TD Puits de potentiel

Objectifs

- Savoir écrire le hamiltonien d'une particule dans un potentiel simple
- Savoir poser l'équation de Schrödinger
- Lier les notions de fonction d'onde et de probabilité de présence
- Recherche des états propres de l'opérateur hamiltonien, ou états stationnaires
- Aborder la notion de modélisation en physique : le puits rectangulaire comme modèle réaliste de situations physiques
- Ordres de grandeur des énergies mises en jeu en fonction de la dimension du puits
- Aborder la notion de confinement, qui entraîne la quantification de l'énergie.
- Bien faire la différence entre le puits infini totalement infranchissable en physique quantique comme en physique classique et le puits fini, infranchissable dans la description classique mais qui permet une probabilité de présence non nulle à l'extérieur en physique quantique.

On étudie une particule quantique de masse m placée dans un potentiel 1D formant un puits, dont l'allure est tracée figure 1. Ce modèle simple de puits « carré » va nous permettre de retrouver des résultats similaires à ceux d'un électron dans un atome, une molécule ou un métal.

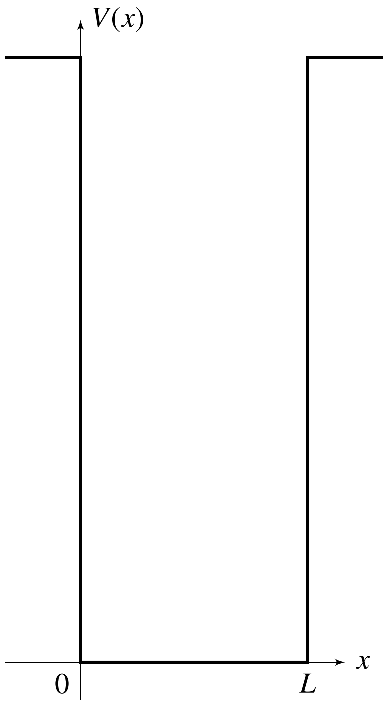

FIGURE 1 – Potentiel en fonction de x pour un puits fini de largeur L et de hauteur V_0.

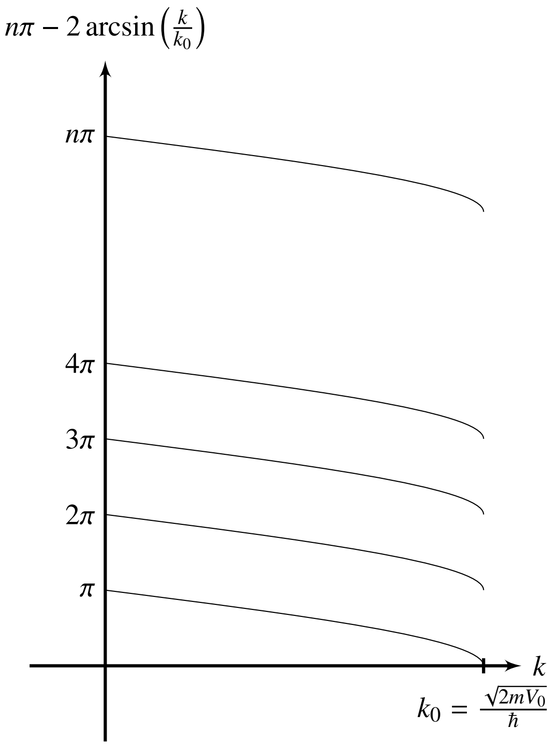

FIGURE 2 – Détermination graphique des valeurs possibles de k, cf. question 7.

On rappelle la méthode générale de résolution de ce type de problème :

1. Déterminer le hamiltonien $\hat{H}$ du système étudié.
2. Déterminer les états stationnaires et les énergies possibles en résolvant $\hat{H}\,|\psi\rangle = E\,|\psi\rangle$.
3. On cherchera éventuellement un lien entre E et la quantité de mouvement $\hbar k$.

4. (Si on cherche l'évolution du système à partir d'un état initial, le décomposer sur la base des états stationnaires ; mais nous ne le ferons pas ici.)

I Hamiltonien et forme générale des états stationnaires

Question 1 Rappeler le hamiltonien pour une particule de masse m dans un potentiel V. On l'exprimera en représentation position (c'est-à-dire comme un opérateur agissant sur les fonctions d'ondes). On distinguera différentes régions de l'espace suivant la valeur de V.

