

# Analyse semi-classique de l'effet tunnel.

Bernard Helffer (Nantes Université)

Rennes, 13 Février 2024

Dans cet exposé, destiné aux étudiants de 3ème et 4ème année, je voudrais montrer comment un problème décrit en mécanique quantique comme étant l'effet tunnel conduit à un traitement mathématique rigoureux dans le régime semi-classique. Même si je vais décrire les résultats dans un cas où la solution est plus ancienne, on peut dire que le traitement général (en toute dimension) remonte à des travaux des années 80 dus à Barry Simon et Helffer-Sjöstrand. Je vais illustrer cette mesure de l'effet tunnel dans le cas dit du double puits.

# Regardant Wikipedia

L'effet tunnel désigne la propriété que possède un objet quantique de franchir une barrière de potentiel même si son énergie est inférieure à l'énergie minimale requise pour franchir cette barrière. C'est un effet purement quantique, qui ne peut pas s'expliquer par la mécanique classique. Pour une telle particule, la fonction d'onde, dont le carré du module représente la densité de probabilité de présence, ne s'annule pas au niveau de la barrière, mais s'atténue à l'intérieur de la barrière (pratiquement exponentiellement pour une barrière assez large). Si, à la sortie de la barrière de potentiel, la particule possède une probabilité de présence non nulle, cela signifie qu'elle peut traverser cette barrière. Cette probabilité dépend des états accessibles de part et d'autre de la barrière ainsi que de l'extension spatiale de la barrière.

# Mécanique classique

Tout le monde se souvient de

$$\vec{\gamma} = \frac{1}{m} \vec{F}$$

En supposant que  $m = 1$  et que  $\vec{F} = -\text{grad}V$  où  $V$  est un potentiel, je préfère regarder le système qu'on appelle Hamiltonien

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt}(t) &= 2\xi(t) \\ \frac{d\xi}{dt}(t) &= -\text{grad}V(x(t)) \end{aligned}$$

On observe alors que pour une solution  $(x(t), \xi(t))$  de ce système différentiel on a

$$|\xi(t)|^2 + V(x(t)) = |\xi(0)|^2 + V(x(0)) = E.$$

(Conservation de l'énergie).

On peut alors discuter le cas dit du double puits en fonction de  $E$  et expliquer ainsi la phrase relative au "franchissement de la barrière".

# Mécanique quantique

On regarde une fonction d'onde  $\psi$  qu'on va faire vivre dans un espace de Hilbert  $\mathcal{H} := L^2(\mathbb{R}^d)$  (on peut prendre  $d = 1$  pour se faciliter la compréhension) dont on veut regarder l'évolution en fonction du temps.

Dans le problème dépendant du temps, cette fonction d'onde est solution de

$$\begin{aligned}(\partial\psi/\partial t)(t, \mathbf{x}) &= (S\psi)(t, \mathbf{x}) \\ \psi(0, \mathbf{x}) &= \psi_0(\mathbf{x}).\end{aligned}$$

$\psi_0 \in \mathcal{H}$  correspond à la condition initiale et  $S$  est un opérateur aux dérivées partielles découvert par Schrödinger

$$S = -h^2\Delta + V.$$

Ici  $h$  est la constante de Planck qu'on peut considérer (en tout cas qu'on va) comme très petite.  $\Delta$  est le Laplacien

$$\Delta = \frac{d^2}{dx^2} \text{ si } d = 1, \quad \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \text{ si } d = 2.$$

$V$  est le potentiel. C'est une fonction sur  $\mathbb{R}^d$ .

