Mécanique quantique



Confinement d'une particule et quantification de l'énergie

Sommaire

Ι	Con	finement 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
п	Puit	s 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
111	[Puit	s de potentiel fini	9
	III.1	Conditions aux limites en mécanique quantique	10
	III.2	Equation de Schrödinger stationnaire	10
	III.3	Etats liés : $0 < E < V_0$	10
	III.4	Etats de diffusion : $E > V_0$	14
	III.5	Synthèse sur les niveaux d'énergies possibles pour les états stationnaires	15
	III.6	Comparaison des niveaux d'énergies entre le puits de potentiel infini et le puits de	
		potentiel fini	16

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 évanescente, 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 XXième 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 clée en chimie : remplissage électronique des souscouches 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 :

 \star

- 1. Déterminer les énergies et les fonctions d'onde des états stationnaires pour le puits de potentiel infini.
- 2. Proposer les formes des fonctions d'onde d'un état stationnaire suivant la valeur de l'énergie E de la particule par rapport à la valeur du potentiel dans la région considérée.
- 3. Associer 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 ?

<u>Définition</u> : 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) :

$$\overrightarrow{F} = -\overrightarrow{\operatorname{grad}}(V) \Rightarrow F(x) = -\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}$$

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





- Si l'énergie mécanique E de la particule vérifie E > V₀, alors la particule peut se déplacer de x = -∞ à x = +∞ : on dit que la particule est dans un état de diffusion ou état libre.
- \star

• 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 : $E = \frac{3}{2}k_BT$. Or, cette énergie est une énergie cinétique : $E = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{\lambda_{DB}^2 2m}$. Donc : $\lambda_{DB} = \sqrt{\frac{\hbar^2}{3k_BTm}} = 6$ 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 $\beta\text{-carotène}$ pouvant être délocalisés le long de l'ensemble des double li aisons.



• 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).



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]:

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

 \star Graphe et numérotation des régions.

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

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.

 \star

 \star

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

La particule a forcément une énergie mécanique $E \ge 0$ 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 = 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 :

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

On admet que la fonction d'onde est continue en x = 0 et en x = a:

$$\psi(x=0,t) = 0$$
 et $\psi(x=a,t) = 0$

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 stationiEt

naire : $\psi(x,t) = \Phi(x) e^{-\hbar}$ avec *E* l'énergie de l'état stationnaire et $\Phi(x)$ vérifiant l'équation de Schrödinger stationnaire :

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

Dans la région II :

$$V(x) = 0 \Rightarrow \frac{\mathrm{d}^2 \Phi}{\mathrm{d}x^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \Phi(x) = 0$$

 \star

et
$$E > 0$$
 car $V(x) = 0$. On pose $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \iff E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$. Donc :

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

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 et $\sin(ka) = 0 \Rightarrow ka = n\pi$. Donc $E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2$ avec $n \in \mathbb{Z}$ On se restreint aux valeurs de n positives, car $\Phi_{-n}(x) = -\Phi_n(x)$: les deux fonctions

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

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

$$\star$$

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 $\lambda/4$.

 \star

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

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 antisymétrique 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.
 - 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 $\Delta x \leq a$.

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

 \bigstar D'après l'inégalité d'Heisenberg :

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

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 :

$$\star$$

 \star

 $E_{\min} = \frac{\langle p_x^2 \rangle_{\min}}{2m} = \frac{\hbar^2}{8ma^2} > 0$

Ce raisonnement justifie la nécessité d'une énergie de confinement quantique et donne qualitativement l'énergie du fondamental. On vérifie bien que $E_1 > E_{\min}$.

c Lien entre la physique classique et la physique quantique

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

- \star
- $a \to +\infty$: 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.
- $m \to +\infty$: 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.
- " $\hbar \to 0$ " : 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 $\hbar \to 0$, 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'enn 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 $n \to +\infty$, 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 $\psi(x,t) = \frac{\sqrt{3}}{2}\psi_1(x,t) + \frac{\sqrt{3}}{2}\psi_1(x,t)$ $\frac{1}{2}\psi_2(x,t)$ où $\psi_1(x,t)$ et $\psi_2(x,t)$ sont les fonctions d'onde des états stationnaires de nombres quan-tiques 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 :

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



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

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

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) 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. en fonction de x pour différentes valeurs



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 extremum pour $t = \frac{T}{2}$. L'oscillation de la densité de probabilité se réalise alors vers la gauche jusqu'à revenir aux valeurs initiales pour t = T, la période d'oscillation.

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

 \star

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 $\nu = \frac{(L_2 - L_1)}{h}$ 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:

 \star

 \star

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, cela facilite la résolution.

Conditions aux limites en mécanique quantique III.1

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 :

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

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 ψ(x,t) et ∂ψ/∂x sont continus.
 Si le potentiel tend vers l'infini, alors seul ψ(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.

