MQ2-Cours

Particule quantique dans un puit de potentiel

Résumé partiel du chapitre MQ1. Dans le chapitre MQ1, nous avons étudié la particule quantique libre (i.e. soumise à un potentiel nul $V = 0$). Nous nous sommes intéressés à ses états stationnaires (= états d'énergie fixée), en montrant que ce sont les OPPH. Ces états ne respectant pas la condition de normalisation de la fonction d'onde, ils ne sont pas « physiques ». La description d'une particule libre ne peut donc se faire que par des **paquets d'onde**, c'est-à-dire la superposition d'OPPH de pulsations ω différentes (donc, par relation de De Broglie $E = \hbar\omega$, d'énergies différentes). Nous avons conclu que l'énergie d'une particule quantique libre n'était donc pas précisément définie, ce qui est en fait une conséquence de l'inégalité de Heisenberg temps/énergie.

Introduction du chapitre MQ2. Dans ce chapitre et le suivant, nous allons étudier une particule quantique soumise à un potentiel non nul. Dans le cadre du programme, ce potentiel sera par contre toujours **constant par morceaux**, ce qui simplifiera grandement les calculs (qui resteront cependant assez lourds, la physique quantique n'est pas une science simple). Ce chapitre se consacre à une particule plongée dans un puit de potentiel. Nous commencerons par étudier le puit infini, puis nous discuterons le cas du puit fini.

Table des matières

1 Particule dans un puit infini

1.1 Rappel sur une particule classique

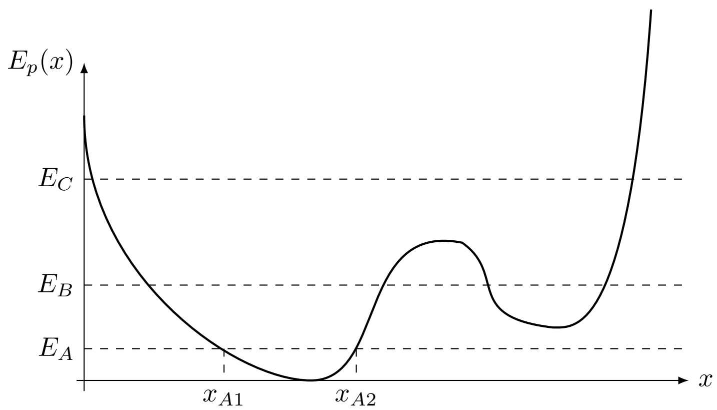
Commençons par quelques rappels sur la physique d'une particule classique dans un profil d'énergie potentielle. Considérons une particule d'énergie mécanique totale E_m. Celle-ci se décompose toujours en une partie cinétique et une partie potentielle

$$E_m = E_c + E_p$$

or l'énergie cinétique $E_c = m\,v^2\,/\,2$ est toujours positive, si bien que

$$\boxed{E_m \geqslant E_p} \tag{1}$$

Considérons le cas d'une particule astreinte à se déplacer le long de l'axe x (système unidimensionnel), et soumise à l'énergie potentielle représentée ci-dessous

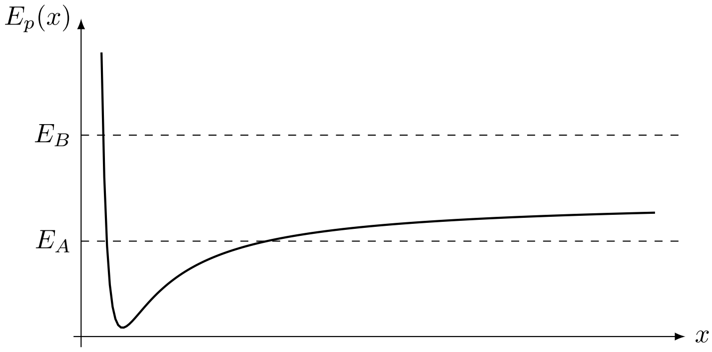


► Alors si l'énergie mécanique de la particule est $E_m = E_A$, la particule est piégée dans le puit de gauche : la seule zone qui lui est acccessible est $[x_{A1}; x_{A2}]$ d'après (1).

► Si son énergie est $E_m = E_B$, elle peut se trouver dans le puit de gauche ou le puit de droite, mais ne peut pas passer de l'un à l'autre, son énergie est trop faible pour franchir la barrière d'énergie potentielle qui sépare ces deux zones.

► Si enfin son énergie est $E_m = E_C$, alors elle peut passer d'un puit à l'autre.

Regardons maintenant un autre profil d'énergie potentielle représenté ci-dessous.