Sous certaines conditions sur  $V$ , on va montrer que cet opérateur est "diagonalisable" comme dans le cas d'une matrice symétrique et qu'il existe une base de vecteurs propres. La différence est qu'il y a une infinité de valeurs propres. Sous nos hypothèses, cette suite de valeurs propres  $\lambda_j(h)$  tend vers l'infini et on la range par ordre croissant et on tient compte de la multiplicité. Si on cherche des solutions du système sous la forme

$$\psi(t, \mathbf{x}) = e^{i\lambda t} \psi_0(\mathbf{x}),$$

on trouve l'équation

$$S\psi_0 = \lambda\psi_0,$$

ce qui conduit à prendre pour  $\lambda_0$  une valeur propre et pour  $\psi_0$  une fonction propre c'est à dire  $\psi_j \in \mathcal{H}$  telle que

$$S\psi_j(x, h) = \lambda_j(h)\psi_j(x, h).$$

# Mécanique semi-classique

On parle de limite semi-classique quand on regarde ce qui se passe pour le problème quantique quand  $\hbar$  tend vers 0. Par exemple que se passe-t-il pour la plus petite valeur propre ? et pour un vecteur propre associé ?

En supposant que

$$\int_{\mathbb{R}^d} |\psi_j(\mathbf{x}, \hbar)|^2 d\mathbf{x} = 1,$$

on peut se poser la question de la localisation puisque  $|\psi_j(\mathbf{x}, \hbar)|^2 d\mathbf{x}$  désigne la densité de présence.

Pour  $d = 1$ ,  $d\mathbf{x} := dx$ .

Pour  $d = 2$ ,  $\mathbf{x} = (x, y)$  et  $d\mathbf{x} := dx dy$ .

La probabilité pour la particule d'être localisée dans un domaine  $\Omega$  est donnée par:

$$\int_{\Omega} |\psi_j(\mathbf{x}, h)|^2 d\mathbf{x}$$

Pour  $\Omega$  fixé, on dira que (la famille)  $\psi_j(\cdot, h)$  n'est pas localisée dans  $\Omega$  si cette quantité tend vers 0 quand  $h$  tend vers 0.

On peut aussi être intéressé à une estimation plus précise de comment elle tend vers 0.



# L'oscillateur harmonique

C'est un des rares exemples où la réponse aux questions ci-dessus est obtenue par des calculs explicites. En dimension **1**, on a pour  $V(x) = x^2$  et  $n \geq 1$

$$\lambda_n(h) = (2n - 1)h$$

$$\phi_n(x, h) = c_n h^{-1/4} \phi_n(x/\sqrt{h}) \text{ avec } \phi_n(x) = \left(\frac{d}{dx} - x\right)^{n-1} e^{-x^2/2}.$$

On remarque que

- ▶ pour  $n$  fixé,  $\lambda_n(h)$  tend vers **0** qui correspond au minimum de  $V(x)$ .
- ▶ pour  $n$  fixé, et pour un intervalle  $]a, b[$  ne contenant pas **0**,

$$\int_a^b |\phi_n(x, h)|^2 dx = o(1)$$

quand  $h$  tend vers **0** (en fait est exponentiellement petit)

- ▶ Plus précisément,  $\phi_n(x; h)$  décroît exponentiellement (essentiellement) comme  $e^{-x^2/h}$

## Exercice avec un puits carré

Un autre exemple instructif avec des résultats explicites est le cas du puits carré. Je prends ( $d = 1$ ) et je suppose que  $V(x) = 0$  pour  $|x| < 1$  et  $V(x) = 1$  pour  $|x| \geq 1$ , et je regarde

$$-h^2 \frac{d^2}{dx^2} + V(x).$$

Pour la première fonction propre, je peux supposer qu'elle est paire. Je résous dans  $(-1, +1)$ , puis dans  $(1, +\infty)$  en imposant que la solution tend vers 0 en  $+\infty$ . Enfin je recolle les deux solutions en 1 pour obtenir qu'elle est de classe  $C^1$ . La condition de compatibilité donne l'équation aux valeurs propres

$$-\sqrt{\lambda} \sin(\sqrt{\lambda}/h) = \sqrt{1-\lambda} \cos(\sqrt{\lambda}/h).$$

Cela conduit à

$$\lambda(h) \sim h^2 \frac{\pi^2}{4}.$$

# Inégalités d'Agmon

Il est important de noter que ces propriétés restent dans le cadre où  $V(x)$  est avec un unique minimum global en  $0$ , qu'on suppose égal à  $0$ , et tendant vers  $+\infty$  à l'infini.

