

CHAPITRE 26 : Puits de potentiel en mécanique QUANTIQUE

I. Puits de profondeur infinie

1. Situation étudiée et modélisation

(cf. FIGURE 1)

On travaille en une dimension.

• En mécanique newtonienne : $\vec{F} = -\vec{\nabla}U = -\frac{dU}{dx} \vec{e}_x$.

La particule est retenue dans la région où U est nulle.

Conservation de l'énergie :

$$\frac{1}{2}mv^2 + U(x) = E.$$

La région accessible est définie par $U(x) \leq E$.

Si $v \neq 0$, $U(x) = E$.

- Si $E < U_0$, on a un état lié.
- Si $E > U_0$, on a un état de diffusion.

Modèle : $U_0 \rightarrow +\infty$.

2. Recherche des états stationnaires.

On résout $H\phi = E\phi$.

$$\text{i.e.} \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\phi + U\phi = E\phi.$$

Pour $x \leq -\frac{a}{2}$ ou $x \geq \frac{a}{2}$, $\phi(x) = 0$.

* Sur $]-\frac{a}{2}; \frac{a}{2}[$, $U(x) = 0$

$$\text{donc } -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\phi}{dx^2} = E\phi$$

$$\text{donc } \frac{d^2\phi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} = 0$$

Comme $E \geq 0$, on pose $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

$$\hbar^2 k^2 = 2mE$$

i.e. $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{p^2}{2m}$ on reconnaît E_p en mécanique classique.

Alors,

$$\phi = A \cos(kx) + B \sin(kx)$$

$$\phi = C e^{ikx} + D e^{-ikx}$$

où $A, B, C, D \in \mathbb{C}$.

On cherche aussi E , c'est-à-dire k .

C.B. : en $x = -\frac{a}{2}$, $\phi = 0$

$$\text{donc } A \cos\left(\frac{ka}{2}\right) - B \sin\left(\frac{ka}{2}\right) = 0$$

* en $x = \frac{a}{2}$, $\phi = 0$

$$\text{donc } A \cos\left(\frac{ka}{2}\right) + B \sin\left(\frac{ka}{2}\right) = 0$$

N.B. : au lieu,

On cherche $(A, B) \neq (0, 0)$.

passer les 3

On a $(A, B) \neq (0, 0)$ si le déterminant est nul,

à droite, diviser les

c'est-à-dire $2 \cos\left(\frac{ka}{2}\right) \sin\left(\frac{ka}{2}\right) = 0$.

2 équations

$$\text{donc } \cos\left(\frac{ka}{2}\right) = 0 \quad \text{ou} \quad \sin\left(\frac{ka}{2}\right) = 0$$

$$* \sin\left(\frac{ka}{2}\right) = 0$$

$$\text{donc } \frac{ka}{2} = p\pi \quad \text{où } p \in \mathbb{N}^*$$

$$\text{donc } \cos\left(\frac{ka}{2}\right) = \pm 1$$

N.B. : on revient ici

aux deux équations

$$\text{donc } A = 0 \quad \text{et } \phi = B \sin(kpx) \quad \text{où } k_p = \frac{2p\pi}{a}$$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 (2p\pi)^2}{2m a^2}$$

$$\text{donc } E_p = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m a^2} (2p)^2$$

$$* \cos\left(\frac{ka}{2}\right) = 0$$

$$\text{donc } \frac{ka}{2} = (2p+1)\frac{\pi}{2}$$

$$\text{donc } \sin\left(\frac{ka}{2}\right) = \pm 1$$

N.B. : idem

$$\text{donc } B = 0 \quad \text{et } \phi = A \cos(kpx) \quad \text{où } k_p = (2p+1)\frac{\pi}{a}$$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$\text{donc } E_p = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m a^2} (2p+1)^2$$

On trouve $|A|$ et $|B|$ par normalisation.

Condition de normalisation :

N.B. : l...l mais peu

importe car ϕ est
définie à $e^{i\theta}$ près.

$$\int_{-a/2}^{a/2} |\phi|^2 dx = 1$$

En remplaçant \cos^2 et \sin^2 par $\frac{1}{2}$, i.e. sa valeur moyenne, on a :

$$\text{donc } \frac{1}{2} \times a|B|^2 = 1 \quad \rightarrow |B| = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

$$\text{et } \frac{1}{2} \times a|A|^2 = 1 \quad \rightarrow |A| = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

$$\text{Ainsi, } E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2 \quad \text{où } n \in \mathbb{N}^* .$$

$$* \text{ si } n \text{ est pair : } \phi = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$

$$* \text{ si } n \text{ est impair : } \phi = \sqrt{\frac{2}{a}} \cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$

Le calcul est un peu plus simple si le puits est défini par $x \in]0; a[$.

