

Confinement d'une particule et quantification de l'énergie

Sommaire

I Confinement d'une particule dans un potentiel $V(x)$ uniforme par morceaux	2
I.1 Qu'est-ce qu'une particule confinée ?	2
I.2 Simplification de la modélisation : potentiel variant de manière abrupte	4
II Puits de potentiel infini	4
II.1 Approximation du puits de potentiel infini	4
II.2 Conditions aux limites en mécanique quantique	5
II.3 Résolution de l'équation de Schrödinger stationnaire	5
II.4 Interprétations	6
II.5 Evolution temporelle d'une particule dans une superposition d'états	8
III Puits de potentiel fini	10
III.1 Conditions aux limites en mécanique quantique	10
III.2 Equation de Schrödinger stationnaire	10
III.3 Etats liés : $0 < E < V_0$	11
III.4 Etats de diffusion : $E > V_0$	15
III.5 Synthèse sur les niveaux d'énergies possibles pour les états stationnaires	16
III.6 Comparaison des niveaux d'énergies entre le puits de potentiel infini et le puits de potentiel fini	17
Exercices	18

Questions de cours

- Puits de potentiel infini : sens physique, détermination des énergies et des fonctions d'onde des états stationnaires, commentaire sur l'origine de la quantification des énergies.
- Puits de potentiel infini : énergie de confinement quantique et lien avec l'inégalité de Heisenberg spatiale.
- Puits de potentiel infini de largeur a : on donne les énergies des états stationnaires $E_n = n^2 E_1$ avec $E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$ et $n \in \mathbb{N}^*$. Commenter les analogies, les différences et les liens entre physique classique et physique quantique au vu de ces valeurs d'énergie.
- Puits de potentiel fini (cas général) : décrire la forme des fonctions d'onde dans les différentes régions de l'espace, notion d'onde évanescence, expliciter les conditions aux limites.
- Puits de potentiel fini (recherche des fonctions d'onde propres symétriques) : décrire la forme des fonctions d'onde dans les différentes régions de l'espace, expliciter les conditions aux limites, proposer une résolution graphique permettant la détermination des niveaux d'énergies.
- Puits de potentiel fini *versus* puits de potentiel infini : interpréter qualitativement les positions relatives des niveaux d'énergie dans les deux modèles avec l'inégalité de Heisenberg spatiale.

Prise de notes : Au début du XXI^{ème} siècle, de nbr expériences montrent une quantification de l'énergie dans les systèmes atomiques (principalement : spectroscopie d'une vapeur atomique). Cette quantification de l'énergie ne se retrouve pas en physique classique (exemple du coureur qui se met à courir : son énergie cinétique passe continûment de 0 à sa valeur maximale : absence de quantification).

Cette quantification de l'énergie est clé en chimie : remplissage électronique des sous-couches dans les systèmes atomiques ou moléculaires, réactivité des espèces chimiques (électrons de valence ? stabilité ?). Elle est aussi centrale en matière condensée par exemple : propriétés magnétiques de la matière, conduction électronique. Il faut réussir à comprendre l'origine de cette quantification.

★

Le modèle de Bohr (1913) est le premier modèle simple permettant de prédire la quantification de l'énergie dans les atomes hydrogénoïdes. Mais Bohr a posé la quantification du moment cinétique $L_n = n\hbar$ comme un postulat de son modèle : n'explique pas l'origine microscopique de cette quantification... La question reste donc entière : pourquoi l'énergie d'un système quantique peut-elle être quantifiée ?

Attention : tout système quantique n'a pas une énergie quantifiée : penser à la particule libre.

Ce chapitre a quatre objectifs principaux :

1. Déterminer les énergies et les fonctions d'onde des états stationnaires pour le puits de potentiel infini.
2. Écrire et interpréter la forme des fonctions d'onde d'un état stationnaire suivant la valeur de l'énergie E de la particule par rapport à la valeur constante du potentiel dans la région considérée.
3. Associer la quantification de l'énergie d'une particule quantique au confinement spatial de cette particule.
4. Distinguer et faire des analogies entre les résultats de la physique classique et ceux de la physique quantique.

Dans ce chapitre, on se limite à l'étude spatiale (selon une seule dimension cartésienne x) et temporelle de particules matérielles de masse m évoluant dans un potentiel d'énergie $V(x)$.

I Confinement d'une particule dans un potentiel $V(x)$ uniforme par morceaux

I.1 Qu'est-ce qu'une particule confinée ?

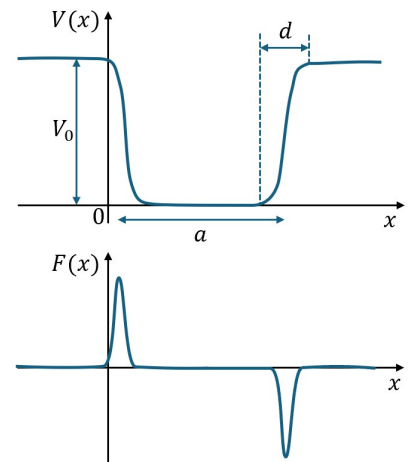
Définition : Particule confinée

Une particule est dite confinée lorsqu'elle est contrainte de rester dans une région restreinte de l'espace, sous l'effet d'une force $\vec{F} = F(x)\vec{e}_x$ ou, de manière équivalente, du potentiel $V(x)$ associé à cette force.

La force \vec{F} conservative dérive du potentiel $V(x)$:

$$\vec{F} = -\vec{\text{grad}}(V) \Rightarrow F(x) = -\frac{dV}{dx}$$

Analyse du mouvement de la particule dans le cadre de la physique classique :



- Si l'énergie mécanique E de la particule vérifie $E > V_0$, alors la particule peut se déplacer de $x = -\infty$ à $x = +\infty$: on dit que la particule est dans un **état de diffusion** ou **état libre**.

★

- Si l'énergie mécanique E de la particule vérifie $0 < E < V_0$, alors la particule est confinée entre $x = 0$ et $x = a$: on dit que la particule est dans un **état lié**. Le mouvement de la particule est alors une oscillation entre deux positions de rebroussement x_{\min} et x_{\max} au niveau desquelles la vitesse s'annule.

En mécanique quantique, on reprend le même vocabulaire : on parlera d'**état de diffusion** si $E > V_0$ et d'**état lié** si $0 < E < V_0$. Ce dernier cas correspond à une particule confinée.

Ordre de grandeur de la largeur a de puits de potentiel pour faire apparaître des effets quantiques :

Un traitement quantique de ce problème est indispensable si a est au plus de l'ordre de qq longueurs d'onde de De Broglie : $a \leq 100\lambda_{DB}$. Dans le cas contraire, un traitement classique du problème convient.

Pour un électron dans le puits de masse $m = 9.1 \times 10^{-31}$ kg à la température ambiante

★

$T = 300$ K, on a, par agitation thermique : $E_c = \frac{3}{2}k_B T$. Or : $E_c = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m} =$

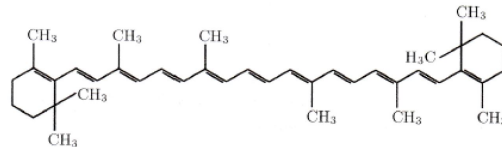
$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{h^2}{\lambda_{DB}^2 2m}. \text{ Donc : } \lambda_{DB} = \sqrt{\frac{h^2}{3k_B T m}} = 6 \text{ nm.}$$

Donc, pour un électron à $T = 300$ K, quantique si $a \leq 500$ nm.

Réalisation pratique d'un puits de potentiel :

Il existe de nombreuses situations concrètes pouvant être modélisées par un tel puits de potentiel. Citons par exemple :

- les électrons π de la molécule de β -carotène pouvant être délocalisés le long de l'ensemble des double liaisons.



- des nucléons subissant des interactions nucléaires attractives au sein d'un noyau mais subissant des interactions électrostatiques répulsives en dehors du noyau (explication de la radioactivité α par exemple, cf. chapitre MQ3).

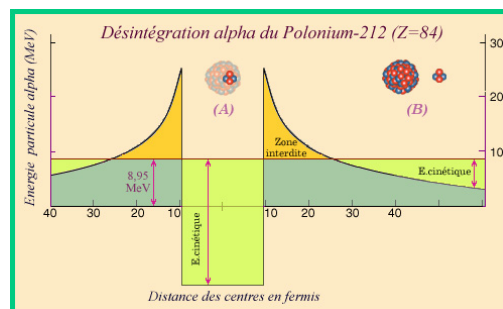
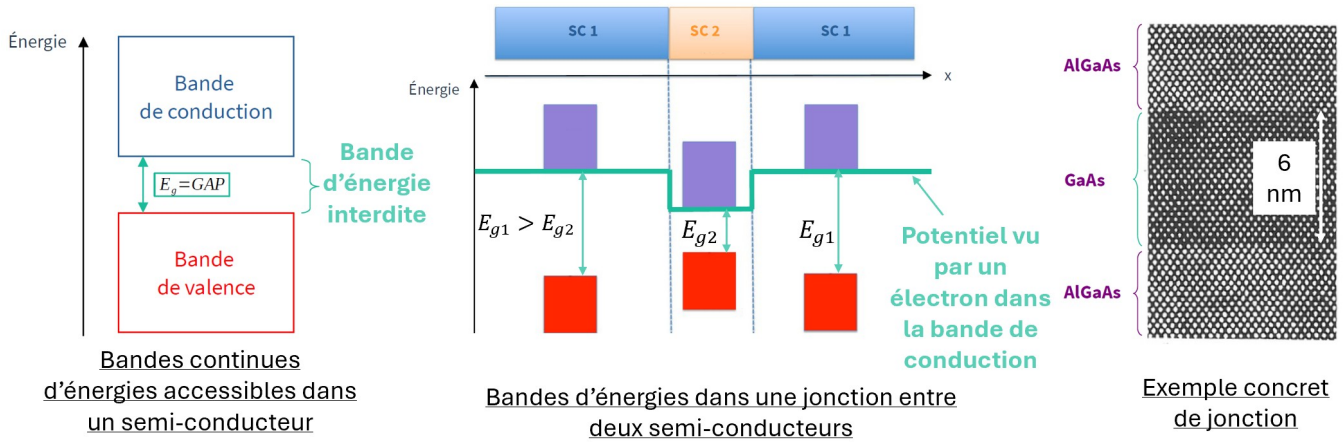


Figure 1: Source : laradioactivite.com

- un dépôt à l'échelle nanométrique de matériaux semi-conducteurs.

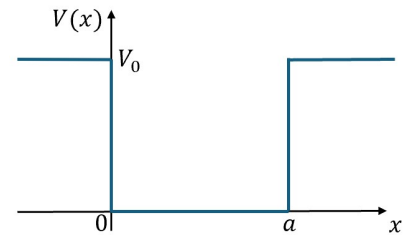


Notons d'ailleurs que les nanotechnologies permettent de réaliser des structures avec un confinement selon une dimension spatiale, selon deux dimensions ou même selon les trois dimensions de l'espace (on parle dans ce dernier cas de boîte quantique, ou *quantum dots*).

