

LP 60 Puits de potentiel : exemples et applications
En physique quantique.

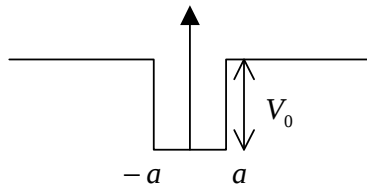
Intro : nous allons étudier ici des situations physiques très simples qui permettent la résolution exacte de l'équation de Schrödinger. Les potentiels considérés seront ici carrés, et nous verrons qu'en dépit de leur forme grossière ils constituent une base fondamentale pour l'interprétation de phénomènes divers, tant en mécanique statistique qu'en physique du solide. Ces potentiels sont appelés puits en raison de leur forme.

A) Le puit de potentiel carré:

1) Généralités:

Les forces qui lient les neutrons et les protons dans les noyaux sont des forces très intenses dont l'effet ne se fait sentir qu'à très courte portée. On modélise alors ces interactions par des potentiels de la forme:

$V = -V_0$ ($V_0 > 0$) pour $r < r_0$ et $V = 0$ pour $r \geq r_0$. De tels potentiels sont appelés potentiels carrés. Leur emploi a permis, en ajustant les paramètres V_0 et r_0 , de rendre compte qualitativement des phénomènes nucléaires, par exemple la liaison du proton et du neutron



constituant le noyau d'hydrogène. Par ailleurs, ils sont la base de développements à plusieurs dimensions ou à plusieurs puits qui modélisent des situations physiques plus complexes.

Pour l'étude de ce problème, nous nous placerons dans une situation unidimensionnelle, où les coordonnées d'espace seront repérées par x et les bornes du puits par $-a$ et a .

De manière générale, entre deux discontinuités, le potentiel V est constant et l'équation de Schrödinger aux états stationnaires va s'écrire:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V \cdot \psi(x) = E \cdot \psi(x). \text{ Deux cas se présentent alors:}$$

- si $E - V > 0$, on a $\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$, avec $k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V)}$
- si $E - V < 0$, on a $\psi(x) = Ae^{Kx} + Be^{-Kx}$, avec $k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V - E)}$

2) Etats liés $-V_0 < E < 0$

Il faut distinguer les trois domaines. Dans les domaines de potentiel V_0 , la solution générale s'écrit:

$$\begin{aligned} \psi_I(x) &= b_- e^{Kx} + b_+ e^{-Kx} \\ \psi_{II}(x) &= c_+ e^{ikx} + c_- e^{-ikx}, \text{ avec } K = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} \text{ et } k = \frac{\sqrt{2m(E + V_0)}}{\hbar} \\ \psi_{III}(x) &= d_- e^{Kx} + d_+ e^{-Kx} \end{aligned}$$

Les conditions aux limites vont nous permettre de déterminer les six constantes, ou au moins des relations entre elles.

Tout d'abord, la probabilité de présence de la particule ne peut tendre vers l'infini à l'infini, ce qui implique que $b_+ = d_- = 0$.

Par ailleurs, on remarque que les conditions physiques sont invariantes par symétrie autour du centre du puits, ce qui implique que le module de la fonction d'onde doit être une fonction paire de x , ce qui impose que $\psi(-x) = e^{i\alpha}\psi(x)$.

Cependant, la réflexion d'espace doit également vérifier que le symétrique du symétrique soit identique à l'objet, ce qui implique que $e^{2i\alpha}\psi(x) = \psi(x)$, ce qui impose que $e^{i\alpha} = \pm 1$. On peut donc, pour simplifier le problème, considérer séparément les fonctions d'ondes paires et les fonctions d'ondes impaires, dont la réunion donne l'ensemble des états stationnaires.

