

MécaQ chap.2 – Doc principal

Cas d'un potentiel uniforme par morceaux

1. Puits de potentiel stationnaire, rectangulaire de profondeur infinie

- 1.1. Intérêt de cette modélisation simplifiée du potentiel
- 1.2. Quantification de l'énergie des états stationnaires
- 1.3. Analogie et différences avec la corde vibrante
- 1.4. Energie minimale et inégalité de Heisenberg
- 1.5. Combinaison d'états stationnaires : un état non-stationnaire (d'énergie indéfinie)

2. Puits de potentiel stationnaire de profondeur finie

- 2.1. Etats liés – Etats de diffusion
- 2.2. Recherche des états stationnaires liés
- 2.3. Quantification de l'énergie – Modes pairs et impairs
- 2.4. Comparaison avec le puits infini – Elargissement par les ondes évanescentes

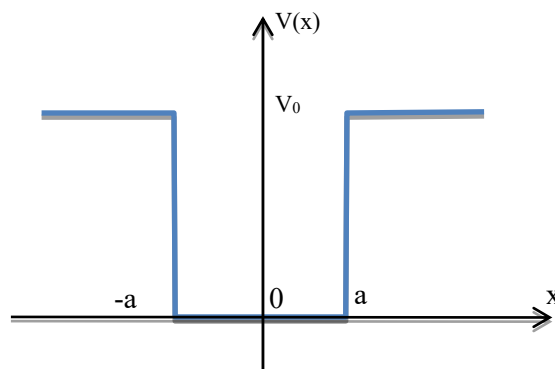
Intro : Après le cas de la particule libre, on aborde ici le cas d'une particule évoluant dans un potentiel stationnaire uniforme par morceaux. Le cas du **puits infini** est le modèle le plus simple que l'on puisse imaginer. Simple à étudier, il permet de montrer facilement *l'origine de la quantification de l'énergie* : le **confinement de la fonction d'onde**. On fait en outre apparaître un résultat intrinsèquement quantique : *l'énergie minimale accessible est non nulle*.

On raffine ensuite en considérant le cas du **puits fini**. L'existence *d'ondes évanescentes sous la barrière* de potentiel entraîne un moindre confinement de la fonction d'onde, d'où un **abaissement des niveaux d'énergie**.

1. Puits de potentiel stationnaire, rectangulaire de profondeur infinie

1.1. Intérêt de cette modélisation simplifiée du potentiel

Les modèles 1D de potentiels stationnaires rectangulaires (appelés « puits ») permettent de modéliser simplement beaucoup de situations (électron dans boîtes quantiques ou dans atomes/ molécules, nucléons dans le noyau, etc.)



$2a \approx 10^{-15}$ m si l'on considère un nucléon dans un noyau

L'hypothèse simplifiée $V_0 \rightarrow +\infty$ permet d'établir facilement quelques résultats importants et généraux. On verra dans la partie suivante (puits fini) qu'une barrière de potentiel infiniment haute signifie que *la fonction d'onde doit être nulle en-dehors de l'intervalle $[-a; a]$* .

1.2. Quantification de l'énergie des états stationnaires

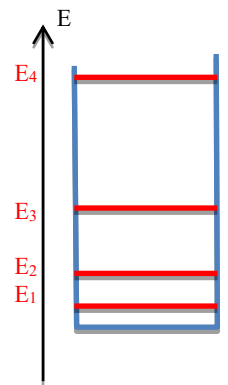
➤ Activité 1 : Etats stationnaires d'un puits INFINI ✪

On comparera ces résultats, compilés ci-dessous, à ceux du puits fini (partie 2. de ce chapitre) :

$$k_n = n \frac{\pi}{a}$$
$$\begin{aligned} \varphi_n(x) &= -i 2A \sin(k_n x) & n \text{ pair} \\ \varphi_n(x) &= 2A \cos(k_n x) & n \text{ impair} \end{aligned}$$

Avec $k = \sqrt{2mE}$:

$$E_n = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2}$$



Origine de la quantification de l'énergie

Le confinement et le caractère ondulatoire des particules quantiques expliquent la quantification de l'énergie.

