



Équation de Schrödinger dans des potentiels constants par morceaux

Lycée Thiers - Physique-Chimie - MPI/MPI* - 2024-2025

Table des matières

1 Les potentiels constants par morceaux	1
2 Étude de la marche de potentiel	2
2.1 Calcul de la fonction d'onde pour $x < 0$	2
2.2 Cas où $\mathcal{E} > V_0$	2
2.3 Cas où $\mathcal{E} < V_0$	5
3 Barrière de potentiel et effet tunnel	7
3.1 Zones où la particule est libre	7
3.2 Cas où $\mathcal{E} > V_0$	8
3.3 Cas où $\mathcal{E} < V_0$ - Effet Tunnel	8
4 Étude du puits de potentiel	9
4.1 Le puits de profondeur finie	10
4.2 Modes propres du puits infini	12
4.3 Superposition d'états quantiques	14
5 Compléments	14
5.1 Continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée dans le cas d'un potentiel borné.	14
5.2 Calcul du coefficient de transmission de l'effet tunnel	15

1 Les potentiels constants par morceaux

Chaque situation physique est décrite par un potentiel V particulier.

Par exemple, dans le cas de l'atome d'hydrogène, l'électron autour du noyau est soumis à un potentiel effectif intégrant la partie coulombienne de l'interaction électrostatique et la partie inertielle dû à la rotation et à la conservation du moment cinétique. On a alors $H(r) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + V(r)$ avec $V(r) = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} - \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r}$. Ce potentiel est tracé à titre d'exemple figure 1a. Un tel potentiel est compliqué et les calculs liées ne sont pas à notre niveau.

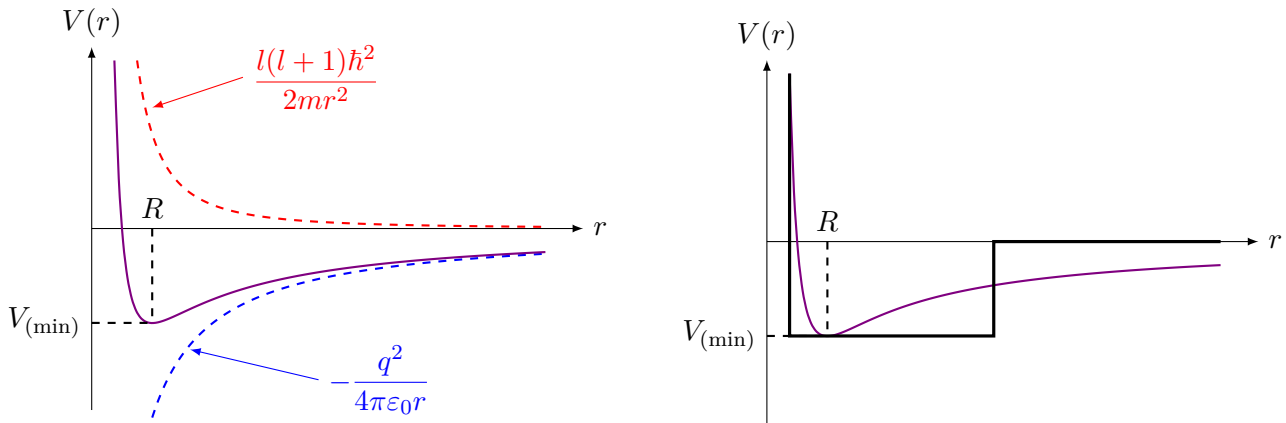
Toutefois, pour donner les premières idées de la mécanique quantique, on peut généralement se contenter des potentiels très approchés constants par morceaux comme représenté figure 1b.

En première approximation, il est donc possible de résoudre par morceau l'équation de Schrödinger pour discuter le problème.

Propriété. On admet les deux propriétés suivantes :

- ▷ la partie spatiale de la fonction d'onde Φ est une fonction **continue de la position** ;
- ▷ dans le cas du franchissement d'un potentiel **fini**, la dérivée de la partie spatiale de la fonction d'onde $\frac{d\Phi}{dx}$ est une fonction **continue de la position**.

Ces propriétés sont démontrés en complément dans le paragraphe 5.1.



(a) Tracé du modèle idéal du potentiel réel.

(b) Approximation du potentiel pour simplifier les calculs.

Fig. 1 – Tracé du potentiel effectif d'interaction entre le noyau de l'électron de l'atome d'hydrogène et son idéalisation en potentiels constants par morceaux.

2 Étude de la marche de potentiel

On cherche des solutions **stationnaires**. On se restreint à des problèmes à une dimension d'espace notée x , et on ne considère des potentiels non nuls sur une fraction seulement de l'espace. On supposera la particule de masse m .

La particule incidente se propage vers les x croissants dans les potentiels de la figure 2. Elle provient de $x = -\infty$. On note \mathcal{E} l'énergie de la particule incidente.

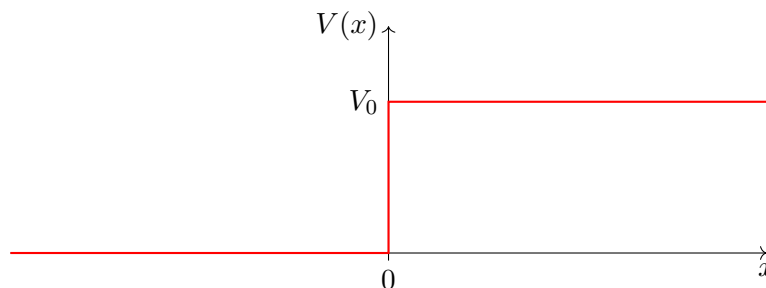


Fig. 2 – Graphe du potentiel de la marche de potentiel.

2.1 Calcul de la fonction d'onde pour $x < 0$

Il s'agit d'une particule libre, il faut résoudre l'équation de Schrödinger à une dimension, soit

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Phi}{dx^2}(x) + \mathcal{E}\Phi(x) = 0.$$

Les solutions de l'équation précédente se mettent sous la forme

$$\Phi(x) = \alpha e^{ik_x x} + \beta e^{-ik_x x}$$

avec α et β des nombres complexes dépendant des conditions aux limites. On pose $k_x^2 = \frac{2m\mathcal{E}}{\hbar^2}$.

2.2 Cas où $\mathcal{E} > V_0$

2.2.1 Résolution

Continuons maintenant la résolution pour $x > 0$.

Il faut tenir compte maintenant de la présence du potentiel. Il faut résoudre l'équation de Schrödinger à une dimension, soit

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Phi}{dx^2}(x) + \mathcal{E}\Phi(x) = V_0\Phi(x).$$

ce qui devient

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Phi}{dx^2}(x) + (\mathcal{E} - V_0)\Phi(x) = 0.$$

Les solutions de l'équation de Schrödinger se mettent sous la forme

$$\Phi(x) = \gamma e^{iK_x x} + \delta e^{-iK_x x}$$

avec α et β des nombres complexes dépendant des conditions aux limites. On pose $K_x^2 = \frac{2m(\mathcal{E} - V_0)}{\hbar^2} > 0$.

En multipliant par $\exp\left(-i\frac{\mathcal{E}t}{\hbar}\right)$ pour retrouver la fonction d'onde complète, on remarque que δ est l'amplitude de l'onde progressive provenant de $x = +\infty$. Or, au vu des conditions initiales, celle-ci n'existe pas. On choisit donc $\delta = 0$.

Il reste trois coefficients complexes qui doivent être déterminés. Nous avons deux relations imposées par la continuité de Φ et de $\frac{d\Phi}{dx}$ en 0.

On écrit donc

$$\Phi(0) = \alpha + \beta = \gamma \quad \text{et} \quad \frac{d\Phi}{dx}(0) = ik_x\alpha - ik_x\beta = iK_x\gamma.$$

On en déduit

$$\beta = \frac{k_x - K_x}{k_x + K_x}\alpha \quad \text{et} \quad \gamma = \frac{2k_x}{k_x + K_x}\alpha.$$

Le coefficient α reste libre et il ne peut pas être déterminé. En effet, pour le déterminer, il faudrait utiliser la condition de normalisation de la fonction d'onde, ce qui n'est pas possible car la fonction d'onde de l'onde plane n'est pas normalisable. Il faudrait donc se ramener à un paquet d'onde.