Si la valeur propre tend vers  $\inf V = 0$ , la décroissance n'est plus mesurée par  $\exp(-x^2/2h)$  mais, pour tout  $\eta > 0$  par  $\exp(-(1 - \eta)d(x)/h)$  avec

$$d(x) = \operatorname{sign} x \int_0^x V(t)^{1/2} dt$$

En dimension  $> 1$ , on peut montrer le même résultat en définissant  $d(x)$  comme la distance d'Agmon au minimum de  $V$ . On mesure la longueur d'une courbe  $\gamma$  par  $\int_0^1 V(\gamma(t))^{1/2} |\gamma'(t)| dt$ .

# Le cas du double puits

L'exemple typique en dimension 1 est, avec  $a < 0 < b$

$$V(x) = (x - a)^2(x - b)^2.$$

$V$  atteint maintenant son minimum en  $x = a$  et  $x = b$ .  $V$  a aussi un maximum local en  $x = (a + b)/2$ .

Tant que les valeurs propres sont en dessous de  $\frac{1}{16}(b - a)^2$ , le spectre est à une erreur près  $\mathcal{O}(h^\infty)$  la réunion du spectre obtenu "à gauche" et du spectre obtenu "à droite" en utilisant les résultats du problème à un puits (translaté de  $a$  ou de  $b$ ).

Tout ceci n'est pas spécifique de l'exemple et se traite à l'identique si  $V$  a deux minima et un maximum local.

## "Preuve"

On peut définir un problème de gauche en "bouchant" le puits de droite (i.e. en ajoutant un  $w_b$  à support près de  $b$  de sorte que  $V + w_b$  n'a plus qu'un minimum. Une fonction propre  $\phi_n^g$ , de ce problème est de fait une solution approchée du problème initial. On a en effet

$$(S - \lambda_n^g)\phi_n^g = w_b\phi_n^g$$

Le terme de droite en norme  $L^2$  presque comme  $\exp -d(b, a)/h$  avec

$$d(a, b) = \int_a^b \sqrt{V(t)} dt.$$

Le théorème spectral pour les opérateurs autoadjoints (extension du cas des matrices symétriques) dit alors que pour tout  $u$  (dans le domaine de l'opérateur)

$$\inf_j |\lambda - \lambda_j| \|u\|_{\mathcal{H}} \leq \|(S - \lambda)u\|_{\mathcal{H}}.$$

En appliquant cette inégalité avec  $u = \phi_n^g$ , on en déduit qu'il existe une valeur propre de  $S$  exponentiellement proche de  $\lambda_n^g$ . Ceci démontre une moitié de l'affirmation.

Attention, cela ne veut pas dire en général qu'il y a une fonction propre de  $S$  proche de  $\phi_n^g$  !!

# Le double puits symétrique

On prend maintenant le cas où

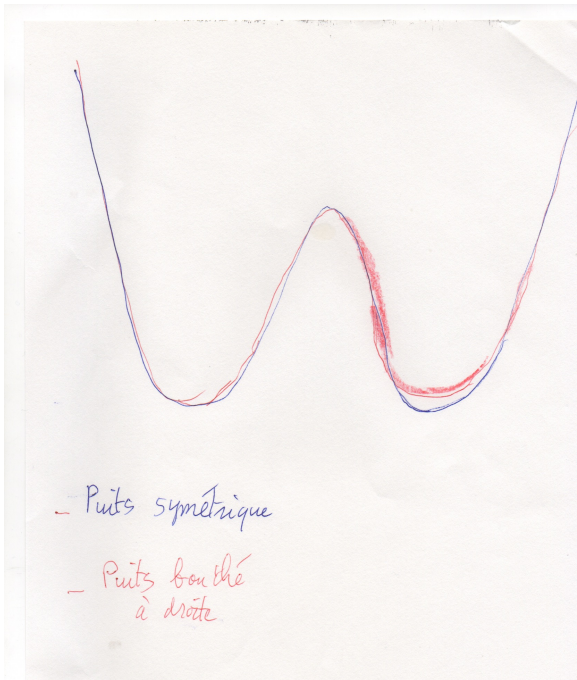
$$V(x) = V(-x)$$

(dans l'exemple on a donc  $a = -b$ ).

