www.cafeplanck.com

Le puits potentiel rectangulaire

Mécanique Quantique

Hossein Rahimzadeh

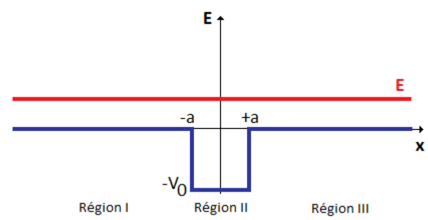
8/19/2008

Le puits potentiel rectangulaire

$$V(x)=\begin{cases}0 & , \quad x<-a \\ -V_0 & , \quad -a<x<a \\ 0 & , \quad x>a\end{cases}$$

Le cas $E>0$

Les états non liés correspondants à la diffusion d'un flux de particules



Région I	**Frontière X= -a**	**Région** II	**Frontière X= a**	**Région** III
$\hat{H}u(x)=Eu(x)$		$\hat{H}u(x)=Eu(x)$		$\hat{H}u(x)=Eu(x)$
$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right]u(x)=Eu(x)$		$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right]u(x)=Eu(x)$		$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right]u(x)=Eu(x)$
$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}u(x)+V(x)u(x)=Eu(x)$		$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}u(x)+V(x)u(x)=Eu(x)$		$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}u(x)+V(x)u(x)=Eu(x)$
$V(x)=0$		$V(x)=-V_0$		$V(x)=0$
$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}u(x)=Eu(x)$		$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}u(x)-V_0u(x)=Eu(x)$		$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}u(x)=Eu(x)$
$\frac{d^2}{dx^2}u(x)+\frac{2mE}{\hbar^2}u(x)=0$		$\frac{d^2}{dx^2}u(x)+\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}u(x)=0$		$\frac{d^2}{dx^2}u(x)+\frac{2mE}{\hbar^2}u(x)=0$
$\frac{d^2}{dx^2}u(x)+k^2u(x)=0$ où $k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$		$\frac{d^2}{dx^2}u(x)-q^2u(x)=0$ où $q^2=\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}$		$\frac{d^2}{dx^2}u(x)+k^2u(x)=0$ où $k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$
$u_I(x)=e^{ikx}+Re^{-ikx}$ où $k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$		$u_{II}(x)=Ae^{iqx}+Be^{-iqx}$ où $q^2=\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}$		$u_{III}(x)=Te^{ikx}$ où $k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$

Les conditions de continuités :

À $x=-a$:

1. $u_I(-a)=u_{II}(-a)\Rightarrow e^{-ika}+Re^{ika}=Ae^{-iqa}+Be^{iqa}$
2. $u'_I(-a)=u'_{II}(-a)\Rightarrow ike^{-ika}-ikRe^{ika}=iqAe^{-iqa}-iqBe^{iqa}$

À $x=a$:

3. $u_{II}(a)=u_{III}(a)\Rightarrow Ae^{iqa}+Be^{-iqa}=Te^{ika}$
4. $u'_{II}(a)=u'_{III}(a)\Rightarrow iqAe^{iqa}-iqBe^{-iqa}=ikTe^{ika}$

Égalité de j :

$$j_I=j_{II}=j_{III}\Rightarrow \frac{\hbar k}{m}-\frac{\hbar k}{m}|R|^2=\frac{\hbar q}{m}|A|^2-\frac{\hbar q}{m}|B|^2=\frac{\hbar k}{m}|T|^2\Rightarrow k\left(1-|R|^2\right)=q(|A|^2-|B|^2)=q|T|^2$$

Trouvons R et T :

$$\begin{cases}-Re^{ika}+0\times T+Ae^{-iqa}+Be^{iqa}=-e^{-ika}\\ ikRe^{ika}+0\times T+iqAe^{-iqa}-iqBe^{iqa}=-ike^{-ika}\\ 0\times R-Te^{ika}+Ae^{iqa}+Be^{-iqa}=0\\ 0\times R-ikTe^{ika}+iqAe^{iqa}-iqBe^{-iqa}=0\end{cases}$$

$$\begin{pmatrix}-e^{ika} & 0 & e^{-iqa} & e^{iqa}\\ ike^{ika} & 0 & iqe^{-iqa} & -iqe^{iqa}\\ 0 & -e^{ika} & e^{iqa} & e^{-iqa}\\ 0 & -ike^{ika} & iqe^{iqa} & -iqe^{-iqa}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}R\\ T\\ A\\ B\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-e^{-ika}\\ -ike^{-ika}\\ 0\\ 0\end{pmatrix}$$