On pose les coefficients de transmission en amplitude $\underline{t} = \frac{2k_x}{k_x + K_x}$ et de réflexion en amplitude

$$\underline{r} = \frac{k_x - K_x}{k_x + K_x}.$$

On a alors

$$\Phi(x) = \begin{cases} \alpha e^{ik_x x} + \alpha \underline{r} e^{-ik_x x} & \text{si } x < 0 \\ \alpha \underline{t} e^{iK_x x} & \text{sinon.} \end{cases}$$

Les coefficients de réflexion et transmission ont des formes analogues à ceux d'une onde électromagnétique à l'interface entre deux milieux d'indice optique différents. On note également que l'onde réfléchi apparaît même dans une situation où la particule serait uniquement transmise dans la région $x > 0$ dans le cas classique.

Il est possible de tracer cette fonction d'onde en séparant les ondes incidente, réfléchi et transmise comme réalisé figure 3.

Les coefficients \underline{t} et \underline{r} sont réels. Donc la particule quantique ne subit aucun retard à sa réflexion ou sa transmission.

De plus, on constate que le nombre d'onde est plus petit pour $x > 0$, soit une longueur d'onde plus grande. En revenant aux relations de de Bröglie, cela implique une vitesse plus faible. C'est cohérent avec la mécanique classique. En effet, pour la particule libre, l'énergie est sous forme purement cinétique alors qu'en présence du potentiel, une partie de l'énergie de la particule est sous forme potentielle, soit une vitesse plus faible.

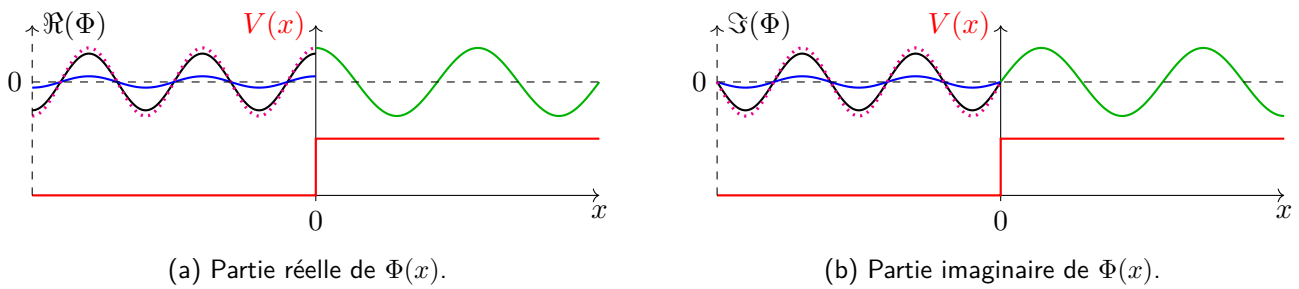


Fig. 3 – Tracé de la partie spatiale de la fonction d'onde sur une marche de potentiel dans le cas où $\mathcal{E} > V_0$. L'onde incidente est en noir, l'onde réfléchiée en bleu et l'onde transmise en vert. La courbe pointillé magenta représente la somme de l'onde incidente et de l'onde réfléchiée et permet de vérifier la continuité de la fonction et de sa dérivée.

2.2.2 Interprétation

On rappelle qu'une onde progressive ne permet pas de décrire une particule. Il faut en réalité considérer un ensemble d'ondes planes via un paquet d'onde pour décrire la particule comme tracé figure 4.

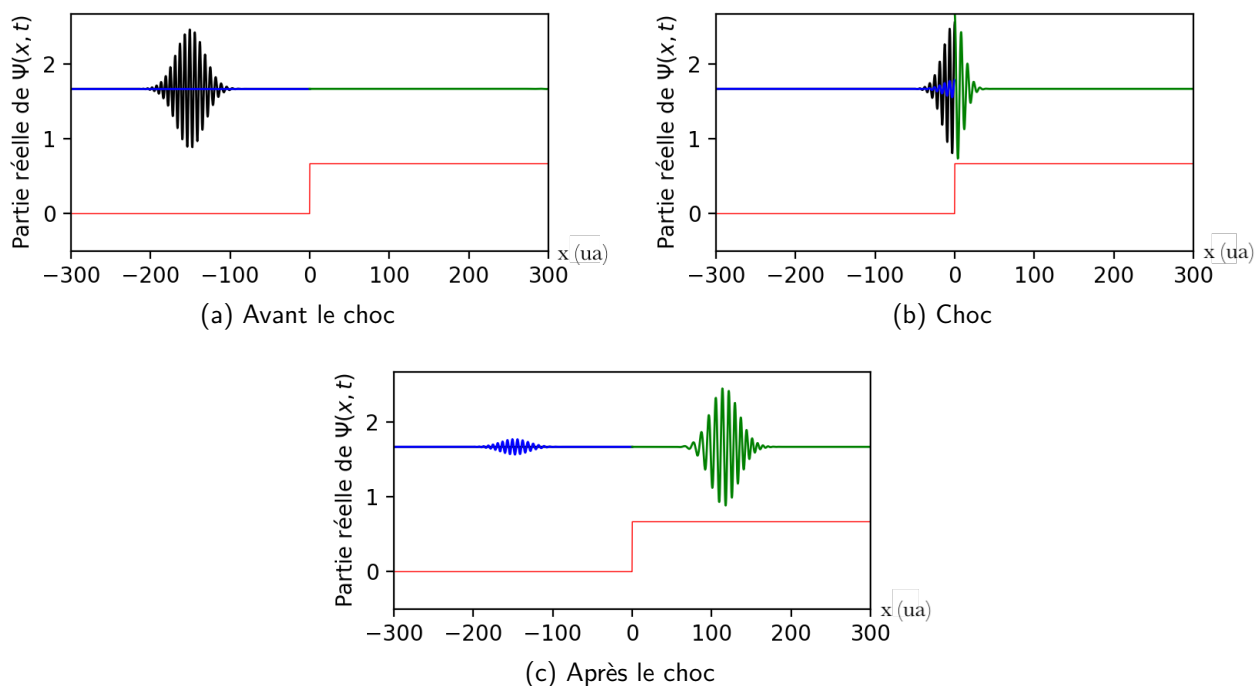


Fig. 4 – Évolution de la partie réelle du paquet d'onde en fonction de la position sur une marche de potentiel dans le cas où $\mathcal{E} > V_0$. L'onde incidente est en noir, l'onde réfléchiée en bleu et l'onde transmise en vert. Les unités sont arbitraires.

Revenons aux ondes progressives pour faciliter les calculs. Le courant de probabilité pour $x < 0$ s'écrit

$$\vec{J}_{x < 0} = \frac{i\hbar}{2m} \left(\Psi \overrightarrow{\text{grad}} \Psi^* - \Psi^* \overrightarrow{\text{grad}} \Psi \right)$$

avec $\Psi(x, t) = \alpha(e^{ik_x x} + \underline{r} e^{-ik_x x})e^{-i\omega t}$. On a alors

$$\overrightarrow{\text{grad}} \Psi = \alpha i k_x (e^{ik_x x} - \underline{r} e^{-ik_x x}) e^{-i\omega t} \vec{e}_x$$

et donc

$$\Psi \overrightarrow{\text{grad}} \Psi^* = -|\alpha|^2 i k_x (e^{ik_x x} + \underline{r} e^{-ik_x x})(e^{-ik_x x} - \underline{r}^* e^{ik_x x}) \vec{e}_x = -|\alpha|^2 i k_x (1 + |\underline{r}|^2 + \underline{r} e^{-2ik_x x} - \underline{r}^* e^{2ik_x x}) \vec{e}_x$$

puis

$$\Psi^* \overrightarrow{\text{grad}} \Psi = |\alpha|^2 i k_x (1 + |\underline{r}|^2 + \underline{r}^* e^{2ik_x x} - \underline{r} e^{-2ik_x x}) \vec{e}_x .$$

En soustrayant ces deux termes, on constate que les termes croisés disparaissent.

