Mécanique Quantique I, Corrigé série complémentaire

Assistants : joseph.saliba@epfl.ch & pierre.lugan@epfl.ch

Exercice 1 : Barrière de potentiel, effet tunnel et interférences

1. Cas $0 < E < V_0$. Cette question est traitée dans les notes de cours. Nous allons ici à l'essentiel.
   (a) Dans chaque région, ψ doit obéir à l'équation différentielle homogène du second ordre

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \alpha\psi = 0, \tag{1}$$

avec $\alpha_{1,3} = 2mE/\hbar^2 > 0$ dans les régions I et III, et $\alpha_2 = 2m(E - V_0)/\hbar^2 < 0$ dans la région II. On en déduit la forme générale

$$\psi(x) = \begin{cases} A_1 e^{ipx/\hbar} + B_1 e^{-ipx/\hbar} & x < 0 \\ A_2 e^{-\gamma x} + B_2 e^{\gamma x} & 0 \leq x \leq L \\ A_3 e^{ipx/\hbar} + B_3 e^{-ipx/\hbar} & x > L \end{cases}, \tag{2}$$

avec

$$p = \hbar\sqrt{\alpha_{1,3}} = \sqrt{2mE} \tag{3}$$

$$\gamma = \sqrt{-\alpha_2} = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}. \tag{4}$$

   (b) La solution $\psi(x)$ doit être continue en $x = 0$ et $x = L$, au même titre que sa dérivée

$$\psi'(x) = \begin{cases} \frac{ip}{\hbar} A_1 e^{ipx/\hbar} - \frac{ip}{\hbar} B_1 e^{-ipx/\hbar} & x < 0 \\ -\gamma A_2 e^{-\gamma x} + \gamma B_2 e^{\gamma x} & 0 \leq x \leq L \\ \frac{ip}{\hbar} A_3 e^{ipx/\hbar} - \frac{ip}{\hbar} B_3 e^{-ipx/\hbar} & x > L \end{cases}. \tag{5}$$

Ces conditions de raccordement se traduisent par les quatre équations

$$A_1 + B_1 = A_2 + B_2 \tag{6}$$

$$\frac{ip}{\hbar} A_1 - \frac{ip}{\hbar} B_1 = -\gamma A_2 + \gamma B_2 \tag{7}$$

$$e^{-\gamma L} A_2 + e^{\gamma L} B_2 = e^{ipL/\hbar} A_3 + e^{-ipL/\hbar} B_3 \tag{8}$$

$$-\gamma e^{-\gamma L} A_2 + \gamma e^{\gamma L} B_2 = \frac{ip}{\hbar} e^{ipL/\hbar} A_3 - \frac{ip}{\hbar} e^{-ipL/\hbar} B_3 \tag{9}$$

En ne cherchant que les solutions incidentes par la gauche ($B_3 = 0$), on obtient ainsi le système

$$M \begin{pmatrix} B_1 \\ A_2 \\ B_2 \\ A_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -A_1 \\ -ipA_1/\hbar \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \tag{10}$$

avec

$$M = \begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 & 0 \\ -\frac{ip}{\hbar} & \gamma & -\gamma & 0 \\ 0 & -e^{-\gamma L} & -e^{\gamma L} & e^{ipL/\hbar} \\ 0 & \gamma e^{-\gamma L} & -\gamma e^{\gamma L} & \frac{ip}{\hbar} e^{ipL/\hbar} \end{pmatrix}. \tag{11}$$

Pour résoudre ce système, il convient d'abord de calculer le déterminant de M, en développant par exemple selon la première colonne :

