Potentiel quantique variable

Notes de cours

mardi 20 mars 2018

Effet tunnel *expérience de cours*

une onde centimétrique peut se réfléchir totalement sur un dioptre. L'onde évanescente peut être récupérée grâce à un autre prisme : c'est l'effet tunnel.
à installer mardi 20 mars 2018 en salle L028.

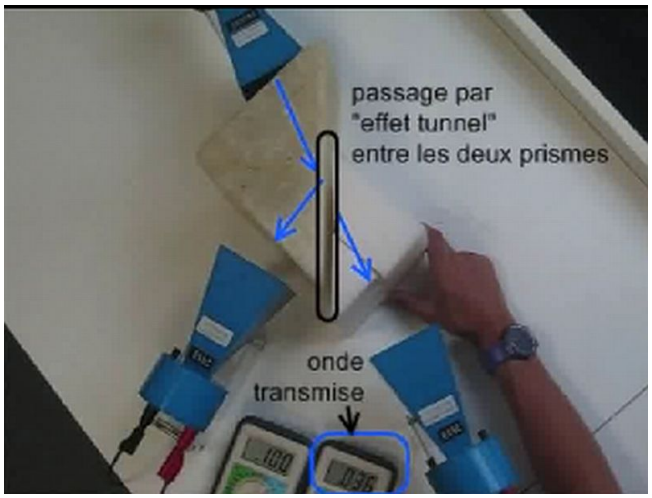


FIGURE 1 – Effet tunnel

I- Marche de potentiel

Étude de distributions de potentiels constants par parties : marche, puits et barrière *schéma*

La figure 2 représente divers types de potentiels constants par parties. À gauche, la discontinuité du potentiel dans le cas d'une marche en $x = 0$. Au centre, les discontinuités du potentiel dans le cas d'un puits de potentiel de profondeur finie. À droite, les discontinuités du potentiel dans le cas d'une barrière de potentiel de hauteur finie.

1 État libre et état lié *exercice*

On s'intéresse à un flux de particules incidentes avec une vitesse $\vec{v} = v\,\vec{u}_x$ dans un potentiel $V(x) = V_0$.
▷ Déterminer la forme des fonctions d'onde $\tilde{\psi}(x,t) = \varphi(x)\,e^{-i\,\frac{E}{\hbar}t}$ des états stationnaires si l'énergie cinétique des particules est $E > V_0$. Interpréter le type de fonction d'ondes obtenue. Proposer une analogie avec une onde classique.
▷ Faire de même si l'énergie cinétique des particules est $E < V_0$.
▷ Que se passe-t-il si $V_0 \to \infty$?

▷ Si $E > V_0$, on cherche les solutions sous la forme $\varphi(x) = \tilde{A}_+\,e^{i\,k\,x} + \tilde{A}_-\,e^{-i\,k\,x}$. Or

$$E = \frac{p^2}{2\,m} + V(x) \text{ et } p = \hbar\,k \Rightarrow E = \frac{\hbar^2\,k^2}{2\,m} + V_0 \Rightarrow k = \frac{\sqrt{2\,m\,(E - V_0)}}{\hbar}$$

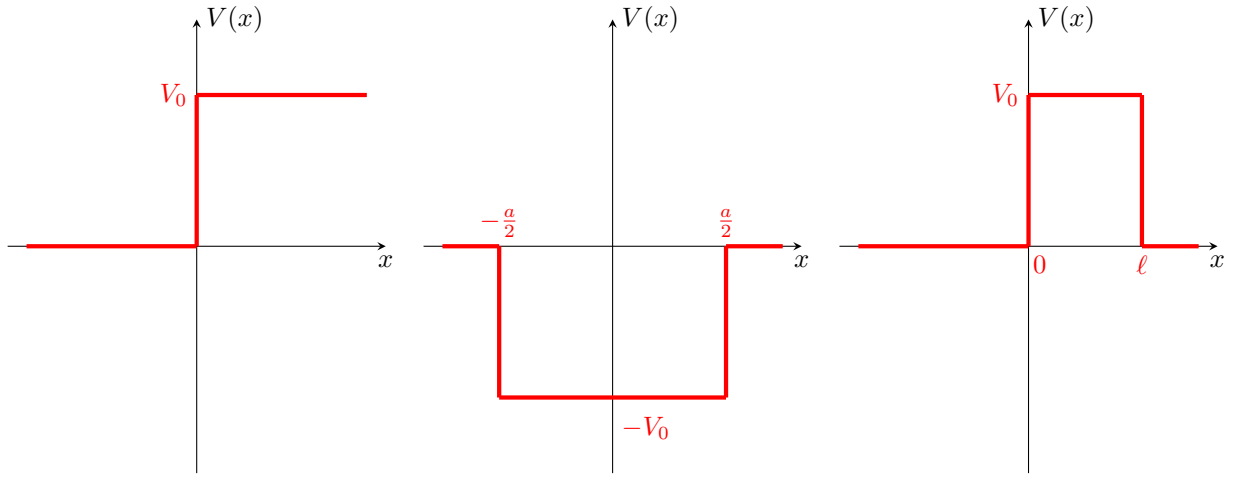


FIGURE 2 – Étude de distributions de potentiels constants par parties : marche, puits et barrière

Il s'agit de vecteurs d'onde réels : les solutions sont des superpositions d'OPPM.
On peut faire l'analogie avec une onde électromagnétique (ou optique) qui se propage avec un vecteur d'onde $k\frac{2\pi}{\lambda_{vide}}n$, l'indice optique n étant d'autant plus grand que $E - V_0$ est plus grand. ▷

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

Cette fois k est imaginaire pur. On peut le ré-écrire :

$$k = i\frac{\sqrt{2m\,(V_0 - E)}}{\hbar} = i\,\rho$$

Du coup : $\varphi(x) = \tilde{A}\,e^{-\rho\,x} + \tilde{A}'\,e^{\rho\,x}$. Il s'agit de vecteurs d'onde imaginaire : les solutions sont des ondes évanescente.
On peut faire l'analogie avec une onde évanescente par exemple dans un métal réel, l'épaisseur de peau δ étant d'autant plus petite que $V_0 - E$ est plus grand.
▷ Si $V_0 \to \infty$, on est dans le cas précédent avec $\delta \to 0$: il s'agit d'un métal parfait.

2 Flux de particules avec une énergie supérieure à une marche de potentiel

exercice

On s'intéresse à un flux de particules incidentes avec une vitesse $\vec{v} = v\,\vec{u}_x$ venant de $x \to -\infty$ sur une marche de potentiel en $x = 0$: si $x < 0$, $V(x) = 0$ et si $x > 0$, $V(x) = V_0 > 0$. On suppose que l'énergie cinétique des particules est $E > V_0$.
▷ Déterminer la forme des fonctions d'onde $\tilde{\psi}\,(x,t) = \varphi(x)\,e^{-i\,\frac{E}{\hbar}t}$ des états stationnaires dans chacun des deux domaines.
▷ En utilisant les conditions de continuité de la fonction $\varphi(x)$ et de sa dérivée $\frac{d\varphi}{dx}$, déterminer parfaitement les fonctions d'onde.
▷ Associer un courant de probabilité $\vec{J} = |\tilde{\psi}\,(x,t)\,|^2\,\frac{\hbar\,\vec{k}}{m}$ aux flux incident, réfléchi et transmis pour déterminer les coefficients R et T de réflexion et transmission des flux.

▷ Pour les états stationnaires $\varphi(x) = \tilde{A}_+\,e^{i\,k\,x} + \tilde{A}_-\,e^{-i\,k\,x}$ dans chacun des deux domaines. Or

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x) \text{ et } p = \hbar\,k \Rightarrow E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V(x) \Rightarrow k = \frac{\sqrt{2m\,(E - V(x))}}{\hbar}$$

du coup :
si $x < 0$, $\varphi(x) = \tilde{A}_i\,e^{i\,k_1\,x} + \tilde{A}_r\,e^{-i\,k_1\,x}$ avec $k_1 = \frac{\sqrt{2\,m\,E}}{\hbar}$,
et si $x > 0$, $\varphi(x) = \tilde{A}_t\,e^{i\,k_2\,x}$ avec $k_2 = \frac{\sqrt{2\,m\,(E - V_0)}}{\hbar}$ (pas de particules incidentes depuis $+\infty$).
▷ La continuité de $\varphi(x)$ en $x = 0$ donne :

$$\tilde{A}_i + \tilde{A}_r = \tilde{A}_t$$

La continuité de $\frac{d\varphi}{dx}$, en $x = 0$ donne :

$$i\,k_1\,\tilde{A}_i - i\,k_1\,\tilde{A}_r = i\,k_2\,\tilde{A}_t \Rightarrow k_1\,\left(\tilde{A}_i - \tilde{A}_r\right) = k_2\,\tilde{A}_t$$

ce qui permet de déterminer $\tilde{A}_r$ et $\tilde{A}_t$ en fonction de $\tilde{A}_i$:

$$\left\{\begin{array}{l} \frac{\tilde{A}_r}{\tilde{A}_i} = \frac{k_1-k_2}{k_1+k_2} \\ \frac{\tilde{A}_t}{\tilde{A}_i} = \frac{2\,k_1}{k_1+k_2} \end{array}\right.$$

▷ On associe un courant de probabilité :
incident $\vec{J}_i = |\tilde{A}_i|^2\,\frac{\hbar\,k_1\,\vec{u}_x}{m}$
réfléchi $\vec{J}_r = -|\tilde{A}_r|^2\,\frac{\hbar\,k_1\,\vec{u}_x}{m}$
et transmis $\vec{J}_t = |\tilde{A}_t|^2\,\frac{\hbar\,k_2\,\vec{u}_x}{m}$.
Le coefficient de réflexion des flux est

$$R = \frac{\|\vec{J}_r\|}{\|\vec{J}_i\|} = \left|\frac{\tilde{A}_r}{\tilde{A}_i}\right|^2 = \left(\frac{k_1-k_2}{k_1+k_2}\right)^2$$

et le coefficient de transmission du flux est

$$T = \frac{\|\vec{J}_t\|}{\|\vec{J}_i\|} = \left(\frac{A_t}{A_i}\right)^2\frac{k_2}{k_1} = \frac{4\,k_1\,k_2}{(k_1+k_2)^2}$$

On vérifie que $R+T=1$.

3 Flux de particules avec une énergie inférieure à une marche de potentiel

exercice

On s'intéresse à un flux de particules incidentes avec une vitesse $\vec{v} = v\,\vec{u}_x$ venant de $x \to -\infty$ sur une marche de potentiel en $x=0$: si $x<0$, $V(x)=0$ et si $x>0$, $V(x)=V_0>0$. On suppose que l'énergie cinétique des particules est $E<V_0$.
▷ Déterminer la forme des fonctions d'onde $\tilde{\psi}\,(x,t) = \varphi(x)\,e^{-i\,\frac{E}{\hbar}\,t}$ des états stationnaires dans chacun des deux domaines.
▷ En utilisant les conditions de continuité de la fonction $\varphi(x)$ et de sa dérivée $\frac{d\varphi}{dx}$, déterminer parfaitement les fonctions d'onde.
▷ Associer un courant de probabilité $\vec{J} = |\tilde{\psi}\,(x,t)\,|^2\,\frac{\hbar\,\vec{k}}{m}$ aux flux incident, réfléchi et transmis pour déterminer les coefficients R et T de réflexion et transmission des flux.

▷ Pour les états stationnaires $\varphi(x) = A_+\,e^{i\,k\,x} + A_-\,e^{-i\,k\,x}$ dans chacun des deux domaines. Or

$$E = \frac{p^2}{2\,m} + V(x) \text{ et } p = \hbar\,k \Rightarrow E = \frac{\hbar^2\,k^2}{2\,m} + V(x) \Rightarrow$$

soit

$$\left\{\begin{array}{c} k_1 = \frac{\sqrt{2\,m\,(E)}}{\hbar} \\ k_2 = i\,\frac{\sqrt{2\,m\,(V_0-E)}}{\hbar} = i\,\rho_2 \end{array}\right.$$

du coup :
si $x<0$, $\varphi(x) = \tilde{A}_i\,e^{i\,k_1\,x} + \tilde{A}_r\,e^{-i\,k_1\,x}$,
et si $x>0$, $\varphi(x) = \tilde{A}_t\,e^{-\rho_2\,x}$ (onde évanescente, pas de solution positive divergente en $+\infty$).
▷ La continuité de $\varphi(x)$ en $x=0$ donne :

$$\tilde{A}_i + \tilde{A}_r = \tilde{A}_t$$

La continuité de $\frac{d\varphi}{dx}$, en $x=0$ donne :

$$i\,k_1\,\tilde{A}_i - i\,k_1\,\tilde{A}_r = -\rho_2\,\tilde{A}_t \Rightarrow k_1\,\left(\tilde{A}_i - \tilde{A}_r\right) = i\,\rho_2\,\tilde{A}_t$$

ce qui permet de déterminer $\tilde{A}_r$ et $\tilde{A}_t$ en fonction de $\tilde{A}_i$:

$$\left\{\begin{array}{l} \frac{\tilde{A}_r}{\tilde{A}_i} = \frac{k_1-i\,\rho_2}{k_1+i\,\rho_2} \\ \frac{\tilde{A}_t}{\tilde{A}_i} = \frac{2\,k_1}{k_1+i\,\rho_2} \end{array}\right.$$

▷ On associe un courant de probabilité :

incident $\vec{J}_i = \left|\tilde{A}_i\right|^2 \frac{\hbar\, k_1\, \vec{u}_x}{m}$
réfléchi $\vec{J}_r = -\left|\tilde{A}_r\right|^2 \frac{\hbar\, k_1\, \vec{u}_x}{m}$
et transmis $\vec{J}_t = \left|\tilde{A}_t\right|^2 \frac{\hbar\, k_2\, \vec{u}_x}{m} = \left|\tilde{A}_t\right|^2 \frac{i\,\hbar\, \rho_2\, \vec{u}_x}{m}$.
Le coefficient de réflexion des flux est

$$R = \frac{\|\vec{J}_r\|}{\|\vec{J}_i\|} = \left|\frac{\tilde{A}_r}{\tilde{A}_i}\right|^2 = \left|\frac{k_1 - i\rho_2}{k_1 + i\rho_2}\right|^2 = 1$$

il y a donc réflexion totale et le coefficient de transmission du flux est

$$T = \frac{\|\vec{J}_t\|}{\|\vec{J}_i\|} = 0$$

On vérifie que $R + T = 1$.

Effet de la marche de potentiel sur un flux de particules *schéma*

La figure 3 représente la réflexion et la transmission ou non due à la marche de potentiel.

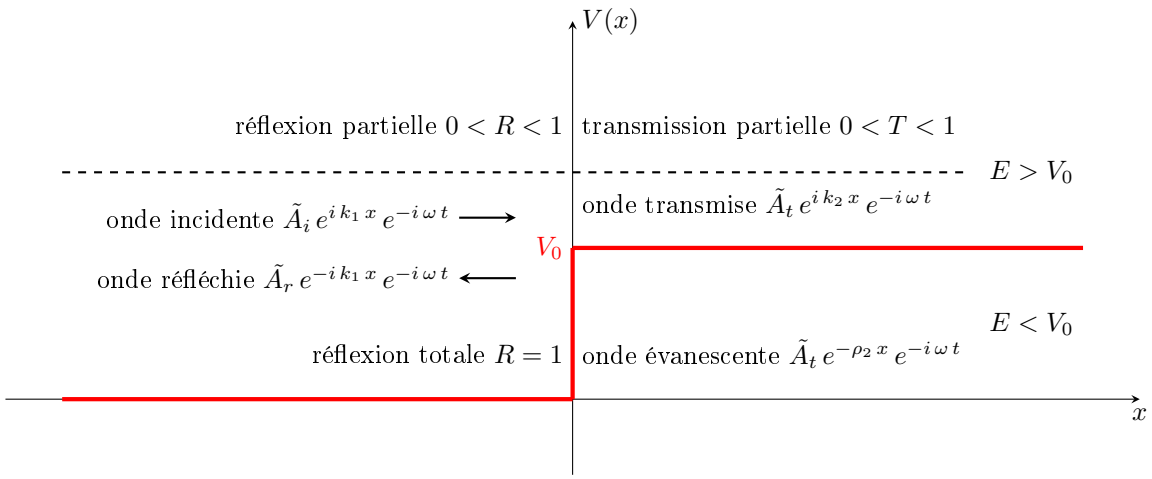


FIGURE 3 – Effet de la marche de potentiel sur un flux de particules

Comparaison des cas quantique et classique pour une marche de potentiel *tableau*

Le tableau 1 présente le récapitulatif des comportements des particules quantiques vis-à-vis d'une marche de potentiel et la comparaison avec des particules classiques.

Cas	$E > V_0$	$E < V_0$
quantique	réflexion et transmission	réflexion mais onde évanescente dans le milieu interdit
classique	transmission	réflexion totale
passage quantique - classique	si $E \gg V_0$, $R \to 0$	si $V_0 \to \infty$, plus d'onde évanescente

TABLE 1 – comparaison classique-quantique pour la marche de potentiel

II- Puits de potentiel de profondeur finie

4 Étude des états liés dans un puits de profondeur finie *exercice*

On s'intéresse à une particule de masse m dans le potentiel suivant :
si $x < -\frac{a}{2}$, $V(x) = V_0 > 0$;
si $x \in \left[-\frac{a}{2}; +\frac{a}{2}\right]$, $V(x) = 0$;
si $x > \frac{a}{2}$, $V(x) = V_0 > 0$.
On suppose que l'énergie cinétique de la particule est $E < V_0$.
▷ Donner la forme des états stationnaires dans les trois domaines. On notera k le vecteur d'onde dans le puits et k' le module du vecteur d'onde hors du puits. La probabilité de présence de la particule ne peut tendre vers l'infini à l'infini, qu'est-ce que cela impose ?
On peut, pour simplifier le problème, considérer séparément les fonctions d'ondes paires et les fonctions d'ondes impaires, dont la réunion donne l'ensemble des états stationnaires.
▷ Donner la forme des états stationnaires symétrique ($\varphi_s(x)$ paire) et antisymétrique ($\varphi_a(x)$ impaire).
▷ Montrer que les conditions aux limites du puits mènent à :
$k' = k \tan\left(\frac{k\,a}{2}\right)$ pour les états symétriques,
$k' = -k \frac{1}{\tan\left(\frac{k\,a}{2}\right)}$ pour les états antisymétriques.
▷ En déduire que cela revient à :
$\alpha \frac{k\,a}{2} = \left|\cos\left(\frac{k\,a}{2}\right)\right|$ avec $\cos\left(\frac{k\,a}{2}\right)\sin\left(\frac{k\,a}{2}\right) > 0$ pour les états symétriques,
et $\alpha \frac{k\,a}{2} = \left|\sin\left(\frac{k\,a}{2}\right)\right|$ avec $\cos\left(\frac{k\,a}{2}\right)\sin\left(\frac{k\,a}{2}\right) < 0$ pour les états antisymétriques
avec α, un facteur qu'on exprimera.

