

Particule quantique dans un puits de potentiel

Résumé partiel du début du chapitre MQ2. On s'attache à décrire la physique quantique à travers ses différences avec les résultats classiques. Une particule quantique confinée dans un puits de potentiel infini ne peut avoir que certaines valeurs discrètes d'énergie, et son état fondamental n'est pas d'énergie nulle. On dit souvent qu'elle n'est pour cette raison « jamais au repos ».

Nous continuons le chapitre MQ2 par l'étude du puits de profondeur finie. Cela nous mènera à utiliser une résolution graphique pour discuter les solutions d'équations non solvables analytiquement.

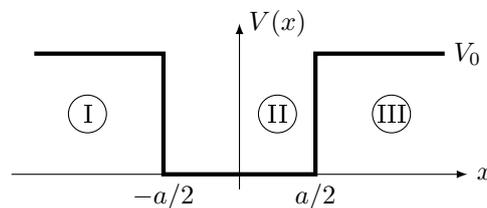
Table des matières

2	Particule dans un puits fini	1
2.1	puits de potentiel	1
2.2	Formes des états stationnaires dans les trois domaines	1
2.3	Recherche des solutions paires	3
2.4	Recherche des solutions impaires	5
2.5	Discussion	6

2 Particule dans un puits fini

2.1 puits de potentiel

On considère une particule de masse m soumise au profil d'énergie potentielle $V(x)$ suivant



Ce potentiel est constant par morceaux. On précise son expression

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{si } x \leq -a/2 & \text{(domaine I)} \\ 0 & \text{si } -a/2 \leq x \leq a/2 & \text{(domaine II)} \\ V_0 & \text{si } x \geq a/2 & \text{(domaine III)} \end{cases}$$

Il s'agit d'un puits de potentiel unidimensionnel de profondeur V_0 fini. Nous chercherons à mettre en évidence les différences avec la physique du puits infini.

On suppose par ailleurs que l'énergie de la particule est $0 < E \leq V_0$: **classiquement, la particule est donc piégée dans le puit**. De manière identique à l'étude du puits infini, on se demande quelles peuvent être les énergies d'une particule quantique dans ce potentiel. Pour répondre à cette question, on va chercher à déterminer les états stationnaires de la particule.

2.2 Formes des états stationnaires dans les trois domaines

Un état stationnaire s'écrit toujours sous la forme

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

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

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

Ici, puisque le potentiel est constant par morceaux, nous allons **résoudre cette équation dans chacun des trois domaines puis raccorder les solutions en $x = \pm a/2$ en utilisant que la fonction d'onde et sa dérivée spatiale sont continues** (voir MQ1).

► Dans le domaine I et III, $V(x) = V_0$ donc $\varphi(x)$ vérifie

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} - \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} \varphi = 0 \quad (1)$$

Puisque $V_0 > E$, posons

$$k = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$$

alors $k \in \mathbb{R}$. Les solutions de l'équation de Schrödinger stationnaire (1) dans les domaines I et III prennent donc la forme

$$\varphi(x) = A e^{+kx} + B e^{-kx}$$

On peut écrire plus précisément, dans les domaines I et III respectivement,

$$\varphi_I(x) = A_I e^{+kx} + B_I e^{-kx} \quad \text{et} \quad \varphi_{III}(x) = A_{III} e^{+kx} + B_{III} e^{-kx}$$

Par ailleurs, φ ne peut pas tendre vers l'infini, sinon elle ne serait pas normalisable. Dans le domaine I où x peut tendre vers $-\infty$, cela impose

$$B_I = 0$$

et dans le domaine III où x peut tendre vers $+\infty$, cela impose

$$A_{III} = 0$$

► Dans le domaine II maintenant, $V(x) = 0$ donc $\varphi(x)$ vérifie

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \varphi = 0 \quad (2)$$

Puisque $E > 0$, posons

$$k_0 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

alors $k_0 \in \mathbb{R}$. Les solutions de l'équation de Schrödinger stationnaire (2) dans le domaine II prend alors la forme

$$\varphi_{II}(x) = A_{II} e^{+ik_0x} + B_{II} e^{-ik_0x}$$

(Remarquons que nous aurions dans ce cas aussi pu écrire la solution sous la forme de cosinus/sinus, tout à fait équivalente).

