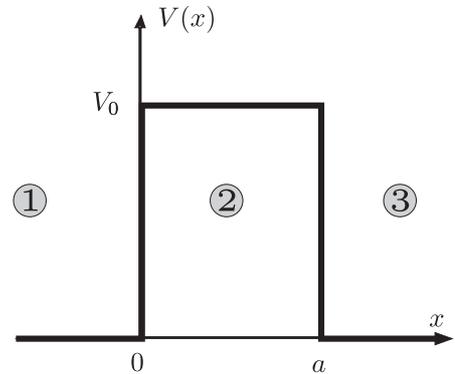


Travaux dirigés de physique quantique  
PA101 - PC 3  
Effet tunnel

On considère une particule de masse  $m$  dans un potentiel comme ci-dessus composé de deux zones à potentiel nul séparées par une barrière de hauteur  $V_0$  et d'épaisseur  $a$ . On s'intéresse aux états stationnaires d'énergie  $E$  telle que

$$0 < E < V_0$$

. Dans le cas classique, une telle particule arrivant sur la barrière par la gauche par exemple serait réfléchiée par cette barrière et repartirait dans l'autre sens. Nous allons calculer ce qui se passe en mécanique quantique et voir que l'on obtient un résultat bien différent !



1. Écrire l'équation vérifiée par la fonction d'onde  $\psi(x)$  stationnaire dans les 3 zones de l'espace et donner la solution générale dans chacune de ces zones séparément. On introduira les constantes

$$K = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \quad \text{et} \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Commenter la forme générale de la fonction d'onde totale  $\Psi(x, t)$  dans chacune des régions.

2. Montrer que  $\psi$  et  $\psi' = \frac{d\psi}{dx}$  sont continues en  $x = 0$  et en  $x = a$ . En déduire les conditions aux interfaces adéquates. Inventorier le nombre d'inconnues et le nombre d'équations.
3. On considère une situation physique correspondant à une onde plane incidente dont l'amplitude est prise comme référence, venant de  $-\infty$  en direction de la barrière et on note  $R$  (resp.  $T$ ) le coefficient de réflexion sur la barrière (resp. transmission par la barrière) de potentiel. Montrer que

$$R = \frac{(K^2 + k^2)^2 \operatorname{sh}^2(Ka)}{4K^2k^2 + (K^2 + k^2)^2 \operatorname{sh}^2(Ka)} \quad \text{et} \quad T = \frac{4K^2k^2}{4K^2k^2 + (K^2 + k^2)^2 \operatorname{sh}^2(Ka)}$$

4. Dans la limite  $Ka \gg 1$ , étudier le comportement du coefficient de transmission  $T$  en fonction de  $a$ ,  $m$  et  $(V_0 - E)$ . Application numérique : estimer le coefficient de transmission pour une hauteur de barrière de l'ordre  $V_0 - E = 1$  eV (valeur typique d'énergie en jeu pour les électrons dans les solides) et une épaisseur de barrière  $a = 1$  nm. Que deviendrait ce coefficient de transmission si on remplaçait l'électron par un proton ?
5. Courant de probabilité

- (a) Montrer que toutes les solutions de l'équation de Schrödinger  $\Psi(x, t)$  vérifient l'équation

$$\frac{\partial |\Psi|^2}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{J} = 0 \tag{1}$$

où le vecteur

$$\vec{J}(\vec{r}, t) = \frac{\hbar}{2mi} (\bar{\Psi} \vec{\nabla} \Psi - \Psi \vec{\nabla} \bar{\Psi})$$

est appelé courant de probabilité. Quelle est l'interprétation physique de l'équation (1). Que devient cette équation dans le cas stationnaire ?

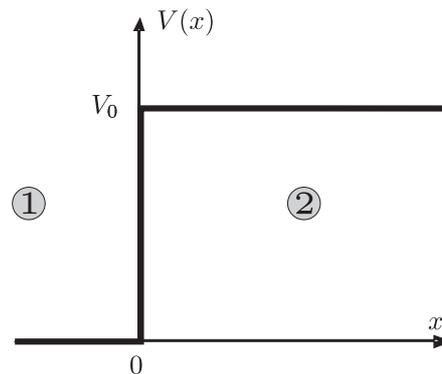
(b) Déterminer le courant de probabilité dans chacune des régions 1,2 et 3 relatives au potentiel des questions 1 à 4. Retrouver le fait que  $R + T = 1$ .

