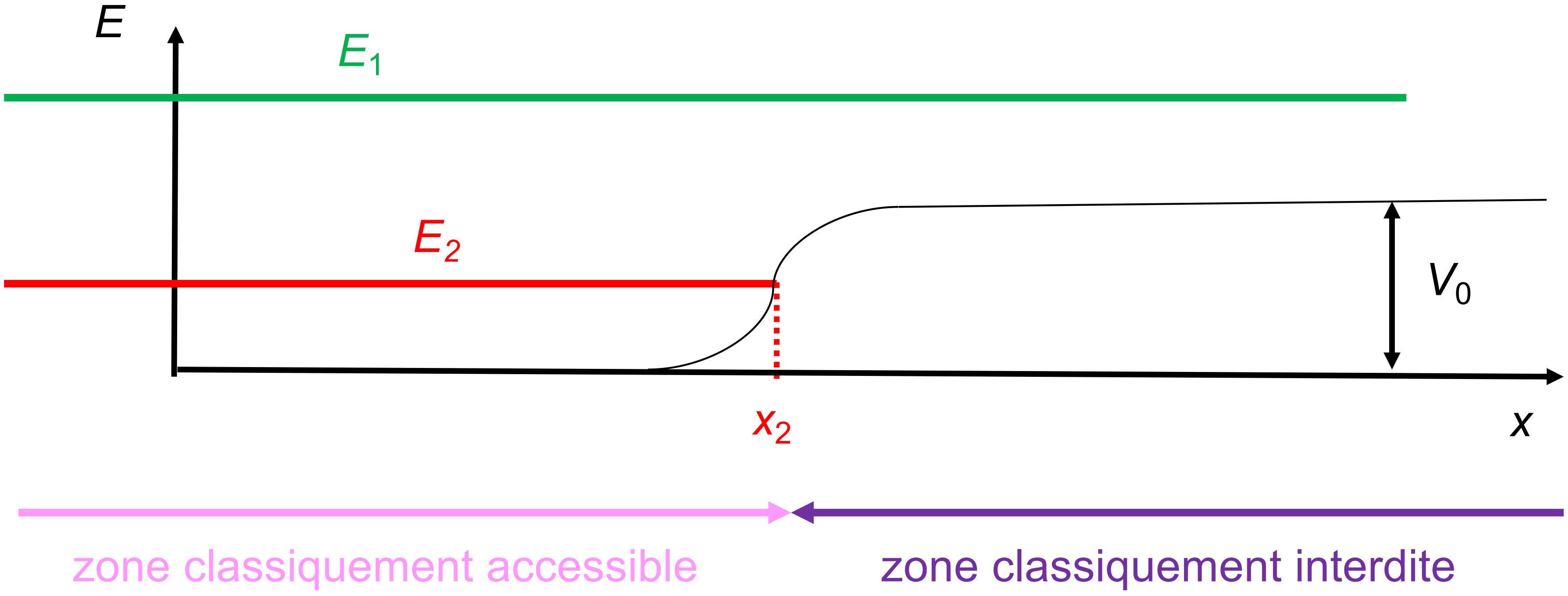
Cours 13

États non-liés

- Saut de potentiel : énergies inférieures à la hauteur
- Saut de potentiel : énergies supérieures à la hauteur
- Barrière de potentiel : régime de transmission et effet tunnel

Saut de potentiel



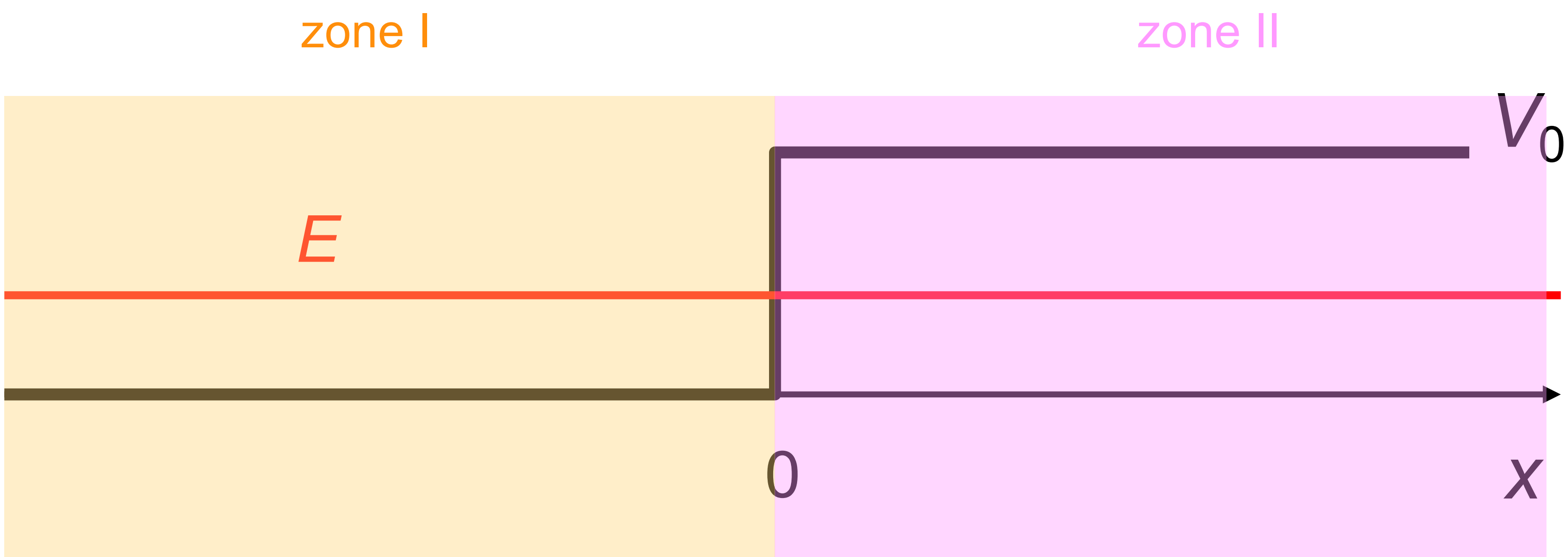
Classiquement

- $E > V_0$ (par exemple pour E_1) la particule continue à se déplacer vers la droite, mais avec une énergie cinétique plus faible.

- $E < V_0$ (par exemple pour E_2) la particule arrive jusqu'à x_2 où $V(x_2) = E_2$, mais n'arrive pas à pénétrer la zone où $V(x) > E_2$ (zone classiquement interdite)

Saut de potentiel en mécanique quantique

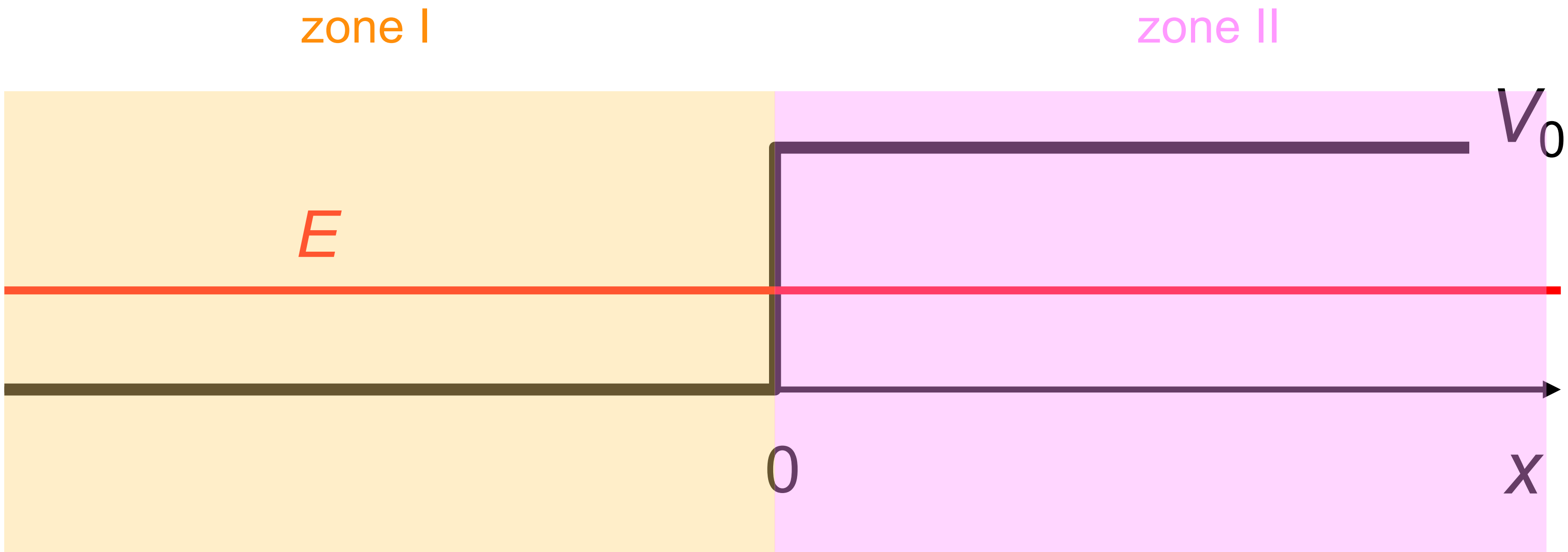
Par simplicité, considérons un *saut de potentiel carré* :



Cherchons les solutions stationnaires $E < V_0$.

On définit deux zones, la zone I et la zone II, où le potentiel est plat.