Finalement,

$$\varphi(x) = \begin{cases} A_I e^{+kx} & \text{pour } x \leq -a/2 \\ A_{II} e^{+ik_0x} + B_{II} e^{-ik_0x} & \text{pour } -a/2 \leq x \leq a/2 \\ B_{III} e^{-kx} & \text{pour } x \geq a/2 \end{cases} \quad (3)$$

avec

$$k = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} \quad \text{et} \quad k_0 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

Remarque 1. La fonction d'onde est non nulle pour $x \geq a/2$ et $x \leq -a/2$. Cela signifie que **la particule a une probabilité non nulle de s'y trouver, alors que c'est une zone interdite classiquement !**

Remarque 2. Dans les zones I et III, $\varphi(x)$ est une exponentielle décroissante. On parle d'**onde évanescente**.

Pour avancer dans la résolution, il nous reste à déterminer les quatre constantes d'intégration A_I , A_{II} , B_{II} et B_{III} .

Rappel. La fonction d'onde ψ , donc sa partie spatiale φ est continue et sa dérivée spatiale aussi

$$\varphi \quad \text{et} \quad \frac{d\varphi}{dx} \quad \text{sont continues}$$

Nous avons donc deux relations (pour φ et φ') en $-a/2$, et deux autres relations en $a/2$ soient quatre relations de continuité et la condition de normalisation pour déterminer quatre inconnues et l'énergie, ce qui est suffisant pour toutes les calculer, mais le calcul est fastidieux. On le raccourcit en admettant la propriété suivante.

Propriété. Le potentiel $V(x)$ étant pair, au sens où $V(-x) = V(x)$, des considérations de symétries (hors programme) permettent de conclure que **les parties spatiales des états stationnaires sont**

$$\text{soit paires} \quad \varphi(x) = \varphi(-x), \quad \text{soit impaires} \quad \varphi(x) = -\varphi(-x).$$

Grâce à cette propriété admise, nous pouvons simplifier la résolution en cherchant d'une part les solutions paires, et d'autre part les solutions impaires. Nous aurons alors toutes les solutions.

2.3 Recherche des solutions paires

On cherche pour commencer les solutions paires, telles que $\varphi(x) = \varphi(-x)$. D'après (3), cela impose

$$A_I e^{kx} = B_{III} e^{-k(-x)} \quad \text{pour} \quad |x| \geq a/2 \quad \text{soit} \quad \boxed{A_I = B_{III}}$$

donc on notera désormais $A_I = B_{III} \equiv A$. Et aussi

$$A_{II} e^{ik_0 x} + B_{II} e^{-ik_0 x} = A_{II} e^{-ik_0 x} + B_{II} e^{ik_0 x} \quad \text{pour} \quad |x| \leq a/2$$

qui donne

$$2i A_{II} \sin(k_0 x) = 2i B_{II} \sin(k_0 x) \quad \text{soit} \quad \boxed{A_{II} = B_{II}}$$

donc nous noterons désormais $A_{II} = B_{II} \equiv B/2$. Finalement, les solutions paires sont donc de la forme

$$\varphi(x) = \begin{cases} A e^{+kx} & \text{pour } x \leq -a/2 \\ B \cos(k_0 x) & \text{pour } -a/2 \leq x \leq a/2 \\ A e^{-kx} & \text{pour } x \geq a/2 \end{cases} \quad (4)$$

Il ne nous reste alors que deux constantes à déterminer, A et B . On peut les obtenir en écrivant les conditions aux limites en $x = a/2$ (sachant que les conditions en $-a/2$ donneraient les mêmes résultats puisqu'on cherche une solution paire). Les continuités de φ et φ' conduisent respectivement à [À faire!]

$$B \cos\left(\frac{k_0 a}{2}\right) = A e^{-ka/2} \quad \text{et} \quad -B k_0 \sin\left(\frac{k_0 a}{2}\right) = -k A e^{-ka/2}$$

En remettant l'équation de gauche dans celle de droite, on calcule

$$B k_0 \sin\left(\frac{k_0 a}{2}\right) = k B \cos\left(\frac{k_0 a}{2}\right) \quad \text{soit} \quad \boxed{\tan\left(\frac{k_0 a}{2}\right) = \frac{k}{k_0}} \quad (5)$$