Il vient $\vec{J}_{x<0} = |\alpha|^2 \frac{\hbar k_x}{m} \vec{e}_x - |\alpha|^2 |\underline{r}|^2 \frac{\hbar k_x}{m} \vec{e}_x$. Le courant de probabilité est donc la somme de deux courants correspondant aux ondes incidentes et réfléchies.

En effet, on a vu que pour une fonction d'onde s'écrivant $\Psi_0 e^{-i(\omega(k)t - kx)}$, on trouve $\vec{J} = |\Psi_0|^2 \frac{\hbar \vec{k}}{m}$, soit la norme de la densité de probabilité multipliée par la vitesse de la particule. En posant $A = |\alpha|^2$, on a

- ▷ le courant incident $\vec{J}_i = A \frac{\hbar k_x}{m} \vec{e}_x$;
- ▷ le courant réfléchi $\vec{J}_r = -A |\underline{r}|^2 \frac{\hbar k_x}{m} \vec{e}_x = -A \left(1 - \frac{4k_x K_x}{(k_x + K_x)^2} \right) \frac{\hbar k_x}{m} \vec{e}_x$;
- ▷ le courant transmis $\vec{J}_t = A |\underline{t}|^2 \frac{\hbar K_x}{m} \vec{e}_x = A \frac{4k_x^2}{(k_x + K_x)^2} \frac{\hbar K_x}{m} \vec{e}_x$.

On constate que $\vec{J}_{x<0} = \vec{J}_i + \vec{J}_r = \vec{J}_t$. Le courant de probabilité se conserve à la traversée de la barrière.

On définit alors les coefficients de réflexion $R = \frac{|\vec{J}_r|}{|\vec{J}_i|}$ et de transmission $T = \frac{|\vec{J}_t|}{|\vec{J}_i|}$ de la distribution de probabilité. On calcule alors

$$R = 1 - \frac{4k_x K_x}{(k_x + K_x)^2} \quad \text{et} \quad T = \frac{4k_x K_x}{(k_x + K_x)^2} = 1 - R.$$

Ainsi, on constate qu'en mécanique quantique, il existe une probabilité non nulle que la particule revienne en arrière alors qu'elle a une énergie suffisante pour franchir l'obstacle. Ainsi, si on réalise $N \gg 1$ fois l'expérience, on mesure environ RN fois un retour de la particule.

Toutefois, si on explicite, on a

$$T = \frac{4\sqrt{\mathcal{E}}\sqrt{\mathcal{E} - V_0}}{(\sqrt{\mathcal{E}} + \sqrt{\mathcal{E} - V_0})^2} \xrightarrow{\mathcal{E} \gg V_0} 1.$$

Ainsi, la probabilité de retour, certes non nulle, est d'autant plus faible que l'énergie est grande devant celle de la marche.

2.3 Cas où $\mathcal{E} < V_0$

2.3.1 Résolution

Reprenons maintenant la résolution pour $x > 0$ en modifiant la valeur de l'énergie. On a toujours l'équation de Schrödinger à une dimension qui s'écrit

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Phi}{dx^2}(x) + (\mathcal{E} - V_0) \Phi(x) = 0.$$

Les solutions de l'équation de Schrödinger se mettent cette fois sous la forme

$$\Phi(x) = \gamma e^{K_x x} + \delta e^{-K_x x}$$

avec α et β des nombres complexes dépendant des conditions aux limites. On pose $K_x^2 = \frac{2m(V_0 - \mathcal{E})}{\hbar^2} > 0$.

En multipliant par $\exp\left(-i\frac{\mathcal{E}t}{\hbar}\right)$, on constate que ce n'est pas d'une onde progressive. L'onde ne se propage pas. Toutefois, pour respecter la condition de normalisation, il est nécessaire d'avoir $\gamma = 0$ sinon la fonction d'onde diverge en $x = +\infty$.

Il reste trois coefficients complexes qui doivent être déterminés. Nous avons deux relations imposées par la continuité de Φ et de $\frac{d\Phi}{dx}$ en 0.

On écrit donc

$$\Phi(0) = \alpha + \beta = \delta \quad \text{et} \quad \frac{d\Phi}{dx}(0) = ik_x\alpha - ik_x\beta = -K_x\delta .$$

On en déduit

$$\beta = \frac{K_x + ik_x}{K_x - ik_x}\alpha \quad \text{et} \quad \delta = \frac{2ik_x}{ik_x - K_x}\alpha .$$

Le coefficient α reste libre et il ne peut pas être déterminé. En effet, pour le déterminer, il faudrait utiliser la condition de normalisation de la fonction d'onde, ce qui n'est pas possible car la fonction d'onde de l'onde plane n'est pas normalisable. Il faudrait donc se ramener à un paquet d'onde.

On pose les coefficients de transmission en amplitude $\underline{t} = \frac{2ik_x}{ik_x - K_x}$ et de réflexion en amplitude

$$\underline{r} = \frac{ik_x + K_x}{ik_x - K_x} .$$

On a alors

$$\Phi(x) = \begin{cases} \alpha e^{ik_x x} + \alpha \underline{r} e^{-ik_x x} & \text{si } x < 0 \\ \alpha \underline{t} e^{-K_x x} & \text{sinon.} \end{cases}$$

Il est possible de tracer cette fonction d'onde en séparant les ondes incidente, réfléchiée et transmise comme réalisé figure 5.

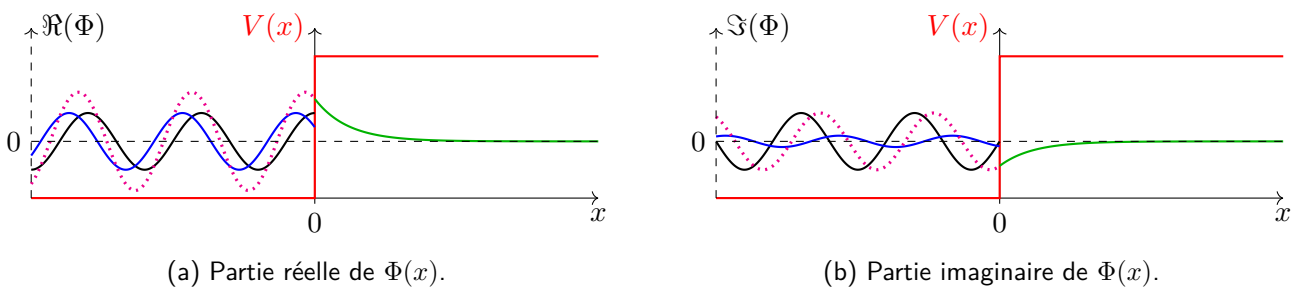


Fig. 5 – Tracé de la partie spatiale de la fonction d'onde sur une marche de potentiel dans le cas où $\mathcal{E} < V_0$. L'onde incidente est en noir, l'onde réfléchiée en bleu et l'onde transmise en vert. La courbe pointillée magenta représente la somme de l'onde incidente et de l'onde réfléchiée et permet de vérifier la continuité de la fonction et de sa dérivée.

On constate que \underline{r} est complexe, il apparaît donc lors de la réflexion un certain déphasage qui, physiquement, est dû au retard que prend la particule en pénétrant dans la région $x > 0$. Ce déphasage est analogue à celui qui apparaît lors de la réflexion de la lumière sur un milieu de type métallique ; par contre, il n'a pas d'analogue en mécanique classique.

Définition. Une onde **évanescence** est une onde dont l'amplitude décroît exponentiellement sans se propager. Son nombre d'onde est un imaginaire pur.

Propriété. La fonction d'onde dans la zone $x > 0$ d'une marche de potentielle pour laquelle l'énergie incidente est plus faible que le potentiel est une onde évanescence.

2.3.2 Interprétation

À nouveau, pour interpréter correctement le phénomène, il faut revenir au paquet d'onde pour décrire la particule comme tracé figure 6.

Ainsi, on constate qu'avant et après le choc, la particule est localisée comme attendu en mécanique classique. Toutefois, pendant le choc, la probabilité de mesurer la probabilité en $x > 0$ est non nulle. La particule peut donc « entrer » dans le mur pendant le choc.