I.2 Simplification de la modélisation : potentiel variant de manière abrupte

Dans un souci de simplification de la résolution du problème, nous souhaitons décrire le potentiel $V(x)$ comme une fonction uniforme par morceaux. On parlera alors de **puits de potentiel fini** (ou de **puits de potentiel carré** ou **puits de potentiel rectangulaire**) de hauteur V_0 et de largeur a .

A quelle condition peut-on remplacer le potentiel $V(x)$ précédent par ce potentiel carré ?



- ★ Il faut pouvoir négliger la longueur d de variation de $V(x)$ devant la longueur caractéristique d'évolution de la fonction d'onde, i.e. devant la longueur d'onde de De Broglie : $d \ll \lambda_{DB}$.

Dans la suite de ce cours, nous ne considérerons que des puits de potentiel carrés.

II Puits de potentiel infini

II.1 Approximation du puits de potentiel infini

Dans cette partie, on simplifie encore davantage le potentiel $V(x)$ en supposant qu'il est infini en dehors de $[0, a]$:

$$\begin{cases} V(x) = +\infty & \text{si } x < 0 \\ V(x) = 0 & \text{si } 0 \leq x \leq a \\ V(x) = +\infty & \text{si } x > a \end{cases}$$

- ★ Graphes et numérotation des régions.

Cette modélisation simplifiée est celle permettant la résolution la plus simple du problème du puits de potentiel.

Validité de cette modélisation : A quelle condition est-il pertinent de considérer ce puits de potentiel infini plutôt que le puits de potentiel fini ?

Ce puits de potentiel infini est pertinent si l'énergie E de la particule vérifie $E \ll V_0$: du point de vue de la particule, tout se passe comme si les marches de potentiel étaient infiniment hautes.

Dans la suite de cette partie II, la modélisation du potentiel sera donc un puits de potentiel infini

de largeur a .

Analyse du mouvement de la particule dans le cadre de la physique classique :

- ★ La particule a forcément une énergie mécanique $E \geq 0$ et est dans un **état lié**. Elle est confinée entre $x = 0$ et $x = a$ et rebondit contre les "murs" de potentiel (idée de bille dans un verre).
Graphe de $x(t)$: signal triangulaire car $v = \text{cste}$.

II.2 Conditions aux limites en mécanique quantique

Comme en mécanique classique, comme le potentiel tend vers $+\infty$ pour $x < 0$ et $x > a$, la probabilité de trouver la particule dans les régions I et III est nulle :

- ★ $\psi(x < 0, t) = 0$ et $\psi(x > a, t) = 0$
On admet que la fonction d'onde est continue en $x = 0$ et en $x = a$:

$$\psi(x = 0, t) = 0 \quad \text{et} \quad \psi(x = a, t) = 0$$

Remarque : Dans le cas où le potentiel $V(x)$ devient infini, il n'y a pas continuité de $\frac{\partial \psi}{\partial x}$.

II.3 Résolution de l'équation de Schrödinger stationnaire

a Energies des états stationnaires

On rappelle l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x)\psi(x, t)$$

Le potentiel $V(x)$ étant stationnaire, on cherche $\psi(x, t)$ sous la forme d'un état stationnaire : $\psi(x, t) = \Phi(x) e^{-\frac{iEt}{\hbar}} = \Phi(x) e^{-i\omega t}$ avec $E = \hbar\omega$ l'énergie de l'état stationnaire et $\Phi(x)$ vérifiant l'équation de Schrödinger stationnaire :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Phi}{dx^2} + V(x)\Phi(x) = E\Phi(x)$$

Dans la région II :

- ★ $V(x) = 0 \Rightarrow \frac{d^2 \Phi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \Phi(x) = 0$
et $E > 0$ car $V(x) = 0$. On pose $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \iff E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$. Donc :

$$\frac{d^2 \Phi}{dx^2} + k^2 \Phi(x) = 0$$

On reconnaît l'équation d'un OH dont la solution générale est

$$\Phi(x) = A \cos(kx) + B \sin(kx)$$

avec A et B des constantes complexes.



Exercice : En utilisant les conditions aux limites, déterminer les énergies possibles pour les états stationnaires. Représenter ces énergies sur un graphe en énergie.

$$A = 0 \text{ et } \sin(ka) = 0 \Rightarrow ka = n\pi. \text{ Donc } E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2 \text{ avec } n \in \mathbb{Z}$$

★ On se restreint aux valeurs de n positives, car $\Phi_{-n}(x) = -\Phi_n(x)$: les deux fonctions d'onde donnent la même densité de probabilité. La valeur $n = 0$ donnant $\psi = 0$ est sans intérêt physique. Donc on se restreint à $n \in \mathbb{N}^*$.

Graphe

Le niveau d'énergie $E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$ est appelé **niveau fondamental**, les autres niveaux d'énergie étant les **niveaux excités**. Toutes les énergies sont repérées par un entier naturel non nul n appelé **nombre quantique**.

Ordres de grandeurs (très grossiers) :

- Supposons que l'on puisse modéliser un électron confiné dans un atome par un puits de potentiel infini de taille a de l'ordre de la taille de l'atome. Avec $m \sim 10^{-30}$ kg et $a \sim 10^{-10}$ m, on trouve $E_1 \sim 10$ eV. Cette énergie correspond à l'ordre de grandeur des énergies mises en jeu dans les transformations chimiques.
- En faisant le même modèle pour un nucléon dans un noyau, on aboutit, avec $m \sim 10^{-27}$ kg et $a \sim 10^{-15}$ m, à $E_1 \sim 100$ MeV. Les énergies de liaison par nucléon dans un noyau atomique sont de l'ordre de 10 MeV.

b Fonctions d'onde des états stationnaires

On a ainsi : $\Phi_n(x) = B \sin(k_n x)$. On détermine la constante B avec la condition de normalisation :

$$\int_0^a |\Phi(x)|^2 dx = 1 \Rightarrow |B|^2 \int_0^a \sin^2(k_n x) dx = |B|^2 \int_0^a \left(\frac{1 - \cos(2k_n x)}{2} \right) dx = \frac{|B|^2 a}{2} = 1$$

La fonction d'onde étant définie à un facteur de phase près, on peut alors choisir $B = \sqrt{\frac{2}{a}}$.

★ Les fonctions d'onde des états stationnaires s'écrivent :

$$\psi_n(x, t) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(k_n x) e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} \quad \text{avec} \quad k_n = \frac{n\pi}{a} \quad \text{et} \quad E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = n^2 E_1$$

Graphe représentant l'allure de $\Phi_n(x)$ avec la convention de représenter ces fonctions d'onde avec une origine décalée de la valeur de l'énergie de l'état stationnaire + graphe avec la densité de probabilité. Ajouter l'écart $\frac{\lambda_{DB}}{2}$ entre deux noeuds de la densité de proba.

II.4 Interprétations

La résolution de ce problème montre de nombreuses similitudes avec le problème de la recherche des modes propres pour une corde vibrante fixée en ses deux extrémités, mais fait aussi apparaître des spécificités propres à la mécanique quantique.

a Points communs avec la physique classique

- Les modes propres de la corde vibrante et les fonctions d'onde propres sont stationnaires et harmoniques.
- Les conditions aux limites sous forme de noeuds (ou de ventres) induisent une quantification des vecteurs d'onde k_n .

- Deux ventres ou deux noeuds consécutifs sont distants de $\frac{\lambda}{2}$, alors qu'un ventre et un noeud consécutifs sont distants de $\lambda/4$.
- La fonction d'onde peut aussi s'écrire :

$$\psi_n(x,t) = \sqrt{\frac{2}{a}} \left(\frac{e^{ik_n x} - e^{-ik_n x}}{2i} \right) e^{-i\omega_n t} \quad \text{avec} \quad E_n = \hbar\omega_n$$

La fonction d'onde d'un état stationnaire est donc la superposition de deux OPH contra-propageantes, liées à la réflexion de l'OPH sur les bords du puits de potentiel.

- Le potentiel $V(x)$ est symétrique autour de $x = \frac{a}{2}$. D'après le principe de Curie, la symétrie dans la cause se retrouve dans la conséquence : la densité de probabilité est également symétrique autour de $x = \frac{a}{2}$. Il en résulte que la fonction d'onde est symétrique ou anti-symétrique par rapport à $x = \frac{a}{2}$.

Remarque : Cette propriété de symétrie ou d'antisymétrie de la fonction d'onde sera très utile pour simplifier le problème plus complexe du puits de potentiel fini.

b Différences avec la physique classique

- La relation de dispersion associée à la corde vibrante (équation de d'Alembert) est différente de la relation de dispersion associée à l'équation de Schrödinger.
 - La densité de probabilité est indépendante du temps, ce qui est caractéristique d'un état stationnaire. En physique classique, la position de la corde (ou de la bille) dépend du temps, même pour une onde stationnaire.
 - Contrairement au cas d'une bille confinée, il existe des points où la probabilité de trouver la particule est nulle quelque soit t .
 - Le confinement de la particule quantique implique que l'énergie est quantifiée. (Pour rappel, en l'absence de confinement, l'énergie de la particule quantique n'est pas quantifiée.) En revanche, pour la corde vibrante ou la bille confinée, l'énergie mécanique peut prendre n'importe quelle valeur.
 - L'énergie quantique E_1 du fondamental n'est pas nulle : E_1 est aussi appelée **énergie de confinement quantique**. Le confinement d'une particule quantique induit que son énergie cinétique est nécessairement non nulle. Cette propriété est à relier à l'inégalité de Heisenberg (cf. ci-après).

Energie minimale autorisée d'après l'inégalité d'Heisenberg :

La particule quantique dans le puits est confinée dans un domaine de largeur a : l'indétermination sur sa position vérifie $\Delta x \leq \frac{a}{2}$.

Graphe avec la densité de proba du fondamental et l'explicitation de Δx . Δx est l'écart-type de la distribution des positions de la particule.

- ★ D'après l'inégalité d'Heisenberg :

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \Rightarrow \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2\Delta x} \geq \frac{\hbar}{a}$$

Graphe avec la densité de proba en quantité de mouvement et explicitation de Δp_x .

La particule quantique a la même probabilité de se déplacer dans le sens des x croissants ou dans le sens des x décroissants : aucune direction n'est privilégiée. Donc, $\langle p_x \rangle = 0$. Il en résulte que

$$\Delta p_x = \sqrt{\langle p_x^2 \rangle - \langle p_x \rangle^2} = \sqrt{\langle p_x^2 \rangle}.$$

Ainsi, l'énergie minimale de la particule imposée par la relation d'Heisenberg est :

- ★
$$E_{\min} = \frac{\langle p_x^2 \rangle_{\min}}{2m} = \frac{\hbar^2}{2ma^2} > 0$$

Par rapport au cas de la particule libre, le confinement induit une augmentation de l'énergie cinétique minimale.