▷ La forme des états stationnaires dans les trois domaines est la suivante :
si $x < -\frac{a}{2}$, $\varphi(x) = A_g\, e^{-k'\,x} + B_g\, e^{k'\,x}$;
si $x \in \left[-\frac{a}{2}; +\frac{a}{2}\right]$, $\varphi(x) = A_c\, e^{-i\,k\,x} + B_c\, e^{i\,k\,x}$;
si $x > \frac{a}{2}$, $\varphi(x) = A_d\, e^{-k'\,x} + B_d\, e^{k'\,x}$;.
Comme la probabilité de présence de la particule ne peut tendre vers l'infini à l'infini, cela impose $A_g = B_d = 0$.
▷ États stationnaires symétriques :
si $x < -\frac{a}{2}$, $\varphi(x) = B\, e^{k'\,x}$;
si $x \in \left[-\frac{a}{2}; +\frac{a}{2}\right]$, $\varphi(x) = A\, \cos(k\,x)$;
si $x > \frac{a}{2}$, $\varphi(x) = B\, e^{-k'\,x}$
et états stationnaires antisymétriques :
si $x < -\frac{a}{2}$, $\varphi(x) = -B'\, e^{k'\,x}$;
si $x \in \left[-\frac{a}{2}; +\frac{a}{2}\right]$, $\varphi(x) = A'\, \sin(k\,x)$;
si $x > \frac{a}{2}$, $\varphi(x) = B'\, e^{-k'\,x}$.
▷ Les conditions de continuité pour les états stationnaires symétriques sont :
en $x = \frac{a}{2}$, $A \cos\left(k\,\frac{a}{2}\right) = B\, e^{-k'\,\frac{a}{2}}$
et pour la dérivée : $-A\,k \sin\left(k\,\frac{a}{2}\right) = -B\,k'\, e^{k'\,\frac{a}{2}}$.
Les conditions de continuité pour les états stationnaires antisymétriques sont :
en $x = \frac{a}{2}$, $A' \sin\left(k\,\frac{a}{2}\right) = B'\, e^{-k'\,\frac{a}{2}}$
et pour la dérivée : $-A'\,k \cos\left(k\,\frac{a}{2}\right) = -B'\,k'\, e^{k'\,\frac{a}{2}}$.
Quand on fait le rapport, on voit donc bien que les conditions aux limites du puits mènent à :
$k' = k \tan\left(\frac{k\,a}{2}\right)$ pour les états symétriques,
$k' = -k \frac{1}{\tan\left(\frac{k\,a}{2}\right)}$ pour les états antisymétriques.
▷ En élevant au carré, et en remarquant que $\tan^2\left(\frac{k\,a}{2}\right) = \frac{1-\cos^2\left(\frac{k\,a}{2}\right)}{\cos^2\left(\frac{k\,a}{2}\right)}$, on trouve :
$k^2 = \left(k^2 - k'^2\right)\cos^2\left(\frac{k\,a}{2}\right)$ pour les états symétriques,
et en remarquant que $\frac{1}{\tan^2\left(\frac{k\,a}{2}\right)} = \frac{1-\sin^2\left(\frac{k\,a}{2}\right)}{\sin^2\left(\frac{k\,a}{2}\right)}$, on trouve :
$k^2 = \left(k^2 - k'^2\right)\sin^2\left(\frac{k\,a}{2}\right)$ pour les états antisymétriques.
Enfin, comme $\frac{\hbar^2\,k^2}{2\,m} = E$ et $\frac{\hbar^2\,k'^2}{2\,m} = E - V_0$, on a aussi $k^2 - k'^2 = \frac{2\,m\,V_0}{\hbar^2}$, soit les formules proposées avec :

$$\alpha = \frac{2\,\hbar}{a\,\sqrt{2\,m\,V_0}}$$

Aide à la solution graphique des états stationnaires liés du puits fini *schéma*

La figure 4 représente les courbes de $\sin\left(\frac{k\,a}{2}\right)$, $|\sin\left(\frac{k\,a}{2}\right)|$, $\cos\left(\frac{k\,a}{2}\right)$, $|\cos\left(\frac{k\,a}{2}\right)|$ et $\alpha\frac{k\,a}{2}$. Il y a une quantification de l'énergie avec une alternance d'états symétrique / anti-symétrique.

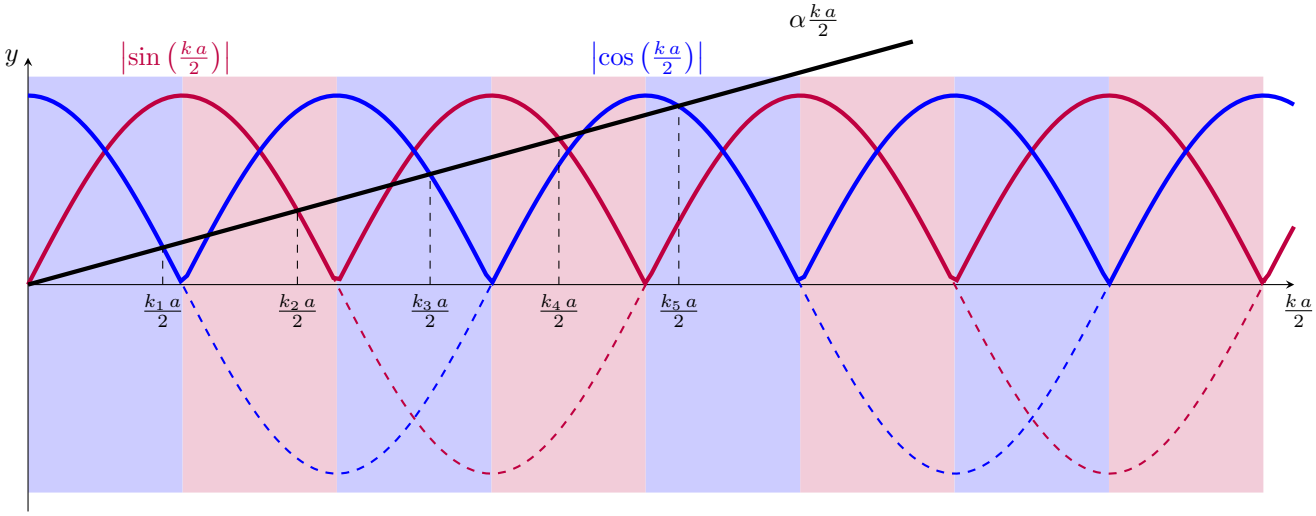


FIGURE 4 – Aide à la solution graphique des états stationnaires liés du puits fini

Fonctions d'onde et énergies dans le puits fini *schéma*

La figure 5 représente les énergies des états stationnaires et probabilités de présence dans le puits fini. Ici, $V_0 = 3,5\frac{\hbar^2}{m\,a^2}$.
On visualise une profondeur de pénétration de la particule en dehors du puits d'autant plus grande que $V_0 - E$ est plus petite.

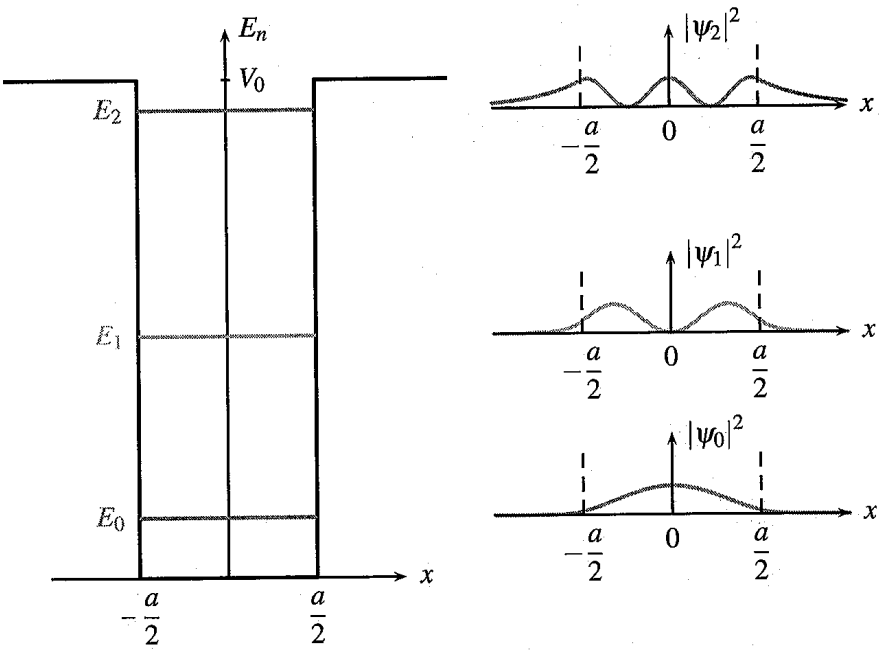


FIGURE 5 – Fonctions d'onde et énergies dans le puits fini

Propriétés des états liés dans le puits fini *à retenir*

Le confinement dans le puits fini se caractérise par :

- une quantification de l'énergie,
- une alternance d'états symétrique / anti-symétrique,
- une profondeur de pénétration de la particule en dehors du puits $\delta = \frac{\hbar}{\sqrt{2\,m\,(V_0-E)}}$,
- un abaissement de l'énergie par rapport au puits infini dû à l'élargissement effectif du puits (par les ondes évanescentes sur les bords du puits).

III- Effet tunnel à travers une barrière de potentiel

5 Flux de particules avec une énergie inférieure à une barrière de potentiel *exercice*

On s'intéresse à un flux de particules incidentes avec une vitesse $\vec{v} = v\,\vec{u}_x$ venant de $x \to -\infty$ sur une barrière de potentiel entre $x = 0$ et $x = \ell$:
si $x < 0$, $V(x) = 0$;
si $x \in [0;\ell]$, $V(x) = V_0 > 0$;
et si $x > \ell$, $V(x) = 0$.
On suppose que l'énergie cinétique des particules est $E < V_0$.
▷ Déterminer la forme des fonctions d'onde $\tilde{\psi}\,(x,t) = \varphi(x)\,e^{-i\,\frac{E}{\hbar}\,t}$ des états stationnaires dans chacun des trois domaines.
▷ Écrire les conditions de continuité de la fonction $\varphi(x)$ et de sa dérivée $\frac{d\varphi}{dx}$.

▷ Pour les états stationnaires $\varphi(x) = A_+\,e^{i\,k\,x} + A_-\,e^{-i\,k\,x}$ dans chacun des deux domaines. Or

$$E = \frac{p^2}{2\,m} + V(x) \text{ et } p = \hbar\,k \Rightarrow E = \frac{\hbar^2\,k^2}{2\,m} + V(x) \Rightarrow$$

soit

$$\left\{\begin{array}{c} k_1 = \frac{\sqrt{2\,m\,E}}{\hbar} = k_3 = k \\ k_2 = i\,\frac{\sqrt{2\,m\,(V_0-E)}}{\hbar} = i\,\rho \end{array}\right.$$

du coup :
si $x < 0$, $\varphi(x) = \tilde{A}_i\,e^{i\,k\,x} + \tilde{A}_r\,e^{-i\,k\,x}$;
si $x \in [0;\ell]$, $\varphi(x) = \tilde{A}_2\,e^{-\rho\,x} + \tilde{A}'_2\,e^{+\rho\,x}$ (onde évanescente) ;
et si $x > \ell$, $\varphi(x) = \tilde{A}_t\,e^{i\,k\,x}$ (pas d'onde venant de $+\infty$).
La continuité de $\varphi(x)$ en $x = 0$ et $x = \ell$ donne :

$$\left\{\begin{array}{c} \tilde{A}_i + \tilde{A}_r = \tilde{A}_2 + \tilde{A}'_2 \\ \tilde{A}_2\,e^{-\rho\,\ell} + \tilde{A}'_2\,e^{+\rho\,\ell} = \tilde{A}_t\,e^{i\,k\,\ell} \end{array}\right.$$

La continuité de $\frac{d\varphi}{dx}$, en $x = 0$ et $x = \ell$ donne :

$$\left\{\begin{array}{c} i\,k\,\tilde{A}_i - i\,k\,\tilde{A}_r = -\rho\,\tilde{A}_2 + \rho\,\tilde{A}'_2 \\ -\rho\,\tilde{A}_2\,e^{-\rho\,\ell} + \rho\,\tilde{A}'_2\,e^{+\rho\,\ell} = i\,k\,\tilde{A}_t\,e^{i\,k\,\ell} \end{array}\right.$$

Comme $i\,k_2 = -\rho$, les dernières relations peuvent se réécrire :

$$\left\{\begin{array}{c} \tilde{A}_i + \tilde{A}_r = \tilde{A}_2 + \tilde{A}'_2 \\ \tilde{A}_i - \tilde{A}_r = \frac{k_2}{k}\left(\tilde{A}_2 - \tilde{A}'_2\right) \\ \tilde{A}_2 + \tilde{A}'_2\,e^{-2\,i\,k_2\,\ell} = \tilde{A}_t\,e^{i\,(k-k_2)\,\ell} \\ \tilde{A}_2 - \tilde{A}'_2\,e^{-2\,i\,k_2\,\ell} = \frac{k}{k_2}\tilde{A}_t\,e^{i\,(k-k_2)\,\ell} \end{array}\right.$$

ce qui permet de déterminer $\tilde{A}_t$ et $\tilde{A}_r$ en fonction de $\tilde{A}_i$.

Coefficient de transmission du flux à travers une barrière de potentiel *à retenir*

La probabilité que le flux d'énergie E traverse "par effet tunnel" la barrière de potentiel de hauteur $V_0 > E$ de largeur ℓ est non nulle, contrairement au cas classique. Le coefficient de transmission du flux, pour peu que $\rho\,\ell = \frac{\sqrt{2\,m\,(V_0-E)}}{\hbar}\ell \gg 1$ est :

$$T \approx \frac{16\,E\,(V_0-E)}{V_0^2}\,e^{-2\,\rho\,\ell}$$

a) Principe du microscope à effet tunnel

Principe du microscope à effet tunnel *schéma*

La figure 6 représente le principe du microscope à effet tunnel, avec deux schémas, l'un à l'échelle macroscopique, l'autre à l'échelle microscopique. L'espace entre l'échantillon et la pointe est un espace isolant, interdit aux électrons, mais dans lequel une onde évanescente existe. On récupère un flux d'électrons (un courant électrique) dont l'intensité dépend de la distance entre la pointe et l'échantillon. Le déplacement de la pointe permet de reconstituer la surface de l'échantillon.

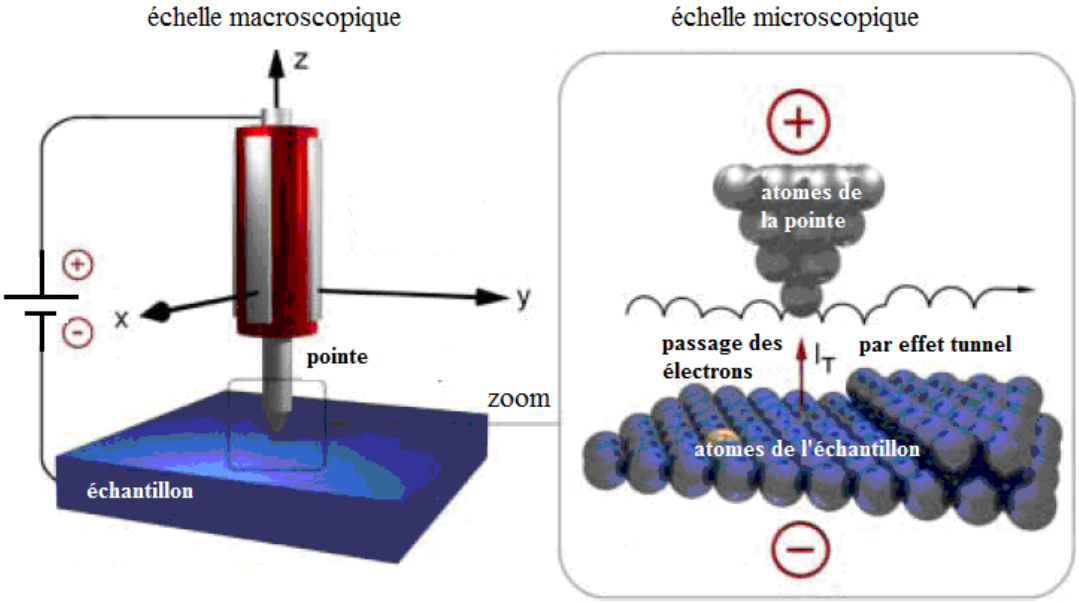


FIGURE 6 – Principe du microscope à effet tunnel

Exemple d'image reconstituée grâce à un microscope à effet tunnel *schéma*

La figure 7 représente un exemple d'image reconstituée grâce à un microscope à effet tunnel. L'intensité électrique passée par effet tunnel entre la pointe et l'échantillon est transformée en image. Ici, il s'agit d'un échantillon de 7 nm d'une surface de $GaAs$ (en bleu) sur laquelle une chaine d'atomes de césium (en rouge) a été déposée. Ref : Geometric and Electronic Properties of Cs Structures on III-V (110) Surfaces : From 1-D and 2-D Insulators to 3-D Metals, L.J. Whitman, J.A. Stroscio, R.A. Dragoset, and R.J. Celotta, Phys. Rev. Lett. 66, 1338 (1991).

b) Le modèle de Gamow de la radioactivité alpha

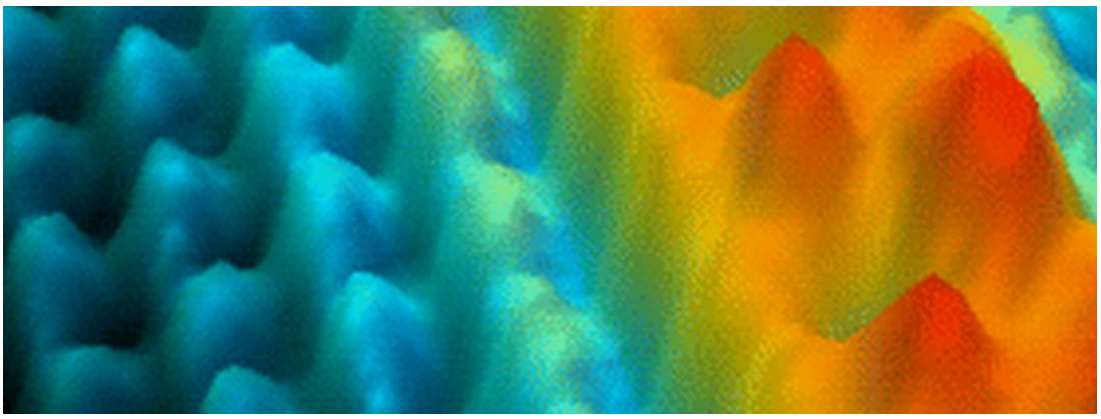


FIGURE 7 – Exemple d'image reconstituée grâce à un microscope à effet tunnel

Allure du potentiel auquel est soumis la particule α selon le modèle de Gamow.

schéma

La figure 8 représente l'évolution du potentiel auquel est soumis une particule α avec la distance r au centre du noyau si le noyau est suffisamment gros. Gamow suppose que des particules α préformées peuvent exister dans le noyau. Une telle particule α est liée au reste du noyau du fait d'un potentiel nucléaire de courte portée R et de profondeur V_0 (interaction forte), et au delà est soumise au potentiel coulombien, répulsif (interaction électromagnétique).

