

TD4: Puits de potentiel et effet tunnel

April 9, 2024

L'objectif de cette séance est d'étudier le cas de la résolution de la dynamique de systèmes quantiques (ici un électron non-relativiste) dans le cas de potentiels continus par morceaux. Nous verrons le cas du puits de potentiel et de l'effet Tunnel, intervenant dans des technologies quantiques (microscopie à effet tunnel, boîtes quantiques).

1 Puits de potentiel

1.1 Puits infini

On considère un puits infini, modélisé par un potentiel de la forme suivante:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } 0 < x < a \\ \infty & \text{sinon.} \end{cases} \quad (1)$$

(1) Écrire les fonctions d'onde à l'intérieur et à l'extérieur du puits.

(2) En écrivant les conditions aux limites aux interfaces, montrer que l'énergie est quantifiée :

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2 \quad (2)$$

Sa valeur minimale correspond-elle au fond du puits comme en physique classique? Cette énergie minimale assure la stabilité de la matière.

(3) Écrire la fonction d'onde dans le puits. En quel point la fonction d'onde s'annule-t-elle? Faire un schéma représentant la fonction d'onde pour différentes valeurs de l'énergie dans le puits de potentiel en fonction de x .

(4) Calculer l'écart entre niveaux d'énergie (en eV) dans les cas suivants. On donne $\hbar = 10^{-34}$ J.s, 1 eV = 1.6×10^{-19} J, $m = 10^{-30}$ kg. Commenter; en particulier, comparer cet écart à l'énergie thermique $k_B T \sim 25 \times 10^{-3}$ eV à température ambiante, et à l'énergie d'un photon de lumière visible (1.5 à 3 eV).

Atome	$a = 3 \text{ \AA}$	$E_2 - E_1 = ?$
Molécule linéaire (chaîne de 5 atomes)	$a = 15 \text{ \AA}$	$E_2 - E_1 = ?$
Fil métallique	$a = 3 \text{ mm}$	$E_2 - E_1 = ?$
		$E_{10^7+1} - E_{10^7} = ?$

1.2 Puits fini

On considère cette fois que le potentiel n'est pas de hauteur infinie $V_0 \neq \infty$.

(5) Sans résoudre l'équation de Schrödinger dans ce cas, que se passe-t-il quantitativement lorsque $E < V_0$? Refaire un schéma représentant la fonction d'onde pour différentes valeurs de l'énergie dans le puits de potentiel en fonction de x .

(6) Les états sont liés lorsque $E < V_0$. Pourquoi dit-on que les états sont de diffusion lorsque $E > V_0$?

2 Effet Tunnel

2.1 Modélisation de l'effet tunnel

Un électron pénètre dans une zone où le potentiel peut se mettre sous la forme:

$$V(x) = \begin{cases} U_0 & \text{si } 0 < x < a \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (3)$$

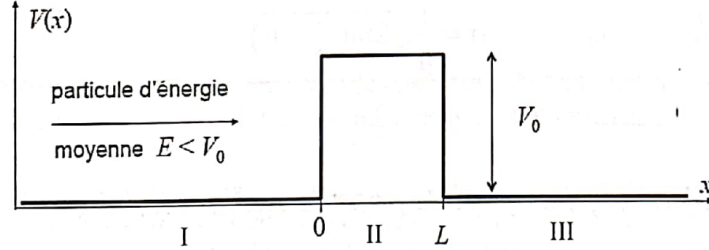


Figure 1: Modélisation du potentiel en fonction de la distance dans le cas de la description de l'effet Tunnel.

Considérons le cas où $0 < E < V_0$.