On vérifie bien que l'énergie du fondamental $E_1 > E_{\min}$. L'inégalité de Heisenberg permet de retrouver l'ordre de grandeur de $E_1 \sim E_{\min}$.

c Lien entre la physique classique et la physique quantique

Les résultats de la physique quantique redonnent les résultats classiques si :

- ★ • $a \rightarrow +\infty$: plus la largeur du puits est importante, plus l'énergie de confinement quantique diminue et plus l'écart entre deux niveaux d'énergies successifs diminue. Le système tend vers un continuum d'énergies accessibles. On retrouve la propriété énoncée dans la sous-partie I.1.
- $m \rightarrow +\infty$: à nouveau, l'énergie de confinement quantique tend vers zéro et l'écart entre deux niveaux d'énergies successifs aussi. On retrouve un continuum d'énergies accessibles, semblable à la physique classique. Un système tend donc à perdre ses propriétés quantiques lorsque sa masse augmente.
- " $\hbar \rightarrow 0$ " : la constante fondamentale de la physique quantique à l'origine de toutes les propriétés quantiques est la constante de Planck. Si on imaginait un monde où $\hbar \rightarrow 0$, on retrouverait alors uniquement des propriétés décrites par la physique classique. C'est effectivement bien le cas sur l'exemple de l'énergie de confinement quantique et l'écart entre niveaux d'énergies successifs.

Remarquons enfin qu'en physique classique, les énergies cinétiques mises en jeu sont très grandes (au moins de l'ordre du Joule) devant l'énergie de confinement quantique. En physique quantique, quand $n \rightarrow +\infty$, la densité de probabilité présente de nombreuses oscillations : la particule a une probabilité non nulle d'être présente en presque tout point de l'espace. Cette propriété est similaire à l'étude classique d'un puits de potentiel.

II.5 Evolution temporelle d'une particule dans une superposition d'états

Comme souvent en mécanique quantique, la particule a une évolution semblable à celle prédite par la physique classique lorsque cette particule est décrite par une superposition d'états stationnaires.

Prenons en guise d'exemple une particule décrite par la fonction d'onde $\psi(x,t) = \frac{\sqrt{3}}{2}\psi_1(x,t) + \frac{1}{2}\psi_2(x,t)$ où $\psi_1(x,t)$ et $\psi_2(x,t)$ sont les fonctions d'onde des états stationnaires de nombres quantiques $n = 1$ et $n = 2$.

Comme on veut étudier l'évolution de la position de la particule quantique, on s'intéresse à la densité de probabilité :

$$|\psi(x,t)|^2 = \psi\psi^* = \frac{3}{4}|\psi_1|^2 + \frac{1}{4}|\psi_2|^2 + 2\frac{\sqrt{3}}{4}\text{Re}(\psi_1\psi_2^*)$$

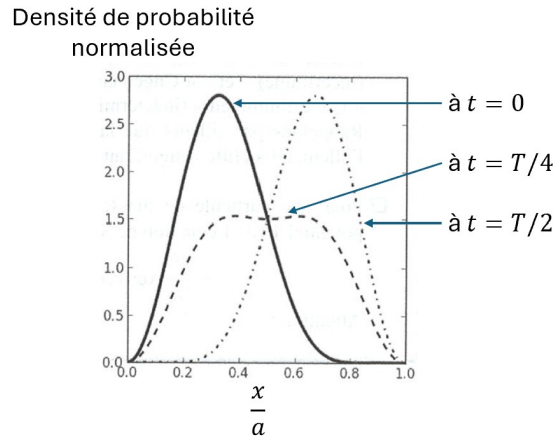
- ★ Avec les fonctions d'onde déterminées pour le puits de potentiel infini, on obtient :

$$|\psi(x,t)|^2 = \frac{3}{4}\frac{2}{a}\sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) + \frac{1}{4}\frac{2}{a}\sin^2\left(\frac{2\pi x}{a}\right) + \frac{\sqrt{3}}{2}\frac{2}{a}\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)\sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\cos\left(\frac{(E_2 - E_1)t}{\hbar}\right)$$

Cette densité de probabilité dépend du temps, signe que la superposition de deux états stationnaires n'est pas un état stationnaire.



On trace ci-contre cette densité de probabilité (normalisée pour qu'elle soit sans unité) en fonction de x pour différentes valeurs de t . On a posé $T = \frac{1}{\nu} = \frac{2\pi}{\omega}$ avec $\omega = \frac{E_2 - E_1}{\hbar}$ la pulsation d'oscillation de la densité de probabilité.



★ A $t = 0$, la particule a une plus grande probabilité d'être détectée à gauche du puits. Progressivement, le maximum de probabilité de détection se décale vers la droite jusqu'à atteindre sa position extrême pour $t = \frac{T}{2}$. L'oscillation de la densité de probabilité se poursuit alors vers la gauche jusqu'à revenir aux valeurs initiales pour $t = T$.

Oscillation d'une particule dans une superposition d'états stationnaires

En mécanique quantique, il y a mouvement de la particule quand l'état du système est dans une superposition d'états stationnaires d'énergies différentes.

★ La densité de probabilité (et donc la particule) oscille à la fréquence $\nu = \frac{(E_2 - E_1)}{\hbar}$ appelée **fréquence de Bohr** du système. Cette fréquence est d'autant plus élevée que la différence entre les deux énergies des états stationnaires considérés est grande.

Position moyenne de la particule à l'instant t :

La densité de probabilité permet même de conclure quantitativement sur la position moyenne de la particule à un instant t fixé.

A t fixé, on calcule la position moyenne comme en mathématiques (mettre des guillemets) :

$$\langle x \rangle (t) = \sum x P(X = x) \Rightarrow \langle x \rangle (t) = \int_0^a x |\psi(x,t)|^2 dx$$



Cette moyenne est à comprendre au sens quantique. La mesure de la position de la particule à t fixé donne un résultat intrinsèquement aléatoire : il s'agit ici d'une moyenne probabiliste (i.e. sur un grand nombre de mesures), pas d'une moyenne temporelle.

Remarque : De même, si nous voulions connaître, à t fixé, la moyenne de la mesure de la position quadratique de la particule, on calculerait $\langle x^2 \rangle (t) = \int_{x=0}^a x^2 |\psi(x,t)|^2 dx$.

On admet que le calcul de l'intégrale donne :

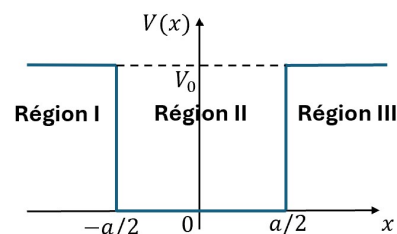
$$\langle x \rangle (t) = \frac{a}{2} - \frac{8\sqrt{3}}{9\pi^2} a \cos\left(\frac{(E_2 - E_1)t}{\hbar}\right)$$

Cette expression montre que la particule est en mouvement dans le puits. L'oscillation de la particule se fait autour de $x = \frac{a}{2}$ avec une amplitude de $\frac{8\sqrt{3}}{9\pi^2} a \simeq 0.16a$. (Attention néanmoins, la

notion de trajectoire d'une particule n'a pas de sens en physique quantique.) On remarque que la particule a une forte probabilité de "rebrousser chemin" avant qu'elle atteigne les bords du puits de potentiel. Ceci s'interprète physiquement en considérant que "le pied" de la superposition d'états décrivant la particule confinée ressent les bords du puits de potentiel avant que le centre de cette superposition d'états n'atteigne ce bord.

III Puits de potentiel fini

Dans cette partie, on étudie le puits de potentiel de hauteur finie, introduit à la sous-partie I.2. Ce puits de potentiel est une modélisation moins restrictive que le puits de potentiel infini, mais mène à une résolution plus délicate.



Remarque : Vous remarquerez que, volontairement, j'ai choisi de placer les bornes du puits de potentiel en $\pm a/2$, ce qui rend le puits de potentiel symétrique autour de $x = 0$. Dans le cas du puits de potentiel fini, cette paramétrisation facilite la résolution (ce qui n'est pas le cas pour le puits de potentiel infini).

III.1 Conditions aux limites en mécanique quantique

Dans le cas où le potentiel $V(x)$ ne tend pas vers l'infini, on admet que la fonction d'onde et sa dérivée partielle spatiale sont continues :

$$\psi(x = \frac{a^-}{2}, t) = \psi(\frac{a^+}{2}, t) \quad \text{et} \quad \frac{\partial \psi}{\partial x}(\frac{a^-}{2}, t) = \frac{\partial \psi}{\partial x}(\frac{a^+}{2}, t)$$

et de même en $-\frac{a}{2}$.

Synthèse sur les conditions aux limites pour un puits de potentiel

Les conditions aux limites diffèrent donc suivant si le potentiel tend vers l'infini ou non.

- Si le potentiel reste fini, alors $\psi(x,t)$ et $\frac{\partial \psi}{\partial x}$ sont continus.
- Si le potentiel tend vers l'infini, alors seul $\psi(x,t)$ est continu.

Ces conditions aux limites sont à appliquer aux deux limites spatiales du puits de potentiel.

Remarque : Comme on se contente de chercher des états stationnaires, ces conditions limites se traduisent directement sur la partie spatiale $\Phi(x)$ de la fonction d'onde.

Remarque : Ne pas oublier qu'il faut aussi respecter la condition de normalisation.

III.2 Equation de Schrödinger stationnaire

On rappelle l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x)\psi(x,t)$$

Le potentiel $V(x)$ étant stationnaire, on cherche $\psi(x,t)$ sous la forme d'un état stationnaire :

$\psi(x,t) = \Phi(x) e^{-\frac{iEt}{\hbar}} = \Phi(x) e^{-i\omega t}$ avec $E = \hbar\omega$ l'énergie de l'état stationnaire (qui est donc une constante, quelque que soit la région du puits de potentiel) et $\Phi(x)$ vérifiant l'équation de Schrödinger stationnaire :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Phi}{dx^2} + V(x)\Phi(x) = E\Phi(x)$$

Dans les régions I et III :

$$\star \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Phi}{dx^2} = (E - V_0)\Phi(x) \Rightarrow \frac{d^2\Phi}{dx^2} - \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} \Phi(x) = 0$$

Dans la région II :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Phi}{dx^2} = E\Phi(x) \Rightarrow \frac{d^2\Phi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \Phi(x) = 0$$

La suite de la résolution diffère suivant le signe de $V_0 - E$.

