

MécaQ chap.2 – 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

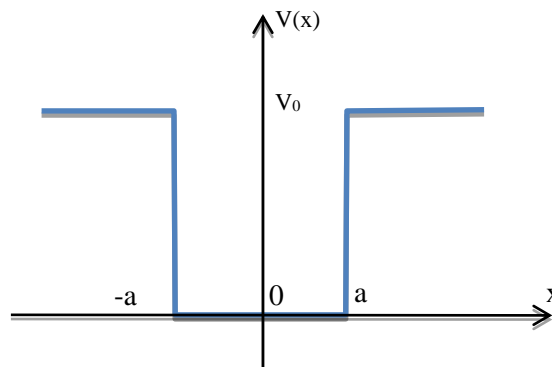
Intro : Après le cas de la particule libre, on aborde ici le cas d'une particule évoluant dans un potentiel stationnaire uniforme par morceaux. Le cas du *puits infini* est le modèle le plus simple que l'on puisse imaginer. Simple à étudier, il permet de montrer facilement *l'origine de la quantification 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

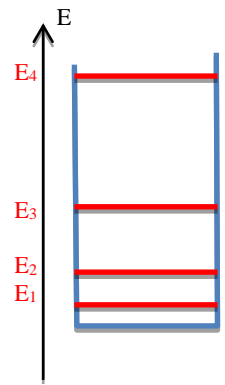
On recherche une famille de solutions sous la forme d'états stationnaires

- ❖ Rappeler la forme mathématique d'un état stationnaire (rappel $E > 0$)
- ❖ Ecrire l'équation de Schrödinger indépendante du temps pour la partie spatiale $\varphi(x)$
- ❖ En déduire la forme des solutions

Conformément au programme, on admet la condition à la limite suivante :

$\varphi(x)$ est continue sur les parois du puits

- ❖ En déduire la quantification du vecteur d'onde en distinguant deux cas
- ❖ Synthétiser ces deux cas en un seul :
 - en exprimant sous une seule formule la quantification du vecteur d'onde (et de la longueur d'onde)
 - en en déduisant une quantification de l'énergie
 - en remarquant qu'un cas correspond à des fonctions paires, et l'autre à des fonctions impaires
- ⊛ Grâce à la condition de normalisation, déterminer la constante d'intégration restante



Origine de la quantification de l'énergie

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

Historiquement, ce fut une étape importante pour la physique quantique que d'avoir pu expliquer l'origine de la quantification de l'énergie des atomes.

1.3. Analogie et différences avec la corde vibrante

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. Son énergie est alors nulle : c'est la plus petite énergie accessible à la particule classique.

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

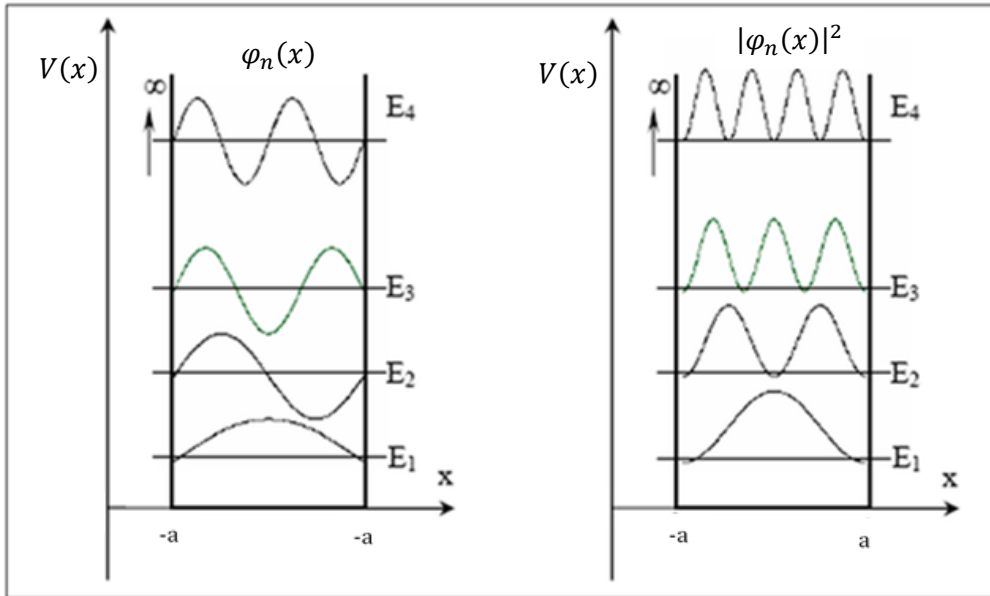
Rappel de proba : $(\Delta X)^2 = \langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2$

