie, est moins important pour la particule quantique piégée dans un puits de profondeur finie. En effet, en raison de la pénétration de la fonction d'onde en dehors du puits, la particule quantique est piégée dans un puits de largeur effective supérieure à  $a$ .

- Pour le puits infini on a vu :

$$\begin{cases} \Delta x = a \\ \Delta p_x \Delta x \geq \frac{\hbar}{2} \end{cases} \\ \Rightarrow \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2a} \Rightarrow \langle p_x^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4a^2} \Rightarrow E \geq \frac{\hbar^2}{8ma^2}$$

- Pour le puits fini on aura :

$$\Delta x \sim a + 2\delta \\ \Rightarrow E \geq \frac{\hbar^2}{8m(a + 2\delta)^2}$$

Par conséquent :

$$E_{\infty, \min} > E_{\text{fini}, \min}$$

Le niveau d'énergie minimal d'un quanton dans un puits de potentiel fini sera inférieur à celui du même quanton dans un puits de même largeur mais de potentiel infini. Il en sera de même pour les niveaux excités.

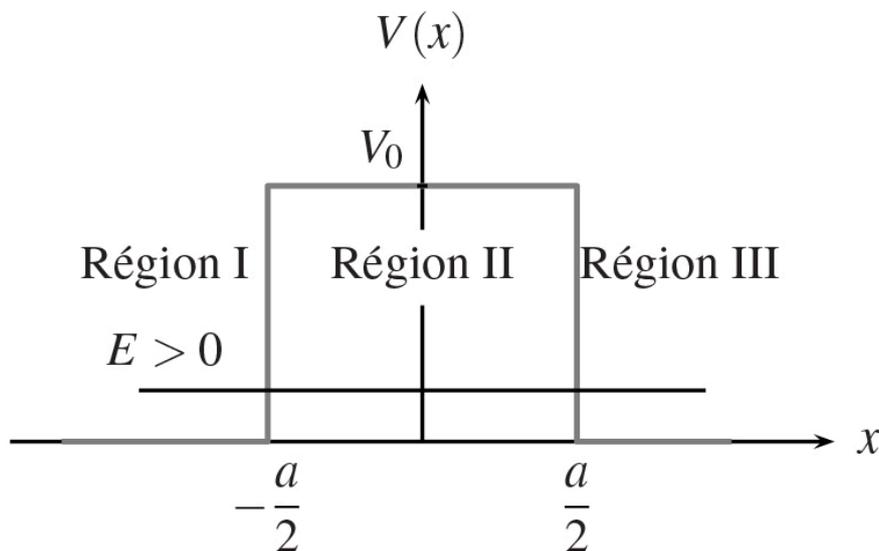
### III – Effet tunnel

#### III-1) Modélisation

L'étude du puits de potentiel de profondeur finie a mis en évidence la pénétration de la fonction d'onde, sous forme d'onde évanescence, dans des régions inaccessibles au sens de la mécanique classique. Nous allons étudier le cas d'une barrière de potentiel où cet effet, porte le nom d'effet tunnel.

Le problème étudié correspond à celui d'un faisceau de particules quantiques incidentes, d'énergie  $E$ , provenant de  $-\infty$  et se dirigeant vers une barrière de potentiel.

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



La région II constitue la barrière de potentiel, de largeur  $a$  et de hauteur  $V_0$ . Du point de vue de la mécanique classique, si une particule classique incidente a une énergie  $E$  supérieure à  $V_0$ , elle peut aller au-delà de la barrière de potentiel et atteindre  $+\infty$ .

Du point de vue de la mécanique quantique, l'étude du puits de potentiel de profondeur finie a montré que, lorsque  $E < V_0$ , la

probabilité de présence est non nulle dans la région classiquement interdite. On peut alors s'attendre à ce que la probabilité de présence soit non nulle à la sortie de la barrière de potentiel. : une particule quantique peut donc traverser la barrière.