III.3 Etats liés : $0 < E < V_0$

Dans cette sous-partie, on se contente d'étudier les états liés du puits de potentiel, c'est-à-dire que l'énergie de l'état stationnaire vérifie $0 < E < V_0$.

a Formes des parties spatiales des fonctions d'onde (en n'utilisant pas les propriétés de symétrie du potentiel)

On pose $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} > 0$ et $q = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} > 0$, de sorte que les équations différentielles se ré-écrivent :

- dans les régions I et III : $\frac{d^2\Phi}{dx^2} - q^2\Phi(x) = 0$
- dans la région II : $\frac{d^2\Phi}{dx^2} + k^2\Phi(x) = 0$

★

Les formes des solutions sont donc :

$$\begin{cases} \Phi_1(x) = \alpha_1 e^{qx} + \beta_1 e^{-qx} & \text{ou de manière équivalente} & \Phi_1(x) = \gamma_1 \cosh(qx) + \delta_1 \sinh(qx) \\ \Phi_2(x) = \alpha_2 e^{ikx} + \beta_2 e^{-ikx} & \text{ou} & \Phi_2(x) = \gamma_2 \cos(kx) + \delta_2 \sin(kx) \\ \Phi_3(x) = \alpha_3 e^{qx} + \beta_3 e^{-qx} & \text{ou de manière équivalente} & \Phi_3(x) = \gamma_3 \cosh(qx) + \delta_3 \sinh(qx) \end{cases}$$

avec toutes les constantes étant a priori complexes. Dans la suite, on cherchera à chaque fois à choisir l'écriture des solutions qui facilite la résolution mathématique.

Physiquement, la densité de probabilité ne peut pas diverger. Donc : $\beta_1 = 0$ et $\alpha_3 = 0$.

Il nous resterait alors à déterminer les valeurs des 4 constantes restantes. En utilisant les 4 conditions aux limites de continuité, on obtiendrait un système linéaire de 4 équations à 4 inconnues.

Remarque : Ce système pourrait se mettre sous une forme matricielle, du type $MX = 0$ avec $X = (\alpha_1 \ \alpha_2 \ \beta_2 \ \beta_3)$. Mais il existe une solution triviale à ce système : le vecteur nul. Il ne faut surtout pas que cette solution soit unique (absence de sens physique de cette solution) : il faut donc mathématiquement imposer que $\det(M) = 0$ pour que ce système admette des solutions non triviales.

b Formes des parties spatiales des fonctions d'onde symétriques et antisymétriques

On peut grandement simplifier la résolution mathématique de ce problème en utilisant (comme souvent) les symétries du problème.

Le puits de potentiel est symétrique autour de $x = 0$: cela implique que les fonctions d'onde doivent être symétriques ou antisymétriques par rapport à $x = 0$. On simplifie donc la forme des parties spatiales des fonctions d'onde en cherchant des fonctions d'onde paires ou impaires.

Fonctions d'onde symétriques par rapport à $x = 0$:

La forme des solutions cherchées est donc :

$$\star \quad \begin{cases} \Phi_1(x) = A_1 e^{qx} + \cancel{B_1}^0 e^{-qx} \\ \Phi_2(x) = A_2 \cos(kx) \\ \Phi_3(x) = \cancel{A_3}^0 e^{qx} + B_3 e^{-qx} \end{cases}$$

De plus, par parité,

$$\forall x > a/2, \quad \Phi_3(x) = \Phi_1(-x) \Rightarrow B_3 = A_1$$

Donc, finalement, on cherche les solutions sous la forme :

$$\begin{cases} \Phi_1(x) = A_1 e^{qx} \\ \Phi_2(x) = A_2 \cos(kx) \\ \Phi_3(x) = A_1 e^{-qx} \end{cases}$$

Remarque : Comme la fonction d'onde est définie à un facteur de phase près, on peut imposer la phase pour l'une des constantes (pas pour les deux !) : par exemple $A_1 \in \mathbb{R}^+$. En utilisant la condition limite de continuité de $\Phi(x)$, on peut alors en déduire que $A_2 \in \mathbb{R}$.

Fonctions d'onde antisymétriques par rapport à $x = 0$:

La forme des solutions cherchées est :

$$\begin{cases} \Phi_1(x) = C_1 e^{qx} + \cancel{D_1}^0 e^{-qx} \\ \Phi_2(x) = C_2 \sin(kx) \\ \Phi_3(x) = \cancel{C_3}^0 e^{qx} + D_3 e^{-qx} \end{cases}$$

De plus, la fonction d'onde étant impaire,

$$\forall x > a/2, \quad \Phi_3(x) = -\Phi_1(-x) \Rightarrow D_3 = -C_1$$

Donc, finalement, on cherche les solutions sous la forme :

$$\begin{cases} \Phi_1(x) = C_1 e^{qx} \\ \Phi_2(x) = C_2 \sin(kx) \\ \Phi_3(x) = -C_1 e^{-qx} \end{cases}$$

Interprétations :

Sans même aller plus loin dans la résolution, de nombreux commentaires peuvent déjà être faits.

- Les fonctions d'ondes dans les régions I et III s'écrivent donc

$$\psi_{1/3}(x,t) = \text{cste} e^{+/-qx} e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$$

Il s'agit d'une fonction d'onde d'un état stationnaire avec une décroissance spatiale exponentielle : la particule est donc caractérisée par une **onde évanescente** dans les régions I et III !

★

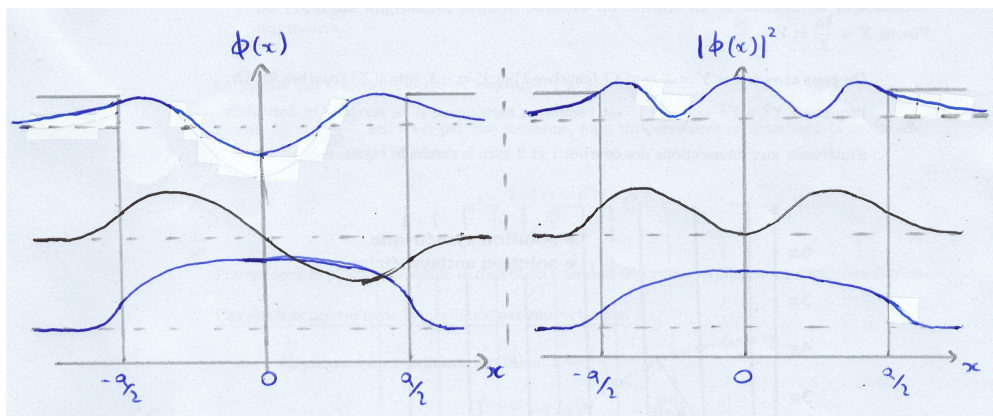
- On peut même donner la **profondeur de pénétration** de la particule, qui est la distance sur laquelle la probabilité de mesurer la présence de la particule hors du puits est importante :

$$\delta = \frac{1}{q} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}$$

Il s'agit d'un effet purement quantique : en physique classique, la particule ne peut pas se trouver hors du puits si $E < V_0$.

On remarque que δ augmente si E tend vers V_0 (idée de particule "quasiment pas confinée") et si m diminue (effet quantique plus fort pour les masses faibles). (Et si $\hbar \rightarrow 0$, on fait disparaître cet effet : logique, c'est un effet quantique !)

Essayons désormais de représenter graphiquement la partie spatiale de la fonction d'onde dans les trois régions de l'espace (on peut ici choisir les constantes réelles), ainsi que la densité de probabilité associée. On doit alors respecter les conditions limites de continuité de Φ et de $\frac{d\Phi}{dx}$.



★

Ainsi :

- Il y a quantification de k , de q et donc de l'énergie E de l'état lié. Cette quantification provient du confinement de la particule dans le puits, et en particulier des conditions limites et de la non divergence de la fonction d'onde en $\pm\infty$.
- On introduit donc le nombre quantique $n \in \mathbb{N}^*$. Plus n augmente, plus la fonction d'onde a de nœuds, donc, plus k_n augmente et plus E_n augmente. On retiendra que **plus l'énergie de l'état lié augmente, plus le nombre de nœuds de la densité de probabilité augmente**.

c Equation transcendante et résolution graphique

Posons $k_0^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}$, qui n'est pas une inconnue, mais un paramètre caractérisant la profondeur du puits de potentiel. On a alors :

$$q^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} = k_0^2 - k^2$$

Poursuivons le plus loin possible la résolution : on doit désormais expliciter les conditions limites.

Cas des fonctions d'onde symétriques par rapport à $x = 0$:

Appliquons les conditions limites en $x = \frac{a}{2}$:

$$\star \quad \begin{cases} A_2 \cos\left(\frac{ka}{2}\right) = A_1 e^{-\frac{qa}{2}} \\ -A_2 k \sin\left(\frac{ka}{2}\right) = -qA_1 e^{-\frac{qa}{2}} \end{cases}$$

On élimine A_1 :

$$A_2 k \sin\left(\frac{ka}{2}\right) = qA_2 \cos\left(\frac{ka}{2}\right) \Rightarrow k \tan\left(\frac{ka}{2}\right) = q$$

L'application des conditions limites en $x = -\frac{a}{2}$ n'apporte rien de plus, ce qui est logique vu que la fonction d'onde est paire.

Ainsi, pour les fonctions d'onde symétriques par rapport à $x = 0$, k et q doivent vérifier le système d'équations :

$$\begin{cases} q = k \tan\left(\frac{ka}{2}\right) \\ k^2 + q^2 = k_0^2 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \frac{qa}{2} = \frac{ka}{2} \tan\left(\frac{ka}{2}\right) \\ \left(\frac{ka}{2}\right)^2 + \left(\frac{qa}{2}\right)^2 = \left(\frac{k_0 a}{2}\right)^2 \end{cases}$$

On appelle ce système d'équations un système transcendant : il n'existe pas de solution analytique.

Cas des fonctions d'onde antisymétriques par rapport à $x = 0$:

L'écriture des conditions limites en $x = \frac{a}{2}$ mène alors, avec une méthode similaire, au système transcendant :

$$\begin{cases} q = -\frac{k}{\tan\left(\frac{ka}{2}\right)} = -k \cotan\left(\frac{ka}{2}\right) \\ k^2 + q^2 = k_0^2 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \frac{qa}{2} = -\frac{ka}{2} \cotan\left(\frac{ka}{2}\right) \\ \left(\frac{ka}{2}\right)^2 + \left(\frac{qa}{2}\right)^2 = \left(\frac{k_0 a}{2}\right)^2 \end{cases}$$

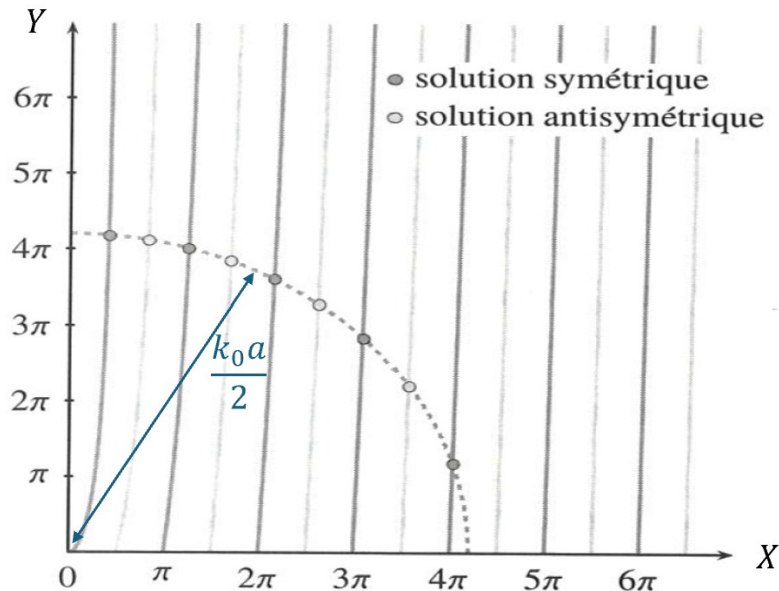
Résolution graphique des systèmes transcendants :

Pour déterminer les valeurs de k_n et q_n solutions, il faut alors soit se diriger vers une résolution numérique, soit vers une résolution graphique. Dans le cadre du programme, on se dirige vers une résolution graphique.

