Chapitre VI

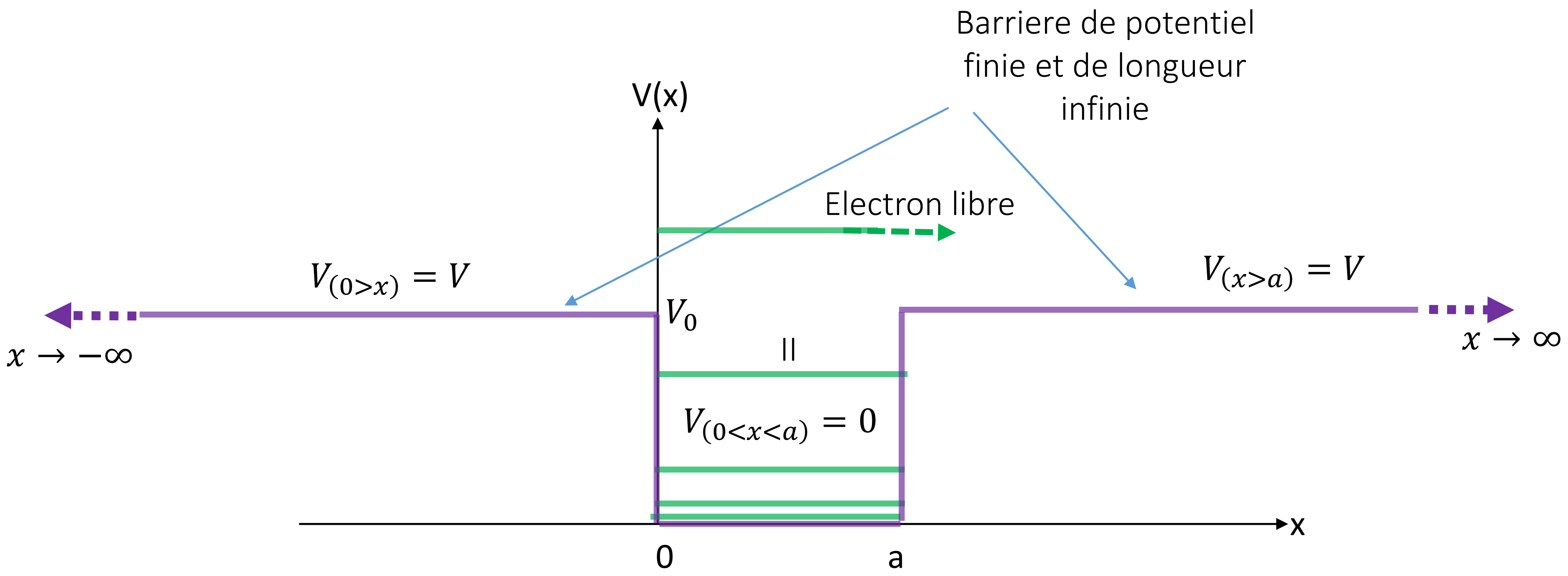
Puits de potentiel fini et effet tunnel

Mécanique Quantique
2021-2022 – Semestre 5 – JUNIA ISEN Lille

David Mele
david.mele@junia.com

VI.1 Puits de potentiel fini

A – Barrière infiniment large mais potentiel fini



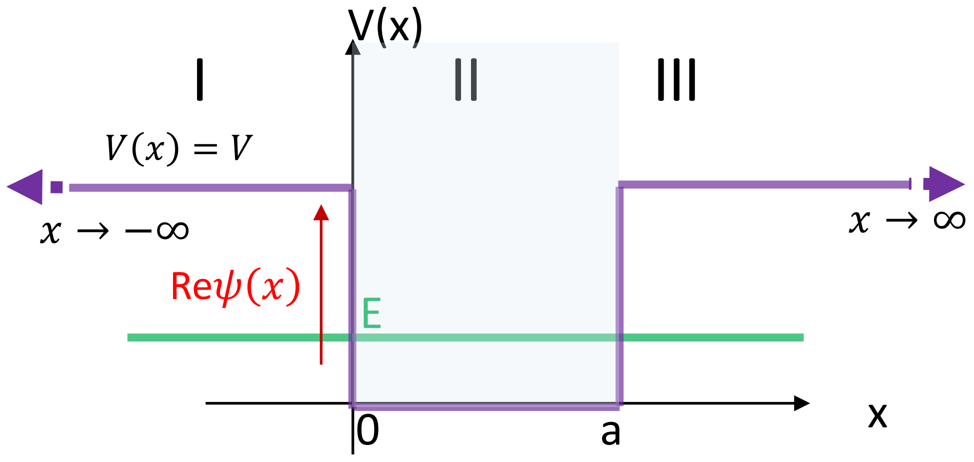
Motivation:

Les potentiels carrés infinis font l'approximation que les particules (électrons) ne peuvent jamais sortir du puits.

Dans les cas plus réalistes, avec assez d'énergie, un électron peut s'en extraire (effet photo électrique par exemple).

VI.1 Puits de potentiel fini

A – Barrière infiniment large mais potentiel fini -1D



Dans la région II :

$E > V$ donc : $E - V < 0$

Commençons par réécrire l'équation de Schrödinger indépendante du temps (ESIT) pour rechercher les solutions stationnaires:

$$\mathrm{E}\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x) + \hat{V}(\boldsymbol{x})\psi(x)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x) = \frac{2m}{\hbar^2}[V(\boldsymbol{x}) - E]\psi(x)$$

Et je pose $\underbrace{\frac{2m}{\hbar^2}}_{>0}\underbrace{[V(x) - E]}_{<0} = \underbrace{-\boldsymbol{k}^2}_{-k^2<0}$

alors k est un réel

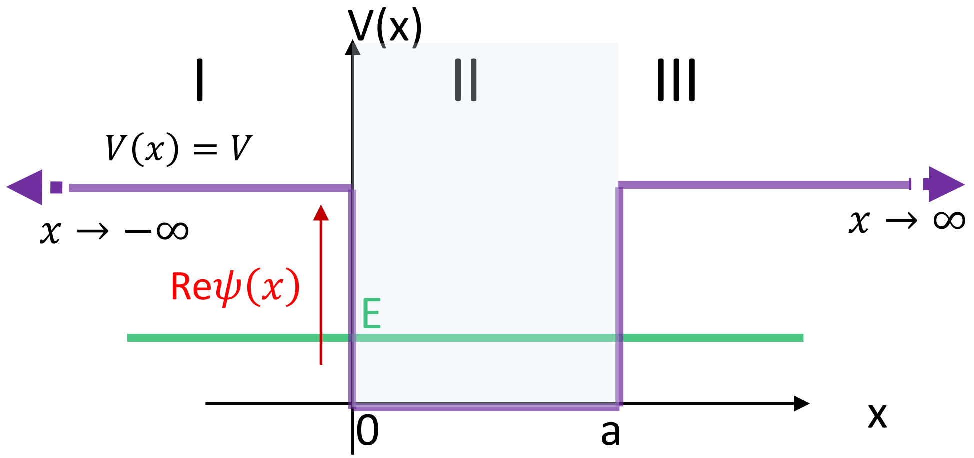
Je peux donc réécrire mon ESIT: $\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi_{II}(x) = -k^2\psi_{II}(x)$

Equation différentielle que je sais résoudre

VI.1 Puits de potentiel fini

Dans la région II :

A – Barrière infiniment large mais potentiel fini -1D



- Equation différentielle que je cherche à résoudre:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi_{II}(x) + k^2\psi_{II}(x) = 0$$

Ici k est réel et l'équa diff du second degré est sans second membre

- Donc je peux poser l'équation caractéristique:

$$r^2 + k^2 = 0$$

Equation de type $ar^2+br+c=0$

- Je cherche le discriminant de cette éq. caractéristique:

$$\Delta = b^2 - 4ac$$

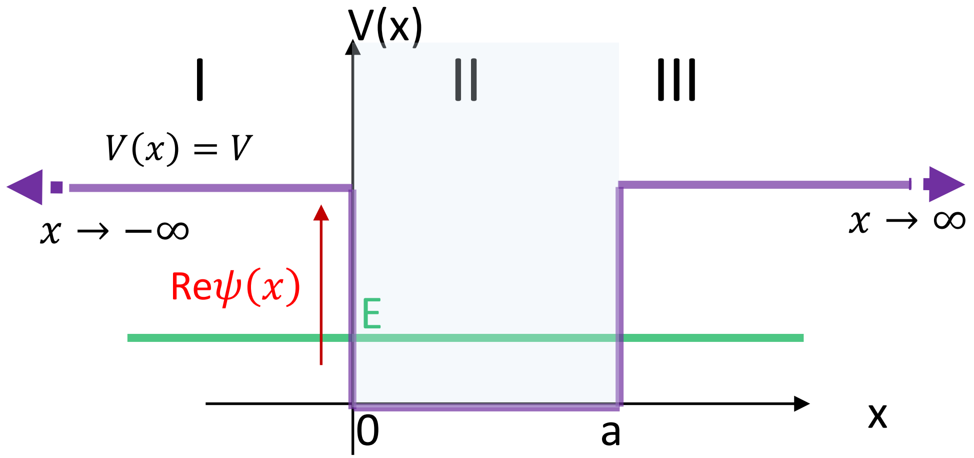
$$\Delta = -4k^2$$

$\Delta < 0$ Car on sait que k^2 est positif (k réel)

VI.1 Puits de potentiel fini

Dans la région II :

A – Barrière infiniment large mais potentiel fini -1D



- Je calcule les deux solutions racines de l'éq. caractéristique en sachant que $\Delta < 0$

$$r_{1,2} = \frac{-b \pm i\sqrt{|\Delta|}}{2a}$$

$$r_{1,2} = \frac{\pm i\sqrt{4k^2}}{2} \qquad \text{avec } \Delta = -4k^2$$

$$r_{1,2} = \pm ik$$

$$r_{1,2} = \alpha \pm i\beta \begin{cases} \alpha = 0 \\ \beta = k \end{cases}$$

- Comme le discriminant est négatif, les solutions générales de cette équation différentielle dans la région II sont données par :

$$\psi_{II}(x) = [A\cos(\underbrace{\beta}_{=k} x) + B\sin(\beta x)]\underbrace{e^{\alpha x}}_{e^0 = 1}$$

