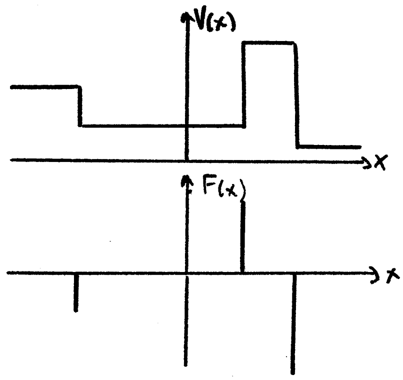
Marche, puits, barrière et créneaux (potentiels plats)

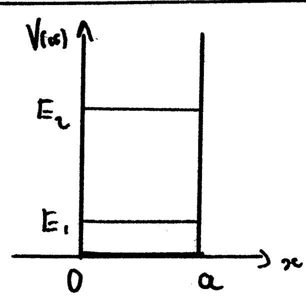
1) Potentiels plats



Sur chaque palier le quanton est libre, la valeur absolue de $V(x)$ n'est fixée qu'à une constante additive près. Seules importent la position et la hauteur des discontinuités. A chaque discontinuité du potentiel correspond une force en fonction de Dirac.

2) Le puits plat infini

. A une dimension



quand $0 \leq x \leq a$ $\quad \varphi_E(x) = a_+ e^{ip_E x} + a_- e^{-ip_E x}$

$E = p^2/2m$, $p_E = \sqrt{2mE}$

continuité de $\varphi(x)$ en $x=0$ et $x=a \Rightarrow \varphi_E(a) = 0, \varphi_E(0) = 0$

$\varphi_E(0) = a_+ + a_- = 0 \Rightarrow \varphi_E(x) = C \sin p_E x \qquad C = 2i a_+$

$\varphi_E(a) = 0 \Rightarrow \sin p_E a = 0 \Rightarrow p_E = n\frac{\pi}{a} \qquad (n \in \mathbb{N}^*) \Rightarrow E_n = n^2 \frac{\pi^2}{2} \frac{1}{m a^2}$

Les fonctions d'onde indépendantes du temps s'écrivent : $\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin n\pi \frac{x}{a}$

. A trois dimensions

Dans une boite de potentiel cubique (a,b,c) dans laquelle le potentiel V est nul, nous avons la fonction d'onde : $\varphi(x,y,z) = A \sin(p_x x) . \sin(p_y . y) \sin(p_z . z)$, avec

$p_x = n_x \frac{\pi}{a}$, $p_y = n_y \frac{\pi}{b}$, $p_z = n_z \frac{\pi}{c}$ $\quad (n_x, n_y, n_z$, entiers positifs$) \Rightarrow E = (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)/2m$

$\Rightarrow E_{n_x n_y n_z} = \frac{\pi^2}{2m}\left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2}\right) \Rightarrow$ dégénérescence de l'énergie $(g(E))$

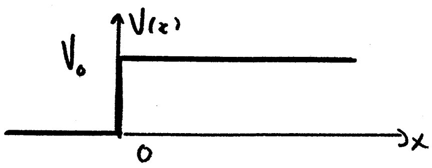
.Densité d'états d'un quanton libre

Pour un spectre continu on remplace la notion de dégénérescence $g(\epsilon)$ par celle de densité d'états $\rho(\epsilon)$. On a $E_n = \frac{h^2}{8ma^2} n^2$ $(ka = n\pi)$, et le nombre total d'états d'énergie inférieure à E est $\phi(\epsilon) = \frac{1}{8}\frac{4}{3}\pi n^3 \Rightarrow \phi(E) = \frac{\pi}{6}\left(\frac{8ma^2 E}{h^2}\right)^{3/2}$.

$\Rightarrow \rho(\epsilon) = \frac{\partial \phi(\epsilon)}{\partial \epsilon} = \frac{\pi}{4}\left(\frac{8ma^2}{h^2}\right)^{3/2} E^{1/2} \Rightarrow \frac{1}{V}\rho(\epsilon) = \frac{1}{2\pi^2}\sqrt{2m^3 E} \qquad (\hbar = 1)$

3) Marche de potentiel

• Conditions de continuité



$V(x) = 0$ si $x < 0$ et $V(x) = V_0$ si $x > 0$

$x < 0$: $\varphi_E(x) = a_+ e^{ip_E x} + a_- e^{-ip_E x}$ $\quad p_E^2 = 2mE$

$x > 0$: $\varphi_E(x) = a'_+ e^{ip'_E x} + a'_- e^{-ip'_E x}$ $\quad p_E'^2 = 2m(E - V_0)$

continuité de la densité de probabilité en $x = 0$ $\Rightarrow |a_+ + a_-|^2 = |a'_+ + a'_-|^2$

courant de probabilité $\Rightarrow \frac{p_E}{m}(|a_+|^2 - |a_-|^2) = \frac{p'_E}{m}(|a'_+|^2 - |a'_-|^2)$

continuité de $\varphi_E(x)$ en $x = 0$ $\Rightarrow \varphi_E(0) = a_+ + a_- = a'_+ + a'_-$

continuité de $\varphi'_E(x)$ en $x = 0$ $\Rightarrow p_E(a_+ - a_-) = p'_E(a'_+ - a'_-)$

