Particule dans un potentiel scalaire et stationnaire

Introduction

une particule peut avoir une nature ondulatoire à chaque fois que la longeur d'onde associée à la particule $\lambda = \frac{h}{p}$ (Relation de De Broglie) devient de même ordre de grandeur que la longeur caractéristique du problème.

Le comportement d'une telle particule est régit par l'équation de schrödinger. On se propose d'étudier le comportement d'une particule (non relativiste) dans un potentiel qui varie sur des distances de l'ordre de λ

I- Fonction d'onde et équation de schrödinger.

1- Fonction d'onde d'une particule matérielle :

On caractérise l'état d'une particule matérielle à l'instant t par la donnée d'une "fonction d'onde" $\Psi(\vec{r}, t)$ qui contient toutes les informations sur la particule.

$\Psi(\vec{r}, t)$ est interprétée comme une amplitude de probabilité de présence de la particule au point $\vec{r}$ à l'instant t.

$|\Psi(\vec{r}, t)|^2$ est la densité de probabilité de présence de la particule au point $\vec{r}$ à l'instant t.

Comme la probabilité totale de trouver la particule n'importe où dans l'espace à l'instant t doit être égale à l'unité, on a

$$\boxed{\int_{espace} |\Psi(\vec{r}, t)|^2 \, d^3\vec{r} = 1}$$

c'est la condition de normalisation d'une fonction d'onde

2- Equation de schrödinger :

L'équation qui régit l'évolution de la fonction d'onde est l'équation de schrödinger elle s'écrit :

$$\boxed{\hbar = \frac{h}{2\pi}}$$

$$\boxed{\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r})\right]\Psi(\vec{r},t) = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}(\vec{r},t)}$$

$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r})$ opérateur spatial (opérateur hamiltonien)

potentiel scalaire et stationnaire

Δ : Laplacien

$\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$

$$H\,\Psi(\vec{r},t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t)$$

$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$ opérateur temporel

Pour justifier la bonne construction de l'équation de schrödinger on considère une particule libre en mouvement et n'est soumise à aucune force. Pour simplifier on suppose que l'état de la particule est décrit par une onde plane et monochromatique

$$\Psi(\vec{r},t) = \Psi_0\, e^{-i(\omega t - \vec{k}\cdot\vec{r})}$$

Les relations qui assure le lien entre les propriétés corpusculaires et les propriétés ondulatoires sont :

* la relation de Planck-Einstein $E = h\nu$

$$E = \frac{h}{2\pi}2\pi\nu$$

$$= \hbar\,\omega \;;\; \omega = 2\pi\nu$$

* La relation de De Broglie $\lambda = \frac{h}{p} \Rightarrow p = \frac{h}{\lambda}$

$$p = \frac{h}{2\pi}\cdot\frac{2\pi}{\lambda}$$

$$\vec{p} = \hbar\,\vec{k} \;;\; k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

$$\Psi(\vec{r},t) = \Psi_0 \, e^{-i(\omega t - \vec{k}.\vec{r})} = \Psi_0 e^{-i\left(\frac{E}{\hbar} t - \frac{\vec{P}}{\hbar}.\vec{r}\right)}$$

$$= \Psi_0 \, e^{-i(E.t - \vec{P}.\vec{r})/\hbar}$$

or l'equation de schrödinger est:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\vec{r},t) + V(\vec{r}) \Psi(\vec{r},t) = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}(\vec{r},t)$$

Calculons: $\frac{\partial \Psi}{\partial t}(\vec{r},t) = -i \frac{E}{\hbar} \Psi(\vec{r},t)$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}(\vec{r},t) = E \, \Psi(\vec{r},t)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \longleftrightarrow E$$

Calculons : $\frac{\partial}{\partial x} \Psi(\vec{r},t) = \frac{\partial}{\partial x} \Psi_0 \, e^{-i\left(\frac{E}{\hbar} t - \frac{P_x}{\hbar} x - \frac{P_y}{\hbar} y - \frac{P_z}{\hbar} z\right)}$

$\vec{r} = x\vec{e_x} + y\vec{e_y} + z\vec{e_z}$
$\vec{P} = P_x\vec{e_x} + P_y\vec{e_y} + P_z\vec{e_z}$

$$= \frac{i}{\hbar} P_x \, \Psi_x(\vec{r},t)$$

$$\Rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi(\vec{r},t) = P_x \, \Psi(\vec{r},t)$$

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \longleftrightarrow P_x$$

de même : $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} \Psi(\vec{r},t) = P_y \, \Psi(\vec{r},t)$