On suppose que  $V''(b) > 0$  pour que le bas du spectre du problème de droite (ou de gauche) soit très proche de celui de l'oscillateur harmonique.

Par symétrie, chaque fois qu'on a une valeur propre pour le problème de gauche, on a une valeur propre pour le problème de droite.

Ainsi les valeurs propres de  $S$  apparaissent par paire exponentiellement proches séparées par une trou de taille  $h$ .



- Puits symétrique

- Puits bouché  
à droite



# Écart ou pas écart

On peut alors se demander si pour cette paire on peut avoir une valeur propre de multiplicité  $2$ .

- ▶ L'intuition classique dit "Oui" par symétrie.
- ▶ L'approche quantique dit "Non" car (en dimension  $1$ ) car par la théorie de Sturm-Liouville dit que les valeurs propres sont simples. Cet argument ne marche pas quand  $n > 1$ . Que se passe-t-il en dimension plus grande que  $1$  ?
- ▶ L'approche semi-classique va simplement tâcher de répondre à la question : puisque c'est non nul peut-on calculer l'asymptotique de l'écart ?

# L'écart entre les deux premières valeurs propres

Revenant au problème de "gauche" et au problème symétrique de "droite", on peut choisir les premières fonctions propres correspondantes sous la forme

$$\phi_1^g(x) = \phi_1^d(-x), \lambda_1^g(h) = \lambda_1^d(h).$$

Les autres valeurs propres sont à distance de l'ordre de  $h$ .

Le point essentiel ici est que l'espace engendré par  $\phi_1^g$  et  $\phi_1^d$  est "très très" proche de l'espace propre  $\mathcal{V}_1(h)$  engendré par les deux premières fonctions propres de  $S$ .

Plus précisément, il existe une base orthonormée  $(\tilde{\phi}_1, \tilde{\phi}_2)$  de  $\mathcal{V}_1(h)$  telle que  $\tilde{\phi}_1(x) = \tilde{\phi}_2(-x)$ ,  $\phi_1^g$  est "très très" proche de  $\tilde{\phi}_1$  et  $\phi_1^d$  est "très très" proche de  $\tilde{\phi}_2$ .

Il nous reste à calculer la matrice de la restriction de  $(S - \lambda_g)$  à  $\mathcal{V}_1(h)$ . Cette matrice  $2 \times 2$  est réelle, symétrique et a la forme

$$\begin{pmatrix} \langle (S - \lambda_g)\tilde{\phi}_1, \tilde{\phi}_1 \rangle & \langle (S - \lambda_g)\tilde{\phi}_1, \tilde{\phi}_2 \rangle \\ \langle (S - \lambda_g)\tilde{\phi}_2, \tilde{\phi}_1 \rangle & \langle (S - \lambda_g)\tilde{\phi}_2, \tilde{\phi}_2 \rangle \end{pmatrix}$$

Les deux éléments sur la diagonale sont égaux et le calcul matriciel nous indique que

$$\begin{aligned} \lambda_2(h, S) - \lambda_1(h, S) &= 2|\langle (S - \lambda_g)\tilde{\phi}_1, \tilde{\phi}_2 \rangle| \\ &\text{" très très proche " de} \\ &2|\langle (S - \lambda_g)\phi_1^g, \phi_1^d \rangle| \end{aligned}$$

Ce terme est appelé le coefficient d'effet tunnel.

On a

$$\langle (S - \lambda_g)\phi_1^g, \phi_1^d \rangle = \langle w_b \phi_1^g, \phi_1^d \rangle$$

On observe maintenant (en regardant le support de  $w_b$  que

$$\langle w_b \phi_1^g, \phi_1^d \rangle = \int_0^{+\infty} w_b(x) \phi_1^g(x) \phi_1^d(x) dx.$$

Avec en tête les équations vérifiées par  $\phi_1^g$  et  $\phi_1^d$  et que  $w_a$  est nulle sur  $[0, +\infty]$ , on obtient après deux intégrations par partie

$$\begin{aligned} \int_0^{+\infty} w_b(x) \phi_1^g(x) \phi_1^d(x) dx &= -h^2(\phi_1^g)'(0)(\phi_1^d)(0) + h^2(\phi_1^d)'(0)(\phi_1^g)(0) \\ &= 2h^2(\phi_1^g)'(0)(\phi_1^g)(0) \end{aligned}$$

On connaît assez bien  $\phi_1^g$  via ce qui est appelé un développement WKB.

