

Puits de potentiel en mécanique quantique

1.

I - Puits de profondeur infinie

1. Situation étudiée et modélisation.

cf. Figure 1

En mécanique classique :

$$E = \underbrace{E_c}_{\geq 0} + U \quad \text{donc } U \leq E$$

La particule ne peut accéder qu'aux régions où $U(x) \leq E$

* Si $U(x) = E$: $E_c = 0$ donc $v = 0$

* Si $E < U_0$: état lié $\rightarrow$ mouvement d'oscillation

* Si $E > U_0$: état de diffusion avec une vitesse plus élevée dans la région du puit.

On décrit des situations où une zone d'attraction retient plus ou moins la particule

partie droite de la Figure 1 : modèle très grossier.

2. Recherche des états stationnaires

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

On résout sur $[-\frac{a}{2}, \frac{a}{2}]$, $U=0$

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

$$\phi''(x) + \underbrace{\left(\frac{2m}{\hbar^2} E\right)}_{\text{la forme de la solution dépend du signe de sa}}$$

Si $E < 0$, on trouve avec les conditions de bord $\phi = 0$ ce qui est sans intérêt.

Dans la suite: $E > 0$

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

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$\phi = A \cos(kx) + B \sin(kx) \quad (A, B) \in \mathbb{C}^2$$

On pourrait aussi prendre une CL de e^{ikx} et e^{-ikx} .

CB:

$$\phi\left(\frac{a}{2}\right) = 0 \quad \text{et} \quad \phi\left(-\frac{a}{2}\right) = 0$$

$$\begin{cases} A \cos\left(\frac{ka}{2}\right) + B \sin\left(\frac{ka}{2}\right) = 0 \\ A \cos\left(\frac{ka}{2}\right) - B \sin\left(\frac{ka}{2}\right) = 0 \end{cases}$$

Il existe des solutions non nulles si le déterminant est nul.

$$\text{c'est si} \quad -2 \sin\left(\frac{ka}{2}\right) \cos\left(\frac{ka}{2}\right) = 0$$

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

$$\frac{ka}{2} = (2\ell+1)\frac{\pi}{2} \quad \ell \in \mathbb{N}$$

$$k = (2\ell+1)\frac{\pi}{a} \quad \ell \in \mathbb{N}$$

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2}{a^2} (2\ell+1)^2$$

$$\text{Alors } B = 0 \quad (\text{CB}) \Rightarrow \phi = A \cos\left(\frac{(2\ell+1)\pi x}{a}\right)$$

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

$$\frac{ka}{2} = \ell\pi \quad \ell \in \mathbb{N}^*$$

$$k = \frac{2\ell\pi}{a}$$

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

$$\text{Alors } A = 0 \quad (\text{CB}) \Rightarrow \phi = B \sin\left(\frac{2\ell\pi x}{a}\right)$$

La normalisation

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

2

donne $|A|^2 \times \frac{1}{2} a = 1$

$$|A| = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

$$|B| = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

l'argument de ces nombres n'a pas de signification physique ; on peut

prendre : $A = \sqrt{\frac{2}{a}}$ et $B = \sqrt{\frac{2}{a}}$

En regroupant les 2 situations,

on a :

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \times n^2 \quad n \in \mathbb{N}^*$$

n impair pour ϕ paire

n pair pour ϕ impaire

cf. Figure 2.

Les états stationnaires sont soit pairs soit impairs, ce qu'on aurait pu affirmer dès le début.

Si on prend l'origine sur le bord gauche, le calcul est peut-être plus simple mais on perd cette parité.

3. Niveaux d'énergie.

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

cf. Figure 3

Les énergies possibles sont dénombrables, E ne peut prendre que certaines valeurs particulières. L'énergie est quantifiée

C'est une conséquence de l'emprisonnement de la particule et des CB.

$E_1 > 0$: le repos parfait est impossible

↳ conséquence de l'inégalité de Heisenberg.

$$\Delta x \sim a$$

Heisenberg : $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$

$$\Delta p \geq \frac{\hbar}{2\Delta x} = \frac{\hbar}{2a}$$

$$\Delta v \geq \frac{\hbar}{2ma}$$

Ceci est aussi l'ordre de la vitesse

$$E = \frac{1}{2} m v^2 \geq \frac{1}{2} m \frac{\hbar^2}{(2ma)^2} = \frac{\hbar^2}{8ma^2}$$

On retrouve bien le facteur $\frac{\hbar^2}{ma^2}$

Cette quantification se rencontre dans les atomes, mais en 3d il faut 3 indices n, m, l

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

Sur l'intervalle $[0, a]$, on aurait trouvé comme pour la corde vibrante $\phi \propto \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$.