### III-2) Fonction d'onde propre

On se limite aux états liés de la particule quantique correspondent à  $0 \leq E \leq V_0$ . Les fonctions d'ondes doivent vérifier :

$$\begin{cases} \text{Région I et III : } \frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \varphi(x) = 0 \\ \text{Région II : } \frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \underbrace{(E - V_0)}_{<0} \varphi(x) = 0 \end{cases}$$

Posons :

$$\begin{cases} k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E} \\ q = \sqrt{-\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0)} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \text{Région I et III : } \frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} + k^2 \varphi(x) = 0 \\ \text{Région II : } \frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} - q^2 \varphi(x) = 0 \end{cases}$$

D'où les solutions :

$$\Rightarrow \begin{cases} \text{Région I : } \varphi(x) = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx} \\ \text{Région III : } \varphi(x) = A_3 e^{ikx} + B_3 e^{-ikx} \\ \text{Région II : } \varphi(x) = A_2 e^{qx} + B_2 e^{-qx} \end{cases}$$

Dans la région III, on a superposition d'une OPPH se propageant dans le sens des  $x$  croissants et d'une OPPH se propageant dans le sens des  $x$  décroissants. Mais, physiquement, dans la région III, il ne peut pas y avoir de particules venant de la droite puisqu'il n'y a pas de sources à  $+\infty$  donc donc  $B_3 = 0$ .

Exploitions les continuités de  $\varphi(x)$  et  $\varphi'(x)$  aux limites.

Soit :

$$\left\{ \begin{array}{l} \varphi\left(-\frac{a}{2}\right) = A_1 e^{-\frac{ika}{2}} + B_1 e^{\frac{ika}{2}} = A_2 e^{-\frac{qa}{2}} + B_2 e^{\frac{qa}{2}} \\ \varphi\left(\frac{a}{2}\right) = A_3 e^{\frac{ika}{2}} = A_2 e^{\frac{qa}{2}} + B_2 e^{-\frac{qa}{2}} \\ \varphi'\left(-\frac{a}{2}\right) = ik\left(A_1 e^{-\frac{ika}{2}} - B_1 e^{\frac{ika}{2}}\right) = q\left(A_2 e^{-\frac{qa}{2}} - B_2 e^{\frac{qa}{2}}\right) \\ \varphi'\left(\frac{a}{2}\right) = ikA_3 e^{\frac{ika}{2}} = q\left(A_2 e^{\frac{qa}{2}} - B_2 e^{-\frac{qa}{2}}\right) \end{array} \right.$$

Nous obtenons quatre équations pour cinq inconnues. Il est donc toujours possible d'exprimer quatre des inconnues en fonction de la cinquième, quelles que soient les valeurs de  $k$  et de  $q$ .

Nous ne voyons donc pas apparaître ici de quantification de l'énergie. C'est dû au fait que la particule quantique n'est pas confinée.

### III-3) Probabilités de réflexion et transmission

Commençons par écrire les expressions des fonctions d'onde des ondes incidente, réfléchie et transmise :

$$\left\{ \begin{array}{l} \psi_i(x, t) = A_1 e^{i(kx - \omega t)} \\ \psi_r(x, t) = B_1 e^{-i(kx + \omega t)} \\ \psi_t(x, t) = A_3 e^{i(kx - \omega t)} \end{array} \right.$$

Les vecteurs densité de courant de probabilité s'expriment ainsi :

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{J}_i(x, t) = \frac{\hbar \vec{k}}{m} |\psi_i(x, t)|^2 = \frac{\hbar \vec{k}}{m} |A_1|^2 \\ \vec{J}_r(x, t) = -\frac{\hbar \vec{k}}{m} |\psi_r(x, t)|^2 = -\frac{\hbar \vec{k}}{m} |B_1|^2 \\ \vec{J}_t(x, t) = \frac{\hbar \vec{k}}{m} |\psi_t(x, t)|^2 = \frac{\hbar \vec{k}}{m} |A_3|^2 \end{array} \right.$$

On définit les coefficients  $R$  de réflexion et  $T$  de transmission donnant les probabilités respectives qu'a la particule de se réfléchir sur la barrière ou de la franchir par :

$$R = \frac{\|\vec{J}_r\|}{\|\vec{J}_i\|} \text{ et } T = \frac{\|\vec{J}_t\|}{\|\vec{J}_i\|}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} R = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2} \\ T = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2} \end{cases}$$

avec  $R+T=1$ , c'est-à-dire que la particule est soit réfléchiée, soit transmise mais sans autre possibilité.