6. On se place maintenant dans le cas d'une marche de potentiel de hauteur  $V_0$ .

(a) Que vaut  $T$  si  $E < V_0$

(b) On se place dans le cas  $E > V_0$ . Calculer les coefficients de réflexion  $R$  et de transmission  $T$  pour une onde de probabilité arrivant de  $-\infty$  en reprenant les résultats de la question 3. Que constatez-vous ?

(c) Déterminer  $R$  et  $T$  en utilisant le courant de probabilité, commenter le résultat obtenu.



Travaux dirigés de physique quantique  
PA 101  
Effet tunnel - Correction

1. Le potentiel est indépendant du temps, les valeurs propres  $E$  du hamiltonien le sont aussi, la fonction d'onde est donc stationnaire

$$\Psi(\mathbf{q}, t) = e^{-i\omega t} \psi(\mathbf{q}) \quad \text{avec } \omega = \frac{E}{\hbar}$$

la fonction  $\psi(\mathbf{q})$  est au minimum bornée et solution de l'équation de Schrödinger stationnaire

$$\hat{H}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V(\mathbf{q})\psi = E\psi$$

nous sommes ici dans un cas mono-dimensionnel, en écrivant  $\psi''(x) = \frac{d^2\psi}{dx^2}$ , l'équation à résoudre est donc la suivante

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + [V - E]\psi = 0 \quad (2)$$

Le potentiel  $V$  est constant sur les 3 morceaux que forment les régions 1, 2 et 3. On résout donc cette équation séparément dans ces 3 régions en cherchant les 3 solutions correspondantes  $\psi_1(x)$ ,  $\psi_2(x)$  et  $\psi_3(x)$  et on aura

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_1(x) & \text{si } x < 0 & \text{(Région 1)} \\ \psi_2(x) & \text{si } 0 < x < a & \text{(Région 2)} \\ \psi_3(x) & \text{si } x > a & \text{(Région 3)} \end{cases}$$

Les raccordements en  $x = 0$  et  $a$  seront étudiés plus loin...

- (a) Région 1 et 3 :  $V(x) = 0$ ; L'équation (2) s'écrit

$$\frac{\hbar^2}{2m}\psi''_{1,3} + E\psi_{1,3} = 0$$

que l'on résout directement

$$\psi_1(x) = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx} \quad \text{et} \quad \psi_3(x) = A_3 e^{ikx} + B_3 e^{-ikx}$$

où l'on a posé

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Les fonctions  $\psi_1(x)$  et  $\psi_3(x)$  ne peuvent donc différer que par l'intermédiaire des constantes d'intégration complexes  $A_1, B_1, A_3$  et  $B_3$ .

- (b) Région 2 :  $V(x) = V_0$ ; L'équation (2) s'écrit

$$\frac{\hbar^2}{2m}\psi''_2 + (E - V_0)\psi_2 = 0$$

Si l'on s'intéresse au cas  $0 < E < V_0$  on peut alors introduire la constante réelle

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

qui permet d'écrire

$$\psi''_2 - K^2\psi_2 = 0$$

que l'on résout directement sous la forme

$$\psi_2(x) = A_2 e^{Kx} + B_2 e^{-Kx}$$

Les solutions de l'équation de Schrödinger sont donc de la forme

$$\Psi(x, t) = \begin{cases} A_1 e^{i(kx - \omega t)} + B_1 e^{i(-kx - \omega t)} & \text{si } x < 0 & \text{(Région 1)} \\ A_2 e^{Kx - i\omega t} + B_2 e^{-Kx - i\omega t} & \text{si } 0 < x < a & \text{(Région 2)} \\ A_3 e^{i(kx - \omega t)} + B_3 e^{i(-kx - \omega t)} & \text{si } x > a & \text{(Région 3)} \end{cases}$$

Il existe donc deux ondes dans chaque région :

- progressives dans des directions opposées dans les régions 1 et 3;
- évanescentes dans des directions opposées dans la région 2.

Il n'existe pour le moment aucune restriction sur la valeur possible de  $E$  dans l'intervalle  $[0, V_0]$ .

