MQ3-Cours

Barrière de potentiel et effet tunnel

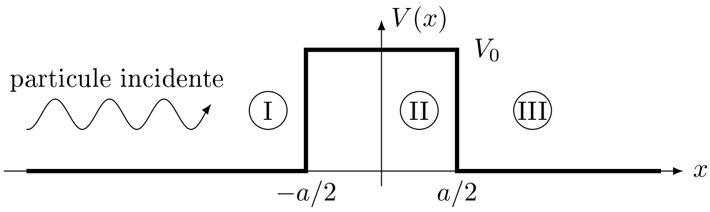
Nous avons vu dans le chapitre MQ2 qu'une particule quantique pouvait se trouver à des endroits qui lui sont inaccessibles classiquement. Dans ce chapitre, nous allons étudier une configuration pour laquelle cette propriété permet à la particule d'avoir une probabilité non nulle de traverser des zones interdites. On parle d'**effet tunnel**. En guise d'illustration, il s'agit d'avoir une probabilité non nulle de franchir une porte sans l'ouvrir, mais seulement en marchant à travers !

Table des matières

1 Effet tunnel

1.1 Barrière de potentiel

On considère une particule de masse m soumise au profil d'énergie potentielle $V(x)$ suivant



Ce potentiel est constant par morceaux. On précise son expression

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si} \quad x \leqslant -a/2 & \text{(domaine I)} \\ V_0 & \text{si} \quad -a/2 \leqslant x \leqslant a/2 & \text{(domaine II)} \\ 0 & \text{si} \quad x \geqslant a/2 & \text{(domaine III)} \end{cases}$$

Il s'agit d'une barrière de potentiel unidimensionnelle de hauteur $V_0 > 0$ finie. Dans toute la suite du chapitre, on suppose que **la particule incidente a une énergie** $E < V_0$.

Intéressons-nous alors au devenir d'une particule classique dans la même configuration. Son énergie E doit toujours être supérieure à $V(x)$, puisque

$$E = \frac{1}{2}\, m\, v^2 + V(x) \geqslant V(x)$$

donc les zones de potentiel supérieur à son énergie lui sont interdites : c'est ici le cas de la barrière de potentiel puisqu'on a $E < V_0$. La particule classique qui arrive sur cette barrière ne peut donc pas la franchir : elle va rebondir dessus et repartir en arrière.

Nous allons montrer qu'une particule quantique a par contre une probabilité non nulle de traverser la barrière ! Mentionnons qu'en pratique, la nature de la physique quantique, par essence probabiliste, nous condamne à ne pas pouvoir dire si une particule donnée va traverser ou pas : la seule chose calculable, c'est la **probabilité de passer**. Ce qu'il advient d'une particule donnée, on ne peut pas le prédire. Par contre, l'interprétation probabiliste de la fonction d'onde nous permet de dire quel pourcentage de particules vont traverser si on en envoie beaucoup sur la barrière. Par exemple, si on calcule qu'une particule à 1% de chance de passer et qu'on en envoie un million, on peut affirmer qu'en moyenne il y aura dix mille particules qui auront franchi la barrière.

Évidemment, si une particule quantique ne traverse pas la barrière, alors elle est réfléchie par celle-ci, comme le serait une particule classique. On peut pour cette raison voir ce chapitre comme un chapitre de « réflexion/transmission sur une interface ».

1.2 Forme de la fonction d'onde dans les trois domaines

Pour le traitement quantique de ce problème, on fait l'hypothèse que la particule libre (libre puisqu'elle provient d'une zone $x \leqslant -a/2$ où $V(x) = 0$) peut être décrite par un état stationnaire (= une OPPH pour la particule libre, voir MQ1). Cela est contraire aux considérations que nous avons tenues dans le chapitre MQ1, où nous avions montré qu'un tel état n'est pas normalisable donc pas physique, et qu'il faut forcément passer par un paquet d'onde (= une somme de plein d'OPPH) pour décrire une particule libre. Néanmoins, mener les calculs avec un paquet d'onde serait trop compliqué, c'est pourquoi on le fait avec une unique OPPH.

