Traversée d'un puits de potentiel fini

Une particule qui se déplace sur un axe (Ox) est soumise au potentiel représenté suivant :

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si : } x < 0 & \text{Zone n°1} \\ -V_0 & \text{si : } 0 < x < d \text{ avec : } V_0 > 0 & \text{Zone n°2} \\ 0 & \text{si : } x > d & \text{Zone n°3} \end{cases}$$

1) Décrire le comportement d'une particule classique soumis à ce potentiel.

On suppose que l'amplitude de l'onde incidente vaut 1. On note r et t les coefficients de réflexion et de transmission en amplitude du puits. On s'intéresse aux états stationnaires. Les fonctions d'onde peuvent donc s'écrire sous la forme :

$$\psi(x,t) = \varphi(x)\ e^{-iEt/\hbar}$$

On pose :

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad \text{et} \quad q = \frac{\sqrt{2m\left(E + V_0\right)}}{\hbar}$$

2) Expliquer la forme proposée de $\psi(x,t)$.

3) Déterminer la forme générale de $\varphi(x)$ dans tout l'espace.

4) À l'aide des conditions aux limites, établir un système de 4 équations à 4 inconnues : r, t et deux constantes A et B. Ne pas le résoudre.

5) On suppose que $E \to 0$. Déterminer le coefficient de réflexion en énergie $R = |r|^2$ et discuter des différents cas possibles.

Correction

Correction

1) Le mouvement étant conservatif, l'énergie mécanique se conserve (notée $E > 0$). L'énergie potentielle étant constante par morceau, l'énergie cinétique sera également constante par morceau.

$$E = V + \mathcal{E}_c \quad \Rightarrow \quad \boxed{\mathcal{E}_{c,1/3} = E \quad \text{et} \quad \mathcal{E}_{c,2} = E + V_0}$$

La particule accélère dans la zone n°2 puis retrouve sa vitesse initiale dans la zone n°3. En particulier, la particule traverse toujours la barrière.

2) On cherche des états stationnaires, on peut donc écrire :

$$\psi(x,t) = \varphi(x) \times f(t)$$

On injecte cette solution dans l'équation de Schrödinger :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + V(x)\,\psi = i\hbar\,\frac{\partial\psi}{\partial t} \quad \Rightarrow \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\,\varphi'' f + V(x)\,\varphi f = i\hbar\,\varphi f'$$

On sépare les variables :

$$\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\varphi''}{\varphi} + V(x)}_{\text{fonction de } x} = \underbrace{i\hbar\,\frac{f'}{f}}_{\text{fonction de } t} = E$$

Une fonction de x ne peut être égale à une fonction de t que si ces fonctions sont constantes. On pose E la constante, car homogène à une énergie. Ainsi :

$$\frac{df}{dt} = -\frac{iE}{\hbar}\,f(t) \quad \Rightarrow \quad \boxed{f(t) = e^{-iEt/\hbar}}$$

3)

Zone n°1 et 3 : hors du puits

L'équation de Schrödinger donne :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2} = E\varphi \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2} + k^2\,\varphi = 0 \quad \text{avec :} \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Ainsi :

$$\varphi(x) = A'\,e^{ikx} + B'\,e^{-ikx}$$

L'amplitude de l'onde incidence (A') vaut 1 et par définition du coefficient de réflexion en amplitude :

$$\boxed{\varphi_1(x) = e^{ikx} + r\,e^{-ikx}}$$

Dans la zone 3, l'onde se propage seulement selon les x croissants, aucune onde ne vient de l'infini. Donc, par définition du coefficient de transmission en amplitude :

$$\boxed{\varphi_3(x) = t\,e^{ikx}}$$

Zone n°2 : dans le puits

L'équation de Schrödinger donne) :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2} - V_0\varphi = E\varphi \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2} + q^2\,\varphi = 0 \quad \text{avec :} \quad q = \frac{\sqrt{2m\,(E+V_0)}}{\hbar}$$

Ainsi :

$$\boxed{\varphi_2(x) = A\,e^{iqx} + B\,e^{-iqx}}$$

4) On a continuité de φ et de sa dérivée en $x = 0$ et $x = d$. Ainsi :

$$\begin{cases} [1] \quad \varphi_1(0) = \varphi_2(0) \quad \Rightarrow \quad 1 + r = A + B \\ [2] \quad \varphi_1'(0) = \varphi_2'(0) \quad \Rightarrow \quad k\,(1-r) = q\,(A-B) \\ [3] \quad \varphi_2(d) = \varphi_3(d) \quad \Rightarrow \quad A\,e^{iqd} + B\,e^{-iqd} = t\,e^{ikd} \\ [4] \quad \varphi_2'(d) = \varphi_3'(d) \quad \Rightarrow \quad q\Big[A\,e^{iqd} + B\,e^{-iqd}\Big] = kt\,e^{ikd} \end{cases}$$

5) Si $E \to 0$, alors $k \to 0$. Ainsi :

$$\begin{cases} [1] \quad 1 + r = A + B \\ [2] \quad 0 = A - B \\ [3] \quad A\,e^{iqd} + B\,e^{-iqd} = t \\ [4] \quad A\,e^{iqd} + B\,e^{-iqd} = 0 \end{cases}$$

La relation $[2]$ donne $\boxed{A = B}$. La relation $[4]$ donne alors :

$$2iA\,\sin(qd) = 0 \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} A = 0 \\ \text{ou} \\ \sin(qd) = 0 \end{cases}$$

Une question ? Un soucis de QRCode ? nicolasperrissin@gmail.com

Cas où $\boxed{A=0}$. La relation $[1]$ donne immédiatement :

$$r=-1 \quad \Rightarrow \quad \boxed{R=1}$$

L'intégralité de l'énergie est réfléchie : effet purement quantique.

Cas où sin(qd). On a donc : cos$(qd)=\pm 1$. La relation $[3]$ donne alors :

$$2A\cos(qd)=t \quad \Rightarrow \quad 2A=\pm t$$

La relation $[1]$ donne :

$$2A=1+r \quad \Rightarrow \quad \boxed{1+r=t}$$

Or, par conservation de l'énergie en régime stationnaire $|r|^2+|t|^2=1$ (en régime stationnaire, l'énergie ne peut pas s'accumuler dans le puits, elle est soit réfléchie, soit transmise).

$$t^2=1-r^2=(1+r)^2 \quad \Rightarrow \quad \boxed{r=0}$$

L'intégralité de l'énergie est transmise.

Conclusion : si la largeur du puits est correctement choisit (sin$(qd)=0$), alors la particule sera nécessairement transmise. Sinon, elle sera nécessairement réfléchie.