Revenons donc aux courants de probabilité. En posant $A = |\alpha|^2$, il vient deux courants non nuls :

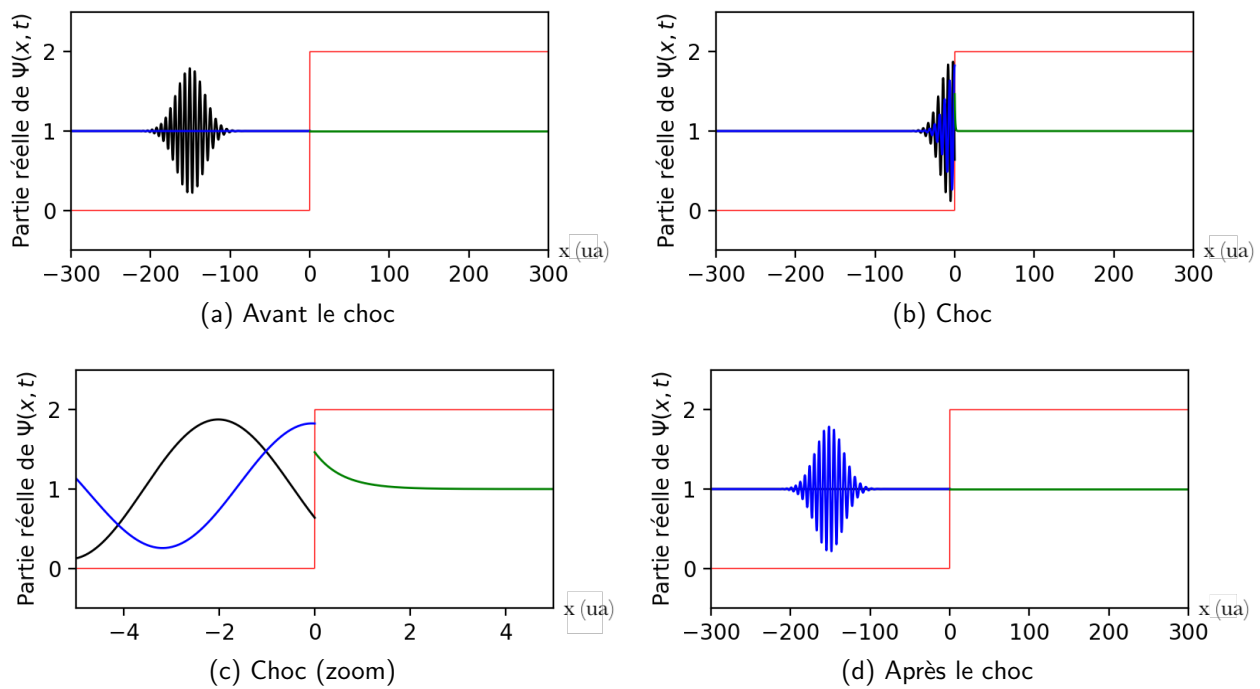


Fig. 6 – Évolution de la partie réelle du paquet d'onde en fonction de la position sur une marche de potentiel dans le cas où $\mathcal{E} < V_0$. L'onde incidente est en noir, l'onde réfléchi en bleu et l'onde transmise en vert. Les unités sont arbitraires.

▷ le courant incident $\vec{J}_i = A \frac{\hbar k_x}{m} \vec{e}_x$;

▷ le courant réfléchi $\vec{J}_r = -A|r|^2 \frac{\hbar k_x}{m} \vec{e}_x = -\vec{J}_i$ car r est de module 1.

On trouve à nouveau pour le calcul $\vec{J}_{x<0} = \vec{J}_i + \vec{J}_r$.

De plus, on trouve par le calcul, avec $\Psi_t = \alpha \underline{t} e^{-K_x x} e^{-i\omega t}$,

$$\vec{J}_t = \frac{i\hbar}{2m} \left(\Psi_t \overrightarrow{\text{grad}} \Psi_t^* - \Psi_t^* \overrightarrow{\text{grad}} \Psi_t \right) = \vec{0} .$$

Ainsi, le coefficient de réflexion vaut $R = \frac{|\vec{J}_r|}{|\vec{J}_i|} = 1$ tandis que celui de transmission est nul. Le module du coefficient de réflexion vaut 1, ce qui veut dire que la probabilité de transmission de la particule s'annule : il n'y a pas de courant de probabilité transmis.

La particule ne peut pas passer l'obstacle, et tout comme en mécanique classique, elle va rebondir dessus.

3 Barrière de potentiel et effet tunnel

Considérons maintenant le cas où la marche redescend à la distance L . Autrement dit, nous avons affaire cette fois à une barrière de potentiel comme représenté figure 7. La particule provient toujours de $x = -\infty$. On note \mathcal{E} l'énergie de la particule incidente.

3.1 Zones où la particule est libre

Dans les zones $x < 0$ et $x > L$, la particule est libre. Les solutions de l'équation précédente se mettent sous la forme

$$\Phi(x) = \alpha e^{ik_x x} + \alpha \underline{r} e^{-ik_x x} \quad \text{pour } x < 0 \quad \text{et} \quad \Phi(x) = \alpha \underline{t} e^{ik_x x} \quad \text{pour } x > L$$

avec α , \underline{r} et \underline{t} des nombres complexes dépendant des conditions aux limites. On pose $k_x^2 = \frac{2m\mathcal{E}}{\hbar^2}$.

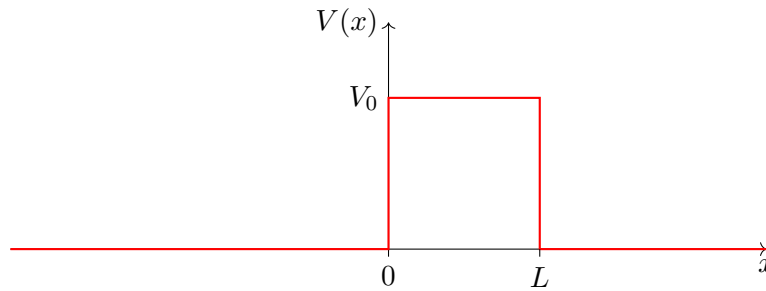


Fig. 7 – Graphe du potentiel de la barrière de potentiel.

La solution en $e^{-ik_x x}$ pour $x > L$ a été directement négligée car elle représente une onde incidente arrivant de $x = +\infty$ ce qui ne correspond pas à notre problème.

Concernant la barrière, à nouveau il faut distinguer les cas où l'énergie est plus grande ou plus petite que la barrière.

3.2 Cas où $\mathcal{E} > V_0$

On a

$$\Phi(x) = \alpha_1 e^{iK_x x} + \beta_1 e^{-iK_x x}$$

avec α_1 et β_1 des nombres complexes dépendant des conditions aux limites. On pose $K_x^2 = \frac{2m(\mathcal{E} - V_0)}{\hbar^2}$.

Avec un peu de technicité calculatoire, on peut exprimer \underline{r} , \underline{t} , α_1 et β_1 en fonction de α en utilisant les continuités de Φ et $\frac{d\Phi}{dx}$ en $x = 0$ et $x = L$. Nous ne ferons pas ce calcul fastidieux qui n'apporte pas d'informations intéressantes.

On remarquera juste que β_1 est non nul, ce qui implique la présence d'un courant de probabilité se propageant vers les x décroissants dans la barrière. La particule peut donc ainsi « rebondir » sur la seconde face de la barrière, bien que celle-ci passe d'une zone plus contraignante (potentiel non nul) à une zone libre.

3.3 Cas où $\mathcal{E} < V_0$ - Effet Tunnel

Il s'agit du cas intéressant. On a

$$\Phi(x) = \alpha_2 e^{K_x x} + \beta_2 e^{-K_x x}$$

avec α_2 et β_2 des nombres complexes dépendant des conditions aux limites. On pose $K_x^2 = \frac{2m(V_0 - \mathcal{E})}{\hbar^2}$.

Cette fonction correspond à une onde stationnaire. Toutefois, cette fonction est nécessairement non nulle comme une somme d'exponentielle en $x = L$.