Donc,

Coefficient de réflexion	$R=ie^{-2ika}\dfrac{(q^2-k^2)\sin 2qa}{2kq\cos 2qa-i(q^2+k^2)\sin 2qa}$
Coefficient de transmission	$T=e^{-2ika}\dfrac{2kq}{2kq\cos 2qa-i(q^2+k^2)\sin 2qa}$

Les cas particuliers :

1-Absence de réflexion

$$E \gg V_0 \;\Rightarrow\; q^2 = \frac{2m(\overbrace{E+V_0}^{E})}{\hbar^2} \simeq k^2 \;\Rightarrow\; q = k \;\Rightarrow\; R = 0$$

2-Absence de transmission

$$E \to 0 \;\Rightarrow\; k \to 0 \;\Rightarrow\; T = 0$$

3-Absence de réflexion et transmission totale

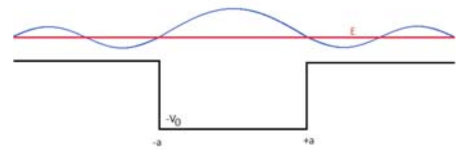
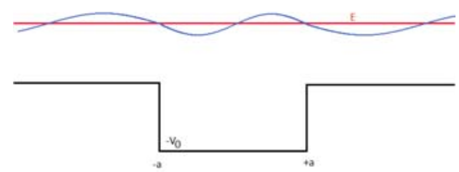
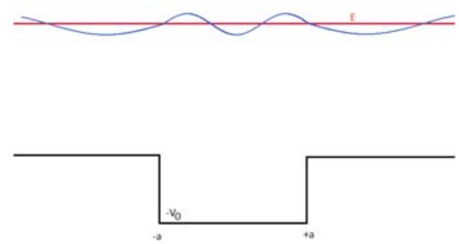
Lorsque la largeur du puits sera égale à un multiple entier de la demi-longueur d'onde dans la région II , il y aura interférence destructive des ondes réfléchies à $x = -a$ et $x = a$, donc absence de réflexion et transmission totale. comme si le puits est transparent.

$2a = n\dfrac{\lambda}{2}$, $n = 1, 2, 3, \ldots$ donc,

$$\begin{cases} \boxed{\lambda = \dfrac{4a}{n} \;,\; n = 1,2,3,\ldots} \\ q = \dfrac{2\pi}{\lambda} = \dfrac{2\pi}{\frac{4a}{n}} = \dfrac{n\pi}{2a} \;,\; n = 1,2,3,\ldots \Rightarrow \begin{cases} q^2 = \dfrac{2m(E+V_0)}{\hbar^2} \Rightarrow \dfrac{n^2\pi^2}{4a^2} = \dfrac{2m(E+V_0)}{\hbar^2} \Rightarrow \boxed{E = -V_0 + \dfrac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{8ma^2} \;,\; n = 1,2,3,\ldots} \\ \sin 2qa = \sin(n\pi) = 0 \Rightarrow \begin{cases} \boxed{R = 0} \\ \boxed{T = 1} \end{cases} \end{cases} \end{cases}$$

Autrement dit, il existe des valeurs particulières de l'énergie pour lesquelles le potentiel ne rétrodiffuse pas les particules.

Exemple :

$n=1 \Rightarrow \begin{cases} \lambda_1 = 4a \\ E_1 = -V_0 + \frac{1}{8}\frac{\hbar^2\pi^2}{ma^2} \end{cases}$	
$n=2 \Rightarrow \begin{cases} \lambda_1 = 2a \\ E_1 = -V_0 + \frac{1}{2}\frac{\hbar^2\pi^2}{ma^2} \end{cases}$	
$n=3 \Rightarrow \begin{cases} \lambda_1 = \frac{4a}{3} \\ E_1 = -V_0 + \frac{9}{8}\frac{\hbar^2\pi^2}{ma^2} \end{cases}$	

Analogie Dans le cas d'absence de réflexion et transmission totale :

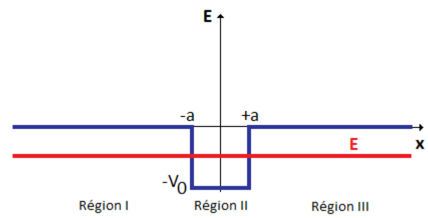
Ceci est analogue au phénomène optique observé lorsqu'une région d'épaisseur $\frac{\lambda}{2}$ est située entre deux régions ayant le même indice de réfraction, plus élevé que celui de la région centrale.