Solution générale de la fonction d'onde dans le puits (région II)

$$\boxed{\psi_{II}(x) = A\cos(kx) + B\sin(kx)}$$

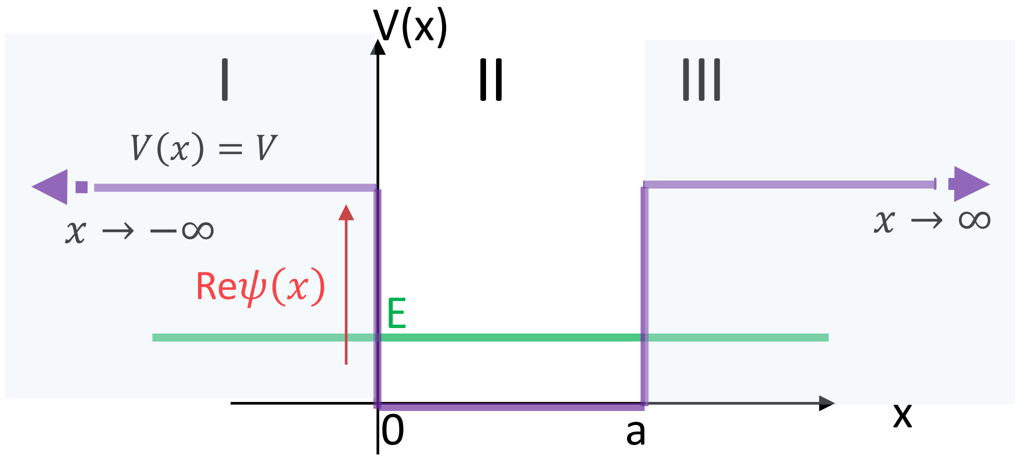
Comme je n'ai pas encore imposé de conditions limites dans la région II, les deux solutions sin et cos sont encore permises (contrairement au cas infini)

Il est aussi possible d'exprimer la solution générale sous la forme $\psi_{II}(x) = A\,e^{ikx} + Be^{-ikx}$

Voir TD 4

VI.1 Puits de potentiel fini

A – Barrière infiniment large mais potentiel fini -1D



Dans les régions I et III :

Le potentiel V est supérieur à l'énergie de la particule

$$V - E > 0$$

ESIT: $$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x) = \frac{2m}{\hbar^2}[V(\boldsymbol{x}) - E]\psi(x)$$

On peux cette fois ci poser : $$\underbrace{\frac{2m}{\hbar^2}}_{>0}\underbrace{[V(x) - E]}_{>0} = \underbrace{\boldsymbol{\alpha}^2}_{>0}$$

alors α est un réel

Je peux donc réécrire mon ESIT:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi_I(x) = \alpha^2\psi_I(x)$$

$\psi_I = \psi_{III} = \psi_{ext}$
pour extérieur aux puits

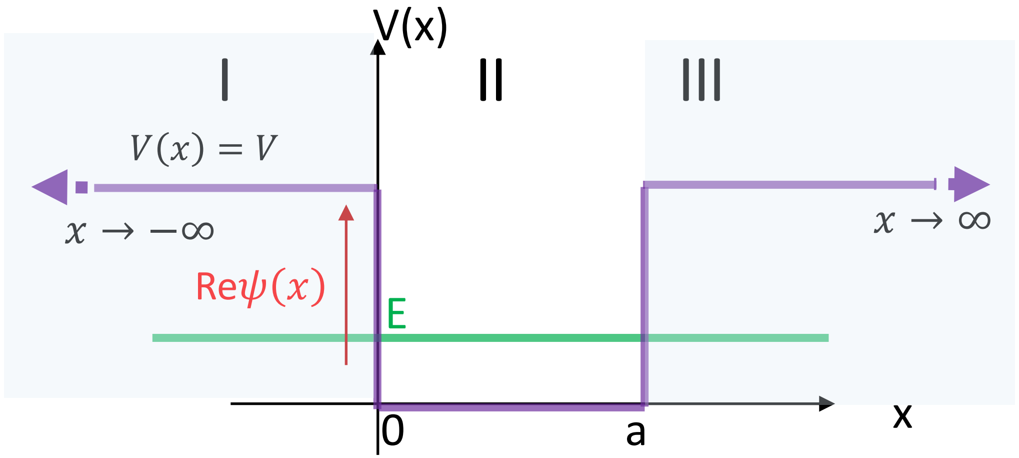
$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi_I(x) - \alpha^2\psi_I(x) = 0$$

Equation différentielle que je sais résoudre

VI.1 Puits de potentiel fini

Dans les régions I et III :

A – Barrière infiniment large mais potentiel fini -1D



- Equation différentielle que je cherche à résoudre:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi_I(x) - \alpha^2\psi_I(x) = 0$$

Ici k est réel et l'équa diff du second degré est sans second membre

- Donc je peux poser l'équation caractéristique:

$$r^2 - \alpha^2 = 0$$

Equation de type $ar^2+br+c=0$

- Je cherche le discriminant de cette éq. caractéristique:

$$\Delta = b^2 - 4ac$$

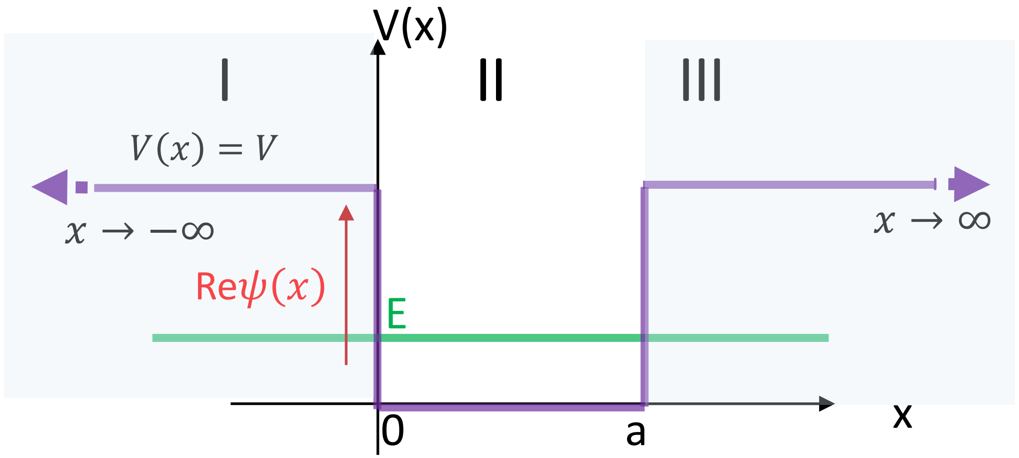
$$\Delta = +4\alpha^2$$

$\Delta > 0$ Car on sait que α^2 est positif

VI.1 Puits de potentiel fini

Dans les régions I et III :

A – Barrière infiniment large mais potentiel fini -1D



- Je calcule les deux solutions racines de l'éq. caractéristique en sachant que $\Delta > 0$

$$r_{1,2} = \frac{-b \pm \sqrt{\Delta}}{2a}$$

$$r_{1,2} = \frac{\pm\sqrt{4\alpha^2}}{2}$$

avec $\Delta = 4\alpha^2$

$$r_{1,2} = \pm\alpha$$

- Cette fois ci le discriminant est positif, les solutions générales de cette équation différentielle dans les régions I et III sont données par :

$$\psi_I(x) = Ce^{\underbrace{r_1}_{=\alpha} x} + De^{\underbrace{r_2}_{=-\alpha} x}$$

Solution générale de la fonction d'onde dans la région I

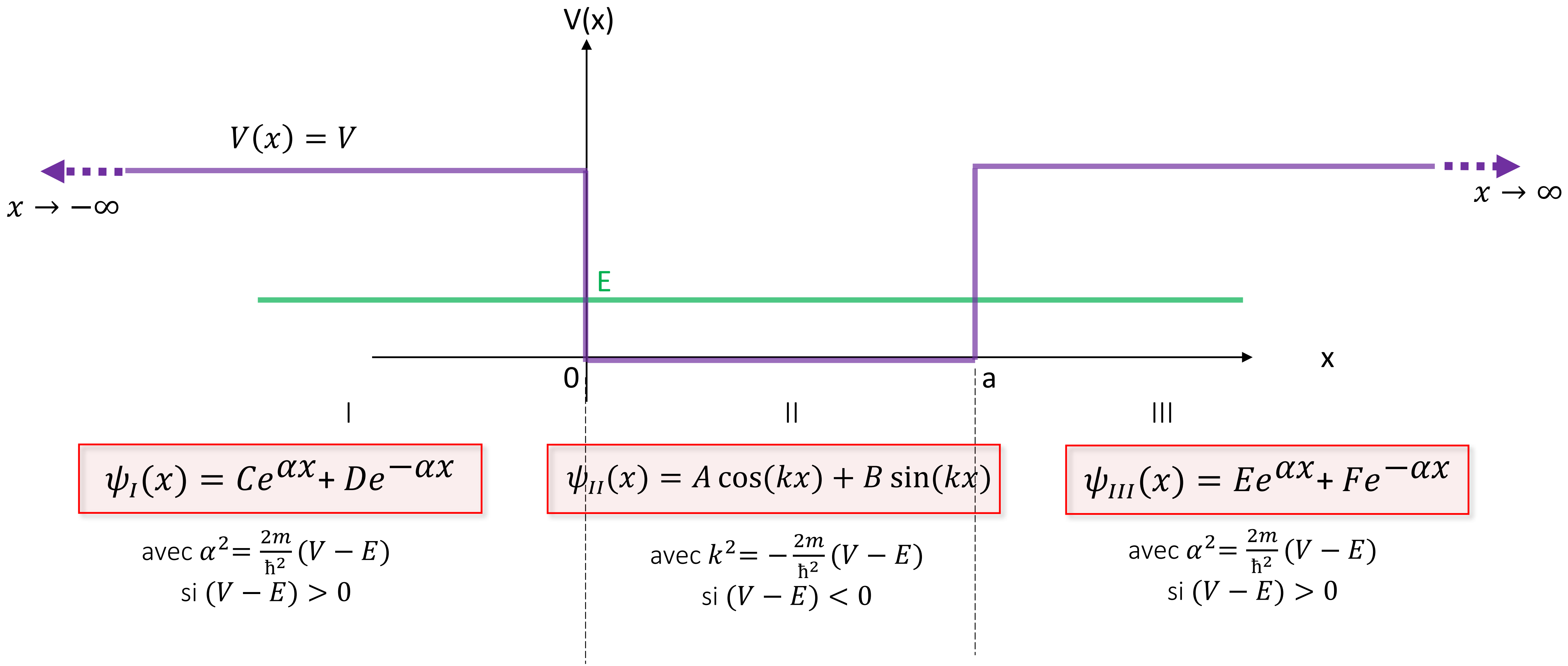
$$\boxed{\psi_I(x) = Ce^{\alpha x} + De^{-\alpha x}}$$

De même dans la région III

$$\boxed{\psi_{III}(x) = Ee^{\alpha x} + Fe^{-\alpha x}}$$

VI.1 Puits de potentiel fini

A – Barrière infiniment large mais potentiel fini -1D



$$\boxed{\psi_I(x) = Ce^{\alpha x} + De^{-\alpha x}}$$

avec $\alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V-E)$
si $(V-E) > 0$

$$\boxed{\psi_{II}(x) = A\cos(kx) + B\sin(kx)}$$

avec $k^2 = -\frac{2m}{\hbar^2}(V-E)$
si $(V-E) < 0$

$$\boxed{\psi_{III}(x) = Ee^{\alpha x} + Fe^{-\alpha x}}$$

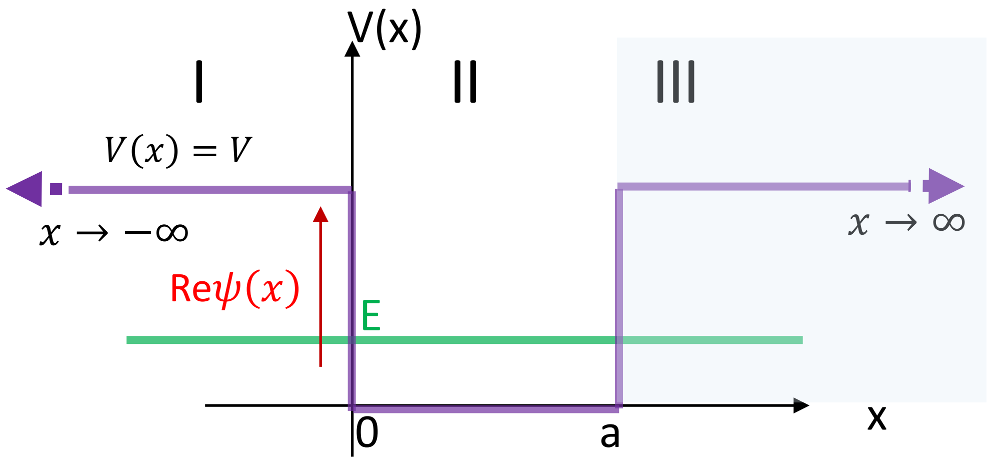
avec $\alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V-E)$
si $(V-E) > 0$

Quelles sont les valeurs de constantes A, B, C, D, et F physiquement acceptables?