Posons $X = \frac{ka}{2}$ et $Y = \frac{qa}{2}$.

On peut alors tracer $Y = X \tan(X)$ (courbes 1) et $Y = -X \cotan(X)$ (courbes 2). Or,

\star l'équation $X^2 + Y^2 = \left(\frac{k_0 a}{2}\right)^2$ est l'équation cartésienne d'un cercle. On doit alors s'intéresser aux intersections des courbes 1 et 2 avec le cercle de rayon $\frac{k_0 a}{2}$.



Interprétations :

- On retrouve bien la quantification des valeurs de k et de q , et donc la quantification des énergies des états liés.
- Le niveau fondamental (énergie la plus faible, donc k le plus faible, donc X le plus faible) est toujours une solution symétrique par rapport à $x = 0$. Puis, concernant les niveaux excités, il y a alternance de solutions impaires et de solutions paires.
 - Une différence importante par rapport au cas du potentiel infini est que le nombre de niveaux d'énergies possibles est limité.
 - Plus V_0 augmente, plus k_0 augmente, et donc plus le nombre de niveaux d'énergie dans le puits augmente.
- ★ Il y a toujours au minimum un niveau d'énergie possible dans le puits. Il n'y aura qu'un seul niveau d'énergie dans le puits si

$$\frac{k_0 a}{2} < \frac{\pi}{2} \Rightarrow k_0^2 a^2 < \pi^2 \Rightarrow V_0 < \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

- Dans le cas où $V_0 \gg E$, on doit retrouver le cas du puits de potentiel infini. Et effectivement, si $V_0 \gg E$, alors le cercle a un rayon très grand, et on se rend compte que les solutions vérifient dans ce cas

$$X_n = \frac{n\pi}{2} \Rightarrow k_n a = n\pi$$

avec $n \in \mathbb{N}^*$, ce qui est la même condition de quantification que celle obtenue avec le puits infini !

Remarque : Une fois k et q déterminés, on peut calculer les constantes A_1 et A_2 (ou C_1 et C_2) en utilisant l'une des conditions limites et la condition de normalisation.

III.4 Etats de diffusion : $E > V_0$

Dans cette sous-partie, on se contente d'étudier les états de diffusion du puits de potentiel, c'est-à-dire que l'énergie de l'état stationnaire vérifie $E > V_0$.

On pose alors $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} > 0$ et $q' = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar} > 0$, de sorte que les équations de Schrödinger stationnaires se ré-écrivent :

- dans les régions I et III : $\frac{d^2\Phi}{dx^2} + q'^2\Phi(x) = 0$
- dans la région II : $\frac{d^2\Phi}{dx^2} + k^2\Phi(x) = 0$

La forme des solutions est donc :

$$\begin{cases} \Phi_1(x) = A_1 e^{iq'x} + B_1 e^{-iq'x} \\ \Phi_2(x) = A_2 e^{ikx} + B_2 e^{-ikx} \\ \Phi_3(x) = A_3 e^{iq'x} + B_3 e^{-iq'x} \end{cases}$$

avec toutes les constantes étant a priori complexes.

Cette fois, la condition de non divergence de la densité de probabilité en $x = \pm\infty$ ne nous permet pas de simplifier la forme de ces solutions. Quelles que soient les valeurs de k et de q' , on pourra toujours réussir à exprimer cinq constantes en fonction de la sixième. Il n'apparaîtra pas de condition de quantification sur k et q' , et donc pas de quantification de l'énergie.

Ainsi, toutes les énergies $E > V_0$ sont accessibles par la particule : on parle de **continuum d'énergies**.

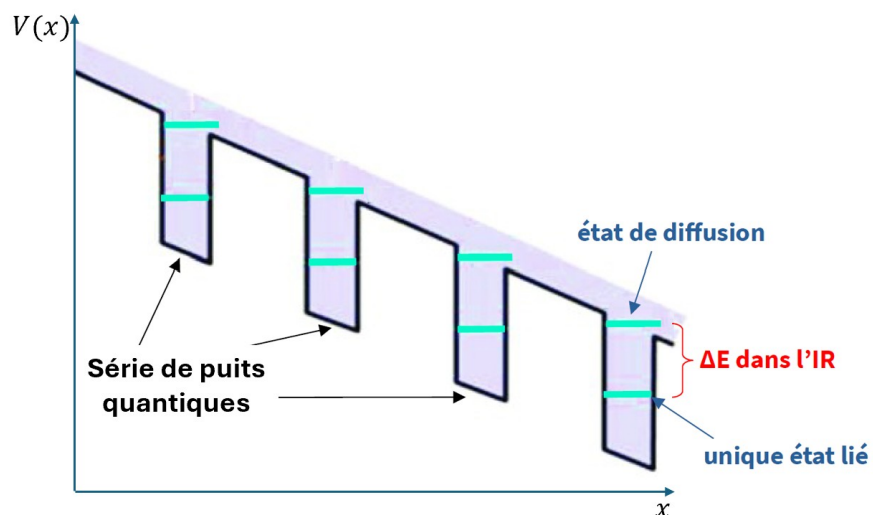
III.5 Synthèse sur les niveaux d'énergies possibles pour les états stationnaires

- ★ Spectre en énergies : préciser états liés, états de diffusion. Faire un cas V_0 petit et un cas V_0 grand $V_{0,grand} = 2V_{0,petit}$ (passer de 5 états liés à 7 états liés).

Origine de la quantification des niveaux d'énergie en mécanique quantique

- ★ Les énergies des états stationnaires sont quantifiées si la particule est dans un état lié, i.e. si elle est confinée. Dans le cas où la particule est dans un état de diffusion, il y a un continuum d'énergies accessibles.

Application : Détecteur infrarouge L'objectif d'un détecteur infrarouge est de générer un courant électrique lorsqu'un rayonnement infrarouge incident parvient au détecteur. On réalise pour cela une structure avec un ensemble de puits quantiques identiques de profondeur finie. On vient alors appliquer un champ électrostatique uniforme à cette structure. L'effet du champ électrostatique est de modifier l'allure du potentiel d'énergie $V(x)$ vu par l'électron : on obtient l'allure de potentiel ci-dessous.

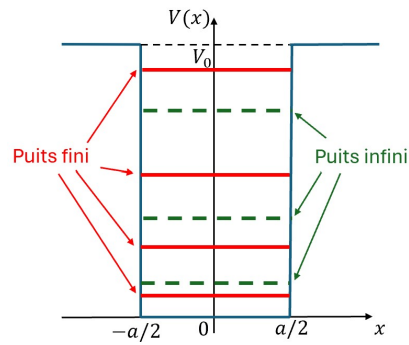


Prise de notes : Sous l'effet d'un photon IR, l'électron dans l'état lié passe dans un état de diffusion et peut librement circuler dans la structure. Il va alors évoluer préférentiellement vers les x où son énergie potentielle sera la plus faible : il se déplace vers les x croissants. Il y a création d'un courant électrique mesurable !

- ★ Point important : en penchant l'allure du potentiel, on peut réussir aussi à contrôler le nombre d'états liés accessibles par puits. C'est d'ailleurs comme cela que l'on pilote le plus facilement ce nbr d'états liés.

III.6 Comparaison des niveaux d'énergies entre le puits de potentiel infini et le puits de potentiel fini

Pour finir ce chapitre, comparons les énergies des états liés trouvées avec le modèle du puits fini et le modèle du puits infini. Pour que cette comparaison est un sens, on compare deux puits de potentiel de même largeur a , et on ne s'intéresse qu'aux états liés d'énergies $E < V_0$. L'allure des spectres en énergies superposées pour les deux puits est tracée ci-contre.



On remarque que, pour un même nombre quantique, les énergies des états liés du puits fini sont inférieures aux énergies du puits infini.

Interprétation qualitative avec l'inégalité d'Heisenberg :

Dans le puits infini, l'indétermination sur la mesure de la position de la particule $\Delta x_{infini} \sim \frac{a}{2}$. Mais, pour les états liés du puits fini, du fait des ondes évanescentes,

l'indétermination sur la mesure de la position est plus importante : $\Delta x_{fini} \sim \frac{a}{2} + \delta > \Delta x_{infini}$.

★

D'après l'inégalité d'Heisenberg : $\Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2\Delta x}$. Ainsi, qualitativement, $\Delta p_{x,fini} < \Delta p_{x,infini}$.

Or les énergies des états stationnaires vérifient

$$E = E_c = \frac{\langle p_x^2 \rangle}{2m} = \frac{(\Delta p_x)^2}{2m}$$

On retrouve bien l'abaissement des niveaux d'énergie du puits fini par rapport au puits infini.

Une approche quantique consiste à modéliser le déplacement d'un électron π comme une particule confinée au fond d'un puits infiniment profond de largeur L , celle de la molécule (**figure 11**) :

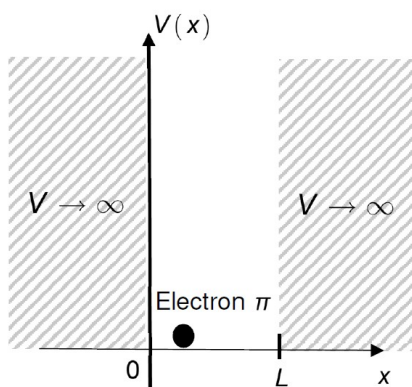


Figure 11 - Modélisation de la chaîne carbonée

On donne la constante de Planck $h = 6.6 \times 10^{-34}$ Js et la masse d'un électron $m = 9.1 \times 10^{-31}$ kg.