2. La continuité de  $\psi$  et  $\psi'$  est un point fondamental, déjà étudiés au TD précédent. Supposons que la fonction d'onde soit bornée (ce qui est la moindre des choses compte-tenu de son interprétation physique) et que le potentiel le soit aussi (c'est le cas ici), on peut intégrer l'équation de Schrödinger stationnaire sur un intervalle centré sur n'importe quel point  $x_0$ , et obtenir

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int_{x_0 - \varepsilon}^{x_0 + \varepsilon} \psi''(x) dx + \int_{x_0 - \varepsilon}^{x_0 + \varepsilon} [V(x) - E] \psi(x) dx = 0$$

si les fonctions  $V$  et  $\psi$  sont bornées, il est clair que

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{x_0 - \varepsilon}^{x_0 + \varepsilon} [V(x) - E] \psi(x) dx = 0$$

ainsi toujours nous pouvons écrire

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{x_0 - \varepsilon}^{x_0 + \varepsilon} \psi''(x) dx = [\psi'(x)]_{x_0 - \varepsilon}^{x_0 + \varepsilon} = 0$$

Ainsi donc la dérivée de la fonction d'onde est-elle continue, même aux éventuels points de discontinuités du potentiel pourvu qu'il reste borné. Il en résulte immédiatement que la fonction d'onde stationnaire  $\psi$ , primitive d'une fonction continue, est elle-même continue. Dans le cas qui nous intéresse, on peut donc écrire que

$$\psi \text{ et } \psi' \text{ sont continues sur } \mathbb{R} \text{ et donc en } x = 0 \text{ et } x = a$$

Deux cas ont été évincés dans cette démonstration, celui de la fonction d'onde non bornée qui ne correspond pas à un cas physique, et celui d'un potentiel non borné qui est intéressant, un peu plus compliqué et à traiter au cas par cas!

Les conditions de raccordement sont issues de la continuité de  $\psi$  et  $\psi'$  en  $x = 0$  et  $x = a$ . On les écrit directement

$$\begin{aligned} \text{en } x = 0 & \begin{cases} \psi_1(0) = \psi_2(0) & \Rightarrow A_1 + B_1 = A_2 + B_2 \\ \psi'_1(0) = \psi'_2(0) & \Rightarrow ik(A_1 - B_1) = K(A_2 - B_2) \end{cases} \\ \text{en } x = a & \begin{cases} \psi_2(a) = \psi_3(a) & \Rightarrow A_2 e^{Ka} + B_2 e^{-Ka} = A_3 e^{ika} + B_3 e^{-ika} \\ \psi'_2(a) = \psi'_3(a) & \Rightarrow K(A_2 e^{Ka} - B_2 e^{-Ka}) = ik(A_3 e^{ika} - B_3 e^{-ika}) \end{cases} \end{aligned}$$

La situation semble délicate car nous disposons de 4 équations pour fixer les 6 inconnues que sont les  $(A_i, B_i)$  pour  $i = 1, 2$  et  $3$ . Il faut préciser les conditions aux limites!

3. Interprétons les différentes amplitudes intervenant dans la fonction d'onde  $\Psi(x, t)$ .

Considérons que la particule vient de la région 1 : elle est émise en  $-\infty$  et se propage dans la région 1 en direction de la barrière (terme d'amplitude  $A_1$ ); une partie est réfléchiée par la barrière et se propage donc dans la région 1 en s'éloignant de la barrière (terme d'amplitude  $B_1$ ); une partie est

transmise sous la forme d'une onde évanescente à travers la barrière (solution dans la région 2) et sort du potentiel en  $x = a$  pour se propager dans la région 3 vers les  $x$  croissants (terme d'amplitude  $A_3$ ).

S'il n'y a pas de source de particule en  $+\infty$ , le terme  $B_3$  est donc nul. Il ne reste plus que 5 inconnues pour 4 équations, En normalisant le terme source  $A_1 = 1$ , en nommant  $\rho = B_1$  l'amplitude du terme réfléchi et  $\tau = A_3$  celle du terme transmis, on peut oublier les indices des termes évanescents, on a donc

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + \rho e^{-ikx} & \text{si } x < 0 & \text{(Région 1)} \\ Ae^{Kx} + Be^{-Kx} & \text{si } 0 < x < a & \text{(Région 2)} \\ \tau e^{ikx} & \text{si } x > a & \text{(Région 3)} \end{cases}$$

et les conditions de raccordement s'écrivent alors

$$\begin{cases} A + B = 1 + \rho \\ A - B = i\frac{k}{K}(1 - \rho) \\ Ae^{Ka} + Be^{-Ka} = \tau e^{ika} \\ Ae^{Ka} - Be^{-Ka} = i\tau\frac{k}{K}e^{ika} \end{cases}$$

Les 4 inconnues  $\rho, \tau, A$  et  $B$  sont maintenant en vue!