On peut montrer que le coefficient de transmission T de la probabilité vaut

$$T = \frac{|\vec{J}_t|}{|\vec{J}_i|} = \frac{4k_x^2 K_x^2}{(k_x^2 + K_x^2)^2 \sinh^2(K_x L) + 4k_x^2 K_x^2} = \frac{4\mathcal{E}(V_0 - \mathcal{E})}{V_0^2 \sinh^2(\sqrt{2m(V_0 - \mathcal{E})}L/\hbar) + 4\mathcal{E}(V_0 - \mathcal{E})}$$

La démonstration est donnée pour la culture paragraphe 5.2. Le coefficient de réflexion est donné par $R = 1 - T$.

Définition. Si la longueur du milieu dans lequel l'onde est évanescence est de l'ordre de la longueur d'atténuation $1/K_x$, l'évanescence est **frustrée**, et de la probabilité peut malgré tout passer au travers du milieu.

La particule peut donc passer la barrière malgré le fait que son énergie est insuffisante. On parle d'**effet tunnel**.

Il est possible de tracer cette fonction d'onde en séparant les ondes comme réalisé figure 8.

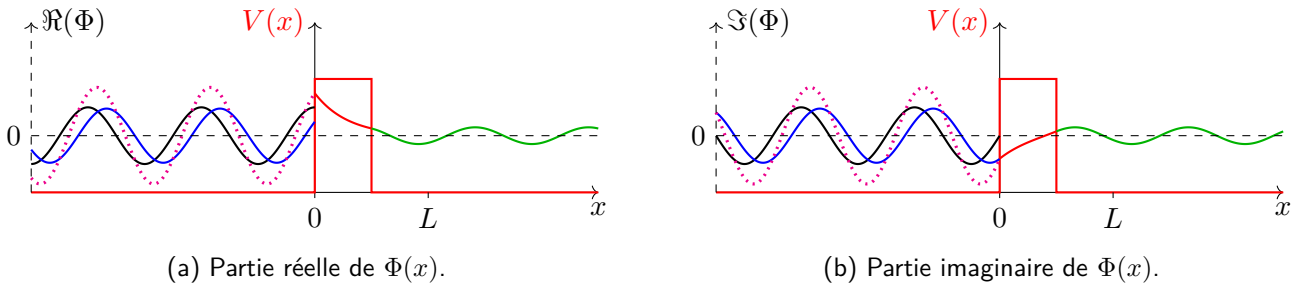


Fig. 8 – Tracé de la partie spatiale de la fonction d'onde sur une barrière de potentiel et visualisation de l'effet tunnel. L'onde incidente est en noir, l'onde réfléchi en bleu, l'onde transmise en vert et l'onde dans la barrière est en rouge. La courbe pointillé magenta représente la somme de l'onde incidente et de l'onde réfléchi et permet de vérifier la continuité de la fonction et de sa dérivée. Même si cela est peu visible en $x = 0$, il y a continuité de la fonction d'onde ainsi que de sa dérivée.

3.3.1 Discussion

Revenons sur le paramètre T que l'on peut réécrire

$$T = \frac{4k_x^2 K_x^2}{(k_x^2 + K_x^2)^2 \sinh^2\left(\frac{L}{L_t}\right) + 4k_x^2 K_x^2}.$$

où on pose la longueur de pénétration typique tunnel $L_t = \frac{1}{K_x} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - \mathcal{E})}}$.

Posons quelques ordres de grandeurs. Pour des énergies exprimées en électronvolt (on rappelle que $1 \text{ eV} = 1.6 \times 10^{-19} \text{ J}$), on a pour un électron $L_{t,e} \approx \frac{10^{-9}}{\sqrt{0.67 \times (V_0 - \mathcal{E})}}$ (en mètre) et pour un nucléon, on a $L_{t,n} \approx \frac{10^{-10}}{\sqrt{12 \times (V_0 - \mathcal{E})}}$ (en mètre).

On rappelle que l'ordre de grandeur de la taille des atomes est de l'ordre de $100 \text{ pm} = 10^{-10} \text{ m}$. Les énergies au niveau atomiques étant de l'ordre de l'électronvolt, on constate que la longueur de pénétration d'un nucléon sera bien inférieure à la taille des atomes. Ainsi, sauf pour les électrons, cet effet sera bien souvent négligeable en dehors de l'atome. Toutefois, il peut expliquer certains effets à cette échelle (comme la symétrie de l'ammoniac NH_3 ou des modèles de désintégration nucléaire).

En ce qui concerne les électrons, cette longueur est bien plus importante et peut avoir des effets non négligeables, notamment dans les circuits électroniques miniaturisés. Cet effet est notamment à la base de certaines diodes ou de la microscopie à effet tunnel.

On peut donc bien souvent faire l'approximation de la barrière épaisse, soit $L \gg L_t$. Or si $x \gg 1$, on a $\sinh x \sim e^x/2$ et donc

$$T \approx 16 \frac{k_x^2 K_x^2}{(k_x^2 + K_x^2)^2} e^{-2L/L_t}.$$

On constate néanmoins que la probabilité de traverser la barrière décroît très rapidement lorsque $V_0 \gg \mathcal{E}$ ou $L \gg L_t$ (barrière haute ou épaisse) et qu'elle tend vers 0 dans la limite classique $\hbar \rightarrow 0$, comme attendu.

La figure 9 représente plusieurs visualisations de l'effet tunnel sur un paquet d'onde en fonction de l'épaisseur de la barrière.

4 Étude du puits de potentiel

Dans cette partie, nous allons discuter du phénomène d'une particule confinée. Le confinement peut être dû à plusieurs facteurs, par exemple une balle dans un vrai puits, mais pour discuter de phénomènes quantiques, nous devons aller chercher plus petit.

Prenons par exemple un électron confiné dans un puits d'énergie potentielle causé par des forces mécaniques extérieures. Ce type de modèle permet en première approximation de décrire sommairement