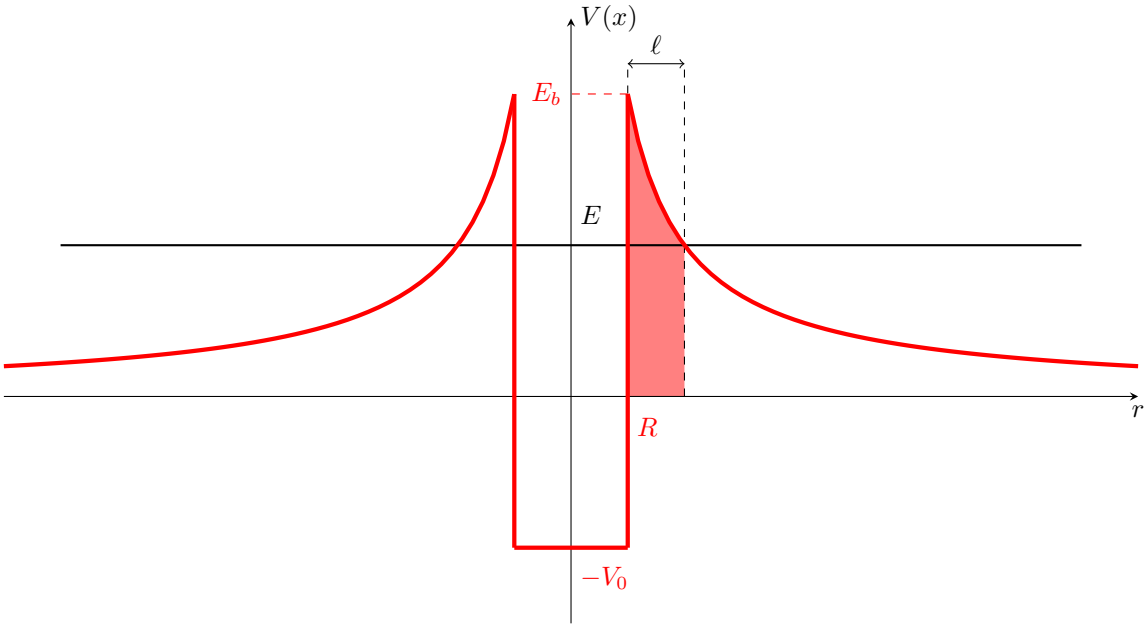


FIGURE 8 – Allure du potentiel auquel est soumis la particule α selon le modèle de Gamow.

6 Calcul de la durée de vie d'un isotope *exercice*

▷ Estimer l'énergie E_n de la particule α à l'intérieur du noyau de rayon R. En déduire sa vitesse, puis la fréquence f à laquelle elle rebondit sur les parois du noyau.
La probabilité de passage à travers la zone interdite par effet tunnel à chaque rebond est :

$$P \approx \frac{16\,E\,(E_b - E)}{V_0^2}\,e^{-2\,\rho\,\ell}$$

avec $\rho\,\ell = \frac{\sqrt{2\,m\,(E_b - E)}}{\hbar}\ell \gg 1$.

▷ A l'intérieur du noyau, la particule a a une énergie cinétique $E_n = E + V_0$ ($V_0 \approx 10$ MeV). On suppose qu'elle se comporte comme une particule libre de vitesse $v = \sqrt{\frac{2\,E_n}{m}}$ qui rebondit sur les parois du noyau à une fréquence

$$f = \frac{v}{2\,R} = \frac{\sqrt{\frac{2\,(E+V_0)}{m}}}{2\,R}$$

▷ La durée de vie moyenne de l'isotope considéré est

$$\tau = f\,P = \frac{\sqrt{\frac{2\,(E+V_0)}{m}}}{2\,R}\,\frac{16\,E\,(E_b - E)}{V_0^2}\,e^{-2\,\rho\,\ell}$$

Temps de vie des radioisotopes en fonction de l'énergie de la particule α émise *schéma*

La figure 9 représente le logarithme du temps de vie qui varie comme l'inverse de la racine de l'énergie de la particule a émise. Il y a un très bon accord entre les résultats expérimentaux et la loi de Geiger-Nuttall : la demi-vie $\lambda = \frac{\ln 2}{\tau} = \frac{-A}{\sqrt{E}} + B$ avec A et B constante.

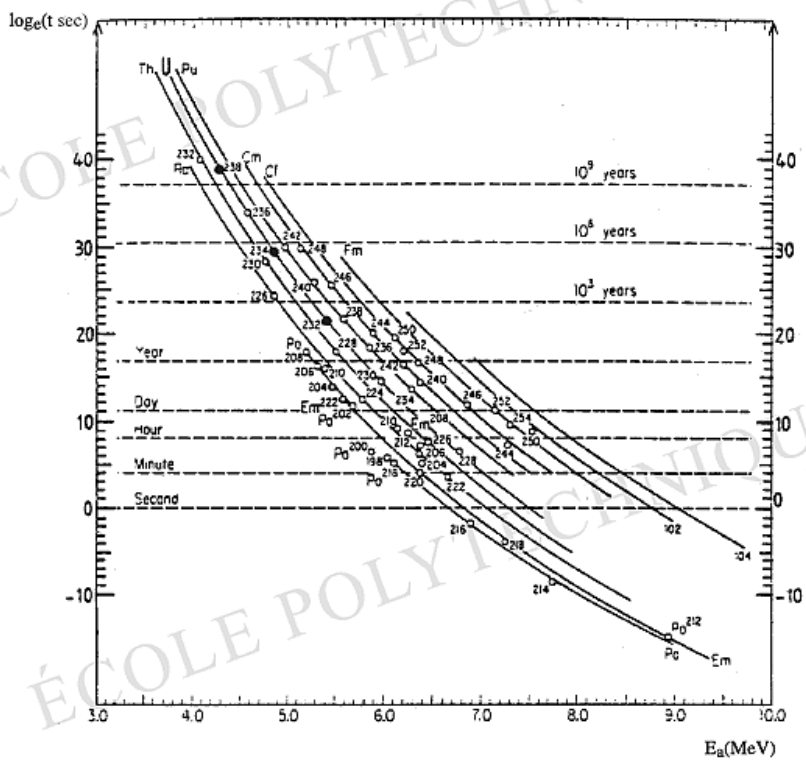


FIGURE 9 – Temps de vie des radioisotopes en fonction de l'énergie de la particule α émise

c) Le modèle du double puits fini en chimie

Premiers états stationnaires du double puits et leur énergie *schéma*

La figure 10 représente les allures du premier état stationnaire dans un double puits (en bleu) infini et fini, et la densité de probabilité de ces états (en rouge).

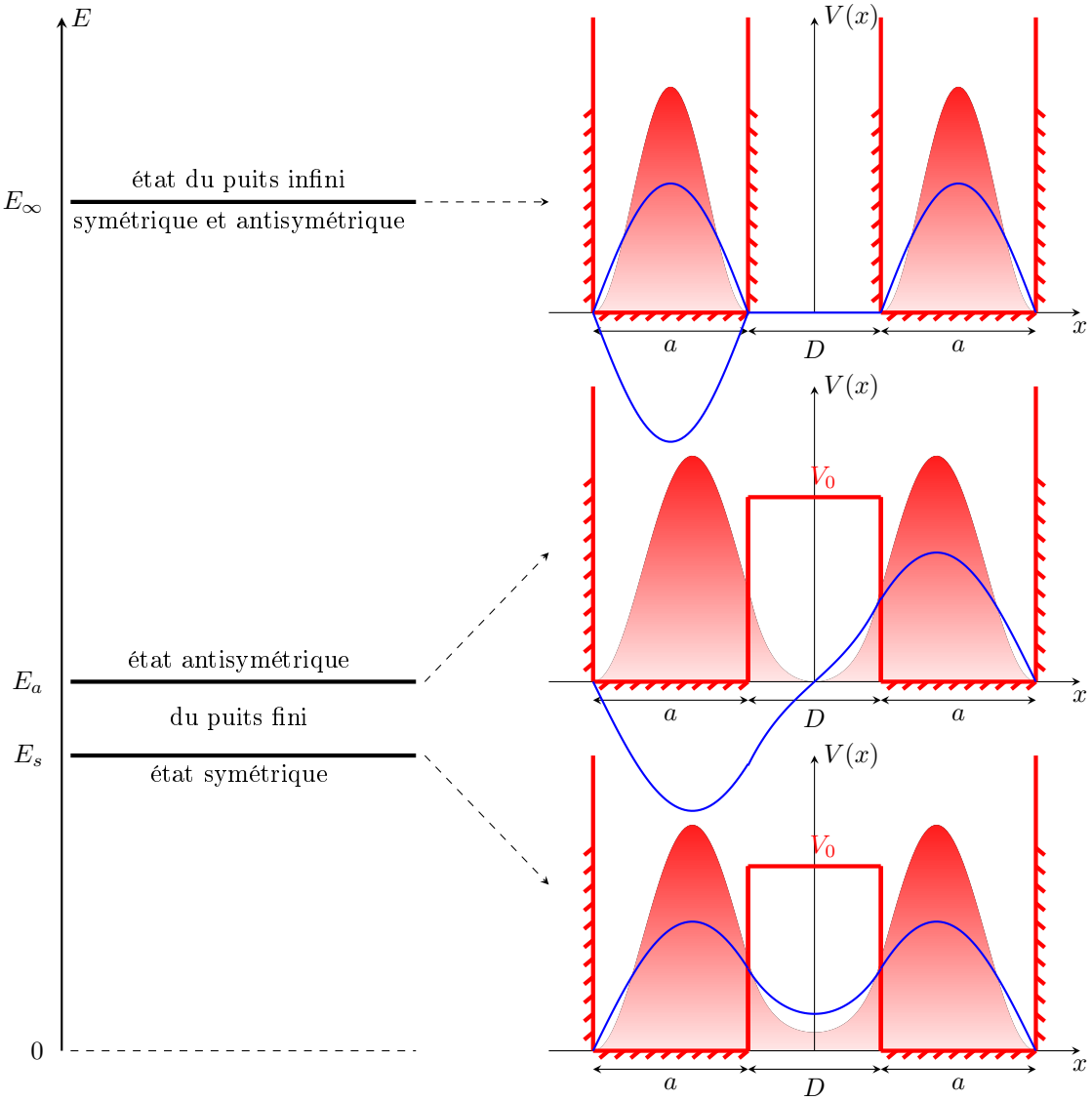


FIGURE 10 – Premiers états stationnaires du double puits et leur énergie

Passage du double puits infini au double puits fini *à retenir*

Le passage du double puits infini au double puits fini se caractérise par :

- la possibilité du passage d'un puits à l'autre par effet tunnel,
- un abaissement de l'énergie dû à l'élargissement effectif du puits,
- une levée de dégénérescence (les deux états symétrique et anti-symétrique ayant des énergies différentes),
- une oscillation possible de la densité de probabilité au cours du temps traduisant le passage par effet tunnel à travers la barrière.

Double puits fini et liaison covalente *s'y retrouver*

La liaison chimique s'effectue par une mise en commun d'un (ou plusieurs) électron entre deux atomes (les deux puits). La délocalisation de l'électron opérée par l'effet tunnel entre les deux puits se traduit par un abaissement de l'énergie du système, donc par une interaction attractive.

Double puits fini et molécule d'ammoniac *schéma*

La figure 11 représente les deux configurations de la molécule d'ammoniac, chacune dans un puits de potentiel. L'effet tunnel permet le passage d'une configuration à l'autre, comme le retournement d'un parapluie. L'oscillation a lieu à une fréquence de 23870 MHz, utilisée dans le MASER à ammoniac, prédécesseur du LASER.

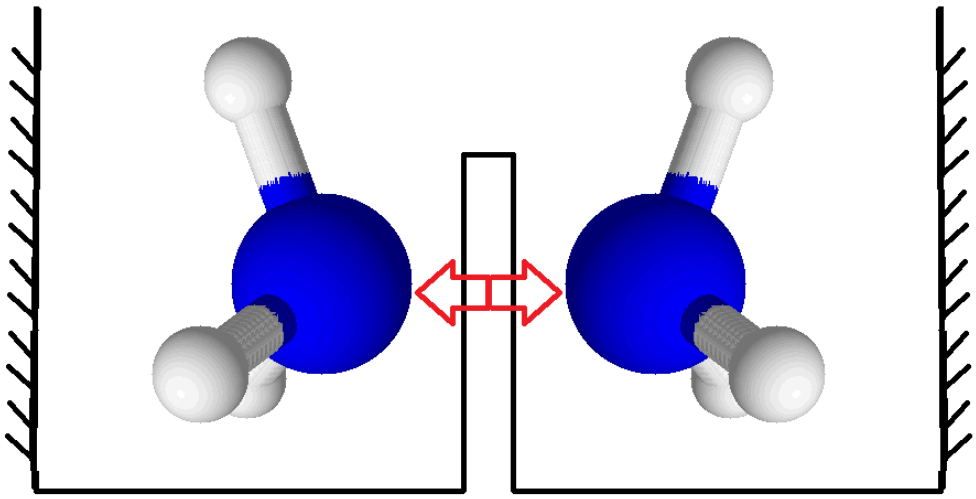


FIGURE 11 – Double puits fini et molécule d'ammoniac

Technique à maîtriser

jeudi 22 mars 2018

I- Les capacités exigibles

ce qu'il faut savoir faire *capacités*

Puits de profondeur finie

- Mettre en place les éléments du modèle : forme des fonctions d'ondes dans les différents domaines.
- Utiliser les conditions aux limites admises : continuité de $\varphi(x)$ et $\frac{d\varphi}{dx}$.
- 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.

Effet tunnel

- Associer l'existence d'une probabilité de traverser une barrière de potentiel et l'existence de deux ondes évanescentes dans la zone classiquement interdite.
- Exprimer les coefficients de transmission et de réflexion associés à la barrière comme des rapports de courants de probabilités.

Approche documentaire de la radioactivité alpha :

- utiliser une expression fournie du coefficient de transmission pour analyser des documents scientifiques ;
- expliquer le rôle de l'effet tunnel dans la radioactivité alpha ;

Approche documentaire de la microscopie à effet tunnel :

- utiliser une expression fournie du coefficient de transmission pour analyser des documents scientifiques ;
- expliquer la sensibilité à la distance de cette méthode d'observation des surfaces.

II- Méthodes

A) Déterminer la forme des fonctions d'onde *méthode*

Pour trouver les fonctions d'onde $\tilde{\psi}(x,t) = \varphi(x)\, e^{-i\,\frac{E}{\hbar}t}$ des états stationnaires, il suffit d'écrire, dans chaque région où le potentiel est constant $V = V_0$, une combinaison linéaire de fonctions exponentielles d'argument réel ou imaginaire suivant que l'énergie est inférieure ou supérieure au potentiel :

- si $E > V_0$: $\varphi(x) = A_+\, e^{i\,k\,x} + A_-\, e^{-i\,k\,x}$
- si $E < V_0$: $\varphi(x) = A_+\, e^{+\rho\,x} + A_-\, e^{-\rho\,x}$

B) Déterminer les amplitudes des fonctions d'onde *méthode*

Il faut ensuite raccorder la fonction d'onde d'une région à l'autre en imposant les conditions de continuité de la fonction et de sa dérivée :

- $\varphi(x)$ continue en $x = x_0$: $\varphi(x = x_0^-) = \varphi(x = x_0^+)$
- $\frac{d\varphi}{dx}$ continue en $x = x_0$: $\frac{d\varphi}{dx}(x = x_0^-) = \frac{d\varphi}{dx}(x = x_0^+)$

NB : si $V_0 \to \infty$, $\varphi(x)$ est continue mais pas $\frac{d\varphi}{dx}$.

III- Exercices

1. Marche de potentiel

1.1) De la marche finie à la marche infinie

1) On s'intéresse à un flux de particules incidentes avec une vitesse $\vec{v} = v\,\vec{u}_x$ venant de $x \to -\infty$ sur une marche de potentiel en $x = 0$: si $x < 0$, $V(x) = 0$ et si $x > 0$, $V(x) = V_0 > 0$. On suppose que l'énergie cinétique des particules est $E < V_0$.

1.a) Déterminer la forme des fonctions d'onde $\tilde{\psi}(x,t) = \varphi(x)\,e^{-i\,\frac{E}{\hbar}t}$ des états stationnaires dans chacun des deux domaines.

1.b) En utilisant les conditions de continuité de la fonction $\varphi(x)$ et de sa dérivée $\frac{d\varphi}{dx}$, déterminer parfaitement les fonctions d'onde.

1.c) Associer un courant de probabilité $\vec{J} = |\tilde{\psi}(x,t)|^2\,\frac{\hbar\,\vec{k}}{m}$ aux flux incident, réfléchi et transmis pour déterminer les coefficients R et T de réflexion et transmission des flux.

2) On fait tendre V_0 vers l'infini.

2.a) Montrer qu'il n'y a plus d'onde évanescente.

2.b) Montrer qu'il y a un déphasage de π.

2.c) φ est-elle continue ? Et sa dérivée ?

1)

1.a) Pour les états stationnaires $\varphi(x) = A_+\,e^{i\,k\,x} + A_-\,e^{-i\,k\,x}$ dans chacun des deux domaines. Or

$$E = \frac{p^2}{2\,m} + V(x) \text{ et } p = \hbar\,k \Rightarrow E = \frac{\hbar^2\,k^2}{2\,m} + V(x) \Rightarrow$$

soit

$$\begin{cases} k_1 = \frac{\sqrt{2\,m\,(E)}}{\hbar} \\ k_2 = i\frac{\sqrt{2\,m\,(V_0 - E)}}{\hbar} = i\,\rho_2 \end{cases}$$

du coup :
si $x < 0$, $\varphi(x) = \tilde{A}_i\,e^{i\,k_1\,x} + \tilde{A}_r\,e^{-i\,k_1\,x}$,
et si $x > 0$, $\varphi(x) = \tilde{A}_t\,e^{-\rho_2\,x}$ (onde évanescente, pas de solution positive divergente en $+\infty$).

1.b) La continuité de $\varphi(x)$ en $x = 0$ donne :

$$\tilde{A}_i + \tilde{A}_r = \tilde{A}_t$$

La continuité de $\frac{d\varphi}{dx}$, en $x = 0$ donne :

$$i\,k_1\,\tilde{A}_i - i\,k_1\,\tilde{A}_r = -\rho_2\,\tilde{A}_t \Rightarrow k_1\,\left(\tilde{A}_i - \tilde{A}_r\right) = i\,\rho_2\,\tilde{A}_t$$

ce qui permet de déterminer $\tilde{A}_r$ et $\tilde{A}_t$ en fonction de $\tilde{A}_i$:

$$\begin{cases} \frac{\tilde{A}_r}{\tilde{A}_i} = \frac{k_1 - i\,\rho_2}{k_1 + i\,\rho_2} \\ \frac{\tilde{A}_t}{\tilde{A}_i} = \frac{2\,k_1}{k_1 + i\,\rho_2} \end{cases}$$

1.c) On associe un courant de probabilité :
incident $\vec{J}_i = \tilde{A}_i^{\,2}\,\frac{\hbar\,k_1\,\vec{u}_x}{m}$
réfléchi $\vec{J}_r = -\tilde{A}_r^{\,2}\,\frac{\hbar\,k_1\,\vec{u}_x}{m}$
et transmis $\vec{J}_t = \tilde{A}_t^{\,2}\,\frac{\hbar\,k_2\,\vec{u}_x}{m} = A_t^2\,\frac{i\,\hbar\,\rho_2\,\vec{u}_x}{m}$.
Le coefficient de réflexion des flux est

$$R = \frac{\|\vec{J}_r\|}{\|\vec{J}_i\|} = \left|\frac{\tilde{A}_r}{\tilde{A}_i}\right|^2 = \left|\frac{k_1 - i\rho_2}{k_1 + i\rho_2}\right|^2 = 1$$

il y a donc réflexion totale et le coefficient de transmission du flux est

$$T = \frac{\|\vec{J_t}\|}{\|\vec{J_i}\|} = 0$$

On vérifie que $R + T = 1$.