Exprimons  $A_3$  en fonction de  $A_1$  :

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

$$\Rightarrow \begin{cases} (1) + (3) : 2A_1 e^{-\frac{ika}{2}} = A_2 e^{-\frac{qa}{2}} \left(1 + \frac{q}{ik}\right) + B_2 e^{\frac{qa}{2}} \left(1 - \frac{q}{ik}\right) \\ (1) - (3) : 2B_1 e^{\frac{ika}{2}} = A_2 e^{-\frac{qa}{2}} \left(1 - \frac{q}{ik}\right) + B_2 e^{\frac{qa}{2}} \left(1 + \frac{q}{ik}\right) \\ (2) - \frac{ik}{q} (4) : A_3 e^{\frac{ika}{2}} \left(1 - \frac{ik}{q}\right) = 2B_2 e^{-\frac{qa}{2}} \\ (2) + \frac{ik}{q} (4) : A_3 e^{\frac{ika}{2}} \left(1 + \frac{ik}{q}\right) = 2A_2 e^{+\frac{qa}{2}} \end{cases}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} A_1 = \frac{1}{2} e^{i\frac{ka}{2}} \left( A_2 e^{-\frac{qa}{2}} \left(1 + \frac{q}{ik}\right) + B_2 e^{\frac{qa}{2}} \left(1 - \frac{q}{ik}\right) \right) \\ B_2 = \frac{1}{2} e^{\frac{qa}{2}} A_3 e^{\frac{ika}{2}} \left(1 - \frac{ik}{q}\right) \\ A_2 = \frac{1}{2} e^{-\frac{qa}{2}} A_3 e^{\frac{ika}{2}} \left(1 + \frac{ik}{q}\right) \end{cases}$$

$$\Rightarrow A_1 = \frac{1}{2} e^{ika} \left( \frac{1}{2} e^{-\frac{qa}{2}} A_3 e^{\frac{ika}{2}} \left( 1 + \frac{ik}{q} \right) e^{-\frac{qa}{2}} \left( 1 + \frac{q}{ik} \right) + \frac{1}{2} e^{\frac{qa}{2}} A_3 e^{\frac{ika}{2}} \left( 1 - \frac{ik}{q} \right) e^{\frac{qa}{2}} \left( 1 - \frac{q}{ik} \right) \right)$$

$$\Rightarrow A_1 = \frac{1}{4} e^{ika} \left( e^{-qa} A_3 \left( 2 + \frac{ik}{q} + \frac{q}{ik} \right) + e^{qa} A_3 \left( 2 - \frac{ik}{q} - \frac{q}{ik} \right) \right)$$

$$\Rightarrow A_1 = \frac{A_3}{4} e^{ika} \left( 2(e^{+qa} + e^{-qa}) + i \left( \frac{k}{q} - \frac{q}{k} \right) (e^{-qa} - e^{+qa}) \right)$$

$$\Rightarrow A_1 = A_3 e^{ika} \left( ch(qa) - i \left( \frac{k^2 - q^2}{2kq} \right) sh(qa) \right)$$

$$\Rightarrow |A_1|^2 = |A_3|^2 \left( ch^2(qa) + \left( \frac{k^2 - q^2}{2kq} \right)^2 sh^2(qa) \right)$$

Or :  $ch^2 x - sh^2 x = 1$

$$\Rightarrow |A_1|^2 = |A_3|^2 \left( 1 + sh^2(qa) + \left( \frac{k^2 - q^2}{2kq} \right)^2 sh^2(qa) \right)$$

$$\Rightarrow |A_1|^2 = |A_3|^2 \left( 1 + \left[ 1 + \left( \frac{k^2 - q^2}{2kq} \right)^2 \right] sh^2(qa) \right)$$

$$\Rightarrow |A_1|^2 = |A_3|^2 \left( 1 + \left[ \frac{4q^2 k^2 + k^4 + q^4 - 2q^2 k^2}{4q^2 k^2} \right] sh^2(qa) \right)$$

$$\Rightarrow |A_1|^2 = |A_3|^2 \left( 1 + \frac{(k^2 + q^2)^2}{4k^2 q^2} sh^2(qa) \right)$$

$$\Rightarrow T = \frac{1}{\left( 1 + \frac{(k^2 + q^2)^2}{4k^2 q^2} sh^2(qa) \right)}$$

$$\text{Or : } \begin{cases} k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E} \\ q = \sqrt{-\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0)} \end{cases} \Rightarrow k^2 + q^2 = \frac{2m}{\hbar^2} V_0$$

$$\Rightarrow T = \frac{1}{\left( 1 + \frac{\left(\frac{2m}{\hbar^2} V_0\right)^2}{4 \times \frac{2m}{\hbar^2} E \times \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)} \operatorname{sh}^2(qa) \right)}$$

$$\Rightarrow T = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \operatorname{sh}^2(qa)}$$

Ces expressions appellent les commentaires suivants.