Forme de la function d’onde



$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\phi_{\mathrm{I}}(x)}{\partial x^2} = \underbrace{E}_{>0}\,\phi_{\mathrm{I}}(x) \qquad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\phi_{\mathrm{II}}(x)}{\partial x^2} = \underbrace{(E - V_0)}_{<0}\,\phi_{\mathrm{II}}(x)$$

$$\phi_{\mathrm{I}} = C\exp(i\,k\,x) + D\exp(-i\,k\,x) \qquad \phi_{\mathrm{II}} = A\exp(-q\,x) + B\exp(q\,x)$$

$$k = \sqrt{2\,m\,E}\,/\,\hbar \qquad q = \sqrt{2\,m\,(V_0 - E)}\,/\,\hbar$$

Nature des états propres

- Les états sont non-liés (particule non-confinée).
- Pour $x \to -\infty$, les états propres se comportent comme des ondes planes. Ces états propres ne sont pas carré-sommables.
- Les états propres ne peuvent pas décrire une particule. Il faudra faire recours à un paquet d'onde.

Conditions de normalisation

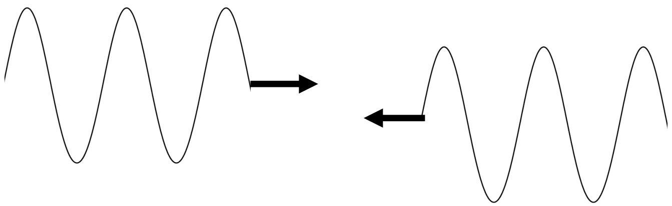
- On impose que la densité de probabilité reste bornée, c'est-à-dire qu'elle ne diverge pas pour $x \to \pm\infty$.

- Les solutions qui diffèrent par un facteur multiplicatif sont équivalentes.
  Afin de distinguer ces solutions, on fixera de manière arbitraire une condition pour la function d'onde dans la limite $x \to +\infty$ (ou $x \to -\infty$).
  Ceci fera office de “normalisation” des états propres non-liés.

États propres : fonctions d'ondes

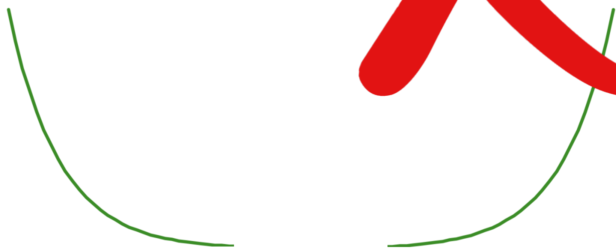
zone I

$$\phi_{\mathrm{I}} = C \exp(i\,k\,x) + D \exp(-i\,k\,x)$$



zone II

$$\phi_{\mathrm{II}} = A \exp(-q\,x) + \cancel{B \exp(q\,x)}$$



Pour déterminer *A*, *B*, *C* et *D*, on doit utiliser les conditions aux bords :

1. à $x \to +\infty$ la densité de probabilité doit rester bornée ($B = 0$)
2. à $x = 0$ continuité de la function et de sa dérivée
3. à $x \to -\infty$ "normalisation" de l'état non-lié (choix d'un coefficient)

Conditions de continuité à $x = 0$

Continuité de $\phi(x)$:

$$\phi_{\mathrm{I}}(x = 0) = \phi_{\mathrm{II}}(x = 0)$$

$$C + D = A$$

Continuité de $\partial\phi(x)/\partial x$:

$$\left.\frac{\partial \phi_{\mathrm{I}}(x)}{\partial x}\right|_{x=0} = \left.\frac{\partial \phi_{\mathrm{II}}(x)}{\partial x}\right|_{x=0}$$

$$\text{¿}\, k\,(C - D) = -q\,A$$

Inconnus : 3 coefficients (A, C, D) + énergie E 4

Contraintes : 2 conditions de continuité + “normalisation” 3

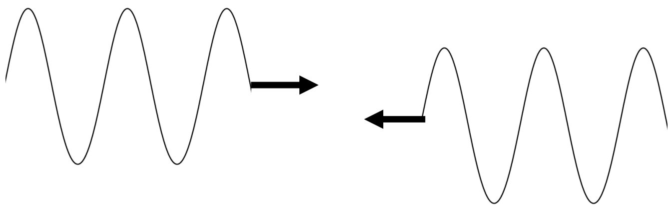
Si on fixe E arbitrairement, il y 3 contraintes pour 3 coefficients,
ce qui admet solution. Il y a donc une solution pour chaque énergie.

spectre continu !

Solution explicite

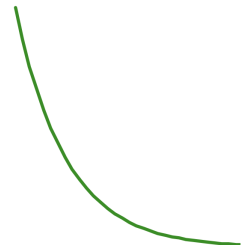
zone I

$$\phi_{\mathrm{I}}(x) = C \exp(i k x) + D \exp(-i k x)$$



zone II

$$\phi_{\mathrm{II}}(x) = A \exp(-q x)$$



Conditions de continuité :

$$\begin{cases} C + D = A \\ i k (C - D) = -q A \end{cases}$$

Normalisation (choix d'un coefficient) : $C = 1$

Solution :

$$A = \frac{2}{1 + i q / k} \qquad D = \frac{1 - i q / k}{1 + i q / k}$$

État propre non-lié

- Fonction d'onde :

$$\phi_{\mathrm{I}}(x) = \exp(i\,k(E)\,x) + \frac{1 - i\,q(E)/k(E)}{1 + i\,q(E)/k(E)} \exp(-i\,k(E)\,x)$$

$$\phi_{\mathrm{II}}(x) = \frac{2}{1 + i\,q(E)/k(E)} \exp(-q(E)\,x)$$

- $k(E)$ et $q(E)$ sont des fonctions de l'énergie E :

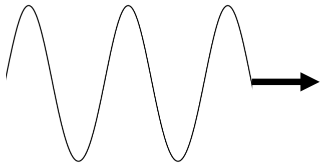
$$k = \sqrt{2\,m\,E}\;/\;\hbar \qquad\qquad q = \sqrt{2\,m\,(V_0 - E)}\;/\;\hbar$$

- Il y a une solution pour chaque E → spectre continu

Analyse de la forme de la solution

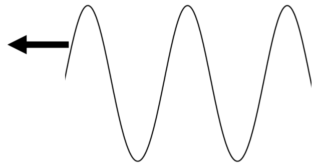
zone I

$$\phi_{\mathrm{I}}(x) = \exp(i k x) + \frac{1 - i q/k}{1 + i q/k} \exp(-i k x)$$



$p = \hbar k$

onde incidente



$p = -\hbar k$

onde réfléchie

Amplitude de l'onde réfléchie : $\left| \dfrac{1 - i q/k}{1 + i q/k} \right| = 1$

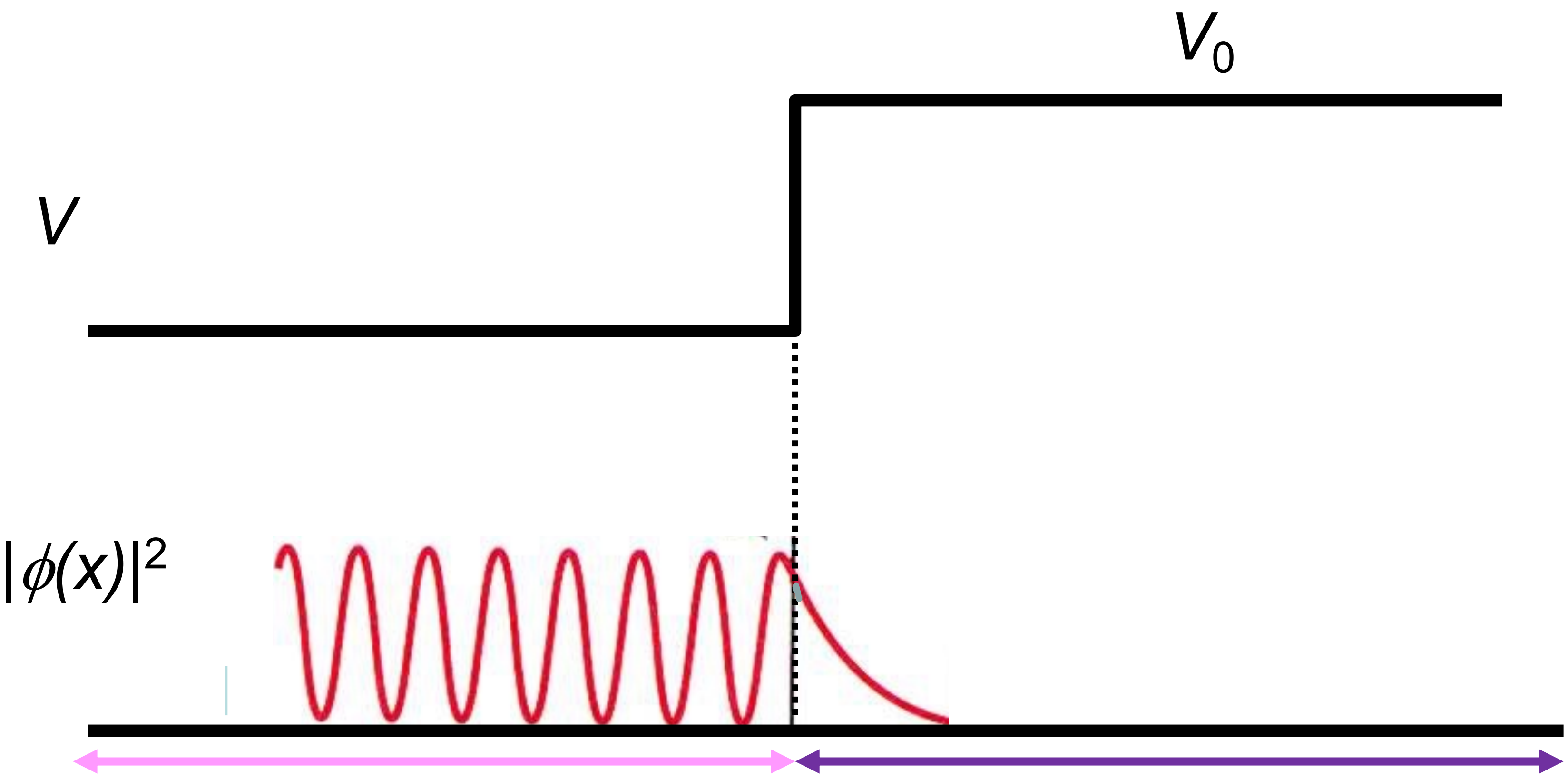
L'onde incidente et l'onde réfléchie ont la même amplitude !