Effet Ramsauer :

Ce phénomène de résonance de transmission, appelé effet Ramsauer, s'observe lorsque des électrons sont diffusés sur des atomes des gaz rares. Les atomes semblent transparents à certaines énergies lorsque les électrons les pénètrent et ressentent le potentiel positif du noyau qui joue le rôle du puits de potentiel.

Le cas $-V_0 < E < 0$

Les états stationnaires ou liés



Région I	Frontière X= -a	Région II	Frontière X= a	Région III
$\hat{H}u(x) = Eu(x)$		$\hat{H}u(x) = Eu(x)$		$\hat{H}u(x) = Eu(x)$
$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]u(x) = Eu(x)$		$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]u(x) = Eu(x)$		$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]u(x) = Eu(x)$
$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}u(x) + V(x)u(x) = Eu(x)$		$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}u(x) + V(x)u(x) = Eu(x)$		$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}u(x) + V(x)u(x) = Eu(x)$
$V(x) = 0$		$V(x) = -V_0$		$V(x) = 0$
$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}u(x) = Eu(x)$		$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}u(x) - V_0 u(x) = Eu(x)$		$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}u(x) = Eu(x)$
$\frac{d^2}{dx^2}u(x) - \frac{2m\lvert E\rvert}{\hbar^2}u(x) = 0$		$\frac{d^2}{dx^2}u(x) + \frac{2m(V_0 - \lvert E\rvert)}{\hbar^2}u(x) = 0$		$\frac{d^2}{dx^2}u(x) - \frac{2m\lvert E\rvert}{\hbar^2}u(x) = 0$
$\frac{d^2}{dx^2}u(x) - \kappa^2 u(x) = 0$ où $\kappa^2 = \frac{2m\lvert E\rvert}{\hbar^2}$		$\frac{d^2}{dx^2}u(x) + q^2 u(x) = 0$ où $q^2 = \frac{2m(V_0 - \lvert E\rvert)}{\hbar^2}$		$\frac{d^2}{dx^2}u(x) - \kappa^2 u(x) = 0$ où $\kappa^2 = \frac{2m\lvert E\rvert}{\hbar^2}$
Pour les états pairs : $u_I(x) = C_1 e^{\kappa x}$ où $\kappa^2 = \frac{2m\lvert E\rvert}{\hbar^2}$ Pour les états impairs : $u_I(x) = -C_1 e^{\kappa x}$ où $\kappa^2 = \frac{2m\lvert E\rvert}{\hbar^2}$		Pour les états pairs : $u_{II}(x) = A\cos(qx)$ où $q^2 = \frac{2m(V_0 - \lvert E\rvert)}{\hbar^2}$ Pour les états impairs : $u_{II}(x) = B\sin(qx)$ où $q^2 = \frac{2m(V_0 - \lvert E\rvert)}{\hbar^2}$		Pour les états pairs : $u_{III}(x) = C_2 e^{-\kappa x}$ où $\kappa^2 = \frac{2m\lvert E\rvert}{\hbar^2}$ Pour les états impairs : $u_{III}(x) = C_2 e^{-\kappa x}$ où $\kappa^2 = \frac{2m\lvert E\rvert}{\hbar^2}$

Première possibilités, les solutions paires :

Puisqu'il y a une symétrie selon l'axe $y = 0$, on aura :

$$\begin{cases} C_1 = C_2 = C \\ B = 0 \end{cases}$$

Donc,

$$u_I(x) = Ce^{\kappa x} \text{ où } \kappa^2 = \frac{2m|E|}{\hbar^2}$$

$$u_{II}(x) = A\cos(qx) \text{ où } q^2 = \frac{2m(V_0 - |E|)}{\hbar^2}$$

$$u_{III}(x) = Ce^{-\kappa x} \text{ où } \kappa^2 = \frac{2m|E|}{\hbar^2}$$

Les conditions de continuités :