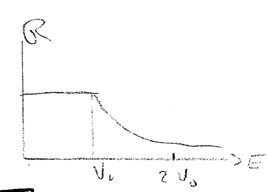
• Transmission et reflexion $\quad E > V_0$

on a : $a'_- = 0$ d'où : $a_- = a_+ \frac{p_E - p'_E}{p_E + p'_E}$ et $a'_+ = a_+ \frac{2p_E}{p_E + p'_E}$

on aura : $R = |a_-|^2 / |a_+|^2 = \left(\frac{p_E - p'_E}{p_E + p'_E}\right)^2$ et $T = p'_E |a'_+|^2 / p_E |a_+|^2 = \frac{4 p_E p'_E}{(p_E + p'_E)^2}$

on a : $R + T = 1$ $\quad \psi(x$

• Rebondissement. $\quad 0 < E < V_0$



$x < 0$: $\varphi_E(x) = a_+ e^{ip_E x} + a_- e^{-ip_E x}$ $\quad p_E^2 = 2mE$

$x > 0$: $\varphi_E(x) = a'_+ e^{-k'_E x} + a'_- e^{k'_E x}$ $\quad p'_E = \pm\sqrt{2m(E - V_0)} = \pm i k'_E$

on a : $a'_- = 0$ $\Rightarrow \varphi_E(0) = a_+ + a_- = a'_+$ et $\varphi'_E(0) = ip_E(a_+ - a_-) = -k'_E a'_+$

donc : $a_- = a_+ \frac{p_E - ik'_E}{p_E + ik'_E}$ et $a'_+ = a_+ \frac{2p_E}{p_E + ik'_E}$ $\Rightarrow R = 1$ et $T = 0$

on a : $\psi(x,t) = A \int \tilde{\varphi}(p) e^{i(px - E_p t)} dp \Rightarrow \varphi_E(x) = A \int e^{ipx} \tilde{\varphi}_E(p) dp$

d'où : $\tilde{\varphi}_E(p) = \text{cte}/(p - ik'_E)$ (avec $k'_E = \sqrt{2m(V_0 - E)}$) $\Rightarrow \sigma_E(p) = \text{cte}^2/(p^2 + k_E'^2)$

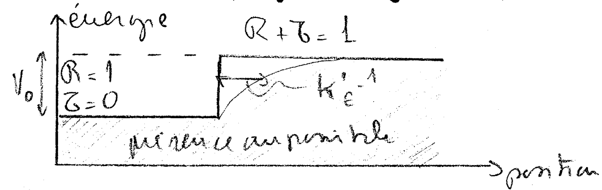
• Les énergies interdites. $\quad E < 0$

on pose $k_E^2 = -2mE$ et $k'_E = 2m(V_0 + |E|)$ on aura $a_+ = 0$ et $a'_- = 0$

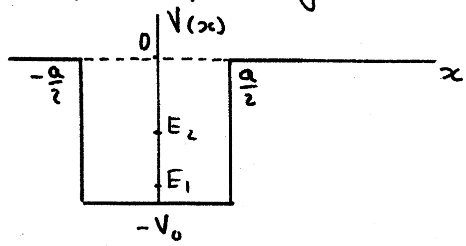
d'où : $\varphi_E(x) = a_- e^{k_E x}$ si $x < 0$ et $\varphi_E(x) = a'_+ e^{-k'_E x}$ si $x > 0$

on a $\varphi_E(x)$ et $\varphi'_E(x)$ non continues en $x = 0$, donc il n'existe pas de fonction d'onde admissible pour $E < 0$.

Un quanton ne peut avoir une énergie inférieure à la valeur minimale du potentiel.



4) Le puits plat fini $E > -V_0$



$V(x) = 0$ si $|x| > a/2$ $\quad V(x) = -V_0$ si $|x| < a/2$

$x \leq -\frac{a}{2}$: $\varphi(x) = b_+ e^{ipx} + b_- e^{-ipx}$

$|x| \leq \frac{a}{2}$: $\varphi(x) = c_+ e^{ip'x} + c_- e^{-ip'x}$

$x \geq \frac{a}{2}$: $\varphi(x) = d_+ e^{ipx} + d_- e^{-ipx}$

$p^2 = 2mE$, $p'^2 = 2m(E+V_0)$.

Si $-V_0 < E < 0$ $\quad p = iK$, $K^2 = -2mE$

. Les états liés

_Parité : on prend $-V_0 < E < 0$. Symétrie $\Rightarrow |\varphi(x)| = |\varphi(-x)| \Rightarrow \varphi(-x) = e^{i\alpha}\varphi(x)$

$\Rightarrow e^{i\alpha} = \pm 1$ (+ → fonctions paires , − → fonctions impaires) on aura entre les divers coefficients les relations : $d_- = \pm b_+$; $c_- = \pm c_+$; $b_- = \pm d_+$

_Les énergies propres : on a $-V_0 < E < 0 \Rightarrow p = iK$, $K^2 = -2mE$

on a $d_- = 0 \Rightarrow b_+ = 0$. On aura deux classes de fonctions d'onde.

