MQ3-TD

Correction

MQ3 — 01 Réflexion/transmission sur une marche de potentiel

1) Une particule classique venant de la gauche avec une énergie $E > V_0$ poursuit son chemin vers la droite. Ses vitesses v dans la zone $x < 0$ et v' dans la zone $x > 0$ sont

$$v = \sqrt{\frac{2\,E}{m}} \qquad \text{et} \qquad v' = \sqrt{\frac{2\,(E - V_0)}{m}} < v$$

La marche de potentiel fait ralentir la particule mais celle-ci est **transmise à coup sûr**.

2) Dans la zone $x < 0$, le potentiel est $V = 0$ donc l'équation de Schrödinger indépendante du temps s'écrit

$$\frac{\mathrm{d}^2\varphi}{\mathrm{d}x^2} + k_0^2\,\varphi = 0 \qquad \text{avec} \qquad k_0 = \sqrt{\frac{2\,m\,E}{\hbar^2}}$$

et les solutions sont

$$\varphi_{\mathrm{I}}(x) = A_{\mathrm{I}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\,k_0\,x} + B_{\mathrm{I}}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,k_0\,x}$$

La fonction d'onde totale de cet état stationnaire est

$$\psi_{\mathrm{I}}(x,t) = \underbrace{A_{\mathrm{I}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\,(k_0\,x - \omega\,t)}}_{\text{OPPH "+"}} + \underbrace{B_{\mathrm{I}}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,(k_0\,x + \omega\,t)}}_{\text{OPPH "−"}} \qquad \text{avec} \qquad \omega = \frac{E}{\hbar}$$

où la première OPPH représente la particule incidente, et la seconde une particule réfléchie.

Dans l'autre zone $x > 0$, le potentiel est $V = V_0$ donc l'équation de Schrödinger indépendante du temps s'écrit

$$\frac{\mathrm{d}^2\varphi}{\mathrm{d}x^2} + k^2\,\varphi = 0 \qquad \text{avec} \qquad k = \sqrt{\frac{2\,m\,(E - V_0)}{\hbar^2}}$$

et les solutions sont

$$\varphi_{\mathrm{II}}(x) = A_{\mathrm{II}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\,k\,x} + B_{\mathrm{II}}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,k\,x}$$

La fonction d'onde totale de cet état stationnaire est

$$\psi_{\mathrm{II}}(x,t) = \underbrace{A_{\mathrm{II}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\,(k\,x - \omega\,t)}}_{\text{OPPH "+"}} + \underbrace{B_{\mathrm{II}}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,(k\,x + \omega\,t)}}_{\text{OPPH "−"}} \qquad \text{avec} \qquad \omega = \frac{E}{\hbar}$$

où la première OPPH représente une particule transmise, et la seconde une particule qui arriverait de $x = +\infty$ et qui se dirigerait vers la marche. Cette deuxième OPPH ne correspond pas à notre situation où la particule incidente vient de la gauche et non de la droite de la marche. On peut donc conclure directement

$$B_{\mathrm{II}} = 0$$

Finalement, les états stationnaires sont

$$\boxed{\varphi(x) = \begin{cases} A_{\mathrm{I}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\,k_0\,x} + B_{\mathrm{I}}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,k_0\,x} & \text{si} \quad x \leqslant 0 \\ A_{\mathrm{II}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\,k\,x} & \text{si} \quad x \geqslant 0 \end{cases}}$$

3) Il y a **trois inconnues** dans ce problème : A_{I}, A_{II} et B_{I} ; et nous avons **deux équations** : la continuité de φ et de φ' en $x = 0$. Nous pouvons donc exprimer A_{II} et B_{I} en fonction de A_{I}, ce qui est suffisant pour calculer le coefficient de réflexion R et celui de transmission T. *Dans l'absolu, A_I se détermine par la condition de normalisation, mais celle-ci est inexploitable ici car on travaille avec des OPPH non normalisables. Ce problème est symptomatique du fait qu'une particule libre ne peut pas être décrite par une OPPH mais seulement par un paquet d'onde...*