VI.1 Puits de potentiel fini

A – Barrière infiniment large mais potentiel fini -1D

Quelles sont les valeurs de constantes A, B, C, D, et F physiquement acceptables?



$$\boxed{\psi_{III}(x) = Ee^{\alpha x} + Fe^{-\alpha x}}$$

$$\psi_{III}(x) = Fe^{-\alpha x}$$

Onde exponentiellement décroissante

→ Onde évanescente

- Si $E \neq 0$ alors $\lim_{x\to\infty} Ee^{\alpha x} = \infty$

  Ce qui rend ma fonction d'onde impossible à normaliser !

  (si $\psi(x) \to \infty$ alors $\int_a^\infty |\varphi(x)|^2 dx \to \infty$
  Ce qui ne respecter la condition de carré sommable de la fonction d'onde)

  Donc $\boxed{E = 0}$

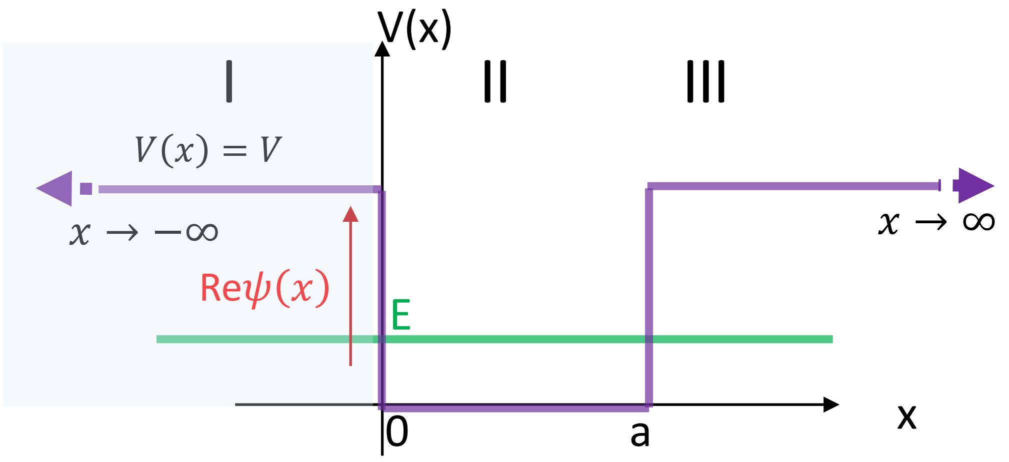
- Mais si $\mathrm{F} \neq 0$ alors $\lim_{x\to\infty} Fe^{-\alpha x} = 0$
  Ce qui est acceptable car normalisable!

  Donc $\boxed{F \neq 0}$

VI.1 Puits de potentiel fini

A – Barrière infiniment large mais potentiel fini -1D

Quelles sont les valeurs de constantes A, B, C, D, et F physiquement acceptables?



$$\boxed{\psi_I(x) = Ce^{\alpha x} + De^{-\alpha x}}$$

$$\psi_I(x) = Ce^{\alpha x}$$

Onde exponentiellement décroissante
→ Onde évanescente

- Si $C \neq 0$ alors $\lim_{x \to -\infty} Ce^{\alpha x} = 0$

  Cette fois ci on va vers les x décroissants

  Ce qui est acceptable car normalisable!

  Donc $\boxed{C \neq 0}$

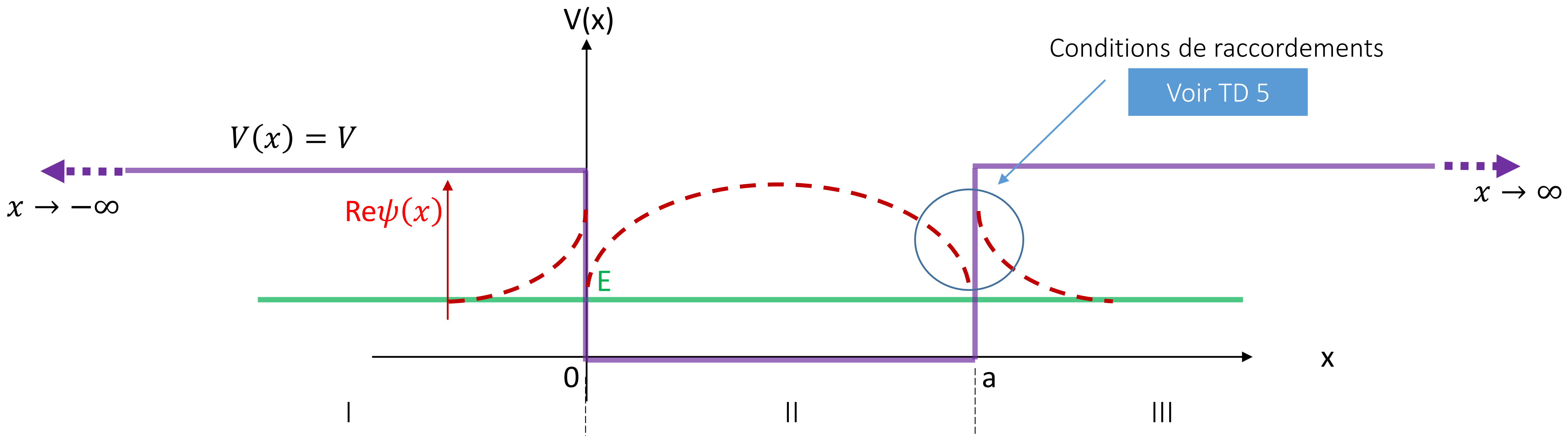
- Mais si $\mathrm{D} \neq 0$ alors $\lim_{x \to -\infty} De^{-\alpha x} = \infty$

  Ce qui rend ma fonction d'onde impossible à normaliser !

  Donc $\boxed{D = 0}$

VI.1 Puits de potentiel fini

A – Barrière infiniment large mais potentiel fini -1D



$$\boldsymbol{\psi_I(x) = De^{\alpha x}}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi_I(x) = \alpha^2\psi_I(x)$$

avec $\alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V-E)$

si $(V-E) > 0$

$$\boldsymbol{\psi_{II}(x) = A\cos(kx) + B\sin(kx)}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi_{II}(x) = -k^2\psi_{II}(x)$$

avec $k^2 = -\frac{2m}{\hbar^2}(V-E)$

si $(V-E) < 0$

$$\boldsymbol{\psi_{III}(x) = Fe^{-\alpha x}}$$

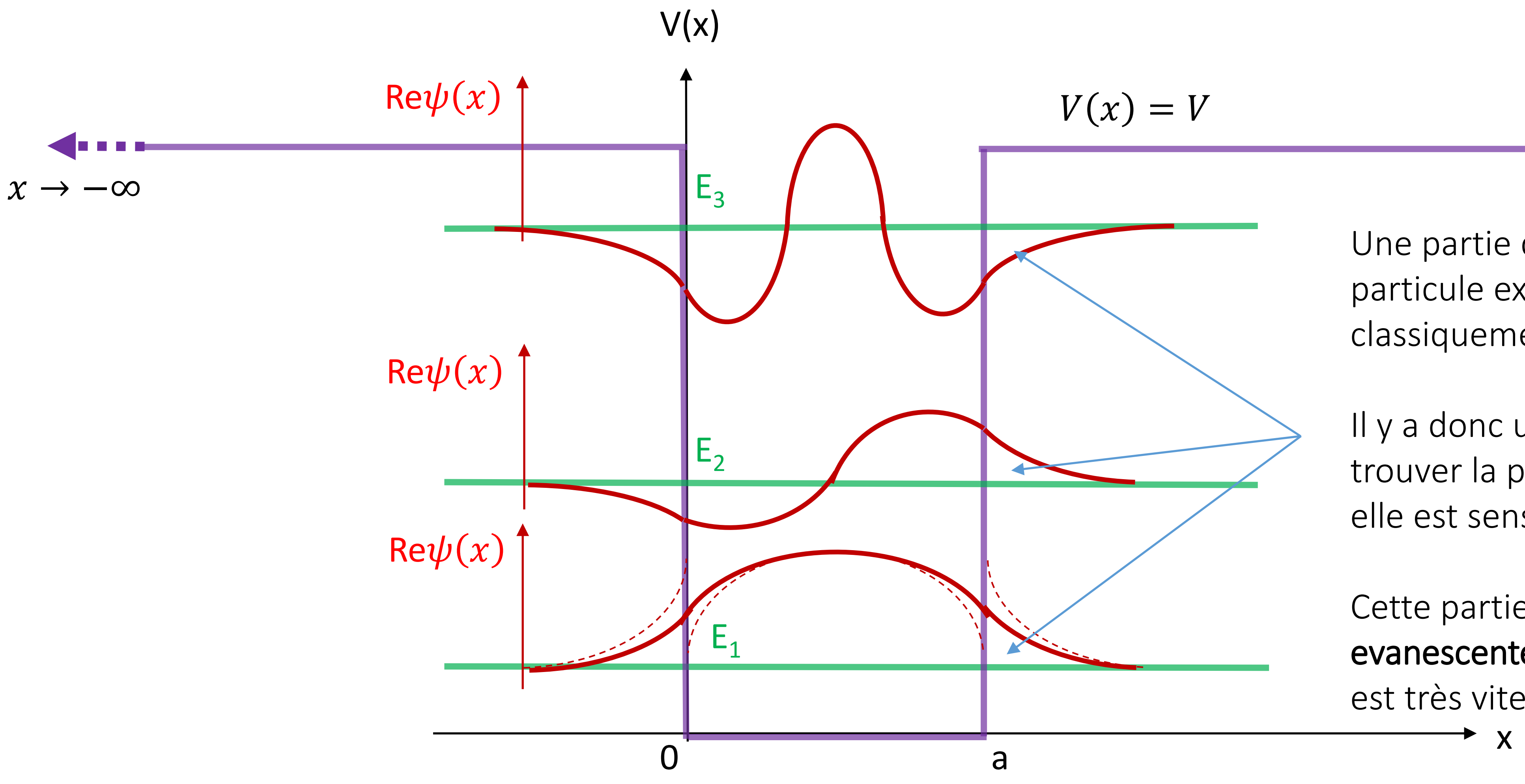
$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi_{III}(x) = \alpha^2\psi_{III}(x)$$