Les deux premières lignes donnent

$$\begin{aligned} A &= \frac{1}{2} \left[ 1 + i\frac{k}{K} + \left(1 - i\frac{k}{K}\right) \rho \right] \\ B &= \frac{1}{2} \left[ 1 - i\frac{k}{K} + \left(1 + i\frac{k}{K}\right) \rho \right] \end{aligned}$$

et les deux dernières

$$A = \frac{1}{2} \tau e^{ika} e^{-Ka} \left(1 + i\frac{k}{K}\right) \quad (3)$$

$$B = \frac{1}{2} \tau e^{ika} e^{+Ka} \left(1 - i\frac{k}{K}\right) \quad (4)$$

les coefficients  $\rho$  et  $\tau$  sont donc les solutions d'un système de Cramer, on pose

$$\begin{bmatrix} e^{ika} e^{-Ka} \Omega_+ & -\Omega_- \\ e^{ika} e^{+Ka} \Omega_- & -\Omega_+ \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tau \\ \rho \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Omega_+ \\ \Omega_- \end{bmatrix} \quad \text{avec } \Omega_+ = 1 + i\frac{k}{K} \quad \text{et } \Omega_- = 1 - i\frac{k}{K}$$

$$\delta = \begin{vmatrix} e^{ika} e^{-Ka} \Omega_+ & -\Omega_- \\ e^{ika} e^{+Ka} \Omega_- & -\Omega_+ \end{vmatrix} = e^{ika} (\Omega_-^2 e^{+Ka} - e^{-Ka} \Omega_+^2)$$

$$\delta_\tau = \begin{vmatrix} \Omega_+ & -\Omega_- \\ \Omega_- & -\Omega_+ \end{vmatrix} = \Omega_-^2 - \Omega_+^2$$

$$\delta_\rho = \begin{vmatrix} e^{ika} e^{-Ka} \Omega_+ & \Omega_+ \\ e^{ika} e^{+Ka} \Omega_- & \Omega_- \end{vmatrix} = -2\text{sh}(Ka) e^{ika} \Omega_+ \Omega_-$$

ainsi

$$\tau = \frac{\delta_\tau}{\delta} = e^{-ika} \frac{\Omega_-^2 - \Omega_+^2}{\Omega_-^2 e^{+Ka} - e^{-Ka} \Omega_+^2} \quad \text{et} \quad \rho = \frac{\delta_\rho}{\delta} = \frac{-2\text{sh}(Ka) \Omega_+ \Omega_-}{\Omega_-^2 e^{+Ka} - e^{-Ka} \Omega_+^2}$$

Les coefficients de réflexion  $R$  et de transmission  $T$  sont les carrés des modules des nombres complexes  $\tau$  et  $\rho$ ,

quelques lignes supplémentaires donnent

$$\begin{aligned} T &= |\tau|^2 = \frac{|\Omega_-^2 - \Omega_+^2|^2}{|\Omega_-^2 e^{+Ka} - e^{-Ka} \Omega_+^2|^2} \\ &= \frac{4k^2 K^2}{(K^2 + k^2)^2 \operatorname{sh}^2(Ka) + 4K^2 k^2} \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned} R &= |\rho|^2 = \frac{|2\operatorname{sh}(Ka) \Omega_+ \Omega_-|^2}{|\Omega_-^2 e^{+Ka} - e^{-Ka} \Omega_+^2|^2} \\ &= \frac{\operatorname{sh}^2(Ka) (k^2 + K^2)^2}{(K^2 + k^2)^2 \operatorname{sh}^2(Ka) + 4K^2 k^2} \end{aligned}$$

Il est évident que

$$R + T = 1$$

Tout ce qui n'est pas transmis est réfléchi !

4. La limite  $Ka \gg 1$  correspond au cas où la largeur  $a$  de la barrière est grande devant la longueur caractéristique d'atténuation de l'onde évanescente  $1/K$ . Elle correspond donc à une transmission faible.