Lors de l'étude de la corde vibrante, le confinement impose la quantification de la fréquence des OSH.

Ici, en quantique, le confinement impose la quantification de la fréquence des états stationnaires.

D'après la relation d'Einstein, le confinement impose donc la quantification de l'énergie des états stationnaires.

Ce fut une étape importante en phys quantique que de pouvoir expliquer la quantification de l'énergie des atomes.

1.3. Analogie et différences avec la corde vibrante

Par analogie avec la corde, les états stationnaires du puits infini sont qualifiés de « modes ». On peut distinguer deux types de modes : les *modes pairs* et les *modes impairs*.

La condition de quantification de k est formellement identique à celle établie pour la corde vibrante fixée à ses deux extrémités. On notera tout de même les différences suivantes :

- la relation de dispersion est différente dans les deux cas
- la quantification de longueur d'onde n'entraîne pas de quantification de l'énergie dans le cas de la corde

1.4. Energie minimale et inégalité de Heisenberg

En physique classique, il est possible de placer une particule sans vitesse initiale dans le puits. La plus petite énergie accessible à la particule classique est donc nulle.

Considérons la même situation, mais en physique quantique. On imagine une particule de quantité de mouvement nulle. D'après Heisenberg, on sait que la quantité de mouvement n'est pas parfaitement déterminée, mais qu'elle est distribuée selon une certaine densité de probabilité, de moyenne et d'écart-type fixés.

Donc on imagine plutôt que c'est la moyenne (la valeur centrale) de la quantité de mouvement accessible à la particule qui est nulle.

- ❖ Montrer que d'après l'inégalité d'Heisenberg, et parce que la particule est confinée, alors son énergie cinétique moyenne $\langle \frac{p_x^2}{2m} \rangle$ possède une borne inférieure non nulle

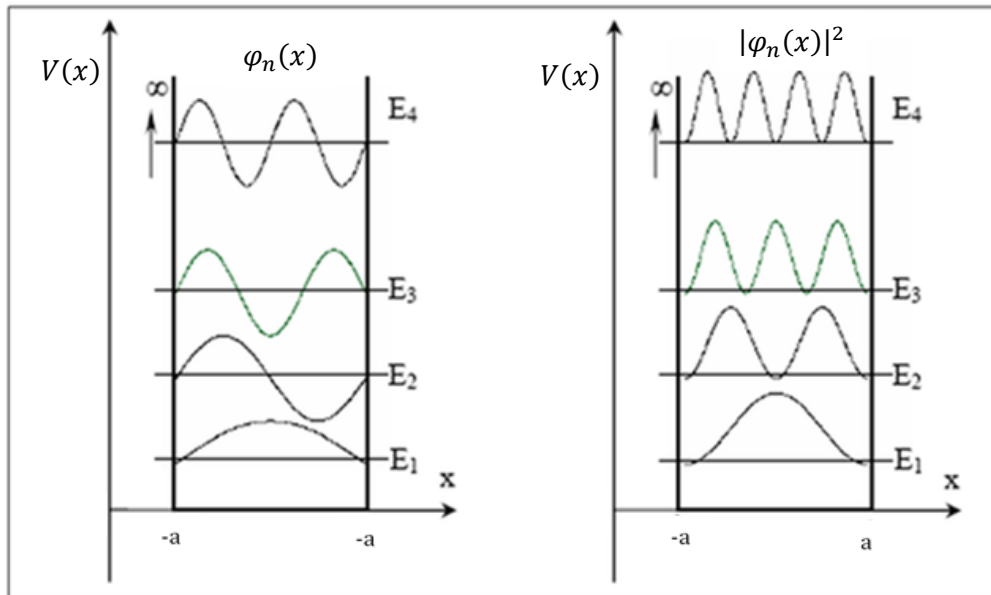
Rappel de proba : $(\Delta X)^2 = \langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2$

Energie minimale de confinement

Une particule quantique confinée possède une énergie cinétique minimale non nulle, d'autant plus grande que l'espace qui lui est accessible est étroit.