Equation de Schrödinger stationnaire III.2

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 : iEt $\psi(x,t) = \Phi(x) e^{-\hbar}$ avec E 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 :

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

Dans les régions I et III :

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

Dans la région II :

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

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

Etats liés : $0 < E < V_0$ III.3

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 :

$$\star$$

$$\begin{cases} \Phi_1(x) = \widetilde{A_1} e^{qx} + \widetilde{B_1} e^{-qx} & \text{ou de manière équivalente} \quad \Phi_1(x) = \widetilde{C_1} \cosh(qx) + \widetilde{D_1} \sinh(qx) \\ \Phi_2(x) = \widetilde{A_2} e^{ikx} + \widetilde{B_2} e^{-ikx} & \text{ou} \quad \Phi_2(x) = \widetilde{C_2} \cos(kx) + \widetilde{D_2} \sin(kx) \\ \Phi_3(x) = \widetilde{A_3} e^{qx} + \widetilde{B_3} e^{-qx} & \text{ou de manière équivalente} \quad \Phi_3(x) = \widetilde{C_3} \cosh(qx) + \widetilde{D_3} \sinh(qx) \end{cases}$$

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 : $\widetilde{B_1} = 0$ et $\widetilde{A_3} = 0$.

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 $X = (\alpha_1 \quad \alpha_2 \quad \beta_2 \quad \beta_3)$. 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 :

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

 \star

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 :

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

Enfin, 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 !) : on choisit $A_1 \in \mathbb{R}^+$.

Remarque : En utilisant la condition limite de continuité de $\Phi(x)$, on peut alors en déduire que $A_2 \in \mathbb{R}$.

Lycée Rabelais - PC - 2024-2025 - C. Logé

La forme des solutions cherchées est :

$$\begin{cases} \Phi_1(x) = C_1 e^{qx} + \mathcal{D}_1^{*0} e^{-qx} \\ \Phi_2(x) = C_2 \sin(kx) \\ \Phi_3(x) = \mathcal{D}_3^{*0} e^{qx} + D_3 e^{-qx} \end{cases}$$

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 :

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

On peut à nouveau imposer la phase pour l'une des constantes : on choisit $C_1 \in \mathbb{R}^+$.

Remarque : De même, cela impose $C_2 \in \mathbb{R}$.

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

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

Il s'agit d'une fonction d'onde 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 $\hbar \to 0$, on fait disparaitre 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, ainsi que la densité de probabilité associée. On doit alors respecter les conditions limites de continuité de Φ et de $\frac{d\Phi}{dx}$.

Représentation de $\Phi(x)$: translater les origines des différentes représentations sur un axe en énergie. Représentation de $|\Phi(x)|^2$. 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 <u>et</u> 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 $x = \frac{a}{2}$:

$$\begin{cases} A_2 \cos\left(\frac{ka}{2}\right) = A_1 e^{-\frac{qa}{2}} \\ -A_2k \sin\left(\frac{ka}{2}\right) = -qA_1 e^{-\frac{qa}{2}} \end{cases}$$

On élimine A_1 :

 \star

$$A_2k\sin\left(\frac{ka}{2}\right) = qA_2\cos\left(\frac{ka}{2}\right) \Rightarrow k\tan\left(\frac{ka}{2}\right) = q$$

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 :

$$\begin{cases} q = k \tan\left(\frac{ka}{2}\right) \\ k^2 + q^2 = k_0^2 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \frac{qa}{2} = \frac{ka}{2} \tan\left(\frac{ka}{2}\right) \\ \left(\frac{ka}{2}\right)^2 + \left(\frac{qa}{2}\right)^2 = \left(\frac{k_0a}{2}\right)^2 \end{cases}$$

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 :

$$\begin{cases} q = -\frac{k}{\tan\left(\frac{ka}{2}\right)} = -k \cot\left(\frac{ka}{2}\right) \\ k^2 + q^2 = k_0^2 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \frac{qa}{2} = -\frac{ka}{2} \cot\left(\frac{ka}{2}\right) \\ \left(\frac{ka}{2}\right)^2 + \left(\frac{qa}{2}\right)^2 = \left(\frac{k_0a}{2}\right)^2 \end{cases}$$

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 $Y = \frac{qa}{2}$.

Lycée Rabelais - PC - 2024-2025 - C. Logé

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

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

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



 \star

- dans la région II : $\frac{\mathrm{d}^2\Phi}{\mathrm{d}x^2}+k^2\Phi(x)=0$

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

 \star

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

 $\bigstar \quad \text{lié, i.e. si elle est confinée. Dans le cas où la particule est dans un état de diffusion, il y a un continuum d'énergies accessibles.}$

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 $\Delta x_{infini} \sim a$. Mais, pour les états liés du puits fini, du fait des ondes évanescentes, l'indétermination sur la mesure de la position est plus importante : $\Delta x_{fini} \sim a + \delta > \Delta x_{infini}$.



 \star

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

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

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