Remarquons que l'énergie E de l'état stationnaire est cachée dans k et k_0 . L'idée est donc de trouver toutes les énergies pour lesquelles cette équation a une solution. Cela est impossible analytiquement, nous allons donc devoir nous contenter d'une **résolution graphique**. Pour commencer, nous voyons que (5) peut se réécrire

$$\tan\left(\frac{k_0 a}{2}\right) = \frac{k a}{2} \frac{2}{k_0 a}$$

On pose donc le changement de variable

$$X = \frac{k_0 a}{2} \quad \text{et} \quad Y = \frac{k a}{2}$$

L'équation (5) s'écrit avec ces nouvelles variables

$$X \tan X = Y$$

Par ailleurs, k et k_0 nous sont connus et sont liés. On rappelle que

$$k = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} \quad \text{et} \quad k_0 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

Si on calcule

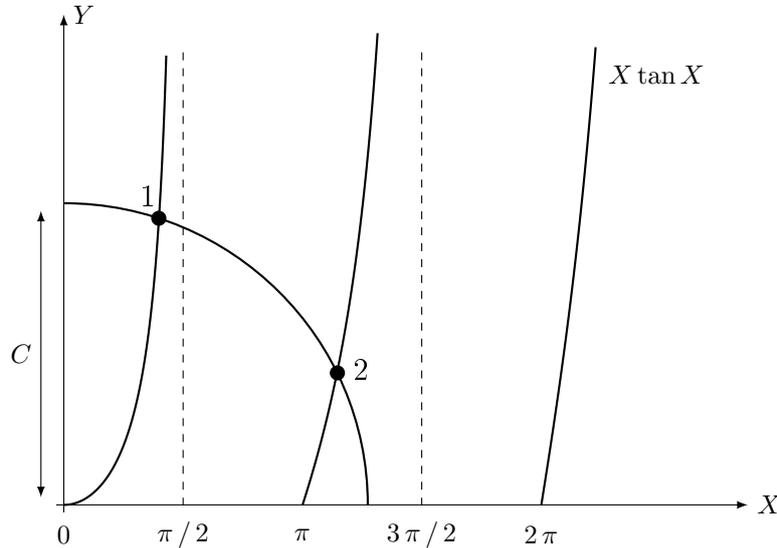
$$\begin{aligned} X^2 + Y^2 &= (k_0^2 + k^2) \frac{a^2}{4} \\ &= \left(\frac{2mE}{\hbar^2} + \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} \right) \frac{a^2}{4} \\ &= \frac{m a^2}{2 \hbar^2} V_0 = \text{Cste} \end{aligned}$$

Nous observons ainsi que la somme $X^2 + Y^2$ est une constante du problème, déterminée entièrement par la largeur a et la profondeur V_0 du puits de potentiel.

Finalement, les deux variables $X \geq 0$ et $Y \geq 0$ (car $k_0 \geq 0$ et $k \geq 0$) vérifient

$$X \tan X = Y \quad \text{et} \quad X^2 + Y^2 = C^2 \quad \text{avec} \quad C^2 = \frac{m a^2}{2 \hbar^2} V_0, \quad X \geq 0 \quad \text{et} \quad Y \geq 0.$$

La deuxième équation est celle d'un cercle de centre (0, 0) et de rayon C. Graphiquement, on peut alors voir les solutions de ce système sur le tracé suivant



Les solutions sont sur les intersections de la représentation graphique de la fonction $x \tan x$ avec le cercle de rayon C .

Remarque 1. On remarque qu'il y a plusieurs solutions, selon la valeur de C . Les coordonnées (X_n, Y_n) de la n -ième solution permettent de remonter à l'énergie de l'état stationnaire correspondant

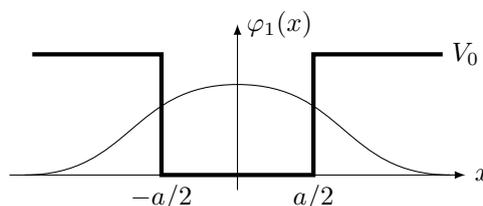
$$X_n^2 = \left(\frac{k_0 a}{2}\right)^2 = \frac{m a^2 E_n^2}{\hbar^2} \quad \text{soit} \quad E_n = \frac{\hbar^2 X_n^2}{m a^2}$$

On ne peut évidemment pas faire grand chose de cette expression puisque les X_n sont des nombres que nous ne connaissons pas analytiquement. On observe cependant que plus X_n est grand (X_n est l'abscisse de la solution sur le graphique, donc plus X_n est grand plus la solution est « à droite »), plus E_n est grande. Les états sont donc classés du moins énergétique au plus énergétique sur le graphique lorsqu'on le parcourt de gauche à droite.