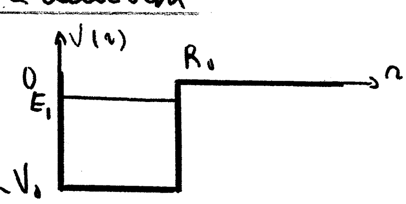
Fonctions paires		Fonctions impaires	
$x < -\frac{a}{2}$:	$\varphi(x) = D e^{Kx}$	$x < -\frac{a}{2}$:	$\varphi(x) = -D e^{Kx}$
$\|x\| < \frac{a}{2}$:	$\varphi(x) = C \cos p'x$	$\|x\| < \frac{a}{2}$:	$\varphi(x) = C \sin p'x$
$x > \frac{a}{2}$:	$\varphi(x) = D e^{-Kx}$	$x > \frac{a}{2}$:	$\varphi(x) = D e^{-Kx}$
continuité $\Rightarrow p'.\mathrm{tg}(p'a/2) = K$		continuité $\Rightarrow p'.\mathrm{cotg}(p'a/2) = -K$	

on obtient une seule relation : $\cos(p'a) + \eta(E)\sin(p'a) = 0$ $\qquad \eta(E) = \frac{K^2 - p'^2}{2Kp'}$

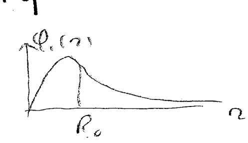
on a donc une quantification de l'énergie. On fait une résolution graphique.

on pose $q^2 = 2mV_0 \Rightarrow |\cos(p'a/2)| = p'/q$ et $|\sin(p'a/2)| = p'/q$

_Le deutéron



Puits plat à coeur dur :



$V(r) = 0$ si $r > R_0$; $V(r) = -V_0$ si $0 < r < R_0$; $V(r) = \infty$ si $r < 0$

on doit avoir $\varphi(0) = 0$ donc on ne considère que les fonctions impaires définies précédemment. On aura : $\sin(p'a/2) = p'/q$

On aura un seul état lié E_1 ; donc $p'/q \simeq 1 \Rightarrow V_0 \gg |E_1| \Rightarrow p'a \simeq \pi$.

On pourra ajouter le terme centrifuge du potentiel : $V^{(l)}_{centr} = \frac{l(l+1)}{2mr^2}$

• Les états de diffusion $E > 0$

- transmission et réflexion. on a continuité de φ et φ' en $x = \pm \frac{a}{2}$ d'où pour $E > 0$ (donc avec $d_- = 0$) on aura les relations :

$$b_+ e^{-ipa/2} + b_- e^{ipa/2} = c_+ e^{-ip'a/2} + c_- e^{ip'a/2} \qquad \varphi(-a/2)$$

$$p\left(b_+ e^{-ipa/2} - b_- e^{ipa/2}\right) = p'\left(c_+ e^{-ip'a/2} - c_- e^{ip'a/2}\right) \qquad \varphi'(-a/2)$$

$$c_+ e^{ip'a/2} + c_- e^{-ip'a/2} = d_+ e^{ipa/2} \qquad \varphi(a/2)$$

$$p'\left(c_+ e^{ip'a/2} - c_- e^{-ip'a/2}\right) = p d_+ e^{ipa/2} \qquad \varphi'(a/2)$$

on a les facteurs de réflexion et de transmission en amplitude : $A_r = \frac{b_-}{b_+}$ et $A_t = \frac{d_+}{b_+}$

on obtiendra : $A_r = \dfrac{i \frac{p'^2 - p^2}{2pp'} \sin p'a}{\cos p'a - i \frac{p'^2+p^2}{2pp'} \sin p'a} e^{-ipa}$, $A_t = \dfrac{1}{\cos p'a - i \frac{p'^2+p^2}{2pp'} \sin p'a} e^{-ipa}$

d'où avec : $p^2 = 2mE$ $\quad p'^2 = 2m(E+V_0)$ $\quad q^2 = 2mV_0$ on aura les coefficients :

$$\mathcal{R} = |A_r|^2 = \frac{(q^2/2pp')^2 \sin^2 p'a}{1 + (q^2/2pp')^2 \sin^2 p'a} \quad ; \quad \mathcal{T} = |A_t|^2 = \frac{1}{1 + (q^2/2pp')^2 \sin^2 p'a}$$

- transparences (minimums de $\mathcal{R}(E)$)

$\mathcal{R}(E) = 0 \Rightarrow p'a = n\pi \Rightarrow \mathcal{T} = 1$ $\quad (\mathcal{R} + \mathcal{T} = 1)$

- résonances (maximums de $\mathcal{R}(E)$)

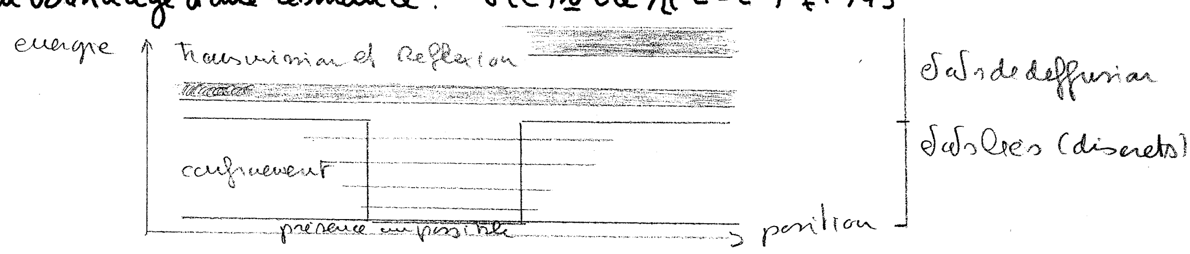
$\mathcal{R}(E)$ maxima $\Rightarrow p'a \simeq (n + \frac{1}{2})\pi$, $\mathcal{R}(E)$ maxima $\Leftrightarrow R = \infty$, donc on a :