Dans cette limite

$$\operatorname{sh}(Ka) \simeq \frac{e^{Ka}}{2}$$

ainsi

$$\begin{aligned} T &\simeq \frac{16k^2 K^2 e^{-2Ka}}{((K^2 + k^2)^2 + 16K^2 k^2 e^{-2Ka})} \\ &\simeq 16 \frac{k^2 K^2}{(K^2 + k^2)^2} e^{-2Ka} \end{aligned}$$

en revenant aux expressions de  $K$  et  $k$  on trouve

$$T \simeq 16 \frac{E(V_0 - E)}{V_0^2} \exp\left(-\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)}\right)$$

Le terme exponentiel domine le comportement de  $T$ . La transmission décroît exponentiellement avec :

- l'épaisseur de la barrière  $a$  ;
- la racine carrée de la masse  $m$  ;
- la racine carrée de la hauteur de la barrière  $V_0 - E$

Pour un électron ( $m = 9.10^{-31} \text{kg}$ ) avec  $V_0 - E = 1 \text{eV} = 1,6.10^{-19} \text{J}$  et  $a = 10^{-9} \text{m}$  on obtient

$$\begin{aligned} K &= \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} = \frac{\sqrt{2 \times 9.10^{-31} \times 1,6.10^{-19}}}{1,05.10^{-34}} \\ &= 5,1.10^9 \end{aligned}$$

et donc  $Ka \simeq 5$  ce qui justifie le fait de négliger  $e^{-Ka} \simeq 10^{-2}$  devant  $e^{Ka} \simeq 10^2$ , en prenant  $E = \alpha V_0$  avec  $0 < \alpha < V_0$  on trouve finalement pour le facteur de transmission

$$T_\alpha \simeq 16\alpha(1 - \alpha)e^{-10}$$

La fonction  $\alpha(1 - \alpha)$  est maximale pour  $\alpha = \frac{1}{2}$  la transmission est optimale lorsque  $E = V_0/2$ , dans ce cas précis

$$T_{1/2} \simeq 4e^{-10} \simeq 1,8 \cdot 10^{-4}$$

Pour qu'on puisse observer l'effet tunnel d'électrons dans les solides, les épaisseurs de barrière ne peuvent être au-delà de quelques nanomètres. On sait effectivement réaliser de façon industrielle des jonctions tunnels avec des épaisseurs et hauteurs de barrière de cet ordre.

Avec des protons, 1840 fois plus massifs, et pour la même barrière le facteur  $K$  devient

$$K_{pro} = \sqrt{1840} K_{el} \simeq 2 \cdot 10^{11}$$

ainsi  $Ka \simeq 200$  et le coefficient de transmission optimal n'est plus que

$$T_{1/2,pro} \simeq 4e^{-400}$$

Une barrière de 1 nm est donc strictement infranchissable par effet tunnel pour un proton !

## 5. Courant de probabilité

(a) Pour un problème 1D, la fonction d'onde  $\Psi(x, t)$  vérifie l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \widehat{H} \Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\Psi$$

Le potentiel  $V(x)$  est réel et le hamiltonien est auto-adjoint ( $H = H^\dagger$ ), ainsi le complexe conjugué de cette équation s'écrit

$$-i\hbar \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial t} = \widehat{H}^\dagger \bar{\Psi} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \bar{\Psi}}{\partial x^2} + V(x)\bar{\Psi}$$

On calcule la dérivée temporelle du module carré de  $\Psi$ , il vient

$$\frac{\partial |\Psi|^2}{\partial t} = \frac{\partial \Psi \bar{\Psi}}{\partial t} = \Psi \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial t} + \bar{\Psi} \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

en utilisant l'équation de Schrödinger et sa conjuguée on trouve alors

$$\begin{aligned} \frac{\partial |\Psi|^2}{\partial t} &= -\frac{\Psi}{i\hbar} \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \bar{\Psi}}{\partial x^2} + V(x)\bar{\Psi} \right) + \frac{\bar{\Psi}}{i\hbar} \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\Psi \right) \\ &= \frac{\hbar}{2im} \left( \Psi \frac{\partial^2 \bar{\Psi}}{\partial x^2} - \bar{\Psi} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \right) \end{aligned}$$

