# TD4 - PUITS DE POTENTIEL INFINIMENT PROFOND

L'objectif du TD est de mettre en évidence les effets quantiques sur le spectre en énergie d'une particule en raison de sa nature ondulatoire. On considère pour cela le modèle le plus simple, celui du puits de potentiel infiniment profond.

## RAPPEL DE COURS

L'état quantique d'un corpuscule, tel que l'électron, est caractérisé par une fonction d'onde Ψ(r,t). Cette fonction d'onde est interprétée comme l'amplitude de la probabilité de présence du corpuscule. Lorsque le corpuscule de masse m subit l'action d'un potentiel V, sa fonction d'onde obéit à l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(r,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(r,t) + V(r,t)\Psi(r,t)$$

Lorsque le potentiel est indépendant du temps, la fonction ψ(r,t) peut s'écrire comme le produit de deux fonctions φ et χ qui dépendent respectivement de r et de t. La fonction φ obéit à l'équation de Schrödinger indépendante du temps :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi(r) + V(r)\varphi(r) = E\varphi(r)$$

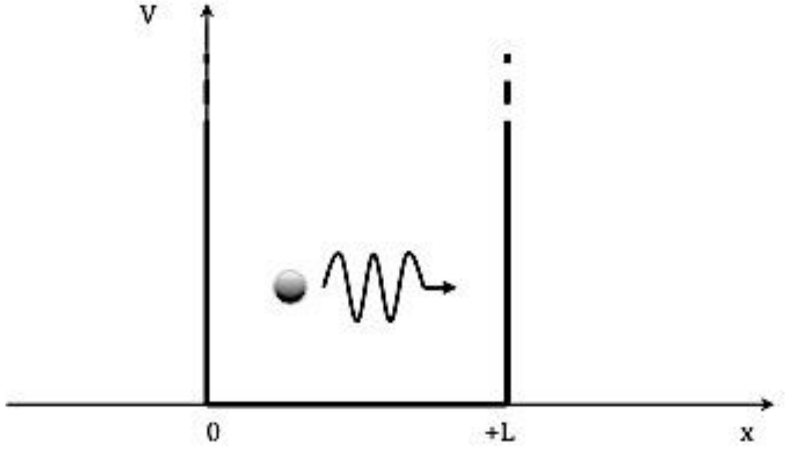
$$\chi(t) = \exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right)$$

$$\Psi(r,t) = \varphi(r).\chi(t) = \varphi(r)\exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right)$$

Quand la fonction $\varphi(r)$est solution de l'équation indépendante du temps, la fonction $\Psi(r,t)$ est alors un "**état stationnaire**" de la particule.

## PUITS DE POTENTIEL

Limiter le déplacement d'un corpuscule dans une région particulière de l'espace revient à choisir un potentiel V d'amplitude supérieure à l'énergie de la particule. Pour simplifier le problème, nous choisissons un puits de potentiel « carré », infiniment profond, tel que celui schématisé ci-dessous.



1. Ecrire l'équation de Schrödinger indépendante du temps vérifiée par la fonction d'onde $\varphi(x)$ dans le puits?
2. Quelle est la solution générale $\varphi(x)$ de l'équation? Nous poserons :

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

3. Que devient la fonction d'onde $\varphi(x)$ au niveau des parois du puits ? Ecrire les conditions aux limites x=0 et x=L.
4. Montrer que ces conditions imposent une quantification pour le vecteur d'onde k et donc pour l'énergie associée.
5. Donner l'expression des fonctions d'onde pour les trois niveaux d'énergie les plus bas. Comment faire le lien entre les fonctions d'onde et la position de la particule dans le puits?
6. Application numérique : déterminer l'énergie minimale à communiquer à un électron pour le faire passer de l'état fondamental au premier niveau excité dans les cas suivants :
   - cas de l'atome : L = 3 Å
   - cas d'une molécule telle qu'une chaîne d'anneaux de thiophène : L = 25 Å
   - cas d'un nanotube de carbone : L = 5 µm
7. Pour découvrir les fonctions d'onde en fonction du temps, ouvrir le fichier *'TimeEvolutionOfTheWavefunctionInA1DInfiniteSquareWell.cdf'* dans le Wolfram CDF Player. Cette animation joue avec une combinaison linéaire des trois premiers états stationnaires.
   a) Mettre successivement $a_1$ puis $a_2$ puis $a_3$ à la valeur 1. En animant en fonction du temps, observer l'évolution de la densité de probabilité de présence.
   b) Cette fois réaliser une combinaison linéaire en mettant $a_1$ et $a_2$ à la valeur 0.5. De nouveau observer en fonction du temps.
   c) Cette combinaison linéaire est-elle un état stationnaire ? Est-elle solution de l'équation de Schrödinger ?

**Eléments de réponse**

4. $E_n = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n\pi}{l}\right)^2$

5. Facteur de normalisation : $\sqrt{\frac{2}{L}}$

**Formulaire :** Equation différentielle du second degré, homogène, à coefficient réel constant

$\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2} + k^2\varphi = 0$ a pour solution générale : $\varphi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$

$\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2} - \alpha^2\varphi = 0$ a pour solution générale : $\varphi(x) = Ae^{\alpha x} + Be^{-\alpha x}$