$\cos p'a - i \frac{p'^2 + p^2}{2pp'} \sin p'a = 0 \Rightarrow p$ imaginaire pur $\Rightarrow E < 0 \Rightarrow p = iK$, $K^2 = -2mE$

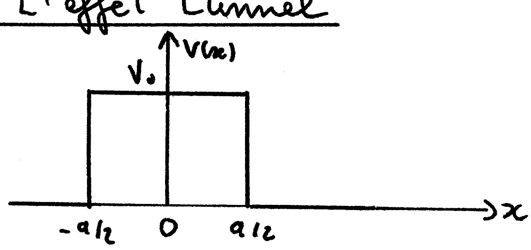
on aura $A \propto \dfrac{1}{E - E_k}$ pour $E \simeq E_k < 0$ (E_k énergie propre de l'état lié d'ordre k)

Si E_n^* est l'énergie propre de la résonance d'ordre n alors : $A \propto \dfrac{1}{E - E_n^* + i\frac{\Gamma_n}{2}}$ pour $E \simeq E_n^* > 0$

On trouve qu'au voisinage d'une résonance : $\sigma(E) \simeq \text{cte} / [(E - E^*)^2 + \Gamma^2/4]$



5) L'effet tunnel



$V(x) = 0$ si $|x| > a/2$ $\qquad V(x) = V_0$ si $|x| < a/2$

on utilise les expressions générales précédentes au seul changement de signe près de V_0.

On n'a plus d'états liés, puisque le potentiel n'a plus de caractère attractif.

. Le coefficient de transmission

- Si $E > V_0$ on pose $p^2 = 2mE$ $\quad p'^2 = 2m(E-V_0)$ $\quad q^2 = 2mV_0$

$$R = \frac{(q^2/2pp')^2 \sin^2 p'a}{1 + (q^2/2pp')^2 \sin^2 p'a} \qquad T = \frac{1}{1 + (q^2/2pp')^2 \sin^2 p'a}$$

- Si $0 < E < V_0$ on a pénétration du quanton dans la barrière de la quantité $1/K' = 1/\sqrt{2m(V_0-E)}$. Le quanton passe la barrière si $a \lesssim 1/K'$. La fonction d'onde $\varphi(x)$ de l'état stationnaire d'énergie s'écrit donc :

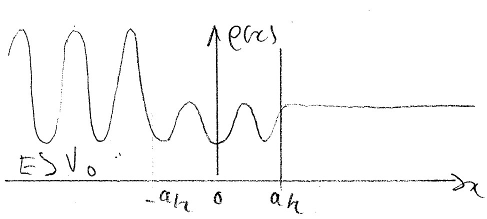
$x < -a/2$: $\varphi(x) = b_+ e^{ipx} + b_- e^{-ipx}$ $\qquad$ avec $p^2 = 2mE$

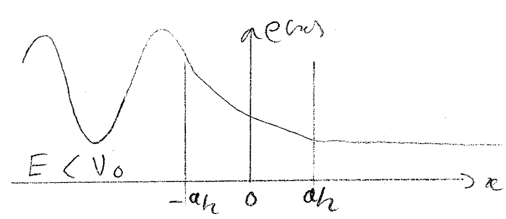
$|x| < a/2$: $\varphi(x) = c_+ e^{-K'x} + c_- e^{K'x}$ $\qquad$ avec $K'^2 = 2m(V_0 - E)$

$x > a/2$: $\varphi(x) = d_+ e^{ipx}$ $\qquad$ avec $p^2 = 2mE$

on a continuité de φ et φ' en $x = \pm a/2$. On trouve pour $A_t = d_+/b_+$:

$$A_t = \frac{e^{-ipa}}{\operatorname{ch} K'a - i\,\frac{p^2 - K'^2}{2pK'} \operatorname{sh} K'a} \Rightarrow T = |A_t|^2 = \frac{1}{1 + (q^2/2pK')^2 \operatorname{sh}^2 K'a}$$





. Tunnel ou saute mouton

C'est en passant par dessus la barrière que le quanton la franchit. On aura :

$$\left(\frac{E + \Delta E - V_0}{2m}\right)^{1/2} \frac{\hbar}{\Delta E} \gtrsim a \Rightarrow \sqrt{2m(V_0 - E)}\,.\,a = K'a < \hbar \qquad (\text{pour } \Delta E = 2(V_0 - E))$$

. L'approximation de la barrière épaisse

on suppose $1 \ll K'a = \sqrt{2m(V_0 - E)a^2}$ d'où $A_t = \frac{d_+}{b_+} = \frac{4ipK'}{(p+iK')^2} e^{-K'a} e^{-ipa}$

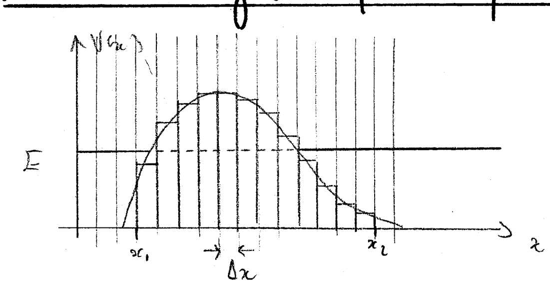
on a $p' = iK' \Rightarrow \frac{4ipK'}{(p+iK')^2} = \frac{2p}{p+p'} \cdot \frac{2p'}{p+p'} \Rightarrow \varphi(\frac{a}{2}) = \varphi(-\frac{a}{2}) \frac{2p}{p+p'} \cdot e^{-K'a} \cdot \frac{2p'}{p+p'}$ $\quad (K'a \gg 1)$

$\frac{2p}{p+p'}$: effet de la première discontinuité ; $e^{-K'a}$: atténuation dans le tunnel ;

$\frac{2p'}{p+p'}$: effet de la seconde discontinuité.