- La probabilité de transmission  $T$  n'est jamais nulle : une particule quantique a donc toujours la possibilité de traverser la barrière de potentiel. Cet effet, inexplicable par les lois de la mécanique classique, est purement quantique. Il porte le nom d'effet tunnel. Il est dû à l'existence d'ondes évanescentes dans la barrière de potentiel.

### III-4) Barrière épaisse

Supposons le cas d'une barrière épaisse tel que :  $qa \gg 1$ , alors  $\operatorname{sh}^2(qa) \sim \frac{e^{2qa}}{4} \gg 1$ .

D'où :

$$\Rightarrow T \sim \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-\frac{2a}{\delta}} \text{ où } \delta = \frac{1}{q} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}$$

La probabilité de transmission varie de façon très sensible avec la masse des particules quantiques, la largeur et la hauteur de la barrière, comme l'illustre l'application numérique suivante où l'on a choisi  $E = \frac{V_0}{2}$ .

Particule	M(kg)	$V_0$ (eV)	$a$ (nm)	$\delta$ (nm)	T
Electron	$9,1 \cdot 10^{-31}$	4	0,3	0,1	0,2
Electron	$9,1 \cdot 10^{-31}$	40	0,3	0,04	$10^{-6}$
Electron	$9,1 \cdot 10^{-31}$	4	3	0,1	$10^{-20}$
Proton	$1,6 \cdot 10^{-27}$	4	0,3	0,003	$10^{-63}$
Proton	$1,6 \cdot 10^{-27}$	4	3	0,003	$10^{-628}$
Proton	$1,6 \cdot 10^{-27}$	$10^7$	$10^{-6}$	$2 \cdot 10^{-6}$	0,8

La probabilité de transmission est d'autant plus importante que la barrière de potentiel est d'amplitude faible, de faible largeur et que la masse est plus faible. On constate une fois encore que les effets quantiques sont plus marqués pour les particules les moins massives.

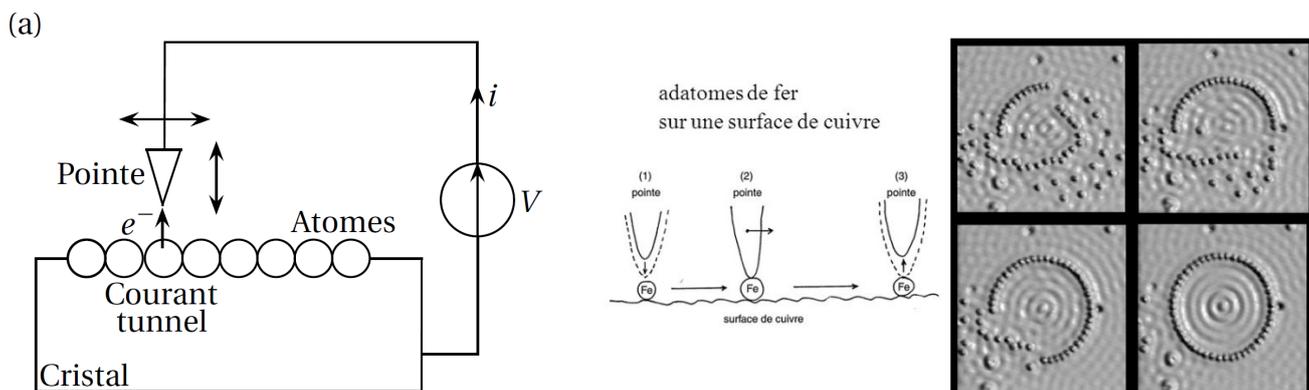
- Pour un électron avec des o.d.g. atomiques : l'électron a une probabilité de passage de 20% : voilà un résultat parfaitement anticlassique !
- Dans les mêmes conditions, un proton a  $T=10^{-63}$  à cause de l'effet de masse. Autrement dit, un proton ou un noyau occupent un site bien déterminé dans un atome ou une molécule.
- À des échelles nucléaires, en prenant la probabilité est de 80% et le proton est délocalisé dans le noyau.

### III-5) Applications de l'effet tunnel

#### a) Microscope à effet tunnel

L'effet tunnel est un phénomène quantique qui présente de nombreuses applications et entre en jeu dans un grand nombre de phénomènes physiques. Parmi l'ensemble des applications de l'effet tunnel, on peut citer la microscopie à effet tunnel qui permet de faire des images à l'échelle atomique d'échantillons cristallins et l'explication de la radioactivité  $\alpha$ .