Coefficient de réflexion R : $R = \dfrac{|D|^2}{|C|^2} = \left| \dfrac{1 - i q/k}{1 + i q/k} \right|^2 = 1$

L'onde incidente est complètement réfléchie !

NB Cette analyse concerne les états propres délocalisés. La comparaison avec la physique classique doit se faire avec un paquet d'onde, qui localise la particule.

Densité de probabilité d'un état propre

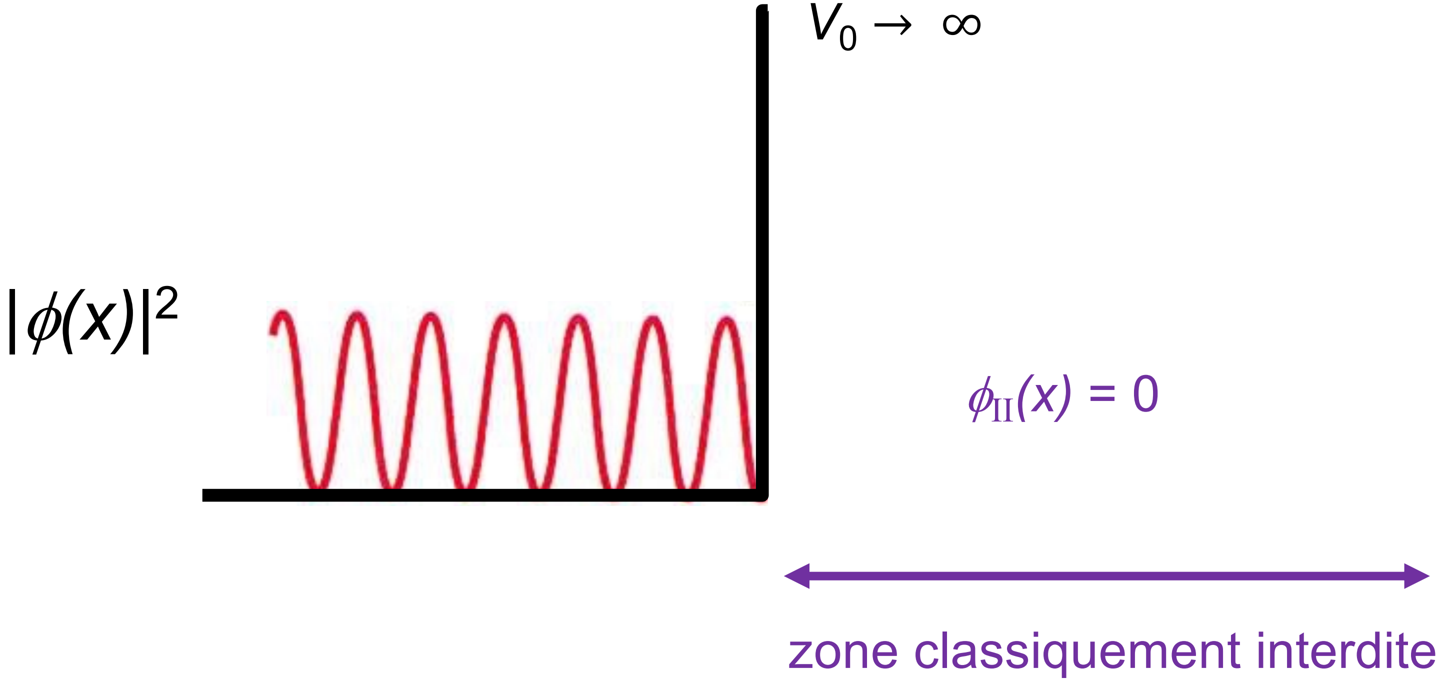


Interférence entre deux ondes avec la même amplitude

Décroissance exponentielle dans la zone classiquement interdite

Densité de probabilité pour $V_0 \to \infty$

Cas de barrière infinie



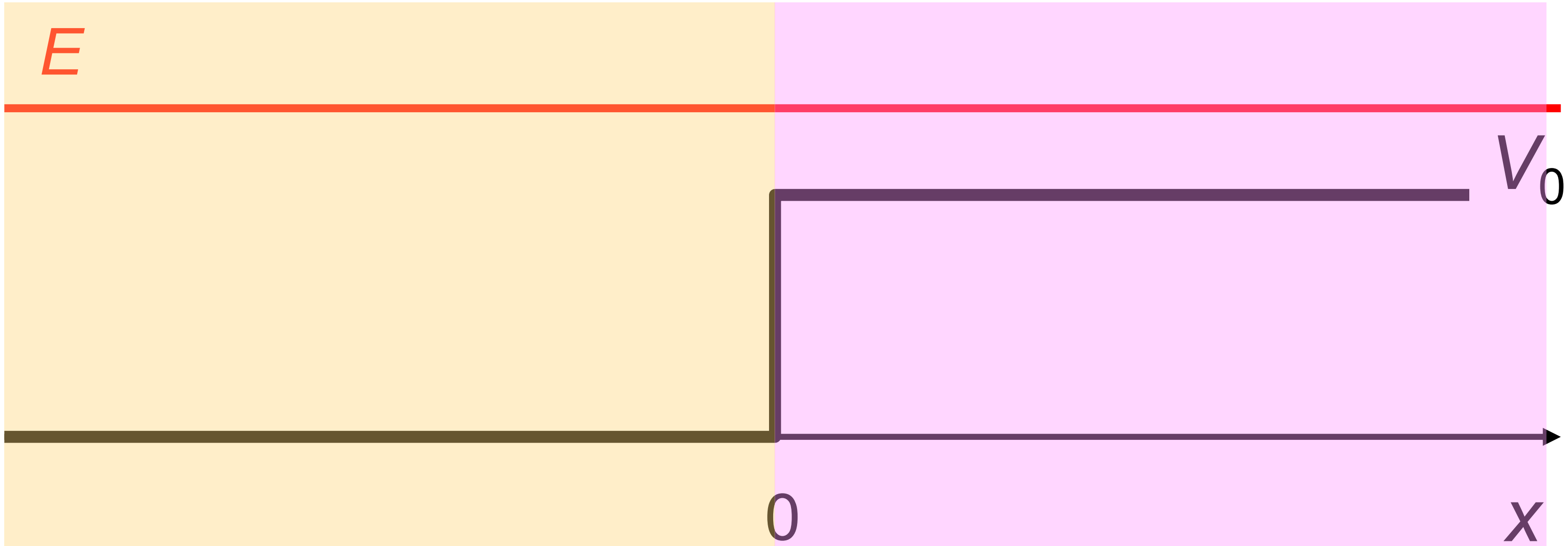
Seulement dans le cas de barrière infinie, on retrouve le comportement classique, dans le sens que il n'y a plus de pénétration dans la barrière.

Cours 13

États non-liés

- Saut de potentiel : énergies inférieures à la hauteur
- Saut de potentiel : énergies supérieures à la hauteur
- Barrière de potentiel : régime de transmission et effet tunnel

Saut de potential : cas $E > V_0$



zone I

zone II

$$\phi_{\mathrm{I}}(x) = A \exp(i\, k_1\, x) + B \exp(-i\, k_1\, x) \qquad k_1 = \sqrt{2\, m\, E}\ /\ \hbar$$

$$\phi_{\mathrm{II}}(x) = C \exp(i\, k_2\, x) + D \exp(-i\, k_2\, x) \qquad k_2 = \sqrt{2\, m\, (E - V_0)}\ /\ \hbar$$

Inconnus et contraintes

$$\phi_{\mathrm{I}}(x) = A \exp(i k_1 x) + B \exp(-i k_1 x)$$

$$\phi_{\mathrm{II}}(x) = C \exp(i k_2 x) + D \exp(-i k_2 x)$$

Inconnus : 4 coefficients (*A*, *B*, *C*, *D*) + énergie *E* 5

Contraintes : 2 conditions de continuité + “normalisation” 3

- L’energie *E* peut se fixer librement : spectre continu.
- Le fait d’avoir un coefficient inconnu résiduel implique que la solution est une combinaison linéaire de deux fonctions avec un coefficient libre.

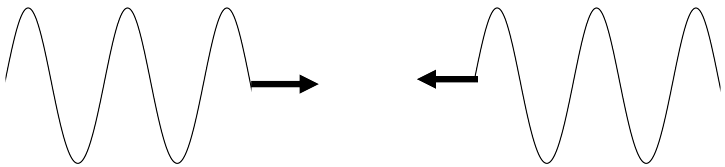
La solution est dégénérée : il y a deux solutions pour chaque *E* !