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} \longleftrightarrow P_y$$

aussi $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} \Psi(\vec{r},t) = P_z \, \Psi(\vec{r},t)$

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} \longleftrightarrow P_z$$

$$\vec{\nabla} = \frac{\partial}{\partial x}\vec{e}_x + \frac{\partial}{\partial y}\vec{e}_y + \frac{\partial}{\partial z}\vec{e}_z$$

$$\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\Psi(\vec{r},t) = \vec{P}_x + \vec{P}_y + \vec{P}_z = \vec{P}$$

$$\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} \longleftrightarrow \vec{P}$$

$$\Delta = \vec{\nabla}.\vec{\nabla} \Rightarrow \quad \Delta \longleftrightarrow \frac{i}{\hbar}\frac{i}{\hbar}P^2 = -\frac{P^2}{\hbar^2}$$

Retournons à l'equation de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(-\frac{P^2}{\hbar^2}\right)\Psi(\vec{r},t) + V(\vec{r})\,\Psi(\vec{r},t) = E\,\Psi(\vec{r},t)$$

$$\frac{P^2}{2m}\Psi(\vec{r},t) + V(\vec{r})\,\Psi(\vec{r},t) = E\,\Psi(\vec{r},t)$$

$$\boxed{\frac{P^2}{2m} + V(\vec{r}) = E}$$

L'equation de Schrödinger apparait comme une réformulation basée sur des opérateurs de l'equation de conservation d'energie.

II - Résolution de l'équation de Schrödinger

1 - Méthode de séparation des variables.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(\vec{r},t) + V(\vec{r})\,\Psi(\vec{r},t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t)$$

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

$$\Psi(\vec{r},t) = x(t)\,\varphi(\vec{r})$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} x(t)\,\Delta\varphi(\vec{r}) + V(\vec{r})\,x(t)\,\varphi(\vec{r}) = i\hbar\,\varphi(\vec{r})\,\frac{\partial x(t)}{\partial t}\right]\frac{1}{x(t)\,\varphi(\vec{r})}$$

$$\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\varphi(\vec{r})}\Delta\varphi(\vec{r}) + V(\vec{r})}_{\text{fonction de } \vec{r}} = \underbrace{i\hbar\,\frac{1}{x(t)}\,\frac{\partial x(t)}{\partial t}}_{\text{fonction de } t} = E$$

Cette égalité n'est possible que si les deux fonctions sont égalent à la même constante appelée paramètre de séparation des variables, ce paramètre noté E a la dimension d'une energie. E n'est en fait que l'energie totale de la particule

$$i\hbar\,\frac{1}{x(t)}\,\frac{\partial x(t)}{\partial t} = E$$

$$\frac{\partial x(t)}{\partial t} = \frac{-i}{\hbar} E\,x(t)$$

$$\frac{\partial x}{x} = -\frac{i}{\hbar} E\,\partial t$$

$$\ln x = \frac{-i}{\hbar} E t + C_1 \quad \text{constante}$$

$$x(t) = e^{C_1}\, e^{-\frac{i}{\hbar} E t}$$

notons $x(0) = e^{C_1}$

$$\Rightarrow \boxed{x(t) = x(0)\, e^{-\frac{i}{\hbar} E t}}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\varphi(\vec{r})}\Delta\varphi(\vec{r}) + V(\vec{r}) = E$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi(\vec{r}) + V(\vec{r})\,\varphi(\vec{r}) = E.\varphi(\vec{r})$$

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

↳ C'est l'equation de Schrödinger stationnaire

Si on incorpore la constante $x(0)$ la fonction d'onde $\Psi(\vec{r},t) = \varphi(\vec{r})\,e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$ est une solution de l'equation de Schrödinger dépendant du temps que lorsque $\varphi(\vec{r})$ est solution de l'équation de Schrödinger stationnaire (et l'energie se conserve au cours du temps)

$$|\Psi(\vec{r},t)|^2 = |\varphi(\vec{r})|^2$$

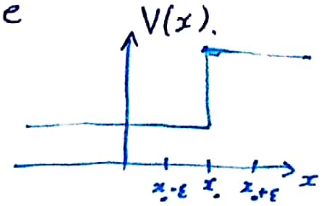
on dit que la particule est dans un état stationnaire !!

dans ce qui suit on va s'interesser qu'à des problemes à 1D suivant l'axe des x

2. Conditions aux limites

$$\frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} = - \frac{2m}{\hbar^2} \left[E - V(x) \right] \varphi(x)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} | \varphi(x) |^2 dx = 1 \Rightarrow \varphi(x) \text{ est bornée}$$



$$\int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} \frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} dx = - \frac{2m}{\hbar} \int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} (E - V(x)) \varphi(x) \, dx$$

*) $V(x)$ présente un saut fini en x_0.

