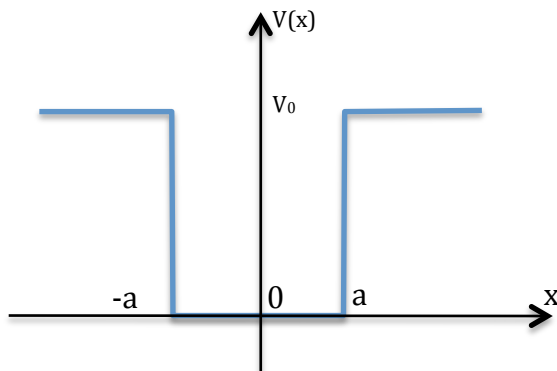


Chapitre 3 : EQUATION DE SCHRÖDINGER DANS UN POTENTIEL UNIFORME PAR MORCEAUX

5.3. Équation de Schrödinger dans un potentiel $V(x)$ uniforme par morceaux	..
Quantification de l'énergie dans un puits de potentiel rectangulaire de profondeur infinie. Énergie de confinement quantique.	Établir les expressions des énergies des états stationnaires. Faire l'analogie avec la recherche des pulsations propres d'une corde vibrante fixée en ses deux extrémités. Retrouver qualitativement l'énergie minimale à partir de l'inégalité de Heisenberg spatiale. Associer le confinement d'une particule quantique à une augmentation de l'énergie cinétique.
Quantification de l'énergie des états liés dans un puits de profondeur finie. Élargissement effectif du puits par les ondes évanescentes.	Mettre en place les éléments du modèle : forme des fonctions d'onde dans les différents domaines. Utiliser les conditions aux limites admises : continuité de φ et $d\varphi/dx$. Associer la quantification de l'énergie au caractère lié de la particule. Mener une discussion graphique. Interpréter qualitativement, à partir de l'inégalité de Heisenberg spatiale, l'abaissement des niveaux d'énergie par rapport au puits de profondeur infinie.

Les modèles de potentiels rectangulaires (appelés « puits ») permettent de modéliser simplement beaucoup de situations.

Exemple : les forces qui lient les neutrons et les protons dans le noyau sont des forces très intenses mais à très courte portée, qu'on peut modéliser par un potentiel de la forme :



$2a \approx 10^{-15}$ m est la taille du noyau.

Rappel important : malgré sa notation, $V(x)$ est l'énergie potentielle de la particule.

1. Puits rectangulaire de profondeur infinie :

Ce potentiel est une modélisation simple du précédent dans la situation où l'énergie E de la particule quantique est telle que :

$$E \ll V_0,$$

V_0 étant la profondeur du puits (on est « au fond du puits »).

On considère alors que $V_0 \rightarrow \infty$.

1.1. Recherche des états stationnaires :

On cherche des états stationnaires, de fonction d'onde :

$$\Psi(x,t) = \varphi(x) \cdot \exp(-iEt/\hbar)$$

La fonction d'onde spatiale $\varphi(x)$ obéit à l'équation stationnaire (*faites le calcul*) :

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

Le potentiel étant infini pour $x > a$ ou $x < -a$, l'équation de Schrödinger stationnaire impose :

$$\varphi(x) = 0 \Rightarrow \Psi = 0.$$

Pour $-a < x < a$, on a $V = 0$: l'équation de Schrödinger spatiale est celle d'une particule libre ; elle a pour solutions (*faites le calcul*) pour $E > 0$:

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

avec :

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \text{ avec } E > 0$$

Remarque : on peut montrer que le cas $E < 0$ ne donne pas de solutions.

1.2. Conditions aux limites :

Conditions générales de continuité :

- la fonction $\varphi(x)$ doit être continue.
- lorsque le potentiel $V(x)$ est continu ou présente des discontinuités finies, la dérivée $\frac{d\varphi(x)}{dx}$ est continue.

On doit donc avoir :

$$\varphi(-a) = \varphi(a) = 0$$

On en déduit (*faites le calcul*) :

$$k_n = \frac{n\pi}{2a}$$

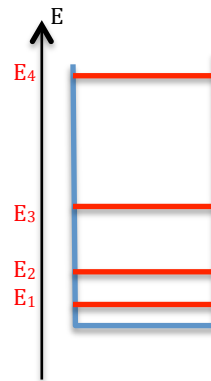
1.3. Énergie de confinement quantique :

On déduit de la relation de dispersion :

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

On constate que l'énergie de la particule est quantifiée.

<http://www.quantum-physics.polytechnique.fr> : 2.2.4.



On peut faire une analogie avec la corde vibrante fixée en $x=0$ et $x=2a$, dont les modes propres correspondent à :

$$k_n = \frac{n\pi}{2a}$$

Néanmoins l'énergie de la corde n'était pas quantifiée !