On doit alors avoir:

$$\begin{cases} b_- = \pm d_+ \\ c_- = \pm c_+ \\ d_- = \pm b_+ \end{cases}$$

On en déduit alors la forme générale des fonctions d'ondes:

Fonctions paires:

$$\psi_{I'}(x) = D.e^{Kx}$$

$$\psi_{II}(x) = C \cos(kx)$$

$$\psi_I(x) = D.e^{-Kx}$$

Fonctions impaires

$$\psi_{I'}(x) = -D.e^{Kx}$$

$$\psi_{II}(x) = C \sin(kx)$$

$$\psi_I(x) = D.e^{-Kx}$$

Ensuite, il faut exprimer les conditions aux limites du puits. D'une part, la réalité physique du module de la fonction d'onde comme amplitude de probabilité impose à la fonction d'onde d'être continue. De plus, on peut montrer que, pour une discontinuité finie, la dérivée de la fonction d'onde est également continue.

On a alors:

Fonctions paires:

$$C \cos\left(\frac{ka}{2}\right) = D.e^{-\frac{Ka}{2}}$$

$$-kC \sin\left(\frac{ka}{2}\right) = -KDe^{-\frac{Ka}{2}},$$

$$\text{soit } \boxed{k \tan\left(\frac{ka}{2}\right) = K}.$$

Pour les fonctions impaires, on trouve de même $\boxed{k \cot an\left(\frac{ka}{2}\right) = -K}$

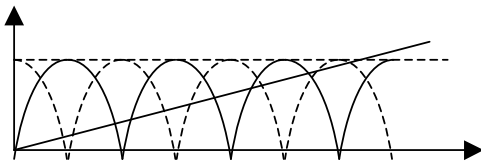
Ces équations sont transcendantes mais on peut déterminer les énergies propres associées à chacun des états stationnaires en résolvant graphiquement les équations ci-dessus. Pour cela, on écrit:

$$k^2 \tan^2\left(\frac{ka}{2}\right) = K^2, \text{ soit } 2m(E + V_0) \frac{1 - \cos^2(ka/2)}{\cos^2(ka/2)} = -2mE, \text{ soit } \cos^2(ka/2) = \frac{k^2}{2mV_0}, \text{ ce}$$

qui donne alors:

$$\left| \cos\left(\frac{ka}{2}\right) \right| = \frac{k}{q}, \text{ avec } q = \sqrt{2mV_0}, \text{ caractéristique du puits.}$$

$$\text{Pour les solutions impaires, on obtient } \left| \sin\left(\frac{ka}{2}\right) \right| = \frac{k}{q}.$$



Il faut alors se souvenir que seuls les points correspondant à $\tan(ka/2) > 0$ et à $\cot an(ka/2) < 0$ sont valables. Notons qu'il y a toujours un état lié, et celui-ci est pair. On remarque par ailleurs que, contrairement au cas

limite du puits infini et également contrairement à ce que l'on trouve en mécanique classique, la particule n'a pas une probabilité non nulle de se trouver hors du puits, où elle est pourtant "localisée" pour l'essentiel. On peut donc dire qu'en raison de la nature non locale de la particule, tout se passe comme si le puits avait une largeur effective supérieure à a .

3) Etats de diffusion:

Ce sont les états avec $E > 0$, qui correspondent à la situation physique où une particule est émise en $-\infty$, là où ne règne aucun potentiel. Dans la région du puits, la particule est soumise à un potentiel attractif $-V_0$. Il s'agit donc, par analogie avec la mécanique classique, d'une expérience de diffusion par un potentiel attractif de portée a . C'est la raison pour laquelle on donne le nom d'états de diffusion aux états non liés.

La fonction d'onde a pour expression, en posant $d_- = 0$ pour ne signifier qu'il n'y a pas de source de particules en $+\infty$ (on ne peut utiliser ici la parité puisque la source n'existe que d'un seul côté):

$$\begin{aligned} \psi_I(x) &= b_- e^{-iKx} + b_+ e^{iKx} \\ \psi_{II}(x) &= c_+ e^{ikx} + c_- e^{-ikx}, \text{ avec } K = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \text{ et } k = \frac{\sqrt{2m(E + V_0)}}{\hbar} \\ \psi_I(x) &= d_- e^{-iKx} + d_+ e^{iKx} \end{aligned}$$