Ici, cependant, c'est $|\phi|^2$ qui a un sens physique

Par ailleurs, les équations d'onde ne sont pas les mêmes et les relations de dispersion différent.

• corde : $f_n = \frac{n c}{2a}$ ou $a = \frac{n \lambda}{2}$

$$w = ck \quad k = \frac{w}{c} = \frac{2\pi f}{c} \Rightarrow k = \frac{n\pi}{a}$$

• ici, on a encore $a = \frac{n \lambda}{2}$

$$k = \frac{n\pi}{a} \quad \text{mais} \quad E = \frac{p^2}{2m}$$

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

5. Superposition de deux états stationnaires

3.

État à $t=0$:

$$\Psi(x, 0) = c_1 \Phi_1 + c_2 \Phi_2$$

Normalisation:

$$\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} |\Psi|^2 dx = 1$$

Après calculs, la normalisation donne $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$.

On peut choisir $c_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}$ et $c_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \Phi_1 e^{-i \frac{E_1 t}{\hbar}} + \frac{1}{\sqrt{2}} \Phi_2 e^{-i \frac{E_2 t}{\hbar}}$$

$$\rho(x, t) = \Psi \Psi^*$$

Rq Ψ^* on met des $\oplus$ dans les exp.

$$= \frac{1}{2} \Phi_1^2 + \frac{1}{2} \Phi_2^2 + \frac{1}{2} \Phi_1 \Phi_2 \left(e^{-i \frac{(E_2 - E_1)t}{\hbar}} + e^{i \frac{(E_2 - E_1)t}{\hbar}} \right)$$

$$n=1 : \Phi_1 = \sqrt{\frac{2}{a}} \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right)$$

$$n=2 : \Phi_2 = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)$$

donc

$$\rho(x, t) = \frac{1}{2} e_1 + \frac{1}{2} e_2 + \sqrt{e_1 e_2} \cos\left(\frac{(E_2 - E_1)t}{\hbar}\right)$$

oscillations à la pulsation: $\omega_{12} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar}$

$$f_{12} = \frac{E_2 - E_1}{h}$$

On retrouve une formule de Planck-Einstein pour une transition entre 2 niveaux

cf. Figure 4

$$* \text{ si } \cos(\omega_{12} t) = 1$$

$$\begin{aligned} \rho &= \frac{1}{2} (\sqrt{e_1} + \sqrt{e_2})^2 \\ &= \frac{1}{2} (\Phi_1 + \Phi_2)^2 \end{aligned}$$

$$* \text{ si } \cos(\omega_{s2} t) = -1$$

$$e = \frac{1}{2} (\phi_1 - \phi_2)^2$$

II - Puits de profondeur finie.

1. Modèle de Potentiel

cf. Figure 5

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

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

* mécanique classique :

• si $E < U_0$: état lié : on se place dans ce cas pour la suite.

2. Recherche d'états stationnaires

$$* \text{ si } x \leq -\frac{a}{2}, \quad U(x) = U_0$$

$$\phi'' + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0) \phi = 0$$

$$\text{on pose } q^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E) \in \mathbb{R}^+$$

$$\phi'' - q^2 \phi = 0$$

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

on exclut cette fonction car $\rightarrow \infty$ qd $x \rightarrow -\infty$, elle n'est pas normalisable.

$$* \text{ si } -\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2}, \quad U(x) = 0$$

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

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

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

* si $x \geq \frac{a}{2}$

$$\phi = G e^{-qx} \rightarrow F e^{-qx}$$

$\rightarrow +\infty$ qd $x \rightarrow +\infty$

L'énergie E est cachée dans les variables q et k .

On remarque : $q^2 + k^2 = \frac{2m U_0}{\hbar^2}$

$$(-ka)^2 + (qa)^2 = \frac{2m U_0}{\hbar^2} a^2$$

3. Discussion graphique des conditions de bord.

On peut supposer ϕ paire ou bien impaire.

$$x \leq -\frac{a}{2}$$

paire $\phi = D e^{qx}$

$$-\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2}$$

$$\phi = A \cos(kx)$$

$$\frac{a}{2} \leq x$$

$$\phi = D e^{-qx}$$

$$G = D$$

impaire $\phi = D e^{qx}$

$$\phi = B \sin(kx)$$

$$\phi = -D e^{-qx}$$

$$G = -D$$

Comme U est bornée, ϕ et ϕ' sont continues.