Remarque 2. Les énergies sont quantifiées! Elles ne peuvent prendre que des valeurs discrètes $E_n = \hbar^2 X_n^2 / (m a^2)$, comme pour le puits infini!

Conclusion sur les états stationnaires pairs du puits fini.

- **Il existe toujours au moins un état stationnaire pair.** On observe en effet que même si C est tout petit, il y aura une intersection avec la première branche de la courbe représentative de $x \tan x$.
- Il y a une solution si $0 < C < \pi$, deux solutions si $\pi < C < 2\pi$ (comme sur le schéma ci-dessus), trois solutions si $2\pi < C < 3\pi$, etc...
- Une obtention graphique des X_n permet de remonter aux k_{0n} et k_n , et donc de tracer la fonction d'onde correspondante. Le niveau pair de plus basse énergie (dit **fondamental**) existe toujours et il prend la forme suivante (on s'en douterait par analogie avec les niveaux du puits infini), obtenue grâce aux expressions (4) de φ



Attention dans la représentation de φ_1 : la partie spatiale de la fonction d'onde φ et sa dérivée spatiale sont

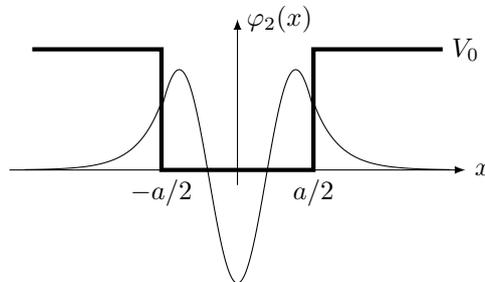
continues donc pas de discontinuité ni de points anguleux en $x = \pm a/2$.

► La particule a une densité de probabilité $|\varphi_1(x)|^2$ non nulle de **se trouver hors du puit !** Alors que ce sont des zones interdites classiquement.

► On peut aussi tracer le premier niveau pair excité φ_2 . Il n'existe que si $C > \pi$ donc si

$$V_0 > \frac{2 \hbar^2 \pi^2}{m a^2}$$

Il prend la forme



2.4 Recherche des solutions impaires

On peut mener exactement le même travail sur les solutions impaires, donc vérifiant $\varphi(x) = -\varphi(-x)$. On se contentera de donner quelques résultats intermédiaires, sans refaire tous les calculs. Cette fois

$$\varphi(x) = \begin{cases} A e^{+k x} & \text{pour } x \leq -a/2 \\ B \sin(k_0 x) & \text{pour } -a/2 \leq x \leq a/2 \\ -A e^{-k x} & \text{pour } x \geq a/2 \end{cases} \quad (6)$$

La continuité de φ et $d\varphi/dx$ impose alors

$$\cotan\left(\frac{k_0 a}{2}\right) = -\frac{k}{k_0}$$

soit, avec les mêmes notations que précédemment,

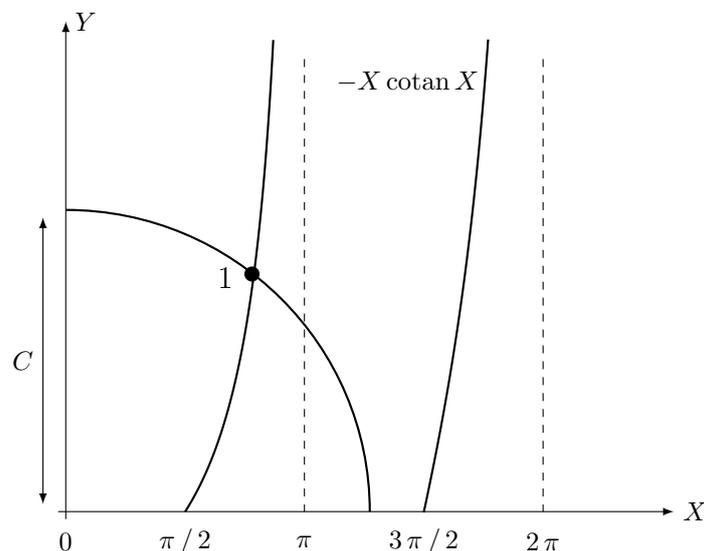
$$-X \cotan X = Y$$

On a aussi toujours les mêmes expressions pour k_0 et k , donc la relation

$$X^2 + Y^2 = C^2 \quad \text{avec} \quad C^2 = \frac{m a^2}{2 \hbar^2} V_0$$

n'a pas changé. Il nous faut donc, pour obtenir les niveaux impaires, résoudre graphiquement