On remarque que

$$\begin{aligned} \Psi \frac{\partial^2 \bar{\Psi}}{\partial x^2} &= \frac{\partial}{\partial x} \left( \Psi \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial x} \right) - \frac{\partial \Psi}{\partial x} \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial x} \\ \text{et} \\ \bar{\Psi} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} &= \frac{\partial}{\partial x} \left( \bar{\Psi} \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) - \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial x} \frac{\partial \Psi}{\partial x} \end{aligned}$$

ainsi

$$\frac{\partial |\Psi|^2}{\partial t} = \frac{\hbar}{2im} \left[ \frac{\partial}{\partial x} \left( \Psi \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial x} \left( \bar{\Psi} \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) \right]$$

en introduisant le courant de probabilité

$$J(x, t) = \frac{\hbar}{2im} \left[ \bar{\Psi} \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial x} \right]$$

on a bien

$$\frac{\partial |\Psi|^2}{\partial t} + \frac{\partial J}{\partial x} = 0$$

Cette équation est à rapprocher de la traditionnelle équation de conservation

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div} \left( \vec{j} \right) = 0$$

où  $\vec{j} = \rho \vec{v}$  est le courant des charges de densité volumique  $\rho$  se déplaçant à la vitesse  $\vec{v}$ . En mécanique quantique  $|\Psi|^2$  est la densité de probabilité de présence, le courant de probabilité associé est donc la fonction  $J(x, t)$ . La généralisation tri-dimensionnelle est immédiate :

$$\frac{\partial |\Psi|^2}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{J} = 0 \quad \text{avec} \quad \vec{J} = \frac{\hbar}{2im} \left[ \bar{\Psi} \vec{\nabla} \Psi - \Psi \vec{\nabla} \bar{\Psi} \right]$$

Dans le cas stationnaire, on a vu que

$$\Psi(\mathbf{q}, t) = e^{-i\omega t} \psi(\mathbf{q})$$

ainsi

$$\Psi(\mathbf{q}, t) \overline{\Psi(\mathbf{q}, t)} = e^{-i\omega t} \psi(\mathbf{q}) e^{i\omega t} \overline{\psi(\mathbf{q})} = \psi(\mathbf{q}) \overline{\psi(\mathbf{q})}$$

le carré du module de  $\Psi$  est donc indépendant du temps (d'où le nom de stationnaire...) ainsi

$$\frac{\partial |\Psi|^2}{\partial t} = 0 \quad \Rightarrow \quad \text{div} \vec{J} = 0$$

que l'on écrit en terme de la fonction  $\psi$  sous la forme

$$\vec{\nabla} \cdot \left( \bar{\Psi} \vec{\nabla} \Psi - \Psi \vec{\nabla} \bar{\Psi} \right) = \vec{\nabla} \cdot \left( \bar{\psi} \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \bar{\psi} \right) = 0$$

Dans le cas stationnaire, on remarque donc que  $\vec{J} = \vec{J}(\mathbf{q})$

$$J(\Psi) = \frac{\hbar}{2im} \left[ \bar{\Psi} \vec{\nabla} \Psi - \Psi \vec{\nabla} \bar{\Psi} \right] = J(\psi) = \frac{\hbar}{2im} \left[ \bar{\psi} \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \bar{\psi} \right]$$

(b) Calculons le courant dans chacune des régions de notre problème :

i. Région 1 : On a trouvé  $\psi_1(x) = e^{ikx} + \rho e^{-ikx}$  ainsi

$$\begin{aligned} J_1(x) &= \frac{k\hbar}{2m} \left[ (e^{-ikx} + \bar{\rho} e^{ikx}) (e^{ikx} - \rho e^{-ikx}) - (e^{ikx} + \rho e^{-ikx}) (-e^{-ikx} + \bar{\rho} e^{ikx}) \right] \\ &= \frac{k\hbar}{m} (1 - |\rho|^2) \end{aligned}$$

ii. Région 2 :  $\psi_2(x) = Ae^{Kx} + Be^{-Kx}$  ainsi

$$\begin{aligned} J_2(x) &= \frac{K\hbar}{2im} \left[ (\bar{A}e^{Kx} + \bar{B}e^{-Kx}) (Ae^{Kx} - Be^{-Kx}) - (Ae^{Kx} + Be^{-Kx}) (\bar{A}e^{Kx} - \bar{B}e^{-Kx}) \right] \\ &= \frac{K\hbar}{im} [A\bar{B} - B\bar{A}] \end{aligned}$$