1. Pour une solution stationnaire $\psi(x,t) = \varphi(x)\chi(t)$, établir l'équation vérifiée par la fonction d'amplitude $\varphi(x)$ en faisant apparaître l'énergie E de la particule.
2. Avec le choix d'origine de l'énergie potentielle effectué en figure 11, l'énergie E de la particule peut-elle être négative ?
3. Justifier que les valeurs prises par la grandeur $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ sont de la forme $k_n = nk_1$, où n est un entier strictement positif. Exprimer complètement, à un facteur de phase près, les fonctions d'onde $\psi_n(x,t)$ associées à ces états stationnaires dont les énergies sont notées E_n .

Application à la couleur des flamants roses :

4. Dénombrer le nombre N d'électrons π présents dans la molécule de β -carotène.
5. Sachant que la distance entre deux atomes de carbone est estimée à 0,14 nm, évaluer la longueur L sur laquelle ces électrons π sont libres de se déplacer.

En considérant le spin des électrons, deux électrons au maximum peuvent se trouver sur un même niveau d'énergie d'après le principe d'exclusion de Wolfgang Pauli.

6. Placer les N électrons π sur un diagramme énergétique dans l'état de plus basse énergie de la molécule. Quelle est la transition électronique de plus basse énergie possible pour certains de ces électrons ?
7. En déduire l'expression de la longueur d'onde du photon susceptible d'être absorbé par la molécule. Application numérique : dans quel domaine du spectre électromagnétique se situe une telle radiation ? Est-ce cohérent avec le spectre d'absorbance de la figure 9 ?

En raison des groupes méthyle latéraux sur la chaîne carbonée et des interactions électrons/noyaux ou électrons/électrons, la modélisation précédente doit être corrigée. Ces corrections peuvent être intégrées dans la longueur L qui prend alors la valeur $L_{\text{corr}} = 1.8$ nm.

8. Refaire le calcul de la longueur d'onde λ_{corr} du photon absorbé. Interpréter alors la couleur des flamants roses.

Correction de l'exercice 1

1. On injecte la forme de la fonction d'onde d'un état stationnaire dans l'équation de Schrödinger, pour $0 < x < L$ ($V(x) = 0$) :

$$i\hbar\varphi(x)\frac{d\chi}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m}\chi(t)\frac{d^2\varphi}{dx^2} \Rightarrow i\hbar\frac{1}{\chi(t)}\frac{d\chi}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\varphi(x)}\frac{d^2\varphi}{dx^2}$$

On reconnaît l'égalité d'une fonction ne dépendant que de t et d'une fonction ne dépendant que de x : ces deux fonctions sont égales à une même constante E , l'énergie de la particule. On a donc :

$$i\hbar\frac{1}{\chi(t)}\frac{d\chi}{dt} = E \Rightarrow \frac{d\chi}{dt} + \frac{iE}{\hbar}\chi(t) = 0 \Rightarrow \chi(t) = \text{cste} e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$$

On suppose que $\text{cste} = 1$ (on injecte en fait la constante dans la fonction $\varphi(x)$).

On obtient l'équation de Schrödinger stationnaire :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\varphi(x)} \frac{d^2\varphi}{dx^2} = E \Rightarrow \frac{d^2\varphi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \varphi(x) = 0$$

2. On a forcément E supérieure à l'énergie potentielle minimale dans tout l'espace, soit ici $E > 0$.
3. On doit donc résoudre

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} + k^2\varphi(x) = 0$$

La solution générale peut s'écrire $\varphi(x) = A \cos(kx) + B \sin(kx)$ avec A et B des constantes complexes. Avec les conditions limites :

- en $x = 0$: $\varphi(x = 0) = 0 \Rightarrow A = 0$. D'où : $\varphi(x) = B \sin(kx)$.

- en $x = L$: $\varphi(x = L) = 0 \Rightarrow \sin(kL) = 0 \Rightarrow k = \frac{n\pi}{L} = nk_1$ avec n entier relatif et $k_1 = \frac{\pi}{L}$.

On se restreint à $n \geq 0$, car $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ est défini positivement ici. On élimine la solution $n = 0$, car on aurait alors ψ identiquement nul. Donc, $n \in \mathbb{N}^*$.

On détermine finalement la constante B avec la condition de normalisation :

$$\int_0^L |\varphi(x)|^2 dx = 1 \Rightarrow |B|^2 \int_0^L \sin^2(k_n x) dx = 1 \Rightarrow |B|^2 \int_0^L \left(\frac{1 - \cos(2k_n x)}{2} \right) dx = \frac{|B|^2 L}{2} = 1$$

Ainsi $|B| = \sqrt{\frac{2}{L}}$. B étant défini à un facteur de phase près, on peut imposer $B = \sqrt{\frac{2}{L}}$.

On en déduit donc la fonction d'onde complète :

$$\psi_n(x,t) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(nk_1 x) e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} \quad \text{avec} \quad E_n = n^2 \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} \quad \text{et} \quad k_1 = \frac{\pi}{L} \quad \text{et} \quad n \in \mathbb{N}^*$$

4. 2 électrons π sont présents par double liaison. Il y a 11 doubles liaisons, soit $N = 22$ électrons π .
5. Les électrons π peuvent être délocalisés sur 22 atomes de carbone. La chaîne mesure donc $L = 21d_{CC} = 2.9$ nm.
6. Dans l'état de plus basse énergie de la molécule, on place les électrons sur les états de plus faibles énergies, soit ici sur les états avec n variant de 1 à 11. La première transition électronique possible est donc la transition $n = 11 \rightarrow n = 12$.
7. Pour cette transition électronique, l'énergie du photon pouvant être absorbé est $\frac{hc}{\lambda} = E_{12} - E_{11}$. Donc :

$$\lambda = \frac{hc}{E_{12} - E_{11}} = \frac{hc2mL^2}{\hbar^2\pi^2} \frac{1}{12^2 - 11^2} = \frac{8cmL^2}{h} \frac{1}{12^2 - 11^2}$$

A.N. : $\lambda = 1.2 \mu\text{m}$, ce qui est dans le domaine IR. C'est incohérent avec le spectre d'absorption de la molécule, qui absorbe dans le bleu.

8. A.N. : $\lambda_{\text{corr}} = 4.7 \times 10^{-7}$ nm, soit dans le bleu. Ceci est cohérent avec le spectre d'absorption proposé. Si la molécule absorbe la couleur bleue, elle nous paraît avec la couleur complémentaire, soit orange/rose (vert + rouge), ce qui est bien la couleur des flamants roses !

Ex. 2 Marche de potentiel

On étudie le mouvement d'une particule quantique de masse m dans le potentiel d'énergie $V(x)$ suivant, appelé marche de potentiel :

$$\begin{cases} V(x < 0) = 0 \\ V(x \geq 0) = V_0 > 0 \end{cases}$$

On envisage, dans un premier temps, le cas d'une particule incidente envoyée depuis $x = -\infty$ et d'énergie $E > V_0$.

1. Décrire le mouvement de la particule si celle-ci était décrite par la physique classique. On précisera la vitesse que la particule aurait dans les différentes régions de l'espace.

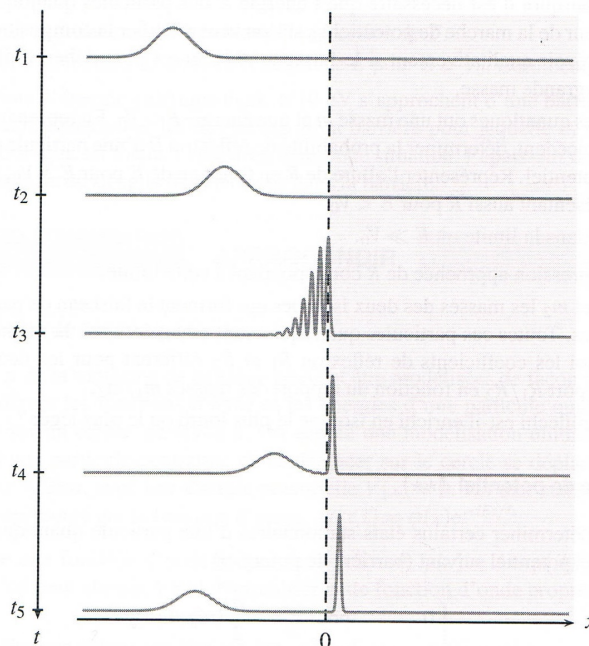
On pose $k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ et $k_2 = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}$.

2. Montrer qu'un état stationnaire de la particule peut être décrit par la fonction d'onde propre :

$$\begin{cases} \Phi(x) = A e^{ik_1x} + rA e^{-ik_1x} & \text{si } x < 0 \\ \Phi(x) = tA e^{ik_2x} & \text{si } x \geq 0 \end{cases}$$

où A est une constante non nulle et r et t sont des coefficients complexes, que l'on ne cherchera pour le moment pas à déterminer. Interpréter physiquement ce que représente la fonction d'onde dans les différentes régions de l'espace.

3. Donner les expressions des courants de probabilité modélisant la particule incidente, la particule réfléchie et la particule transmise.
4. Ecrire les conditions de raccordement de la fonction d'onde propre en $x = 0$. En déduire les expressions de r et de t .
5. Définir puis déterminer les expressions des coefficients de réflexion R et de transmission T en probabilité. Discuter les spécificités du comportement quantique vis-à-vis du comportement classique.
6. Examiner le cas où $E \gg V_0$ et commenter.
7. En superposant des états stationnaires d'énergies voisines de E , on forme un paquet d'ondes représentant une particule quantique incidente. La figure ci-dessous représente l'évolution dans l'espace et dans le temps de la densité de probabilité de ce paquet d'ondes. Le temps s'écoule du haut vers le bas de la figure. Commenter ces graphes.



On envisage désormais le cas d'une particule quantique incidente envoyée depuis $x = -\infty$ et d'énergie $E < V_0$.

8. Déterminer la forme des fonctions d'onde propres dans les différentes régions de l'espace. En déduire le coefficient de réflexion R en probabilité. Commenter.
9. En guise de synthèse, tracer l'allure de R en fonction de E à la fois pour $E < V_0$ et pour $E > V_0$.

Application : enrichissement isotopique

Une source envoie, depuis $x = -\infty$, un faisceau de particules quantiques, constitué d'un mélange de deux isotopes de masses m_1 et $m_2 > m_1$. Tous ces isotopes sont envoyés à la même vitesse. On souhaite utiliser le phénomène de réflexion sur la marche de potentiel pour modifier la composition isotopique du mélange.

10. Expliquer pourquoi il est nécessaire que l'énergie E des particules quantiques soit supérieure à la hauteur de la marche de potentiel V_0 si l'on veut modifier la composition isotopique du mélange. Prévoir si le faisceau réfléchi est plus riche ou plus pauvre en isotope de plus grande masse.