Sur ce potentiel, qui tend vers une limite finie lorsque x tend vers l'infini, on distingue deux cas : si l'énergie de la particule est $E_m = E_A$, alors la particule est piégée dans le puit de d'énergie potentielle : on parle d'**état lié**. Si par contre l'énergie de la particule est $E_m = E_B$ alors la particule a suffisamment d'énergie pour s'échapper à l'infini. On dit qu'elle est dans un **état de diffusion**.

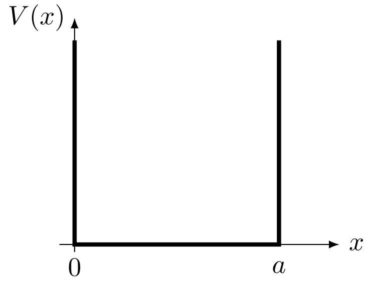
Nous allons nous attacher dans ce chapitre à souligner les différences entre le comportement de cette particule classique et le comportement de son homologue quantique : notamment, nous verrons que des zones interdites à une particule classique ne le sont pas forcément pour une particule quantique (→ voir les ondes évanescentes en dehors du puit fini).

1.2 Description et exemple

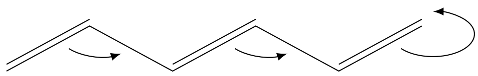
Démarrons l'étude du cas quantique. On considère une particule de masse m astreinte à se déplacer le long d'un axe x (géométrie unidimensionnelle) et soumise au potentiel V (= énergie potentielle en mécanique quantique)

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si} \quad 0 \leqslant x \leqslant a \\ +\infty & \text{sinon} \end{cases}$$

Ce puit a des barrières infiniment hautes, on le qualifie donc de **puit infini**.



Exemples. Cela peut correspondre par exemple à un électron piégé dans une couche de semi-conducteurs AsGa entre deux couches de AsAlGa, qu'on synthétise facilement aujourd'hui grâce aux technologies de la nano-électronique. Ce potentiel peut aussi décrire un électron π sur une molécule linéaire (donc quasi-1D) conjuguée.



1.3 États stationnaires et niveaux d'énergie

On pose la question : « Quels sont les énergies possibles pour la particule piégée dans un tel puit ? »

Rappel. Nous avons vu dans le chapitre MQ1 que les états d'énergie bien définie sont les états stationnaires. Ils prennent la forme

$$\psi(x, t) = \varphi(x)\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\, E\, t\, /\, \hbar}$$

avec E l'énergie de l'état stationnaire, et la partie spatiale de l'état stationnaire $\varphi(x)$ vérifie l'équation de Schrödinger indépendante du temps

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

C'est donc cette équation que nous devons résoudre pour trouver les énergies possibles.

Propriété. Les domaines de potentiel infini sont des **zones interdites** pour la particule quantique.

Preuve. Si $V(x) = \infty$ alors il faut forcément $\varphi(x) = 0$ pour ne pas avoir le terme $V(x)\,\varphi(x)$ infini dans l'équation de Schrödinger indépendante du temps. Et si $\varphi(x) = 0$, alors la probabilité de présence en x à $\mathrm{d}x$ près est

$$\mathrm{d}P(x,\,t) = |\psi(x,\,t)|^2\,\mathrm{d}x = |\varphi(x)|^2\,\mathrm{d}x = 0$$

donc la particule n'a aucune chance de se trouver dans cette zone.

▶ Ici, avec le puit de potentiel que l'on considère, cela signifie que $\varphi(x) = 0$ pour $x \geqslant a$ et pour $x \leqslant 0$.

▶ Ensuite, entre $x = 0$ et $x = a$, le potentiel est nul donc l'équation vérifiée par $\varphi(x)$ est

$$-\frac{\hbar^2}{2\,m}\,\frac{\mathrm{d}^2\varphi(x)}{\mathrm{d}x^2} = E\,\varphi(x) \qquad \text{soit} \qquad \frac{\mathrm{d}^2\varphi(x)}{\mathrm{d}x^2} + \frac{2\,m\,E}{\hbar^2}\,\varphi(x) = 0$$

dont les solutions sont, en notant $k = \sqrt{2\,m\,E\,/\,\hbar^2}$ (c'est-à-dire $E = \hbar^2\,k^2\,/\,(2\,m)$, on retrouve la relation de dispersion d'une particule libre puisque $V = 0$ dans le puit),