4) Les coefficients de réflexion R et de transmission T sont définis comme le rapport du courant réfléchi (resp. transmis) sur le courant incident, c'est-à-dire

$$R = \frac{||\vec{\jmath_r}||}{||\vec{\jmath_i}||} \qquad \text{et} \qquad T = \frac{||\vec{\jmath_t}||}{||\vec{\jmath_i}||}$$

Or, les courants de probabilité associés à des OPPH sont d'après le cours

$$\vec{\jmath_i} = \frac{\hbar\, k_0}{m}\, |A_\mathrm{I}|^2\, \vec{e_x}, \qquad \vec{\jmath_r} = -\frac{\hbar\, k_0}{m}\, |B_\mathrm{I}|^2\, \vec{e_x} \qquad \text{et} \qquad \vec{\jmath_t} = \frac{\hbar\, k}{m}\, |A_\mathrm{II}|^2\, \vec{e_x}$$

d'où

$$\boxed{R = \frac{|B_\mathrm{I}|^2}{|A_\mathrm{I}|^2} \qquad \text{et} \qquad T = \frac{k}{k_0}\, \frac{|A_\mathrm{II}|^2}{|A_\mathrm{I}|^2}}$$

5) On obtient R et T à partir des conditions aux limites. Les continuités de φ et de φ' en $x = 0$ donnent

$$A_\mathrm{I} + B_\mathrm{I} = A_\mathrm{II} \qquad \text{et} \qquad A_\mathrm{I} - B_\mathrm{I} = \frac{k}{k_0}\, A_\mathrm{II}$$

On déduit alors directement

$$A_\mathrm{II} = \frac{2\, k_0}{k_0 + k}\, A_\mathrm{I} \qquad \text{et} \qquad B_\mathrm{I} = \frac{1}{2}\left(1 - \frac{k}{k_0}\right) A_\mathrm{II} = \frac{k_0 - k}{k_0 + k}\, A_\mathrm{I}$$

Les facteurs de réflexion et de transmission sont par conséquent

$$\boxed{R = \frac{(k_0 - k)^2}{(k_0 + k)^2} \qquad \text{et} \qquad T = \frac{4\, k\, k_0}{(k_0 + k)^2}}$$

Il y a de nombreux commentaires à faire :

- déjà, $R \neq 0$ donc la particule a une probabilité non nulle de rebondir sur la marche de potentiel, ce qui n'est pas le cas avec une particule classique ;
- ensuite, $R + T = 1$, ce qui signifie que la particule est soit transmise, soit réfléchie, conformément à l'intuition (c'est en fait une propriété de « conservation de la particule ») ;
- si la marche est très petite ($V_0 \to 0$), alors $k \to k_0$ et donc $R \to 0$ et $T \to 1$, ce qui est de nouveau conforme à l'intuition : si $V_0 = 0$, c'est qu'il n'y a en fait pas de marche de potentiel !
- si la marche est très haute ($V_0 \to E$) alors $k \to 0$ donc $R \to 1$ et $T \to 0$: la particule quantique ne peut franchir la barrière que si elle a suffisamment d'énergie ($E > V_0$, comme la particule classique) ; *(si au contraire V_0 devient égal ou supérieur à E, on pourrait montrer que la particule est forcément réfléchie)* ;
- plus subtil ici, les coefficients R et T ne dépendent curieusement pas de $\hbar$, donc il n'est pas possible de regarder la « limite classique » $\hbar \to 0$ ...

Attention, la limite de la barrière haute est bien $V_0 \to E$ et non $V_0 \to \infty$ car si jamais $V_0 > E$, alors les solutions de l'équation de Schrödinger indépendante du temps ne sont plus les OPPH mais les ondes évanescentes ! Et tout le calcul est à refaire depuis le début... Notre étude est donc bien valable uniquement dans le cas $V_0 < E$.

6) Déjà fait, la particule quantique a une probabilité non nulle d'être réfléchie alors que la particule classique est toujours transmise.