$V(x)$ borné
$\varphi(x)$ bornée

$$\left.\frac{d\varphi}{dx}\right)_{x_0+\varepsilon} - \left.\frac{d\varphi}{dx}\right)_{x_0-\varepsilon} = - \frac{2m}{\hbar} \int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} (E - V(x) \varphi(x) \, dx$$

$$\ldots \leq M \int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} dx \xrightarrow[\varepsilon \to 0]{} 0$$

$$\left.\frac{d\varphi}{dx}\right)_{x_0+\varepsilon} = \left.\frac{d\varphi}{dx}\right)_{x_0-\varepsilon}$$

la dérivée première de la fonction d'onde est continue

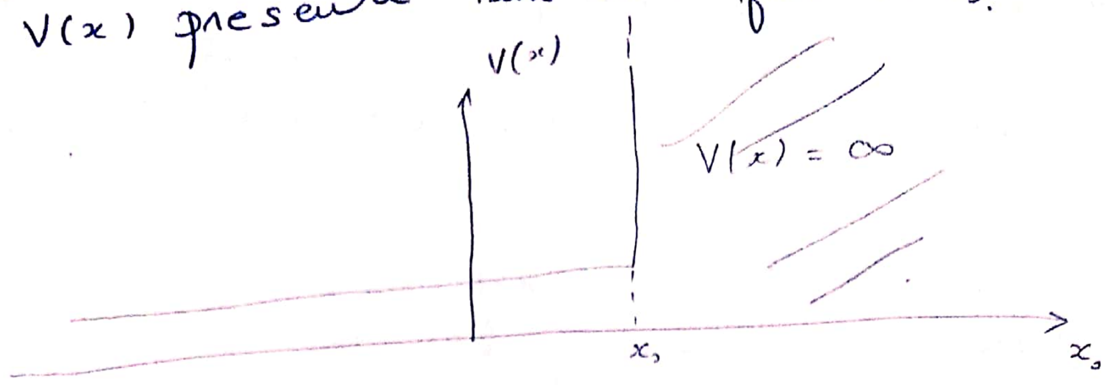
$\Rightarrow$ fonction d'onde est continue

$\longrightarrow$ Lorsque le saut du potentiel en x_0 est fini :

$\frac{d\varphi(x)}{dx}$ est continue en x_0

$\varphi(x)$ est continue en x_0

*) $V(x)$ présente un saut fini en x_0.



$$\frac{d\varphi}{dx}\Big|_{x_0+\varepsilon} - \frac{d\varphi}{dx}\Big|_{x_0-\varepsilon} = -\frac{2m}{\hbar^2}\int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} (E - V(x))\,\varphi(x)\,dx$$

$$\frac{d\varphi}{dx}\Big|_{x_0+\varepsilon} - \frac{d\varphi}{dx}\Big|_{x_0-\varepsilon} = \underbrace{-\frac{2m}{\hbar}\int_{x_0-\varepsilon}^{x_0} (E - V(x))\,\varphi(x)\,dx}_{\substack{\varphi(x) \text{ bornée} \\ V(x) \text{ bornée}}} - \underbrace{\frac{2m}{\hbar}\int_{x_0}^{x_0+\varepsilon} (E - \underset{\infty}{V(x)})\,\underset{0}{\varphi(x)}\,dx}_{\text{valeur finie}}$$

$\varepsilon \to 0$

$\lim_{\varepsilon \to 0} \text{intégral} \to 0$

Pour que la particule puisse franchir le saut de potentiel, il faut que son énergie soit ∞ impossible

$\Rightarrow$ la particule ne peut pas exister dans la région où le potentiel est infini.