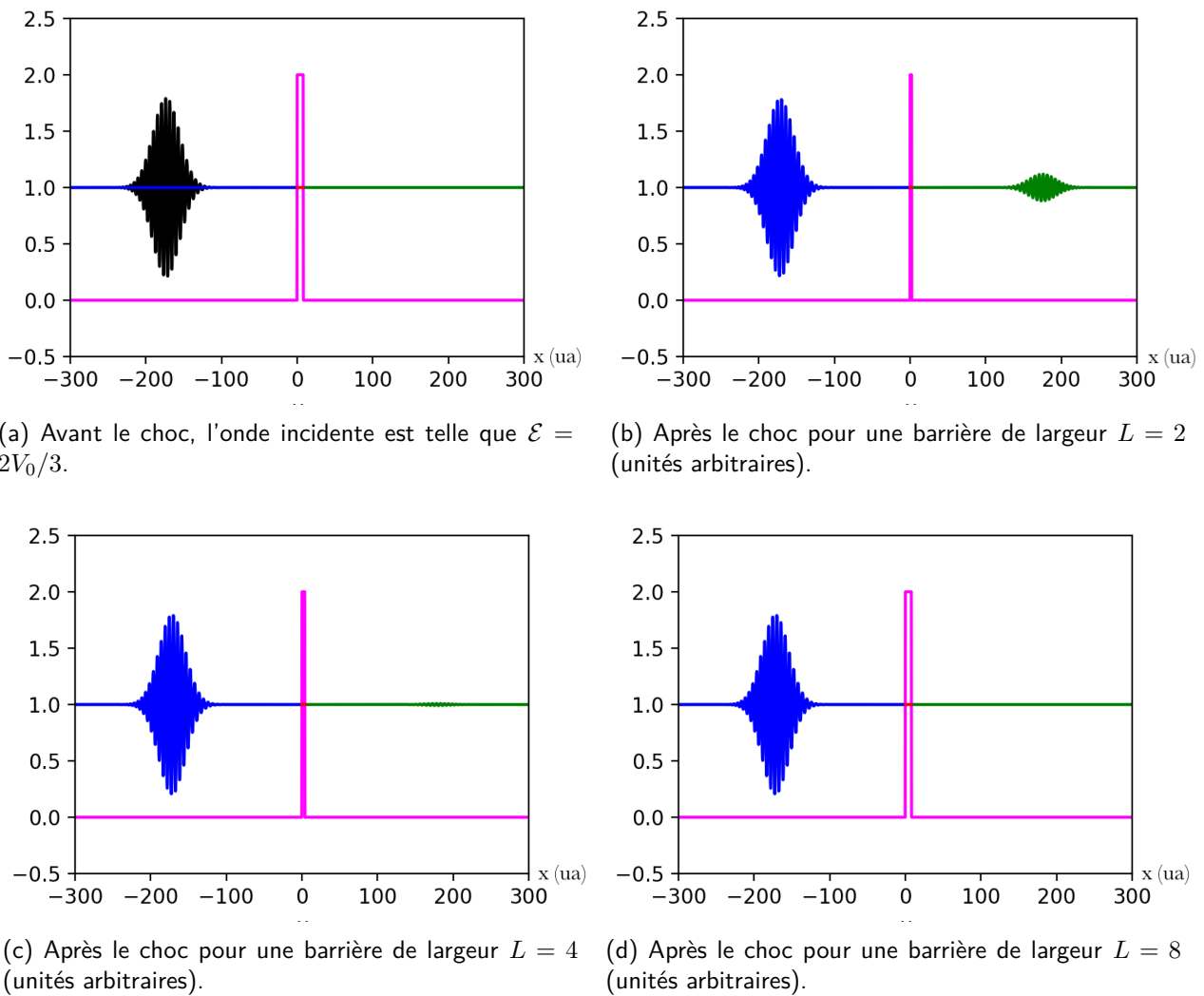


Fig. 9 – Évolution de la partie réelle du paquet d'onde avant et après un effet tunnel en fonction de l'épaisseur de la barrière. L'onde incidente est en noir, l'onde réfléchi en bleu et l'onde transmise en vert. Les unités sont arbitraires.

pourquoi un électron reste confiné autour d'un noyau dans un atome ou le confinement des électrons dans un métal.

Comme dans les paragraphes précédents, on étudie des solutions stationnaires de l'équation de Schrödinger.

4.1 Le puits de profondeur finie

On étudie une particule d'énergie $\mathcal{E} < V_0$ dans un puits de potentiel représenté figure 10.

Il faut résoudre l'équation de Schrödinger dans les différentes zones de l'espace, comme cela a été fait précédemment.

$$\text{On pose } k_x^2 = \frac{2m\mathcal{E}}{\hbar^2} \text{ et } K_x^2 = \frac{2m(V_0 - \mathcal{E})}{\hbar^2}.$$

Pour $x < -a/2$, on a

$$\Phi(x) = \alpha_1 e^{K_x x} + \beta_1 e^{-K_x x} = \alpha_1 e^{K_x x}.$$

En effet, on a nécessairement $\beta_1 = 0$ pour éviter la divergence de la fonction d'onde en $x \rightarrow -\infty$.

De même, pour $x > a/2$, on a

$$\Phi(x) = \alpha_3 e^{K_x x} + \beta_3 e^{-K_x x} = \beta_3 e^{-K_x x}.$$

Cette fois, on a nécessairement $\alpha_3 = 0$ pour éviter la divergence de la fonction d'onde en $x \rightarrow +\infty$.

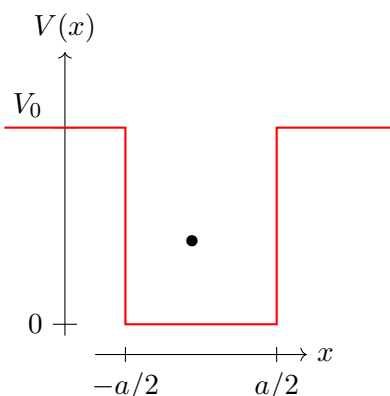


Fig. 10 – Schématisation d'une particule piégée dans un puits d'énergie potentielle de taille a .

Dans la zone du puits, on a

$$\Phi(x) = \alpha_2 e^{ik_x x} + \beta_2 e^{-ik_x x}.$$

En conclusion, il y a 4 coefficients à déterminer α_1 , α_2 , β_2 et β_3 . Pour les déterminer, il y a la relation de normalisation et quatre relations de continuité, de la fonction d'onde et de sa dérivée en $x = -a/2$ et $x = a/2$. Soit cinq équations pour 4 coefficients. En conséquence, soit le système n'a pas de solution, ce qui n'est pas physiquement acceptable, soit un autre paramètre va être imposé par ces relations. Ce dernier paramètre libre est l'énergie, et donc la longueur d'onde dans le puits.

La résolution de ce système est fastidieuse. Nous pouvons à la place mener une discussion graphique basée sur la vérification de ces continuités. Plusieurs solutions sont représentées figure 11.

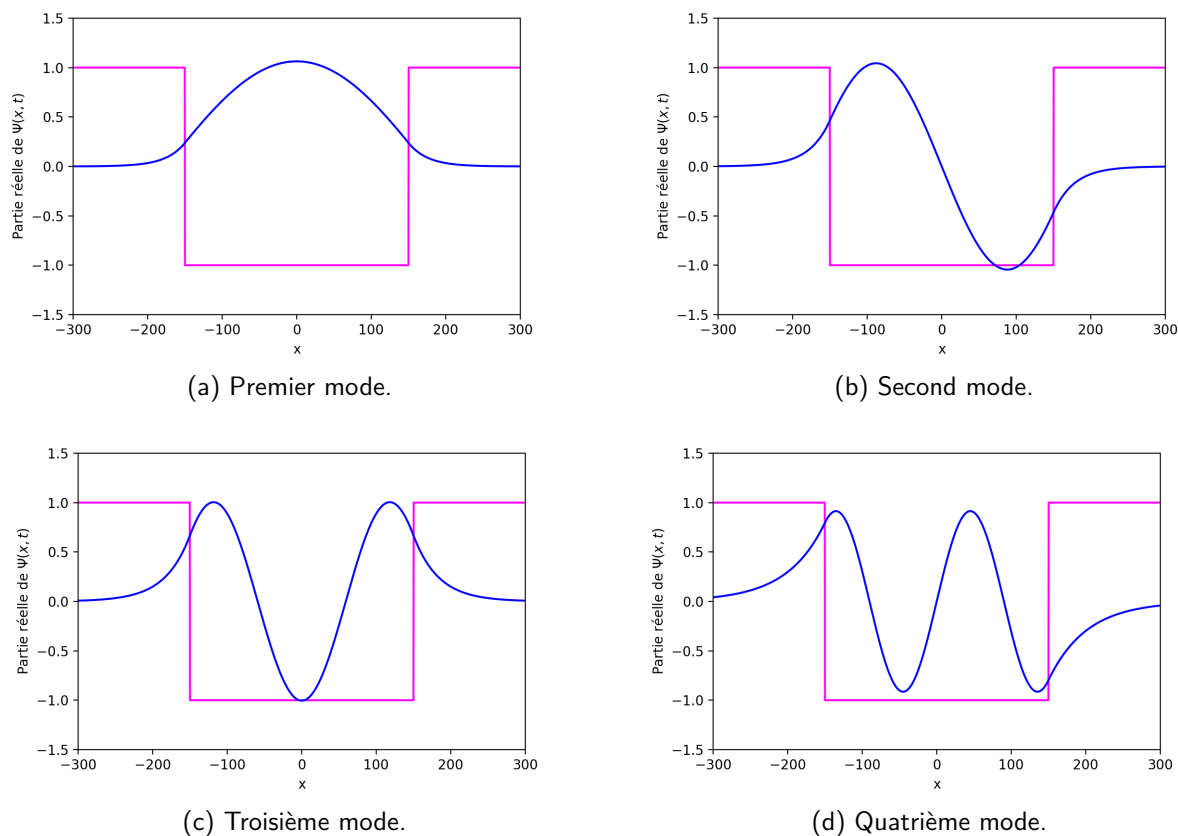


Fig. 11 – Solutions de l'équation de Schrödinger dans un puits fini tel que représenté figure 10. Seules ces solutions vérifient les relations de continuité et de normalisation. Pour des raisons graphiques, les fonctions d'ondes représentées le sont en unité arbitraire.

Propriété. Les conditions de continuité et de normalisation de la fonction d'onde d'une particule confinée d'énergie \mathcal{E} dans un puits de potentiel de hauteur $V_0 > \mathcal{E}$ imposent une quantification de l'énergie. Seules certaines valeurs d'énergie sont possibles pour la particule.