$$\begin{aligned}
\det(M) &= \begin{vmatrix} \gamma & -\gamma & 0 \\ -e^{-\gamma L} & -e^{\gamma L} & e^{ipL/\hbar} \\ \gamma e^{-\gamma L} & -\gamma e^{\gamma L} & \frac{ipL}{\hbar} e^{ipL/\hbar} \end{vmatrix} + \frac{ip}{\hbar} \begin{vmatrix} -1 & -1 & 0 \\ -e^{-\gamma L} & -e^{\gamma L} & e^{ipL/\hbar} \\ \gamma e^{-\gamma L} & -\gamma e^{\gamma L} & \frac{ipL}{\hbar} e^{ipL/\hbar} \end{vmatrix} \\
&= \gamma \begin{vmatrix} -e^{\gamma L} & e^{ipL/\hbar} \\ -\gamma e^{\gamma L} & \frac{ipL}{\hbar} e^{ipL/\hbar} \end{vmatrix} + \gamma \begin{vmatrix} -e^{-\gamma L} & e^{ipL/\hbar} \\ \gamma e^{-\gamma L} & \frac{ipL}{\hbar} e^{ipL/\hbar} \end{vmatrix} \\
&\quad - \frac{ip}{\hbar} \begin{vmatrix} -e^{\gamma L} & e^{ipL/\hbar} \\ -\gamma e^{\gamma L} & \frac{ipL}{\hbar} e^{ipL/\hbar} \end{vmatrix} + \frac{ip}{\hbar} \begin{vmatrix} -e^{-\gamma L} & e^{ipL/\hbar} \\ \gamma e^{-\gamma L} & \frac{ipL}{\hbar} e^{ipL/\hbar} \end{vmatrix} \\
&= \left(\gamma - \frac{ip}{\hbar}\right) e^{ipL/\hbar} e^{\gamma L} \left(\gamma - \frac{ip}{\hbar}\right) + \left(\gamma + \frac{ip}{\hbar}\right) e^{ipL/\hbar} e^{-\gamma L} \left(-\gamma - \frac{ip}{\hbar}\right) \\
&= 2e^{ipL/\hbar} \left(\left[\gamma^2 + \left(\frac{ip}{\hbar}\right)^2\right] \sinh(\gamma L) - 2\gamma \frac{ip}{\hbar} \cosh(\gamma L) \right)
\end{aligned} \tag{12}$$

Remarque : M est toujours inversible puisque

$$\begin{aligned}
|\det(M)|^2 &= 4\left(\gamma^2 - \frac{p^2}{\hbar^2}\right)^2 \sinh^2(\gamma L) + 16\gamma^2 \frac{p^2}{\hbar^2} \cosh^2(\gamma L) \\
&= 4\left(\gamma^2 + \frac{p^2}{\hbar^2}\right)^2 \sinh^2(\gamma L) + 16\gamma^2 \frac{p^2}{\hbar^2} \neq 0
\end{aligned} \tag{13}$$

Par la règle de Cramer, on a

$$B_1 = \frac{\det(M_{B_1})}{\det(M)}, \tag{14}$$

où M_{B_1} est la matrice obtenue à partir de M en remplaçant la première colonne par le vecteur colonne du membre inhomogène dans l'équation (10) :

$$M_{B_1} = \begin{pmatrix} -A_1 & -1 & -1 & 0 \\ -\frac{ip}{\hbar} A_1 & \gamma & -\gamma & 0 \\ 0 & -e^{-\gamma L} & -e^{\gamma L} & e^{ipL/\hbar} \\ 0 & \gamma e^{-\gamma L} & -\gamma e^{\gamma L} & \frac{ipL}{\hbar} e^{ipL/\hbar} \end{pmatrix}. \tag{15}$$

Un calcul en tous points similaire au précédent (noter qu'après division de la première colonne par A_1 seul l'élément supérieur gauche de la matrice a changé par rapport à M) donne donc :

$$\begin{aligned}
\det M_{B_1} &= A_1 \left(-\gamma - \frac{ip}{\hbar}\right) e^{ipL/\hbar} e^{\gamma L} \left(\gamma - \frac{ip}{\hbar}\right) + A_1 \left(-\gamma + \frac{ip}{\hbar}\right) e^{ipL/\hbar} e^{-\gamma L} \left(-\gamma - \frac{ip}{\hbar}\right) \\
&= -2A_1 e^{ipL/\hbar} \left(\gamma^2 + \frac{p^2}{\hbar^2}\right) \sinh(\gamma L),
\end{aligned} \tag{16}$$

En combinant Eqs. (12), (14) et (16), on obtient ainsi le coefficient de réflexion en amplitude

$$r = \frac{B_1}{A_1} = \frac{-\left(\gamma^2 + \frac{p^2}{\hbar^2}\right) \sinh(\gamma L)}{\left(\gamma^2 - \frac{p^2}{\hbar^2}\right) \sinh(\gamma L) - 2i\gamma \frac{p}{\hbar} \cosh(\gamma L)} \tag{17}$$