$\Rightarrow \varphi(x) = 0$ au delà de x_0

les limites $\underset{\varepsilon \to 0}{\varphi(x) \longrightarrow 0}$ v la divergence de l'intégrale évitent

mais il n'y a aucune raison pour que l'intégrale soit nulle

$\frac{d\varphi}{dx}(x)$ est discontinue en x_0.

la discontinuité finie de $\frac{d\varphi}{dx}$ assure la continuité de $\varphi(x)$

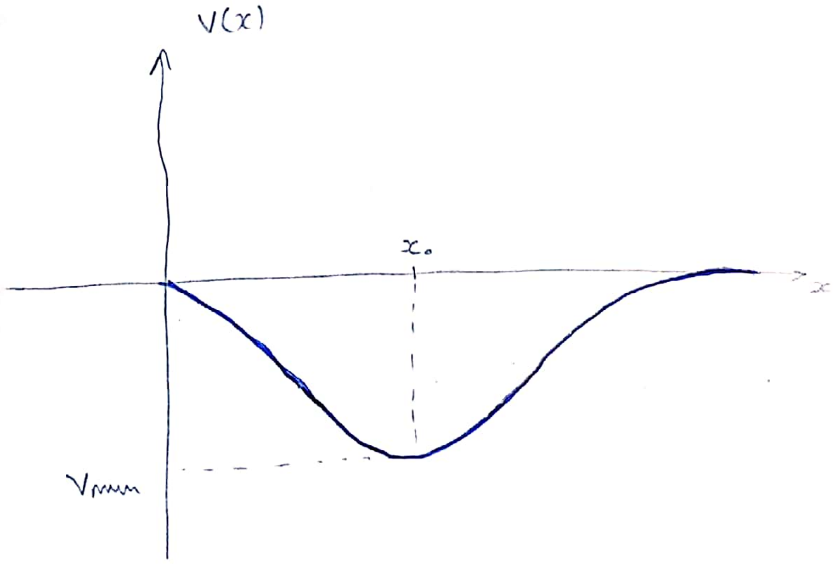
$$\underbrace{\int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} \frac{d\varphi}{dx}\,dx}_{\varepsilon \to 0 \atop \varphi \to 0} = \varphi(x_0+\varepsilon) - \varphi(x_0-\varepsilon)$$

$\Rightarrow$ Lorsque $\varepsilon \to 0$, $\varphi(x_0+\varepsilon) = \varphi(x_0-\varepsilon)$

$\rightarrow$ $\varphi(x)$ est continue

Lorsque le saut du potentiel en x_0 est infini, uniquement la fonction d'onde $\varphi(x)$ est continue en x_0

3 - État lié et état non lié :



particule classique :

$E = \frac{1}{2} m V^2 + V(x)$
$\frac{1}{2} m V^2 = E - V(x)$
$= V_{min} - V(x)$

* $E = V_{min}$: particule au repos au fond du puit
* $V_{min} < E < 0$ particule confiné dans le puits
  ↳ état lié.
* $E > 0$: tout l'espace est accessible par la particule.
  ↳ état non lié

particule quantique :

* $E > V_{min}$: l'état de repos absolue n'existe pas pour une particule quantique

* $V_{min} < E < 0$ état lié $\varphi(\pm\infty) \to 0$

↳ quantification de l'énergie.

*| $E > 0$ état non lié spectre continue.

Lorsque la particule reste confinée dans une région de l'espace la probabilité de la trouver à l'infinie est nulle. et les valeur de son énergie sont quantifiés ; le spectre d'énergie de la particule est discontinue, la particule se trouve dans un état lié.

Si la particule n'est pas confinée dans une région, le spectre d'énergie de la particule est continue et la particule se trouve dans un état non lié.

III - Comportement d'une particule quantique.

et se dirige vers les x positives (région 2). Deux cas peuvent se présenter suivant que E est supérieur ou inférieur à la hauteur de la marche V_0

$\circledast$ $E > V_0$

Avant d'étudier le comportement des particules quantiques dans un tel potentiel, rappelons celui des particules classiques

particule classique

$E = E_c + V(x)$

$E_c = E - V(x) \geq 0$

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

région I : $\frac{1}{2} m v^2 = E \rightarrow v = \sqrt{\frac{2E}{m}}$

région II : $\frac{1}{2} m v^2 - V_0 \rightarrow v = \sqrt{\frac{2(E-V_0)}{m}}$

la particule classique est en mouvement dans la région I par la vitesse $v = \sqrt{\frac{2E}{m}}$.

En arrivant en $x = 0$, la particule classique franchit avec certitude, la discontinuité du potentiel. et continue son mouvement dans la région II. avec la vitesse $\sqrt{\frac{2(E-V_0)}{m}}$ (la particule est ralenti)

particule quantique.