2) On fait tendre V_0 vers l'infini.

2.a) Puisque $\rho_2 = \frac{\sqrt{2\,m\,(V_0 - E)}}{\hbar}\infty$, $\tilde{A}_t\, e^{-\rho_2\, x} \to 0$, il n'y a donc plus d'onde évanescente.

2.b) Comme

$$\tilde{A}_r = \frac{k_1 - i\,\rho_2}{k_1 + i\,\rho_2} \to \frac{-i\,\rho_2}{+i\,\rho_2} = -1$$

Il y a donc un déphasage de π.

2.c) φ est continue, mais pas sa dérivée (infinie à droite).

1.2) Passage au cas classique dans le cas de la marche finie

1) On s'intéresse à un flux de particules incidentes avec une vitesse $\vec{v} = v\,\vec{u}_x$ venant de $x \to -\infty$ sur une marche de potentiel en $x = 0$: si $x < 0$, $V(x) = 0$ et si $x > 0$, $V(x) = V_0 > 0$. On suppose que l'énergie cinétique des particules est $E > V_0$.

1.a) Déterminer la forme des fonctions d'onde $\tilde{\psi}\,(x,t) = \varphi(x)\, e^{-i\,\frac{E}{\hbar}\,t}$ des états stationnaires dans chacun des deux domaines.

1.b) En utilisant les conditions de continuité de la fonction $\varphi(x)$ et de sa dérivée $\frac{d\varphi}{dx}$, déterminer parfaitement les fonctions d'onde.

1.c) Associer un courant de probabilité $\vec{J} = |\tilde{\psi}\,(x,t)\,|^2\,\frac{\hbar\,\vec{k}}{m}$ aux flux incident, réfléchi et transmis pour déterminer les coefficients R et T de réflexion et transmission des flux.

2) Montrer qu'on retrouve les résultats de la mécanique classique si $E \gg V_0$.

1) Cas quantique

1.a) Pour les états stationnaires $\varphi(x) = \tilde{A}_+\, e^{i\,k\,x} + \tilde{A}_-\, e^{-i\,k\,x}$ dans chacun des deux domaines. Or

$$E = \frac{p^2}{2\,m} + V(x) \text{ et } p = \hbar\,k \Rightarrow E = \frac{\hbar^2\,k^2}{2\,m} + V(x) \Rightarrow k = \frac{\sqrt{2\,m\,(E - V(x))}}{\hbar}$$

du coup :
si $x < 0$, $\varphi(x) = \tilde{A}_i\, e^{i\,k_1\,x} + \tilde{A}_r\, e^{-i\,k_1\,x}$ avec $k_1 = \frac{\sqrt{2\,m\,E}}{\hbar}$,
et si $x > 0$, $\varphi(x) = \tilde{A}_t\, e^{i\,k_2\,x}$ avec $k_2 = \frac{\sqrt{2\,m\,(E - V_0)}}{\hbar}$ (pas de particules incidentes depuis $+\infty$).

1.b) La continuité de $\varphi(x)$ en $x = 0$ donne :

$$\tilde{A}_i + \tilde{A}_r = \tilde{A}_t$$

La continuité de $\frac{d\varphi}{dx}$, en $x = 0$ donne :

$$i\,k_1\,\tilde{A}_i - i\,k_1\,\tilde{A}_r = i\,k_2\,\tilde{A}_t \Rightarrow k_1\,\left(\tilde{A}_i - \tilde{A}_r\right) = k_2\,\tilde{A}_t$$

ce qui permet de déterminer $\tilde{A}_r$ et $\tilde{A}_t$ en fonction de $\tilde{A}_i$:

$$\begin{cases} \frac{\tilde{A}_r}{\tilde{A}_i} = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \\ \frac{\tilde{A}_t}{\tilde{A}_i} = \frac{2\,k_1}{k_1 + k_2} \end{cases}$$

1.c) On associe un courant de probabilité :
incident $\vec{J_i} = |\tilde{A}_i|^2\,\frac{\hbar\,k_1\,\vec{u}_x}{m}$
réfléchi $\vec{J_r} = -|\tilde{A}_r|^2\,\frac{\hbar\,k_1\,\vec{u}_x}{m}$
et transmis $\vec{J_t} = |\tilde{A}_t|^2\,\frac{\hbar\,k_2\,\vec{u}_x}{m}$.
Le coefficient de réflexion des flux est

$$R = \frac{\|\vec{J_r}\|}{\|\vec{J_i}\|} = \left|\frac{\tilde{A}_r}{\tilde{A}_i}\right|^2 = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2$$

et le coefficient de transmission du flux est

$$T = \frac{\|\vec{J}_t\|}{\|\vec{J}_i\|} = \left(\frac{A_t}{A_i}\right)^2 \frac{k_2}{k_1} = \frac{4\,k_1\,k_2}{(k_1+k_2)^2}$$

On vérifie que $R + T = 1$.

2) Cas classique

Si $E \gg V_0$, $k_2 = \frac{\sqrt{2\,m\,(E-V_0)}}{\hbar} \approx= \frac{\sqrt{2\,m\,(E)}}{\hbar} = k_1$ donc

$$\begin{cases} \frac{\tilde{A}_r}{\tilde{A}_i} = \frac{k_1-k_2}{k_1+k_2} = 0 \\ \frac{\tilde{A}_t}{\tilde{A}_i} = \frac{2\,k_1}{k_1+k_2} = 1 \end{cases}$$

Pas de réflexion, tout est transmis.

1.3) Profondeur de pénétration dans un milieu interdit

1) On s'intéresse à un flux de particules incidentes avec une vitesse $\vec{v} = v\,\vec{u}_x$ venant de $x \to -\infty$ sur une marche de potentiel en $x = 0$: si $x < 0$, $V(x) = 0$ et si $x > 0$, $V(x) = V_0 > 0$. On suppose que l'énergie cinétique des particules est $E < V_0$.

1.a) Déterminer la forme des fonctions d'onde $\tilde{\psi}\,(x,t) = \varphi(x)\,e^{-i\,\frac{E}{\hbar}t}$ des états stationnaires dans chacun des deux domaines.

1.b) En utilisant les conditions de continuité de la fonction $\varphi(x)$ et de sa dérivée $\frac{d\varphi}{dx}$, déterminer parfaitement les fonctions d'onde.

1.c) Associer un courant de probabilité $\vec{J} = |\tilde{\psi}\,(x,t)\,|^2\,\frac{\hbar\,\vec{k}}{m}$ aux flux incident, réfléchi et transmis pour déterminer les coefficients R et T de réflexion et transmission des flux.

2) En déduire l'épaisseur caractéristique de pénétration de l'onde dans le milieu interdit.

3) Que devient cette épaisseur si $V_0 \to \infty$?

1)

1.a) Pour les états stationnaires $\varphi(x) = A_+\,e^{i\,k\,x} + A_-\,e^{-i\,k\,x}$ dans chacun des deux domaines. Or

$$E = \frac{p^2}{2\,m} + V(x) \text{ et } p = \hbar\,k \Rightarrow E = \frac{\hbar^2\,k^2}{2\,m} + V(x) \Rightarrow$$

soit

$$\begin{cases} k_1 = \frac{\sqrt{2\,m\,(E)}}{\hbar} \\ k_2 = i\,\frac{\sqrt{2\,m\,(V_0-E)}}{\hbar} = i\,\rho_2 \end{cases}$$

du coup :
si $x < 0$, $\varphi(x) = \tilde{A}_i\,e^{i\,k_1\,x} + \tilde{A}_r\,e^{-i\,k_1\,x}$,
et si $x > 0$, $\varphi(x) = \tilde{A}_t\,e^{-\rho_2\,x}$ (onde évanescente, pas de solution positive divergente en $+\infty$).

1.b) La continuité de $\varphi(x)$ en $x = 0$ donne :

$$\tilde{A}_i + \tilde{A}_r = \tilde{A}_t$$

La continuité de $\frac{d\varphi}{dx}$, en $x = 0$ donne :

$$i\,k_1\,\tilde{A}_i - i\,k_1\,\tilde{A}_r = -\rho_2\,\tilde{A}_t \Rightarrow k_1\,\left(\tilde{A}_i - \tilde{A}_r\right) = i\,\rho_2\,\tilde{A}_t$$

ce qui permet de déterminer $\tilde{A}_r$ et $\tilde{A}_t$ en fonction de $\tilde{A}_i$:

$$\begin{cases} \frac{\tilde{A}_r}{\tilde{A}_i} = \frac{k_1-i\,\rho_2}{k_1+i\,\rho_2} \\ \frac{\tilde{A}_t}{\tilde{A}_i} = \frac{2\,k_1}{k_1+i\,\rho_2} \end{cases}$$

1.c) On associe un courant de probabilité :
incident $\vec{J}_i = \tilde{A}_i^{\,2}\,\frac{\hbar\,k_1\,\vec{u}_x}{m}$
réfléchi $\vec{J}_r = -\tilde{A}_r^{\,2}\,\frac{\hbar\,k_1\,\vec{u}_x}{m}$

et transmis $\vec{J_t} = \tilde{A_t}^2 \frac{\hbar\, k_2\, \vec{u}_x}{m} = A_t^2 \frac{i\,\hbar\,\rho_2\,\vec{u}_x}{m}$.
Le coefficient de réflexion des flux est

$$R = \frac{\|\vec{J_r}\|}{\|\vec{J_i}\|} = \left|\frac{\tilde{A}_r}{\tilde{A}_i}\right|^2 = \left|\frac{k_1 - i\rho_2}{k_1 + i\rho_2}\right|^2 = 1$$

il y a donc réflexion totale et le coefficient de transmission du flux est

$$T = \frac{\|\vec{J_t}\|}{\|\vec{J_i}\|} = 0$$

On vérifie que $R + T = 1$.

2) L'épaisseur de pénétration est : $\frac{1}{\rho_2} = \frac{\hbar}{\sqrt{2\,m\,(V_0 - E)}}$.

3) Elle tend vers 0 si $V_0 \to \infty$.

1.4) Analogie de la marche de potentiel avec l'optique

On s'intéresse à un flux de particules incidentes avec une vitesse $\vec{v} = v\,\vec{u}_x$ venant de $x \to -\infty$ sur une marche de potentiel en $x = 0$: si $x < 0$, $V(x) = V_1$ et si $x > 0$, $V(x) = V_2$. On suppose que l'énergie cinétique des particules est $E > V_1$ et V_2.

1) Proposer une analogie pour une onde électromagnétique qui se propage dans l'air ou dans le verre.

1) Si $E > V_0$, on cherche les solutions sous la forme $\varphi(x) = \tilde{A_+}\, e^{i\,k\,x} + \tilde{A_-}\, e^{-i\,k\,x}$. Or

$$E = \frac{p^2}{2\,m} + V(x) \text{ et } p = \hbar\,k \Rightarrow E = \frac{\hbar^2\,k^2}{2\,m} + V_0 \Rightarrow k = \frac{\sqrt{2\,m\,(E - V_0)}}{\hbar}$$

Il s'agit de vecteurs d'onde réels : les solutions sont des superpositions d'OPPM.
On peut faire l'analogie avec une onde électromagnétique (ou optique) qui se propage avec un vecteur d'onde $k = \frac{2\,\pi}{\lambda_{vide}} n$, l'indice optique n étant d'autant plus grand que $E - V_0$ est plus grand.

Donc, si $V_1 < V_2$, $n_1 > n_2$. On peut considérer un dioptre verre - air.
Au contraire, $V_1 > V_2$, $n_1 < n_2$. On peut considérer un dioptre air - verre.

2. Puits fini

2.5) Nombre d'états liés dans le puits fini

On s'intéresse à une particule de masse m dans le potentiel suivant :
si $x < -\frac{a}{2}$, $V(x) = V_0 > 0$;
si $x \in \left[-\frac{a}{2}; +\frac{a}{2}\right]$, $V(x) = 0$;
si $x > \frac{a}{2}$, $V(x) = V_0 > 0$.
On suppose que l'énergie cinétique de la particule est $E < V_0$.
On note k le vecteur d'onde dans le puits et k' le module du vecteur d'onde hors du puits.
On admet que les conditions aux limites du puits mènent à :
$\alpha \frac{k\,a}{2} = \left|\cos\left(\frac{k\,a}{2}\right)\right|$ avec $\cos\left(\frac{k\,a}{2}\right) \sin\left(\frac{k\,a}{2}\right) > 0$ pour les états symétriques,
et $\alpha \frac{k\,a}{2} = \left|\sin\left(\frac{k\,a}{2}\right)\right|$ avec $\cos\left(\frac{k\,a}{2}\right) \sin\left(\frac{k\,a}{2}\right) < 0$ pour les états antisymétriques.
avec α, un facteur positif.

1) Faire un tracé en fonction de $\frac{k\,a}{2}\frac{k\,a}{2}$ de plusieurs courbes qui permette de trouver les solutions k des précédentes conditions.

2) Interprétation :

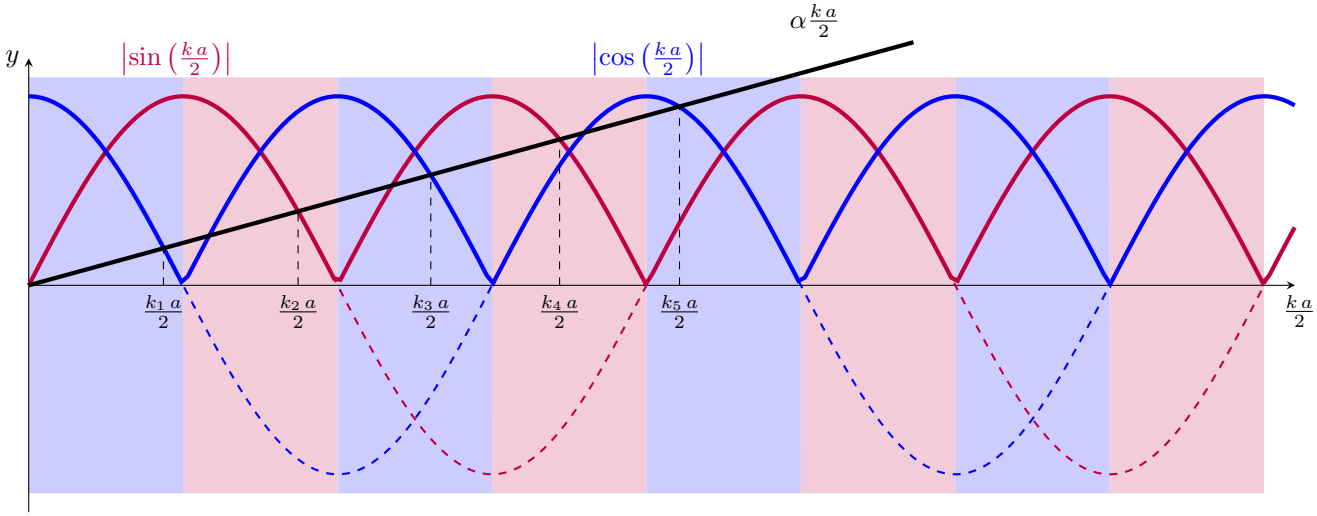
2.a) Évaluer le nombre de solutions.

2.b) Montrer que, quel que soit α, il existe au moins une solution. De quel type est-elle ?

On s'intéresse à une particule de masse m dans le potentiel suivant :
si $x < -\frac{a}{2}$, $V(x) = V_0 > 0$;
si $x \in \left[-\frac{a}{2}; +\frac{a}{2}\right]$, $V(x) = 0$;
si $x > \frac{a}{2}$, $V(x) = V_0 > 0$.
On suppose que l'énergie cinétique de la particule est $E < V_0$.

On note k le vecteur d'onde dans le puits et k' le module du vecteur d'onde hors du puits.
On admet que les conditions aux limites du puits mènent à :
$\alpha\frac{k\,a}{2} = \left|\cos\left(\frac{k\,a}{2}\right)\right|$ avec $\cos\left(\frac{k\,a}{2}\right)\,\sin\left(\frac{k\,a}{2}\right) > 0$ pour les états symétriques,
et $\alpha\frac{k\,a}{2} = \left|\sin\left(\frac{k\,a}{2}\right)\right|$ avec $\cos\left(\frac{k\,a}{2}\right)\,\sin\left(\frac{k\,a}{2}\right) < 0$ pour les états antisymétriques.
avec α, un facteur positif.

1) Le tracé en fonction de $\frac{k\,a}{2}\frac{k\,a}{2}$ de plusieurs courbes qui permette de trouver les solutions k des précédentes conditions est le suivant :



2) Interprétation :

2.a) Il s'agit de déterminer quand

$$\alpha\frac{k\,a}{2} = 1 \Leftrightarrow x = \frac{k\,a}{2} = \frac{1}{\alpha}$$

A partir de là, il n'y aura plus de solution possibles. Pour compter les solutions, il suffit de voir combien de segments de longueur $\frac{\pi}{2}$ comporte le segment $[0;x]$, soit un nombre de solutions :

$$N = 1 + \lceil\frac{2}{\alpha\,\pi}\rceil$$

2.b) On voit donc que, quel que soit α, il existe au moins une solution. Sur le graphique, on voit qu'elle est symétrique.

2.6) Analogie du puits fini avec l'optique

On s'intéresse à un flux de particules incidentes avec une vitesse $\vec{v} = v\,\vec{u}_x$ venant de $x \to -\infty$ sur un puits de potentiel :
si $x < -\frac{a}{2}$, $V(x) = V_0$;
si $x \in \left[-\frac{a}{2};+\frac{a}{2}\right]$, $V(x) = 0$;
si $x > \frac{a}{2}$, $V(x) = V_0$.
On suppose que l'énergie cinétique de la particule est $E > V_0 > 0$.

1) Proposer une analogie pour une onde électromagnétique qui se propage dans l'air ou dans le verre.

1) Si $E > V$, on cherche les solutions sous la forme $\varphi(x) = \tilde{A}_+\,e^{i\,k\,x} + \tilde{A}_-\,e^{-i\,k\,x}$. Or

$$E = \frac{p^2}{2\,m} + V(x) \text{ et } p = \hbar\,k \Rightarrow E = \frac{\hbar^2\,k^2}{2\,m} + V \Rightarrow k = \frac{\sqrt{2\,m\,(E-V)}}{\hbar}$$

Il s'agit de vecteurs d'onde réels : les solutions sont des superpositions d'OPPM.
On peut faire l'analogie avec une onde électromagnétique (ou optique) qui se propage avec un vecteur d'onde $k = \frac{2\,\pi}{\lambda_{vide}}n$, l'indice optique n étant d'autant plus grand que $E - V$ est plus grand.

Donc la partie centrale, de potentiel plus faible a un indice plus fort. On peut considérer un dioptre air - verre - air. Il s'agit donc d'une lame de verre dans l'air.