avec $\alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V-E)$

si $(V-E) > 0$

VI.1 Puits de potentiel fini

B – Solutions de TISE dans un potentiel fini -1D

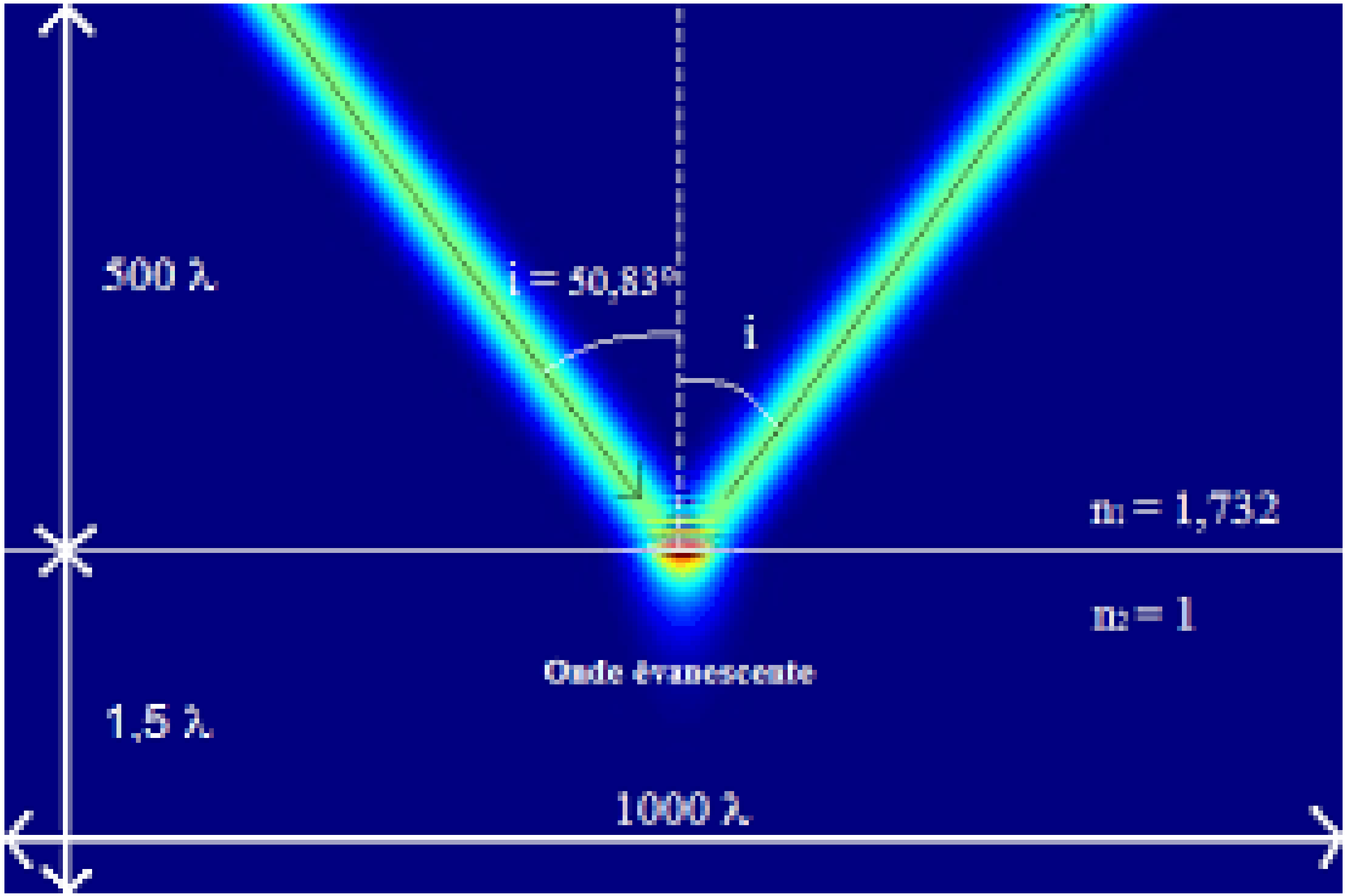


Une partie de la fonction d'onde de la particule existe dans une région classiquement interdite.

Il y a donc une probabilité non nulle de trouver la particule en dehors de là où elle est sensé être confinée.

Cette partie de l'onde est appelée **onde evanescente.** Elle ne se propage pas et est très vite absorbée par le matériau.

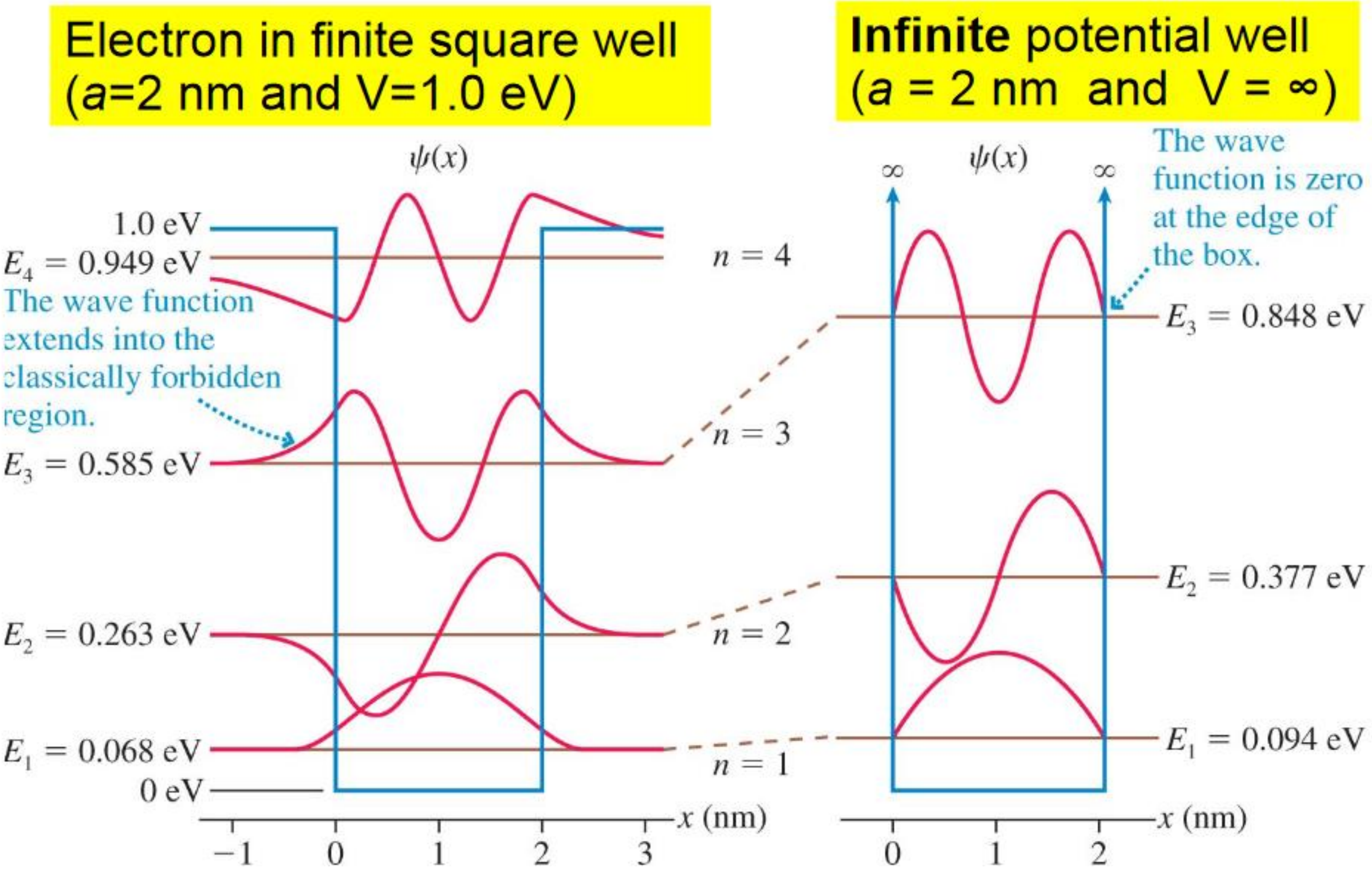
https://phet.colorado.edu/sims/cheerpj/bound-states/latest/bound-states.html?simulation=bound-states



Ces ondes évanescentes existent aussi dans le cas d'ondes électromagnétiques à l'interface de deux milieux d'indices différents