Réponse 1

$$\hat{H} = \begin{cases} -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\partial^2}{\partial x^2} & \text{pour } 0 \leqslant x \leqslant L \\ -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\partial^2}{\partial x^2} + V_0 & \text{pour } x < 0 \text{ et } x > L. \end{cases}$$

Question 2 Justifier brièvement la forme générale des solutions de $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ en supposant $E < V_0$:

$$\psi(x) = A\sin(kx + \zeta) \qquad \text{pour } 0 \leqslant x \leqslant L \tag{1a}$$

$$\psi(x) = A\sin(\zeta)e^{\kappa x} \qquad \text{pour } x \leqslant 0 \tag{1b}$$

$$\psi(x) = A\sin(kL + \zeta)e^{-\kappa(x-L)} \qquad \text{pour } x \geqslant L. \tag{1c}$$

On explicitera les relations entre k, E, κ et V_0.

Réponse 2 Ce sont les solutions générales des équations différentielles du second ordre :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial\psi}{\partial x^2} = E\psi \qquad \text{pour } 0 \leqslant x \leqslant L$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial\psi}{\partial x^2} + (V_0 - E)\psi = 0 \qquad \text{pour } x \leqslant 0 \text{ et } x \geqslant L$$

utilisant le hamiltonien trouvé question 1, en supposant $V_0 > E$, avec en plus la continuité en $x = 0$ et $x = L$. Les paramètres k et κ s'écrivent via les relations :

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \qquad V_0 - E = \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m}$$

On retrouve l'énergie cinétique classique $E = \frac{p^2}{2m}$.

Question 3 Justifier que la condition de dérivabilité de la fonction d'onde (dérivée continue) impose :

$$\tan(\zeta) = -\tan(kL + \zeta) = \tan\left(\arcsin\left(\frac{k}{k_0}\right)\right) \qquad \text{avec : } k_0 = \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar}. \tag{2}$$

(On rappelle : $\tan(\arcsin(x)) = \frac{x}{\sqrt{1-x^2}}$.)

Réponse 3 La dérivabilité en 0 et en L s'écrit :

$$k\cos(\zeta) = \kappa\sin(\zeta)$$

$$k\cos(kL + \zeta) = -\kappa\sin(kL + \zeta)$$

ce qui peut se résumer à :

$$\begin{aligned}
\tan(\zeta) = -\tan(kL+\zeta) &= \frac{k}{\kappa} \\
&= \frac{k}{\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)}} \\
&= \frac{k}{\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}V_0 - k^2}} = \frac{\frac{k}{k_0}}{\sqrt{1-\left(\frac{k}{k_0}\right)^2}} \qquad \text{avec : } V_0 = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} \\
&= \tan\left(\arcsin\left(\frac{k}{k_0}\right)\right)
\end{aligned}$$

sachant que $\frac{k}{k_0}$ est compris entre -1 et 1 puisqu'on a supposé $E < V_0$, et on va même voir que k sera positif.

II Cas du puits infini : $V_0 = +\infty$

On suppose le potentiel infini à l'extérieur du puits, ce qui revient à faire tendre V_0 et donc k_0 vers $+\infty$.

Question 4 Éliminer ζ dans l'équation (2), et en déduire :

- Les valeurs possibles de k ; en particulier, $k = 0$ est-elle possible, et les valeurs négatives de k représentent-elles des états différents des valeurs positives ?
  $\zeta \equiv 0\ [\pi]$, autrement dit il disparaît dans le sinus équation 1a : il ne ferait que changer le signe, ce qui ne change pas l'état. Ce même argument permet d'affirmer que les valeurs négatives de k représentent les mêmes états que les valeurs positives. Par contre $k \neq 0$, sinon la fonction d'onde serait nulle partout, ce qui n'est pas un état possible. Au final, les valeurs de k sont :

  $$k_n = \frac{n\pi}{L} \qquad \text{avec : } n \in \mathbb{N}^*.$$

- Les valeurs possibles de l'énergie E ; en particulier, est-elle quantifiée ? Sa valeur minimum correspond-elle au fond du puits comme en physique classique ?

  $$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}n^2 \qquad \text{avec : } n \in \mathbb{N}^*.$$

  L'énergie est quantifiée. On remarque que $E_1 > 0$, ce qui signifie que la particule a une énergie minimum plus grande que le fond du puits. On parle d'**énergie de confinement**.
- La valeur de la fonction d'onde des états stationnaires aux bords du puits et en-dehors ; quelle en est la signification physique ?
  Les $\sin(\zeta)$ et $\sin(kL+\zeta)$ s'annulent, donc la fonction d'onde est nulle aux bords du puits et en-dehors. Comme la probabilité de présence est égale au module au carré de la fonction d'onde, **la particule ne peut pas sortir**, ce qui est cohérent avec notre hypothèse de potentiel infini.
- La symétrie de la fonction d'onde par rapport à celle du puits ; en particulier si elle peut s'annuler en certains points dans le puits, et ce que cela signifie.
  La fonction d'onde est une sinusoïde qui s'annule aux bords du puits. Son module carré est nécessairement symétrique par rapport au centre du puits, elle-même est donc symétrique ou antisymétrique. La fonction n° n va s'annuler périodiquement $n-1$ fois à l'intérieur du puits, ce qui veut dire que si la particule est dans l'état n° n, elle n'a aucune chance d'être aux positions correspondantes.