Correction de l'exercice 2

1. Particule a une trajectoire rectiligne depuis $x = -\infty$ vers $x = +\infty$ (elle ne rebrousse jamais chemin) : elle est dans un état de diffusion. Dans la région $x < 0$, sa vitesse est $v = \sqrt{\frac{2E}{m}}$ et dans la région $x \geq 0$, sa vitesse

$$\text{est } v = \sqrt{\frac{2(E - V_0)}{m}}.$$

2. Région I : $x < 0$: L'équation de Schrödinger stationnaire est :

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + k_1^2 \Phi(x) = 0 \Rightarrow \Phi(x) = A e^{ik_1 x} + B e^{-ik_1 x}$$

soit la solution proposée en posant $r = \frac{B}{A}$.

Région II : $x \geq 0$: L'équation de Schrödinger stationnaire est :

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + k_2^2 \Phi(x) = 0 \Rightarrow \Phi(x) = C e^{ik_2 x} + D e^{-ik_2 x}$$

On pose alors $t = \frac{C}{A}$.

Pour interpréter, il faut repasser à la fonction d'onde complète $\psi(x,t) = \Phi(x) e^{-i\omega t}$ avec $E = \hbar\omega$ pour un état stationnaire. Le premier terme de la fonction d'onde dans la région I représente une OPH modélisant la particule libre incidente (sens de propagation : x croissants). Le second représente une OPH modélisant la particule libre réfléchi (sens de propagation : x décroissants). Enfin, dans la région II, le premier terme représente une OPH se propageant dans le sens des x croissants, et modélisant donc la particule transmise. Le second terme représenterait une OPH se propageant dans le sens des x décroissants, ce qui n'a pas de sens dans la modélisation étudiée ici, vu qu'il n'y a aucune réflexion possible dans cette région II et aucune source de particule. On impose donc bien $D = 0$.

3. Comme toutes ces particules sont LIBRES (modélisées par des OPH), les expressions des courants de probabilités sont (comptés positivement dans le sens des x croissants) :

$$j_i = |A|^2 \frac{\hbar k_1}{m} \quad \text{et} \quad j_r = -|rA|^2 \frac{\hbar k_1}{m} \quad \text{et} \quad j_t = |tA|^2 \frac{\hbar k_2}{m}$$

4. CL en $x = 0$ (saut de potentiel fini) ($A \neq 0$ pour éliminer la solution non physique) :

$$\begin{cases} A + rA = tA \Rightarrow 1 + r = t \\ ik_1 A - rAik_1 = tAik_2 \Rightarrow k_1(1 - r) = k_2 t \end{cases}$$

On trouve :

$$r = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \quad \text{et} \quad t = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}$$

On retrouve la même forme que les coefficients de réflexion et de transmission en amplitudes usuels de la physique des ondes ! En particulier, si $k_1 = k_2$, i.e. si $V_0 = 0$, on trouve que la probabilité d'être réfléchi est nulle, ce qui est cohérent avec un potentiel uniforme.

5. On définit

$$R = \frac{-j_r}{j_i} \geq 0 \quad \text{et} \quad T = \frac{j_t}{j_i} \geq 0$$

Ici, on en déduit donc :

$$R = |r|^2 = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2 \quad \text{et} \quad T = |t|^2 \frac{k_2}{k_1} = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}$$

On retrouve les formes usuelles de la physique des ondes des coefficients de réflexion et de transmission en puissance. On vérifie bien que $R + T = 1$. En mécanique quantique, contrairement à la physique classique, il y a donc une probabilité non nulle d'être réfléchi par la marche de potentiel si $k_1 \neq k_2$, i.e. si $V_0 \neq 0$.

A remarquer : On remarque par ailleurs que les vitesses de groupe associées à la particule libre incidente et transmise sont les mêmes que dans le cadre de la physique classique. En effet, pour la particule incidente :

$$v_1 = \frac{\hbar k_1}{m} = \sqrt{\frac{2E}{m}} \text{ et pour la particule transmise : } v_2 = \frac{\hbar k_2}{m} = \sqrt{\frac{2(E - V_0)}{m}} !$$

6. Si $E \gg V_0$, alors $k_1 \simeq k_2$ et donc $R \simeq 0$ et $T \simeq 1$. On retrouve le cas d'une probabilité de transmission de 1 de la particule incidente. Vu depuis la particule, la marche de potentiel est « quasiment plate ».
7. On retrouve que :
 - le paquet d'onde est en partie réfléchi, en partie transmis. Les amplitudes des enveloppes dépendent des valeurs de R et T .
 - le paquet d'onde se déplace à une vitesse de groupe plus grande pour $x < 0$ et moins grande pour $x > 0$.
 - il y a interférences entre le paquet d'onde incident et le paquet d'onde réfléchi à l'instant t_3 !
8. On pose alors $k'_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$. Les formes des fonctions d'onde propres sont alors :

$$\begin{cases} \Phi(x) = A e^{ik_1x} + rA e^{-ik_1x} & \text{si } x < 0 \\ \Phi(x) = B e^{k'_2x} + C e^{-k'_2x} & \text{si } x \geq 0 \end{cases}$$

En imposant la non divergence de la densité de probabilité pour $x \rightarrow +infty$, on impose $B = 0$. On retrouve alors une onde évanescente dans la région $x \geq 0$.

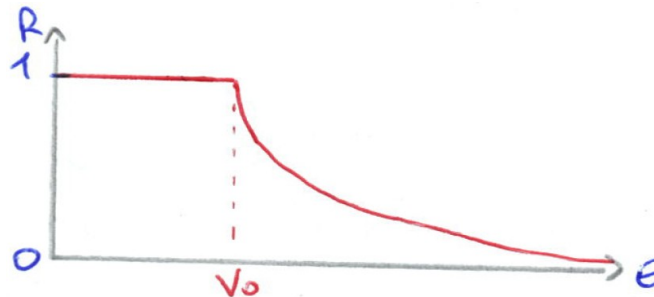
On utilise à nouveau les CL en $x = 0$ pour déterminer :

$$\begin{cases} (1 + r)A = C \\ ik_1A(1 - r) = -k'_2C \end{cases}$$

soit

$$ik_1(1 - r) = -k'_2(1 + r) \Rightarrow r = \frac{ik_1 + k'_2}{ik_1 - k'_2}$$

c'est-à-dire un complexe sur son conjugué. Il en résulte que $R = |r|^2 = 1$: la particule est réfléchie avec une probabilité de 1. Ceci est à mettre en relation avec le fait que dans la région $x \geq 0$, la particule n'est pas décrite par une OPH : pas de propagation.



9. **Remarque :** Pour se convaincre de la tangente à droite pour $E = V_0$, le plus simple est de faire un DL à l'ordre 1 en $\frac{E - V_0}{E}$. On trouve alors :

$$R = 1 - 4\sqrt{\frac{E - V_0}{E}} = 1 - 4\sqrt{\frac{E - V_0}{V_0}}$$

Donc, à partir de $E = V_0$, la courbe évolue comme une racine carrée.

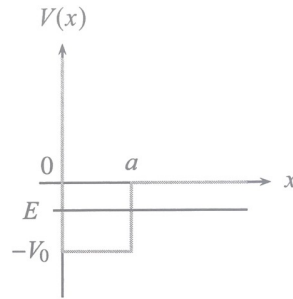
10. Si pour les deux isotopes, $E < V_0$, alors toutes les particules sont réfléchies : aucun enrichissement en isotope. Il faut donc que, pour au moins l'un des isotopes, $E > V_0$. Dans la région $x < 0$, $E = E_c = \frac{1}{2}mv^2$. Ainsi, $E_2 > E_1$. D'après le graphe précédent, les isotopes de masse m_1 ont une plus grande probabilité d'être réfléchis : le faisceau réfléchi est donc plus riche en isotopes de faible masse.

Ex. 3 Puits mixte infini/fini

On considère les états stationnaires liés d'une particule quantique de masse m dans le puits de potentiel défini par :

$$V(x) = \begin{cases} +\infty & \text{pour } x < 0, \\ -V_0 & \text{pour } 0 \leq x \leq a, \\ 0 & \text{pour } x > a, \end{cases}$$

avec $V_0 > 0$.



La fonction d'onde représentant un état stationnaire d'énergie E s'écrit $\psi(x,t) = \varphi(x) e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$.

1. Quelles inégalités vérifie l'énergie E de la particule dans un état lié ?

On pose alors $k = \frac{\sqrt{2m(V_0 + E)}}{\hbar} > 0$ et $q = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} > 0$.

2. Expliciter les conditions limites portant sur la partie spatiale $\varphi(x)$ de la fonction d'onde.
3. Déterminer la forme de la partie spatiale de la fonction d'onde dans les différentes régions de l'espace. Commenter la forme de la fonction d'onde dans la région $x > a$ et donner l'expression de la profondeur de pénétration δ de la particule dans cette région.
4. En utilisant les conditions limites, montrer que les états liés vérifient

$$q = -k \cotan(ka)$$

De par leur définition, on a aussi $k^2 + q^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}$.

5. En utilisant le graphe du cours (partie : résolution graphique du puits de potentiel fini), déterminer que pour qu'il existe un unique état lié dans le puits mixte, il est nécessaire que V_0 soit compris entre deux valeurs V_{\min} et V_{\max} dont on donnera les expressions en fonction de m , a et de constantes fondamentales.

On utilise ce modèle du puits mixte pour décrire l'interaction nucléaire forte entre un proton et un neutron dans un noyau d'hydrogène.

6. (a) Expliquer en quoi ce potentiel peut modéliser (simplement) l'interaction nucléaire forte.
 (b) L'expérience montre qu'il existe un unique état lié, appelé "deutéron". On donne $a = 2.8 \times 10^{-15}$ m et m la masse réduite du proton et du neutron $m = \frac{m_n}{2}$ avec $m_n = 1.7 \times 10^{-27}$ kg la masse d'un nucléon. Déterminer les valeurs numériques de V_{\min} et V_{\max} en eV.
 (c) L'énergie de liaison du deutéron est $E = -2.2$ MeV. En déduire la valeur de q et donc de δ . Estimer également avec la question précédente les valeurs minimale et maximale possibles pour k .
 (d) En utilisant une résolution numérique à la calculatrice, déterminer la valeur numérique de V_0 .

Donnée : Constante de Planck $\hbar = 6.63 \times 10^{-34}$ J s

Correction de l'exercice 3

1. Pour les états liés, $-V_0 < E < 0$. **Remarque :** Les cas d'égalité ne mènent, en règle général, à aucune solution acceptable à cause soit des conditions limites, soit de la condition de normalisation. Le seul moyen que ces cas soient acceptables est que a vaille précisément une certaine valeur. On les exclut donc directement.
2. CL en $x = 0$ (sauf de potentiel infini) : $\varphi(x = 0^+) = \varphi(x = 0^-) = 0$
 CL en $x = a$ (saut de potentiel fini) : $\varphi(x = a^-) = \varphi(x = a^+)$ et $\frac{\partial \varphi}{\partial x}(x = a^-) = \frac{\partial \varphi}{\partial x}(x = a^+)$
3. Région I : $0 \leq x \leq a$:

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + k^2 \varphi(x) = 0 \Rightarrow \varphi(x) = A \cos(kx) + B \sin(kx) = B \sin(kx)$$

en utilisant le fait que $\varphi(x = 0^+) = 0$.