VI.1 Puits de potentiel fini

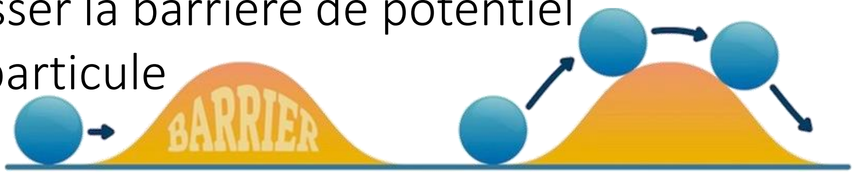
C – Comparaison puits infini/puits fini

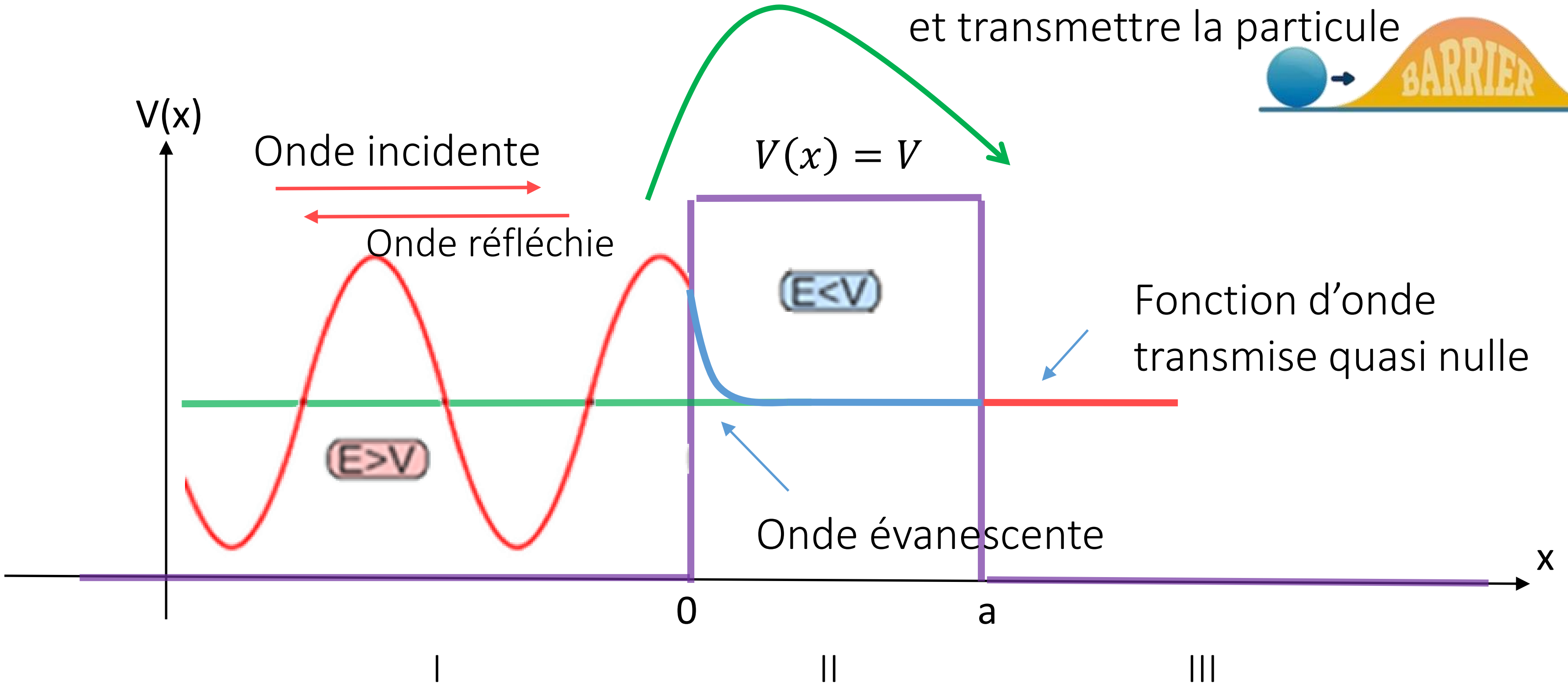


VI.2 Barrière de potentiel – effet tunnel

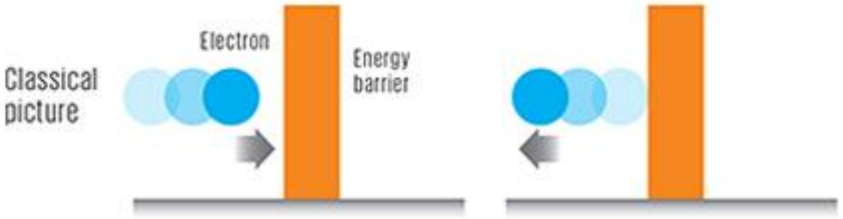
A – Barriere 1D large

Il faudrait apporter de l'énergie (thermique par ex) pour dépasser la barrière de potentiel et transmettre la particule



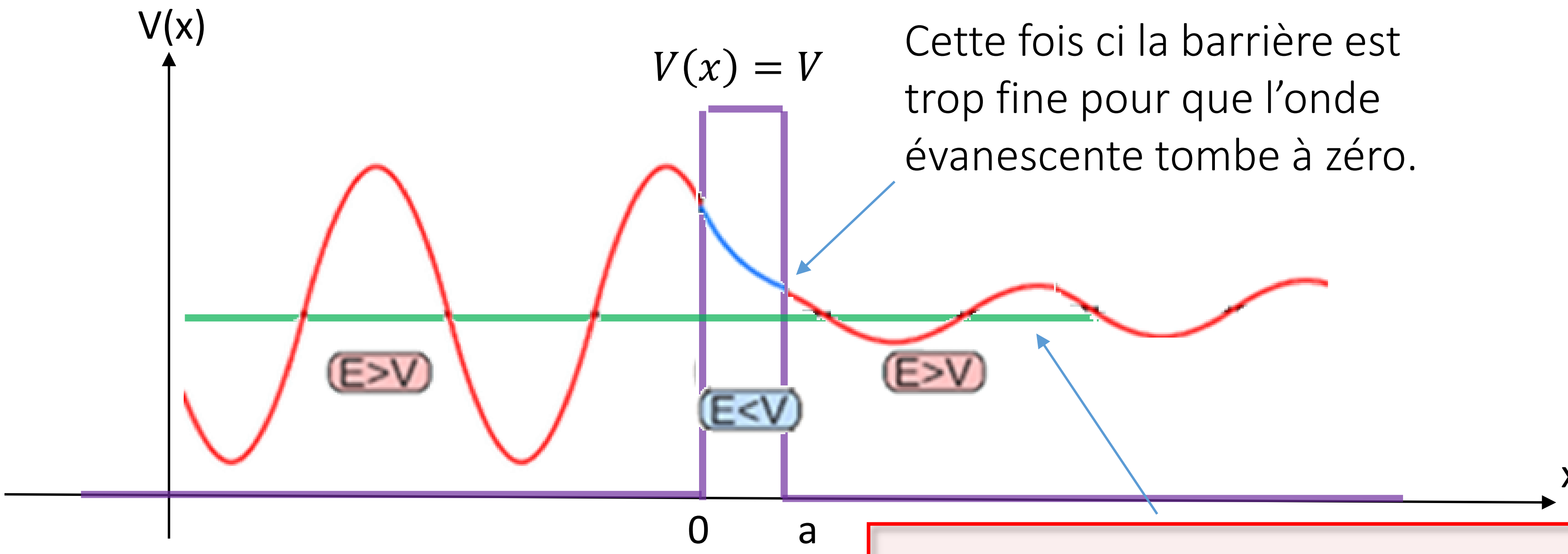


On se retrouve dans le cas classique où une balle rebondit contre le mur car elle ne peut la traverser:



VI.2 Barrière de potentiel – effet tunnel

B – Barrière 1D étroite et Effet tunnel



Cette fois ci la barrière est trop fine pour que l'onde évanescente tombe à zéro.

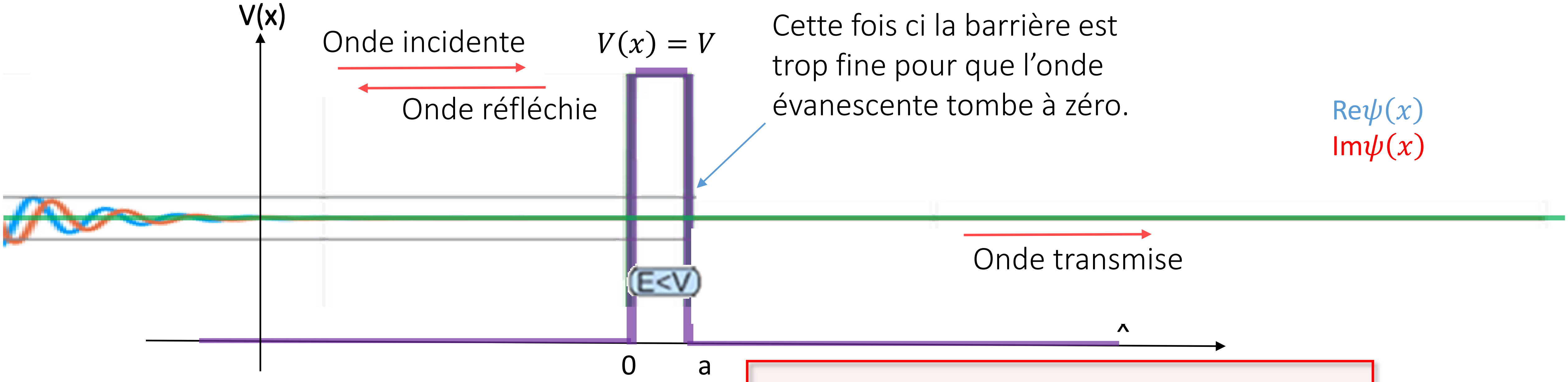
Il y a donc une partie de la fonction d'onde qui est transmise à travers la barrière.