- (1) Écrire la fonction d'onde d'énergie $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ en terme d'onde se propageant vers les x croissants et vers les x décroissants d'amplitudes respectives A_i^+ et A_i^- ($i = 1, 2, 3$).
- (2) Introduire le facteur de réflexion au sein de la première interface $A_i^- = r A_i^+$, et de transmission en $x = a$ et réécrire les fonctions d'ondes.
- (3) En écrivant la continuité de la fonction d'onde (et de sa dérivée première), en déduire le système d'équation à 4 inconnues.
- (4) Résoudre le système afin de montrer que le coefficient de transmission est donné par (à faire chez soi):

$$T = \frac{1}{1 + M \sinh^2(\alpha a)}, \quad M = \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \quad (4)$$

- (5) Montrer alors dans le cas de la barrière épaisse: $\alpha a \gg 1$, on a:

$$T \sim 16 \frac{E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0}\right) e^{-2\alpha a} \quad (5)$$

En présence d'une barrière de potentiel d'une hauteur V_0 , le coefficient de transmission T d'une particule quantique de masse m et d'énergie $E < V_0$ est observable. Contrairement à ce que prédit la physique classique, il existe une probabilité non négligeable pour que la particule traverse la barrière. Cette observation résulte de la probabilité non nulle de présence de la particule à l'intérieur de la barrière, illustrée par l'existence d'une onde évanescente de matière pénétrant sur une épaisseur de peau caractéristique.

L'expression de cette épaisseur de peau, notée d , est déterminée par la décroissance exponentielle de la fonction d'onde à l'intérieur de la barrière. Elle peut être calculée en fonction de la constante de propagation k de la particule dans la barrière:

$$d = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(E - V_0)}}$$

Cette expression révèle que la probabilité de présence de la particule décroît exponentiellement à mesure que l'on s'éloigne de la surface de la barrière. Ainsi, bien que la probabilité de transmission soit non nulle, elle diminue avec l'énergie de la particule et la hauteur de la barrière, ce qui est une caractéristique distinctive des phénomènes quantiques par rapport à la mécanique classique.

- (6) Que se passe-t-il lorsque $V_0 \rightarrow \infty$?

2.2 Hétérojonction de semi-conducteurs et microscope à effet tunnel

On considère une hétérojonction de semi-conducteurs $AlGaAs-GaAs-AlGaAs$ (voir Fig. 2) avec les paramètres suivants:

- masse effective de l'électron égale à $0.0067 m_e$ (une masse effective, dit simplement, est la masse d'une particule lorsqu'elle est soumise à des interactions (ici Coulombienne).)

- $V_0 = 375 \text{ meV}$
 - largeur de la barrière entre 1 et 10nm.
- (7) Quelle est la probabilité de passage pour un électron d'énergie cinétique $E = 40 \text{ meV}$?

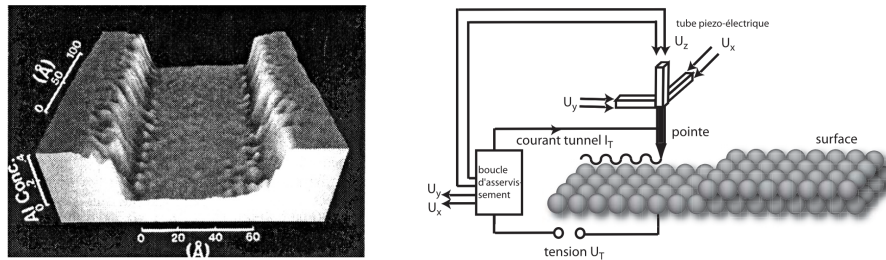


Figure 2: (Gauche) Hétérojonction de semi-conducteurs $AlGaAs - GaAs - AlGaAs$, le relief correspond à la variation de potentiel ressentie par un electron libre (dit de conduction). L'image a été prise à l'aide d'un microscope à effet Tunnel. (Droite) Microscope à effet tunnel, voir description dans le texte.

2.3 Principe du microscope à effet tunnel

Le principe de la microscopie à effet tunnel est la suivante (voir schéma de principe Fig. 2):