Cas de la particule libre

E

$V = 0$

$$\phi(x) = A \exp(i k x) + B \exp(-i k x) \qquad k = \sqrt{2 m E} / \hbar$$



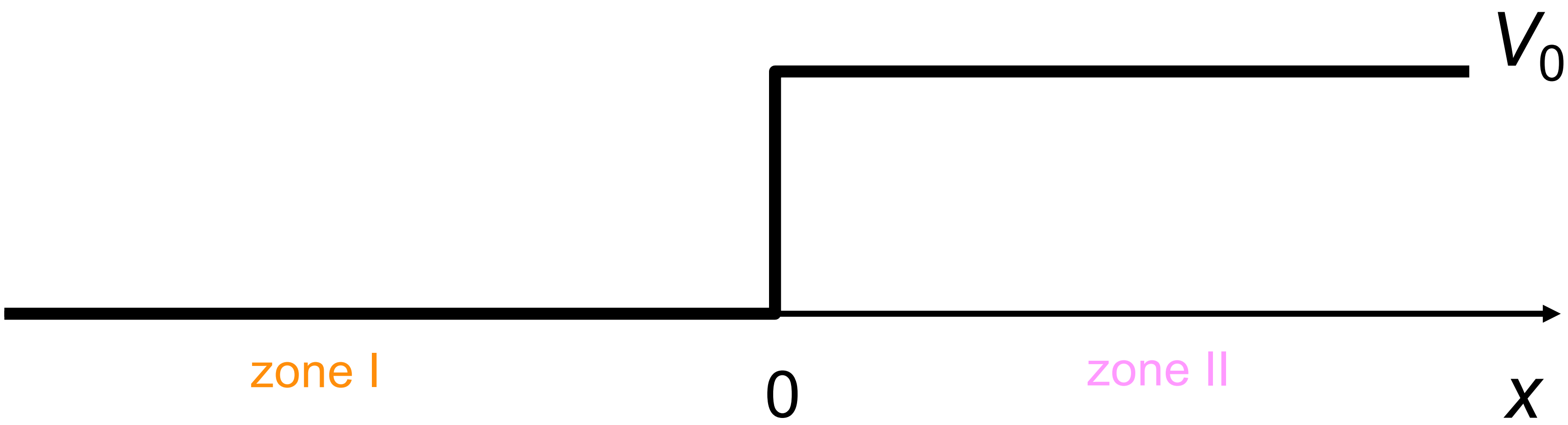
Inconnus : 2 coefficients (A, B) + énergie E 3

Contraintes : “normalisation” 1

On a un spectre continu avec dégénérescence : deux solutions propres pour tout E !

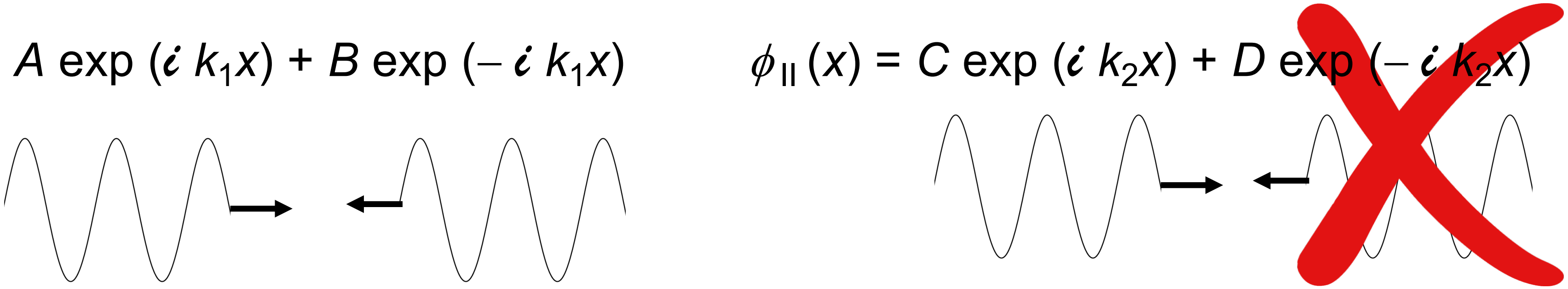
Conditions initiales précises

Pour *lever la dégénérescence*, nous nous mettons dans des conditions initiales précises, c'est-à-dire on va se mettre dans le cas d'une particule arrivant depuis la gauche.



$\phi_{\mathrm{I}}(x) = A \exp(i k_1 x) + B \exp(-i k_1 x)$

$\phi_{\mathrm{II}}(x) = C \exp(i k_2 x) + \cancel{D \exp(-i k_2 x)}$



$D = 0$

Réflexion et transmission

zone I

$$\phi_{\mathrm{I}}(x) = A \exp(i\, k_1 x) + B \exp(-i\, k_1 x)$$

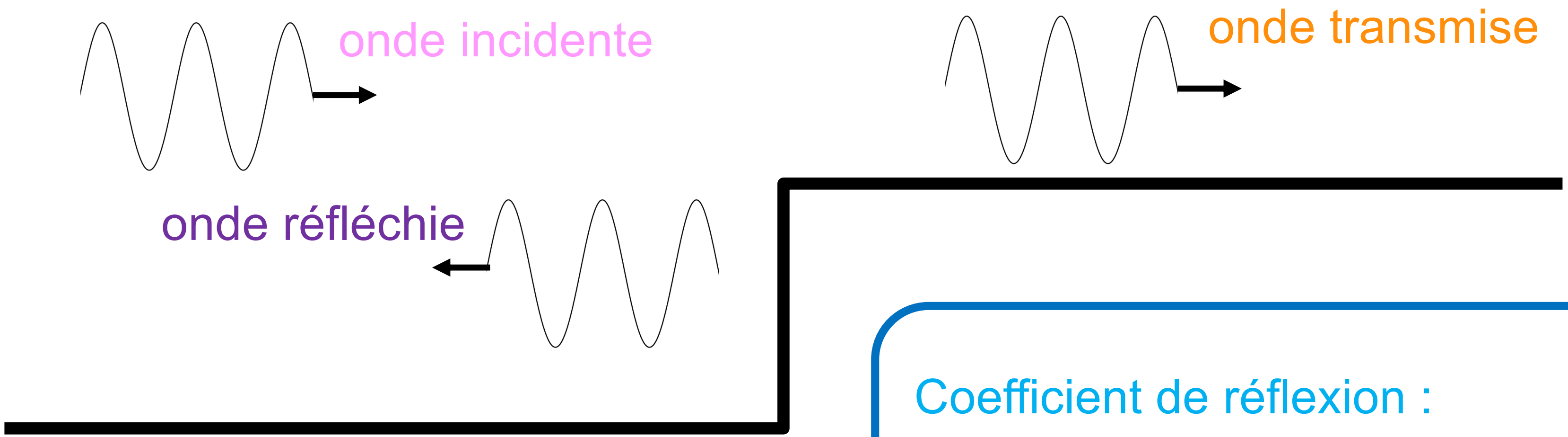
zone II

$$\phi_{\mathrm{II}}(x) = C \exp(i\, k_2 x) + \cancel{D \exp(-i\, k_2 x)}$$

Inconnus : 4 coefficients (A, B, C, D) + énergie E 5

Contraintes : 2 conditions de continuité + “normalisation” 4
+ condition initiale (particule venant de la gauche, D = 0)

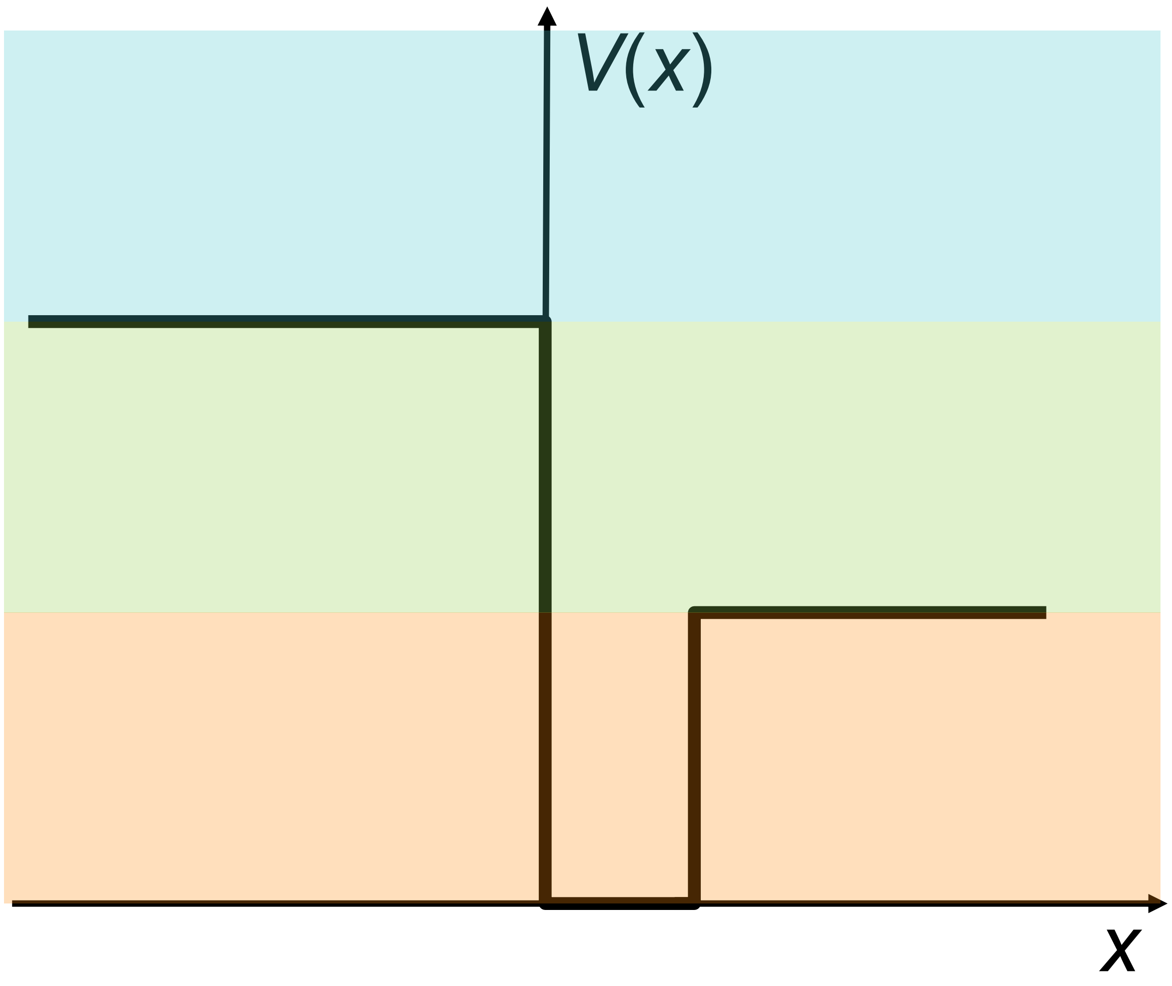
$\boxed{\rightarrow \text{une seule solution pour chaque énergie !}}$



