Petite Classe 3

Solutions stationnaires - Effet tunnel

1 Équation de Schrödinger stationnaire

On cherche les solutions de l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r},t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r})\right]\psi(\vec{r},t) = \hat{H}\psi(\vec{r},t), \tag{3.1}$$

où $\hat{H} = H(\hat{\vec{r}},\hat{\vec{p}}) = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + V(\hat{\vec{r}})$ est l'opérateur appelé "Hamiltonien" qui représente l'opérateur Hermitien de l'observable énergie. Le potentiel V sera supposé indépendant du temps ($\partial V/\partial t = 0$).

Q1 Montrer qu'en écrivant une solution $\psi(\vec{r},t)$ sous la forme séparable : $\psi(\vec{r},t) = \varphi(\vec{r})\chi(t)$, l'équation de Schrödinger est équivalente aux deux équations différentielles suivantes pour $\varphi(\vec{r})$ et $\chi(t)$:

$$\hat{H}\varphi(\vec{r}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r})\right]\varphi(\vec{r}) = E\varphi(\vec{r}) \tag{3.2}$$

$$i\hbar\frac{d\chi(t)}{dt} = E\chi(t) \tag{3.3}$$

où E est une constante arbitraire. Quelle est la dimension de celle-ci ?
L'équation pour $\varphi(\vec{r})$ s'appelle *l'équation de Schrödinger indépendante du temps.* Vérifier que $\psi(\vec{r},t)$ est fonction propre de l'hamiltionien avec pour valeur propre E.

Q2 Résoudre l'équations (3.3) pour exprimer la dépendance temporelle des solutions séparables.

Q3 Calculer la moyenne de l'observable énergie pour un état séparable solution de (3.2) et (3.3), ainsi que sa variance. Quels sont les résultats possibles d'une mesure de l'énergie à un temps t donné ?

Q4 En considérant plus généralement une observable quelconque $\hat{A}$ qui ne dépend pas explicitement du temps $\hat{A} = A(\hat{\vec{r}},\hat{\vec{p}})$, justifier que l'on puisse qualifier les solutions étudiées ici de stationnaires.

2 Effet tunnel

On considère le potentiel unidimensionnel défini comme suit :

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{pour } x < 0 \\ V_0 > 0 & \text{pour } x \in [0,a] \\ 0 & \text{pour } x > a \end{cases}$$

On suppose qu'une particule est mise en $-\infty$ et se propage dans la direction des x positifs.

2.1 Cas $E \geq V_0$

Q1 Montrer que la solution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps peut s'écrire sous la forme

$$\psi(x) = \begin{cases} A^1_{\rightarrow} e^{ik_1 x} + A^1_{\leftarrow} e^{-ik_1 x} & \text{pour } x < 0 \\ A^2_{\rightarrow} e^{ik_2 x} + A^2_{\leftarrow} e^{-ik_2 x} & \text{pour } 0 \leq x \leq a \\ A^3_{\rightarrow} e^{ik_1 x} + A^3_{\leftarrow} e^{-ik_1 x} & \text{pour } x > a \end{cases}$$

où $A^1_{\rightarrow}$, $A^1_{\leftarrow}$, $A^2_{\rightarrow}$, $A^2_{\leftarrow}$, $A^3_{\rightarrow}$, $A^3_{\leftarrow}$ sont des constantes complexes. Donner l'expression de k_1 et k_2.
On remarque que, comme pour les ondes planes, on ne peut pas normaliser cette fonction d'onde. Les solutions que nous allons trouver constituent en fait une base sur laquelle nous pourrons décomposer tout paquet d'onde (normalisable lui).

Q2 Nous supposons que la particule arrive de la gauche. Comme la fonction d'onde est définie à une constante multiplicative près, nous pouvons prendre $A^1_{\rightarrow} = 1$. Quelle constante peut-on annuler par ailleurs ?

Q3 Ecrire les conditions de raccordement en utilisant la continuité de ψ et $d\psi/dx$ en $x = 0$ et $x = a$.

Q4 La probabilité pour que la particule passe la barrière est donnée par le coefficient de transmission $T = |A^3_{\rightarrow}|^2$. Montrer que :

$$T(E) = \frac{4E(E - V_0)}{4E(E - V_0) + V_0^2 \sin^2 \sqrt{2m(E - V_0)}a/\hbar} \tag{3.4}$$

Q5 Interpréter la valeur de $T(E)$ obtenue, et commenter les conditions pour lesquelles on obtient $T(E) = 1$.

2.2 Cas $E < V_0$: Effet tunnel

Dans le cas $0 < E < V_0$, les calculs sont identiques, et on obtient le même résultat (3.4) pour le coefficient de transmission, qui se ré-écrit pour $E - V_0 < 0$:

$$T(E) = \frac{4E(V_0 - E)}{4E(V_0 - E) + V_0^2 \sinh^2 \sqrt{2m(V_0 - E)}a/\hbar} \tag{3.5}$$

Q1 Justifier le passage de (3.4) à (3.5) (on utilisera le fait que $\sin(x) = \frac{e^{ix} - e^{-ix}}{2i}$).

Q2 Donner une expression approché de $T(E)$ quand $\sqrt{2m(V_0 - E)}a/\hbar \gg 1$.

Q3 Quelle est la différence avec le comportement classique ?

3 Microscope à effet tunnel *(Facultatif)*

Le microscope à effet tunnel a été inventé par G. Binnig et H. Rohrer, qui ont obtenu le prix Nobel en 1986 pour cette invention. Le principe est de déplacer une pointe fine au voisinage de la surface d'un échantillon conducteur, et d'appliquer une différence de potentiel entre la pointe et l'échantillon (voir Fig. 3.1). Les électrons passent par effet tunnel de l'ećhantillon vers la pointe, générant ainsi un courant macroscopique qui permet de réaliser une cartographie de la surface de l'échantillon. Le dispositif est sensible à des variations de l'ordre de 0.01 nm de l'élévation de la surface.

Q1 On suppose que le courant tunnel est proportionnel à la transmission donnée par l'équation (3.5). Un des modes de fonctionnement est de maintenir constant le courant qui traverse le circuit. Expliquer alors que ce microscope permet de mesurer la forme de la surface.

Q2 Si $E = 2$ eV et $V_0 = 3$ eV, calculer les valeurs de T pour $a = 1$ nm et $a = 0.5$ nm.

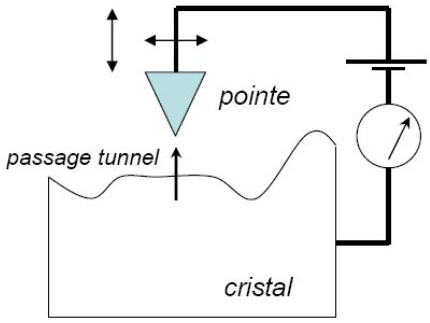

Figure 3.1 – *Principe d'un miscroscope à effet tunnel.*