On s'intéresse donc aux états stationnaires qui s'écrivent toujours pour rappel

$$\psi(x,\, t) = \varphi(x)\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\, E\, t\, /\, \hbar}$$

avec E l'énergie de l'état stationnaire. Il nous faut donc, comme dans le chapitre MQ2, résoudre l'équation de Schrödinger indépendante du temps

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

dans chacun des trois domaines I, II et III dans lesquels le potentiel est constant par morceaux.

► **Dans le domaine I**, le potentiel est nul $V(x) = 0$ donc on a

$$\frac{\mathrm{d}^2\varphi(x)}{\mathrm{d}x^2} + \frac{2\, m\, E}{\hbar^2}\, \varphi(x) = 0$$

Les solutions sont

$$\varphi(x) = A_{\mathrm{I}}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\, k_0\, x} + B_{\mathrm{I}}\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\, k_0\, x} \qquad \text{avec} \qquad k_0 = \sqrt{\frac{2\, m\, E}{\hbar^2}}$$

La fonction d'onde complète est alors

$$\psi(x,\, t) = \underbrace{A_{\mathrm{I}}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\, (k_0\, x - \omega\, t)}}_{\text{OPPH "+"}} + \underbrace{B_{\mathrm{I}}\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\, (k_0\, x + \omega\, t)}}_{\text{OPPH "−"}} \qquad \text{avec} \qquad \omega = \frac{E}{\hbar}$$

Le premier terme, correspondant à une OPPH se propageant vers les x croissants (vers la droite), s'interprète facilement comme la particule incidente. Le deuxième terme, correspondant à une OPPH se propageant vers les x décroissants (vers la gauche), s'interprète comme une particule réfléchie !

► **Dans le domaine II**, le potentiel vaut $V(x) = V_0$ donc on a

$$\frac{\mathrm{d}^2\varphi(x)}{\mathrm{d}x^2} - \frac{2\, m\, (V_0 - E)}{\hbar^2}\, \varphi(x) = 0$$

Les solutions sont

$$\varphi(x) = A_{\mathrm{II}}\, \mathrm{ch}\, k\, x + B_{\mathrm{II}}\, \mathrm{sh}\, k\, x \qquad \text{avec} \qquad k = \sqrt{\frac{2\, m\, (V_0 - E)}{\hbar^2}}$$

k est réel car $E < V_0$. *(Remarquons que nous aurions pu tout autant écrire la solution sous forme d'exponentielles réelles. Le choix de* ch *et* sh *comme base de solutions se révèle plus pratique dans les calculs à venir).* La fonction d'onde complète est alors exponentiellement amortie (l'exponentielle est cachée dans ch et sh), et on la dit **évanescente**.

► **Dans le domaine III**, le potentiel est de nouveau nul $V(x) = 0$ donc on a

$$\frac{\mathrm{d}^2\varphi(x)}{\mathrm{d}x^2} + \frac{2\, m\, E}{\hbar^2}\, \varphi(x) = 0$$

Les solutions sont

$$\varphi(x) = A_{\mathrm{III}}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\, k_0\, x} + B_{\mathrm{III}}\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\, k_0\, x} \qquad \text{avec} \qquad k_0 = \sqrt{\frac{2\, m\, E}{\hbar^2}}$$

La fonction d'onde complète est alors

$$\psi(x,\, t) = \underbrace{A_{\mathrm{III}}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\, (k_0\, x - \omega\, t)}}_{\text{OPPH "+"}} + \underbrace{B_{\mathrm{III}}\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\, (k_0\, x + \omega\, t)}}_{\text{OPPH "−"}} \qquad \text{avec} \qquad \omega = \frac{E}{\hbar}$$

Le premier terme, correspondant à une OPPH se propageant vers les x croissants (vers la droite), s'interprète comme une particule transmise à travers la barrière de potentiel. Le deuxième terme, correspondant à une OPPH se propageant vers les x décroissants (vers la gauche), s'interprète comme une particule qui arriverait depuis $x = +\infty$ vers la barrière. Cela ne correspond pas à ce que nous étudions (la particule incidente vient de la gauche de la barrière, pas de la droite) donc on peut tout de suite conclure que dans notre situation nous avons

$$B_{\mathrm{III}} = 0$$

Discussion. Ayant trouvé la forme de la fonction d'onde dans chacun des domaines, il nous reste à écrire les conditions aux limites : il y a continuité de φ et φ' en $x = -a/2$ et en $x = a/2$. Cela nous fait 4 équations, pour les 5 inconnues A_{I}, B_{I}, A_{II}, B_{II}, et A_{III}. Nous allons donc pouvoir écrire B_{I}, A_{II}, B_{II}, et A_{III} en fonction de l'amplitude de l'onde incidente A_{I}.