L'equation de schrödinger stationnaire s'écrit

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

$$\frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - V(x)\right) \varphi(x) = 0$$

$\longrightarrow$ région I : $V(x) = 0$

$$\frac{d^2 \varphi_1(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \cdot E\, \varphi_1(x) = 0 \quad ; E > 0$$

on pose $k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$

$$\varphi_1(x) = \underbrace{A_1 e^{ik_1 x}}_{\text{onde progressive vers } x\nearrow \text{ incidente}} + \underbrace{B_1 e^{-ik_1 x}}_{\text{onde progressive vers les } x\searrow \text{ réfléchie}}$$

$$\frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} + \alpha\, \varphi(x) = 0$$

$*$ $\alpha > 0 \Rightarrow k^2 = \alpha$

$r^2 + k^2 = 0$

$\Rightarrow r^2 = -k^2 = (ik)^2$

$\Rightarrow \varphi = A e^{+ikx} + B e^{-ikx}$

$*$ $\alpha < 0 \Rightarrow \rho^2 = -\alpha$

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

$x^2 = \rho^2 = -$

$\Rightarrow \varphi(x) = A e^{\rho x} + B e^{-\rho x}$

→ région II : $V(x) = V_0$

$$\frac{d^2 \varphi_2(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)\,\varphi_2(x) = 0 \quad ; \quad E - V_0 > 0$$

$$k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)$$

$$\varphi_2(x) = \underbrace{A_2\, e^{ik_2 x}}_{\text{onde progressive vers } x \nearrow \text{ transmise.}} + \underbrace{B_2\, e^{-ik_2 x}}_{\text{onde progressive vers les } x \searrow \text{ onde venant de } +\infty}$$

Par hypothèse la particule arrive depuis $x = -\infty$ par conséquent $B_2 = 0$.

<u>Solution générale</u>

$$\begin{cases} \varphi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x} \\ \varphi_2(x) = A_2 e^{ik_2 x} \end{cases}$$

Condition de continuité en $x = 0$

Condition de la fonction d'onde en $x = 0$

(*) continuité

$$\varphi_1(0) = \varphi_2(0)$$

$$\boxed{A_1 + B_1 = A_2}$$

(*) continuité de la dérivé première de la fonction d'onde en $x=0$

$$\left.\frac{d\varphi_1(x)}{dx}\right|_{x=0} = \left.\frac{d\varphi_2(x)}{dx}\right|_{x=0}$$

$$\boxed{ik_1(A_1 - B_1) = ik_2 A_2}$$

$R = \left|\frac{B_1}{A_1}\right|^2$ coefficient de reflexion.

(probabilité pour que la particule incidente soit réfléchie)

$T = \frac{v_{g_{II}}}{v_{g_I}}\left|\frac{A_2}{A_1}\right|^2$ coefficient de transmission.

(probabilité pour que la particule soit transmise)

$$A_1 + B_1 = A_2 \quad (1)$$
$$\frac{k_1}{k_2}(A_1 - B_1) = A_2 \quad (2)$$

$(1) - (2)$:

$$A_1\left(1 - \frac{k_1}{k_2}\right) + B_1\left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right) = 0$$

$$\Rightarrow \frac{B_1}{A_1} = \frac{k_2 - k_1}{k_2 + k_1}$$

$$A_1 + B_1 = A_2 \quad (1)$$
$$A_1 - B_1 = \frac{k_2}{k_1} A_2 \quad (2)'$$

$\Rightarrow (1') + (2')$: $2A_1 = A_2\left(1 + \frac{k_2}{k_1}\right)$

$$\frac{A_2}{A_1} = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}$$

$$v_{g_1} = \frac{d\omega}{dk_1} = \frac{1}{\hbar}\frac{d\hbar(\omega)}{dk_1}$$

$$E = \hbar\omega \Rightarrow v_{g_1} = \frac{1}{\hbar}\frac{dE}{dk_1}$$

$$k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E \Rightarrow 2k_1\, dk_1 = \frac{2m}{\hbar^2} dE$$

$$\Rightarrow \frac{dE}{dk_1} = \frac{\hbar^2}{m} k_1$$

$$\Rightarrow v_{g_1} = \frac{\hbar k_1}{m}$$

$$v_{g_2} = \frac{d\omega}{dk_2} = \frac{1}{\hbar}\frac{dE}{dk_2}$$

$$k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)$$

$$2k_2\, dk_2 = \frac{2m}{\hbar^2} dE \longrightarrow v_{g_2} = \frac{\hbar k_2}{m}$$

AN

$$R = \left|\frac{B_1}{A_1}\right|^2 = \left(\frac{k_2 - k_1}{k_2 + k_1}\right)^2$$

$$T = \frac{k_2}{k_1}\left(\frac{2k_1}{k_1 + k_2}\right)^2 = \frac{4k_1k_2}{k_1 + k_2}$$

$$R + T = 1$$

Pour $E > V_0$ Contrairement aux particules classiques, les particules quantiques ont une probabilité non nulle de revenir en arrière.