4.2 Modes propres du puits infini

Pour aller plus loin dans les calculs de façon analytique, nous allons considérer le puits de potentiel infini. On étudie maintenant un puits infini comme représenté figure 12. Il s'agit de la limite du cas précédent lorsque V_0 tend vers l'infini. Ainsi, la longueur de pénétration de l'onde dans la barrière tend vers 0 car K_x tend vers l'infini.

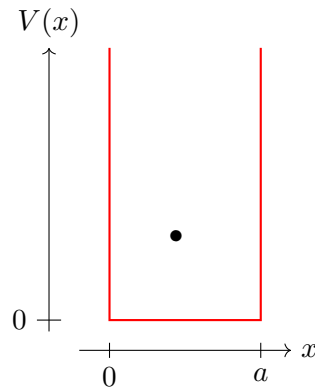


Fig. 12 – Schématisation d'une particule piégée dans un puits infini d'énergie potentielle de taille a . Les murs sont infranchissables et la particule doit nécessairement rester dans le puits.

4.2.1 Étude des modes propres

Entre 0 et a , la particule est décrite par l'équation

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Phi}{dx^2}(x) + \mathcal{E}\Phi(x) = 0.$$

Les solutions de l'équation précédente se mettent sous la forme

$$\Phi(x) = \alpha e^{ik_x x} + \beta e^{-ik_x x}$$

avec α et β des nombres complexes dépendant des conditions aux limites avec $\mathcal{E} = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m}$.

La particule ne peut pas franchir le mur et il y a continuité de la fonction d'onde, ainsi $\Phi(0) = \Phi(a) = 0$. Il n'y a pas cette fois de continuité de la dérivée car celle-ci n'est pas vraie en cas de mur infini.

Remarque : Ce résultat se comprend aisément en prenant le puits infini comme limite du puits fini. Le fait que la longueur de pénétration dans le potentiel tende vers 0 permet de maintenir la continuité de la fonction mais empêche la continuité de la dérivée.

Ces conditions aux limites impliquent

$$\alpha + \beta = 0 \quad \text{et} \quad \alpha e^{ik_x a} + \beta e^{-ik_x a} = 0.$$

De la première équation, on arrive à $\alpha = -\beta$ d'où

$$0 = \alpha (e^{ik_x a} - e^{-ik_x a}) = 2\alpha i \sin(k_x a).$$

Or α ne peut pas être nul, car sinon la fonction d'onde serait nulle, il vient $\sin(k_x a) = 0$.

Pour vérifier cette condition, sachant que k_x est positif, il vient $k_x a = n\pi$ avec $n \in \mathbb{N}^*$.

Propriété. Les solutions de l'équation de Schrödinger d'une particule confinée dans un puits de potentiel infini impliquent que l'énergie est quantifiée et vaut $\mathcal{E}_n = n^2 \frac{\hbar^2}{2ma^2}$ avec $n \in \mathbb{N}^*$.

Les fonctions d'onde correspondantes valent

$$\Psi_n(x, t) = 2\alpha_n i \sin\left(n\pi \frac{x}{a}\right) \exp\left(-i \frac{\mathcal{E}_n t}{\hbar}\right).$$

Le coefficient α_n est calculée en utilisant la condition de normalisation, en effet

$$1 = \int_0^a |\Psi_n(x, t)|^2 dx = 4\alpha_n^2 \int_0^a \sin^2\left(n\pi \frac{x}{a}\right) dx = 2\alpha_n^2 \int_0^a \left[1 - \cos\left(2n\pi \frac{x}{a}\right)\right] dx = 2a\alpha_n^2.$$

Il vient donc

$$\Psi_n(x, t) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(n\pi \frac{x}{a}\right) \exp\left(-i \frac{\mathcal{E}_n t}{\hbar}\right).$$

Propriété. Le confinement d'une particule quantique dans un puits infini impose l'apparition de modes propres quantifiés $\Psi_n(x, t)$ indexés par un entier naturel n .

Les premiers modes sont représentés figure 13.

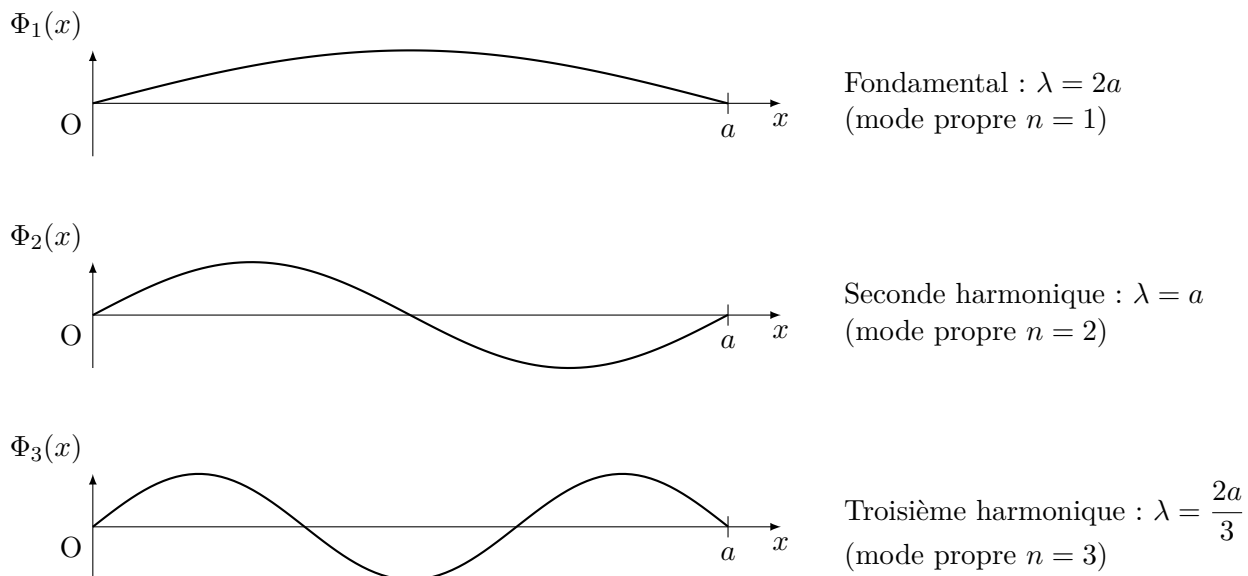


Fig. 13 – Représentation de la partie spatiale des premiers modes la fonction d'onde d'une particule confinée dans un puits infini. Ces modes sont bien la limite de ceux du puits fini de la figure 11 lorsque la longueur de pénétration tend vers 0.

On retrouve les résultats des ondes stationnaires sur une corde vibrante.

4.2.2 Discussion sur l'énergie

Reprenons l'exemple du puits fini. En dehors de celui-ci, son énergie vaut $\mathcal{E} = \mathcal{E}_c^1 + V_0$. Dans le puits, l'énergie devient purement potentielle et $\mathcal{E} = \mathcal{E}_c^p$. L'énergie cinétique dans le puits est donc plus importante qu'en dehors.

Propriété. En se confinant dans un puits de potentiel, une particule gagne de l'énergie cinétique.

On constate, dans les cas fini et infini, que la fonction d'onde est non nulle pour tous les modes dans tout le puits. Cela implique donc que la probabilité de présence de la particule est non nulle sur tout le puits. La particule est délocalisée et on peut dire qu'en ordre de grandeur l'imprécision sur sa position vaut a . Ainsi, en ordre de grandeur, $p_x \sim \frac{\hbar}{2a}$. L'énergie valant $\mathcal{E} = \frac{p^2}{2m} \sim \frac{\hbar^2}{8ma^2}$. On retrouve bien l'ordre de grandeur de l'énergie minimale.

Pour un puits taille finie, on constate figure 11 que la taille de la zone de confinement est plus importante. En effet, la particule pouvant pénétrer dans les bords par effet tunnel, elle est localisée sur une zone plus importante. Ainsi, qualitativement, l'impulsion est plus faible.

Propriété. À mode fixé, les énergies des modes du puits infini sont plus élevés que ceux du puits fini.