$$\varphi(x) = A\,\cos k\,x + B\,\sin k\,x$$

Remarquons qu'on aurait pu écrire les solutions sous forme d'exponentielles complexes plutôt que sous forme de cosinus/sinus. Le choix que nous avons fait se révèle le plus simple pour l'utilisation des conditions aux limites. Justement, $\varphi(x)$ est continue de x (car la fonction d'onde $\psi(x,\,t)$ l'est) donc elle doit vérifier les conditions aux limites

$$\begin{cases} \varphi(0) & = & 0 \\ \varphi(a) & = & 0 \end{cases}$$

qui conduit à

$$A = 0 \qquad \text{et} \qquad 0 = B\,\sin k\,a$$

Mais si $B = 0$, alors $\varphi(x) = 0$ et donc la fonction d'onde est nulle : il n'y a pas de particule dans le puit. Ce n'est évidemment pas un cas qui nous intéresse, donc il faut

$$\sin k\,a = 0 \qquad \text{soit} \qquad \boxed{k_n = \frac{n\,\pi}{a} \qquad \text{avec} \qquad n \in \mathbb{N}^*}$$

Le vecteur d'onde k est donc **quantifié**. On remarque l'analogie entre cette expression pour k et celle des modes propres d'une corde vibrante fixée à ses deux extrémités (voir le chapitre O2). Les fonctions d'onde possibles pour la particule dans puit infini sont finalement

$$\varphi_n(x) = B_n\,\sin\left(\frac{n\,\pi\,x}{a}\right)$$

Comment trouver les amplitudes B_n ? Par la condition de normalisation ! On est sûr que la particule est entre $x = 0$ et $x = a$ donc

$$\int_0^a |\psi(x\,t)|^2\,\mathrm{d}x = 1 \qquad \text{soit} \qquad |B_n|^2 \int_0^a \sin^2\left(\frac{n\,\pi\,x}{a}\right)\mathrm{d}x = 1$$

Le calcul de l'intégrale se fait par linéarisation du sinus

$$\int_0^a \sin^2\left(\frac{n\,\pi\,x}{a}\right)\,\mathrm{d}x = \frac{1}{2}\int_0^a \left(1 - \cos\left(\frac{2\,n\,\pi\,x}{a}\right)\right)\,\mathrm{d}x = \frac{1}{2}\,(a-0) = \frac{a}{2}$$

d'où

$$|B_n| = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

Remarquons maintenant qu'une fonction d'onde, toujours complexe a priori peut s'écrire sous forme exponentielle

$$\varphi(x) = |\varphi(x)|\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}$$

où $|\varphi(x)|$ est le module et θ l'argument de la fonction d'onde. Puisque la seule chose physique dans la fonction d'onde est son module carré (l'interprétation de Born dit que c'est la densité de probabilité de présence de la particule), on peut conclure que son argument n'a pas de sens physique, et peut donc être pris nul sans perte de généralité.

Propriété. Une fonction d'onde est donc toujours définie à un argument près. $\varphi(x)$ et $\varphi(x)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}$ sont deux fonctions d'onde qui décrivent le **même état physique**.

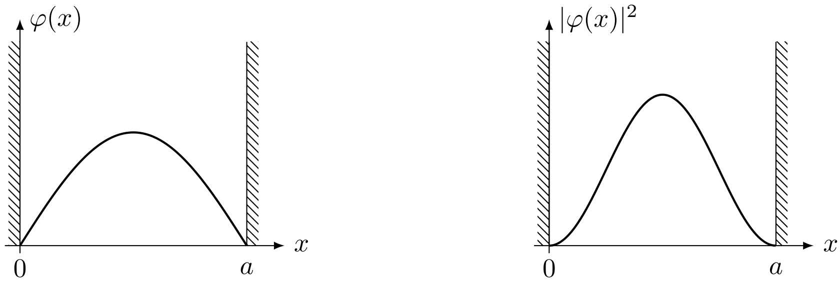
▶ Dans notre cas, la conséquence de cette propriété est que nous pouvons choisir l'argument de B_n nul sans perte de généralité et conclure $B_n = \sqrt{2\,/\,a}$.

Conclusion. Les états stationnaires possibles pour une particule quantique dans un puit infini sont

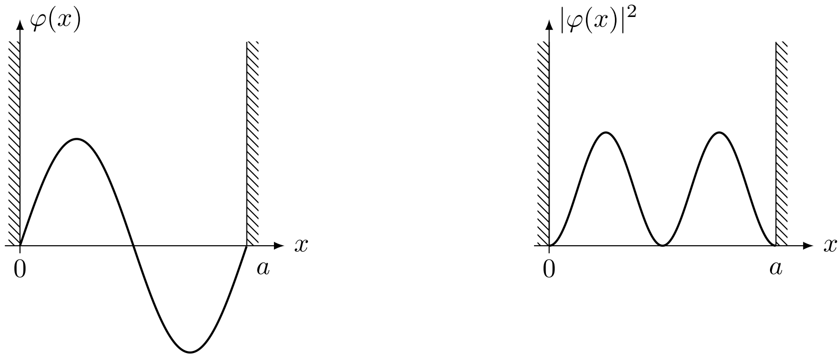
$$\boxed{\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\,\sin\left(\frac{n\,\pi\,x}{a}\right)}$$

On peut en tracer quelques-uns.