Coefficient de réflexion : $R = \dfrac{|B|^2}{|A|^2}$

Coefficient de transmission : $T = \dfrac{|C|^2}{|A|^2}$

Nombre de solutions



spectre continu
solutions doublement dégénérées

spectre continu
solutions non-dégénérées

spectre discret
solutions non-dégénérées

Analogie avec la physique classique

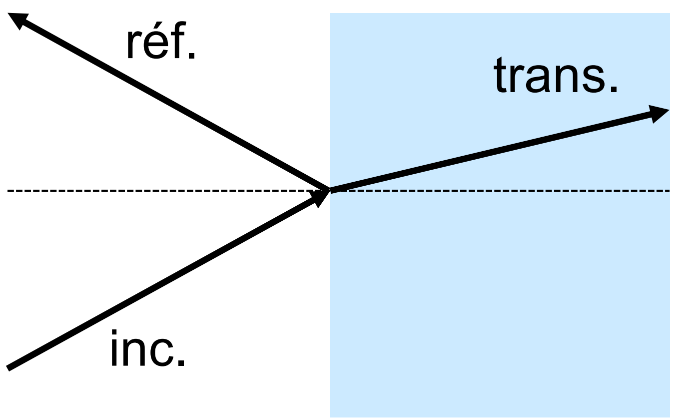
En mécanique classique : perte d'énergie cinétique, pas de réflexion.

Il y a une analogie avec les ondes électromagnétiques

Analogie avec le cas $E > V_0$

Réflexion et réfraction à une interface

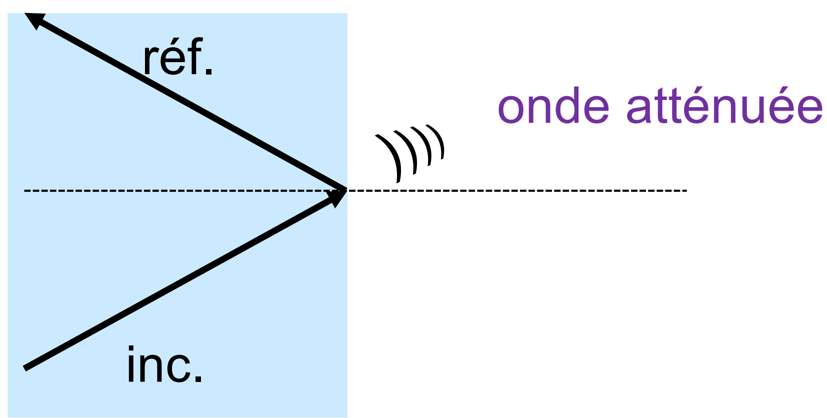
(air) $n_{\mathrm{I}} < n_{\mathrm{II}}$ (verre)



Analogie avec le cas $E < V_0$

Réflexion totale à une interface

(verre) $n_{\mathrm{I}} > n_{\mathrm{II}}$ (air)



Les équations de Maxwell prévoient aussi une onde atténuée

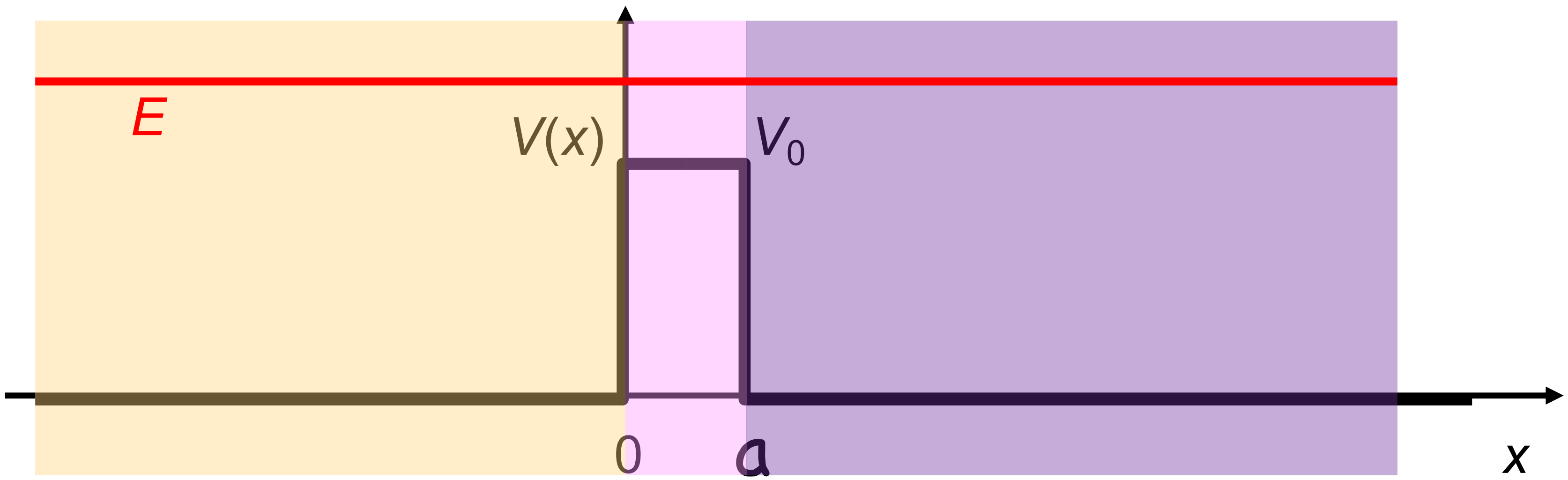
Cours 13

États non-liés

- Saut de potentiel : énergies inférieures à la hauteur
- Saut de potentiel : énergies supérieures à la hauteur
- Barrière de potentiel : régime de transmission et effet tunnel

Barrière de potentiel

Régime de transmission : $E > V_0$



$$\begin{cases} \phi_{\mathrm{I}}(x) = A \exp(i\,k\,x) + B \exp(-i\,k\,x) & k = \sqrt{2\,m\,E}\;/\;\hbar \\ \phi_{\mathrm{II}}(x) = F \exp(i\,k'\,x) + G \exp(-i\,k'\,x) & k' = \sqrt{2\,m\,(E - V_0)}\;/\;\hbar \\ \phi_{\mathrm{III}}(x) = C \exp(i\,k\,x) & \end{cases}$$

(particule venant de la gauche)

Inconnus et contraintes ($E > V_0$)

$$\begin{cases} \phi_{\mathrm{I}}(x) = A \exp(i k x) + B \exp(-i k x) \\ \phi_{\mathrm{II}}(x) = F \exp(i k' x) + G \exp(-i k' x) \\ \phi_{\mathrm{III}}(x) = C \exp(i k x) \end{cases}$$

Inconnus : 5 coefficients (A, B, F, G, C) + énergie E **6**
(ayant déjà imposé une condition initiale précise)

Contraintes : 2 conditions de continuité en $x = 0$ **5**
2 conditions de continuité en $x = a$
+ “normalisation”

$\boxed{\rightarrow \text{une seule solution pour chaque énergie } E\text{ !}}$

Réflexion et transmission (régime de transmission)

Solution analytique possible (voir Leonard I. Schiff, “Quantum Mechanics”)