Remarque : On aurait pu trouver plus rapidement la solution en utilisant que $U(x)$ est paire et donc en supposant une fois $A=0$ et une fois $B=0$.

On aurait pu tracer $|\phi|^2$ qui est plus pertinent. (cf. FIGURE 2)

3. Niveaux d'énergie

(cf. FIGURE 3)

L'énergie ne peut prendre que des valeurs discrètes.

Les énergies sont dites quantifiées.

Cela constitue une grande différence avec la mécanique de Newton.

Les E_n sont les **niveaux d'énergie**.

$$\text{L'énergie minimale est } E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} .$$

La particule ne peut donc pas être totalement au repos.

Ceci est dû au confinement de la particule dans un puits.

N.B. : d'où le nom

de la mécanique quantique

On peut P interpréter comme une conséquence de l'inégalité de Heisenberg :

$$\Delta x \Delta p \approx \hbar$$

$$\text{ici, } \Delta x \approx a \quad \text{et} \quad \Delta p \approx |p|$$

$$\text{donc } a|p| \approx \hbar$$

$$\text{donc } |p| \approx \frac{\hbar}{a}$$

$$E = E_c = \frac{p^2}{2m} \approx \frac{\hbar^2}{2ma^2}$$

→ On retrouve bien le même ordre de grandeur que E_1 .

Si p était nul, on connaîtrait parfaitement la quantité de mouvement donc Δp serait nul, l'inégalité de Heisenberg serait alors violée.

A.N. pour un électron dans un métal

$$a = 1 \text{ cm}$$

$$E_1 = 6 \cdot 10^{-34} \text{ J} = 4 \cdot 10^{-15} \text{ eV}$$

La quantification est alors expérimentalement insaisissable.

$$a = 10^{-10} \text{ m}$$

$$E_1 = 4 \cdot 10^{-4} \text{ eV}$$

La quantification est alors mesurable par spectroscopie, à l'instar des niveaux d'énergie dans un atome.

Pour un problème à 3 dimensions, on aurait 3 indices.

$$\rightarrow E = E_{n,p,m}$$

4. Analogie avec les modes propres d'une corde vibrante

L'analogie est évidente, dans les deux cas : $k_n = \frac{n\pi}{a}$.

Δ! cordes : $\omega = ck$ donc $\omega_n = c \frac{n\pi}{a}$.

$$\text{quantique : } E = \hbar\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

$$\text{donc } E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \times \frac{\pi^2}{a^2} n^2$$

C'est cohérent de trouver deux résultats différents, les cordes et les ondes en mécanique quantique ne sont pas régies par la même équation d'onde, ni par la même relation de dispersion.

5. Superposition de deux états stationnaires

(cf. FIGURE 4)

$$\psi_1 = \phi_1 e^{iE_1 t/\hbar} = \sqrt{\frac{2}{a}} \cos\left(\frac{1 \times \pi x}{a}\right) e^{-iE_1 t/\hbar}$$

$$\psi_2 = \phi_2 e^{-iE_2 t/\hbar} = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{2 \times \pi x}{a}\right) e^{-iE_2 t/\hbar}$$

Une solution de l'équation de Schrödinger est :

$$\psi = c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2 \quad \text{où} \quad |c_1|^2 + |c_2|^2 = 1.$$

Preons $c_1 = c_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$.

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\phi_1 e^{-iE_1 t/\hbar} + \phi_2 e^{-iE_2 t/\hbar} \right)$$

$$\rho = \psi \psi^*$$

$$\text{donc } \rho = \frac{1}{2} \left(\phi_1^2 + \phi_2^2 + \phi_1 \phi_2 \left(e^{\frac{i(E_2 - E_1)t}{\hbar}} + \text{c. conjugué} \right) \right)$$

$$= \frac{1}{2} \left(\phi_1^2 + \phi_2^2 + 2 \cos \left(\frac{E_2 - E_1}{\hbar} t \right) \phi_1 \phi_2 \right)$$

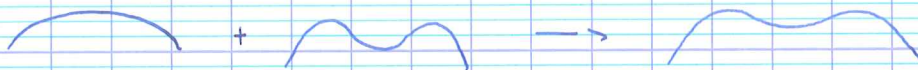
Ainsi, on en déduit la pulsation de Bohr ω_{21} :

$$\omega_{21} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar}$$

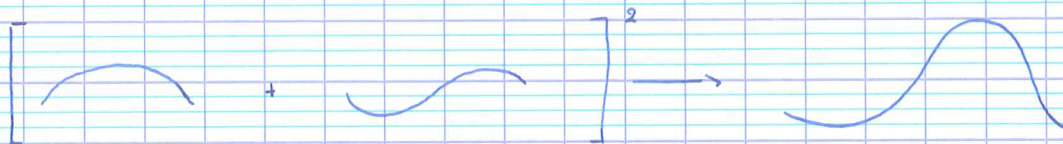
ρ oscille à la pulsation ω_{21} .