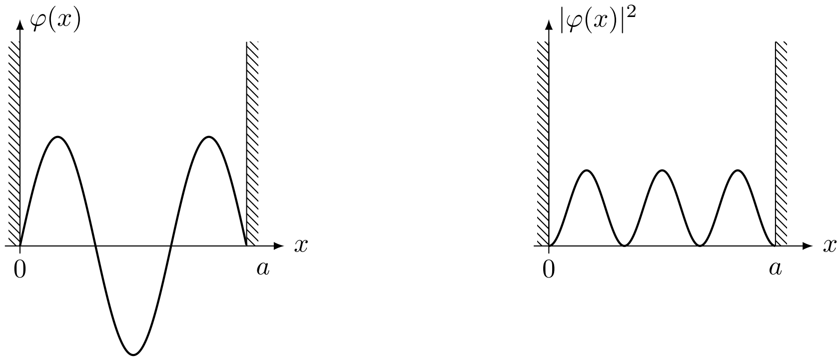
$n = 1$



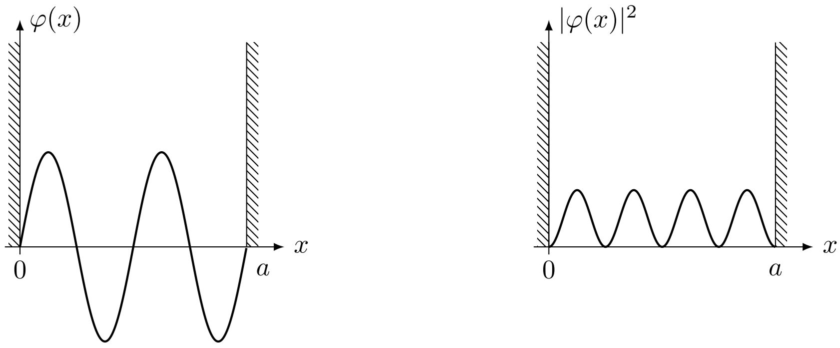
$n = 2$



$n = 3$



$n = 4$



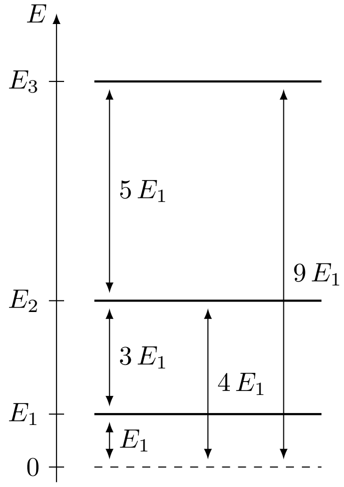
Remarque. On remarque l'analogie entre les états stationnaires d'une particule quantique dans un puit de potentiel infini et les modes propres d'une corde vibrante fixée à ses deux extrémités (voir le chapitre O2).

Par ailleurs, ayant montré que $k = n\,\pi\,/\,a$, on peut obtenir directement les énergies des états stationnaires puisque $k = \sqrt{2\,m\,E\,/\,\hbar^2}$.

Propriété. Les énergies des états stationnaires d'une particule quantique dans un puit infini sont

$$\boxed{E_n = \frac{\hbar^2\,k_n^2}{2\,m} = \frac{n^2\,\hbar^2\,\pi^2}{2\,m\,a^2} \qquad \text{avec} \qquad n \in \mathbb{N}^*}$$

Ils sont quantifiés ! (La particule ne peut pas avoir n'importe quelle énergie). L'état de plus basse énergie, appelé **état fondamental** est $n = 1$. On a ensuite $E_n = n^2\,E_1$, et on peut tracer les premiers niveaux sur un diagramme.