$$-X \cotan X = Y \quad \text{et} \quad X^2 + Y^2 = C^2 \quad \text{avec} \quad C^2 = \frac{m a^2}{2 \hbar^2} V_0, \quad X \geq 0 \quad \text{et} \quad Y \geq 0.$$



Et de ce graphique on déduit les conclusions suivantes.

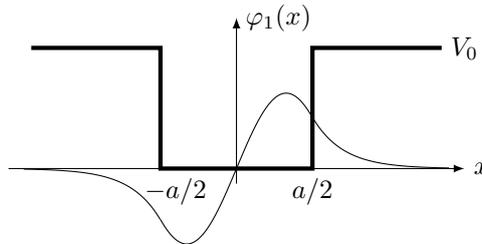
Conclusion sur les états stationnaires impairs du puits fini.

► Il n'y a pas toujours d'état stationnaire impair. On observe en effet que si $C < \pi/2$ alors il n'y a aucune intersection avec la première branche de la courbe représentative de $-x \cotan x$. Il faut donc au moins

$$C > \frac{\pi}{2} \quad \text{soit} \quad V_0 > \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m a^2}$$

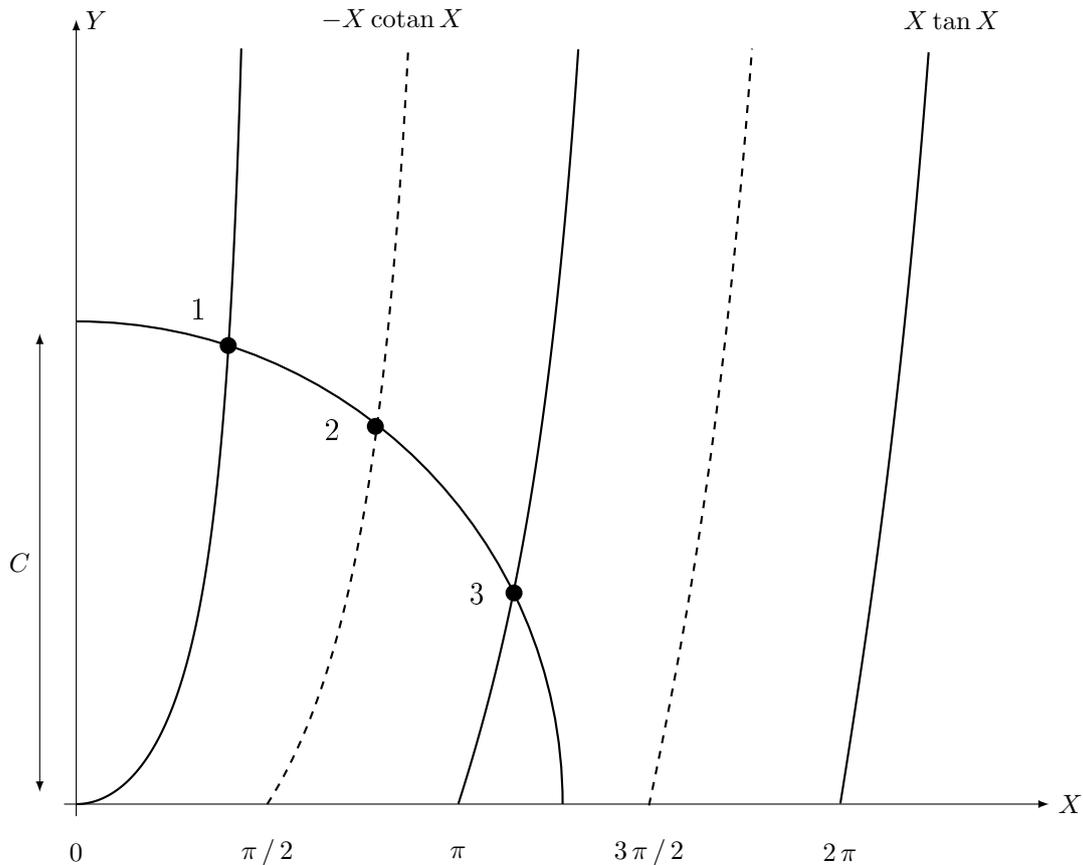
C'est le cas du schéma ci-dessus par exemple. Le puits doit être suffisamment profond.