- (1) Un morceau fini de métal en forme de pointe très fine est placé à proximité de la surface de l'échantillon que l'on souhaite étudier. La pointe et l'échantillon sont maintenus à des tensions différentes.
- (2) Les électrons sur la pointe peuvent passer de la pointe à l'échantillon par effet tunnel (le potentiel n'est pas exactement comme décrit dans Fig.1 car le voltage tord le potentiel) Cependant, le courant tunnel est le même que dans l'approximation de la barrière épaisse.
- (3) Le courant tunnel qui résulte de ce processus dépend de la distance entre la pointe et la surface. À mesure que la pointe se déplace au-dessus de la surface, la variation du courant tunnel est mesurée.
- (4) Pour maintenir le courant tunnel constant, la position de la pointe est ajustée par un mécanisme de rétroaction. Ce réglage permet de maintenir une distance constante entre la pointe et la surface, ce qui donne une carte topographique très précise de la surface de l'échantillon. En d'autres termes, lorsque la distance entre l'échantillon et la pointe diminue, le courant tunnel augmente, et pour revenir à un courant constant, la pointe s'éloigne.
- (5) Les variations du courant tunnel en fonction de la position de la pointe sont utilisées pour créer une image en trois dimensions de la surface de l'échantillon. Les défauts atomiques, les rugosités de surface et d'autres caractéristiques à l'échelle atomique peuvent ainsi être visualisés.

On pourra consulter la vidéo:

https://www.youtube.com/watch?v=6i0Suqe52wE&ab_channel=LaPhysiqueAutrement

A Exercices d'applications

- (1) Considérons une particule dans une boîte à 1 dimension, $\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(\frac{n\pi x}{L})$, où L est la largeur de la boîte et n le nombre quantique quantifiant les niveaux d'énergie. Calculer la valeur moyenne de la position $\langle x \rangle$.
- (2) Pour l'état fondamental dans le puit infini, calculer les variances en position Δx et en impulsion Δp_x . Vérifier alors l'inégalité d'Heisenberg $\Delta x \Delta p_x \geq \hbar/2$.
- (3) Soit maintenant une particule dans une boîte à 2D. Déterminer l'état fondamental et les états excités.

Particule sur un tore

Considérons maintenant une particule sur un tore. Quels sont les conditions aux limites? Montrer que les énergies sont données par:

$$E_n = \frac{2\pi^2 \hbar^2}{mL^2} n_x^2 \quad (6)$$

Une marche de potentiel

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x \leq 0 \\ V_0 & x > 0 \end{cases} \quad (7)$$

Existe-t-il des états liés ou de diffusion? Donner une définition simple de ces termes. Montrer que dans le cas où $E > V_0$, on a :

$$R = \frac{\sqrt{E} - \sqrt{E - V_0}}{\sqrt{E} + \sqrt{E - V_0}} \quad (8)$$

Que constate-t-on dans le cas où $E \gg V_0$? Observerait-on cette situation en mécanique classique?

Complément effet tunnel

On peut montrer que le coefficient de transmission $T = |t|^2$ lorsque $E > U_0$ peut se mettre sous la forme:

$$T(\phi) = \frac{1}{1 + A^2 \sin^2(\phi)} \quad (9)$$

avec $\phi = qa$. À quel analogue optique cette expérience vous fait-elle penser ?

B Puits de potentiel

B.1 Point maths

Pas obligatoire à faire, au cas où l'élève est vraiment insistant dessus (similaire à la démonstration des relations de passages en électromagnétisme). On exige de plus que les fonctions d'onde soient continues et à dérivée première continue aux points de discontinuité du potentiel (c'est une conséquence de l'équation de Schrödinger).

Supposons qu'en un point x_0 , $V(x)$ présente une discontinuité finie: $\forall \epsilon > 0, V(x_0 - \epsilon) \neq V(x_0 + \epsilon)$. Une telle discontinuité ne correspond pas à une réalité physique mais représente assez bien une forte variation de potentiel sur une petite distance. La fonction d'onde est finie en x_0 , on intègre Schrödinger indépendante du temps comme:

$$\phi'(x_0 + \epsilon) - \phi'(x_0 - \epsilon) + \frac{2m}{\hbar^2} \int_{x_0 - \epsilon}^{x_0 + \epsilon} (E - V)\phi(x)dx = 0 \quad (10)$$

Et donc lorsque $\epsilon \rightarrow 0$, on a $\phi'(x_0 + \epsilon) - \phi'(x_0 - \epsilon)$ qui tend aussi vers zéro. ϕ' est continue en x_0 et a fortiori ϕ est continue sur une discontinuité finie de potentiel.