Les conditions aux limites s'expriment alors comme suit, en faisant intervenir la continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée:

$$\begin{aligned} b_+ e^{-iKa/2} + b_- e^{iKa/2} &= c_+ e^{-ika/2} + c_- e^{ika/2} \\ Kb_+ e^{-iKa/2} - Kb_- e^{iKa/2} &= kc_+ e^{-ika/2} - kc_- e^{ika/2} \\ d_+ e^{iKa/2} &= c_+ e^{ika/2} + c_- e^{-ika/2} \\ Kd_+ e^{iKa/2} &= kc_+ e^{ika/2} - kc_- e^{-ika/2} \end{aligned}$$

On dispose ainsi d'un système à quatre équations et cinq inconnues, ce qui permet d'exprimer les quatre en fonction de l'une d'elle. On note déjà que contrairement aux états liés, les états de diffusion ne sont pas quantifiés, ce qui est normal vu que la particule n'est pas confinée dans une région de l'espace.

Deux coefficients particulièrement intéressants sont les amplitudes des ondes réfléchies et transmises, b_- et d_+ . Comme on peut les exprimer uniquement en fonction de b_+ , on peut définir des facteurs de réflexion et de transmission en amplitude par:

$$A_r = \frac{b_-}{b_+}; A_t = \frac{d_+}{b_+}$$

En réalité, seul le coefficient en réflexion $R = |A_r|^2$ caractérise vraiment la diffusion. En effet, le coefficient en transmission $T = |A_t|^2$ peut être considéré comme la somme de l'onde incidente et de l'onde diffusée vers l'avant.

Le calcul donne pour ces coefficients:

$$R = \frac{\left(\frac{q^2}{2kK}\right)^2 \sin^2 ka}{1 + \left(\frac{q^2}{2kK}\right)^2 \sin^2 ka}; T = \frac{1}{1 + \left(\frac{q^2}{2kK}\right)^2 \sin^2 ka}, \text{ avec } \begin{matrix} K^2 = 2mE / \hbar^2 \\ k^2 = 2m(E + V_0) / \hbar^2 \\ q^2 = 2mV_0 / \hbar^2 \end{matrix}$$

Sans nous étendre d'avantage dans l'étude assez complexe des états de diffusion, nous pouvons remarquer qu'il existe des valeurs de K et k , et donc de E , pour lesquelles:

- R s'annule. Ceci constitue le phénomène de "transparence"
- R est maximal. Ceci constitue le phénomène de résonance.

3) Applications.

Une des principales applications du puit de potentiel carré, et plus particulièrement des résultats sur les états liés, et le deutéron, c'est-à-dire le noyau de l'atome d'hydrogène constitué d'un neutron et d'un proton. L'interaction nucléaire est alors schématisée par:

$$V(r) = \begin{cases} 0 & r > R_0 \\ -V_0 & 0 < r < R_0 \\ \infty & r < 0 \end{cases} . \text{ On peut alors considérer ce potentiel comme un demi potentiel en}$$

puit carré, pour lequel on impose $\psi(0) = 0$, c'est-à-dire ψ impaire, de potentiel $-V_0$ et de largeur $a = 2r_0$. De plus, expérimentalement on observe que le deutéron est le seul état lié du système proton neutron observé, et que son énergie de liaison vaut $-E_l = 2,2 \text{ MeV}$. Par ailleurs, la portée des actions nucléaires est de l'ordre de $r_0 = 1 \text{ fm}$. S'il n'existe qu'un état lié,

on voit graphiquement qu'il faut $k/q = \sqrt{\frac{V_0 + E}{V_0}} \approx 1$, c'est-à-dire $ka/2 \approx \pi/2$, et aussi

$V_0 \gg E$. On a alors, comme $k \approx \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar}$, où m est la masse réduite du système et vaut la

moitié de la masse commune du neutron et du proton M , $V_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{4Mr_0^2}$. Ce