en se servant (par exemple) des expressions (3) et (4) de  $A$  et  $B$  on trouve alors très vite

$$\begin{aligned} J_2(x) &= \frac{1}{4} |\tau|^2 \frac{K\hbar}{im} \left[ \left(1 + i\frac{k}{K}\right)^2 - \left(1 - i\frac{k}{K}\right)^2 \right] \\ &= \frac{k\hbar}{m} |\tau|^2 \end{aligned}$$

iii. Région 3 :  $\psi_3(x) = \tau e^{ikx}$  ainsi

$$\begin{aligned} J_3(x) &= \frac{ik\hbar}{2im} [\bar{\tau} e^{-ikx} \tau e^{ikx} + \tau e^{ikx} \bar{\tau} e^{-ikx}] \\ &= \frac{k\hbar}{m} |\tau|^2 \end{aligned}$$

pour avoir conservation du courant de probabilité il faut avoir

$$J_1 = J_2 = J_3$$

ce qui implique

$$|\rho|^2 + |\tau|^2 = 1$$

## 6. Marche de potentiel

- (a) Si l'énergie de la particule  $E$  est inférieure à la hauteur  $V_0$  du potentiel, la région 2 sera le siège d'une onde évanescente et rien ne pourra être transmis : on peut le prouver en étudiant la limite  $a \rightarrow +\infty$  dans le cas de l'effet tunnel. Ainsi,  $T = 0$ .
- (b) Si  $E > V_0$  et pour une source normalisée située en  $x = -\infty$ , en généralisant les résultats de l'effet tunnel nous aurons immédiatement

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + \rho e^{-ikx} & \text{si } x < 0 \quad (\text{Région 1}) \\ \tau e^{iKx} & \text{si } x > 0 \quad (\text{Région 2}) \end{cases}$$

la constante  $k$  est évidemment la même que pour l'effet tunnel, par contre on a maintenant

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

Les conditions à l'interface  $x = 0$  s'écrivent

$$1 + \rho = \tau \quad \text{et} \quad 1 - \rho = \frac{K}{k} \tau$$

que l'on résoud immédiatement

$$\tau = \frac{2k}{k + K} \quad \text{et} \quad \rho = \frac{k - K}{k + K} \quad (5)$$

le calcul des coefficients de transmission et de réflexion est le même

$$T = |\tau|^2 = \frac{4k}{(k + K)^2} \quad \text{et} \quad R = |\rho|^2 = \frac{(k - K)^2}{(k + K)^2}$$

on constate alors que

$$T + R = \frac{(k + K)^2 + 4k(1 - K)}{(k + K)^2} = 1 - \frac{4k(K - 1)}{(k + K)^2}$$

on a vu que  $K$  est généralement très supérieur à 1 et donc

$$T + R \simeq 1 - \frac{4kK}{(k + K)^2} < 1$$

- (c) Le calcul du courant de probabilité dans chacune des deux régions est immédiat, on trouve
- i. Région 1 : C'est le même calcul que pour l'effet tunnel, mis à part que  $\rho$  est maintenant réel

$$J_1(x) = \frac{k\hbar}{m} (1 - \rho^2)$$

- ii. Région 2 : Avec  $\psi_2(x) = \tau e^{iKx}$  et  $\tau$  réel on trouve

$$J_2(x, t) = \frac{K\hbar}{m} \tau^2$$

En utilisant les expressions (5) de  $\rho$  et  $\tau$  on trouve maintenant que

$$J_1 = \frac{k\hbar}{m} (1 - \rho^2) = \frac{4\hbar k^2 K}{m(k+K)^2}$$

et

$$J_2 = \frac{K\hbar}{m} \tau^2 = \frac{K\hbar}{m} \frac{4k^2}{(k+K)^2}$$

on a donc bien comme prévu

$$J_1 = J_2$$

C'est la moindre des choses car ce résultat a été prouvé dans le cas général de l'équation de Schrödinger !

Ceci est dû au fait que la vitesse des ondes de probabilité dans les zones d'entrée et sortie est différente, les coefficients de transmission et de réflexion sont donc plus compliqués que  $R$  et  $T$ . Le traitement du problème par le courant de probabilité permet de tenir compte de cet effet et de le traiter de façon élégante.