B.2 Puits infini

(1) Dans la région (2), l'équation de Schrödinger s'écrit:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) \quad (11)$$

On cherche des solutions stationnaires $\psi(x, t) = \phi(x)e^{-iEt/\hbar}$ on trouve l'équation différentielle:

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \phi(x) = 0 \quad (12)$$

C'est une équation différentielle du second degré dont la solution s'écrit:

$$\phi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad (13)$$

avec $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$, qui correspond à la relation de dispersion. Cette relation de dispersion va être affectée par les conditions aux bords comme on va le voir dans la question suivante.

(2) Les conditions aux bords imposent $\phi(0) = \phi(a) = 0$ ce qui entraînent $A + B = 0$ et $Ae^{ika} + Be^{-ika} = 0$. Ce système admet des solutions non-nulles lorsque le déterminant est nul, ce qui donne $\sin(ka) = 0$. Il existe un entier $n \in \mathbb{Z}$ tel que $k_n a = n\pi$, soit l'énergie qui vaut:

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2 \quad (14)$$

Cette quantification des énergies accessibles à la particule est analogue à la quantification des pulsations propres d'une corde vibrante fixée à ses extrémités.

Dans l'état fondamental, l'énergie dite de confinement quantique prend la valeur (au centre du puit):

$$E_1 = \frac{\hbar^2}{8ma^2} \quad (15)$$

L'énergie, qui se réduit ici à l'énergie cinétique de la particule, du niveau fondamental ($n = 1$) n'est pas nulle : ce n'est pas un état de repos !

(3) La fonction d'onde s'écrit en utilisant la première condition aux bords ($\phi(0) = 0$): $\psi(x, t) = A(e^{ikx} - e^{-ikx}) = 2iA \sin(kx)e^{-iEt/\hbar}$. En utilisant la deuxième condition aux bords ($\phi(a) = 0$), on trouve que:

$$\psi_n(x, t) = 2iA_n \sin(n \frac{\pi x}{a}) e^{-iE_n t/\hbar} \quad (16)$$

La normalisation de la fonction d'onde permet de déterminer la constante de normalisation: $\int_0^a |\psi_n(x, t)|^2 dx = 1$ qui s'écrit:

$$\int_0^a 4|A_n|^2 \sin^2(n \frac{\pi x}{a}) dx = 2|A_n|^2 a = 1 \quad (17)$$

On a liberté sur la phase à l'origine que l'on choisit nulle pour trouver ainsi:

$$\psi_n(x, t) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(n \frac{\pi x}{a}) e^{-iE_n t/\hbar} \quad (18)$$

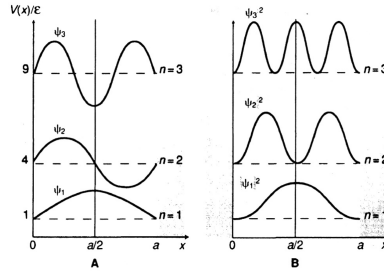


Figure 3: Allure de la fonction d'onde $|\psi_n(x, t)|^2$ des états stationnaires de plus basse énergie dans le cas du puits infini. On remarque leur symétrie / antisymétrie par rapport au centre du puits. La fonction d'onde est nulle hors du puits donc la probabilité de présence aussi.

