La suite du chapitre 2

II-Etats stationnaires d'une particule dans des potentiels carrés indépendants du temps

On considère une particule quantique de masse m en mouvement dans un espace à une dimensions (supposé dans la suite l'axe des x). Nous supposons que la particule est plongée dans un potentiel scalaire $V(x)$ indépendant du temps. On se propose de déterminer les états stationnaires associés à la particule dans différents cas de potentiels

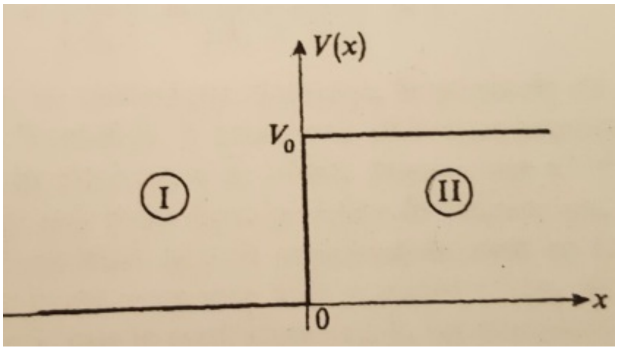
1-Comportement d'une fonction d'onde stationnaire $\varphi\ (x)$

Dans le cas d'un potentiel carré, V(x) est une fonction constante V(x) = V dans certaines régions de l'espace.

$$\frac{d^2}{dx^2}\varphi(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\varphi(x) = 0 \quad (1)$$

2-Marches de Potentiel

$$V(x) = \begin{cases} 0 \ ; \ x \leq 0 \\ V_0 \ ; \ x > 0 \end{cases}$$



a- <u>Cas où $E > V_0$; **réflexion partielle**</u>

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

La solution de l'équation (1) dans les deux régions I (x < 0) et II (x > 0) :

$$\varphi_I(x) = A_1 e^{ik_1 x} + A_1' e^{-ik_1 x} \quad (3)$$

$$\varphi_{II}(x) = A_2 e^{ik_2 x} + A_2' e^{-ik_2 x} \quad (4)$$

Les conditions de raccordement en x = 0 et avec $A'_2 = 0$ (car la particule incidente provenant de $x = -\infty$) :

$$\frac{A'_1}{A_1} = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \qquad (5)$$

$$\frac{A_2}{A_1} = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} \qquad (6)$$

$\varphi_I(x)$ est la superposition de deux ondes : la première (terme en A_1) correspond à une particule incidente, d'impulsion $p = \hbar k_1$, se propageant de gauche à droite ; la seconde (terme A'_1) à une particule réfléchie, d'impulsion $-\hbar k_1$, se propageant en sens opposé à la précédente.

Grace à la notion de courant de probabilité, les coefficients de transmission T et de réflexion R sont :

$$R = \left|\frac{A'_1}{A_1}\right|^2 \qquad (7)$$

$$T = \frac{k_2}{k_1}\left|\frac{A_2}{A_1}\right|^2 \qquad (8)$$

d'où

$$R = 1 - \frac{4k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2} \qquad (9)$$

$$T = \frac{4k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2} \qquad (10)$$

On vérifié aisément que $R + T = 1$: il est certain que la particule est soit transmise, soit réfléchie. Contrairement aux prévisions de la mécanique classique, la particule incidente a une probabilité non nulle de revenir en arrière. On sait d'ailleurs en optique qu'une telle réflexion se fait sans retard de phase ; effectivement ; les égalités (5) et (6) indiquent bien que les rapports $\frac{A'_1}{A_1}$ et $\frac{A_2}{A_1}$ sont réels. Donc, la particule quantique ne subit aucun retard à sa réflexion ou à sa transmission. Si E >>V_0, on a T≈1 : lorsque la particule a une énergie suffisamment grande pour rendre négligeable la hauteur de la marche de potentiel, elle franchit cette marche comme si elle n'existait pas.