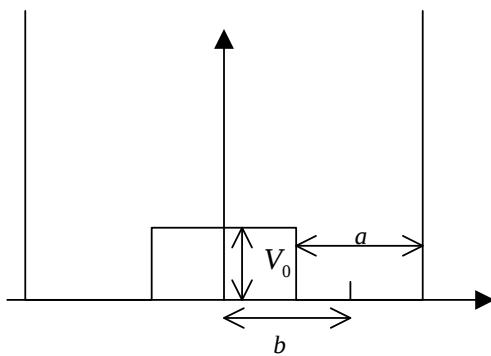
raisonnement simple nous permet de déduire l'ordre de grandeur des potentiels d'interaction nucléaire: $V_0 \sim 100 \text{ MeV}$.

L'application des états de diffusion est l'interprétation de l'effet Ramsauer – Townsend, qui montre que la section efficace de diffusion des électrons par des atomes de gaz rare devenait très petite pour une certaine valeur de l'énergie. C'est le phénomène de transparence observé

plus haut qui est à l'origine de ce phénomène. Le cas des phénomènes de résonance revêt également une importance fondamentale en physique nucléaire puisqu'elle permet de comprendre la formation d'états quasi liés, certes non stationnaires, mais à énergie presque définie, et qui ont une durée de vie appréciable. En effet, c'est dans les situations de résonance que le potentiel attractif a le plus d'effet et la particule se retrouve en quelque sorte coincée dans le puits et la "désintégration" de cet état est en exponentielle décroissante du temps.

B) Puit double:

1) Généralités et résolution:



Considérons une distribution de potentiel définie comme:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & b/2 < |x| < a/2 + b \\ V_0 & -b/2 < x < b/2 \\ +\infty & |x| > b + a/2 \end{cases}$$

On se limite ici aux cas $E < V_0$, c'est-à-dire le cas où, classiquement, une particule demeure dans un des puits.

Si on procède comme précédemment, on trouve l'expression de la fonction d'onde:

Fonctions paires

$$\psi_{sI}(x) = \lambda \cdot \sin[k(b + a/2 + x)]$$

$$\psi_{sII}(x) = \mu \cdot \cosh(Kx) \quad , \text{ avec } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \text{ et } K = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

$$\psi_{sI}(x) = \lambda s \sin[k(b + a/2 - x)]$$

Fonctions impaires

$$\psi_{aI}(x) = -\lambda \cdot \sin[k(b + a/2 + x)]$$

$$\psi_{aII}(x) = \mu \cdot \sinh(Kx)$$

$$\psi_{aI}(x) = \lambda s \sin[k(b + a/2 - x)]$$

Si on exprime alors les conditions aux limites, on obtient:

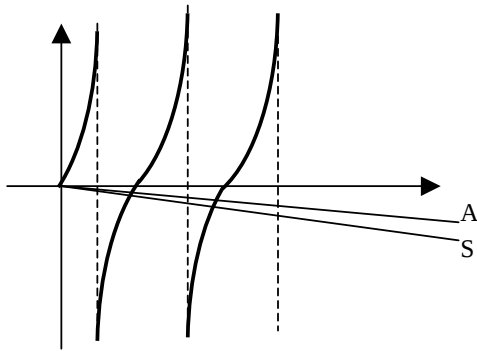
$$\tan ka = -\frac{k}{K} \coth[K(b - a/2)] \text{ pour } \psi_S$$

$$\tan ka = -\frac{k}{K} \tanh[K(b - a/2)] \text{ pour } \psi_A$$

Restreignons nous au cas où $E \ll V_0$, c'est-à-dire $k \ll K \approx \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar}$.