2.7) Coefficient de réflexion sur un puits et analogie avec les interférences

On s'intéresse à un flux de particules incidentes avec une vitesse $\vec{v} = v\,\vec{u}_x$ venant de $x \to -\infty$ sur un puits de potentiel :
si $x < -\frac{a}{2}$, $V(x) = 0$;
si $x \in \left[-\frac{a}{2};+\frac{a}{2}\right]$, $V(x) = -V_0$;
si $x > \frac{a}{2}$, $V(x) = 0$.
On suppose que l'énergie cinétique de la particule est $E > 0 > -V_0$.

1) Proposer une analogie pour une onde électromagnétique qui se propage dans l'air ou dans le verre.

2) On admet que le coefficient de transmission du flux de particules à travers ce puits est :

$$T = \frac{1}{1 + \left(\frac{q^2}{2\,k\,K}\right)^2 \sin^2(k\,a)}$$

où $k = \frac{\sqrt{2\,m\,(E+V_0)}}{\hbar}$, $K = \frac{\sqrt{2\,m\,E}}{\hbar}$ et $q = \frac{\sqrt{2\,m\,V_0}}{\hbar}$.

2.a) En déduire le coefficient de réflexion R en flux de particules.

2.b) Montrer qu'il existe des "transparences" pour lesquelles $R = 0$. Que doit vérifier k ?

2.c) Retrouver ce résultat en utilisant l'analogie.

1) Si $E > V$, on cherche les solutions sous la forme $\varphi(x) = \tilde{A_+}\,e^{i\,k\,x} + \tilde{A_-}\,e^{-i\,k\,x}$. Or

$$E = \frac{p^2}{2\,m} + V(x) \text{ et } p = \hbar\,k \Rightarrow E = \frac{\hbar^2\,k^2}{2\,m} + V \Rightarrow k = \frac{\sqrt{2\,m\,(E-V)}}{\hbar}$$

Il s'agit de vecteurs d'onde réels : les solutions sont des superpositions d'OPPM.
On peut faire l'analogie avec une onde électromagnétique (ou optique) qui se propage avec un vecteur d'onde $k = \frac{2\,\pi}{\lambda_{vide}}n$, l'indice optique n étant d'autant plus grand que $E - V$ est plus grand.

Donc la partie centrale, de potentiel plus faible a un indice plus fort. On peut considérer un dioptre air - verre - air. Il s'agit donc d'une lame de verre dans l'air.

2)

3) On admet que le coefficient de transmission du flux de particules à travers ce puits est :

$$T = \frac{1}{1 + \left(\frac{q^2}{2\,k\,K}\right)^2 \sin^2(k\,a)}$$

où $k = \frac{\sqrt{2\,m\,(E+V_0)}}{\hbar}$, $K = \frac{\sqrt{2\,m\,E}}{\hbar}$ et $q = \frac{\sqrt{2\,m\,V_0}}{\hbar}$.

3.a) Comme $R + T = 1$, on trouve :

$$R = \frac{\left(\frac{q^2}{2\,k\,K}\right)^2 \sin^2(k\,a)}{1 + \left(\frac{q^2}{2\,k\,K}\right)^2 \sin^2(k\,a)}$$

3.b) $R = 0$ si $\left(\frac{q^2}{2\,k\,K}\right)^2 \sin^2(k\,a) = 0$, soit $\sin(k\,a) = 0$. Il faut donc que

$$k\,a = p\,\pi \text{ avec } p \in \mathbb{N}$$

3.c) On cherche une interférence constructive entre un rayon émergent de la lame de verre d'épaisseur a d'indice n et celui qui est réfléchi deux fois et traverse deux fois la lame, soit une différence de marche $\Delta = 2\,n\,a$ et

$$\Delta\varphi = \frac{2\,\pi}{\lambda_{vide}} 2\,n\,a = 2\,p\,\pi \text{ avec } p \in \mathbb{N} \Leftrightarrow 2\,a\,k_{verre} = 2\,p\,\pi \text{ avec } p \in \mathbb{N}$$

Or $k_{verre} = k$. On retrouve donc la même condition.

3. Barrière de potentiel

3.8) Coefficient de réflexion et transmission de la fonction d'onde dans le cas de l'effet tunnel

On s'intéresse à un flux de particules incidentes avec une vitesse $\vec{v} = v\,\vec{u}_x$ venant de $x \to -\infty$ sur une barrière de potentiel entre $x = 0$ et $x = \ell$:
si $x < 0$, $V(x) = 0$;
si $x \in [0; \ell]$, $V(x) = V_0 > 0$;
et si $x > \ell$, $V(x) = 0$.
On suppose que l'énergie cinétique des particules est $E < V_0$.

1) Déterminer la forme des fonctions d'onde $\tilde{\psi}(x,t) = \varphi(x)\,e^{-i\,\frac{E}{\hbar}t}$ des états stationnaires dans chacun des trois domaines.

2) Écrire les conditions de continuité de la fonction $\varphi(x)$ et de sa dérivée $\frac{d\varphi}{dx}$.

3) En déduire les coefficient de transmission $\tilde{t}$ et de réflexion $\tilde{r}$ en amplitude pour la fonction d'onde.

1) Pour les états stationnaires $\varphi(x) = A_+\,e^{i\,k\,x} + A_-\,e^{-i\,k\,x}$ dans chacun des deux domaines. Or

$$E = \frac{p^2}{2\,m} + V(x) \text{ et } p = \hbar\,k \Rightarrow E = \frac{\hbar^2\,k^2}{2\,m} + V(x) \Rightarrow$$

soit

$$\left\{\begin{array}{c} k_1 = \frac{\sqrt{2\,m\,E}}{\hbar} = k_3 = k \\ k_2 = i\,\frac{\sqrt{2\,m\,(V_0 - E)}}{\hbar} = i\,\rho \end{array}\right.$$

du coup :
si $x < 0$, $\varphi(x) = \tilde{A}_i\,e^{i\,k\,x} + \tilde{A}_r\,e^{-i\,k\,x}$;
si $x \in [0; \ell]$, $\varphi(x) = \tilde{A}_2\,e^{-\rho\,x} + \tilde{A}'_2\,e^{+\rho\,x}$ (onde évanescente) ;
et si $x > \ell$, $\varphi(x) = \tilde{A}_t\,e^{i\,k\,x}$ (pas d'onde venant de $+\infty$).

2) La continuité de $\varphi(x)$ en $x = 0$ et $x = \ell$ donne :

$$\left\{\begin{array}{c} \tilde{A}_i + \tilde{A}_r = \tilde{A}_2 + \tilde{A}'_2 \\ \tilde{A}_2\,e^{-\rho\,\ell} + \tilde{A}'_2\,e^{+\rho\,\ell} = \tilde{A}_t\,e^{i\,k\,\ell} \end{array}\right.$$

La continuité de $\frac{d\varphi}{dx}$, en $x = 0$ et $x = \ell$ donne :

$$\left\{\begin{array}{c} i\,k\,\tilde{A}_i - i\,k\,\tilde{A}_r = -\rho\,\tilde{A}_2 + \rho\,\tilde{A}'_2 \\ -\rho\,\tilde{A}_2\,e^{-\rho\,\ell} + \rho\,\tilde{A}'_2\,e^{+\rho\,\ell} = i\,k\,\tilde{A}_t\,e^{i\,k\,\ell} \end{array}\right.$$

Comme $i\,k_2 = -\rho$, les dernières relations peuvent se réécrire :

$$\left\{\begin{array}{c} \tilde{A}_i + \tilde{A}_r = \tilde{A}_2 + \tilde{A}'_2 \\ \tilde{A}_i - \tilde{A}_r = \frac{k_2}{k}\left(\tilde{A}_2 - \tilde{A}'_2\right) \\ \tilde{A}_2 + \tilde{A}'_2\,e^{-2\,i\,k_2\,\ell} = \tilde{A}_t\,e^{i\,(k-k_2)\,\ell} \\ \tilde{A}_2 - \tilde{A}'_2\,e^{-2\,i\,k_2\,\ell} = \frac{k}{k_2}\tilde{A}_t\,e^{i\,(k-k_2)\,\ell} \end{array}\right.$$

3) Ce qui précède permet de déterminer $\tilde{A}_2$ et $\tilde{A}'_2$ en fonction de $\tilde{A}_t$:

$$\left\{\begin{array}{l} \tilde{A}_2 = \frac{k+k_2}{2\,k_2}\tilde{A}_t\,e^{i\,(k-k_2)\,\ell} \\ \tilde{A}'_2 = \frac{k_2-k}{2\,k_2}\tilde{A}_t\,e^{i\,(k+k_2)\,\ell} \end{array}\right.$$

dont on tire

$$\left\{\begin{array}{l} 2\,\tilde{A}_i = \frac{k+k_2}{k}\tilde{A}_2 + \frac{k-k_2}{k}\tilde{A}'_2 = \tilde{A}_t\left[\frac{(k+k_2)^2}{2\,k\,k_2}\,e^{i\,(k-k_2)\,\ell} - \frac{(k_2-k)^2}{2\,k\,k_2}\,e^{i\,(k+k_2)\,\ell}\right] \\ 2\,\tilde{A}_r = \frac{k-k_2}{k}\tilde{A}_2 + \frac{k+k_2}{k}\tilde{A}'_2 = \tilde{A}_t\left[\frac{k^2-k_2^2}{2\,k\,k_2}\,e^{i\,(k-k_2)\,\ell} + \frac{k_2^2-k^2}{2\,k\,k_2}\,e^{i\,(k+k_2)\,\ell}\right] \end{array}\right.$$

puis $\tilde{A}_r$ et $\tilde{A}_t$ en fonction de $\tilde{A}_i$:

$$\left\{\begin{array}{l} \tilde{r} = \frac{\tilde{A}_r}{\tilde{A}_i} = \frac{\left(k^2-k_2^2\right)e^{i\,(k-k_2)\,\ell} + \left(k_2^2-k^2\right)e^{i\,(k+k_2)\,\ell}}{(k+k_2)^2\,e^{i\,(k-k_2)\,\ell} - (k_2-k)^2\,e^{i\,(k+k_2)\,\ell}} = \frac{\left(k^2-k_2^2\right)e^{-i\,k_2\,\ell} + \left(k_2^2-k^2\right)e^{i\,k_2\,\ell}}{(k+k_2)^2\,e^{-i\,k_2\,\ell} - (k_2-k)^2\,e^{i\,k_2\,\ell}} \\ \tilde{t} = \frac{\tilde{A}_t}{\tilde{A}_i} = \frac{4\,k\,k_2}{(k+k_2)^2\,e^{i\,(k-k_2)\,\ell} - (k_2-k)^2\,e^{i\,(k+k_2)\,\ell}} = \frac{4\,k\,k_2\,e^{-i\,k\,\ell}}{(k+k_2)^2\,e^{-i\,k_2\,\ell} - (k_2-k)^2\,e^{i\,k_2\,\ell}} \end{array}\right.$$

soit, en remplaçant k_2 par $i\,\rho$:

$$\tilde{t} = \frac{\tilde{A}_t}{\tilde{A}_i} = \frac{4\,i\,\rho\,k\,e^{-i\,k\,\ell}}{(k+i\,\rho)^2\,e^{\rho\,\ell} - (i\,\rho-k)^2\,e^{-\rho\,\ell}} = \frac{4\,i\,\rho\,k\,e^{-i\,k\,\ell}}{(k^2-\rho^2)\,\left(e^{\rho\,\ell} - e^{-\rho\,\ell}\right) + 2\,i\,k\,\rho\,\left(e^{\rho\,\ell} + e^{-\rho\,\ell}\right)}$$

enfin grâce aux fonction hyperboliques :

$$\tilde{t} = \frac{\tilde{A}_t}{\tilde{A}_i} = \frac{2\,i\,\rho\,k\,e^{-i\,k\,\ell}}{(k^2-\rho^2)\,\sinh(\rho\,\ell) + 2\,i\,k\,\rho\,\cosh(\rho\,\ell)}$$

De la même façon, en remplaçant k_2 par $i\,\rho$:

$$\tilde{r} = \frac{\tilde{A}_r}{\tilde{A}_i} = \frac{\left(k^2+\rho^2\right)\left(e^{\rho\,\ell} - e^{-\rho\,\ell}\right)}{(k+i\,\rho)^2\,e^{\rho\,\ell} - (i\,\rho-k)^2\,e^{-\rho\,\ell}} = \frac{\left(k^2+\rho^2\right)\left(e^{\rho\,\ell} - e^{-\rho\,\ell}\right)}{(k^2-\rho^2)\,\left(e^{\rho\,\ell} - e^{-\rho\,\ell}\right) + 2\,i\,k\,\rho\,\left(e^{\rho\,\ell} + e^{-\rho\,\ell}\right)}$$

enfin grâce aux fonction hyperboliques :

$$\tilde{r} = \frac{\tilde{A}_r}{\tilde{A}_i} = \frac{\left(k^2+\rho^2\right)\,\sinh(\rho\,\ell)}{(k^2-\rho^2)\,\sinh(\rho\,\ell) + 2\,i\,k\,\rho\,\cosh(\rho\,\ell)}$$

3.9) Coefficient de réflexion et transmission de la fonction d'onde dans le cas d'un ressaut de potentiel

On s'intéresse à un flux de particules incidentes avec une vitesse $\vec{v} = v\,\vec{u}_x$ venant de $x \to -\infty$ sur une barrière de potentiel entre $x = 0$ et $x = \ell$:
si $x < 0$, $V(x) = 0$;
si $x \in [0;\ell]$, $V(x) = V_0 > 0$;
et si $x > \ell$, $V(x) = 0$.
On suppose que l'énergie cinétique des particules est $E > V_0$.

1) Déterminer la forme des fonctions d'onde $\tilde{\psi}(x,t) = \varphi(x)\,e^{-i\,\frac{E}{\hbar}t}$ des états stationnaires dans chacun des trois domaines.

2) Écrire les conditions de continuité de la fonction $\varphi(x)$ et de sa dérivée $\frac{d\varphi}{dx}$.

3) En déduire les coefficient de transmission $\tilde{t}$ et de réflexion $\tilde{r}$ en amplitude pour la fonction d'onde.

1) Pour les états stationnaires $\varphi(x) = A_+\,e^{i\,k\,x} + A_-\,e^{-i\,k\,x}$ dans chacun des deux domaines. Or

$$E = \frac{p^2}{2\,m} + V(x) \text{ et } p = \hbar\,k \Rightarrow E = \frac{\hbar^2\,k^2}{2\,m} + V(x) \Rightarrow$$

soit

$$\begin{cases} k_1 = \frac{\sqrt{2\,m\,E}}{\hbar} = k_3 = k \\ k_2 = \frac{\sqrt{2\,m\,(E-V_0)}}{\hbar} \end{cases}$$

du coup :
si $x < 0$, $\varphi(x) = \tilde{A}_i\,e^{i\,k\,x} + \tilde{A}_r\,e^{-i\,k\,x}$;
si $x \in [0;\ell]$, $\varphi(x) = \tilde{A}_2\,e^{i\,k_2\,x} + \tilde{A}'_2\,e^{-i\,k_2\,x}$ (onde évanescente) ;
et si $x > \ell$, $\varphi(x) = \tilde{A}_t\,e^{i\,k\,x}$ (pas d'onde venant de $+\infty$).

2) La continuité de $\varphi(x)$ en $x = 0$ et $x = \ell$ donne :

$$\begin{cases} \tilde{A}_i + \tilde{A}_r = \tilde{A}_2 + \tilde{A}'_2 \\ \tilde{A}_2\,e^{i\,k_2\,\ell} + \tilde{A}'_2\,e^{-i\,k_2\,\ell} = \tilde{A}_t\,e^{i\,k\,\ell} \end{cases}$$

La continuité de $\frac{d\varphi}{dx}$, en $x = 0$ et $x = \ell$ donne :

$$\begin{cases} i\,k\,\tilde{A}_i - i\,k\,\tilde{A}_r = i\,k_2\,\tilde{A}_2 - i\,k_2\,\tilde{A}'_2 \\ i\,k_2\,\tilde{A}_2\,e^{i\,k_2\,\ell} - i\,k_2\,\tilde{A}'_2\,e^{-i\,k_2\,\ell} = i\,k\,\tilde{A}_t\,e^{i\,k\,\ell} \end{cases}$$

Les dernières relations peuvent se réécrire :

$$\begin{cases} \tilde{A}_i + \tilde{A}_r = \tilde{A}_2 + \tilde{A}'_2 \\ \tilde{A}_i - \tilde{A}_r = \frac{k_2}{k}\left(\tilde{A}_2 - \tilde{A}'_2\right) \\ \tilde{A}_2 + \tilde{A}'_2\,e^{-2\,i\,k_2\,\ell} = \tilde{A}_t\,e^{i\,(k-k_2)\,\ell} \\ \tilde{A}_2 - \tilde{A}'_2\,e^{-2\,i\,k_2\,\ell} = \frac{k}{k_2}\tilde{A}_t\,e^{i\,(k-k_2)\,\ell} \end{cases}$$

3) Ce qui précède permet de déterminer $\tilde{A}_2$ et $\tilde{A}'_2$ en fonction de $\tilde{A}_t$:

$$\begin{cases} \tilde{A}_2 = \frac{k+k_2}{2\,k_2}\tilde{A}_t\,e^{i\,(k-k_2)\,\ell} \\ \tilde{A}'_2 = \frac{k_2-k}{2\,k_2}\tilde{A}_t\,e^{i\,(k+k_2)\,\ell} \end{cases}$$

dont on tire

$$\begin{cases} 2\,\tilde{A}_i = \frac{k+k_2}{k}\tilde{A}_2 + \frac{k-k_2}{k}\tilde{A}'_2 = \tilde{A}_t\left[\frac{(k+k_2)^2}{2\,k\,k_2}\,e^{i\,(k-k_2)\,\ell} - \frac{(k_2-k)^2}{2\,k\,k_2}\,e^{i\,(k+k_2)\,\ell}\right] \\ 2\,\tilde{A}_r = \frac{k-k_2}{k}\tilde{A}_2 + \frac{k+k_2}{k}\tilde{A}'_2 = \tilde{A}_t\left[\frac{k^2-k_2^2}{2\,k\,k_2}\,e^{i\,(k-k_2)\,\ell} + \frac{k_2^2-k^2}{2\,k\,k_2}\,e^{i\,(k+k_2)\,\ell}\right] \end{cases}$$

puis $\tilde{A}_r$ et $\tilde{A}_t$ en fonction de $\tilde{A}_i$:

$$\begin{cases} \tilde{r} = \frac{\tilde{A}_r}{\tilde{A}_i} = \frac{\left(k^2-k_2^2\right)e^{i\,(k-k_2)\,\ell}+\left(k_2^2-k^2\right)e^{i\,(k+k_2)\,\ell}}{(k+k_2)^2\,e^{i\,(k-k_2)\,\ell}-(k_2-k)^2\,e^{i\,(k+k_2)\,\ell}} = \frac{\left(k^2-k_2^2\right)e^{-i\,k_2\,\ell}+\left(k_2^2-k^2\right)e^{i\,k_2\,\ell}}{(k+k_2)^2\,e^{-i\,k_2\,\ell}-(k_2-k)^2\,e^{i\,k_2\,\ell}} \\ \tilde{t} = \frac{\tilde{A}_t}{\tilde{A}_i} = \frac{4\,k\,k_2}{(k+k_2)^2\,e^{i\,(k-k_2)\,\ell}-(k_2-k)^2\,e^{i\,(k+k_2)\,\ell}} = \frac{4\,k\,k_2\,e^{-i\,k\,\ell}}{(k+k_2)^2\,e^{-i\,k_2\,\ell}-(k_2-k)^2\,e^{i\,k_2\,\ell}} \end{cases}$$

d'où

$$\tilde{t} = \frac{\tilde{A}_t}{\tilde{A}_i} = \frac{4\,k_2\,k\,e^{-i\,k\,\ell}}{(k^2+k_2^2)\,\left(e^{-i\,k_2\,\ell} - e^{+i\,k_2\,\ell}\right) + 2\,k_2\,k\,\left(e^{-i\,k_2\,\ell} + e^{i\,k_2\,\ell}\right)}$$

enfin grâce aux fonction trigonométrique

$$\tilde{t} = \frac{\tilde{A}_t}{\tilde{A}_i} = \frac{2\,k_2\,k\,e^{-i\,k\,\ell}}{-i\,(k^2+k_2^2)\,\sin(k_2\,\ell) + 2\,k\,k_2\,\cos(k_2\,\ell)}$$

De la même façon :

$$\tilde{r} = \frac{\tilde{A}_r}{\tilde{A}_i} = \frac{\left(k^2-k_2^2\right)\left(e^{-i\,k_2\,\ell} - e^{i\,k_2\,\ell}\right)}{-2\,i\,(k^2+k_2^2)\,\sin(k_2\,\ell) + 4\,k\,k_2\,\cos(k_2\,\ell)} = \frac{-\,i\,\left(k^2-k_2^2\right)\sin(k_2\,\ell)}{-i\,(k^2+k_2^2)\,\sin(k_2\,\ell) + 2\,k\,k_2\,\cos(k_2\,\ell)}$$

3.10) Coefficient de réflexion et transmission des flux dans le cas d'un ressaut de potentiel

On s'intéresse à un flux de particules incidentes avec une vitesse $\vec{v} = v\,\vec{u}_x$ venant de $x \to -\infty$ sur une barrière de potentiel entre $x = 0$ et $x = \ell$:
si $x < 0$, $V(x) = 0$;
si $x \in [0;\ell]$, $V(x) = V_0 > 0$;
et si $x > \ell$, $V(x) = 0$.
On suppose que l'énergie cinétique des particules est $E > V_0$.