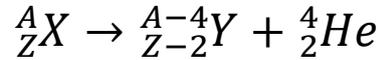
La microscopie à effet tunnel est une technique d'imagerie qui a été mise au point par Gerd Binnig et Heinrich Rohrer dans les années 1980. Le principe de cette technique est basé sur la détection du courant tunnel entre un cristal et une pointe métallique. Dans un microscope à effet tunnel, on déplace une pointe métallique très fine au voisinage de la surface d'un échantillon. Une différence de potentiel  $V$  inférieure au potentiel d'extraction des électrons  $V_e$  est appliquée entre l'échantillon et la pointe. Il apparaît alors un courant qui est dû au passage des électrons de l'échantillon vers la pointe par effet tunnel. La mesure de l'intensité de ce courant durant le balayage de la pointe permet de réaliser une image de l'échantillon à l'échelle atomique.



*Déplacement d'adatoms de fer (anneau de fer) sur une surface de cuivre*

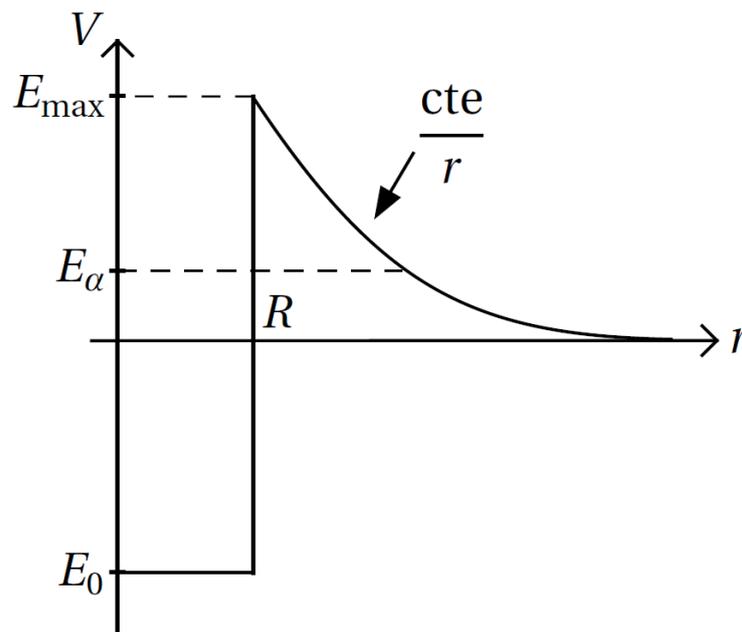
## b) Radioactivité alpha

La radioactivité  $\alpha$  correspond à l'émission d'un atome d'hélium, aussi appelé particule  $\alpha$ , lors d'une désintégration nucléaire. Ce processus se résume par l'équation bilan :



Ce processus est aléatoire et suit une loi cinétique d'ordre 1 en moyenne. Ainsi, le nombre d'atomes radioactifs à l'instant  $t$  s'exprime selon  $N(t) = N_0 e^{-\lambda t}$  avec  $\lambda$  la constante de désintégration radioactive. Une explication de ce phénomène a été donnée par George Gamow en 1928 en invoquant l'effet tunnel. L'approche théorique proposée considère qu'une particule  $\alpha$  préexiste au sein du noyau père. La particule est supposée libre de se déplacer dans le noyau mais y est confinée. Elle ne peut s'en échapper que par effet tunnel, son énergie initiale ne lui permettant pas de passer la barrière de potentiel directement. George Gamow modélise le potentiel ressenti par la particule par :

- Un puits de potentiel traduisant le confinement de la particule dans le noyau père. Ce puits a un rayon  $R = r_0 A^{\frac{1}{3}}$  avec  $r_0 = 1,2 fm$  et une profondeur  $E_0 + E_{max} = 70 MeV$ .



- Un potentiel décrivant une interaction coulombienne en dehors du puits entre la particule  $\alpha$  et le noyau fils modélisée par un potentiel  $V(r) \sim \frac{1}{r}$ .

Grâce à ce modèle, George Gamow a pu calculer des valeurs de  $\lambda$  cohérentes avec celles mesurées expérimentalement et ainsi valider son approche théorique de la radioactivité  $\alpha$ .