Région II : $x \geq a$:

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} - q^2 \varphi(x) = 0 \Rightarrow \varphi(x) = C e^{qx} + D e^{-qx} = D e^{-qx}$$

en imposant la non divergence de la densité de probabilité en $x = +\infty$.

Commentaire :

La fonction d'onde dans la région $x \geq a$ est donc du type onde évanescente : on est susceptible de détecter la particule avec une bonne probabilité dans une zone d'épaisseur caractéristique $\delta = 1/q = \frac{\hbar}{\sqrt{-2mE}}$ à proximité du puits.

4. Avec les CL en $x = a$, on détermine :

$$\begin{cases} B \sin(ka) = D e^{-qa} \\ Bk \cos(ka) = -qD e^{-qa} \end{cases}$$

Donc, en éliminant D :

$$Bk \cos(ka) = -qB \sin(ka) \Rightarrow q = -k \cotan(ka)$$

car $B \neq 0$ pour éliminer la solution triviale.

5. On utilise le graphe du cours avec $X = ka$ et $Y = qa$ en ne conservant que les solutions antisymétriques (les solutions symétriques ne vérifient pas le même système d'équations). Le rayon du cercle est donc $\sqrt{2mV_0} \frac{a}{\hbar}$. Pour qu'il y ait une unique solution, il faut que

$$\frac{\pi}{2} \leq \sqrt{2mV_0} \frac{a}{\hbar} \leq \frac{3\pi}{2} \Rightarrow V_{\min} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} \leq V_0 \leq V_{\max} = 9V_{\min}$$

6. (a) Interaction nucléaire forte attractive (d'où un potentiel négatif) mais de courte portée (caractérisée par a), puis aucune interaction hors du noyau. a représente donc la taille du noyau.
 (b) $V_{\min} = 13 \text{ MeV}$ et $V_{\max} = 116 \text{ MeV}$
 (c) $q = 2.3 \times 10^{14} \text{ m}^{-1}$ et donc $\delta = 4.3 \times 10^{-15} \text{ m}$. On détermine $k_{\min} = 5.1 \times 10^{14} \text{ m}^{-1}$ et $k_{\max} = 1.7 \times 10^{15} \text{ m}^{-1}$
 (d) En utilisant le solveur de la calculatrice : $k = 6.8 \times 10^{14} \text{ m}^{-1}$ et $V_0 + E = 19 \text{ MeV}$ donc $V_0 = 21 \text{ MeV}$

Ex. 4 Courant tunnel

On considère une barrière de potentiel de hauteur $V_0 = 2.0 \text{ eV}$ et de largeur $a = 1.0 \text{ nm}$ sur laquelle on envoie un électron de masse $m = 9.1 \times 10^{-31} \text{ kg}$. Le potentiel $V(x)$ est donc défini par :

$$\begin{cases} V(x) = 0 & \text{si } x < -a/2 \\ V(x) = V_0 & \text{si } -a/2 < x < a/2 \\ V(x) = 0 & \text{si } x > a/2 \end{cases}$$

On s'intéresse à un état stationnaire d'énergie $E = 1.0 \text{ eV}$ de fonction d'onde $\psi(x,t) = \Phi(x) e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$.

- Exprimer la forme de la partie spatiale de la fonction d'onde dans la région $-a/2 < x < a/2$. Commenter et donner l'expression de la profondeur de pénétration δ en fonction de m , E , V_0 et \hbar .
- Justifier que l'on peut se placer dans l'approximation d'une barrière épaisse.

Dans l'approximation d'une barrière épaisse, on peut montrer que le coefficient de transmission de la barrière de potentiel par effet tunnel s'écrit :

$$T = \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-\frac{2a}{\delta}}$$

- On envoie un faisceau d'électrons d'intensité $I = 0.1 \text{ mA}$ sur cette barrière de potentiel. Calculer l'intensité du courant tunnel qui émerge de l'autre côté de la barrière.
- Toutes choses égales par ailleurs, on remplace les électrons par des protons de masse $m = 1.7 \times 10^{-27} \text{ kg}$. Déterminer la nouvelle valeur de l'intensité du courant tunnel émergeant de l'autre côté de la barrière.

Donnée : Constante de Planck : $h = 6.63 \times 10^{-34} \text{ Js}$

Correction de l'exercice 4

1. On doit résoudre l'équation de Schrödinger stationnaire dans la région $[-a/2, a/2]$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Phi}{dx^2} + V_0\Phi(x) = E\Phi(x) \Rightarrow \frac{d^2\Phi}{dx^2} - q^2\Phi(x) = 0$$

avec $q = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$. La forme de $\Phi(x)$ est alors :

$$\Phi(x) = A e^{qx} + B e^{-qx} = A e^{x/\delta} + B e^{-x/\delta} \quad \text{avec} \quad \delta = \frac{1}{q} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}$$

En passant à la fonction d'onde $\psi(x,t) = A e^{qx} e^{-i\omega t} + B e^{-qx} e^{-i\omega t}$ (où $E = \hbar\omega$), on reconnaît une superposition d'ondes évanescentes dans la région $[-a/2, a/2]$.

2. On souhaite vérifier que $a \gg \delta$. A.N. : $\delta = 0.20 \text{ nm}$. On a donc $a \simeq 5\delta$: en pratique, cela est suffisant pour se placer dans l'approximation d'une barrière épaisse (le coefficient de transmission T contient un \sinh dans lequel $e^{-a/\delta} \ll e^{a/\delta}$).

3. Le coefficient T caractérise la probabilité qu'un électron incident traverse la barrière de potentiel. Or, l'intensité électrique représente un nombre de charges passant à travers une surface par unité de temps. Donc, après la barrière, on obtient le courant tunnel : $I_{\text{tunnel}} = TI$. A.N. : $T = 1.4 \times 10^{-4}$ et donc $I_{\text{tunnel}} = 14 \text{ nA}$, ce qui est très faible, mais mesurable en laboratoire (pas en salle de TP de lycée).

4. En tapant le calcul à la calculatrice, celle-ci donne $T = 0...$ En effet, $\frac{2a}{\delta} = 442...$ Donc, on ruse et on calcule y

tel que $10^y = e^{-\frac{2a}{\delta}} = e^{-442} \Rightarrow y = \frac{\ln(e^{-442})}{\ln(10)} = 192$. Ainsi : $T = 4 \times 10^{-192}$, et donc $I_{\text{tunnel}} = 4 \times 10^{-196} \text{ A}$

: totalement indétectable ! On retrouve le fait que les particules de faible masse franchissent avec une plus grande probabilité une barrière de potentiel par effet tunnel.

Ex. 5 (Ecrit CCINP TPC 2023) Relation d'Heisenberg pour le puits de potentiel infini

On considère un électron π confiné au fond d'un puits infiniment profond de largeur L :

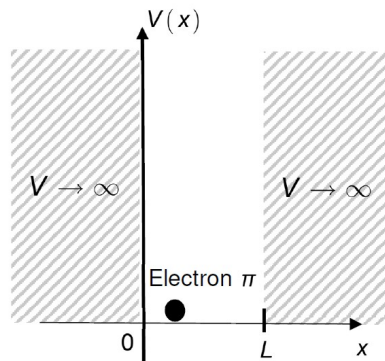


Figure 11 - Modélisation de la chaîne carbonée

Pour une particule quantique, il n'est pas possible de mesurer simultanément sa position et sa quantité de mouvement avec une grande précision. L'indétermination quantique sur la position x et celle sur la quantité de mouvement p_x sont reliées par l'inégalité de Heisenberg :

$$\Delta x \Delta p_x \gtrsim \hbar$$

avec \hbar la constante de Planck réduite $\hbar = \frac{h}{2\pi}$.

L'indétermination quantique ΔZ d'une valeur Z représente la dispersion des résultats possibles pour la mesure de Z et est telle que :

$$(\Delta Z)^2 = \langle Z^2 \rangle - \langle Z \rangle^2$$

où $\langle \rangle$ représente la valeur moyenne des résultats possibles.

On donne $h = 6,6 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$ et $m_e = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$ la masse d'un électron.

1. Déterminer l'expression de l'énergie E d'un électron au fond d'un puits infini en fonction de p_x et de m_e .

- Proposer une valeur minimale pour l'énergie moyenne de l'électron faisant intervenir l'indétermination quantique Δp_x .
- À l'aide de l'inégalité de Heisenberg, montrer alors que l'énergie moyenne d'un électron vérifie :

$$\langle E \rangle \gtrsim \frac{\hbar^2}{2m_e(\Delta x)^2}$$

Commenter sachant que les énergies des états stationnaires vérifient $E_n = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_e L^2}$ avec $n \in \mathbb{N}^*$.

- Quelle serait l'énergie minimale moyenne d'une particule classique dans la même situation ? Commenter l'effet du confinement d'une particule quantique.

Correction de l'exercice 5

- Pour $0 \leq x \leq L$, l'énergie E de la particule correspond à l'énergie cinétique. Donc :

$$E = \frac{1}{2} m_e v_x^2 = \frac{p_x^2}{2m_e}$$

- On en déduit l'énergie moyenne sur un grand nombre de mesures :

$$\langle E \rangle = \frac{\langle p_x^2 \rangle}{2m_e} = \frac{(\Delta p_x)^2 + \langle p_x \rangle^2}{2m_e}$$

Au minimum, $\langle p_x \rangle^2 = 0$ et donc $\langle E \rangle_{min} = \frac{(\Delta p_x)^2}{2m_e}$

Remarque : Il est autant probable qu'une particule ait une quantité de mouvement p_x positive ou négative (même probabilité que l'électron se déplace dans le sens des x croissants ou décroissants). Donc $\langle p_x \rangle = 0$ et la valeur minimale précédente est en fait la valeur de $\langle E \rangle$.

- En utilisant l'inégalité de Heisenberg :

$$\langle E \rangle \gtrsim \langle E \rangle_{min} \gtrsim \frac{\hbar^2}{2m_e(\Delta x)^2}$$

Pour le puits de potentiel infini, la dispersion des mesures de position de l'électron vérifie $\Delta x \leq \frac{L}{2}$. Donc avec l'inégalité de Heisenberg, $\langle E \rangle \gtrsim \frac{2\hbar^2}{m_e L^2}$. Or, $\frac{\pi^2}{2} = 4.9 > 2$. Les énergies des états stationnaires vérifient donc bien l'inégalité de Heisenberg !

- En physique classique, on peut avoir au minimum $E_c = 0$, et donc $E_m = E_c + V(x) = 0$. En physique quantique, contrairement à la physique classique, le confinement d'une particule induit l'existence d'une énergie minimale de confinement quantique : si la particule est confinée, son énergie cinétique augmente.