On admet que les coefficient de transmission $\tilde{t}$ et de réflexion $\tilde{r}$ en amplitude pour la fonction d'onde sont $\tilde{t} = \frac{2\,k_2\,k\,e^{-i\,k\,\ell}}{-i\left(k^2+k_2^2\right)\sin(k_2\,\ell)+2\,k\,k_2\,\cos(k_2\,\ell)}$ et $\tilde{r} = \frac{-\,i\left(k^2-k_2^2\right)\sin(k_2\,\ell)}{-i\left(k^2+k_2^2\right)\sin(k_2\,\ell)+2\,k\,k_2\,\cos(k_2\,\ell)}$
avec $k = \frac{\sqrt{2\,m\,E}}{\hbar}$ et $k_2 = \frac{\sqrt{2\,m\,(E-V_0)}}{\hbar}$.

1) Associer un courant de probabilité $\vec{J} = |\tilde{\psi}\,(x,t)\,|^2\,\frac{\hbar\,\vec{k}}{m}$ aux flux incident, réfléchi et transmis pour déterminer les coefficients R et T de réflexion et transmission des flux.

2) Vérifier qu'on a bien $R + T = 1$.

3) Comparer avec le cas classique.

4) Dans quel cas retrouve-t-on le cas classique ?

1) On associe un courant de probabilité :
incident $\vec{J}_i = \left|\tilde{A}_i\right|^2\,\frac{\hbar\,k\,\vec{u}_x}{m}$
réfléchi $\vec{J}_r = -\left|\tilde{A}_r\right|^2\,\frac{\hbar\,k\,\vec{u}_x}{m}$
et transmis $\vec{J}_t = \left|\tilde{A}_t\right|^2\,\frac{\hbar\,k\,\vec{u}_x}{m}$.
Le coefficient de transmission du flux est

$$T = \frac{\|\vec{J}_t\|}{\|\vec{J}_i\|} = \left|\tilde{t}\right|^2 = \frac{1}{\frac{\left(k^2+k_2^2\right)^2}{4\,k_2^2\,k^2}\,\sin^2(k_2\,\ell) + \cos^2(k_2\,\ell)} = \frac{1}{\frac{\left(k^2+k_2^2\right)^2-4\,k_2^2\,k^2}{4\,k_2^2\,k^2}\,\sin^2(k_2\,\ell) + 1}$$

on trouve donc :

$$T = \frac{1}{\frac{\left(k^2-k_2^2\right)^2}{4\,k_2^2\,k^2}\,\sin^2(k_2\,\ell) + 1}$$

avec $k = \frac{\sqrt{2\,m\,E}}{\hbar}$ et $k_2 = \frac{\sqrt{2\,m\,(E-V_0)}}{\hbar}$, cela donne :

$$T = \frac{1}{\frac{V_0^2}{4\,E(E-V_0)}\,\sin^2\left(\frac{\sqrt{2\,m\,(E-V_0)}}{\hbar}\,\ell\right) + 1}$$

et le coefficient de réflexion des flux

$$R = \frac{\|\vec{J}_r\|}{\|\vec{J}_i\|} = |\tilde{r}|^2 = \frac{\frac{\left(k^2-k_2^2\right)^2}{4\,k_2^2\,k^2}\,\sin^2\left(k_2\,\ell\right)}{\frac{\left(k^2+k_2^2\right)^2}{4\,k_2^2\,k^2}\,\sin^2\left(k_2\,\ell\right) + \cos^2\left(k_2\,\ell\right)} = \frac{\frac{\left(k^2-k_2^2\right)^2}{4\,k_2^2\,k^2}\,\sin^2\left(k_2\,\ell\right)}{\frac{\left(k^2+k_2^2\right)^2-4\,k_2^2\,k^2}{4\,k_2^2\,k^2}\,\sin^2\left(k_2\,\ell\right) + 1}$$

on trouve donc :

$$R = \frac{\frac{\left(k^2-k_2^2\right)^2}{4\,k_2^2\,k^2}\,\sin^2\left(k_2\,\ell\right)}{\frac{\left(k^2-k_2^2\right)^2}{4\,k_2^2\,k^2}\,\sin^2\left(k_2\,\ell\right) + 1}$$

avec $k = \frac{\sqrt{2\,m\,E}}{\hbar}$ et $k_2 = \frac{\sqrt{2\,m\,(E-V_0)}}{\hbar}$, cela donne :

$$R = \frac{\frac{V_0^2}{4\,E(E-V_0)}\,\sin^2\left(\frac{\sqrt{2\,m\,(E-V_0)}}{\hbar}\,\ell\right)}{\frac{V_0^2}{4\,E(E-V_0)}\,\sin^2\left(\frac{\sqrt{2\,m\,(E-V_0)}}{\hbar}\,\ell\right) + 1}$$

2) On vérifie qu'on a bien

$$R + T = \frac{\frac{\left(k^2-k_2^2\right)^2}{4\,k_2^2\,k^2}\,\sin^2\left(k_2\,\ell\right)}{\frac{\left(k^2-k_2^2\right)^2}{4\,k_2^2\,k^2}\,\sin^2\left(k_2\,\ell\right) + 1} + \frac{1}{\frac{\left(k^2-k_2^2\right)^2}{4\,k_2^2\,k^2}\,\sin^2\left(k_2\,\ell\right) + 1} = 1$$

3) Dans le cas classique, $R = 0$ et $T = 1$. Ici, une partie du flux est réfléchie.
4) On retrouve le cas classique si $R \to 0$, soit $T \to 1$, c'est le cas si

$$\frac{V_0^2}{4\,E\,(E-V_0)}\,\sin^2\left(\frac{\sqrt{2\,m\,(E-V_0)}}{\hbar}\,\ell\right) \to 0 \Leftrightarrow \frac{V_0^2}{4\,E\,(E-V_0)} \to 0$$

C'est bien le cas si $E \gg V_0$.

3.11) Coefficient de réflexion et transmission des flux dans le cas de l'effet tunnel

On s'intéresse à un flux de particules incidentes avec une vitesse $\vec{v} = v\,\vec{u}_x$ venant de $x \to -\infty$ sur une barrière de potentiel entre $x = 0$ et $x = \ell$:
si $x < 0$, $V(x) = 0$;
si $x \in [0;\ell]$, $V(x) = V_0 > 0$;
et si $x > \ell$, $V(x) = 0$.
On suppose que l'énergie cinétique des particules est $E < V_0$.

On admet que les coefficient de transmission $\tilde{t}$ et de réflexion $\tilde{r}$ en amplitude pour la fonction d'onde sont $\tilde{t} = \frac{\tilde{A}_t}{\tilde{A}_i} = \frac{2\,i\,\rho\,k\,e^{-i\,k\,\ell}}{(k^2-\rho^2)\,\sinh(\rho\,\ell)+2\,i\,k\,\rho\,\cosh(\rho\,\ell)}$ et $\tilde{r} = \frac{\left(k^2+\rho^2\right)\,\sinh(\rho\,\ell)}{(k^2-\rho^2)\,\sinh(\rho\,\ell)+2\,i\,k\,\rho\,\cosh(\rho\,\ell)}$
avec $k = \frac{\sqrt{2\,m\,E}}{\hbar}$ et $\rho = \frac{\sqrt{2\,m\,(V_0-E)}}{\hbar}$.

1) Associer un courant de probabilité $\vec{J} = |\tilde{\psi}\,(x,t)\,|^2\,\frac{\hbar\,\vec{k}}{m}$ aux flux incident, réfléchi et transmis pour déterminer le coefficient T de transmission des flux.
2) En déduire le coefficient R de réflexion des flux.
3) Comparer avec le cas classique.
4) Que devient T dans le cas où $\rho\,\ell \gg 1$?

1) On associe un courant de probabilité :
incident $\vec{J}_i = \left|\tilde{A}_i\right|^2\,\frac{\hbar\,k\,\vec{u}_x}{m}$

réfléchi $\vec{J_r} = -\left|\tilde{A}_r\right|^2 \frac{\hbar\, k\, \vec{u}_x}{m}$
et transmis $\vec{J_t} = \left|\tilde{A}_t\right|^2 \frac{\hbar\, k\, \vec{u}_x}{m}$.
Le coefficient de transmission du flux est

$$T = \frac{\|\vec{J_t}\|}{\|\vec{J_i}\|} = \left|\frac{\tilde{A}_t}{\tilde{A}_i}\right|^2 = \frac{1}{\frac{(k^2-\rho^2)^2}{4\,\rho^2\,k^2}\,\sinh^2(\rho\,\ell) + \cosh^2(\rho\,\ell)} = \frac{1}{\frac{(k^2-\rho^2)^2-4\,\rho^2\,k^2}{4\,\rho^2\,k^2}\,\sinh^2(\rho\,\ell)+1} = \frac{1}{\frac{(k^2+\rho^2)^2}{4\,\rho^2\,k^2}\,\sinh^2(\rho\,\ell)+1}$$

On peut ensuite remplacer k par $\frac{\sqrt{2\,m\,E}}{\hbar}$ et $\rho = \frac{\sqrt{2\,m\,(V_0-E)}}{\hbar}$:

$$T = \frac{1}{\frac{(V_0)^2}{4\,E\,(V_0-E)}\,\sinh^2(\rho\,\ell)+1}$$

2) On en déduit le coefficient de réflexion des flux

$$R = \frac{\|\vec{J_r}\|}{\|\vec{J_i}\|} = \left|\frac{\tilde{A}_r}{\tilde{A}_i}\right|^2 = 1 - T$$

3) Par rapport au cas classique, il existe une probabilité non nulle de passer à travers la barrière de potentiel "par effet tunnel".

4) Si on suppose que $\rho\,\ell \gg 1$ alors

$$\sinh^2(\rho\,\ell) = \left(\frac{e^{\rho\,\ell} - e^{-\rho\,\ell}}{2}\right)^2 \approx \left(\frac{e^{\rho\,\ell}}{2}\right)^2 = \frac{e^{2\,\rho\,\ell}}{4}$$

aussi

$$T \approx \frac{1}{\frac{(V_0)^2}{4\,E\,(V_0-E)}\,\frac{e^{2\,\rho\,\ell}}{4}+1} \approx \frac{1}{\frac{(V_0)^2}{4\,E\,(V_0-E)}\,\frac{e^{2\,\rho\,\ell}}{4}} = \frac{16\,E\,(V_0-E)}{V_0^2}\,e^{-2\,\rho\,\ell}$$

4. Double puits

4.12) Etude du premier état stationnaire du double puits infini

On s'intéresse à un double puits infini, chaque puits étant de largeur a, les deux puits étant éloignés de D. Le potentiel $V(x)$ est défini par :

- si $x \in \left[-a-\frac{D}{2}; -\frac{D}{2}\right]$, $V(x) = 0$;
- si $x \in \left[\frac{D}{2}; \frac{D}{2}+a\right]$, $V(x) = 0$;
- $V(x)$ infini sinon.

1) On s'intéresse aux états stationnaires $\varphi_G(x)$ et $\varphi_D(x)$ de plus basse énergie E de chacun des puits.

1.a) Déterminer leur forme.

1.b) En utilisant la condition de normalisation déterminer leur facteur de normalisation.

1.c) Quelle est leur énergie ?

2) On en déduit qu'il existe pour le double puits deux fonctions d'onde :

une fonction symétrique : $\tilde{\psi}_S(x,t) = \frac{e^{-i\,\frac{E}{\hbar}\,t}}{\sqrt{2}}\,(\varphi_D(x)+\varphi_G(x))$;

et une fonction anti symétrique : $\tilde{\psi}_A(x,t) = \frac{e^{-i\,\frac{E}{\hbar}\,t}}{\sqrt{2}}\,(\varphi_D(x)-\varphi_G(x))$.

2.a) Y a-t-il possibilité de passage d'un puits à l'autre ?

2.b) Pourquoi dit-on qu'il y a dégénérescence ?

1) Etats stationnaires $\varphi_G(x)$ et $\varphi_D(x)$ de plus basse énergie E de chacun des puits :

1.a) Les états stationnaires sont sinusoïdaux dans chaque puits et s'annulent sur les bords du puits, on peut donc écrire pour $\varphi_G(x)$:

- si $x \in \left[-a-\frac{D}{2}; -\frac{D}{2}\right]$, $\varphi_G(x) = A\,\sin\left(\frac{a+\frac{D}{2}+x}{a}\pi\right)$;
- $\varphi_G(x) = 0$ sinon.

et pour $\varphi_D(x)$:

- si $x \in \left[\frac{D}{2}; \frac{D}{2}+a\right]$, $\varphi_D(x) = A \sin\left(\frac{a+\frac{D}{2}-x}{a}\pi\right)$;
- $\varphi_D(x) = 0$ sinon.

1.b) On trouve le facteur de normalisation A par :

$$1 = \int_{\frac{-D}{2}-a}^{\frac{-D}{2}} A^2 \sin^2\left(\frac{a+\frac{D}{2}+x}{a}\pi\right) dx = \int_0^{\pi} A^2\, a \sin^2(\alpha)\, d\alpha = \frac{A^2\, a}{2}$$

grâce au changement de variable $\alpha = \frac{a+\frac{D}{2}+x}{a}\pi$. On trouve donc : $A = \sqrt{\frac{2}{a}}$.

1.c) L'énergie est trouvée grâce à la relation de dispersion, donnée par l'équation de Schrödinger :

$$i\,\hbar\,\frac{\partial\tilde{\psi}}{\partial t} = \frac{-\hbar^2}{2\,m}\frac{\partial^2\tilde{\psi}}{\partial x^2} + V(x,t)\,\tilde{\psi} \Rightarrow i\,\hbar\left(-i\frac{E}{\hbar}\right) = \frac{\hbar^2}{2\,m}\left(\frac{\pi}{a}\right)^2$$

On trouve donc $E = \frac{\hbar^2\,\pi^2}{2\,m\,a^2}$.

2) Fonctions d'onde symétrique et anti symétrique :

2.a) Il n'y a pas possibilité de passage d'un puits à l'autre car l'espace entre les puits présente une densité de probabilité nulle (car le potentiel est infini).

2.b) Il y a dégénérescence car deux fonctions sont solutions, qui ont la même énergie.

4.13) Forme des premiers états stationnaires du double puits fini

On s'intéresse à un double puits fini, chaque puits étant de largeur a, les deux puits étant éloignés de D. Le potentiel $V(x)$ est défini par :

- si $x \in \left[-a-\frac{D}{2}; -\frac{D}{2}\right]$, $V(x) = 0$;
- si $x \in \left[-\frac{D}{2}; +\frac{D}{2}\right]$, $V(x) = V_0$;
- si $x \in \left[\frac{D}{2}; \frac{D}{2}+a\right]$, $V(x) = 0$;
- $V(x)$ infini sinon.

1) On s'intéresse aux états stationnaires antisymétrique $\varphi_a(x)$ et symétrique $\varphi_s(x)$ de plus basse énergie E ($E < V_0$).

1.a) Donner la forme de $\varphi_a(x)$ et $\varphi_s(x)$ si $x \in \left[-\frac{D}{2}; +\frac{D}{2}\right]$.

1.b) Que doivent vérifier $\varphi_a(x)$ et $\varphi_s(x)$ là où le potentiel devient infini ? En déduire la forme de $\varphi_s(x)$ si $x \in \left[\frac{D}{2}; \frac{D}{2}+a\right]$.

1.c) En utilisant la parité de $\varphi_s(x)$ donner sa forme dans chacun des domaines.

1.d) En utilisant le fait que $\varphi_a(x)$ est impaire, donner sa forme dans chacun des domaines.

1) Etats stationnaires.

1.a) Si $x \in \left[-\frac{D}{2}; +\frac{D}{2}\right]$, comme $E < V_0$, les solutions sont sous forme d'exponentielles réelles, ou encore :

$\varphi_a(x) = C_a \sinh(k'\,x)$ et $\varphi_s(x) = C_s \cosh(k'\,x)$.

1.b) $\varphi_a(x)$ et $\varphi_s(x)$ doivent s'annuler là où le potentiel devient infini, c'est-à-dire en $x = -a-\frac{D}{2}$ et $x = \frac{D}{2}+a$.

On en déduit que si $x \in \left[\frac{D}{2}; \frac{D}{2}+a\right]$, $\varphi_s(x) = +A \sin\left(k\,\left(\frac{D}{2}+a-x\right)\right)$.

1.c) La parité de $\varphi_s(x)$ impose que si $x \to -x$, $\varphi_s(-x) = \varphi_s(x)$.

Or si $x \in \left[\frac{D}{2}; \frac{D}{2}+a\right]$, $\varphi_s(x) = A \sin\left(k\,\left(\frac{D}{2}+a-x\right)\right)$.

Donc si $x \in \left[-a-\frac{D}{2}; -\frac{D}{2}\right]$, $\varphi_s(x) = A \sin\left(k\,\left(\frac{D}{2}+a+x\right)\right)$.