C'est plus facile en dimension 1

$$\phi_1^g(x) \sim h^{-1/4} a(x, h) \exp -\frac{1}{h} \int_a^x \sqrt{V(t)} dt$$

et on a un développement analogue pour la dérivée.

On trouve finalement

$$\lambda_2(h, S) - \lambda_1(h, S) \sim \alpha h^{1/2} \exp -\frac{1}{h} \int_{-b}^b \sqrt{V(t)} dt.$$

J'ai certes expliqué plus en détail le cas de la dimension 1, mais l'approche est de fait générale.

Il faut alors réinterpréter la quantité de manière plus géométrique comme la distance d'Agmon entre les deux minima de  $V$ .

Etrangement, le récit des physiciens dans leurs ouvrages pédagogiques ne semble pas avoir été modifié par ces résultats mathématiques des années 1980 qui sont valables en toute dimension.

## Retour à la traversée de la barrière

On peut montrer (regarder les vecteurs propres de la matrice  $2 \times 2$  dans la base  $(\tilde{\phi}_1, \tilde{\phi}_2)$ ) que de fait

$$\tilde{\phi}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1 + \phi_2), \quad \tilde{\phi}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1 - \phi_2),$$

où  $\phi_1$  et  $\phi_2$  sont les vecteurs propres de  $S$ .

Si on revient à l'équation d'évolution avec comme condition initiale

$$\psi_0 = \tilde{\phi}_1.$$

On a alors par un calcul élémentaire

$$\psi(t, x) = \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{i\lambda_1 t} \phi_1 + e^{i\lambda_2 t} \phi_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\lambda_1 t} (\phi_1 + e^{i(\lambda_2 - \lambda_1)t} \phi_2)$$

Pour  $t = \pi/(\lambda_2 - \lambda_1)$ , on obtient  $|\psi(t, x)| = |\tilde{\phi}_2(x)|$ .

Ainsi, la fonction d'onde a mis un temps égal à  $\pi/(\lambda_2 - \lambda_1)$  pour traverser la barrière, c'est à dire, compte-tenu de l'asymptotique de  $\lambda_2 - \lambda_1$  un temps exponentiellement long.

# Exercice

Faire les calculs explicites pour un double puits "carré", c'est à dire avec  $V = 1$  si  $|x| > 1$  et si  $|x| < 1/2$  et  $V = 0$  ailleurs.

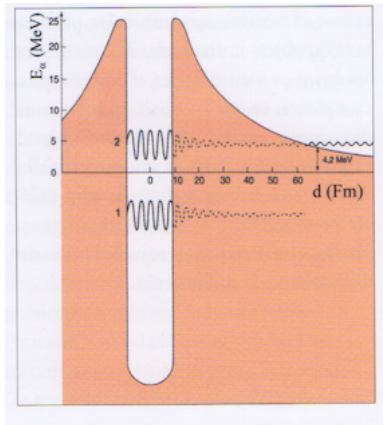


# La puce sur l'éléphant ou "the flea on the elephant"


La localisation d'une fonction propre dans le problème du double puits est très instable dès que l'on détruit la symétrie.





# Zoom




MERCI

 S. Agmon, *Lectures on exponential decay of solutions of second order elliptic equations: bounds on eigenfunctions of N-body Schrodinger operators*, Princeton Univ. Press, NJ, 1982.

 B. Helffer and J. Sjöstrand,  
six papers on multiple wells in the semi-classical limit  
1983-1986.

 Didier Robert.  
Analyse semi-classique de l'effet tunnel.  
Astérisque, tome 145-146 (1987). Séminaire Bourbaki.

 B. Simon,  
Series of four papers in the eighties.