C'est une manifestation de l'inégalité d'Heisenberg.

- ❖ Retrouver l'ordre de grandeur de l'énergie d'un électron dans un atome : qq eV
- ❖ Idem pour un nucléon dans un noyau : qq MeV



1.5. Combinaison d'états stationnaires : un état non-stationnaire (d'énergie indéfinie)

Les états stationnaires sont une base de décomposition des états quelconques. La solution générale est donc une combinaison linéaire d'états stationnaires, i.e. une superposition d'états d'énergie différentes.

Un état quelconque n'est donc pas un état d'énergie bien définie.

Nous allons considérer l'état formé par la superposition des états stationnaires 1 et 3 :

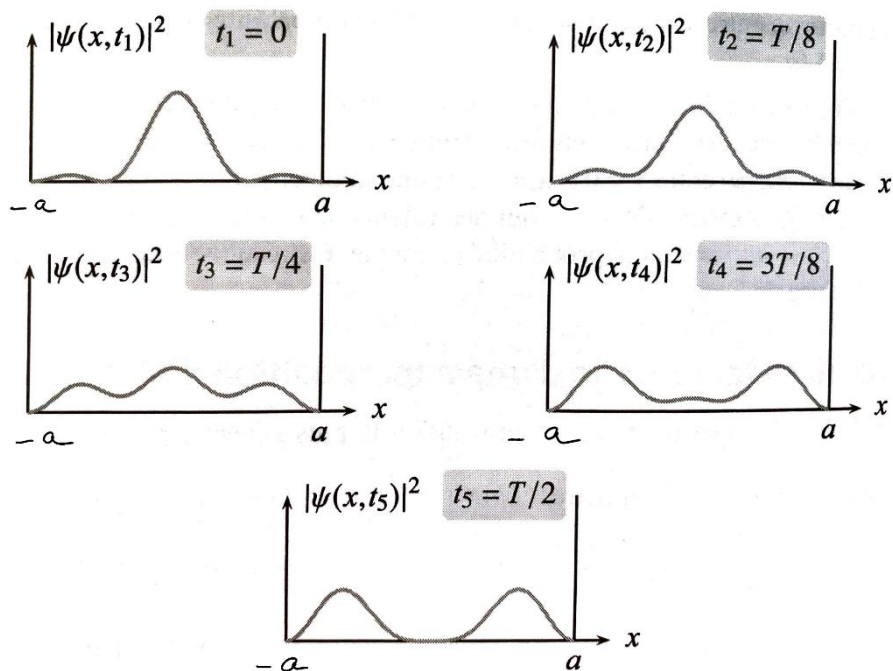
$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2a}} \left(\cos\left(\frac{\pi}{2a}x\right) e^{-i\frac{E_1}{\hbar}t} + \cos\left(\frac{3\pi}{2a}x\right) e^{-i\frac{E_3}{\hbar}t} \right)$$

Cette écriture montre bien que cet état est à la fois dans l'état d'énergie E_1 et dans l'état d'énergie E_3 .

Un calcul simple montre que la densité de probabilité s'écrit ainsi :

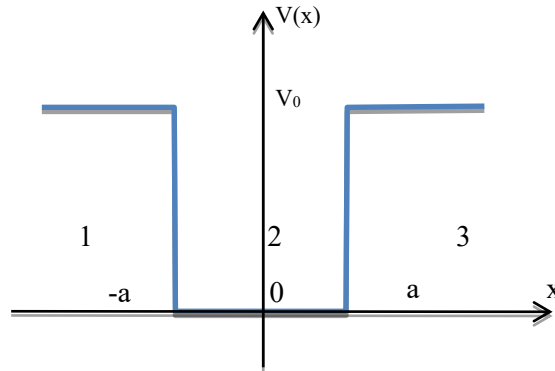
$$|\psi(x, t)|^2 = \frac{1}{2a} \left(\cos^2\left(\frac{\pi}{2a}x\right) + \cos^2\left(\frac{3\pi}{2a}x\right) + 2 \cos\left(\frac{E_3 - E_1}{\hbar}t\right) \cos\left(\frac{\pi}{2a}x\right) \cos\left(\frac{3\pi}{2a}x\right) \right)$$