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 : $qq \text{ eV}$
- ❖ Idem pour un nucléon dans un noyau : $qq \text{ MeV}$



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. L'état général 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 :

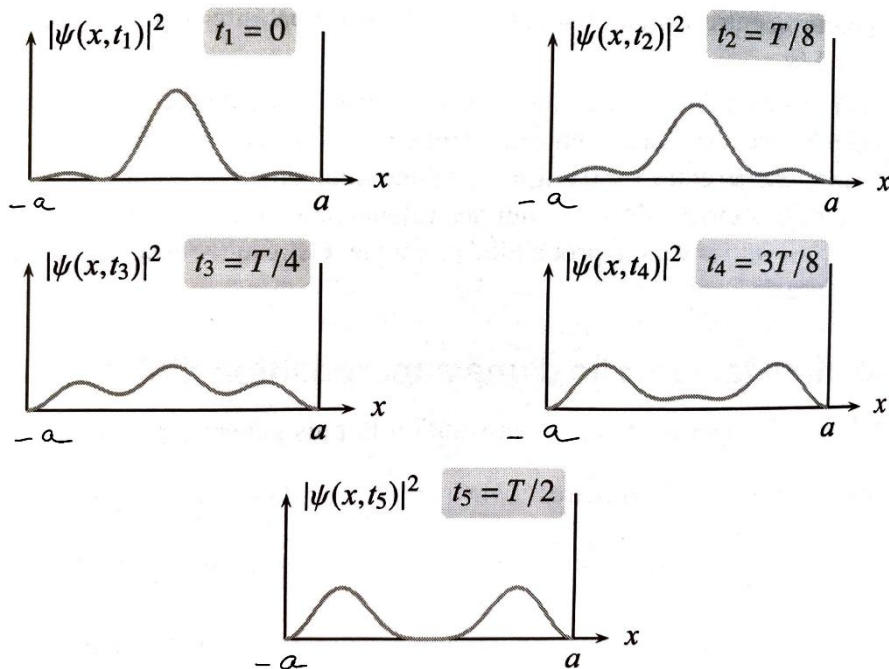
$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2a}} \left(\cos\left(\frac{\pi}{2a}x\right) e^{-i\frac{E_1}{\hbar}t} + \cos\left(\frac{3\pi}{2a}x\right) e^{-i\frac{E_3}{\hbar}t} \right)$$

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 :

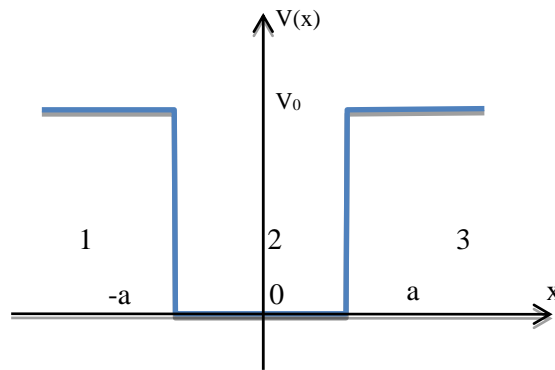
$$|\psi(x, t)|^2 = \frac{1}{2a} \left(\cos^2\left(\frac{\pi}{2a}x\right) + \cos^2\left(\frac{3\pi}{2a}x\right) + 2 \cos\left(\frac{E_3 - E_1}{\hbar}t\right) \cos\left(\frac{\pi}{2a}x\right) \cos\left(\frac{3\pi}{2a}x\right) \right)$$

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

- ❖ Rappeler la forme mathématique d'un état stationnaire (rappel $E > 0$)
- ❖ Ecrire l'équation de Schrödinger indépendante du temps pour la partie spatiale $\varphi(x)$:
 - dans la zone 2
 - dans les zones 1 et 3
- ❖ En déduire la forme des solutions dans les trois régions (donner les expressions de k_1 et k_2) :

$$\varphi_2(x) = A_2 \cdot e^{ik_2x} + B_2 \cdot e^{-ik_2x}$$

$$\varphi_1(x) = A_1 \cdot e^{k_1x} + B_1 \cdot e^{-k_1x}$$

$$\varphi_3(x) = A_3 \cdot e^{k_1x} + B_3 \cdot e^{-k_1x}$$

- ❖ En invoquant la condition de normalisation, montrer que deux constantes d'intégration sont nulles

Conformément au programme, on admet les conditions à la limite suivantes :

$$\varphi(x) \text{ est continue sur les parois du puits}$$

$$\frac{d\varphi}{dx}(x) \text{ est continue sur les parois du puits}$$

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

$$\text{soit } k_1 a = k_2 a \times \tan(k_2 a)$$

$$\text{soit } k_1 a = -k_2 a \times \cotan(k_2 a)$$

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**.