Conclusion : la forme de $\varphi_s(x)$ est la suivante :

- si $x \in \left[-a-\frac{D}{2}; -\frac{D}{2}\right]$, $\varphi_s(x) = A \sin\left(k\,\left(\frac{D}{2}+a+x\right)\right)$;
- si $x \in \left[-\frac{D}{2}; +\frac{D}{2}\right]$, $\varphi_s(x) = C_s \cosh(k'\,x)$;
- si $x \in \left[\frac{D}{2}; \frac{D}{2}+a\right]$, $\varphi_s(x) = A \sin\left(k\,\left(\frac{D}{2}+a-x\right)\right)$;
- $\varphi_s(x) = 0$ sinon.

1.d) En utilisant le fait que $\varphi_a(x)$ est impaire, on trouve

- si $x \in \left[-a-\frac{D}{2}; -\frac{D}{2}\right]$, $\varphi_a(x) = -A' \sin\left(k\,\left(\frac{D}{2}+a+x\right)\right)$;
- si $x \in \left[-\frac{D}{2}; +\frac{D}{2}\right]$, $\varphi_a(x) = C_a \sinh(k'\,x)$;

- si $x \in \left[\frac{D}{2}; \frac{D}{2}+a\right]$, $\varphi_a(x) = +A' \sin\left(k\,\left(\frac{D}{2}+a-x\right)\right)$;
- $\varphi_a(x) = 0$ sinon.

4.14) Expression des premiers états stationnaires du double puits fini

On s'intéresse à un double puits fini, chaque puits étant de largeur a, les deux puits étant éloignés de D. Le potentiel $V(x)$ est défini par :

- si $x \in \left[-a-\frac{D}{2}; -\frac{D}{2}\right]$, $V(x) = 0$;
- si $x \in \left[-\frac{D}{2}; +\frac{D}{2}\right]$, $V(x) = V_0$;
- si $x \in \left[\frac{D}{2}; \frac{D}{2}+a\right]$, $V(x) = 0$;
- $V(x)$ infini sinon.

1) On admet que les états stationnaires antisymétrique $\varphi_a(x)$ et symétrique $\varphi_s(x)$ de plus basse énergie E ($E < V_0$) vérifient :

- si $x \in \left[-a-\frac{D}{2}; -\frac{D}{2}\right]$, $\varphi_s(x) = A \sin\left(k\,\left(\frac{D}{2}+a+x\right)\right)$;
- si $x \in \left[-\frac{D}{2}; +\frac{D}{2}\right]$, $\varphi_s(x) = C_s \cosh(k'\,x)$;
- si $x \in \left[\frac{D}{2}; \frac{D}{2}+a\right]$, $\varphi_s(x) = A \sin\left(k\,\left(\frac{D}{2}+a-x\right)\right)$;
- $\varphi_s(x) = 0$ sinon.

et

- si $x \in \left[-a-\frac{D}{2}; -\frac{D}{2}\right]$, $\varphi_a(x) = -A' \sin\left(k\,\left(\frac{D}{2}+a+x\right)\right)$;
- si $x \in \left[-\frac{D}{2}; +\frac{D}{2}\right]$, $\varphi_a(x) = C_a \sinh(k'\,x)$;
- si $x \in \left[\frac{D}{2}; \frac{D}{2}+a\right]$, $\varphi_a(x) = +A' \sin\left(k\,\left(\frac{D}{2}+a-x\right)\right)$;
- $\varphi_a(x) = 0$ sinon.

1.a) Comment s'écrit la condition de normalisation ?

1.b) Que doivent vérifier $\varphi_a(x)$ et $\varphi_s(x)$ quand on passe d'un domaine à l'autre ?

2) Écrire ces équations de continuité et en déduire la conditions liant k et k' dans le cas de la fonction :

2.a) antisymétrique

2.b) symétrique

1)

1.a) La condition de normalisation est la suivante :

$$1 = \int_{-\frac{D}{2}-a}^{\frac{D}{2}+a} \varphi_a(x)^2\,dx = \int_{-\frac{D}{2}-a}^{\frac{D}{2}+a} \varphi_s(x)^2\,dx$$

1.b) $\varphi_a(x)$ et $\varphi_s(x)$ et leur dérivée par rapport à x doivent être continues quand on passe d'un domaine à l'autre. La symétrie (ou l'antisymétrie) donnent les mêmes équations en $x = +\frac{D}{2}$ et en $x = -\frac{D}{2}$.

2)

2.a) Les conditions de continuité pour $\varphi_a(x)$ sont les suivantes :
$C_a \sinh\left(k'\,\frac{D}{2}\right) = +A' \sin\left(k\,\left(\frac{D}{2}+a-\frac{D}{2}\right)\right)$
et $C_a\,k' \cosh\left(k'\,\frac{D}{2}\right) = -A'\,k \cos\left(k\,\left(\frac{D}{2}+a-\frac{D}{2}\right)\right)$
soit

$$\left\{\begin{array}{c} C_a \sinh\left(k'\,\frac{D}{2}\right) = +A' \sin(k\,a) \\ C_a\,k' \cosh\left(k'\,\frac{D}{2}\right) = -A'\,k \cos(k\,a) \end{array}\right.$$

En faisant le rapport, on trouve :

$$\frac{k'}{\tanh\left(k'\,\frac{D}{2}\right)} = -\frac{k}{\tan(k\,a)}$$

2.b) Les conditions de continuité pour $\varphi_s(x)$ sont les suivantes :
$C_s \cosh\left(k'\,\frac{D}{2}\right) = +A \sin\left(k\,\left(\frac{D}{2}+a-\frac{D}{2}\right)\right)$
et $C_s\,k' \sinh\left(k'\,\frac{D}{2}\right) = -A\,k \cos\left(k\,\left(\frac{D}{2}+a-\frac{D}{2}\right)\right)$
soit

$$\left\{\begin{array}{c} C_s \cosh\left(k'\,\frac{D}{2}\right) = +A \sin(k\,a) \\ C_s\,k' \sinh\left(k'\,\frac{D}{2}\right) = -A\,k \cos(k\,a) \end{array}\right.$$

En faisant le rapport, on trouve :

$$k' \tanh\left(k' \frac{D}{2}\right) = -k \tan(k\,a)$$

4.15) Superposition des deux premiers états stationnaires du double puits fini

On s'intéresse à un double puits fini symétrique.

On note les états stationnaires antisymétrique $\varphi_a(x)$ et symétrique $\varphi_s(x)$ de plus basse énergie E ($E < V_0$), respectivement E_a et $E_s < E_a$.

1) On superpose ces deux états grâce aux fonctions $\tilde{\psi}_+ = A\left(\varphi_s(x)\,e^{-i\frac{E_s}{\hbar}t} + \varphi_a(x)\,e^{-i\frac{E_a}{\hbar}t}\right)$ et $\tilde{\psi}_- = B\left(\varphi_s(x)\,e^{-i\frac{E_s}{\hbar}t} - \varphi_a(x)\,e^{-i\frac{E_a}{\hbar}t}\right)$.

1.a) Expliciter les densités de probabilités dans le cas des deux superpositions.

1.b) Montrer que les densités de probabilités oscillent avec une pulsation Ω qu'on déterminera.

1.c) Comment s'écrit la condition de normalisation ? En déduire A et B.

On note les états stationnaires réels antisymétrique $\varphi_a(x)$ et symétrique $\varphi_s(x)$ de plus basse énergie E ($E < V_0$), respectivement E_a et $E_s < E_a$.

1) Superposition des deux états $\tilde{\psi}_+$ et $\tilde{\psi}_-$.

1.a) Pour $\tilde{\psi}_+$:

$$\left|\tilde{\psi}_+\right|^2 = A^2\left(\varphi_s^2(x) + \varphi_a^2(x) + \varphi_s(x)\,\varphi_a(x)\left(e^{-i\frac{E_a-E_s}{\hbar}t} + e^{+i\frac{E_a-E_s}{\hbar}t}\right)\right)$$

soit

$$\left|\tilde{\psi}_+\right|^2 = A^2\left(\varphi_s^2(x) + \varphi_a^2(x) + 2\,\varphi_s(x)\,\varphi_a(x)\,\cos\left(\frac{E_a-E_s}{\hbar}t\right)\right)$$

De même, on trouve

$$\left|\tilde{\psi}_-\right|^2 = B^2\left(\varphi_s^2(x) + \varphi_a^2(x) - 2\,\varphi_s(x)\,\varphi_a(x)\,\cos\left(\frac{E_a-E_s}{\hbar}t\right)\right)$$

1.b) Les densités de probabilités oscillent avec une pulsation $\Omega = \frac{E_a-E_s}{\hbar}$ (appelée fréquence de Bohr).

1.c) La condition de normalisation s'écrit :

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty}\left|\tilde{\psi}_+\right|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty}\left|\tilde{\psi}_-\right|^2 dx$$

Or, comme $1 = \int_{-\infty}^{+\infty}\varphi_s(x)^2\,dx = \int_{-\infty}^{+\infty}\varphi_a(x)^2\,dx$ d'une part et $0 = \int_{-\infty}^{+\infty}\varphi_s(x)\,\varphi_a(x)\,dx$ à cause des conditions de parité, on trouve :

$$1 = 2\,A^2 = 2\,B^2 \Rightarrow A = B = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

Travaux dirigés

vendredi 23 mars 2018

Cet exercice sera fait en demi-groupe lors de la séance de travaux dirigés.

Les inégalités de Heisenberg

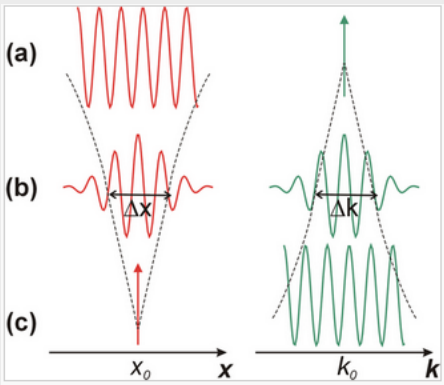
extrait de l'article wikipédia "Principe d'incertitude"
disponible à l'adresse https://fr.wikipedia.org/wiki/Principe_d'incertitude

Un théorème à démontrer

Le principe d'incertitude (ou principe d'indétermination) énonce que, pour une particule massive donnée, on ne peut pas connaître simultanément sa position et sa vitesse avec une précision supérieure à un certain seuil. Ce principe fut énoncé au printemps 1927 par Heisenberg lors des balbutiements de la mécanique quantique.

Le terme « incertitude » est le terme historique pour ce principe. Le nom de théorème d'indétermination est parfois préféré car le principe ne porte pas sur l'ignorance « subjective » de grandeurs par l'expérimentateur, mais bien sur une impossibilité fondamentale de les déterminer, et même sur le fait que le concept de grandeur précise n'a pas de sens physique. De plus, ce principe étant démontré par les équations, il devient un théorème.

De manière simplifiée, ce principe d'indétermination énonce donc que - de façon assez contre-intuitive du point de vue de la mécanique classique - pour une particule massive donnée, on ne peut pas connaître simultanément sa position et sa vitesse. Soit on peut connaître précisément sa position (par exemple à ± 1 mm) contre une grande incertitude sur la valeur de sa vitesse (par exemple à ± 100 m/s), soit on peut connaître précisément sa vitesse (par exemple à ± 0,0001 m/s) contre une grande incertitude sur la valeur de sa position (par exemple à ± 1 km).



Vues spatiale (position) et fréquentielle (impulsion) de (a) une onde, (b) un paquet d'onde et (c) un corpuscule. L'onde étant de fréquence pure, son impulsion est définie mais elle n'est pas localisée dans l'espace. Inversement, le corpuscule est localisé mais n'a pas de fréquence déterminée. Le cas général est celui du paquet d'onde qui est distribué en fréquence comme en espace. Du fait de la dualité entre les deux représentations l'étalement spatial est inversement proportionnel à l'étalement fréquentiel.

Cependant, si on renonce à considérer la particule en tant qu'objet corpusculaire, l'énoncé de ce principe devient plus intuitif. L'objet quantique ayant une certaine extension dans l'espace et une certaine durée de vie en temps, on le représente alors, non plus par un ensemble de valeurs scalaires (position, vitesse), mais par une fonction décrivant sa distribution spatiale. Toute l'information relative à la particule est contenue dans cette fonction d'onde. Les mesures scalaires effectuées sur cette particule consistent à extraire seulement une partie de cette information, par l'intermédiaire d'opérateurs mathématiques.

Enoncé

1) On suppose que $< x >= 0$ et $< p >= 0$. Exprimer Δx et Δp.

2) Montrer que

$$I(\lambda) = \int_{-\infty}^{+\infty} \left| x\,\tilde{\psi} + \lambda\,\hbar \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial x} \right|^2 dx$$

est égal à

$$I(\lambda) =< x^2 > -\lambda\,\hbar + \lambda^2 \; < p_x^2 >$$

3) En utilisant le fait que $I(\lambda)$ est un trinôme du second degré en λ, toujours positif ou nul, en déduire l'inégalité de Heisenberg spatiale.

Correction

1) Pour peu que $< x >= 0$,

$$\Delta x = \sqrt{< x^2 > - (< x >)^2} = \sqrt{< x^2 >}$$

et

$$\Delta p = \sqrt{< p^2 > - (< p >)^2} = \sqrt{< p^2 >}$$

si $< p >= 0$.

2)

$$I(\lambda) = \int_{-\infty}^{+\infty} \left| x\,\tilde{\psi} + \lambda\,\hbar \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial x} \right|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(x^2\,|\tilde{\psi}|^2 + \lambda\,x\,\tilde{\psi}\hbar \frac{\partial \tilde{\psi}^*}{\partial x} + \lambda\,x\,\tilde{\psi}^*\hbar \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial x} + \lambda^2\,\hbar^2 \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial x}\frac{\partial \tilde{\psi}^*}{\partial x} \right) dx$$

soit

$$I(\lambda) = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2\,|\tilde{\psi}|^2\,dx + \lambda\,\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} x \frac{\partial \left(\tilde{\psi}\tilde{\psi}^*\right)}{\partial x}\,dx + \lambda^2\,\hbar^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial x}\frac{\partial \tilde{\psi}^*}{\partial x}\,dx$$

On reconnait, pour la première intégrale :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^2\,|\tilde{\psi}|^2\,dx =< x^2 >$$

La seconde intégrale se calcule par intégration par partie :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x \frac{\partial \left(\tilde{\psi}\tilde{\psi}^*\right)}{\partial x}\,dx = \int_{-\infty}^{+\infty} x \frac{\partial \left(|\tilde{\psi}|^2\right)}{\partial x}\,dx = \left[x\,|\tilde{\psi}|^2\right]_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} |\tilde{\psi}|^2\,dx = -\int_{-\infty}^{+\infty} |\tilde{\psi}|^2\,dx = -1$$

Enfin la troisième intégrale devient, puisque $\frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial x} = i\,k\,\tilde{\psi} = \frac{i}{\hbar} p\,\tilde{\psi}$:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial x}\frac{\partial \tilde{\psi}^*}{\partial x}\,dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{i}{\hbar} p\,\tilde{\psi} \frac{-i}{\hbar} p\,\tilde{\psi}^*\,dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{p^2}{\hbar^2} |\tilde{\psi}|^2\,dx = \frac{< p^2 >}{\hbar^2}$$

On a donc bien

$$I(\lambda) =< x^2 > -\lambda\,\hbar + \lambda^2\ < p^2 >$$

3) Comme $I(\lambda)$ est un trinôme du second degré en λ, toujours positif ou nul, il admet, au plus, une seule racine. Aussi,

$$\Delta = b^2 - 4\,a\,c \leq 0 \Rightarrow \hbar^2 \leq 4\ < x^2 >< p^2 >= 4\,\Delta x^2\,\Delta p^2$$

Donc on retrouve bien

$$\Delta x\,\Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

Devoir non surveillé

vendredi 23 mars 2018

Le document est à lire, l'exercice est à rendre.

La radioactivité α

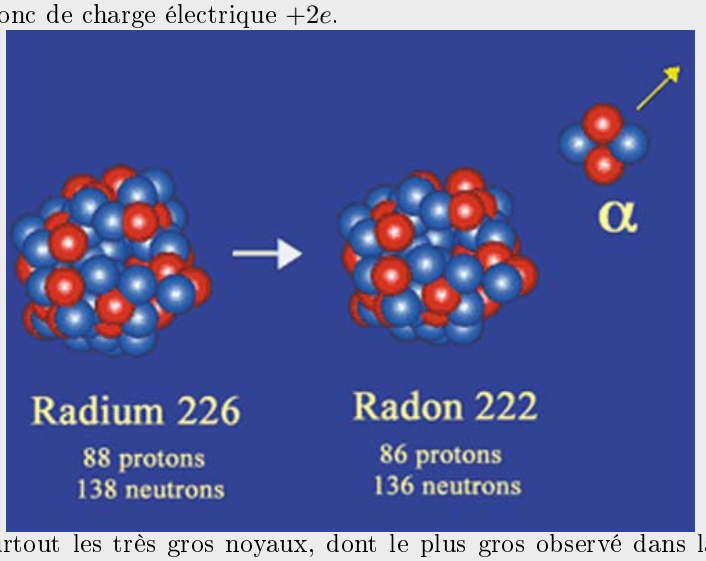
site laradioactivite.com
laradioactivite.com.

George Gamow explique dans les années 1930 la radioactivité alpha par l'effet tunnel.

Où comment des noyaux trop lourds perdent du poids ...

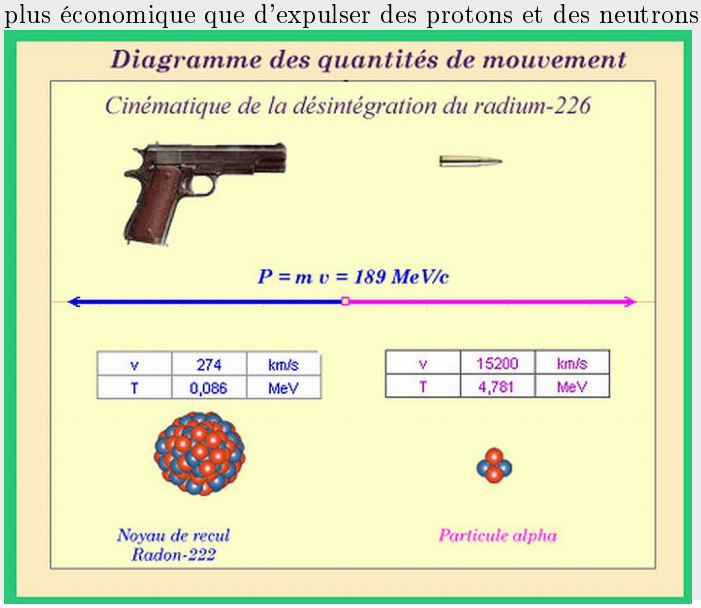
La radioactivité alpha (α) fut d'abord observée comme un rayonnement de type inconnu, dévié par des champs électriques et magnétiques. Le sens des déviations indiquait qu'il était transporté par des particules ayant des charges électriques positives. Ernest Rutherford identifia en 1908 ces particules «alpha» à des noyaux d'hélium composés de 2 protons et 2 neutrons, donc de charge électrique $+2e$.

Exemple de la désintégration historique du radium-226. Ce gros noyau de 226 nucléons, dont 88 protons et 138 neutrons, émet une particule alpha composée de deux protons et deux neutrons. Il se transforme alors en noyau de radon-222, lui-même radioactif, contenant deux protons et deux neutrons de moins. La désintégration libère 4,6 millions d'électronvolts d'énergie. La particule alpha en emporte les 222/226 ièmes et le radon 4/226 ièmes. Il faut attendre la désintégration 2300 ans en moyenne. (c) IN2P3.