► S'il existe, le premier niveau impair est

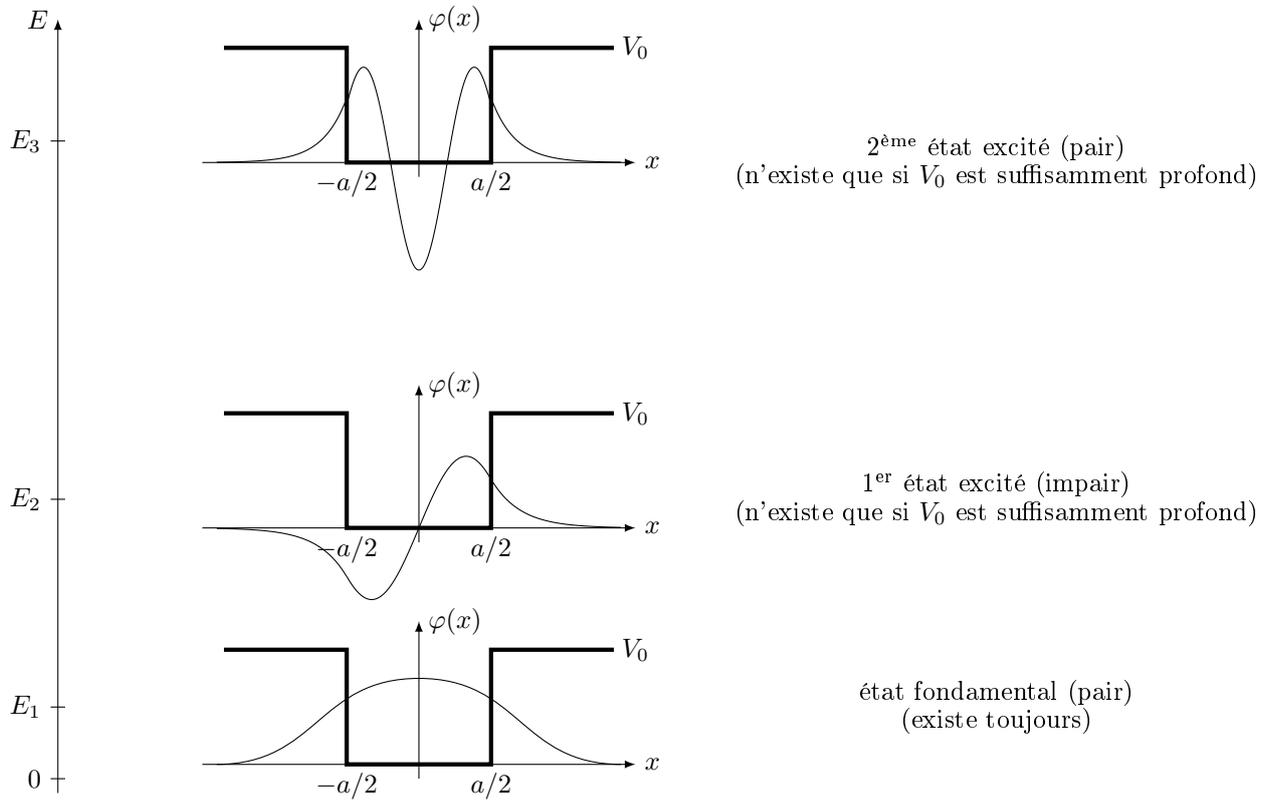


2.5 Discussion

Après avoir étudié séparément les solutions paires puis impaires, il semble pertinent pour prendre du recul de regarder les deux à la fois. Pour cela, on reproduit la résolution graphique des deux types de solutions sur le même schéma ci-dessous.