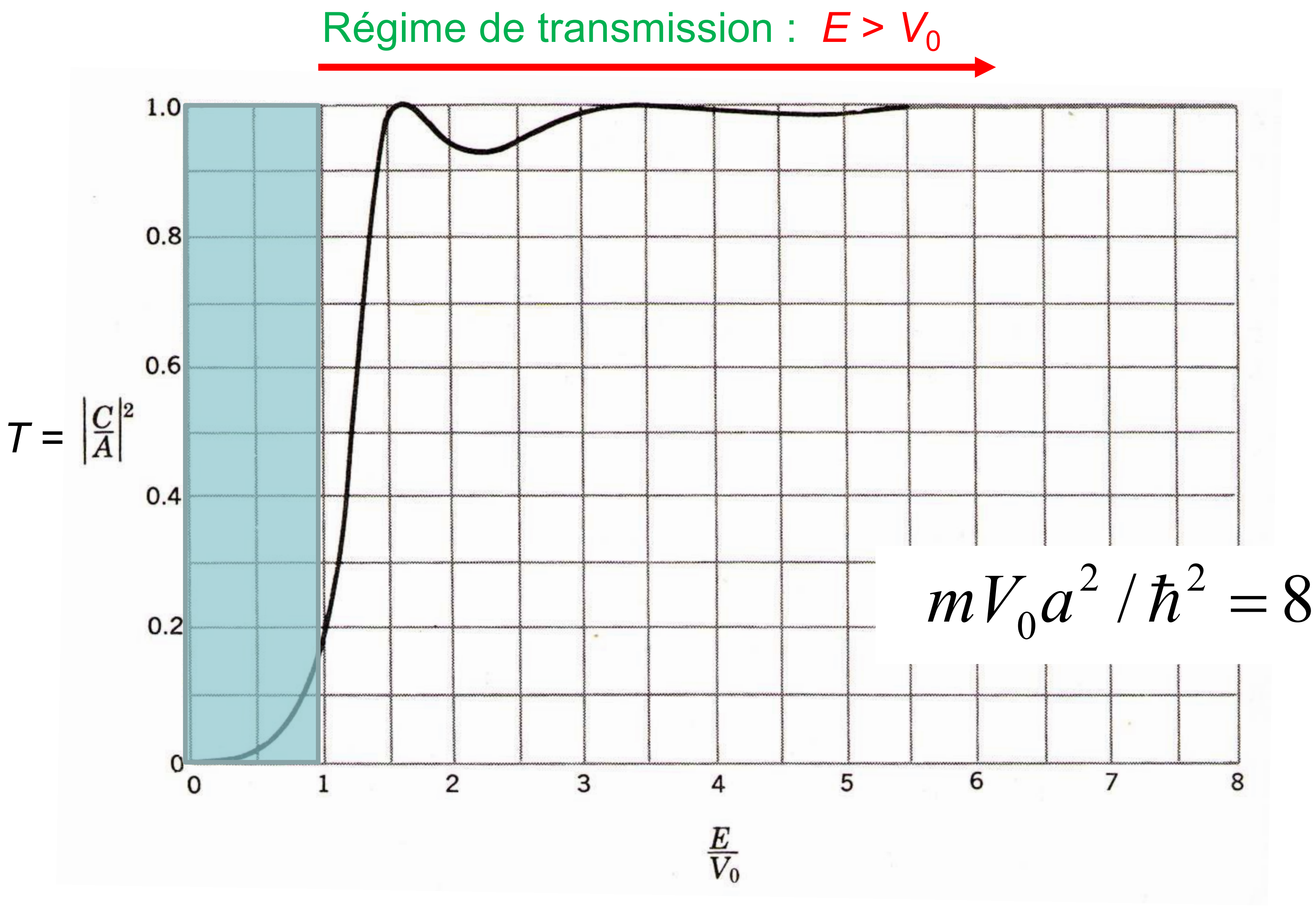
Régime de transmission : $E > V_0$

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left[1 + \frac{4E(E - V_0)}{V_0^2 \sin^2 k'a} \right]^{-1}$$

$$T = \frac{|C|^2}{|A|^2} = \left[1 + \frac{V_0^2 \sin^2 k'a}{4E(E - V_0)} \right]^{-1}$$

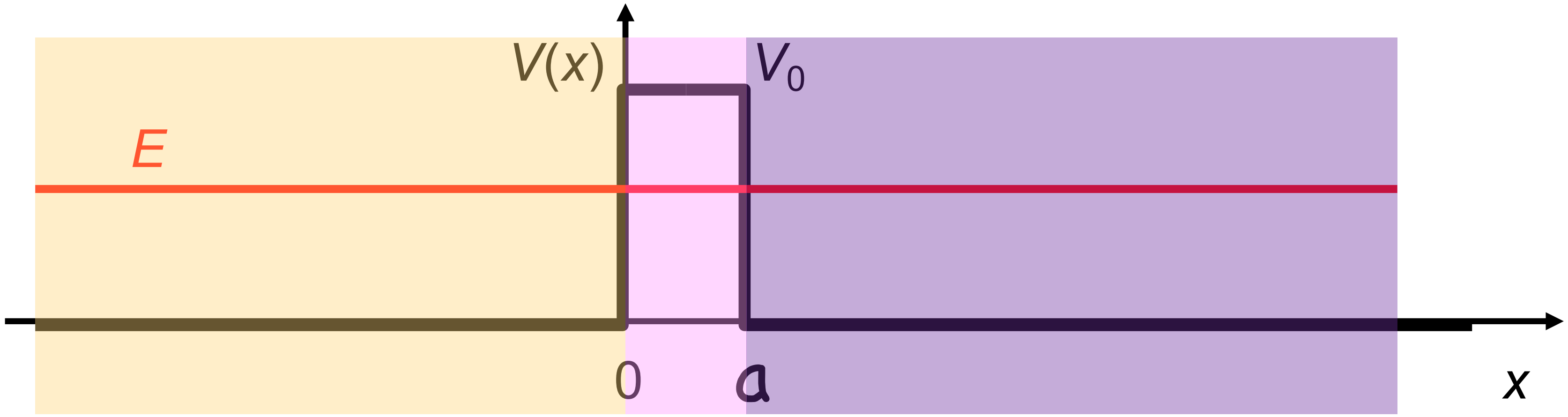
- $R + T = 1$
- $k'a = \pi \;\rightarrow\; T = 1\,,\; R = 0$ (transmission parfaite)

Coefficient de transmission (régime de transmission)



Barrière de potentiel

Régime d'effet tunnel : $E < V_0$



$$\begin{cases} \phi_{\mathrm{I}}(x) = A \exp(i\,k\,x) + B \exp(-i\,k\,x) & k = \sqrt{2\,m\,E}\;/\;\hbar \\ \phi_{\mathrm{II}}(x) = F \exp(q\,x) + G \exp(-q\,x) & q = \sqrt{2\,m\,(V_0 - E)}\;/\;\hbar \\ \phi_{\mathrm{III}}(x) = C \exp(i\,k\,x) & \text{(particule venant de la gauche)} \end{cases}$$

Inconnus et contraintes ($E < V_0$)

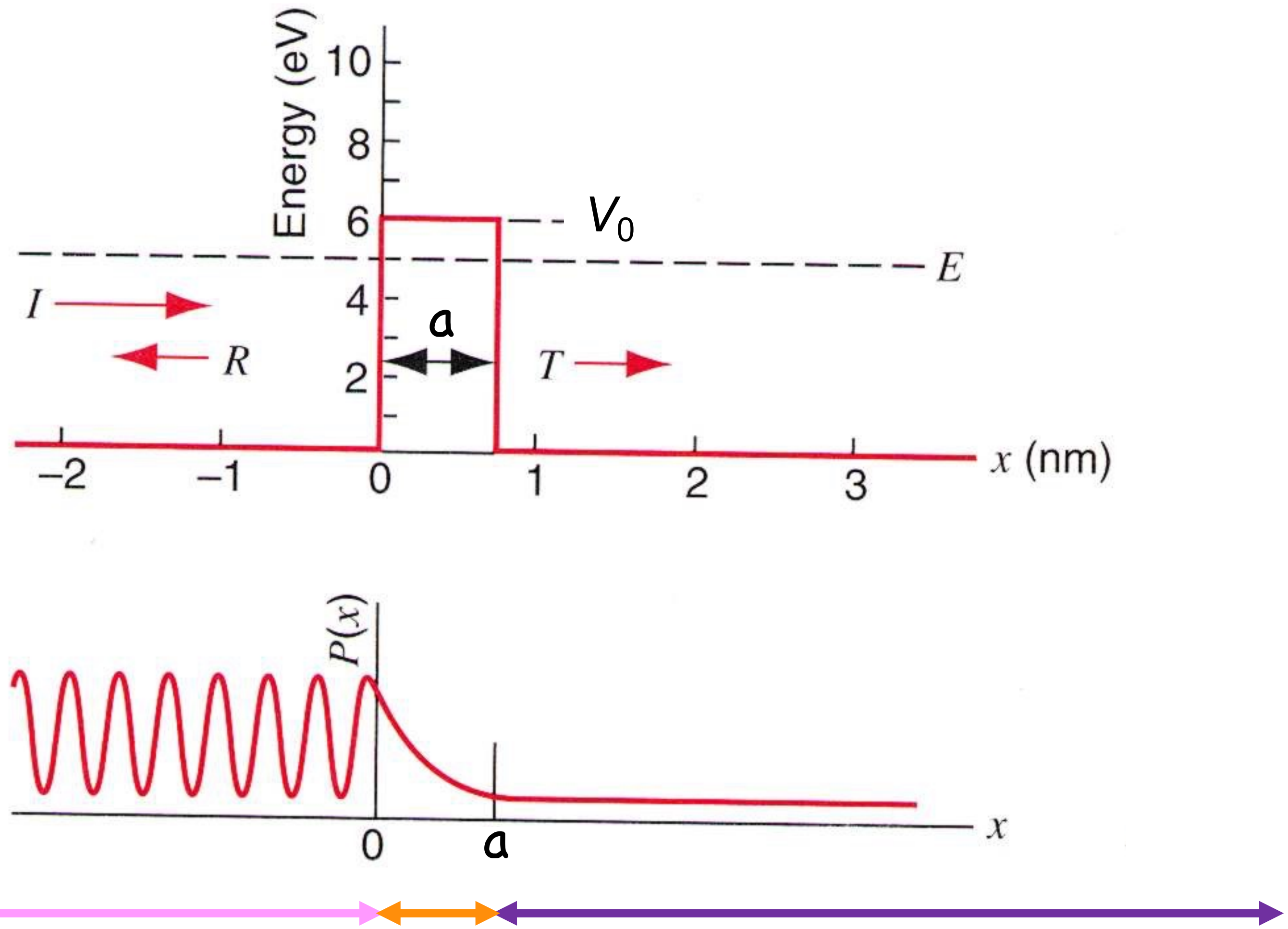
$$\begin{cases} \phi_{I}(x) = A \exp(i k x) + B \exp(-i k x) \\ \phi_{II}(x) = F \exp(q x) + G \exp(-q x) \\ \phi_{III}(x) = C \exp(i k x) \end{cases}$$