→ Effet tunnel

Voir TD5

VI.2 Barrière de potentiel – effet tunnel

B – Barrière 1D étroite et Effet tunnel

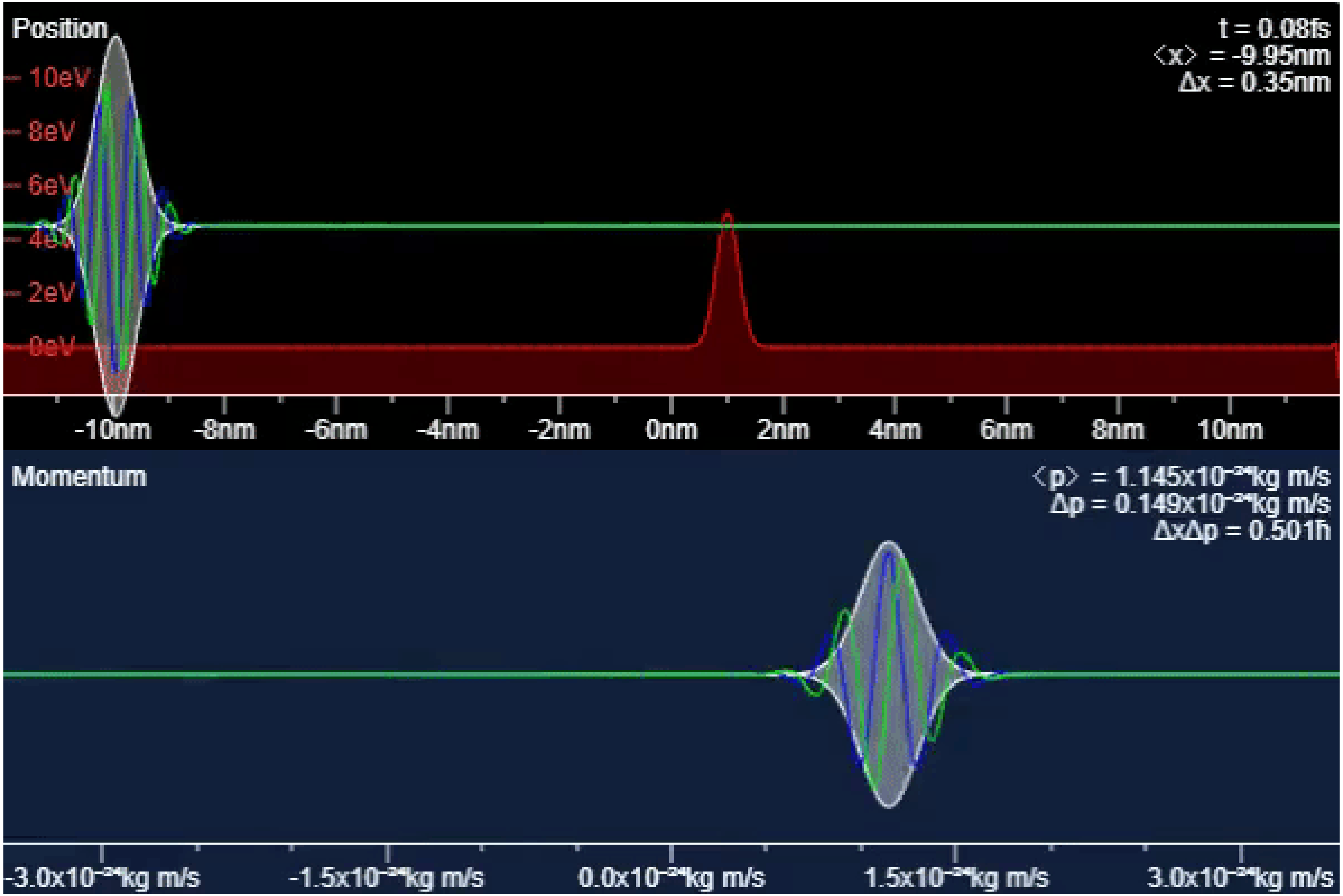


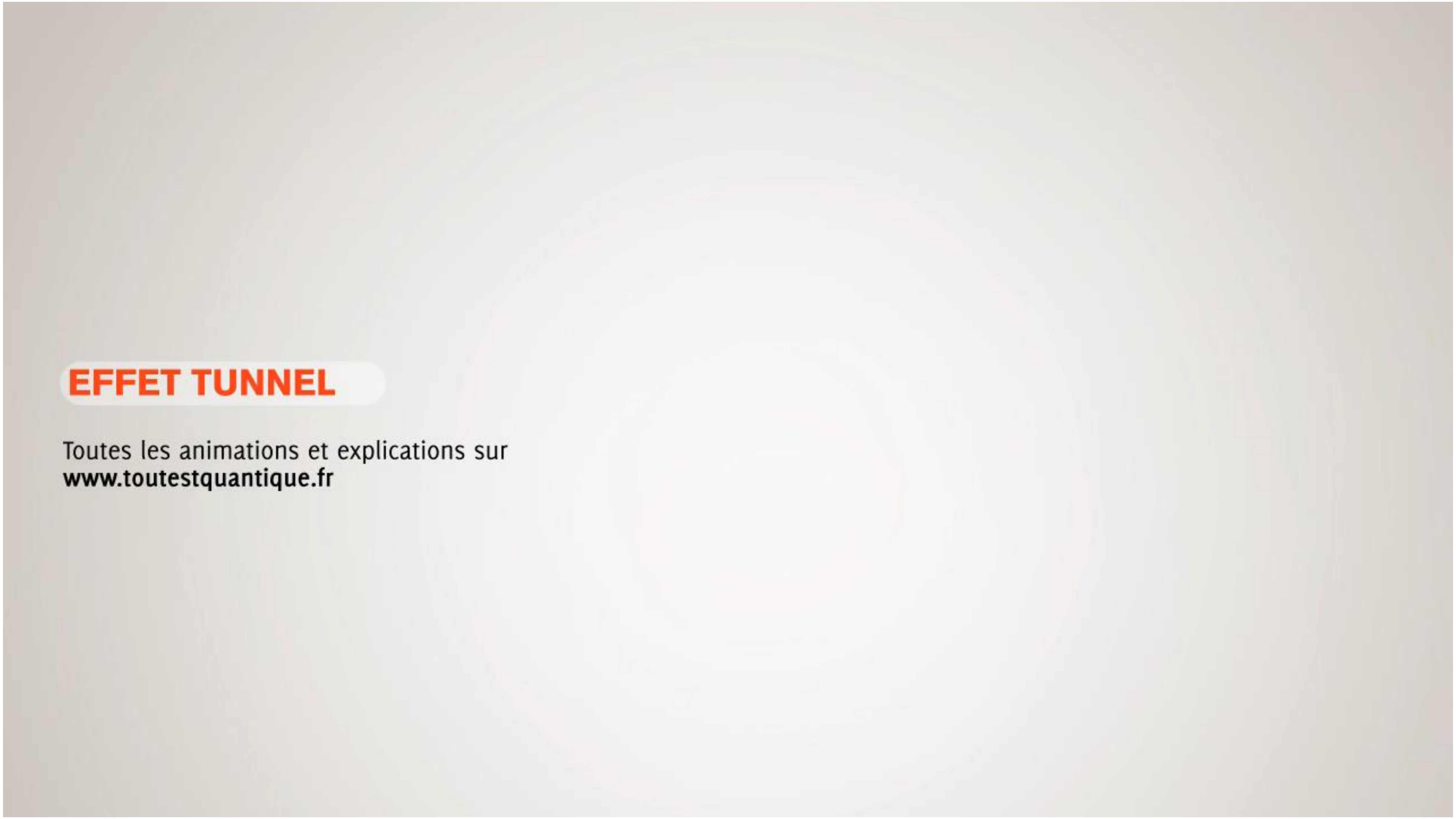
Cette fois ci la barrière est trop fine pour que l'onde évanescente tombe à zéro.

Il y a donc une partie de la fonction d'onde qui est transmise à travers la barrière.

→ Effet tunnel

Voir TD5


Position
t = 0.08fs
⟨x⟩ = -9.95nm
Δx = 0.35nm
10eV
8eV
6eV
4eV
2eV
0eV
-10nm
-8nm
-6nm
-4nm
-2nm
0nm
2nm
4nm
6nm
8nm
10nm
Momentum
⟨p⟩ = 1.145x10⁻²⁴kg m/s
Δp = 0.149x10⁻²⁴kg m/s
ΔxΔp = 0.501ħ
-3.0x10⁻²⁴kg m/s
-1.5x10⁻²⁴kg m/s
0.0x10⁻²⁴kg m/s
1.5x10⁻²⁴kg m/s
3.0x10⁻²⁴kg m/s

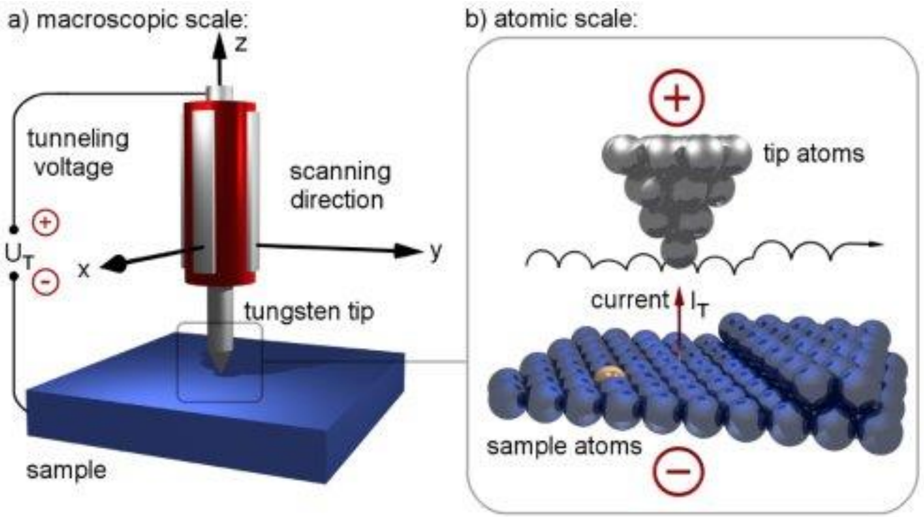


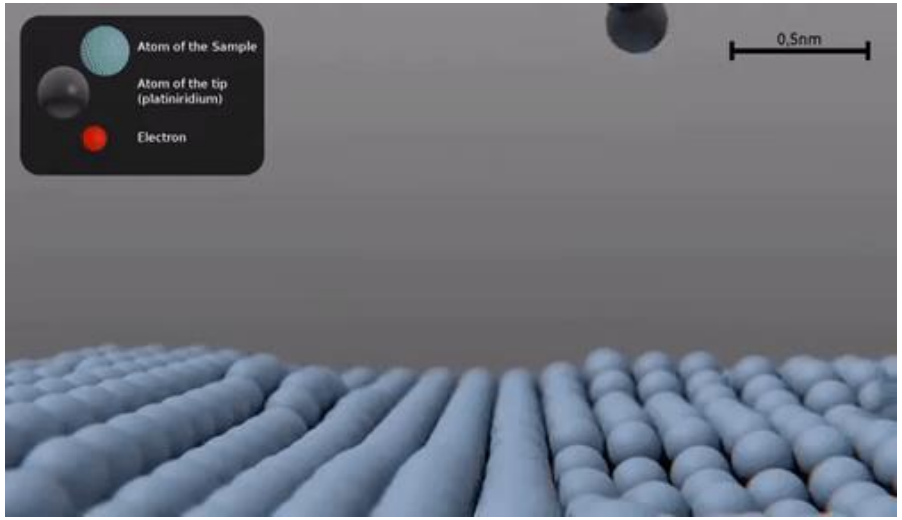
https://www.youtube.com/watch?v=DC0U5viudt0

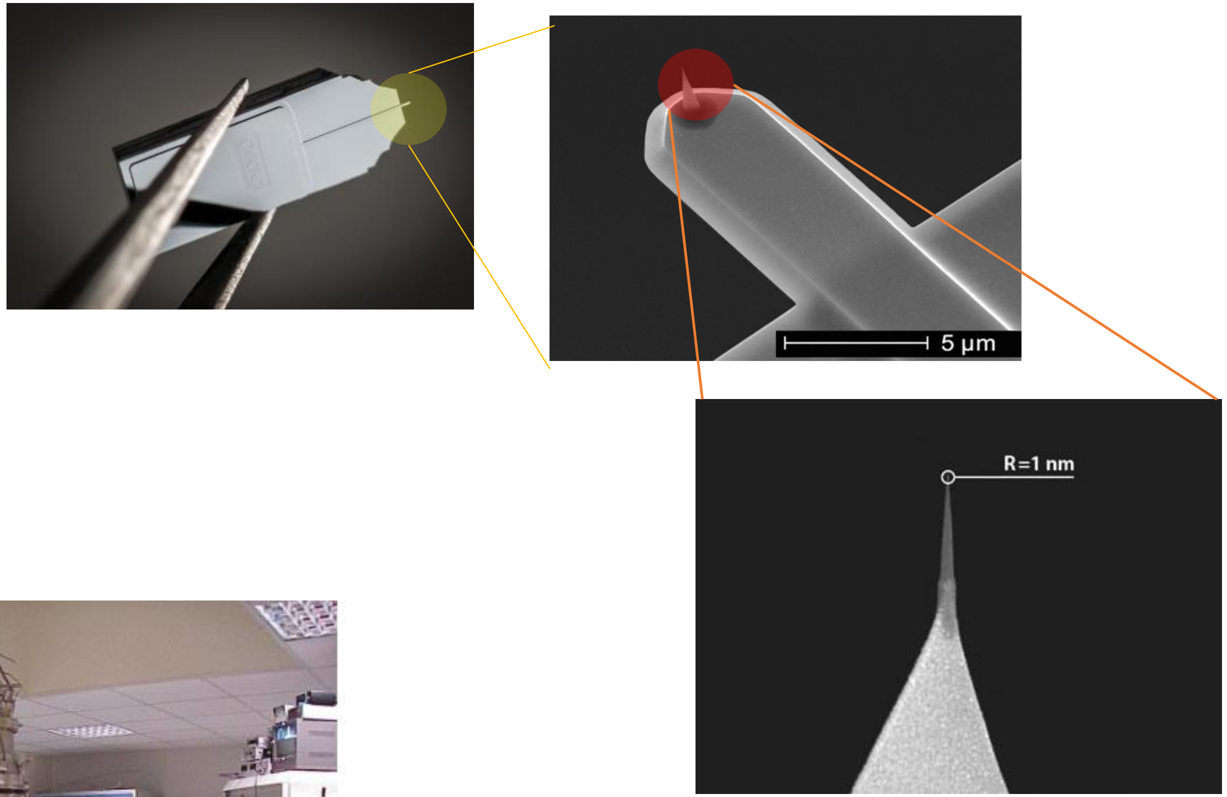
VI.2 Barrière de potentiel – effet tunnel