Remarquons que nous avons à notre disposition une cinquième équation si besoin : pour que la fonction d'onde décrive une particule, elle doit vérifier la condition de normalisation

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x,\, t)|^2 \,\mathrm{d}x = 1$$

Hélas dans notre modélisation cette équation est inutilisable car nous travaillons avec des OPPH (dans les domaines I et III) qui ne sont pas normalisables. En conséquence, l'amplitude de l'onde incidente A_I n'est pas calculable, mais cela ne pose pas de problème pour obtenir la seule quantité qui peut être réellement déterminée ici : la probabilité de traverser la barrière.

1.3 Facteur de transmission

Déf. Facteur de transmission.

On définit le **facteur de transmission** T de la particule par

$$T = \frac{||\vec{\jmath_t}||}{||\vec{\jmath_i}||} \qquad \left(= \frac{\text{courant transmis}}{\text{courant incident}} \right)$$

avec $\vec{\jmath_i}$ le courant de probabilité associé à l'onde incidente et $\vec{\jmath_t}$ celui associé à l'onde transmise.

T s'interprète comme la **probabilité pour la particule de traverser la barrière**.

Rappel. Nous avons vu dans le chapitre MQ1 que le courant de probabilité d'une OPPH ψ de vecteur d'onde $\vec{k}$ s'écrit comme un courant de convection, c'est-à-dire « densité (de probabilité) × vitesse (de groupe) », ici

$$\vec{\jmath} = |\psi|^2 \, \frac{\hbar \, \vec{k}}{m}$$

Propriété. L'onde décrivant la particule incidente est

$$\psi_i(x,\, t) = A_{\mathrm{I}} \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}(k_0\, x - \omega\, t)} \qquad \text{avec} \qquad \vec{k} = k_0 \, \vec{e_x}$$

donc le courant associé est

$$\vec{\jmath_i} = |A_{\mathrm{I}}|^2 \, \frac{\hbar \, k_0}{m} \, \vec{e_x}$$

puisqu'une exponentielle complexe est de module 1. De même, l'onde décrivant la particule transmise est

$$\psi_t(x,\, t) = A_{\mathrm{III}} \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}(k_0\, x - \omega\, t)}$$

donc le courant associé est

$$\vec{\jmath_t} = |A_{\mathrm{III}}|^2 \, \frac{\hbar \, k_0}{m} \, \vec{e_x}$$

Finalement, le facteur de transmission est

$$\boxed{T = \frac{||\vec{\jmath_t}||}{||\vec{\jmath_i}||} = \frac{|A_{\mathrm{III}}|^2}{|A_{\mathrm{I}}|^2}}$$

et A_{III} s'obtient en fonction de A_{I} à l'aide des conditions aux limites.

Prop. Expression du facteur de transmission.

En écrivant les conditions au limites et tout calcul fait `[vous pouvez le faire si vous avez le temps, ce n'est pas compliqué en principe, mais c'est très long, et hors programme]`, on obtient

$$\boxed{T = \frac{1}{1 + \dfrac{V_0^2}{4\, E\, (V_0 - E)} \, \mathrm{sh}^2(k\, a)} \qquad \text{avec} \qquad k = \sqrt{\frac{2\, m\, (V_0 - E)}{\hbar^2}}}$$

De manière tout à fait identique, on peut définir et calculer le facteur de réflexion de la particule.

Déf. Facteur de réflexion.

On définit le **facteur de réflexion** R de la particule par

$$R = \frac{||\vec{\jmath}_r||}{||\vec{\jmath}_i||} \qquad \left(= \frac{\text{courant réfléchi}}{\text{courant incident}} \right)$$

avec $\vec{\jmath}_i$ le courant de probabilité associé à l'onde incidente et $\vec{\jmath}_r$ celui associé à l'onde réfléchie.

R s'interprète comme la **probabilité pour la particule d'être réfléchie sur la barrière**.