Si $K'a \gg 1$ alors $T = \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-2K'a}$ $\Rightarrow$ si $E = \frac{V_0}{2}$: $T = 4e^{-2K'a}$

. Barrière de forme quelconque



Entre x_1 et x_2 on a une succession de petites marches de potentiel dont la valeur moyenne dans Δx est $V(x)$

Si $P(x)$ est la probabilité de traverser le quanton en x alors on aura :

$P(x+\Delta x) = P(x)\,e^{-2K(x)\Delta x}$, avec $K(x)^2 = 2m(V(x)-E)$ donc

$P(x+dx) = P(x)(1-2K(x)dx) \Rightarrow \frac{dP(x)}{dx} = -2K(x)P(x) \Rightarrow P(x) = cte.\,e^{-2\int K(x)dx}$

d'où : $\mathcal{T} = \frac{P(x_2)}{P(x_1)} = \exp\left(-2\int_{x_1}^{x_2} K(x)\,dx\right)$

. Applications : la radioactivité alpha.

Si α est une grandeur d'action alors : $\mathcal{T} = \exp(-\alpha/\hbar)$; $\alpha = 2\int_{x_1}^{x_2}[2m(V(x)-E)]^{1/2}dx$

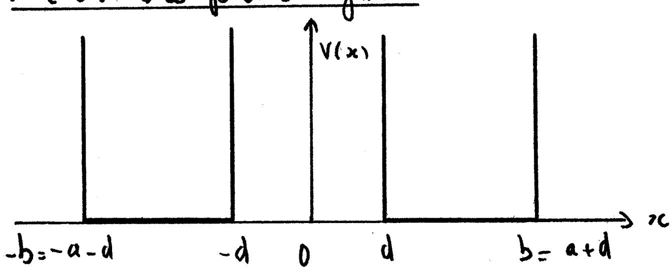
Si on fait l'approximation classique : $\alpha \gg \hbar$ alors on aura $\mathcal{T} \lll 1$

Pour un noyau : ${}^{A}_{Z}N$ alors $R \simeq A^{1/3}R_0$. Pour la particule α (de charge $2q_e$)

et le noyau (de charge $(Z-2)q_e \simeq Zq_e$ si Z grand) alors : $V_m \simeq \frac{2Ze^2}{R} = \frac{2Z}{A^{1/3}}\frac{e^2}{R_0} \simeq 3\frac{Z}{A^{1/3}}$ MeV

6) Le puits double

. Le double puits infini



On a si : $-a-d < x < -d$:

$\varphi_m^G(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(m\pi\frac{x+d}{a}\right)$

et ailleurs $\varphi_m^G(x) = 0$

avec $E_m^G = m^2\frac{\pi^2}{2ma^2}$

De même si : $d < x < a+d$: $\varphi_m^D(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(m\pi\frac{x-d}{a}\right)$ et ailleurs $\varphi_m^D(x) = 0$

avec $E_m^D = m^2\frac{\pi^2}{2ma^2}$.

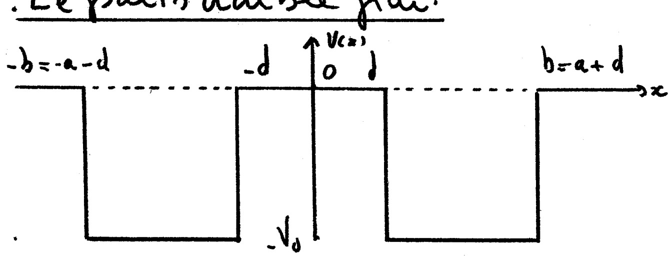
On a $E_m^D = E_m^G$ d'où une dégénérescence d'ordre deux (chaque niveau est double)

On a $\psi(x,0) = \alpha\varphi_m^G(x) + \beta\varphi_m^D(x) \Rightarrow \psi(x,t) = e^{-iE_mt}\psi(x,0)$ (car $E_m = E_m^G = E_m^D$)

Les fonctions d'onde d'un niveau d'énergie dégénéré forment un espace vectoriel de dimension égale au degré de dégénérescence.

On définit : $\varphi_m^{(S)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_m^G(x) + \varphi_m^D(x))$ et $\varphi_m^{(A)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_m^G(x) - \varphi_m^D(x))$

. Le puits double fini.



Un quanton ne peut rester confiné dans l'un des puits à cause de l'effet tunnel.