C – les applications de l'effet tunnel

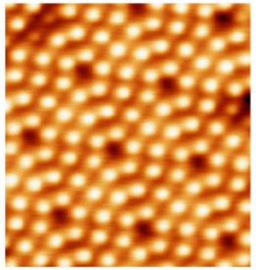
Microscope à effet tunnel



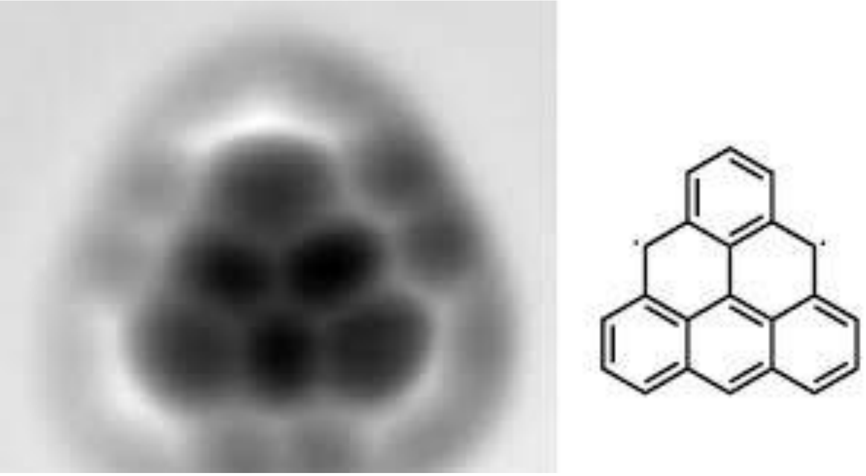


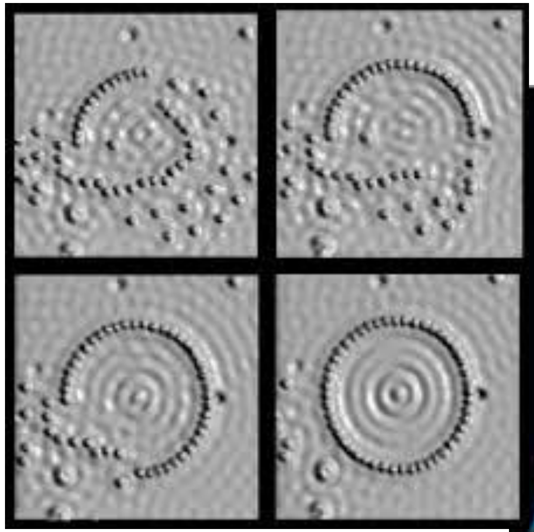


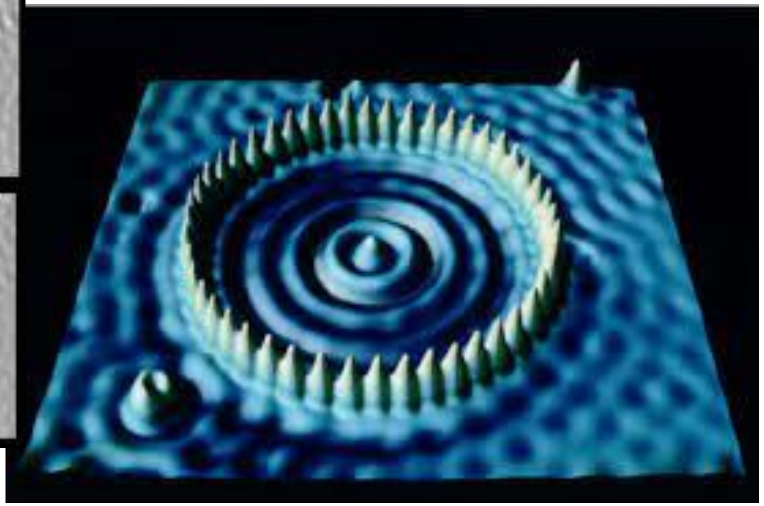
(ISEN)