4.3 Superposition d'états quantiques

4.3.1 Principe

Considérons une particule confinée. Si son énergie n'est pas exactement égale à celle d'un mode propre, sa fonction d'onde ne sera pas un mode propre mais une superposition de plusieurs d'entre eux. Notons Ψ sa fonction d'onde et Φ_n les différents modes propres. Cette décomposition peut s'écrire

$$\Psi(M, t = 0) = \sum_n \alpha_n \Phi_n(M).$$

On dit que les différents modes sont **peuplés**.

Remarque : Trouver les états stationnaires d'un problème quantique est une tâche pouvant s'avérer extrêmement complexe. Dans ce genre de cas, on devra faire appel à des méthodes plus élaborées.

Les états Φ_n étant stationnaires, ils vont évoluer dans le temps sous la forme $\chi(M) \exp\left(-\frac{i\mathcal{E}_n t}{\hbar}\right)$ avec \mathcal{E}_n l'énergie du mode. Le principe de superposition permet ainsi de décrire l'évolution de l'état quantique Ψ :

$$\Psi(M, t) = \sum_n \alpha_n \Phi_n(M) \exp\left(-\frac{i\mathcal{E}_n t}{\hbar}\right).$$

4.3.2 Exemple du système à deux états

Dans le cas d'un système ne comportant que deux états quantiques représentés par les fonctions d'onde Φ_1 et Φ_2 : $\Psi(M, t = 0) = \alpha_1 \Phi_1(M) + \alpha_2 \Phi_2(M)$. Pour un instant ultérieur, on obtient une densité de probabilité de la forme suivante, pour α_1 et α_2 réels :

$$\begin{aligned} |\Psi(M, t)|^2 &= \left| \alpha_1 \Phi_1(M) \exp\left(-\frac{i\mathcal{E}_1 t}{\hbar}\right) + \alpha_2 \Phi_2(M) \exp\left(-\frac{i\mathcal{E}_2 t}{\hbar}\right) \right|^2 \\ &= |\alpha_1|^2 |\Phi_1(M)|^2 + |\alpha_2|^2 |\Phi_2(M)|^2 + 2\alpha_1 \alpha_2 \Re \left[\Phi_1(M) \Phi_2^*(M) \exp\left[\frac{i(\mathcal{E}_2 - \mathcal{E}_1)t}{\hbar}\right] \right]. \end{aligned}$$

Propriété. Ainsi, la densité de probabilité de présence en un point donné de l'espace d'une particule d'un système à deux états quantique est modulée temporellement par un terme oscillant à la fréquence $\frac{|\mathcal{E}_1 - \mathcal{E}_2|}{\hbar}$.

5 Compléments

Les éléments de ces paragraphes sont hors programme, il sont donnés ici pour la culture.

5.1 Continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée dans le cas d'un potentiel borné

On étudie un état stationnaire. Si la partie spatiale de la fonction d'onde est continue, la fonction d'onde est elle-même continue.

Considérons pour commencer un potentiel $V(x)$, éventuellement discontinu, mais borné. Étudions la fonction d'onde au voisinage d'un point x_0 , éventuellement siège d'une discontinuité du potentiel.

Partons de l'équation de Schrödinger écrite sous forme

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

et posons $\varepsilon > 0$.

Il vient, en intégrant la relation précédente,

$$\frac{d\Phi}{dx}(x_0 + \varepsilon) - \frac{d\Phi}{dx}(x_0 - \varepsilon) = -\frac{2m}{\hbar^2} \int_{x_0 - \varepsilon}^{x_0 + \varepsilon} (\mathcal{E} - V(x))\Phi(x)dx . \quad (5.1)$$

La fonction d'onde est nécessairement bornée pour assurer sa normalisation. Le potentiel étant lui même borné, on a naturellement

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{x_0 - \varepsilon}^{x_0 + \varepsilon} (\mathcal{E} - V(x))\Phi(x)dx = 0$$

et donc

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{d\Phi}{dx}(x_0 + \varepsilon) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{d\Phi}{dx}(x_0 - \varepsilon)$$

ce qui implique donc que la dérivée de la fonction d'onde est continue.

On en conclut que la fonction d'onde est elle même continue car sa dérivée l'est. Cette propriété est vraie en tout point de l'espace où le potentiel est borné.

5.2 Calcul du coefficient de transmission de l'effet tunnel

Reprenons les notations du paragraphe 3.

Continuité en $x = 0$: On a

$$\alpha(1 + \underline{r}) = \alpha_1 + \beta_1 \quad (5.2)$$

et

$$ik_x \alpha(1 - \underline{r}) = K_x(\alpha_1 - \beta_1) . \quad (5.3)$$

Continuité en $x = L$: On a

$$\alpha_1 e^{K_x L} + \beta_1 e^{-K_x L} = \alpha \underline{t} e^{ik_x L} \quad (5.4)$$

et

$$K_x (\alpha_1 e^{K_x L} - \beta_1 e^{-K_x L}) = ik_x \alpha \underline{t} e^{ik_x L} . \quad (5.5)$$

Manipulation des équations : Commençons par ajouter (5.5) et K_x fois 5.4, il vient

$$2K_x \alpha_1 e^{K_x L} = \alpha \underline{t} (ik_x + K_x) e^{ik_x L} . \quad (5.6)$$

Maintenant, soustrayons ces deux même équations, il vient

$$-2K_x \beta_1 e^{-K_x L} = \alpha \underline{t} (ik_x - K_x) e^{ik_x L} . \quad (5.7)$$

Il faut maintenant exprimer \underline{t} en fonction de α uniquement, soit en faisant disparaître \underline{r} . Pour cela, ajoutons (5.3) et ik_x fois (5.2). Il vient

$$2ik_x \alpha = K_x(\alpha_1 - \beta_1) + ik_x(\alpha_1 + \beta_1) = (K_x + ik_x)\alpha_1 + (-K_x + ik_x)\beta_1 . \quad (5.8)$$

Il reste alors à remplacer α_1 et β_1 en utilisant les équations (5.6) et (5.7), soit

$$2ik_x \alpha = \frac{(K_x + ik_x)\alpha}{2K_x e^{K_x L}} \underline{t} (ik_x + K_x) e^{ik_x L} + \frac{(-K_x + ik_x)}{-2K_x e^{-K_x L}} \alpha \underline{t} (ik_x - K_x) e^{ik_x L} . \quad (5.9)$$

Il vient alors

$$4ik_x K_x e^{-ik_x L} = \left((K_x + ik_x)^2 e^{-K_x L} - (K_x - ik_x)^2 e^{K_x L} \right) \underline{t} . \quad (5.10)$$

On développe cette expression et on regroupe le termes

$$4ik_x K_x e^{-ik_x L} = \left[(K_x^2 - k_x^2) (e^{-K_x L} - e^{K_x L}) + 2ik_x K_x (e^{-K_x L} + e^{K_x L}) \right] \underline{t} . \quad (5.11)$$

Soit donc

$$\underline{t} = \frac{2ik_x K_x e^{-ik_x L}}{(k_x^2 - K_x^2) \sinh(K_x L) + 2ik_x K_x \cosh(K_x L)}. \quad (5.12)$$

Or par définition, on a

$$T = \frac{|\vec{J}_t|}{|\vec{J}_i|} = |\underline{t}|^2 = \frac{4k_x^2 K_x^2}{[(k_x^2 - K_x^2) \sinh(K_x L)]^2 + [2k_x K_x \cosh(K_x L)]^2}.$$

Or on sait que $\cosh^2 x - \sinh^2 x = 1$, d'où

$$T = \frac{4k_x^2 K_x^2}{(k_x^4 - 2k_x^2 K_x^2 + K_x^4) \sinh^2(K_x L) + 4k_x^2 K_x^2 \cosh^2(K_x L)} = \frac{4k_x^2 K_x^2}{(k_x^4 + 2k_x^2 K_x^2 + K_x^4) \sinh^2(K_x L) + 4k_x^2 K_x^2}.$$

D'où finalement

$$T = \frac{4k_x^2 K_x^2}{(k_x^2 + K_x^2)^2 \sinh^2(K_x L) + 4k_x^2 K_x^2}.$$