Effet tunnel

Evolution dans le temps d'un état quantique

Les vecteurs propres et les valeurs propres de l'hamitonien d'un système quantique sont donnés par l'équation $H|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle$.

L'hamiltonien H étant un opérateur hermitique, les valeurs propres E_n sont réelles et les vecteurs $|\varphi_n\rangle$ forment une base orthogonale de l'espace des états du système. On supposera que cette base est normée.

Si à l'instant $t = 0$ l'état du système est $|\psi(0)\rangle$, on développe ce vecteur sur la base des vecteurs propres de H : $|\psi(0)\rangle = \sum \alpha_n |\varphi_n\rangle$ avec $\alpha_n = \langle\varphi_n|\psi(0)\rangle$.

Quand le spectre de l'hamiltonien est continu, on remplace la sommation par une intégration.

L'état du système à l'instant t est alors donné par :

$$|\psi(t)\rangle = \sum \alpha_n e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} |\varphi_n\rangle.$$

Valeurs propres et vecteurs propres de l'hamiltonien

L'hamiltonien du système est : $H = \dfrac{P^2}{2m} + V(X)$.

L'opérateur P est égal à $-i\hbar$ fois l'opérateur de dérivation par rapport à x et l'opérateur V(X) est la multiplication par la fonction V(x).

Dans le cas de l'effet tunnel, on a $\begin{cases} V(x) = V_0 & \text{pour } 0 < x < a \\ V(x) = 0 & \text{ailleurs} \end{cases}$.

Les valeurs propres et vecteurs propres de l'hamiltonien sont donnés par $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$.

En représentation fonctionnelle, cette relation est l'équation de Schrödinger :

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

H étant un opérateur hermitique, les valeurs propres E sont réelles.

Les fonctions propres doivent appartenir à l'espace des fonctions de carré sommable puisque la probabilité de présence $P(x,t) = \psi^*(x,t)\psi(x,t)$ doit être telle que $\int_{-\infty}^{+\infty} P(x)dx = 1$ (on ne confondra pas avec l'opérateur P).

L'équation de Schrödinger peut s'écrire : $\dfrac{d^2\psi}{dx^2} + \dfrac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\psi = 0$.

La fonction V(x) étant constante par intervalle, les solutions mathématiques de cette équation différentielle dépendent du signe de $E - V(x)$.

Selon les régions, on aura $\psi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ si $E - V(x) > 0$ avec $k = \dfrac{\sqrt{2m(E - V(x))}}{\hbar}$ ou

$\psi = Ce^{\ell x} + De^{-\ell x}$ si $E - V(x) < 0$ avec $\ell = \dfrac{\sqrt{2m(V(x) - E)}}{\hbar}$.

V(x) étant toujours positif, on en déduit que **les valeurs propres de H sont positives** sinon, on aurait des solutions exponentielles divergentes à l'infini.

Les fonctions propres de H seront donc :

$x<0$	$0<x<a$	$x>a$
$\psi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$	$\psi = Ce^{ik'x} + De^{-ik'x}$ si $E > V_0$ $\psi = Ce^{\ell x} + De^{-\ell x}$ si $E < V_0$	$\psi = Fe^{ikx} + Ge^{-ikx}$

Si on tient compte des conditions de continuité de la fonction propre et de sa dérivée en $x = 0$ et $x = a$, on constate que cette fonction ne dépend plus que de deux constantes arbitraires.

On en déduit que **la dégénérescence des valeurs propres de H est égale à 2**.

Pour une énergie positive donnée, il existe donc une infinité de fonctions propres appartenant à un sous-espace à deux dimensions.

Quand on veut accéder aux coefficients de transmission et de réflexion de la barrière, on choisit arbitrairement une fonction de ce sous-espace dans laquelle $G = 0$.

En effet, quand on introduit la dépendance du temps, on obtient :

$x<0$	$0<x<a$	$x>a$
$\psi = \left(Ae^{ikx} + Be^{-ikx}\right)e^{-i\frac{Et}{\hbar}}$	$\psi = \left(Ce^{ik'x} + De^{-ik'x}\right)e^{-i\frac{Et}{\hbar}}$ si $E > V_0$ $\psi = \left(Ce^{\ell x} + De^{-\ell x}\right)e^{-i\frac{Et}{\hbar}}$ si $E < V_0$	$\psi = Fe^{ikx}e^{-i\frac{Et}{\hbar}}$

Dans la région $x < 0$, on identifie aisément les ondes (à amplitude complexe) incidente et réfléchie et dans la région $x > a$ l'onde (toujours à amplitude complexe) transmise.

On pose $\omega = \frac{E}{\hbar}$.

La partie réelle de cette fonction d'onde est :

$x<0$	$0<x<a$	$x>a$
$A\cos(kx - \omega t) + B\cos(kx + \omega t)$	$C\cos(k'x - \omega t) + D\cos(k'x + \omega t)$ si $E > V_0$ $\left(Ce^{\ell x} + De^{-\ell x}\right)\cos\omega t$ si $E < V_0$	$\psi = F\cos(kx - \omega t)$