* pairs :

$$\phi\left(\frac{a^-}{2}\right) = \phi\left(\frac{a^+}{2}\right)$$

$$\phi'\left(\frac{a^-}{2}\right) = \phi'\left(\frac{a^+}{2}\right)$$

$$A \cos\left(\frac{ka}{2}\right) = D e^{-qa/2} \quad (*)$$

$$-k A \sin\left(\frac{ka}{2}\right) = -q D e^{-qa/2} \quad (**)$$

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

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

* impairs :

$$B \sin\left(\frac{a}{2} k\right) = -D e^{-qa/2} \quad (*)$$

$$B k \cos\left(\frac{a}{2} k\right) = D q e^{-qa/2} \quad (**)$$

(**)/(**)

$$\frac{(*)}{(**)} \quad k \frac{1}{\tan\left(\frac{ka}{2}\right)} = -q$$

$$\frac{1}{\tan} = \cotan$$

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

on pose $u = ka$ et $v = qa$

pairs : $v = u \tan\left(\frac{u}{2}\right)$

impairs : $v = -u \cotan\left(\frac{u}{2}\right)$

$$\left. \begin{aligned} \text{et } u^2 + v^2 &= \frac{2m U_0 a^2}{\hbar^2} \\ &= \underbrace{\phantom{\frac{2m U_0 a^2}{\hbar^2}}}_{x_0^2} \end{aligned} \right\} \text{ cercle de rayon } x_0$$

cf. Figure 6 résolution graphique

$$k_0 = \frac{\sqrt{2mU_0}}{\hbar} \quad x_0 = k_0 a$$

les racines sont dénombrables et est y en a $N = 1 + \left\lfloor \frac{x_0}{\pi} \right\rfloor$

les racines u_n sont de la forme $u_n = n\pi - \varepsilon_n$ $\varepsilon_n \in]0, \pi[$

$$k_n = \frac{u_n}{a} = \frac{n\pi - \varepsilon_n}{a}$$

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 u_n^2}{2m a^2} = \frac{\hbar^2}{2m a^2} (n\pi - \varepsilon_n)^2$$

$$E_n \leq \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2m a^2}$$

$$E_n \leq E_{n\infty} \leftarrow \text{partie I}$$

Par rapport à I, le confinement est moins sévère car U_0 est fini.

Par onde évanescente (exp décroissante) la particule peut accéder à la zone classiquement interdite.

Il en résulte un abaissement des niveaux d'énergie.

On retrouve une alternance d'états symétriques et antisymétriques (pairs et impairs) et l'état fondamental est de type symétrique.

4. Spectre et visualisation des premiers états stationnaires.

cf. Figure 8

Plus E augmente, plus q diminue, plus $\frac{1}{q}$ augmente et plus le débordement dans la zone classiquement interdite est profond.

5. Effet de largeur effective

5.

• Cas $U_0 \gg \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} = E_{n\infty}$

cf. Figure 6

↳ "puît profond"

Alors $\pi_0 \gg \pi$

Les 1^{ères} racines sont alors très proches des multiples de π ($E_n \ll U_0$)

Un DL montre que :

$$E_n \rightarrow 0$$

$$E_n \approx \frac{2n\pi}{\pi_0 + 2}$$

$$\text{puis } k_n \approx \frac{n\pi}{1 + \frac{2}{k_0 a}}$$

$$\text{donc } E_n \approx \frac{\hbar^2}{2ma^2} \left(\frac{n\pi}{1 + \frac{2}{k_0 a}} \right)^2$$

$$\approx \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2m \left(a + \frac{2}{k_0} \right)^2}$$

Comme $E_n \ll U_0$, $q \approx k_0$

$$\text{On note } a_{\text{eff}} = a + \frac{2}{k_0} = a + \frac{2}{q}$$

Grâce aux ondes évanescentes, la particule accède à une zone un peu plus large que a .

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m a_{\text{eff}}^2} n^2$$

même formule que pour le puit ∞
mais a est remplacé par a_{eff} .