On montre alors que **l'énergie** des états stationnaire est **quantifiée**. Par analogie avec la corde, les états stationnaires sont qualifiés de « modes ». Il existe deux types de modes : les *modes pairs* et les *modes impairs*.

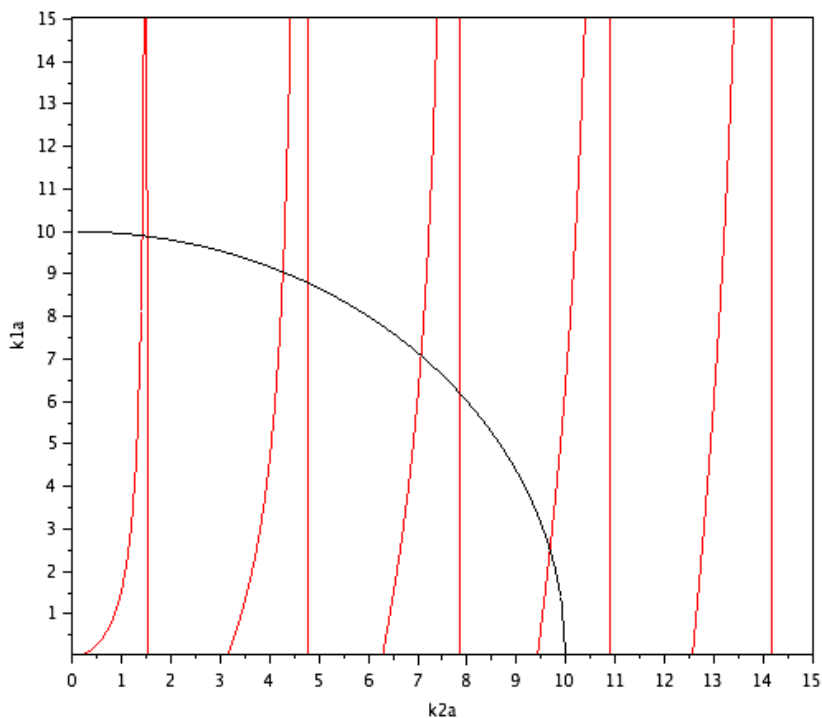
Premier cas, modes pairs

On trace, en fonction de la variable $X \stackrel{\text{def}}{=} k_2 a$, les deux courbes associées à $Y \stackrel{\text{def}}{=} k_1 a$:

- $Y = X \tan X$
- $Y = \sqrt{\beta - X^2}$

pour une valeur donnée de $\beta \stackrel{\text{def}}{=} \frac{2ma^2V_0}{\hbar^2}$, prise numériquement égale à 100 sur le graphe ci-dessous.

Les solutions sont donc données par les intersections des deux courbes.