On constate que cet état n'est pas stationnaire : sa densité de probabilité oscille dans le temps de manière périodique, et **la fréquence d'oscillation ν** est telle que $E_3 - E_1 = h\nu$.



2. Puits de potentiel stationnaire de profondeur finie

On considère cette fois un puits de profondeur V_0 finie, compris entre $-a$ et a , qui définit trois régions de l'espace.



2.1. Etats liés – Etats de diffusion

Comme en mécanique classique, un **état de diffusion** (ou état libre) correspond au cas où $E > V_0$: la particule peut atteindre n'importe quelle région de l'espace. Il n'est pas au programme d'étudier ce cas.

Comme en mécanique classique, un **état lié** correspond au cas où $E < V_0$, simplement parce que la particule ne peut pas s'éloigner arbitrairement loin du centre du puits $x = 0$.

Contrairement à la mécanique classique, par contre, on va montrer que la particule a une **probabilité non nulle de présence dans les régions 1 et 3**.

2.2. Recherche des états stationnaires liés

➤ **Activité 2.1 : Etats stationnaires liés d'un puits FINI, écritures math** ⚡

On admet les conditions à la limite suivantes : $\varphi(x)$ et $\frac{d\varphi}{dx}(x)$ continues sur les parois du puits

Pour que les quatre constantes d'intégration restantes ne soient pas nulles, on doit vérifier les conditions suivantes :

$$k_1^2 + k_2^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}$$

avec la disjonction de cas suivante :

$$\begin{aligned} \text{soit } k_1 a &= k_2 a \times \tan(k_2 a) \\ \text{soit } k_1 a &= -k_2 a \times \cotan(k_2 a) \end{aligned}$$

2.3. Quantification de l'énergie – Modes pairs et impairs

Les deux couples de relations vérifiées par k_1 et k_2 sont compliqués à résoudre analytiquement.

On propose une **résolution qualitative graphique**.

Comme dans le cas du puits infini, on va montrer que **l'énergie** des états stationnaire est **quantifiée**.

On retrouve aussi l'existence de mode pairs et impairs, alternés en énergie.

➤ **Activité 2.2 : Etats stationnaires liés d'un puits FINI, modes PAIRS** ⚡

NB : Le calcul montre que dans ce cas $A_1 = B_3$; $A_2 = B_2$. Soit $\varphi(-x) = \varphi(x)$. D'où le nom de modes pairs.

➤ **Activité 2.3 : Etats stationnaires liés d'un puits FINI, modes IMPAIRS** ⚡

NB : Le calcul montre que $A_1 = -B_3$ et $A_2 = -B_2$. Soit $\varphi(-x) = -\varphi(x)$. D'où le nom de modes impairs.

2.4. Comparaison avec le puits infini – Elargissement par les ondes évanescentes

Dans les régions 1 et 3, la résolution précédente donne :

$$\begin{aligned}\varphi_1(x) &= A_1 \cdot e^{k_1 x} \\ \varphi_3(x) &= \pm A_1 \cdot e^{-k_1 x}\end{aligned}$$

Ce sont des états stationnaires spatialement atténués.

Par analogie avec les ondes classiques, on parle *d'ondes évanescentes*.

Présence sous une barrière de potentiel

Contrairement au cas classique, une particule a une proba de présence non-nulle sous la barrière de potentiel.