On en déduit le coefficient de réflexion en intensité

$$|r|^2 = \left|\frac{B_1}{A_1}\right|^2 = \frac{1}{|\det M|^2} \left|\frac{\det M_{B_1}}{A_1}\right|^2 = \frac{\left(\gamma^2 + \frac{p^2}{\hbar^2}\right)^2 \sinh^2(\gamma L)}{\left(\gamma^2 + \frac{p^2}{\hbar^2}\right)^2 \sinh^2(\gamma L) + 4\gamma^2 \frac{p^2}{\hbar^2}} < 1 \tag{18}$$

L'amplitude transmise s'obtient de façon analogue :

$$A_3 = \frac{\det M_{A_3}}{\det M} \tag{19}$$

avec

$$M_{A_3} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 & -A_1 \\ -\frac{ip}{\hbar} & \gamma & -\gamma & -\frac{ip}{\hbar}A_1 \\ 0 & -e^{-\gamma L} & -e^{\gamma L} & 0 \\ 0 & \gamma e^{-\gamma L} & -\gamma e^{\gamma L} & 0 \end{pmatrix}. \tag{20}$$

En plaçant la quatrième colonne avant les trois autres (par trois permutations de deux colonnes), la matrice devient triangulaire par blocs ; le calcul du déterminant est donc immédiat :

$$\begin{aligned} \det(M_{A_3}) &= (-1)^3 \begin{vmatrix} -A_1 & 1 & -1 & -1 \\ -\frac{ip}{\hbar}A_1 & -\frac{ip}{\hbar} & \gamma & -\gamma \\ 0 & 0 & -e^{-\gamma L} & -e^{\gamma L} \\ 0 & 0 & \gamma e^{-\gamma L} & -\gamma e^{\gamma L} \end{vmatrix} = -A_1 \begin{vmatrix} -1 & 1 \\ -\frac{ip}{\hbar} & -\frac{ip}{\hbar} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} -e^{-\gamma L} & -e^{\gamma L} \\ \gamma e^{-\gamma L} & -\gamma e^{\gamma L} \end{vmatrix} \\ &= -4\gamma \frac{ip}{\hbar} A_1. \end{aligned} \tag{21}$$

On en déduit

$$t = \frac{A_3}{A_1} = \frac{-2\gamma \frac{ip}{\hbar} e^{-ipL/\hbar}}{\left(\gamma^2 - \frac{p^2}{\hbar^2}\right)\sinh(\gamma L) - 2\gamma \frac{ip}{\hbar}\cosh(\gamma L)} \tag{22}$$

et

$$\begin{aligned} |t|^2 &= \left|\frac{A_3}{A_1}\right|^2 \\ &= \frac{4\gamma^2 \frac{p^2}{\hbar^2}}{\left(\gamma^2 + \frac{p^2}{\hbar^2}\right)^2 \sinh^2(\gamma L) + 4\gamma^2 \frac{p^2}{\hbar^2}} = \frac{4\left(1 - \frac{E}{V_0}\right)\frac{E}{V_0}}{\sinh^2\left(\sqrt{\frac{2mL^2V_0}{\hbar^2}\left(1 - \frac{E}{V_0}\right)}\right) + 4\left(1 - \frac{E}{V_0}\right)\frac{E}{V_0}} \end{aligned} \tag{23}$$

On vérifie que $|t|^2 + |r|^2 = 1$, ce qui est compatible avec la conservation du courant de probabilité puisque le potentiel a la même valeur $V = 0$ dans les régions I et III, d'où $p_1 = p_3 = p = \sqrt{2mE}$. Par ailleurs, la transmission $|t|^2$ est non nulle, alors qu'elle le serait classiquement (l'énergie de la particule est inférieure à la hauteur de la barrière de potentiel) : il s'agit là de ce qu'on appelle l'effet tunnel. On note que la transmission $|t|^2$ est une fonction décroissante de la longueur de la barrière, et que pour $\gamma L \gg 1$, cette transmission décroît exponentiellement avec L. A L et V_0 fixé, dans la limite $E \to 0^+$, on voit aussi que cette transmission s'annule à mesure que l'énergie cinétique $E = p^2/2m$ devient négligeable devant la hauteur V_0 de la barrière de potentiel. Dernière remarque : dans la limite $\hbar \to 0$, qui employée pour retrouver la mécanique classique, l'expression (23) tend en effet vers zéro.