$\circledast$ $E < V_0$

particule classique:

$E_c = E - V(x) \geq 0$.

régime II) $E_c < 0$ impossible.

la particule classique est en mouvement à la vitesse $\sqrt{\frac{2E}{m}}$ dans la région I.

En arrivant à $x = 0$ elle rebondit sur la marche de potentiel et repart avec la même vitesse.

particule quantique:

L'equation de schrödinger stationnaire s'écrit:

$$\frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - V(x)\right)\varphi(x) = 0$$

*) région I) : $V(x) = 0$ $\qquad E > 0$

$$\rightarrow \frac{d^2\varphi_1(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E\, \varphi_1(x) = 0.$$

Soit $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$

$$\varphi_1(x) = \underbrace{A_1 e^{ikx}}_{\text{onde incidente}} + \underbrace{B_1 e^{-ikx}}_{\text{onde réfléchie}}$$

*) région II) : $V(x) = V_0$

$$\rightarrow \frac{d^2\varphi_2(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)\,\varphi_2(x) = 0 \quad ; \; E - V_0 < 0$$

Soit $\rho^2 = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)$

$$\varphi_2(x) = \underbrace{A_2 e^{\rho x}}_{x \to +\infty} + B_2 e^{\rho x}$$

Les solutions acceptables physiquement s'écrit

$$\varphi_1(x) = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}$$

$$\varphi_2(x) = B_2 e^{\rho x}$$

* Condition de Continuité de la fonction d'onde en $x=0$

$$\varphi_1(x=0) = \varphi_2(x=0)$$

$$\boxed{A_1 + B_1 = B_2}$$

* Condition de Continuité de la dérivé première de la fonction d'onde en $x=0$.

$$\left.\frac{d\varphi_1}{dx}\right|_{x=0} = \left.\frac{d\varphi_2}{dx}\right|_{x=0}$$

$$\boxed{ik(A_1 - B_1) = -\rho B_2}$$

coefficient de réflexion:

$$R = \left|\frac{B_1}{A_1}\right|^2$$

coefficient de Transmission:

$$T = \frac{v_{g_2}}{v_{g_1}}\left|\frac{B_2}{A_1}\right|^2$$

$$\left\{\begin{array}{ll} A_1 + B_1 = B_2 & (1) \\ -i\frac{k}{\rho}(A_1 - B_1) = B_2 & (2) \end{array}\right\} \quad (1)-(2) \quad A_1\left(1 + \frac{ik}{\rho}\right) + B_1\left(1 - \frac{ik}{\rho}\right) = 0$$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{B_1}{A_1} = -\frac{\rho + ik}{\rho - ik}}$$

$$\left\{\begin{array}{ll} A_1 + B_1 = B_2 & (1)' \\ A_1 - B_1 = -\frac{\rho}{ik} B_2 & (2)' \end{array}\right\} \quad (1)'+(2)' \quad 2A_1 = \left(1 - \frac{\rho}{ik}\right) B_2$$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{B_2}{A_1} = \frac{2ik}{ik - \rho}}$$

$$R = \left|\frac{B_1}{A_1}\right|^2 = \left|-\frac{\rho + ik}{\rho - ik}\right|^2 = \frac{\rho^2 + k^2}{\rho^2 + k^2} = 1$$

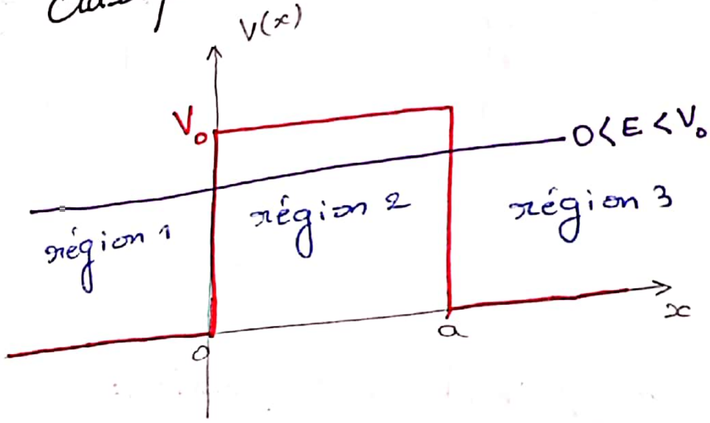
$R + T = 1 \Rightarrow T = 0$ (on a pas une onde progressive)

en effet $v_{g_2} = \cancel{\frac{1}{\hbar}\frac{dE}{dk}} = 0$ (on a pas une onde progressive) dans la région II