Question 5 Calculer l'écart entre niveaux d'énergie (en eV) dans les cas suivants. On donne : $\hbar \simeq 10^{-34}$ J · s, 1 eV $\simeq$ 1,6 · 10^{-19} J, $m \simeq 10^{-30}$ kg. Commenter ; en particulier comparer cet écart à l'énergie thermique $k_B T \simeq 25 \cdot 10^{-3}$ eV à température ambiante, et à l'énergie d'un photon de lumière visible (1,5 à 3 eV).

Atome	$L = 3$ Å	$E_2 - E_1 = ?$
Molécule linéaire (chaîne de 5 atomes)	$L = 15$ Å	$E_2 - E_1 = ?$
Fil métallique	$L = 3$ mm	$E_2 - E_1 = ?$
		$E_{10^7+1} - E_{10^7} = ?$

Bonus : pourquoi 10^7 dans la dernière ligne du tableau ?

Réponse 5

Atome	$L = 3$ Å	$E_2 - E_1 = 3E_1 \simeq 10$ eV $\gg k_B T$
Molécule linéaire (chaîne de 5 atomes)	$L = 15$ Å	$E_2 - E_1 \simeq 0{,}4$ eV $> k_B T$
Fil métallique	$L = 3$ mm	$E_2 - E_1 \simeq 10^{-13}$ eV $\ll k_B T$
		$E_{10^7+1} - E_{10^7} \simeq E_1 \times 2 \cdot 10^7 \simeq 7 \cdot 10^{-7}$ eV $\ll k_B T$

- Pour l'atome, la différence entre niveaux d'énergie est de plusieurs eV. On retrouve un ordre de grandeur similaire aux raies spectrales effectivement observées pour les atomes, qui sont excités par des photons dans l'ultraviolet. Par ailleurs, l'écart est important comparé à $k_B T$, ce qui indique que la quantification ne sera pas masquée par l'énergie d'agitation thermique.
- Pour la molécule, le résultat est similaire, mais les raies spectrales sont dans l'infrarouge, ce qui là aussi correspond à l'observation. L'écart avec $k_B T$ est moins marqué mais reste important.
- Pour le fil métallique, c'est le contraire. L'écart des niveaux d'énergie (que ce soit à E_1 ou E_{10^7}) est très faible devant $k_B T$, la quantification sera complètement masquée par l'agitation thermique. On retrouve le fait que les effets quantiques ne se voient pas à l'échelle macroscopique.
- Bonus : il faut voir que dans un fil métallique, il y a de nombreux électrons, pas qu'un seul. En ordre de grandeur, il y en aura autant que d'atomes ; et si on considère le fil comme une suite de N atomes, avec les dimensions données, $N = 10^7$. Ces N électrons vont occuper les états que nous avons trouvés ; or deux électrons ne peuvent pas occuper le même état (principe d'exclusion de Pauli). On verra les détails en physique statistique, mais intuitivement, ils vont occuper les N premiers niveaux (ce qui minimise l'énergie totale). Dans cette situation, la différence d'énergie à considérer pour exciter le système n'est pas $E_2 - E_1$: l'électron du niveau 1 ne peut pas passer au niveau 2 car celui-ci est occupé par un autre électron ; c'est l'électron du niveau N qu'on peut faire passer au niveau $N+1$, qui est libre, avec une énergie $E_{N+1} - E_N$.

Question 6 Quelle condition supplémentaire permet-elle de déterminer la constante A ? Écrire la relation correspondante sur ψ sans chercher à la résoudre.

Réponse 6 On doit normaliser ψ pour satisfaire une loi de probabilité sur l'espace :

$$\int_{x \in \mathbb{R}} |\psi(x)|^2 dx = 1.$$

(Pour le puits infini : $A = \sqrt{\frac{2}{L}}$.)

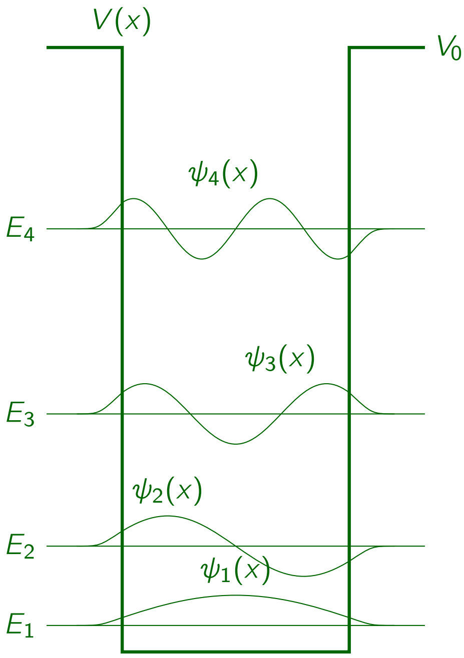

FIGURE 3 – Allure de la fonction d'onde des états stationnaires de plus basse énergie. On remarque leur symétrie / antisymétrie par rapport au centre du puits. La fonction d'onde n'est pas nulle hors du puits, donc la probabilité de présence non plus.

