

Mécanique quantique

TD 4: Particule dans un potentiel constant par morceaux

1 Puits quantiques

On s'intéresse au cas d'une particule d'énergie E piégée dans un puits de potentiel de hauteur $V_0 > E$. Ce puits est décrit par un potentiel constant par morceaux :

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x \in [0, L]; \\ V_0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (1)$$

1. Donner des exemples physiques de réalisations d'un puits quantique (non nécessairement carré).
2. Écrire l'équation aux valeurs propres vérifiée par une fonction propre $\varphi(x)$ dans chaque région de l'espace.
3. Résoudre ces équations. On posera

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad \text{et} \quad K^2 = 2m(V_0 - E)/\hbar^2. \quad (2)$$

4. Quelles conditions vérifient la fonction d'onde aux points de raccordement $x = -L/2$ et $x = L/2$?¹ En déduire quatre équations sur les coefficients indéterminés de ψ .
5. Dans cette question, on se place dans le cas d'un puits infini ($V_0 = \infty$). Donner l'expression de la fonction d'onde dans ce cas. Quelles sont les énergies E_n accessibles à la particule?

Résoudre le cas du puits fini peut être fastidieux, mais une propriété de symétrie du hamiltonien justifie qu'on puisse chercher les fonctions comme symétriques ou antisymétriques.

6. On s'intéresse aux états pairs. Montrer qu'un tel état d'énergie E vérifie

$$k \tan\left(\frac{kL}{2}\right) = K. \quad (3)$$

7. On pose $u = kL/2$ et $W = \frac{L}{2}\sqrt{K^2 + k^2}$. Vérifier que W est indépendant de E . Trouver une équation implicite vérifiée par u .
8. Résoudre cette équation graphiquement. On superposera le résultat du puits infini.
9. Comparer les énergies dans les deux situations, et justifier qualitativement ce résultat grâce à l'inégalité d'Heisenberg.

2 Double puits quantique asymétrique

On s'intéresse maintenant au couplage entre deux puits carrés, mais qui peuvent être de largeur différentes (Fig. 1). On prendra dans la suite $L_d = \frac{3}{2}L_g$.

10. On se place d'abord dans le cas $V_0 = \infty$. Tracer le diagramme énergétique avec les six premiers niveaux du système. On notera $\alpha = \hbar^2\pi^2/8mL_g^2$. Préciser pour chaque niveau le puits dans lequel l'état est localisé.
11. Quel champ électrique devrait-on appliquer sur le système pour que l'état fondamental soit dégénéré? On prendra $L_g = 10\text{ nm}$ et $\Delta = 3\text{ nm}$.
12. Décrire l'évolution du diagramme énergétique lorsqu'on passe d'un V_0 infini à une valeur finie.
13. La situation serait-elle la même si les deux puits étaient identiques? Dans le cas de puits identiques avec un couplage W des états fondamentaux, calculer la dynamique d'un état occupé par un électron, initialement dans le puits de gauche $|\phi_1\rangle$.

1. On pourrait justifier mathématiquement la réponse en intégrant l'équation aux valeurs propres vérifiée par ψ sur un petit intervalle centré sur une discontinuité de $V(x)$, avec l'hypothèse que ψ est \mathcal{C}^2 partout où $V(x)$ est constant et que ψ est globalement bornée.

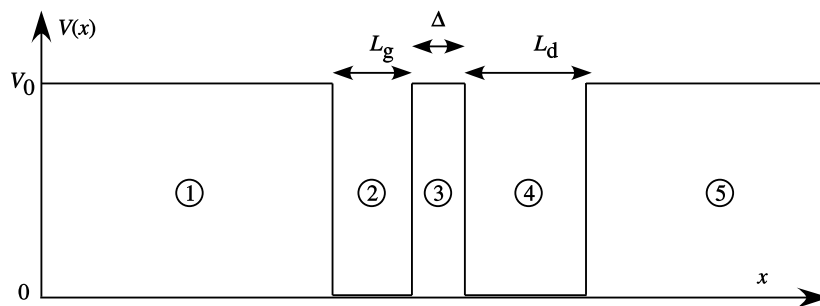


FIGURE 1 – Potentiel créé par un double puits quantique asymétrique.

3 Marche de potentiel

On revient au cas plus simple où le potentiel $V(x)$ est simplement une marche d'escalier (fonction de Heavisde), telle que

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < 0 \\ V_0 & \text{si } x > 0 \end{cases} \quad (4)$$

3.1 États stationnaires

14. Donner la forme générale des solutions $\varphi(x)$ en séparant les cas $E > V_0$ et $E < V_0$. On introduira des notations équivalentes à l'exercice précédent (en particulier k , K et $K_0^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}$).

3.1.1 Cas $E > V_0$

15. Calculer les coefficients de réflexion et de transmission en amplitude \underline{r} et \underline{t} .
 16. Rappeler la définition des coefficients en intensité, et les calculer, toujours dans le cas $E > V_0$. Donner un équivalent optique de cette situation.

3.1.2 Cas $E < V_0$

17. On se place dans le cas $E < V_0$. Calculer à nouveau les coefficients de réflexion en amplitude et en intensité.
 18. Montrer que le rapport des amplitudes des ondes incidente $A_i(k)$ et réfléchie $A_r(k)$ au vecteur d'onde k peut s'écrire

$$\frac{A_r(k)}{A_i(k)} = e^{-2i\theta(k)} \quad \text{avec} \quad \tan \theta(k) = \sqrt{\frac{K_0^2}{k^2} - 1}. \quad (5)$$

3.2 Bonus : Étude dynamique d'un paquet d'onde

Les états stationnaires, bien que fonctions propres du hamiltonien, ne sont pas des états physiques, puisqu'ils ne sont pas normalisables. Une particule est représentée par un paquet d'onde, superposition linéaire de tels états stationnaires centrée sur un vecteur d'onde k_0 incident, et d'élargissement $\Delta k \ll k_0$. Une particule incidente arrive sur la marche de potentiel de la gauche vers la droite.

3.2.1 Cas $k_0 + \Delta k \leq K_0$

Dans cette situation, toutes les OPPH composant le paquet d'onde sont dans le cas $E < V_0$.

19. À partir des résultats de la partie précédente, écrire la fonction d'onde du paquet d'onde $\psi(x, 0)$ puis $\psi(x, t)$ pour tout $x < 0$ comme la somme de deux intégrales sur k .
 20. Calculer la vitesse de groupe des deux paquets d'ondes.
 21. Calculer la position de chaque paquet d'onde en fonction du temps. Que remarquez-vous ? Proposer une explication physique de ce résultat.

3.2.2 Cas $k_0 - \Delta k \geq K_0$

Dans cette situation, toutes les OPPH composant le paquet d'onde vérifient $E > V_0$.

22. Écrire la fonction d'onde $\psi(x, t)$ comme une somme de trois paquets d'ondes.
23. Calculer leur position moyenne en fonction du temps. Comparer votre résultat à la sous-partie précédente.
24. Un développement limité au premier ordre de $\sqrt{k^2 - K_0^2}$ permet de comparer le paquet d'onde incident au paquet d'onde transmis (on posera $q_0 = \sqrt{k_0^2 - K_0^2}$). Montrer que le paquet d'onde transmis est plus condensé dans l'espace réel, et que son amplitude est plus grande que celle du paquet d'onde incident.