On pose : $K^2 = -2mE$, $\rho^2 = 2m(V_0+E)$ $(-V_0 < E < 0)$

Nous aurons les fonctions d'onde :

Fonctions symétriques

$0<x<d$: $\varphi^S(x) = A\,\mathrm{ch}\,Kx$

$d<x<b$: $\varphi^S(x) = B\sin p(b-x) + C\cos p(b-x)$

$b<x$: $\varphi^S(x) = D\,e^{-Kx}$

continuité $\Rightarrow$ $\mathrm{tg}\,pa = -\frac{p}{K}\,\frac{1+\mathrm{th}\,Kd}{\mathrm{th}\,Kd - \frac{p^2}{K^2}}$

niveaux d'énergie : $E_n^S = E_n - \frac{\delta E_n}{2}$

Fonctions antisymétriques

$\varphi^A(x) = A\,\mathrm{sh}\,Kx$

$\varphi^A(x) = B\sin p(b-x) + C\cos p(b-x)$

$\varphi^A(x) = D\,e^{-Kx}$

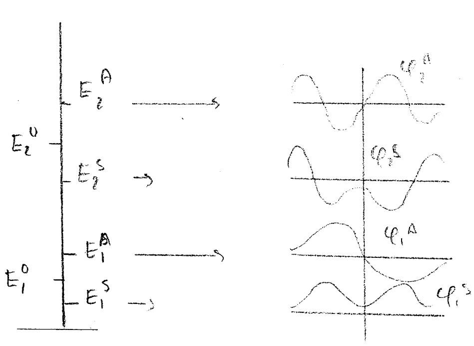
$\mathrm{tg}\,pa = -\frac{p}{K}\,\frac{1+\coth Kd}{\coth Kd - \frac{p^2}{K^2}}$

$E_n^A = E_n + \frac{\delta E_n}{2}$

où $\delta E_n \simeq \mathcal{E}\,e^{-2Kd}$ ($\mathcal{E}$ étant une énergie liée aux caractéristique du puits et du niveau) est l'écart entre les deux niveaux E_n^A et E_n^S.

Si $d \to \infty \Rightarrow e^{-2Kd} \to 0 \Rightarrow E_n = E_n^S = E_n^A$ $d°g = 2$ → pas d'effet tunnel

Si $Kd \gg 1$ → barrière épaisse $\Rightarrow \mathrm{th}\,Kd \simeq 1 - 2e^{-Kd}$



- on a alternance des niveaux correspondant à des fonctions d'onde symétriques et antisymétriques
- caractère pair (symétrique) de l'état fondamental
- existence de k zéros pour la fonction d'onde du $k^{ième}$ niveau excité ($k=0$ correspondant au fondamental)

On considère : $\varphi_n^G(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_n^S(x) + \varphi_n^A(x))$ et $\varphi_n^D(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_n^S(x) - \varphi_n^A(x))$

$\varphi_n^G(x)$ et $\varphi_n^D(x)$ ne sont pas des états stationnaires. Nous avons :

$\psi(x;0) = \varphi_n^G(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_n^S(x) + \varphi_n^A(x)) \Rightarrow \psi(x;t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(e^{-iE_n^S t}\varphi_n^{(S)}(x) + e^{-iE_n^A t}\varphi_n^A(x)\right)$

$\Rightarrow \psi(x;t) = e^{-iE_n^0 t}\left(\cos(\delta E_n t/2)\,\varphi_n^G(x) + i\sin(\delta E_n t/2)\,\varphi_n^D(x)\right)$

ψ oscille entre φ_n^G et φ_n^D, induisant une oscillation de la probabilité de présence du quanton entre les puits de gauche et de droite avec une pulsation δE_n

On a $\langle$ quanton localisé en $x \mid \psi\rangle_t = \langle x \mid \psi\rangle_t$ donc

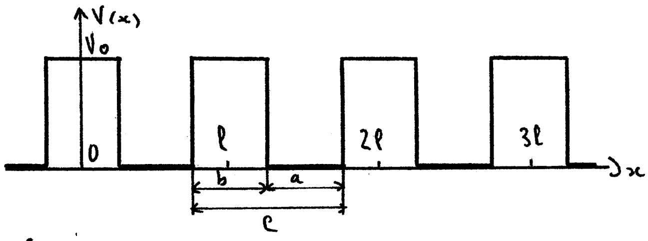
$\langle x|\psi\rangle_t = \langle x|G\rangle.\langle G|\psi\rangle_t + \langle x|D\rangle\langle D|\psi\rangle_t$

$\langle x|\psi\rangle_t = e^{-iE_n t}\varphi_n^G(x).\cos(\delta E_n t/2) + e^{-iE_n t}\varphi_n^D(x).\,i\sin(\delta E_n t/2)$

Tant que $\delta E_n t \ll 1$ alors : $\langle D|\psi\rangle_t \simeq \frac{1}{2}\delta E_n t$ or $\langle D|\psi_t\rangle \simeq \frac{1}{2\pi}\Delta E_n t.|A_t|$

Pour les temps t tels que $\frac{1}{\Delta E_n} \ll t \ll \frac{1}{\delta E_n}$ on aura alors : $\frac{\delta E_n}{\Delta E_n} \simeq \frac{1}{\pi}|A_t| = \frac{1}{\pi}\sqrt{\mathcal{T}}$

7) Potentiel en créneaux. Théorie des bandes



Le potentiel en créneaux est un potentiel périodique de période $l = a+b$

. La matrice de passage

on étudie les états stationnaires d'un quanton d'énergie E ($0 < E < V_0$) dans le potentiel $V(x)$

Dans le créneau à gauche de la n-ième barrière on a : $\varphi_n(x) = A_n e^{ip(x-nl)} + B_n e^{-ip(x-nl)}$

pour $(n-1)l + \frac{a}{2} \leq x \leq nl - \frac{a}{2}$ et avec $p^2 = 2mE$.