→ $T = 0$ avec $\frac{B_2}{A_1} \neq 0$, en effet v_g est nulle dans cette région avec une mais l'onde (la particule) pénètre dans la région de l'ordre de $\frac{1}{\rho}$ ce qui traduit profondeur de pénétration non nulle. Il utile de rappeler une probabilité de présence non nulle que la région II est interdite classiquement.

2- Barrière de potentiel :

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \quad (1) \\ V_0 & 0 \leq x \leq a \quad (2) \\ 0 & x > a \quad (3) \end{cases}$$



a : largeur de la barrière
V_0 : hauteur de la barrière

$0 < E < V_0$

particule classique :

La particule classique est en mouvement dans la région 1 à la vitesse $\sqrt{\frac{2E}{m}}$. en arrivant en $x = 0$ la particule classique rebondit sur la barrière (infranchissable classiquement) et repart en arrière avec la même vitesse.

particule quantique :

L'equation de schrodinger stationnaire s'écrit :

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

*) région 1 et 3 : $V(x) = 0$ $\qquad E > 0$

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

Soit $k^2 = \frac{2m}{\hbar} E$

$$\varphi_1(x) = A_1\, e^{ikx} + B_1\, e^{-ikx}$$
$$\varphi_3(x) = A_3\, e^{ikx} + B_3\, e^{-ikx}$$

*) région 2 : $V(x) = V_0$ $\qquad E - V_0 < 0$

$$\frac{d^2}{dx^2}\varphi_2(x) + \frac{2m}{\hbar}(E - V_0)\,\varphi_2(x) = 0$$

Soit $\rho^2 = -\frac{2m}{\hbar}(E - V_0)$

$$\varphi_2(x) = A_2\, e^{\rho x} + B_2\, e^{-\rho x}$$

d'où
$$\begin{cases} \varphi_1(x) = \underbrace{A_1\, e^{ikx}}_{\text{l'onde incidente}} + \underbrace{B_1\, e^{-ikx}}_{\text{l'onde réfléchit}} \\ \varphi_2(x) = A_2\, e^{\rho x} + B_2\, e^{-\rho x} \\ \varphi_3(x) = \underbrace{A_3\, e^{ikx}}_{\text{l'onde transmise}} + \underbrace{B_3\, e^{-ikx}}_{\text{l'onde venant de } x=+\infty} \end{cases}$$

Par hypothèse la particule arrive depuis $x = -\infty$, de plus il n'y a aucune discontinuité du potentiel au delà de $x = a$

$\Rightarrow B_3 = 0$

Les solutions acceptables physiquement dans les différentes régions s'écrivent :
$$\begin{cases} \varphi_1(x) = A_1\, e^{ikx} + B_1\, e^{-ikx} \\ \varphi_2(x) = A_2\, e^{\rho x} + B_2\, e^{-\rho x} \\ \varphi_3(x) = A_3\, e^{ikx} \end{cases}$$

Continuité de la fonction d'onde φ en $x = 0$

$$\varphi_1(x=0) = \varphi_2(x=0)$$

$$\boxed{A_1 + B_1 = A_2 + B_2} \quad (1)$$

Continuité de la dérivée de la fonction d'onde $\frac{d\varphi}{dx}$ en $x = 0$

$$\left.\frac{d\varphi_1}{dx}\right)_{x=0} = \left.\frac{d\varphi_2}{dx}\right)_{x=0}$$

$$\boxed{ik(A_1 - B_1) = \rho(A_2 - B_2)} \quad (2)$$

Continuité de la fonction d'onde φ en $x = a$

$$\varphi_2(x=a) = \varphi_3(x=a)$$

$$\boxed{A_2 e^{\rho a} + B_2 e^{-\rho a} = A_3 e^{ika}} \quad (3)$$

Continuité de la dérivée de la fonction d'onde $\frac{d\varphi}{dx}$ en $x = a$

$$\left.\frac{d\varphi_2}{dx}\right)_{x=a} = \left.\frac{d\varphi_3}{dx}\right)_{x=a}$$

$$\boxed{\rho\left[A_2 e^{\rho a} - B_2 e^{-\rho a}\right] = ik A_3 e^{ika}} \quad (4)$$