b- Cas où $0<E < V_0$; **réflexion totale**

$$\rho_2 = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} \qquad (11)$$

$$\varphi_{II}(x) = B_2 e^{\rho_2 x} + B_2' e^{-\rho_2 x} \qquad (12)$$

Pour que la solution reste bornée lorsque $x \to +\infty$, il faut que $B_2 = 0$

Les conditions de raccordement en $x = 0$ donnent dans ce cas :

$$\frac{A_1'}{A_1} = \frac{k_1 - i\rho_2}{k_1 + i\rho_2} \qquad (13)$$

$$\frac{B'_2}{A_1} = \frac{2k_1}{k_1 + i\rho_2} \qquad (14)$$

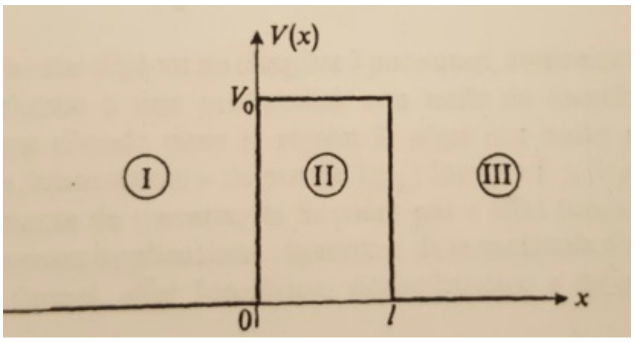
Le coefficient de réflexion R vaut alors :

$$R = \left|\frac{A_1'}{A_1}\right|^2 = \left|\frac{k_1 - i\rho_2}{k_1 + i\rho_2}\right|^2 = 1 \qquad (15)$$

Comme en mécanique classique, la particule est donc réfléchie (réflexion totale).

3- Barrières de potentiel

$$V(x) = \begin{cases} V_0 \ ; \ \ 0 < x < l \\ \ 0 \ ; \ ailleurs \end{cases}$$



a- Cas où $E > V_0$; **résonances**

Avec la notation de l'équation (2), on trouve dans les trois régions I (x < 0), II (0 < x < l) et III (x > l) :

$$\varphi_I(x) = A_1 e^{ik_1x} + A_1' e^{-ik_1x} \qquad (16)$$

$$\varphi_{II}(x) = A_2 e^{ik_2x} + A_2' e^{-ik_2x} \qquad (17)$$

$$\varphi_{III}(x) = A_3 e^{ik_1x} + A_3' e^{-ik_1x} \qquad (18)$$

Prenons, $A'_3 = 0$ (particule incidente venant de $x = -\infty$) .

Les conditions de raccordement en x = l, donnent alors A_2 et A'_2 en fonction de A_3, celles de raccordement en x = 0, A_1 et A'_1 en fonction de A_2 et A'_2, et par suite de A_3; on trouve :

$$A_1 = \left[\cos k_2 l - i\frac{k_1^2 + k_2^2}{2k_1k_2}\sin k_2 l\right] e^{ik_1l} A_3 \qquad (19)$$

$$A'_1 = i\frac{k_2^2 - k_1^2}{2k_1k_2}\sin k_2 l \, e^{ik_1l} A_3 \qquad (20)$$

A'_1/A_1 et A_3/A_1 permettent de calculer les coefficients de réflexion R et de transmission T de la barrière, qui valent ici :

$$R = \left|\frac{A'_1}{A_1}\right|^2 = \frac{(k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2 k_2 l}{4k_1^2k_2^2 + (k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2 k_2 l} \qquad (21)$$

$$T = \left|\frac{A_3}{A_1}\right|^2 = \frac{4k_1^2k_2^2}{4k_1^2k_2^2 + (k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2 k_2 l} \qquad (22)$$

On vérifie alors facilement que R + T =1.

b- Cas où $0<E < V_0$; **effet tunnel**

Il faut remplacer équation (17) par (12), ρ_2 étant toujours donné par (11). Les conditions de raccordement en x = 0 et x = l, permettent de calculer le coefficient de transmission de la barrière. En fait, il est inutile de recommencer les calculs : il suffit de remplacer, dans les égalités obtenus au paragraphe précédent, k_2 par $-i\rho_2$, il vient alors :

$$T = \left|\frac{A_3}{A_1}\right|^2 = \frac{4E(V_0-E)}{4E(V_0-E)+V_0^2 sh^2[\sqrt{2m(V_0-E)}\ l/\hbar]} \qquad (23)$$

Avec, bien sur, R = 1 –T.

Lorsque ρ_2 l >> 1, on a :

$$T = \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2}\ e^{-2\rho_2 l} \quad (24)$$

Contrairement aux prédictions classiques, la particule a une probabilité non nulle de franchir la barrière de potentiel : la fonction d'onde dans la région II n'est pas nulle, mais a le comportement d'une « onde évanescente » de portée $1/\rho_2$; lorsque $l \leq 1/\rho_2$, la particule a une probabilité importante de traverser la barrière par « effet tunnel ».