3.3 Dédoublement des niveaux d'énergie dans les doubles puits symétriques

Le dédoublement d'énergie est un phénomène directement lié à l'effet tunnel. Si la barrière était infranchissable, alors la particule resterait dans un des deux puits et il existerait des niveaux d'énergies séparés et identiques dans chacun des deux puits. Puisque la particule a la possibilité de franchir la barrière, on ne peut plus considérer chaque puits comme un système isolé et cela aboutit au dédoublement des niveaux d'énergie et à la levée de la dégénérescence. [1] [4]

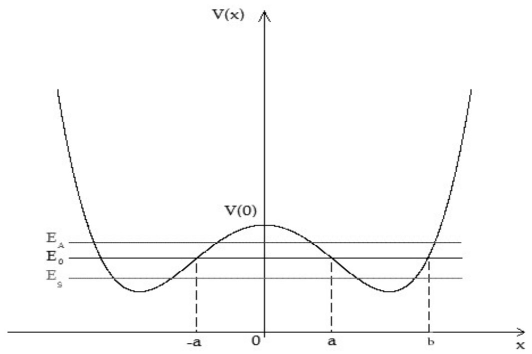

FIGURE 3.4 – Double puits de potentiel, a représente le point de rebroussement pour lequel $E = V$

Pour caractériser ce phénomène, on utilise la fonction d'onde établie dans la partie précédente pour construire les fonctions d'onde associées au système (à partir de la fonction d'onde d'un puits simple) :

$$\Psi_S(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\Psi(x) + \Psi(-x)], \Psi_A(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\Psi(x) - \Psi(-x)] \tag{49}$$

$\Psi_S(x)$ *est la fonction d'onde symétrique*
$\Psi_A(x)$ *est la fonction d'onde antisymétrique*

$$\Delta E = E_A - E_S = E_A - E_0 - (E_S - E_0) \tag{50}$$

Pour calculer $E_A - E_0$ et $E_S - E_0$, on procède de la manière suivante :

$$\Psi'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E_0 - V)\Psi = 0 \tag{51}$$

$$\Psi_S'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E_S - V)\Psi_S = 0 \tag{52}$$

$$\Psi_A'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E_A - V)\Psi_A = 0 \tag{53}$$

En multipliant l'équation (51) par Ψ_S, et la (52) par Ψ, et en soustrayant la première équation à la deuxième, on obtient finalement :

$$\Psi''\Psi_S - \Psi_S''\Psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E_S - E_0)\Psi\Psi_S = 0 \tag{54}$$

On intègre maintenant l'équation sur x de 0 à ∞, ce qui nous donne :

$$\int_0^\infty \Psi''\Psi_S dx - \int_0^\infty \Psi_S''\Psi dx + \frac{2m}{\hbar^2}(E_S - E_0)\int_0^\infty \Psi\Psi_S dx = 0 \tag{55}$$

On remarque :

$$\int_0^\infty \Psi\Psi_S dx \approx \frac{1}{\sqrt{2}} \tag{56}$$

Car $\Psi(x)\Psi(-x)$ *est négligeable partout dans l'espace*

Il vient que :

$$\Psi'(0)\Psi(0) - \frac{m}{\hbar^2}(E_0 - E_S) = 0 \tag{57}$$

On en déduit :

$$E_S - E_0 = \frac{-\hbar^2}{m}\Psi'(0)\Psi(0) \tag{58}$$

En effectuant un raisonnement analogue, on trouve que :

$$E_A - E_0 = \frac{\hbar^2}{m}\Psi'(0)\Psi(0) \tag{59}$$

Il vient finalement :

$$E_A - E_S = \frac{2\hbar^2}{m}\Psi'(0)\Psi(0) \tag{60}$$

On injecte maintenant la méthode WKB dans ce que l'on vient de faire. On obtient :

$$\Psi_{WKB}(0) = \frac{c}{\sqrt{p(0)}} e^{\frac{-1}{\hbar}\int_0^a pdx} \tag{61}$$

On déduit l'expression de c, la condition de normalisation de la fonction d'onde :

$$\int_0^\infty |\Psi_{WKB}(x)|^2 = 1 \tag{62}$$

On a donc :

$$c^2 \int_a^b \frac{1}{p} dx = 1 \tag{63}$$

On effectue le changement de variable : $x = \frac{pt}{m}$, il vient donc :

$$\frac{c^2}{m}\int_0^{\frac{T}{2}} dt = 1 \tag{64}$$

Avec T *le temps mis par la particule pour faire un aller-retour dans le puits*

Il vient alors :

$$\frac{c^2 T}{2m} = 1 \tag{65}$$

Donc :

$$c = \sqrt{\frac{2m}{T}} = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi}} \tag{66}$$

En remarquant également que :

$$\Psi'_{WKB}(0) = \frac{p(0)}{\hbar}\Psi_{WKB}(0) \tag{67}$$

Finalement, on en déduit donc que :

$$E_A - E_S = \frac{\omega\hbar}{\pi} e^{-\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{a} pdx} \tag{68}$$

On peut constater que la différence d'énergie est fonction de deux paramètres : le terme de pulsation $\hbar\omega$, ainsi que la largeur de la barrière (terme dans l'exponentielle). Cette différence d'énergie sera donc d'autant plus grande si l'énergie est importante et si la barrière est mince.

Par suite, on peut en déduire une expression pour T. En partant de :

$$v = \frac{dx}{dt} \tag{69}$$

On en déduit :

$$\int_0^{\frac{T}{2}} dt = \int_a^b \frac{dx}{v} \tag{70}$$

Et ainsi :

$$T = 2\int_a^b \frac{dx}{\sqrt{\frac{2(E-V(x))}{m}}} \tag{71}$$