Coefficient de transmission :

$$T = \frac{v_{g_3}}{v_{g_1}} \left|\frac{A_3}{A_1}\right|^2$$

or $v_{g_3} = v_{g_1} = \frac{1}{\hbar}\frac{dE}{dk} = \frac{\hbar k}{m}$; $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$

$$\Rightarrow T = \left|\frac{A_3}{A_1}\right|^2$$

$(1)'$: $A_1 + B_1 = A_2 + B_2$

$+$

$(2)'$: $A_1 - B_1 = \frac{\rho}{ik}(A_2 - B_2)$

$$= \quad 2A_1 = A_2\left(1 + \frac{\rho}{ik}\right) + B_2\left(1 - \frac{\rho}{ik}\right)$$

$$+\ (3)':\quad A_2 e^{\rho a} + B_2 e^{-\rho a} = A_3 e^{ika}$$

$$(4)':\quad A_2 e^{\rho a} - B_2 e^{-\rho a} = \frac{ik}{\rho} A_3 e^{ika}$$

$$= \quad 2 A_2 e^{\rho a} = \left(1 + \frac{ik}{\rho}\right) A_3 e^{ika}$$

$$\boxed{A_2 = \frac{1}{2} A_3 e^{ika} e^{-\rho a} \left(1 + \frac{ik}{\rho}\right)}$$

$$(3)' - (4)':\quad 2 B_2 e^{-\rho a} = A_3 e^{ika} \left(1 - \frac{ik}{\rho}\right)$$

$$\boxed{B_2 = \frac{1}{2} A_3 e^{ika} e^{\rho a} \left(1 - \frac{ik}{\rho}\right)}$$

$$2 A_1 = A_2 \left(1 + \frac{\rho}{ik}\right) + B_2 \left(1 - \frac{\rho}{ik}\right)$$

$$= \frac{1}{2} A_3 e^{ika} e^{-\rho a} \left(1 + \frac{ik}{\rho}\right)\left(1 + \frac{\rho}{ik}\right) + \frac{1}{2} A_3 e^{ika} e^{\rho a} \left(1 - \frac{ik}{\rho}\right)\left(1 - \frac{\rho}{ik}\right)$$

$$4 A_1 = \frac{A_3 e^{ika}}{ik\rho} \left[(\rho + ik)(ik + \rho) e^{-\rho a} \mp (\rho - ik)(-ik + \rho) e^{\rho a} \right]$$

$$(\rho + ik)^2 = \rho^2 - k^2 + 2ik\rho$$

$$(\rho - ik)^2 = \rho^2 - k^2 - 2ik\rho$$

$$4 A_1 = \frac{A_3 e^{ika}}{ik\rho} \left[(\rho^2 - k^2)(e^{-\rho a} - e^{\rho a}) + 2ik\rho (e^{-\rho a} + e^{\rho a}) \right]$$

$$4 A_1 = \frac{A_3 e^{ika}}{ik\rho} \left[-2(\rho^2 - k^2)\, sh(\rho a) + 4ik\rho\, ch(\rho a) \right]$$

$$\frac{A_3}{A_1} = \frac{ik\rho\, e^{-ika}}{(k^2 - \rho^2)\, sh(\rho a) + i\, 2k\rho\, ch(\rho a)}$$

$$\boxed{T = \left|\frac{A_3}{A_1}\right|^2 = \frac{4k\rho}{(k^2 - \rho^2)^2 sh^2(\rho a) + 4k^2\rho^2 ch^2(\rho a)}}$$

$$\boxed{\begin{array}{l} ch^2(\rho a) - sh^2(\rho a) = 1 \\ \to ch^2(\rho a) = 1 + sh^2(\rho a) \end{array}}$$

$$(k^2 - \rho^2)^2 sh^2(\rho a) + 4k^2\rho^2 + 4k^2\rho^2 sh^2(\rho a) =$$

$$\left[(k^2-\rho^2)^2 + 4k^2\rho^2\right] sh^2(\rho a) + 4k^2\rho^2 =$$

$$(k^2+\rho^2)^2 sh^2(\rho a) + 4k^2\rho^2$$

d'où $$\boxed{T = \frac{4k^2\rho^2}{(k^2+\rho^2)^2 sh^2(\rho a) + 4k^2\rho^2}}$$

Contrairement à une particule classique, la particule quantique a une probabilité non nulle de franchir la barrière. c'est "l'effet tunnel"