La superposition de deux états stationnaires n'est pas un état stationnaire.

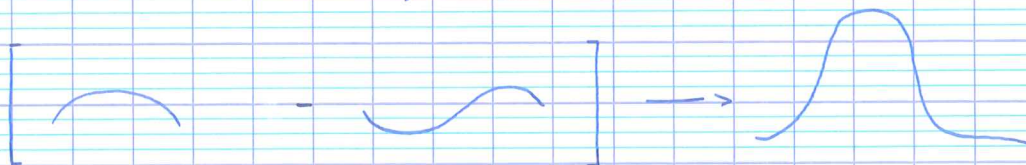
* $\cos(\omega_{21}t) = 0$: $\rho = \frac{1}{2} (\rho_1 + \rho_2)$



* $\cos(\omega_{21}t) = 1$: $\rho = \frac{1}{2} (\phi_1 + \phi_2)^2$



* $\cos(\omega_{21}t) = -1$: $\rho = \frac{1}{2} (\phi_1 - \phi_2)^2$



La particule oscille de droite à gauche à la pulsation de Bohr. Elle n'est pas dans un état stationnaire.

II. Puits de profondeur finie

1. Modèle de potentiel V

(cf. FIGURE 5)

Selon les valeurs de E , l'état de la particule diffère.

$$E < U_0$$

état lié

$$E > U_0$$

état de diffusion

Dans la suite, on suppose $E < U_0$.

Dans ce cas là, la particule serait prisonnière, elle rebondit des deux côtés.

2. Recherche d'états stationnaires

N.B.: $U(x)$ est l'énergie qu'aurait la particule en mécanique classique en l'abscisse x .

Equation de Schrödinger: $H\phi = E\phi$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \phi + U(x)\phi = E\phi$$

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U(x))\phi = 0$$

On distingue 3 intervalles :

$$* \quad x \in]-a; -\frac{a}{2}[\quad (G)$$

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \underbrace{(E - U_0)}_{< 0} \phi = 0$$

$$\text{donc} \quad \frac{d^2\phi}{dx^2} - q^2 \phi = 0 \quad \text{où} \quad q^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E)$$

$$* \quad x \in]-\frac{a}{2}; \frac{a}{2}[: \quad (P)$$

$$\frac{d^2 \phi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \phi = 0$$

$$\text{donc} \quad \frac{d^2 \phi}{dx^2} + k^2 \phi = 0 \quad \text{où} \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$* \quad x \in]\frac{a}{2}; a[: \quad (D)$$

$$\text{de même,} \quad \frac{d^2 \phi}{dx^2} - q^2 \phi = 0$$

N.B. : on peut éliminer

certaines termes puisque

P'on veut

une fonction intégrable

(bornée, donc on

enlève les termes qui

tendent vers l'infini).

On résout :

$$* \quad \text{sur } (G) : \quad \phi = C e^{-qx} + D e^{qx}$$

$$* \quad \text{sur } (P) : \quad \phi = A \cos(kx) + B \sin(kx)$$

$$* \quad \text{sur } (D) : \quad \phi = G e^{-qx} + F e^{qx}$$

On sait que ϕ est paire ou impaire.

(i.e. symétrique ou antisymétrique).

* 1^{er} cas : états symétriques

$$B = 0 \quad \text{et} \quad G = D$$



* 2^{ème} cas : états antisymétriques

$$A = 0 \quad \text{et} \quad G = -D$$



N.B. : quand U est bornée, ϕ' est continue.

Condition de bord : continuité en $x = \frac{a}{2}$ ($\phi(\frac{a}{2}^-) = \phi(\frac{a}{2}^+)$)

* Etats symétriques : $A \cos\left(\frac{ka}{2}\right) = Ge^{-qa/2}$

* Etats antisymétriques : $B \sin\left(\frac{ka}{2}\right) = Ge^{-qa/2}$

N.B. : ϕ est toujours continue

Condition de bord : $\phi'(\frac{a}{2}^-) = \phi'(\frac{a}{2}^+)$

* Etats symétriques : $-kA \sin\left(\frac{ka}{2}\right) = -qe^{-qa/2} G$

* Etats antisymétriques : $kB \cos\left(\frac{ka}{2}\right) = -qe^{-qa/2} G$

On en déduit :

* Etats symétriques : $k \tan\left(\frac{ka}{2}\right) = q$

donc $\frac{ka \tan\left(\frac{ka}{2}\right)}{1} = qa$

* Etats antisymétriques : $\frac{k}{\tan\left(\frac{ka}{2}\right)} = -q$

donc $\frac{ka}{\tan\left(\frac{ka}{2}\right)} = -qa$

Aussi, $k^2 + q^2 = \frac{2mU_0}{\hbar^2}$

donc $(ka)^2 + (qa)^2 =$

donc $\frac{(ka)^2 + (qa)^2}{1} = (k_0 a)^2$ où $k_0^2 = \frac{2mU_0}{\hbar^2}$

Dans les deux cas, on a 2 équations et 2 inconnues.