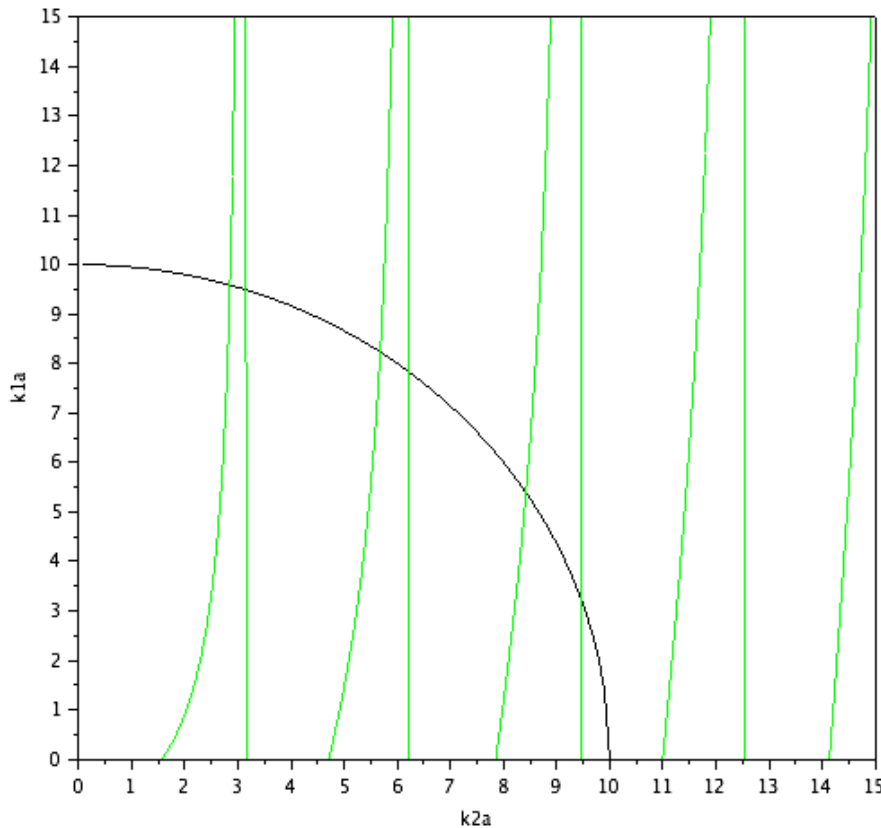
- ❖ Indiquer sur le graphe les intersections représentatives des solutions possibles pour $k_1 a$ et $k_2 a$
- ❖ Selon les valeurs possibles de V_0 , existe-t-il toujours au moins un niveau d'énergie ?
- ❖ Comment le nombre de niveaux dépend-il de V_0 ?

NB : on peut alors montrer dans ce cas que $A_1 = B_3$; $A_2 = B_2$. Soit $\varphi(-x) = \varphi(x)$
C'est pourquoi ces solutions constituent les modes pairs.

Second cas, modes impairs

On trace, en fonction de la variable $X \stackrel{\text{def}}{=} k_2 a$, les deux courbes associées à $Y \stackrel{\text{def}}{=} k_1 a$:

- $Y = -X \cotan X$
- $Y = \sqrt{\beta - X^2}$



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.

- ❖ Comment se situent les niveaux des états pairs par rapport aux niveaux des états impairs ?
- ❖ Existe-t-il toujours des 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.

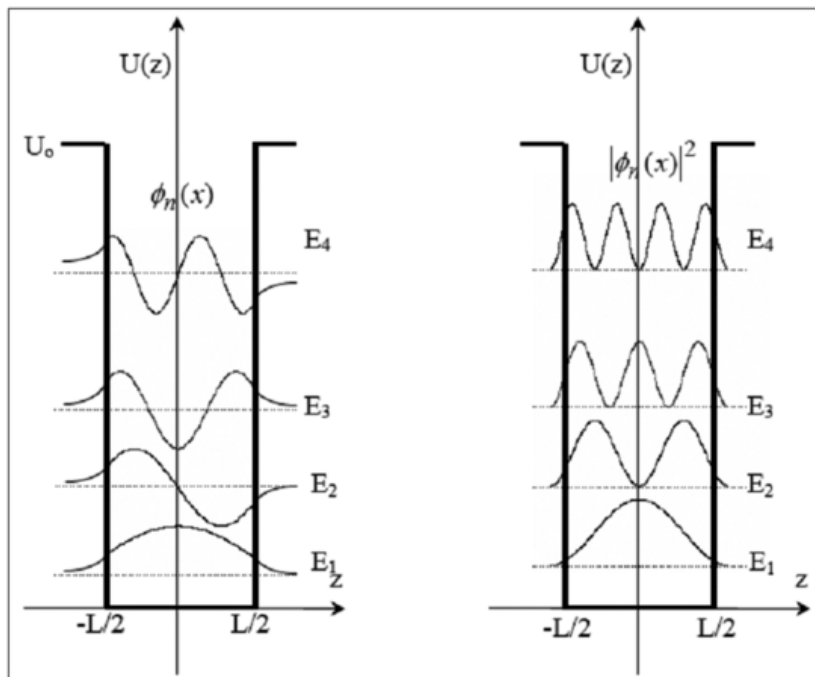
- ❖ Donner l'expression de la profondeur δ caractéristique de pénétration sous la barrière
- ❖ Discuter de l'influence des différents paramètres sur cette profondeur
- ❖ Comparer les niveaux d'énergie du puits fini à ceux du puits infini

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.

Élargissement 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.