(4) Pour l'atome, la différence entre niveaux d'énergie est de plusieurs eV. On retrouve un ordre de grandeur similaire aux raies spectrales effectivement observées pour les atomes, qui sont excités par des photons dans l'ultraviolet. Par ailleurs, l'écart est important comparé à $k_B T$, ce qui indique que la quantification ne sera pas masquée par l'énergie d'agitation thermique. Pour la molécule, le résultat est similaire, mais les raies spectrales sont dans l'infrarouge, ce qui là aussi correspond à l'observation. L'écart avec $k_B T$ est moins marqué mais reste important. Pour le fil métallique, c'est le contraire. L'écart des niveaux d'énergie (que ce soit à E_1 ou E_{10^7}) est très faible devant $k_B T$, la quantification sera complètement masquée par l'agitation thermique. On retrouve le fait que les effets quantiques ne se voient pas à l'échelle macroscopique. Bonus : il faut voir que dans un fil métallique, il y a de nombreux électrons, pas qu'un seul. En ordre de grandeur, il y en aura autant que d'atomes ; et si on considère le fil comme une suite de N atomes, avec les dimensions données, $N = 10^7$. Ces N électrons vont occuper les états que nous avons trouvés ; or deux électrons ne peuvent pas occuper le même état (principe d'exclusion de Pauli). On verra les détails en physique statistique, mais intuitivement, ils vont occuper les N premiers niveaux (ce qui minimise l'énergie totale). Dans cette situation, la différence d'énergie à considérer pour exciter le système n'est pas $E_2 - E_1$: l'électron du niveau 1 ne peut pas passer au niveau 2 car celui-ci est occupé par un autre électron ; c'est l'électron du niveau N qu'on peut faire passer au niveau $N + 1$, qui est libre, avec une énergie $E_{N+1} - E_N$.

B.3 Puits fini

(5) k et E sont de nouveau quantifiés, et les premiers niveaux sont approximativement les mêmes que pour

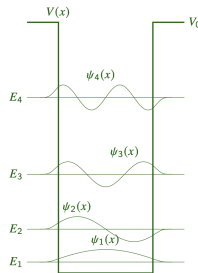


Figure 4: Allure de la fonction d'onde des états stationnaires de plus basse énergie. On remarque leur symétrie / antisymétrie par rapport au centre du puits. La fonction d'onde est pas nulle hors du puits donc la probabilité de présence non plus.

le puits infini, avec $k_n \simeq \frac{n\pi}{L}$. Il y a de nouveau une énergie de confinement non nulle. La fonction d'onde ne s'annule plus hors du puits, même si elle décroît exponentiellement. Contrairement à la situation classique, **la particule peut sortir du puits bien que son énergie soit inférieure à la hauteur du puits !** C'est l'effet tunnel. La fonction d'onde est toujours symétrique ou antisymétrique par rapport au centre du puits. Elle présente toujours des annulations dans le puits (sauf la première).

(6) La particule n'est plus localisée, la fonction d'onde est sinusoïdale partout, l'énergie n'est plus quantifiée. La particule est bien sortie du puits, comme en physique classique.

C Effet Tunnel

C.1 Modélisation de l'effet tunnel

(1) Recherche des états stationnaires de l'équation de Schrödinger

$$\begin{cases} \psi_1(x) = A_1^+ e^{ikx} + A_1^- e^{-ikx} \\ \psi_2(x) = A_2^+ e^{\alpha x} + A_2^- e^{-\alpha x} \\ \psi_3(x) = A_3^+ e^{ikx} \end{cases} \quad (19)$$

avec $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ et $\alpha = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$. S'il n'y a pas de source de particule en ∞ , et allant dans les x décroissant, le terme A_3^- est nul.

(2) On remplace les coefficients comme joint:

$$\begin{cases} \psi_1(x) = A_1^+ e^{ikx} + r A_1^+ e^{-ikx} \\ \psi_2(x) = A_2^+ e^{\alpha x} + A_2^- e^{-\alpha x} \\ \psi_3(x) = A_3^+ e^{ikx} \end{cases} \quad (20)$$

(3) La continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée première aux deux interfaces donne l'équation à 4 inconnues:

$$\begin{cases} A_1^+(1+r) = A_2^+ + A_2^- \\ ikA_1^+(1-r) = \alpha(A_2^+ - A_2^-) \\ A_2^+ e^{\alpha a} + A_2^- = A_1^+ \tau e^{ika} \\ \alpha(A_2^+ e^{\alpha a} + A_2^- e^{-\alpha a}) = A_1^+ \tau i k e^{ika} \end{cases} \quad (21)$$

(4) On se retrouve avec 4 équations avec 5 inconnues. Fixons $A_1^+ = 1$. Les inconnues restantes sont A_2^\pm et r, τ . Le but est d'extraire r, τ . On commence par les deux premières lignes:

$$A_2^+ = \frac{1}{2} \left(1 + i \frac{k}{\alpha} + (1 - i \frac{k}{\alpha} r) \right) \quad (22)$$

$$A_2^- = \frac{1}{2} \left(1 - i \frac{k}{\alpha} + (1 + i \frac{k}{\alpha} r) \right) \quad (23)$$