On peut donc trouver E et k .

3. Discussion graphique des conditions de bord (cf. FIGURE 6)

Posons $u = ka$ et $v = qa$.

$$\text{donc } u^2 + v^2 = (ka)^2$$

On remarque que u et v décrivent l'équation d'un cercle.

$$\bullet \text{ États symétriques : } v = u \tan\left(\frac{\theta}{2}\right)$$

$$\bullet \text{ États antisymétriques : } v = -\frac{u}{\tan\left(\frac{\theta}{2}\right)}$$

Il y a 7 couples solutions.

A chaque couple $(u_n; v_n)$ correspond une énergie.

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2ma^2} u_n^2$$

$$\text{Il y a toujours } N_{\text{solutions}} = 1 + \left\lfloor \frac{ka_0}{\pi} \right\rfloor$$

4. Spectre et visualisation des premiers états stationnaires (cf. FIGURE 7)

Les énergies sont quantifiées.

Le graphique permet de voir que : $(n-1)\pi < u_n < n\pi$
 $u_n \approx n\pi$.

$$\text{donc } E_n \approx \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2$$

Ainsi, $E_n \approx E_{n \text{ quants infini}}$

On voit que la fonction d'onde déborde dans la zone classiquement interdite. (cf. FIGURE 8)

On peut détecter la particule là où, selon les lois de la mécanique classique, elle ne pourrait pas être.

N.B. : tout se passe comme si a augmentait légèrement.

La particule est moins strictement confinée, d'où un abaissement des niveaux d'énergie.

5. Effet de largeur effective

Le débordement en onde évanescente se fait sur une longueur de $\frac{\lambda}{4}$.

On définit alors la largeur effective :

$$a_{\text{eff}} = a + 2 \times \frac{\lambda}{4}$$

N.B. : c'est comme un puits infini de largeur a_{eff} .

On peut deviner : $E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma_{\text{eff}}^2} n^2$

Démonstration :

Hypothèses :

* $U_0 \gg \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} = E_1$ (le puits est profond)

* $E_n \ll U_0$ (on étudie les niveaux bas)

$$k_0 = \frac{\sqrt{2mU_0}}{\hbar} \gg \frac{\pi}{a}$$

$$r_0 = ka \gg \pi$$

D'après la figure 6, $u_n = n\pi - \epsilon$ où $\epsilon \rightarrow 0$
 et $v_n \approx r_0$.

Pour ϕ paire, $v = u \tan\left(\frac{u}{2}\right)$.

donc $r_0 \approx (n\pi - \epsilon) \tan\left(\frac{n\pi - \epsilon}{2}\right)$ avec $n = 2p + 1$.

$$\begin{aligned} \text{or } \tan\left(\frac{n\pi - \epsilon}{2}\right) &= \tan\left(\frac{n\pi}{2} + \frac{\pi}{2} - \frac{\epsilon}{2}\right) \\ &= \frac{\cos(\epsilon/2)}{\sin(\epsilon/2)}. \end{aligned}$$

donc $r_0 \approx (n\pi - \epsilon) \frac{1}{\epsilon/2}$.

$$\frac{r_0 \epsilon}{2} \approx n\pi - \epsilon.$$

$$\text{donc } \epsilon = \frac{n\pi}{1 + r_0/2}$$

$$\begin{aligned} \text{d'où } u_n &= n\pi - \epsilon \\ &= n\pi \left(1 - \frac{1}{1 + r_0/2}\right) \\ &= n\pi \frac{r_0/2}{1 + r_0/2} \\ &= n\pi \frac{1}{2/r_0 + 1}. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{donc } E_n &= \frac{\hbar^2}{2ma^2} u_n^2 \\ &= \frac{\hbar^2}{2ma^2} \frac{\pi^2 n^2}{(1 + 2/r_0)^2}. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{On pose : } a_{\text{eff}} &= a \left(1 + \frac{2}{r_0}\right) \\ &= a + \frac{2a}{r_0} \\ &= a + \frac{2}{k_0}. \end{aligned}$$

Comme $E_n \ll U_0$ (par hypothèse), $q \simeq k_0$

On trouve bien : $\sigma_{\text{eff}} = a + \frac{2}{q}$