Nous pouvons alors écrire $\tan ka = -ka \left(\frac{1 \pm 2e^{-K(2b-a)}}{Ka} \right) = -\varepsilon_{A,S} ka$, le signe +

correspondant à ψ_S et le signe - à ψ_A . On peut alors résoudre le problème par résolution graphique, encore une fois:



On voit alors tout de suite que:

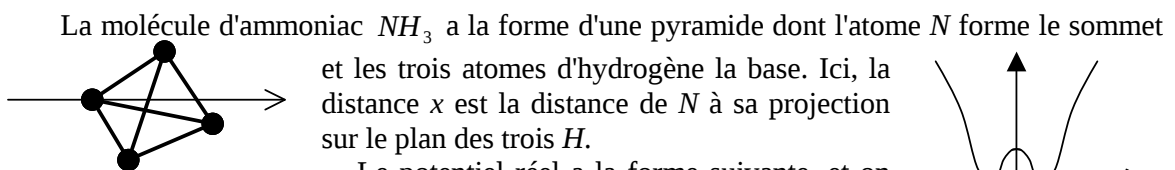
- k_s est inférieur à k_A
- k_s et k_A sont tous deux inférieurs à π/a pour leur valeur dans le "premier" état correspondant.
- Les énergies respectives de ces états $E_s = \frac{\hbar^2}{2m} k_s^2$ et $E_A = \frac{\hbar^2}{2m} k_A^2$ sont telles que $E_s < E_A$.

Par ailleurs, dans notre approximation, on a $k_s = \frac{\pi}{a(1+\varepsilon_s)}$ et $k_A = \frac{\pi}{a(1+\varepsilon_A)}$, et on obtient alors pour la différence d'énergie $2A = E_s - E_A = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \frac{8e^{-K(2b-a)}}{Ka}$, en utilisant le fait que $\varepsilon_{A,S} \ll 1$. Comme $\Delta = 2b - a$ est la largeur de la barrière, on a:

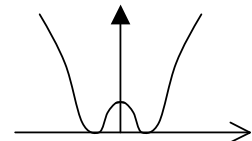
$$A = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \frac{4e^{-K\Delta}}{Ka}$$

Nous voyons donc avec cette modélisation simple que contrairement à un système classique, la particule a une probabilité de présence non nulle dans la région centrale. Les deux états sont dits couplés par effet tunnel, effet qui justement permet à la particule d'aller dans des zones classiquement interdites. On voit par ailleurs que la différence d'énergie entre les deux états A et S tend vers 0 lorsque la largeur ou la hauteur énergétique tendent vers l'infini. On se retrouve alors dans la situation de deux puits infinis, ayant même énergie fondamentale.

2) Application : la molécule d'ammoniac:



Le potentiel réel a la forme suivante, et on le modélise par le potentiel en double puit que nous venons d'étudier.



Pour étudier le comportement de la particule, ici les trois atomes d'hydrogène, nous allons considérer deux combinaisons linéaires des solutions stationnaires de l'équation de Schrödinger:

$$\psi_G = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_s - \psi_A)$$

$$\psi_D = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_s + \psi_A)$$

Ces fonctions d'ondes, droite et gauche, décrivent au temps $t=0$, les états où pratiquement toute la probabilité de présence, c'est-à-dire la base de la pyramide, se trouve d'un côté ou de l'autre de l'atome N.

Considérons une fonction d'onde qui à $t=0$, s'identifie avec ψ_D et décrit donc une particule localisée à droite. A un instant t , on a:

$$\begin{aligned}\psi(x,t) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_S e^{-iE_S t / \hbar} + \psi_A(x) e^{-iE_A t / \hbar} \right) \\ &= \frac{e^{-i(E_S t / \hbar)}}{\sqrt{2}} \left(\psi_S(x) + \psi_A e^{-i\omega t} \right)\end{aligned}$$

où $\omega = \frac{2A}{\hbar}$. Nous constatons qu'au bout d'un temps $t = \frac{\pi}{\hbar}$, la fonction d'onde s'identifie, à une phase près, à ψ_G . La particule se trouve donc à gauche. Autrement dit, la superposition considérée représente une particule qui oscille de droite à gauche avec la pulsation ω , ce retournement étant possible par effet tunnel. Numériquement, ayant $2A = 10^{-4} eV$, on a $\nu = 24 GHz$, qui correspond à $\lambda = 1,25 cm$. Cette fréquence joue un rôle fondamental dans le MASER à ammoniac.