Inconnus : 5 coefficients (*A*, *B*, *F*, G, C) + énergie *E* (ayant déjà imposé une condition initiale précise) **6**

Contraintes : 2 conditions de continuité en $x = 0$ **5**
2 conditions de continuité en $x = a$
+ “normalisation”

$\boxed{\rightarrow \text{ une seule solution pour chaque énergie } E\text{ !}}$

Densité de probabilité (régime d'effet tunnel)

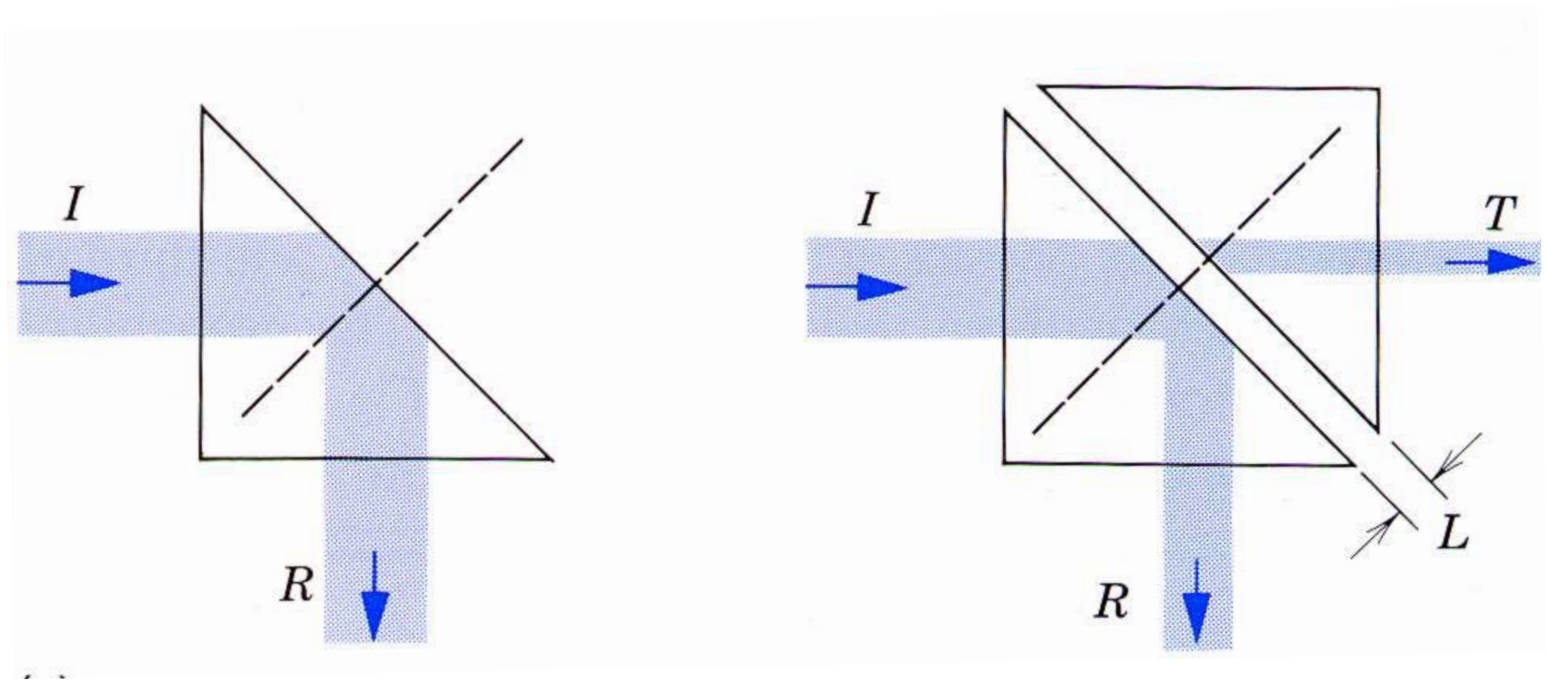


Interférence
entre deux ondes
d'amplitude différente.

Combinaison
d'exponentiels

Densité de probabilité
constante de traverser
la barrière

Analogie avec l'électromagnétisme



Coefficient de transmission (régime d'effet tunnel)

$$T = \left[1 + \frac{V_0^2 \sinh^2 qa}{4E\,(V_0 - E)} \right]^{-1} \qquad q = \sqrt{2\,m\,(V_0 - E)}\;/\;\hbar$$

Approximation de grande barrière : $\boxed{q \cdot a \gg 1}$

- $a \uparrow$: barrière épaisse
- $q \uparrow$: grande masse ou énergie E éloignée de V_0

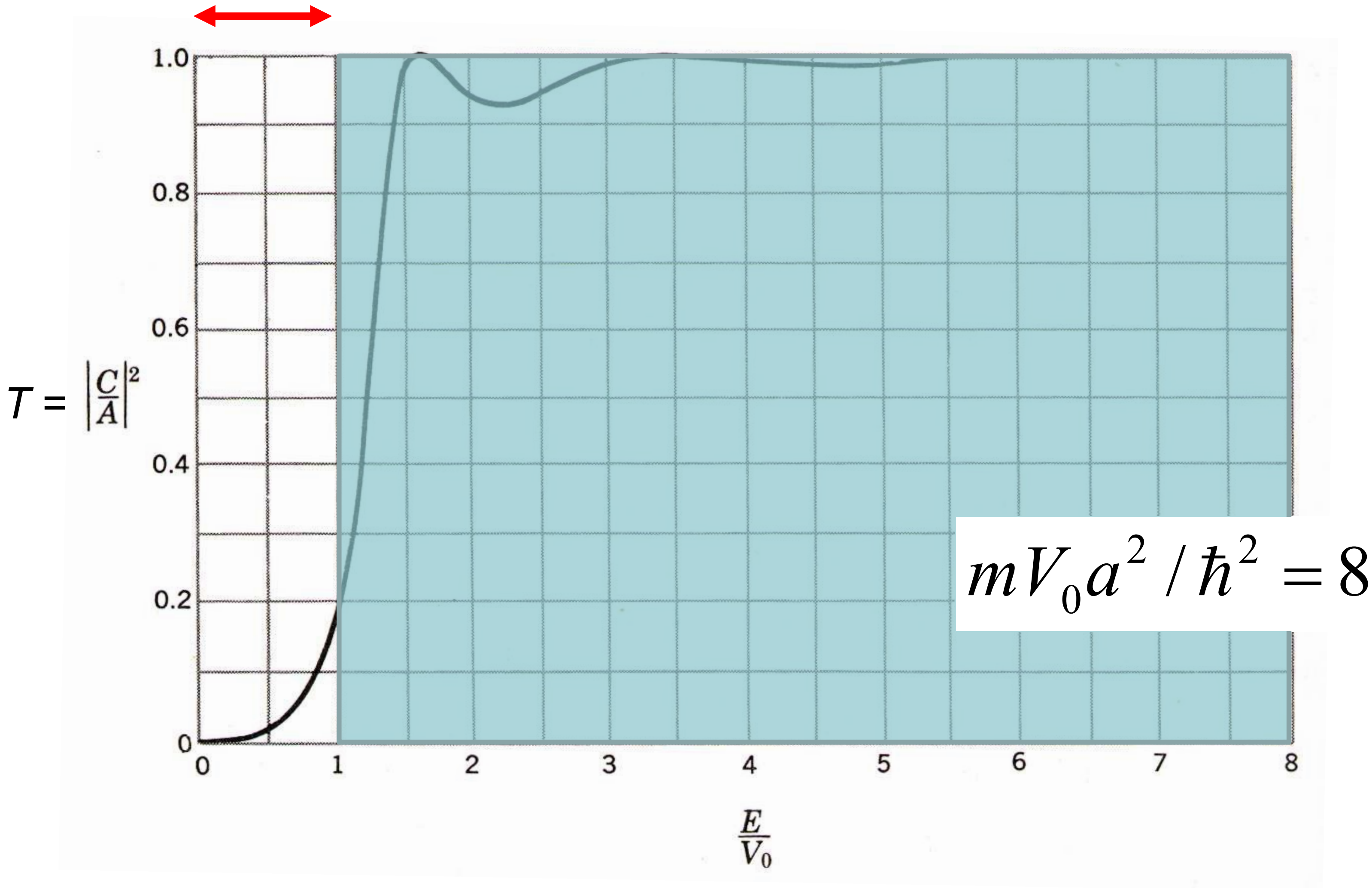
$$q \cdot a \gg 1 \qquad \rightarrow \qquad \sinh^2 qa \approx \left[\frac{1}{2} \left(e^{qa} - e^{-qa} \right) \right]^2 \approx \frac{1}{4}\, e^{2qa}$$

$$\rightarrow \qquad T \cong \frac{16E\,(V_0 - E)}{V_0^2}\; e^{-2qa}$$

Dépendence exponentielle à travers la masse ($m^{1/2}$), l'épaisseur (a), et $(V_0 - E)^{1/2}$!