Propriété. L'onde décrivant la particule réfléchie est

$$\psi_r(x,\,t) = B_\mathrm{I}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(k_0\,x+\omega\,t)} \qquad \text{avec} \qquad \vec{k} = -k_0\,\vec{e_x}$$

donc le courant associé est

$$\vec{\jmath}_r = -|B_\mathrm{I}|^2\,\frac{\hbar\,k_0}{m}\,\vec{e_x}$$

Finalement, le facteur de réflexion est

$$\boxed{R = \frac{||\vec{\jmath}_r||}{||\vec{\jmath}_i||} = \frac{|B_\mathrm{I}|^2}{|A_\mathrm{I}|^2}}$$

et B_I s'obtient en fonction de A_I à l'aide des conditions aux limites.

Propriété. Conservation de la particule

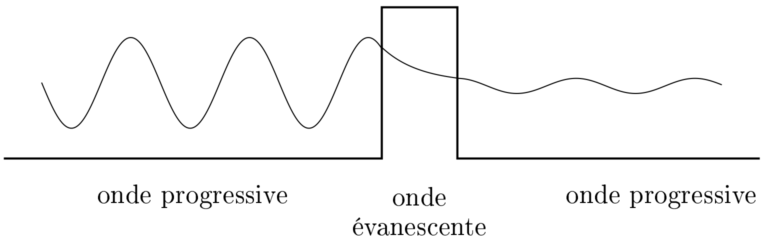
On peut calculer R explicitement puis vérifier la propriété

$$\boxed{R + T = 1}$$

qui s'interprète comme le fait que la particule ne disparaît pas : elle est soit transmise, soit réfléchie, et il n'y a pas d'autre possibilité.

1.4 Effet tunnel et limite de la barrière épaisse

La particule a donc une probabilité T de franchir la barrière, classiquement infranchissable. Graphiquement, on peut tracer la fonction d'onde dans les différents domaines



Pour le tracé, pensez que la fonction d'onde est continue ainsi que sa dérivée, donc il n'y a pas de points anguleux. L'amplitude de l'onde transmise correspond à celle de l'onde incidente, atténuée exponentiellement à travers la barrière.

Définition. Limite de la barrière épaisse

Le facteur de transmission T a une expression lourde donc difficilement exploitable. Il se trouve cependant que de très nombreuses situations d'intérêt sont telles que

$$\boxed{k\,a \gg 1}$$

Cela correspond généralement à a grand, c'est-à-dire à une barrière épaisse. La condition $k\,a \gg 1$ est pour cette raison appelée **limite de la barrière épaisse**.

Dans l'hypothèse d'une barrière épaisse, on a

$$\operatorname{sh} k\,a = \frac{\mathrm{e}^{k\,a} - \mathrm{e}^{-k\,a}}{2} \approx \frac{\mathrm{e}^{k\,a}}{2}$$

et donc

$$T \approx \frac{1}{1 + \dfrac{V_0^2}{16\, E\, (V_0 - E)}\, \mathrm{e}^{2\,k\,a}}$$

soit finalement, puisque $\mathrm{e}^{2\,k\,a} \gg 1$,

$$\boxed{T \approx \frac{16\, E\, (V_0 - E)}{V_0^2}\, \mathrm{e}^{-2\,k\,a} \qquad \text{avec} \qquad k = \frac{\sqrt{2\, m\, (V_0 - E)}}{\hbar}}$$

dans la limite de la barrière épaisse.

Propriété. Transmission à travers une barrière épaisse

En se préoccupant seulement du facteur exponentiel $\mathrm{e}^{-2\,k\,a}$ qui domine le comportement de T, on déduit les conséquences suivantes (V_0 et m sont cachées dans k) :

- plus a est grand (barrière épaisse), plus la probabilité de traverser est petite ;
- plus V_0 est grand (barrière haute), plus la probabilité de traverser est petite ;
- plus m est grand (particule lourde), plus la probabilité de traverser est petite ;
- dans la **limite classique** $\hbar \to 0$, la probabilité de traverser tend vers 0 (on retrouve le résultat classique).

À l'inverse, si a n'est pas trop grand, de même que V_0 (barrière fine et petite), la probabilité T de traverser peut être conséquente : c'est l'effet tunnel.

Nous verrons dans la suite du chapitre deux applications de l'effet tunnel. L'une technologique : la microscopie à effet tunnel ; et l'autre plus fondamentale du point de vue de la physique : la radioactivité α (qui est le seul exemple de physique nucléaire au programme).