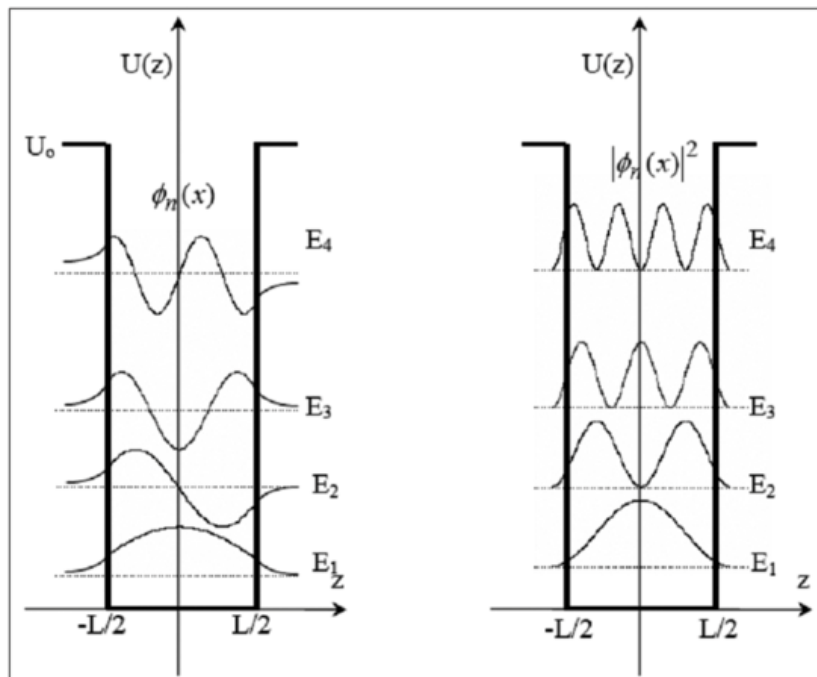
- ❖ Donner l'expression de la profondeur δ caractéristique de pénétration sous la barrière
- ❖ Discuter de l'influence des différents paramètres sur cette profondeur
- ❖ Comparer les niveaux d'énergie du puits fini à ceux du puits infini

Intuitivement, ce constat peut s'interpréter en remarquant que les états stationnaires sont moins confinés dans le cas du puits fini, parce qu'ils pénètrent un peu sous la barrière du fait des ondes évanescentes. En ordre de grandeur on peut même estimer que le puits fini est de ce point de vue équivalent à un puits infini, mais de largeur $2a + 2\delta$. On peut montrer que cette idée intuitive est quantitativement confirmée par un calcul math complet.

Elargissement effectif du puits fini par les ondes évanescentes

La pénétration des états stationnaires sous les barrières de potentiel, du fait des ondes évanescentes, provoque sur les niveaux d'énergie un effet similaire à celui de l'élargissement du puits.

Le moindre confinement qui en résulte, associé à l'inégalité d'Heisenberg, explique la baisse des niveaux d'énergie par rapport au puits infini.



6.5.3. Équation de Schrödinger dans un potentiel $V(x)$ uniforme par morceaux	
Quantification de l'énergie dans un puits de potentiel rectangulaire de profondeur infinie.	Établir les expressions des énergies des états stationnaires. Retrouver qualitativement l'énergie minimale à partir de l'inégalité de Heisenberg spatiale.
Énergie de confinement quantique.	Associer le confinement d'une particule quantique à une augmentation de l'énergie cinétique.
Évolution temporelle d'une particule confinée dans une superposition d'états.	Mettre en évidence les oscillations d'une particule dont la fonction d'onde s'écrit comme la superposition de deux états stationnaires et relier la fréquence d'oscillation à la différence des énergies.
Quantification de l'énergie des états liés dans un puits de profondeur finie. Élargissement effectif du puits par les ondes évanescentes.	Décrire la forme des fonctions d'onde dans les différents domaines. Utiliser les conditions aux limites admises : continuité de ϕ et $d\phi/dx$. Associer la quantification de l'énergie au caractère lié de la particule. Mener une discussion graphique. Interpréter qualitativement, à partir de l'inégalité de Heisenberg spatiale, l'abaissement des niveaux d'énergie par rapport au puits de profondeur infinie.