L'émission d'une particule alpha concerne surtout les très gros noyaux, dont le plus gros observé dans la nature est celui de l'uranium 238 comportant 92 protons et 136 neutrons.

De tels noyaux, instables, émettent un noyau léger d'hélium afin de devenir moins volumineux et ainsi de se rapprocher de la stabilité. Il s'avère que cette manière d'expulser deux protons et deux neutrons groupés est plus économique que d'expulser des protons et des neutrons de manière isolée.

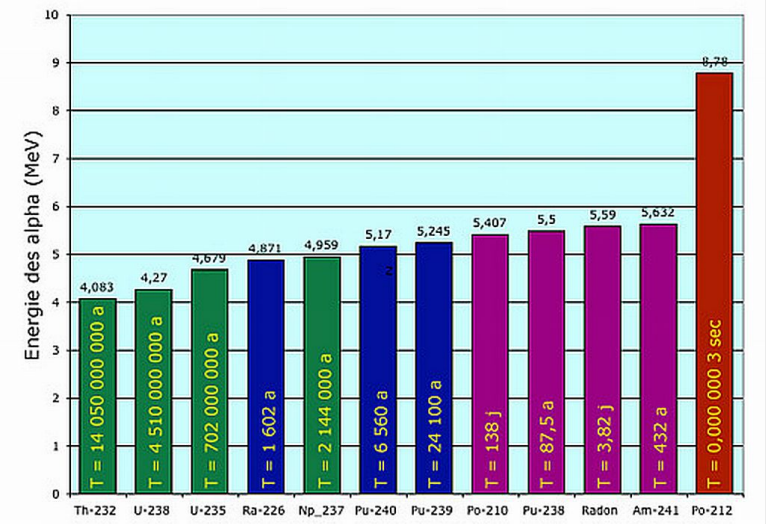


L'énergie libérée lors d'une désintégration alpha se retrouve sous forme d'énergie cinétique partagée entre la particule α et le noyau qui recule. Comme dans un tir d'artillerie où l'obus emporte pratiquement toute l'énergie de la déflagration, les particules α emportent environ 98 % de l'énergie et le noyau de recul (la culasse du canon) le reste. L'énergie de la particule alpha est unique pour une désintégration donnée. Elle est supérieure à celle des électrons bêta et rayons gamma, de l'ordre de 4 millions d'électronvolts (MeV) ou davantage.

Un exemple de désintégration alpha est celui, historique, du radium-226 qui se transforme en un noyau de radon-222 en éjectant une particule alpha. La réaction libère 4,6 MeV. Le noyau résiduel de radon-222 est un gaz rare lui-même radioactif, ce qui permit à Rutherford de le détecter en 1898 à Montréal.

Les périodes des désintégrations alpha sont souvent longues. Ainsi, certains émetteurs alpha comme le thorium-232 et l'uranium-238 mettent des milliards d'années à se désintégrer. Le radium-226 se désintègre lui avec une période de 1600 ans. La moitié des noyaux de radium contemporains du siège de Paris par Attila en 422 ne se sont donc pas encore désintégrés, bien que le radium soit un élément réputé très radioactif.

Contrairement à la radioactivité bêta, l'émission d'un rayon alpha n'est généralement pas accompagnée d'un rayon gamma de désexcitation, ou quand c'est le cas l'énergie de ce rayon gamma est faible.

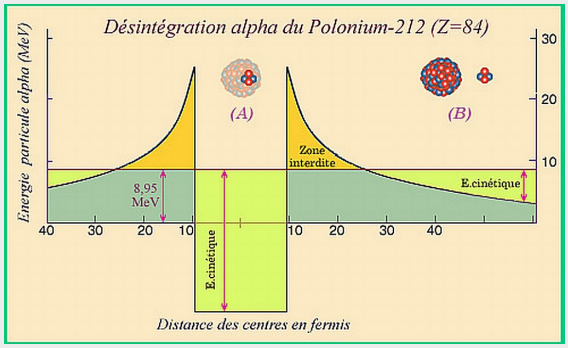


Energies et longs temps de vie des alpha. Ce diagramme de l'énergie des alpha émis par quelques uns des principaux émetteurs montre des énergies toujours supérieures à 4 MeV. Plus l'énergie est élevée, plus la durée de vie du noyau est courte. La période varie de façon impressionnante de 14 milliards d'années pour le thorium (à gauche) à une fraction de millionième de seconde pour le polonium-212 (à droite) alors que l'énergie des alpha émis varie seulement de 4,083 à 8,78 MeV. La limite en énergie à 4 MeV et les durées de vie généralement très longues sont expliquées par l'effet "tunnel". (c) IN2P3.

Un effet de la mécanique quantique

Le très grand âge des noyaux d'uranium et de thorium qui atteignent des milliards d'années témoigne que les désintégrations alpha se produisent difficilement, bien qu'elles libèrent des millions d'électronvolts d'énergie.

Ces noyaux seraient parfaitement stables sans un mécanisme laborieux qui vient à bout des forces nucléaires et déclenche une désintégration. L'effet attractif de la colle nucléaire cesse brutalement hors du noyau. Si quatre nucléons, groupés en une particule alpha, arrivent à perdre le contact avec les autres nucléons, ce groupe ne ressent plus que la répulsion due à la charge électrique du reste du noyau. Il s'en éloigne alors de plus en plus vite pour acquérir l'énergie cinétique de quelques millions d'électronvolts dont il a été question. Le tout est d'arriver à perdre ce contact.



Un "puits" de potentiel. La désintégration alpha du Polonium-212 est celle qui dégage le plus d'énergie, 8,95 MeV. Cette désintégration est pourtant interdite par la mécanique classique. Il est impossible pour une particule alpha de passer de l'intérieur du noyau en A à l'extérieur en B. Elle se retrouve prisonnière au fond d'un «puits» comme le montre la courbe qui représente l'énergie potentielle d'interaction entre la particule et le reste du noyau. Pour aller de A en B, la particule doit franchir une zone interdite où son énergie cinétique serait négative. Les zones permises sont le puits où l'attraction nucléaire prédomine, et l'extérieur du puits où la répulsion due à la charge du noyau l'emporte. (c) IN2P3.

On doit à un physicien américain d'origine russe, George Gamow, la première explication de la désintégration alpha, une désintégration qui n'est pas autorisée par les lois de la physique classique.

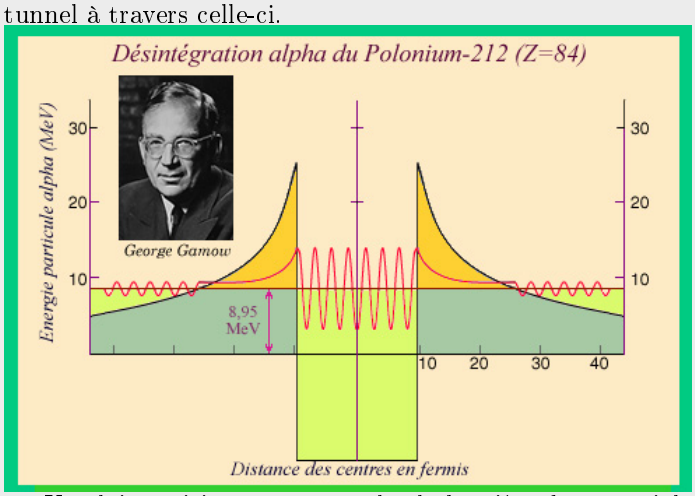
Le mécanisme proposé par Gamow a été appelé "effet tunnel". Pour simplifier la présentation de l'effet tunnel, nous supposerons que la particule alpha préexiste dans le noyau, comme le fit George Gamow à l'époque

L'effet tunnel est dû à ce qu'une particule se comporte à la fois comme un corpuscule et comme une onde dans le domaine de l'infiniment petit où la mécanique quantique se substitue à la mécanique classique.

La particule alpha se retrouve dans la situation d'un alpiniste, prisonnier d'un cratère, qui n'a plus de forces pour gagner le sommet, passer sur l'autre versant et dévaler vers la vallée. La barrière à franchir figure la compétition entre la colle nucléaire attractive et la répulsion électrostatique. La particule alpha ne peut pas franchir la barrière car elle ne possède pas l'énergie nécessaire : elle se trouve soit à l'intérieur, soit à l'extérieur du noyau. Du moins pour la mécanique classique.

En mécanique quantique, la situation est moins tranchée. L'onde, qui représente une particule alpha dans le

noyau, n'est pas strictement localisée et déborde légèrement de l'autre côté de la barrière. Il existe une probabilité d'observer la particule en dehors du noyau, là où la colle nucléaire ne se fait plus sentir. Cette probabilité est extrêmement petite, mais c'est elle qui permet la désintégration. Pour reprendre l'image de l'alpiniste, l'astuce dont il dispose pour gagner l'autre versant de la barrière montagneuse et trouver la liberté, est de creuser un tunnel à travers celle-ci.



L'effet tunnel. L'onde associée à une particule alpha prisonnière à l'intérieur d'un noyau a été superposée à la figure précédente. On voit que l'onde déborde légèrement à l'extérieur du noyau, où l'amplitude des oscillations a été amplifiée pour les rendre visibles. Le carré de l'amplitude des oscillations représente, en mécanique quantique, la probabilité d'observer la particule en un endroit donné. Il existe donc une probabilité d'observer la particule alpha en dehors du noyau, c'est-à-dire une désintégration. (c) IN2P3.

Une loi empirique veut que plus la barrière de potentiel est haute, plus l'épaisseur à traverser est importante et plus le noyau vit longtemps. Ceci explique certaines durées de vie particulièrement longues.

Enoncé

1) Energie cinétique

On suppose

- le noyau de numéro atomique Z et de nombre de nucléons A
- et le noyau α (4 nucléons et une charge $q = 2e$)

initialement au repos en $r = 0$ dans le référentiel barycentrique.

A l'état final, la particule *alpha* est infiniment éloignée du noyau.

1.a) Sous quelle condition peut-on appliquer la conservation de la quantité de mouvement du système ? Ce faisant, exprimer le rapport des énergies cinétiques finales des deux corps.

1.b) Est-ce en accord avec ce que dit le texte pour la radioactivité α du radium-226 : "la particule alpha emporte les 222/226 ièmes et le radon 4/226 ièmes" de l'énergie ou encore "les particules α emportent environ 98 % de l'énergie" ?

1.c) Pourquoi peut-on assimiler le référentiel barycentrique au référentiel du noyau ?

2) Energie potentielle

On suppose donc

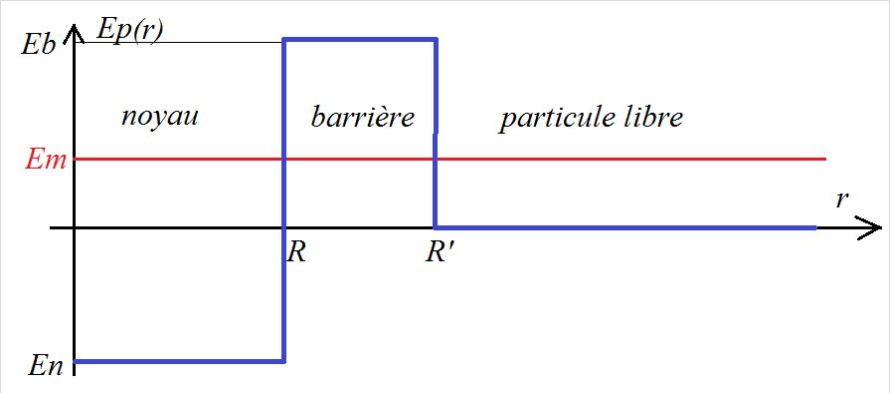
- le noyau de numéro atomique Z et de nombre de nucléons A, quasi ponctuel en $r = 0$,
- et la particule α (4 nucléons et une charge $q = 2e$) à une distance r du noyau.

2.a) Donner l'expression de l'énergie potentielle d'interaction électrostatique $E_{pe}(r)$ ressentie par la particule α en fonction de r. Quelle est la forme de la courbe $E_{pe}(r)$?

2.b) D'après le texte, à quoi est dû l'écart entre le graphe de l'énergie potentielle de la particule α et $E_{pe}(r)$? En déduire la taille du noyau du polonium 212.

3) Effet tunnel

L'énergie de la particule α est notée E_m. Pour simplifier le problème, on va modéliser les variations de l'énergie potentielle de la particule α comme suit :



3.a) Pourquoi y a-t-il une zone interdite du point de vue classique pour la particule α ? Du point de vue quantique, à quel type d'onde peut-on assimiler la particule α dans cette "zone interdite" ?

3.b) Exprimer la vitesse v_n de la particule α dans le noyau en fonction de sa masse m, de E_m et de E_n. La particule α fait donc des allers et retours dans le noyau. A quelle fréquence f rebondit-elle sur les bords du noyau ?

3.c) On note p la probabilité de passage de la particule α par effet tunnel à travers la barrière de potentiel. En déduire la période radioactive T qu'il faut attendre en moyenne avant que la particule α ne sorte du noyau.

3.d) On admet que la probabilité de passage p de la particule α par effet tunnel est proportionnelle à $e^{-2K(R'-R)}$ où $K = \sqrt{\frac{(E_b - E_m)}{\hbar^2}}$. Représenter sur un graphique $\ln(T) = f(\ln(E_m))$ (en échelles logarithmiques) les valeurs des périodes radioactives T en fonction des énergies E_m des particules α données dans le document. En déduire que le facteur exponentiel de p fait varier de façon considérable les périodes.

Correction

1) Energie cinétique

1.a) Si le système est isolé, sa quantité de mouvement se conserve. La conservation de la quantité de mouvement donne $m_1\vec{v}_1 + m_2\vec{v}_2 = \vec{0}$, avec $m = Am_{nucleon}$, soit

$$v(\alpha) = \frac{A}{4}v(noyau) \Rightarrow E_c(\alpha) = \frac{4}{A}\left(\frac{A}{4}\right)^2 E_c(noyau) = \frac{A}{4}E_c(noyau)$$

1.b) Pour la radioactivité α du radium-226, $A = 222$, donc

$$\frac{E_c(\alpha)}{E_c(noyau)} = \frac{A}{4} = \frac{222}{4} \Rightarrow \frac{E_c(\alpha)}{E_c(noyau) + E_c(\alpha)} = \frac{222}{226} = 98,2\%$$

comme le stipule le texte.

1.c) Le référentiel barycentrique est donc quasiment confondu avec le référentiel du noyau (approximation de Born-Oppenheimer).

2) Energie potentielle

2.a) L'énergie potentielle d'interaction électrostatique est $E_{pe} = qV(r)$ où V est le potentiel coulombien créé par une charge ponctuelle ($q' = Ze$) en $r = 0$. Donc :

$$E_{pe} = \frac{qq'}{4\pi\varepsilon_0 r} = \frac{2Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

qui présente une forme hyperbolique et qui tend vers 0 si $r \to \infty$.

2.b) D'après le texte, l'écart entre le graphe de l'énergie potentielle de la particule α et $E_{pe}(r)$ est dû à "l'effet attractif de la colle nucléaire [qui] cesse brutalement hors du noyau". La taille du noyau du polonium 212 se lit sur la courbe de l'énergie potentielle de la particule α : le puits de potentiel cesse en $r = 10$ fm $= 10 \times 10^{-15}$ m.

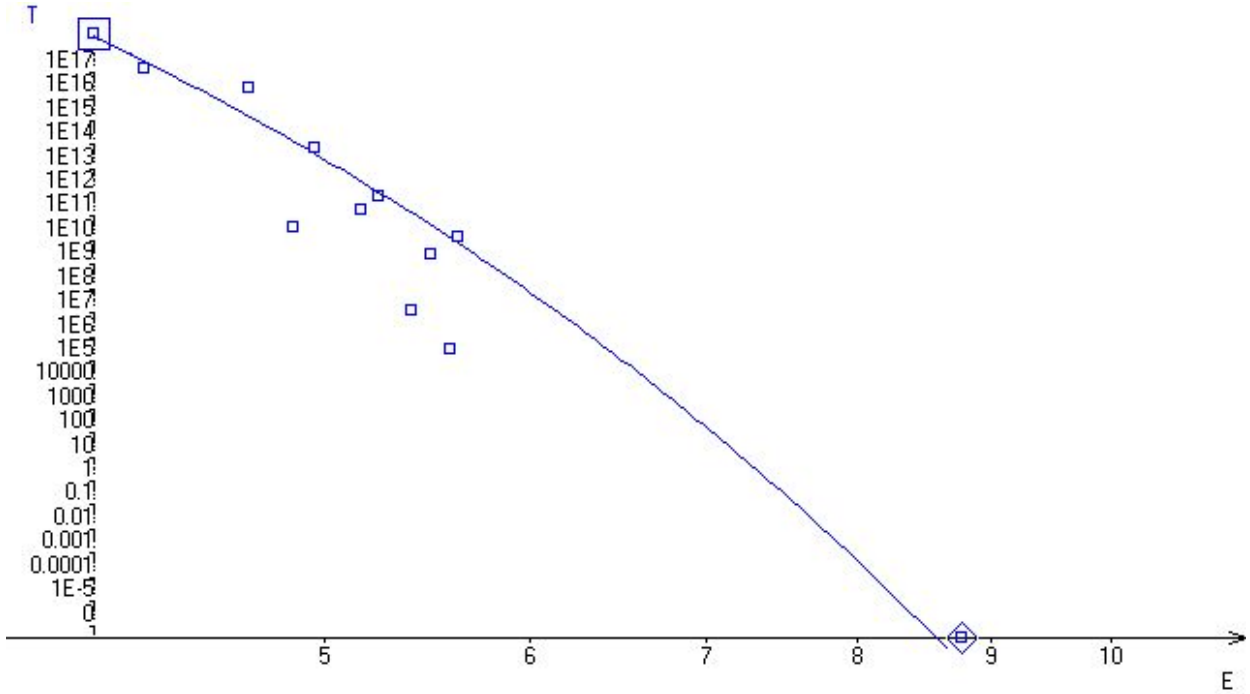
3) Effet tunnel

3.a) Du point de vue classique, la particule α a une énergie $E_m = E_c + E_p$. Comme $E_c \geq 0$, alors $E_m \geq E_p$. Donc la zone où $E_p > E_m$ (pour $r \in]R; R'[$ est interdite du point de vue classique. Du point de vue quantique,on peut assimiler la particule α dans cette "zone interdite" à une onde évanescente.

3.b) L'énergie cinétique dans le noyau est $E_m - E_n = \frac{1}{2}mv_n^2$, donc $v_n = \sqrt{\frac{2(E_m - E_n)}{m}}$. La particule α va donc d'un bord du noyau à l'autre, donc parcourt $2R$ en un temps $\frac{1}{f}$, d'où : $f = \frac{v_n}{2R} = \frac{1}{2R}\sqrt{\frac{2(E_m - E_n)}{m}}$.

3.c) Il faut attendre en moyenne $T = \frac{1}{pf}$ avant que la particule α ne sorte du noyau.

3.d) Le graphique $\ln(T) = f(\ln(E_m))$ est donné sur la figure suivante :



Les points semblent presque alignés : c'est le facteur exponentiel de p qui fait varier de façon considérable les périodes.