Pour la valeur de C (donc de profondeur V_0) choisie, il y a trois intersections entre le cercle de rayon C et les courbes représentatives de $x \tan x$ et $-x \cotan x$, donc trois états stationnaires possibles dans le puits, avec $E_1 < E_2 < E_3$. L'état 1 (le fondamental) est pair, le 2 est impair, le 3 est de nouveau pair, et on voit géométriquement que la parité des états s'alterne lorsqu'on les parcourt du moins énergétique au plus énergétique. On peut les tracer dans un diagramme énergétique.



Remarque 1. Les états sont très similaires par leur forme à ceux du puits infini. La différence majeure est que, pour le puits fini, les états peuvent « baver » un peu en dehors du puit, c'est-à-dire que la fonction d'onde est non nulle au voisinage du puit, et donc la particule quantique a une probabilité non nulle de se trouver dans les zones interdites classiquement $x \geq a/2$ et $x \leq -a/2$. Dans ces zones, la fonction d'onde est dite **évanescence**.

Remarque 2. Nous connaissons les niveaux d'énergie du puits infini

$$E_n^\infty = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2 m a^2}$$

Il est intéressant de se demander si le fait que le puits soit fini abaisse ou réhausse les énergies des états. On se pose donc la question, si le niveau n du puits fini existe, « a-t-on $E_n > E_n^\infty$ ou l'inverse? » L'inégalité de Heisenberg utilisée en ordre de grandeur permet de répondre facilement à la question. Puisque, dans le puits fini, la particule peut « baver » en dehors du puit, tout se passe comme si elle était confinée dans un puits de largeur apparente $a_{app} > a$. Grossièrement, on écrit alors

$$\Delta x \Delta k \approx 1 \quad \text{alors, en OdG} \quad a_{app} k_{0n} \approx 1 \quad \text{soit} \quad k_{0n} \approx \frac{1}{a_{app}}$$

mais

$$a_{app} > a \quad \text{donc} \quad \frac{1}{a_{app}} < \frac{1}{a} \quad \text{et alors} \quad k_{0n} < k_{0n}^\infty$$

Puis, on utilise que $E = \hbar^2 k_0^2 / (2m)$ pour conclure que si $k_{0n} < k_{0n}^\infty$ alors

$$E_n < E_n^\infty$$

Les niveaux d'énergie du puits fini **sont donc abaissés** par rapport à ceux du puits infini. C'est tout à fait logique : la particule étant moins confinée ($a_{app} > a$), son énergie de confinement est plus petite.

Remarque 3. Le niveau fondamental existe toujours : il y a donc toujours au moins un état stationnaire dans lequel la particule est confinée dans (et un peu autour) du puit. On parle d'**état lié**. Dans le cas où la particule a une énergie $E > V_0$, alors les zones hors du puits sont accessibles classiquement, et a fortiori quantiquement. La particule est libre de partir à l'infini, elle est dans un état dit **de diffusion**. Dans ce cas, ses états stationnaires sont les OPPH et son énergie peut prendre n'importe quelle valeur (mais n'est pas parfaitement définie, voir MQ1). On peut conclure dans un petit tableau

$E < V_0$	$E > V_0$
états liés	état de diffusion (OPPH)
particule piégée autour du puit	particule libre de partir à l'infini
énergie quantifiée (E_0, E_1, E_2, \dots)	énergie non quantifiée (E quelconque)

On conclut le chapitre MQ2 sur un point méthode.

Méthode : Particule quantique dans un potentiel constant par morceaux

Stratégie générale :

- 1) Découper l'espace en domaines où $V(x)$ est constant ;
- 2) Résoudre l'équation de Schrödinger indépendante du temps sur chacun de ces domaines ;
- 3) Utiliser la continuité de $\varphi(x)$ et $\varphi'(x)$ comme conditions aux limites et poursuivre le calcul pour obtenir les k possibles puis les énergies.

Cas particuliers :

- Pour le puits infini, $\varphi'(x)$ n'est en fait pas continue à cause du potentiel qui tend brutalement vers l'infini (on obtient les énergies seulement avec la continuité de φ) ;
- Pour le puits fini, le calcul analytique des énergies est impossible, on se contente d'une résolution graphique.

Le chapitre MQ3 s'intéressera à une particule qui arrive sur une barrière de potentiel et la possibilité d'« effet tunnel » à travers celle-ci.