Puisque le potentiel est symétrie on aura besoin aux conditions de continuités à seulement une borne :

À $x = a$:

1. $u_{II}(a) = u_{III}(a) \Rightarrow A\cos(qa) = Ce^{-\kappa a}$
2. $u'_{II}(a) = u'_{III}(a) \Rightarrow qA\sin(qa) = \kappa Ce^{-\kappa a}$

Alors,

$$\frac{\kappa}{q} = \tan(qa)$$

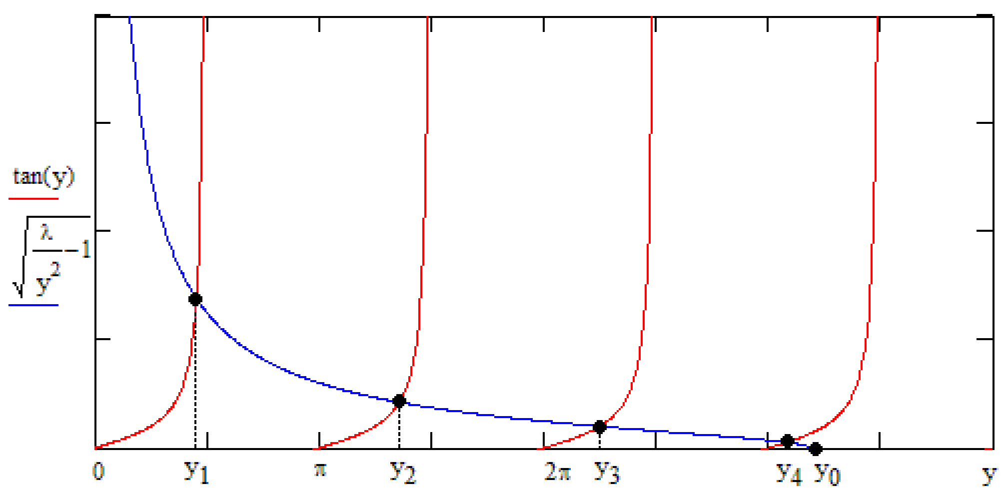
Posons $y = qa$:

$$\begin{cases} q = \dfrac{y}{a} \\ y^2 = q^2 a^2 \ \Rightarrow\ y^2 = \dfrac{2m(V_0 - |E|)}{\hbar^2} a^2 = \underbrace{\dfrac{2mV_0}{\hbar^2} a^2}_{\lambda} - \underbrace{\dfrac{2m|E|}{\hbar^2} a^2}_{\kappa^2} = \lambda - \kappa^2 a^2 \ \Rightarrow\ \kappa = \dfrac{\sqrt{\lambda - y^2}}{a} \end{cases}$$

Alors,

$$\tan y = \sqrt{\frac{\lambda}{y^2} - 1} \ \text{ où } \ y = qa \ \text{ et } \ \lambda = \frac{2mV_0}{\hbar^2} a^2$$

C'est l'équation Transcendantale dont on le résoudre par les méthodes graphique :

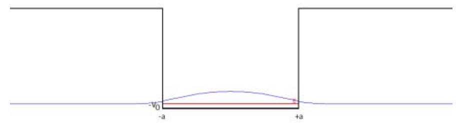
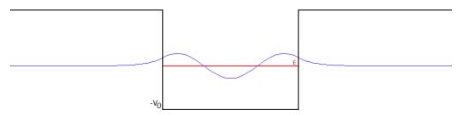


Il y a toujours au moins un état stationnaire pair dans le puits de potentiel (y_1).

Pour trouver y_0 :

$$\sqrt{\frac{\lambda}{y_0^2} - 1} = 0 \ \Rightarrow\ y_0 = \sqrt{\lambda} = \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar} a$$

Exemple :