On a $\varphi_{n+1}(x) = A_{n+1} e^{-ipl} e^{ip(x-nl)} + B_{n+1} e^{ipl} e^{-ip(x-nl)}$

On fait une résolution matricielle : $\begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} A_{n+1} e^{-ipl} \\ B_{n+1} e^{ipl} \end{pmatrix}$

On a une similitude avec la simple barrière de potentiel. On a pour les coefficients $A_n, B_n, A_{n+1}e^{-ipl}, B_{n+1}e^{ipl}$ les correspondances : $(A_n, B_n) \to (b_+, b_-)$; $(A_{n+1}e^{-ipl}, B_{n+1}e^{ipl}) \to (d_+, d_-)$

Nous aurons : $\begin{pmatrix} b_+ \\ b_- \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} d_+ \\ d_- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_1 & M_2 \\ M_3 & M_4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_+ \\ d_- \end{pmatrix}$. On a $A_r = \frac{b_-}{b_+}$ et $A_t = \frac{d_+}{b_+}$

on fait $d_- = 0$ d'où $M_1 = \frac{1}{A_t} = (\mathrm{ch}\, K'a + i\eta\, \mathrm{sh}\, K'a) e^{ipa}$ et $M_3 = \frac{A_r}{A_t} = -i\varepsilon\, \mathrm{sh}\, K'a$

avec $p^2 = 2mE$ $\quad K'^2 = 2m(V_0 - E)$ $\quad \eta = \frac{K'^2 - p^2}{2K'p}$ $\quad \varepsilon = \frac{K'^2 + p^2}{2K'p}$

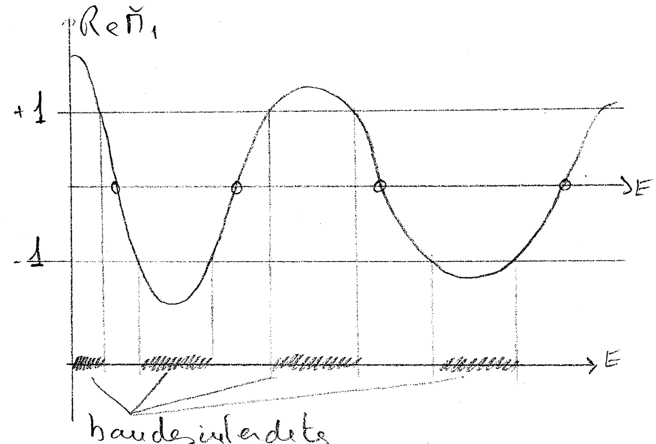
Avec des considérations de symétrie on a : $M_2 = \bar{M}_3$ et $M_4 = \bar{M}_1$, donc nous aurons : $M = \begin{pmatrix} M_1 & \bar{M}_3 \\ M_3 & \bar{M}_1 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} = \breve{M} \begin{pmatrix} A_{n+1} \\ B_{n+1} \end{pmatrix}$ avec $\breve{M} = \begin{pmatrix} M_1 e^{-ipl} & \bar{M}_3 e^{ipl} \\ M_3 e^{-ipl} & \bar{M}_1 e^{ipl} \end{pmatrix}$

. L'inégalité de quantification

on a $\begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} = \breve{M}^n \begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix}$ $\quad A_n$ et B_n doivent être finies. La matrice $\breve{M}^n$ doit rester bornée quand $n \to \pm\infty$. On écrit $\breve{M}$ sous forme diagonale, les valeurs propres de $\breve{M}^n$ (ou la puissance n-ième des valeurs propres de $\breve{M}$) doivent rester bornées lorsque $n \to \pm\infty$, donc les valeurs propres doivent être de module inférieur ou égal à l'unité. Donc $|\mathrm{Re}\, \breve{M}_1| \leq 1$. Si m' et m'' sont les valeurs propres de $\breve{M}$, alors $m' = e^{i\alpha}$, $m'' = e^{-i\alpha}$ avec $\cos\alpha = \mathrm{Re}\, \breve{M}_1$

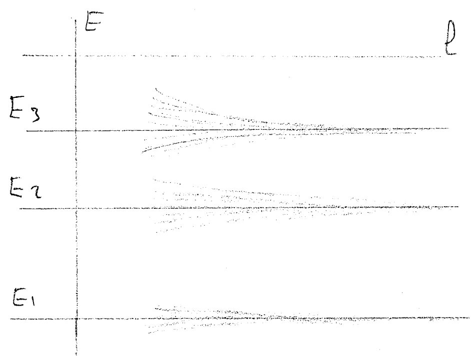
on aura donc : $\mathrm{Re}\, \breve{M}_1 = \mathrm{ch}\, K'a \cdot \cos pb + \eta\, \mathrm{sh}\, K'a \cdot \sin pb$

si on a $K'a \gg 1$ alors $\mathrm{ch}\, K'a$ et $\mathrm{sh}\, K'a$ sont confondus avec $e^{K'a} \gg 1$ donc on aura $|\cos pb + \eta \sin pb| \leq e^{-K'a} \sim 0$. Les énergies $E_n = n^2 \frac{\pi^2}{2mb^2}$ sont exclus rigoureusement.