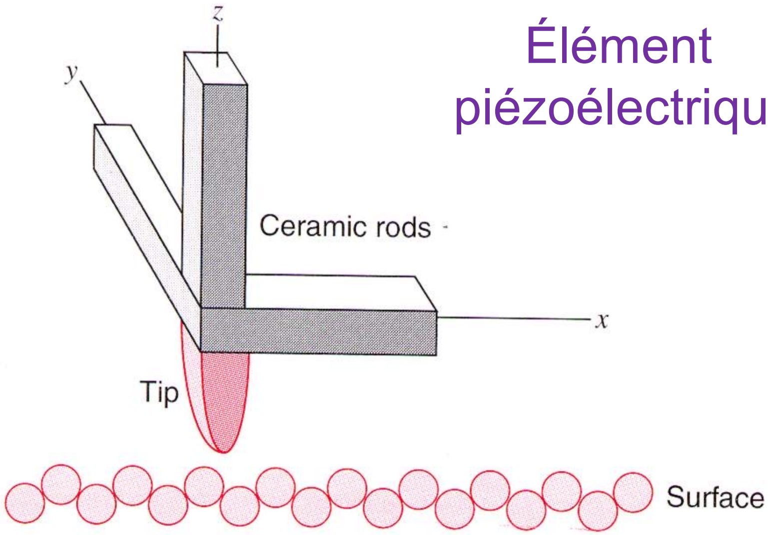
Coefficient de transmission (régime d'effet tunnel)

Régime d'effet tunnel : $E < V_0$



Microscope à effet tunnel

scanning tunneling microscope



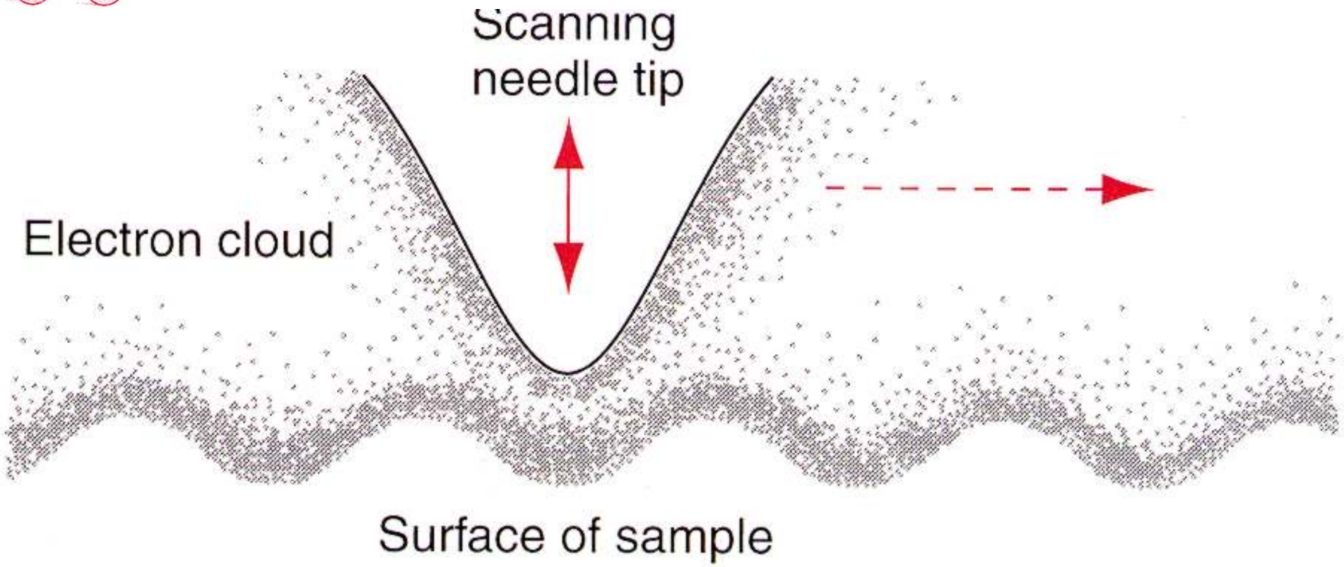
Élément piézoélectrique

1986

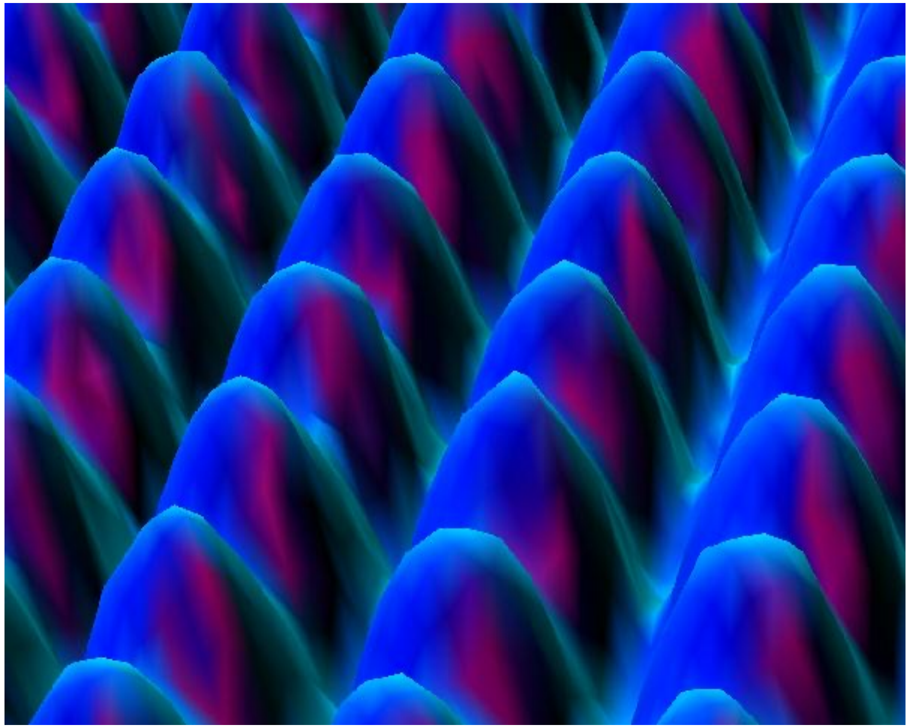
Gerd Binnig
1946 -

Heinrich Rohrer
1933 - 2013

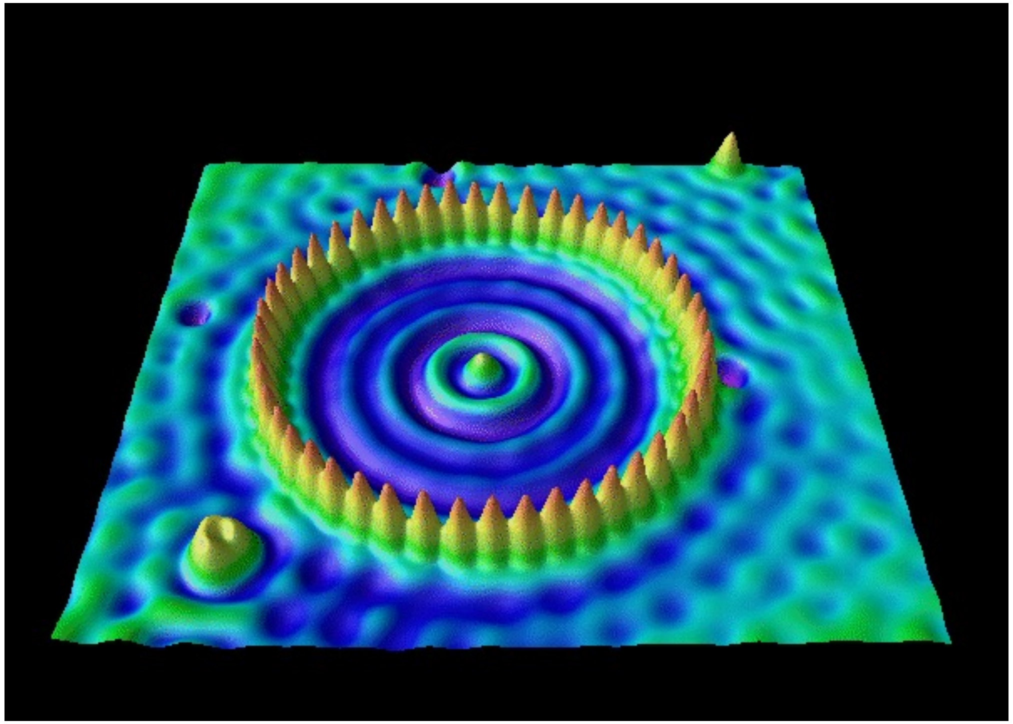
Balayage à courant constant – pour profiter de la sensibilité exponentielle de l'effet tunnel



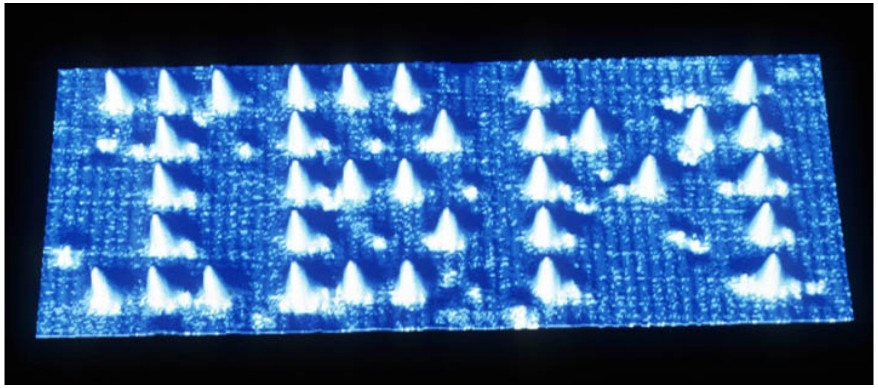
Scanning tunneling microscope (STM) : images



Surface de Ni



Corail de Fe sur du Cu



Cours 13

États non-liés

- Saut de potentiel : énergies inférieures à la hauteur
- Saut de potentiel : énergies supérieures à la hauteur
- Barrière de potentiel : régime de transmission et effet tunnel


That's all Folks!
Bonne chance pour l'examen !