$E_1 = -V_0 + \frac{\hbar^2 y_1^2}{2ma^2}$ $u_I(x) = Ce^{\kappa_1 x}$ où $\kappa_1^2 = \frac{2m\lvert E_1\rvert}{\hbar^2}$ $u_{II}(x) = A\cos(q_1 x)$ où $q_1^2 = \frac{2m(V_0 - \lvert E_1\rvert)}{\hbar^2}$ $u_{III}(x) = Ce^{-\kappa_1 x}$ où $\kappa_1^2 = \frac{2m\lvert E_1\rvert}{\hbar^2}$	
$E_2 = -V_0 + \frac{\hbar^2 y_2^2}{2ma^2}$ $u_I(x) = Ce^{\kappa_2 x}$ où $\kappa_2^2 = \frac{2m\lvert E_2\rvert}{\hbar^2}$ $u_{II}(x) = A\cos(q_2 x)$ où $q_2^2 = \frac{2m(V_0 - \lvert E_2\rvert)}{\hbar^2}$ $u_{III}(x) = Ce^{-\kappa_2 x}$ où $\kappa_2^2 = \frac{2m\lvert E_2\rvert}{\hbar^2}$	

Deuxième possibilités, les solutions impaires :

Puisqu'il y a une symétrie selon l'origine, on aura :

$$\begin{cases} -C_1 = C_2 = C \\ A = 0 \end{cases}$$

Donc,

$$u_I(x) = -Ce^{\kappa x} \text{ où } \kappa^2 = \frac{2m\lvert E\rvert}{\hbar^2}$$

$$u_{II}(x) = B\sin(qx) \text{ où } q^2 = \frac{2m(V_0 - \lvert E\rvert)}{\hbar^2}$$

$$u_{III}(x) = Ce^{-\kappa x} \text{ où } \kappa^2 = \frac{2m\lvert E\rvert}{\hbar^2}$$

Les conditions de continuités :

Puisque le potentiel est symétrie on aura besoin aux conditions de continuités à seulement une borne :

À $x = a$:

1. $u_{II}(a) = u_{III}(a) \Rightarrow B\sin(qa) = Ce^{-\kappa a}$
2. $u'_{II}(a) = u'_{III}(a) \Rightarrow qB\cos(qa) = -\kappa Ce^{-\kappa a}$

Alors,

$$\frac{\kappa}{q} = -\cot(qa)$$

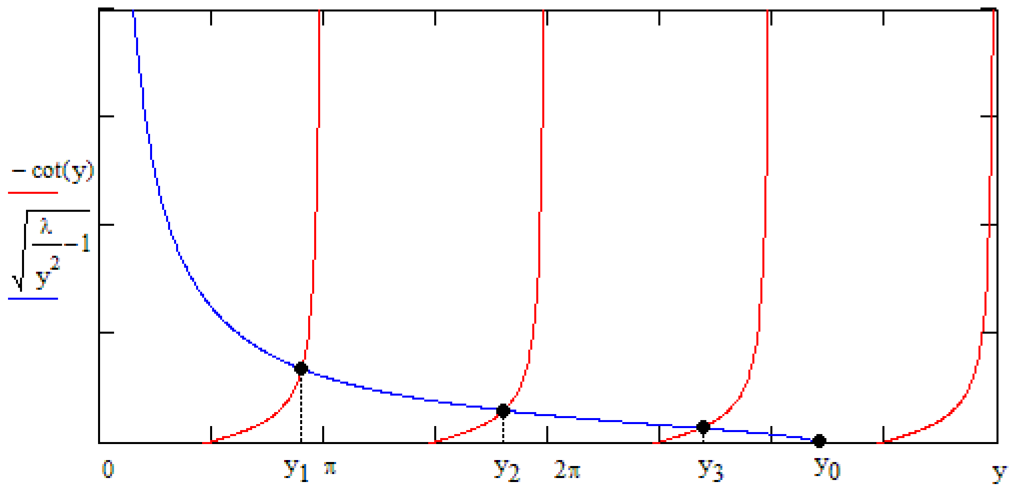
Posons $y = qa$:

$$\begin{cases} q = \dfrac{y}{a} \\ y^2 = q^2a^2 \;\Rightarrow\; y^2 = \dfrac{2m(V_0 - |E|)}{\hbar^2}a^2 = \underbrace{\dfrac{2mV_0}{\hbar^2}a^2}_{\lambda} - \underbrace{\dfrac{2m|E|}{\hbar^2}a^2}_{\kappa^2} = \lambda - \kappa^2 a^2 \;\Rightarrow\; \kappa = \dfrac{\sqrt{\lambda - y^2}}{a} \end{cases}$$

Alors,

$$-\cot y = \sqrt{\frac{\lambda}{y^2} - 1} \quad \text{où} \quad y = qa \quad \text{et} \quad \lambda = \frac{2mV_0}{\hbar^2}a^2$$