Le spectre d'énergie d'un quanton placé dans un potentiel périodique en créneaux comporte une alternance de bandes permises et de bandes interdites.

. Spectre de bandes et délocalisation



Chaque niveau électronique est N fois dégénéré lorsque $\ell = +\infty$. Lorsqu'on rapproche les atomes, cette dégénérescence est levée par effet tunnel. Chaque niveau $(n = 1, 2, 3, \dots)$ donne naissance à N niveaux qui lorsque $N \gg 1$, ont l'apparence d'un continuum d'où le nom de bandes d'énergie.

. La quasi quantité de mouvement

on a $p^2 = 2mE \Rightarrow p = \pm\sqrt{2mE} \Rightarrow \varphi_{\pm p}(x) = e^{\pm ipx}$

$\Rightarrow \varphi_{\pm p}(x+\xi) = e^{\pm ip\xi}\varphi_{\pm p}(x)$.

On recherche des fonctions d'onde d'énergie E telles que $\varphi_E(x+\ell) = e^{i\delta}\varphi_E(x)$

donc telles que l'on ait : $\begin{pmatrix}A_n\\B_n\end{pmatrix} = e^{-i\delta}\begin{pmatrix}A_{n+1}\\B_{n+1}\end{pmatrix}$.

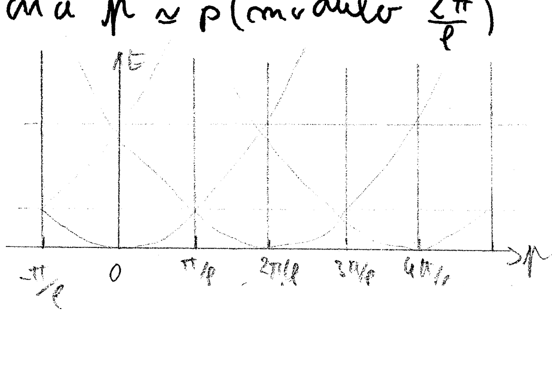
$\check{M}$ a deux valeurs propres $m' = e^{i\alpha}$ et $m'' = e^{-i\alpha}$ correspondant aux fonctions d'onde $\varphi_E^+(x)$ et $\varphi_E^-(x)$. Nous avons donc : $e^{i\delta} = e^{\pm i\alpha}$.

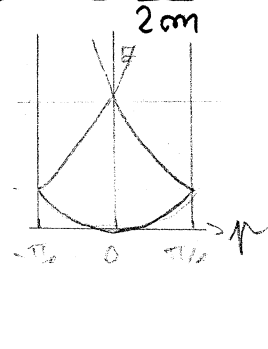
On pose $\alpha = \mathfrak{p}\ell$, donc : $\varphi_E^\pm(x+\ell) = e^{\pm i\mathfrak{p}\ell}\varphi_E(x)$

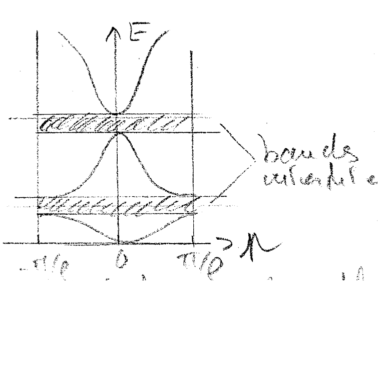
$\mathfrak{p}$ est appelé la quasi quantité de mouvement.

On a la relation de dispersion : $\cos \mathfrak{p}\ell = \mathrm{ch}\,K'a \cdot \cos pb + \eta\,\mathrm{sh}\,K'a \cdot \sin pb$

on a $\mathfrak{p} \simeq p$ (modulo $\frac{2\pi}{\ell}$) et $E \simeq \frac{\mathfrak{p}^2}{2m}$







. Reflexion de Bragg

on écrit : $\varphi_\epsilon^\pm(x) = e^{\pm ipx}\, u_{\pm p}(x)$ or $\varphi_\epsilon^\pm(x+\ell) = e^{\pm ip\ell}\varphi_\epsilon(x)$

donc $u_{\pm p}(x+\ell) = u_{\pm p}(x)$ (fonction de période ℓ)

$\varphi_\epsilon^\pm(x)$: fonction d'onde de Bloch.

Lorsque $e^{\pm ip\ell} = 1$ alors dans la zone de Brillouin $[-\frac{\pi}{\ell}, \frac{\pi}{\ell}]$ on a : $p = 0$ et $p = \pm\frac{\pi}{\ell}$

La condition $p = \pm\frac{\pi}{\ell}$ est analogue à la condition de Bragg qui régit la reflexion des rayons X par les plans d'atomes d'un cristal unidimensionnel distants de ℓ.

. La conductivité électrique des métaux

on a d'après la loi fondamentale de la dynamique : $F = -q_e\mathcal{E} = \frac{dp}{dt}$

on aura : $-q_e\mathcal{E} = \frac{dp}{dt}$ (p : quantité de mouvement)

C'est dans l'imperfection des cristaux que gît la clé de leur conductivité.