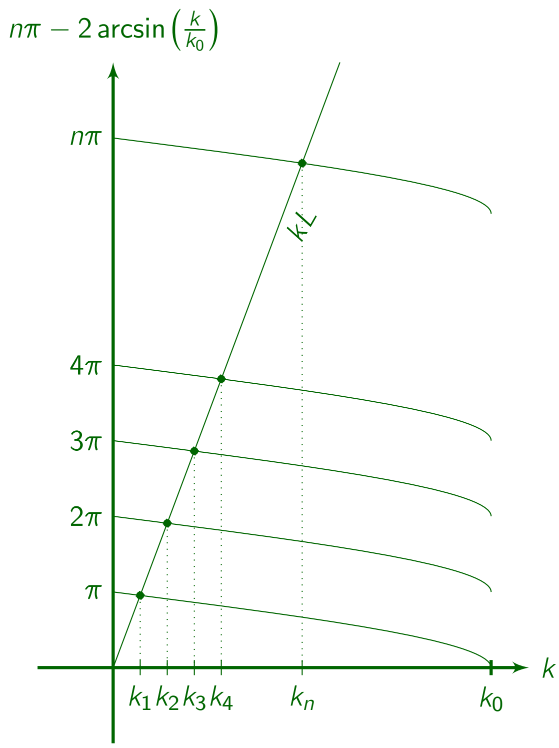

FIGURE 4 – Détermination graphique des valeurs de k, en utilisant la relation : $kL = n\pi - 2\arcsin\left(\frac{k}{k_0}\right)$. On remarque qu'il existe une valeur possible pour chaque intervalle de largeur $\frac{\pi}{L}$; et dans la limite $k \ll k_0$, les premières valeurs de k sont approximativement les multiples de $\frac{\pi}{L}$.

III Cas du puits fini

Question 7 Éliminer ζ dans l'équation (2), et en déduire une condition de quantification sur k qu'on peut résoudre graphiquement en traçant une droite bien choisie sur la figure 2. On supposera $k_0 L \gg 1$.

Réponse 7 L'égalité des tangentes permet d'écrire l'égalité des arguments modulo π :

$$\zeta \equiv -kL - \zeta \equiv \arcsin\left(\frac{k}{k_0}\right) \quad [\pi].$$

Au final :

$$\zeta \equiv -\frac{kL}{2} \quad \left[\frac{\pi}{2}\right]$$
$$kL = n\pi - 2\arcsin\left(\frac{k}{k_0}\right) \qquad \text{avec } n \text{ entier.}$$

On peut alors matérialiser kL en traçant la droite passant par 0 et de pente L sur la figure 2 (quasi-verticale dans la limite $k_0 L \gg 1$), ce qui donne la figure 4 ; les valeurs possibles de k sont les intersections de cette droite avec les $n\pi - 2\arcsin\left(\frac{k}{k_0}\right)$.

Question 8 Retrouve-t-on, au moins approximativement ou qualitativement, les résutats de la question 4 ? Détailler.

Réponse 8 Stricto sensu non, bien entendu, mais certains résultats se retrouvent.

- k et E sont de nouveau quantifiés, et les premiers niveaux sont approximativement les mêmes que pour le puits infini, avec $k_n \simeq \frac{\pi}{L}$. Il y a de nouveau une énergie de confinement non nulle.
- La fonction d'onde ne s'annule plus hors du puits, même si elle décroît exponentiellement. Contrairement à la situation classique, **la particule peut sortir du puits bien que son énergie soit inférieure à la hauteur du puits !** C'est l'« effet tunnel ».
- La fonction d'onde est toujours symétrique ou antisymétrique par rapport au centre du puits (on le voit bien en remarquant que $\zeta \equiv -\frac{kL}{2} \quad \left[\frac{\pi}{2}\right]$, ce qui « centre » la sinusoïde). Elle présente toujours des annulations dans le puits (sauf la première).

Question 9 Tracer l'allure des 3 premières fonctions d'ondes.

Réponse 9 Voir figure 3.

Question 10 Bonus : que se passe-t-il pour $E > V_0$?

Réponse 10 La particule n'est plus localisée, la fonction d'onde est sinusoïdale partout, l'énergie n'est plus quantifiée. La particule est bien sortie du puits, comme en physique classique.