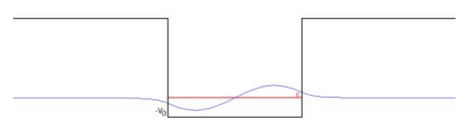
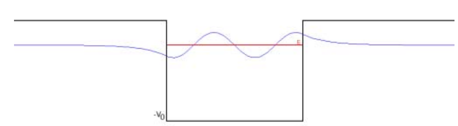
C'est l'équation Transcendantale dont on le résoudre par les méthodes graphique :



Pour trouver y_0 :

$$\sqrt{\frac{\lambda}{y_0^2}-1}=0 \;\Rightarrow\; y_0=\sqrt{\lambda}=\frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar}a$$

Exemple :

$E_1=-V_0+\frac{\hbar^2 y_1^2}{2ma^2}$ $u_I(x)=-Ce^{\kappa_1 x}$ où $\kappa_1^2=\frac{2m\lvert E_1\rvert}{\hbar^2}$ $u_{II}(x)=B\sin(q_1 x)$ où $q_1^2=\frac{2m(V_0-\lvert E_1\rvert)}{\hbar^2}$ $u_{III}(x)=Ce^{-\kappa_1 x}$ où $\kappa_1^2=\frac{2m\lvert E_1\rvert}{\hbar^2}$	
$E_2=-V_0+\frac{\hbar^2 y_2^2}{2ma^2}$ $u_I(x)=-Ce^{\kappa_2 x}$ où $\kappa_2^2=\frac{2m\lvert E_2\rvert}{\hbar^2}$ $u_{II}(x)=B\sin(q_2 x)$ où $q_2^2=\frac{2m(V_0-\lvert E_2\rvert)}{\hbar^2}$ $u_{III}(x)=Ce^{-\kappa_2 x}$ où $\kappa_2^2=\frac{2m\lvert E_2\rvert}{\hbar^2}$	

Quelques remarques :

1- Profondeur du puits :

$$y_0 = \sqrt{\lambda} = \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar} a$$

Donc,

$V_0 \uparrow$	$\lambda \uparrow$	$y_0 \uparrow$	Profondeur $\uparrow$
$V_0 \downarrow$	$\lambda \downarrow$	$y_0 \downarrow$	Profondeur $\downarrow$

2- si $V_0 \to \infty$

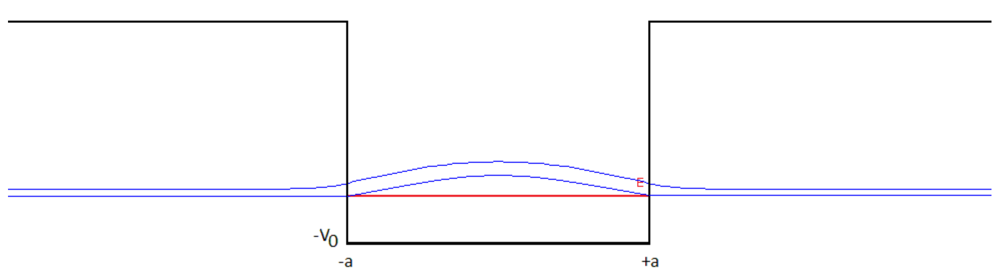
Solutions paires	$y \approx (n + \frac{1}{2})\pi$
Solutions impaires	$y \approx n\pi$
Solutions paires + Solutions impaires	$y \approx \frac{n\pi}{2}$

Dans le cas des solutions paires + solutions impaires :

$$y \approx \frac{n\pi}{2} \Rightarrow y^2 \approx \frac{n^2\pi^2}{4} \Rightarrow \frac{2m(V_0 - |E|)}{\hbar^2} a^2 \approx \frac{n^2\pi^2}{4} \Rightarrow E = V_0 - |E| = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{8ma^2}, n = 1, 2, 3, \cdots$$

C'est les solutions du puits infini.

3- Les solutions du puits infini sont toujours plus basses que celles du puits fini :



$$q_{\text{Fini}} \langle q_{\text{Infini}}$$

$$\frac{\hbar^2 q_{\text{Fini}}^2}{2m} \langle \frac{\hbar^2 q_{\text{Infini}}^2}{2m}$$