2$^{\text{ème}}$ état excité $\quad \varphi_3(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\,\sin\left(\frac{3\,\pi\,x}{a}\right)$

1$^{\text{er}}$ état excité $\quad \varphi_2(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\,\sin\left(\frac{2\,\pi\,x}{a}\right)$

état fondamental $\quad \varphi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\,\sin\left(\frac{\pi\,x}{a}\right)$

Finalement, les fonctions d'onde complètes des états stationnaires de la particule libre dans le puit de potentiel infini sont

$$\boxed{\psi_n(x,\,t) = \sqrt{\frac{2}{a}}\,\sin\left(\frac{n\,\pi\,x}{a}\right)\,\exp\left(-\mathrm{i}\frac{E_n\,t}{\hbar}\right) \qquad \text{avec} \qquad E_n = \frac{n^2\,\hbar^2\,\pi^2}{2\,m\,a^2} \qquad \text{et} \qquad n \in \mathbb{N}^*}$$

1.4 Discussion

Commentons la physique de la particule quantique dans le puit de potentiel infini.

Remarque 1. Plus la particule est confinée dans un puit étroit (a petit), plus elle est énergétique. Les niveaux d'énergie sont en effet

$$E_n = \frac{n^2\,\hbar^2\,\pi^2}{2\,m\,a^2} \propto \frac{1}{a^2}$$

donc si $a \searrow$ alors $E_n \nearrow$.

Remarque 2. La particule quantique n'est jamais au repos ! Classiquement, son énergie est

$$E_m = \frac{1}{2}\,m\,v^2$$

car son énergie potentielle est $V = 0$. Donc son énergie minimale est nulle, ce qui correspond à une particule au repos $v = 0$. Mais quantiquement, nous venons de montrer que son énergie minimale est

$$E_1 = \frac{\hbar^2\,\pi^2}{2\,m\,a^2} \neq 0$$

Son énergie n'est donc jamais nulle ce qui signifie qu'une particule confinée n'est jamais au repos. Pour cette raison, on appelle E_1 l'**énergie de confinement**.

Cette énergie de confinement se comprend qualitativement grâce aux inégalités de Heisenberg. On a

$$\Delta x\,\Delta k \geqslant \frac{1}{2}$$

or ici $\Delta x \approx a$ puisque la particule est confinée dans le puit de largeur a. Par conséquent on a en ordre de grandeur

$$\Delta k \geqslant \frac{1}{2\,a}$$

Or l'énergie est $E = \hbar^2\,k^2\,/\,(2\,m)$ donc en ordre de grandeur, en assimilant k à Δk, on a

$$E \geqslant \frac{\hbar^2}{8\,m\,a^2} > 0$$

Remarque 3. Regardons un exemple d'énergie de confinement. Dans l'atome d'hydrogène, l'unique électron est autour du noyau, confiné sur une distance typique $a_0 \approx 10^{-10}$ m (la taille de l'atome). Son énergie minimale est alors en ordre de grandeur

$$E \approx \frac{\hbar^2}{m\,a_0^2} \approx 10 \text{ eV}$$

ce qui est le bon ordre de grandeur (l'expression exacte est 13, 6 eV). Un exemple similaire est celui d'un proton dans un noyau atomique. La taille du noyau étant $a_n \approx 10^{-15}$ m, l'énergie minimale du proton dans le noyau est de l'ordre de

$$E \approx \frac{\hbar^2}{m\,a_n^2} \approx 10 \text{ MeV}$$

C'est à nouveau le bon ordre de grandeur ! Et on peut ajouter qu'une réaction qui met en jeu les protons dans un noyau (réaction nucléaire) sont, par ce raisonnement en ordre de grandeur, un million de fois plus énergétique qu'une réaction qui met en jeu des électrons dans les atomes (réaction chimique).

Remarque 4. On peut retrouver très rapidement les énergies de la particule quantique dans le puit infini par analogie avec la corde vibrante fixée à ses deux extrémités. En effet, comme pour la corde vibrante, on a

$$k_n = \frac{n\,\pi}{a}$$

puis la relation de dispersion $E = \hbar^2\,k^2\,/\,(2\,m)$ mène directement à l'expression des énergies. Attention à ne pas pousser l'analogie trop loin : l'énergie de la corde n'est pas quantifiée, et la relation de dispersion sur la corde est $\omega = c\,k$, et non $\omega = \hbar\,k^2\,/\,(2\,m)$.

Remarque 5. Dans le chapitre MQ1, nous avions donné comme propriété de la fonction d'onde que sa dérivée par rapport à x était continue

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} \qquad \text{continue}$$

Mais ici ce n'est pas le cas : la dérivée n'est pas continue aux extrémités du puit en $x = 0$ et en $x = a$. Cela est dû au fait que nous considérons un potentiel qui devient infini à ces abscisses, ce qui est une modélisation brutale. Lorsque V n'est pas infini (comme pour le puit fini que nous étudions juste après), la dérivée de la fonction d'onde par rapport à x sera bien continue.