2. Cas $0 < V_0 < E$.

   (a) Le coefficient γ devient imaginaire pur. On pose $p_1 = p = \sqrt{2mE}$ et $p_2 = \sqrt{2m(E - V_0)}$. En choisissant arbitrairement le signe de la racine complexe $\gamma = \pm i\sqrt{2m(E - V_0)/\hbar^2} = \pm ip_2/\hbar$, et comme $\cosh(ix) = \cos(x)$ et $\sinh(ix) = i\sin(x)$, l'adaptation de l'Eq. (22) donne

$$t = \frac{-2p_1p_2e^{ip_1L/\hbar}}{(p_1^2 + p_2^2)i\sin(p_2L/\hbar) - 2p_1p_2\cos(p_2L/\hbar)}, \tag{24}$$

d'où

$$|t|^2 = \frac{4p_1^2p_2^2}{(p_1^2 + p_2^2)^2\sin^2(p_2L/\hbar) + 4p_1^2p_2^2\cos^2(p_2L/\hbar)} = \frac{4p_1^2p_2^2}{(p_1^2 - p_2^2)^2\sin^2(p_2L/\hbar) + 4p_1^2p_2^2} \tag{25}$$

(b) Comme $\sin^2(x) = (1-\cos(2x))/2$ a pour période π, le coefficient de transmission en intensité $|t|^2$ est périodique en L, de période $L_0 = \pi\hbar/p_2 = \lambda_2/2$. Cette périodicité émane de l'interférence des ondes transmises directement vers la droite en $x = L$ avec celles qui sont réfléchies vers la gauche en $x = L$, puis réfléchies vers la droite en $x = 0$ et transmises enfin vers la droite en $x = L$, qui pour $L = nL_0$ ont une différence de marche de $2nL_0$, et donc une différence de phase de $2np_2L_0/\hbar = 2n\pi$. Cette interférence est destructive pour la transmission ($L = (n+1/2)\pi\hbar/p_2$) ou constructive ($L = n\pi\hbar/p_2$) ; elle est une conséquence directe de la nature ondulatoire associée à la particule. Pour être précis, l'onde partielle transmise directement interfère non seulement avec l'onde partielle qui effectue en sus un aller-retour entre $x = L$ et $x = 0$, mais aussi avec les ondes partielles qui font l allers-retours et qui accumulent donc une phase supplémentaire $2lp_2L/\hbar = 2\pi lL/L_0$ (encore un multiple de 2π si $L = nL_0$).

(c) Dans la limite classique, le coefficient de transmission serait 1, puisque l'énergie cinétique de la particule ne s'annule pas, et que la particule ne rebrousse donc pas chemin. Alors que dans le régime tunnel, la mécanique quantique permet à la particule de traverser une barrière impénétrable classiquement, nous voyons que, dans le cas présent, où la transmission classique serait parfaite, les inhomogénéités de potentiel aboutissent en général à une réflexion partielle dans le cas quantique. Il est remarquable formellement que l'expression (25) n'admette pas pour limite 1 lorsque $\hbar \to 0$.

(d) La transmission est parfaite ($|t|^2 = 1$) lorsque $p_2L/\hbar = \sqrt{2m(E-V_0)L^2/\hbar^2}$ est un multiple de π, ce qui se produit pour des énergies particulières à V_0 et L fixés, ou pour des longueurs particuilères à V_0 et E fixés. Le minimum de transmission (vis-à-vis des variations de L) est

$$|t|^2_{\min} = \frac{4p_1^2p_2^2}{(p_1^2-p_2^2)^2+4p_1^2p_2^2} = \frac{4p_1^2p_2^2}{(p_1^2+p_2^2)^2} = \frac{4\left(\frac{E}{V_0}-1\right)\frac{E}{V_0}}{\left(2\frac{E}{V_0}-1\right)^2}, \tag{26}$$

c'est-à-dire une fonction strictement croissante de E/V_0 sur l'intervalle $]1,+\infty[$, qui ne s'annule que dans la limite $E/V_0 \to 1^+$. La barrière n'est donc en général jamais complètement réfléchissante ("opaque").

3. Cas $V_0 < 0 < E$ (solutions non liées d'un puits de potentiel carré de profondeur finie). Les résultats de la question 2. se transposent tels quels, avec $p_2 = \sqrt{2m(E-V_0)} = \sqrt{2m(E+|V_0|)}$. En particulier, à l'exception de jeux de paramètres particuliers pour lesquels la transmission est parfaite, le puits de potentiel provoque une réflexion partielle de la particule, alors même qu'il s'agit là d'une dépression de potentiel. D'aucuns y verront une conséquence de la mécanique quantique au moins aussi étonnante que l'effet tunnel.