Les deux dernières lignes donnent:

$$A_2^+ = \frac{1}{2} \tau e^{ika} e^{-\alpha a} \left(1 + i \frac{k}{\alpha} \right) \quad (24)$$

$$A_2^- = \frac{1}{2} \tau e^{ika} e^{\alpha a} \left(1 - i \frac{k}{\alpha} \right) \quad (25)$$

On se retrouve alors avec un système de Cramer $AX = B$:

$$\begin{pmatrix} e^{ika} e^{-\alpha a} \rho_+ & -\rho_- \\ e^{ika} e^{\alpha a} \rho_- & -\rho_+ \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tau \\ r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho_+ \\ \rho_- \end{pmatrix} \quad (26)$$

avec $\rho_+ = 1 + i \frac{k}{\alpha}$ et $\rho_- = 1 - i \frac{k}{\alpha}$ et on trouve:

$$\tau = e^{-ika} \frac{\rho_-^2 - \rho_+^2}{\rho_-^2 e^{\alpha a} - e^{-\alpha a} \rho_+^2} \quad (27)$$

$$r = \frac{-2 \operatorname{sh}(\alpha a) \rho_+ \rho_-}{\rho_-^2 e^{\alpha a} - \rho_+^2 e^{-\alpha a}} \quad (28)$$

Puis on a les coefficients en puissance:

$$T = |\tau|^2 = \frac{4k^2 \alpha^2}{(\alpha^2 + k^2)^2 \operatorname{sh}^2(\alpha a) + 4\alpha^2 a^2} \quad (29)$$

(5) Dans le cas d'une barrière épaisse, on a $\sinh^2(\alpha a) \sim \frac{1}{4} \exp(2\alpha a)$, d'où:

$$T = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} e^{2\alpha a}} \quad (30)$$

$$= \frac{1}{\frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} e^{2\alpha a} (1 + (\frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} e^{2\alpha a})^{-1})} \quad (31)$$

En utilisant alors le DL au premier ordre $1/(1+x) = 1 - x + \dots$, on trouve bien alors au zero ordre que:

$$T = \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-2\alpha a} \quad (32)$$

$1/\alpha$ apparait comme la longueur caractéristique de l'onde évanescence.

(6) Il n'y a plus aucune transmission, l'onde est purement réfléchiée.

C.2 Hétérojonction de semi-conducteurs et microscope à effet tunnel

(7) $\alpha = \left(\frac{2 \cdot 9 \cdot 10^{-31} \cdot 1.6 \cdot 10^{-19} (375 - 40) \cdot 10^{-3}}{(1.05 \cdot 10^{-34})^2} \right)^{1/2} = 2.95 \cdot 10^9 m^{-1}$ (valeur avec masse de l'électron et non masse effective).

- Pour une largeur de 1nm, on obtient: $T \sim 0.0041$.
- Pour une largeur de 10nm, on obtient: $T \sim 3.08 \cdot 10^{-26}$. Les chiffres sont assez éloquentes: une barrière de 10nm est donc infranchissable pour un electron d'énergie cinétique 40 meV.

D Correction des exercices supplémentaires

(1) Considérons une particule dans une boîte à 1 dimension, $\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$, où L est la largeur de la boîte et n est le nombre quantique quantifiant les niveaux d'énergie. Calculer la valeur moyenne de la position $\langle x \rangle$.

La valeur moyenne de la position $\langle \hat{x} \rangle$ d'une particule décrite par la fonction d'onde $\psi(x)$ dans une boîte à une dimension peut être calculée en utilisant l'intégrale suivante:

$$\langle \hat{x} \rangle = \int_0^L x |\psi(x)|^2 dx$$

La fonction d'onde donnée est $\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$. Nous devons d'abord calculer $|\psi(x)|^2$ et ensuite effectuer l'intégration.

$$|\psi(x)|^2 = \left(\sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \right)^2 = \frac{2}{L} \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

Maintenant, nous pouvons calculer la valeur moyenne de la position $\langle x \rangle$:

$$\langle x \rangle = \int_0^L x \cdot \frac{2}{L} \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx$$

On utilise ensuite $2 \sin^2(\theta) = 1 - \cos(2\theta)$. On est ensuite ramené à calculer

$$\int_0^L dx x \exp\left(\frac{2in\pi x}{L}\right) = \frac{L}{2in\pi} (e^{2in\pi} - 1) \quad (33)$$

qui est nul quelque soit n .