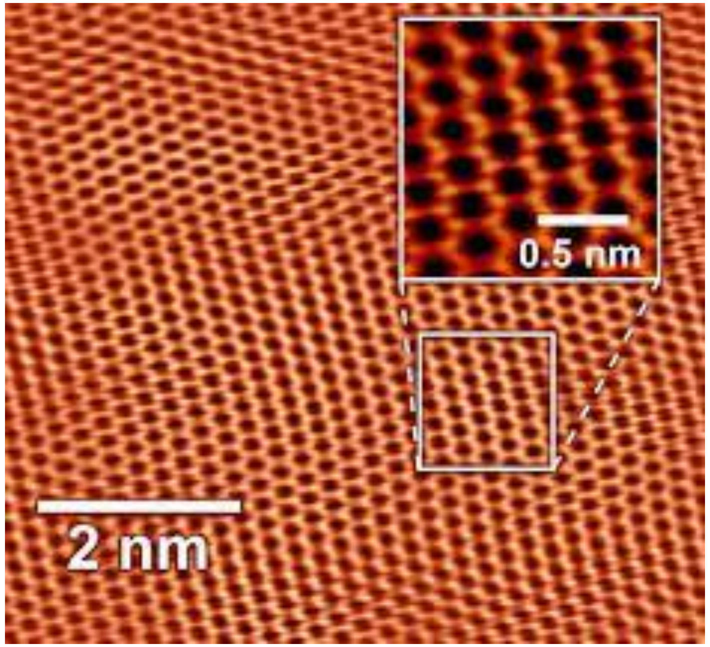


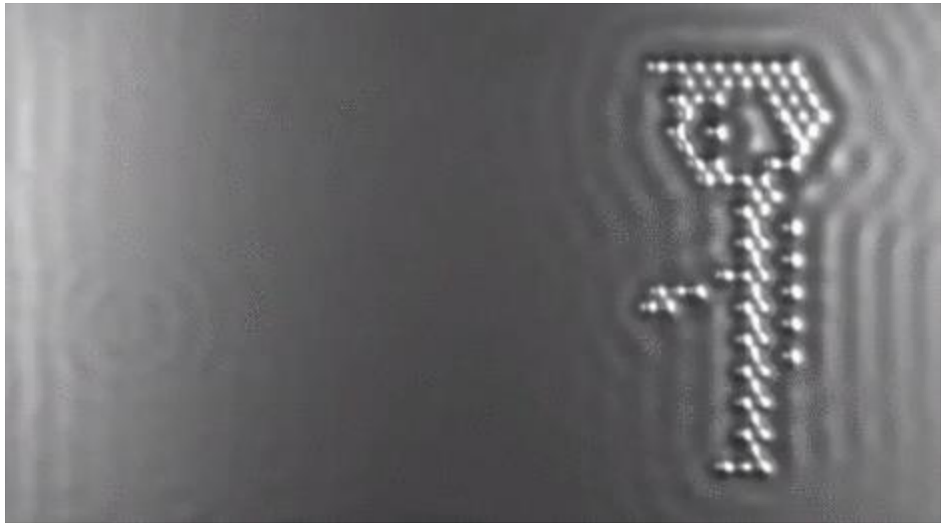
Surface de Si 111

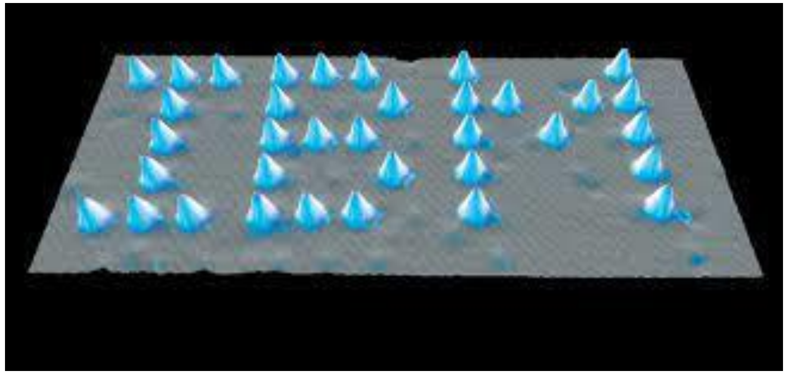







0.5 nm
2 nm

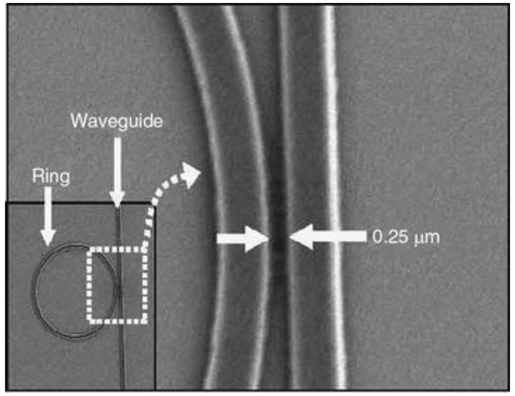


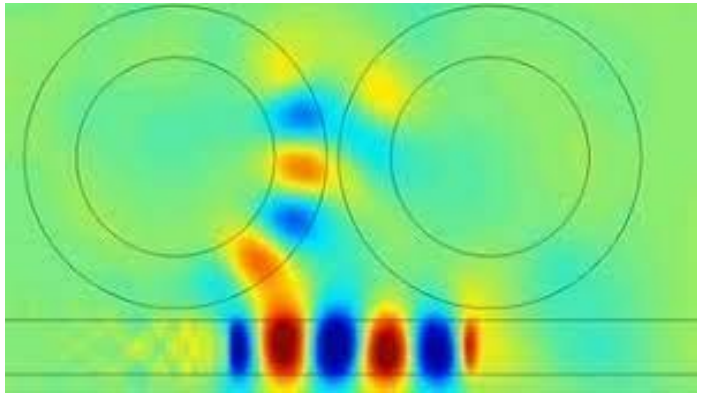


VI.2 Barrière de potentiel – effet tunnel

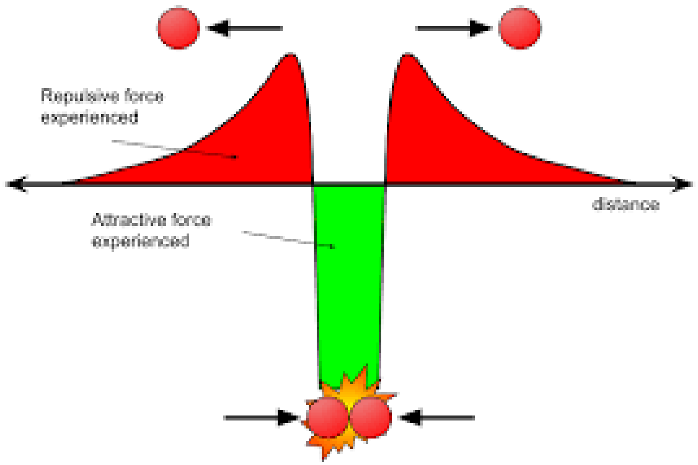
C – les applications de l'effet tunnel

Diodes, Mémoire MRAM…
Dispositifs photoniques





Fusion nucléaire, origine de la radioactivité…

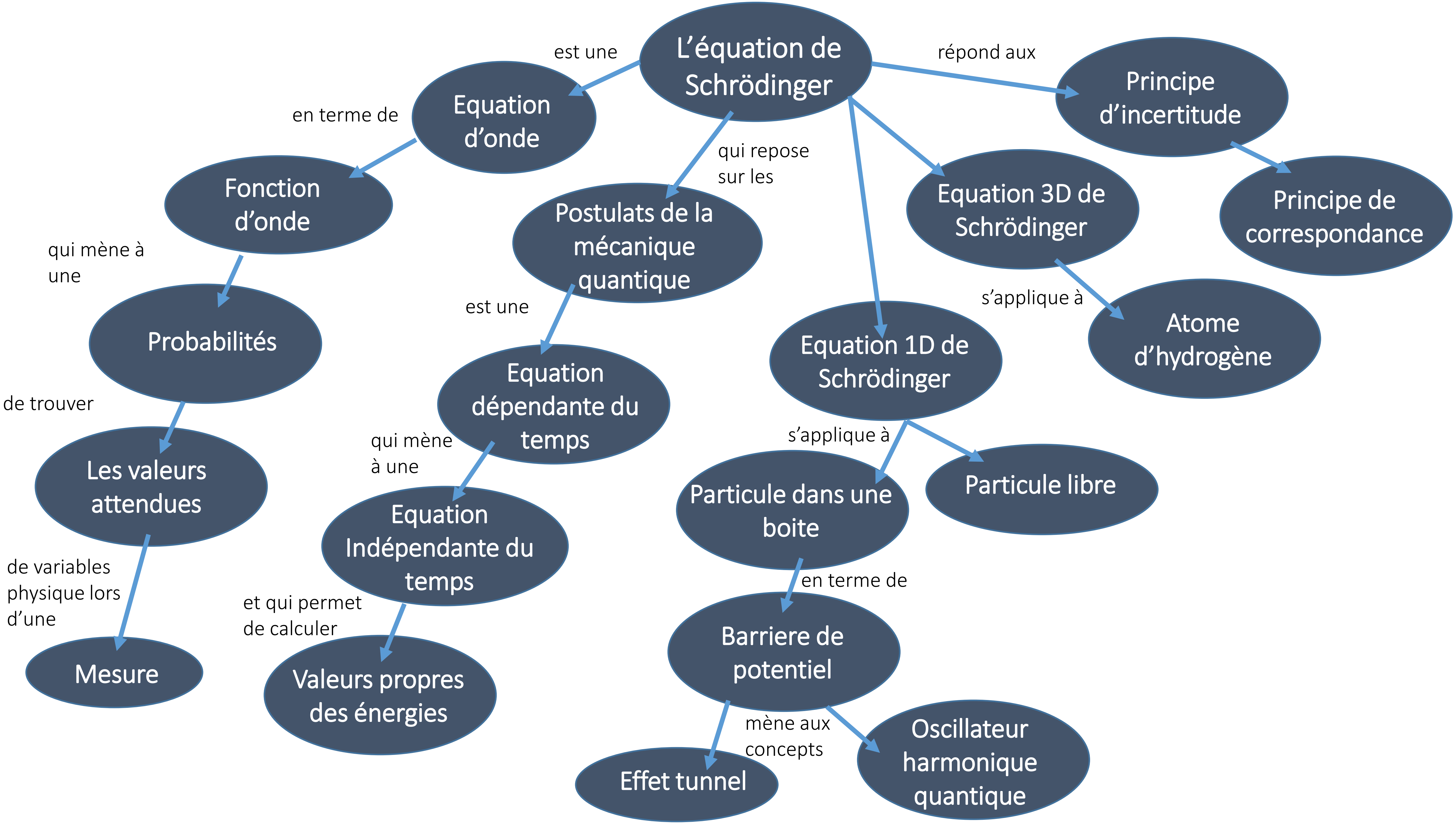


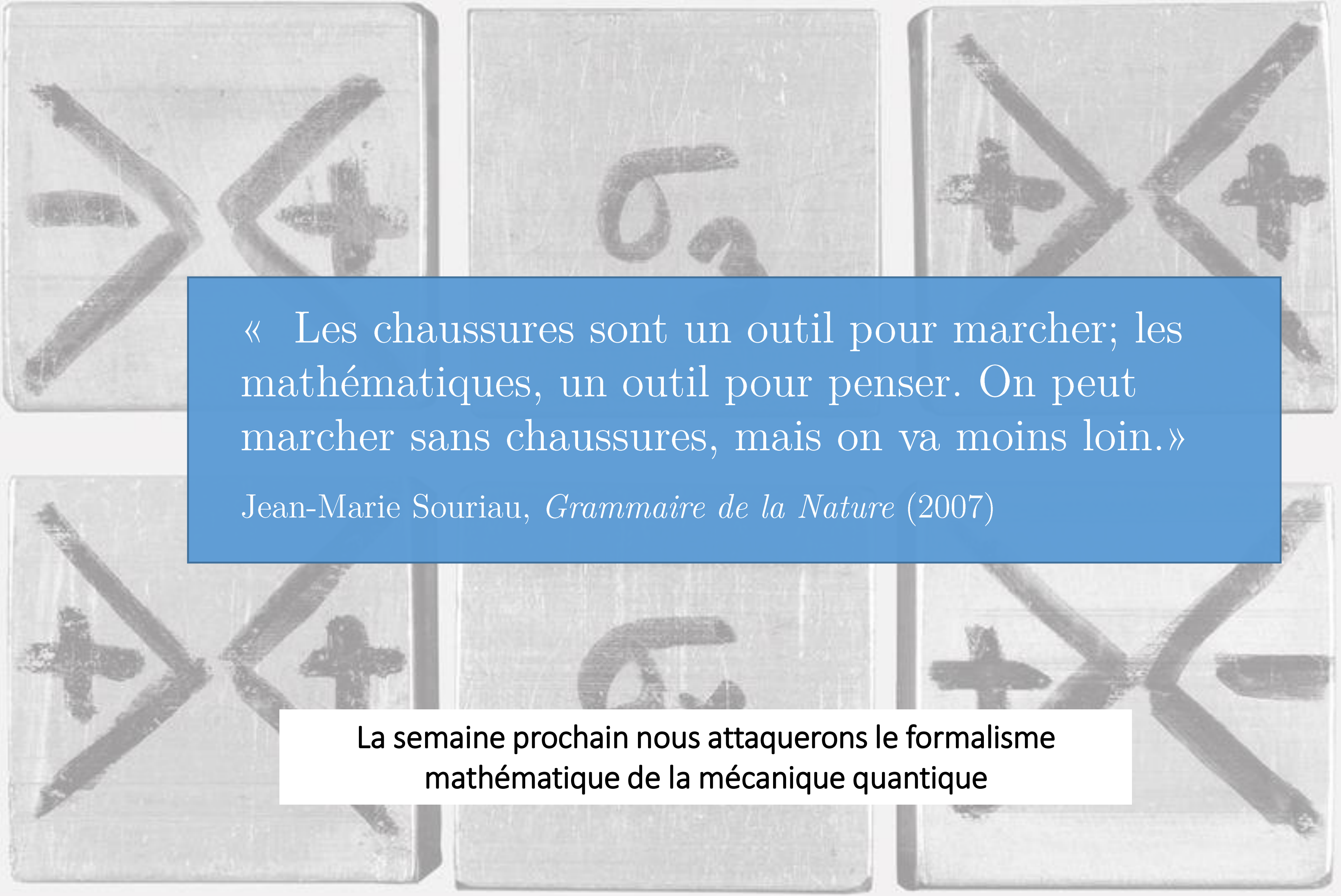

just. shower. thought
Just.Shower.Thought
@JustShwrThought
Thanks to Quantum Tunneling. There is (1/5.2^61) chance that when you slap a table, your hand will pass through it.
ifunny.co

Pour espérer traverser un mur de 10cm par effet tunnel, en essayant de se jeter dessus toute les secondes, une personne de 100kg devra attendre …

10^{39} ans!

soit 10^{29}= 100 000 000 000 000 000 000 000 000 000x l'âge de l’Univers


L'équation de Schrödinger
est une
Equation d'onde
en terme de
Fonction d'onde
qui mène à une
Probabilités
de trouver
Les valeurs attendues
de variables physique lors d'une
Mesure
qui repose sur les
Postulats de la mécanique quantique
est une
Equation dépendante du temps
qui mène à une
Equation Indépendante du temps
et qui permet de calculer
Valeurs propres des énergies
répond aux
Principe d'incertitude
Principe de correspondance
Equation 3D de Schrödinger
s'applique à
Atome d'hydrogène
Equation 1D de Schrödinger
s'applique à
Particule dans une boite
Particule libre
en terme de
Barriere de potentiel
mène aux concepts
Effet tunnel
Oscillateur harmonique quantique



« Les chaussures sont un outil pour marcher; les mathématiques, un outil pour penser. On peut marcher sans chaussures, mais on va moins loin.»

Jean-Marie Souriau, *Grammaire de la Nature* (2007)

La semaine prochain nous attaquerons le formalisme mathématique de la mécanique quantique

Comment participer ?

WEB

1 Connectez-vous sur www.wooclap.com/HGZHJY

2 Vous pouvez participer

SMS

1 Pas encore connecté ? Envoyez @HGZHJY au 06 44 60 96 62

2 Vous pouvez participer