D'où

$$\langle x \rangle = L/2 \quad (34)$$

(2) On doit calculer $\Delta x = \langle x^2 \rangle - (\langle x \rangle)^2$. On a déjà $(\langle x \rangle)^2 = (L/2)^2$, puis

$$\langle x^2 \rangle = \int_0^L x^2 \cdot \frac{2}{L} \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx$$

. On a

$$\int_0^L dx x^2 \exp\left(\frac{2in\pi x}{L}\right) = \left[x^2 \frac{L}{2in\pi} e^{2in\pi x/L} \right]_0^L - 0 = \frac{L^3}{2in\pi} = - \int_0^L dx x^2 \exp\left(\frac{-2in\pi x}{L}\right) \quad (35)$$

Ainsi: $\langle x^2 \rangle = L^2/3$. D'où $\Delta x = L^2/12$.

Calculons la transformée de Fourier de $\psi(x)$:

$$\tilde{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \psi(x) e^{ixp/\hbar} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{2}{L} \left(\frac{1}{2i} (\delta(p/\hbar - 2\pi n/L) - \delta(p/\hbar + 2\pi n/L)) - 2\delta(p/\hbar) \right) \quad (36)$$

(3) Comme il n'y a pas de couplage entre les variables x et y , on est amené à la considérer de manière indépendante. Appelons les dimensions de la boîte L_x et L_y . Les niveaux d'énergie sont donnés par:

$$E_{nm} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL_x^2} n^2 + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL_y^2} m^2 \quad (37)$$

Et les états propres sont:

$$\psi_{n,m}(x, y, t) = \sqrt{\frac{2}{L_x}} \sqrt{\frac{2}{L_y}} \sin\left(m \frac{\pi x}{L_x}\right) \sin\left(n \frac{\pi y}{L_y}\right) e^{-iE_{n,m}t/\hbar} \quad (38)$$

Particule sur un tore

Les conditions aux limites périodiques sont:

$$\psi(x=0) = \psi(x=L) \quad (39)$$

$$\partial\psi/\partial x(x=0) = \partial\psi/\partial x(x=L) \quad (40)$$

$$(41)$$

Les vecteurs propres sont:

$$\psi(x) = A \sin(2\pi n_j x/L) + B \cos(2\pi n_j x/L) \quad (42)$$

Les valeurs propres sont comme indiquées dans l'énoncé.

Une marche de potentiel

Pour $x < 0$, on a

$$\psi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx} \quad (43)$$

avec $\hbar^2 k^2 / 2m = E$, et on a pour $x > 0$

$$\psi(x) = C e^{ik_0 x} + D e^{-ik_0 x} \quad (44)$$

avec $\hbar^2 k^2 / 2m = E - V_0$. On suppose que $E < V_0$, et on prend $k = K$ avec $K = \sqrt{(2m/\hbar^2)(-V_0 + E)}$. Pour avoir une solution bornée, on doit avoir $D = 0$. En imposant que ψ soit C^1 en 0, alors on a:

$$A + B = C \quad ik(A - B) = iKC \quad (45)$$

Le coefficient en réflexion en amplitude est donc:

$$r = \frac{B}{A} = \frac{k - K}{k + K} \quad (46)$$

soit si $E \gg V_0$,

$$r = 1 - 2\sqrt{\frac{E - V_0}{E}} \quad (47)$$

et la quasi totalité de l'onde est réfléchi, alors que l'énergie de la particule est largement au dessus de la barrière. En mécanique classique, la particule ne verrait même pas ce potentiel.

Complément effet tunnel

Une cavité Fabry-Perot: on observe les mêmes résonances.