En effet dans le cas des énergies élevées, on a :

$$\frac{E_{n+1} - E_n}{E_n} = \frac{2n + 1}{n^2} \rightarrow 0 \text{ pour } n \rightarrow \infty$$

1.4. Energie minimale : interprétation par l'inégalité de Heisenberg (cf cours PCSI) :

Dans le puits :

$$\langle p_x \rangle = 0$$

d'où :

$$(\Delta p_x)^2 = \langle p_x^2 \rangle$$

L'énergie ayant une valeur constante, on a :

$$E = \langle E \rangle = \frac{\langle p_x^2 \rangle}{2m} = \frac{(\Delta p_x)^2}{2m} \geq \frac{\hbar^2}{2m(\Delta x)^2}$$

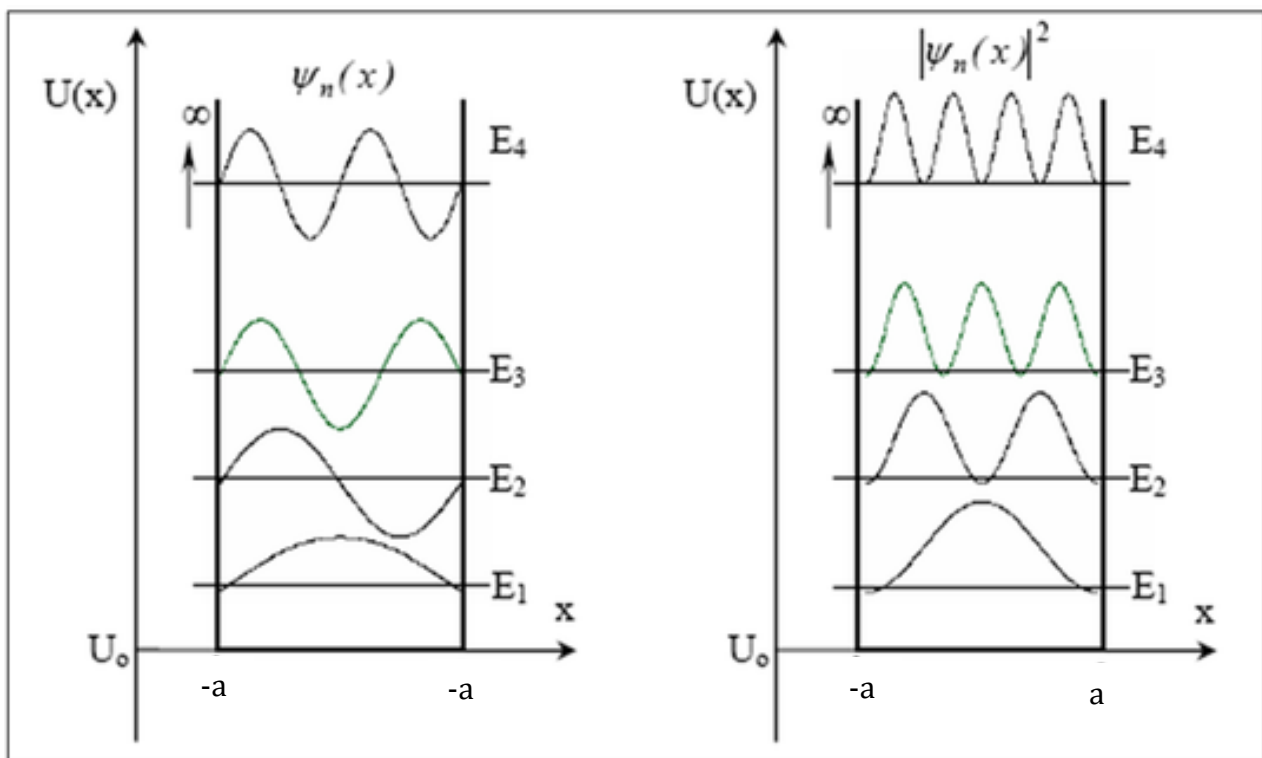
d'après l'inégalité de Heisenberg.

On a de plus :

$$\Delta x < 2a$$

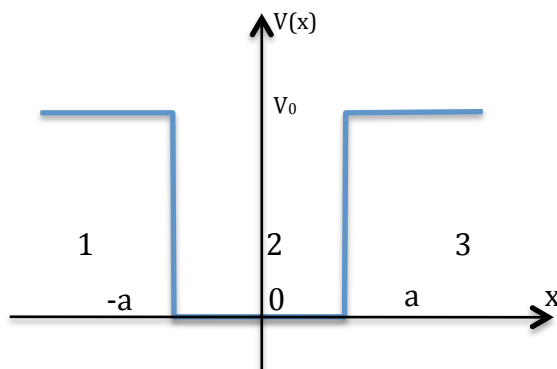
d'où :

$$E \geq \frac{\hbar^2}{2m(2a)^2}$$



2. Puits de profondeur finie.

On considère cette fois un puits de profondeur V_0 finie, compris entre $-a$ et a , qui définit trois régions de l'espace.



2.1. Etats liés, états de diffusion :

Définition : on appelle états de diffusion les états pour lesquels $E \geq V_0$, et états liés les états pour lesquels : $0 \leq E < V_0$.

On ne s'intéresse ici qu'aux états liés.

On peut montrer qu'il n'existe pas de solution pour $E < 0$; on a donc $E > 0$.

2.2. Comportement classique :

En mécanique classique, on doit avoir : $E_c > 0$, or $E = E_c + V$, on doit donc avoir $E > V$: une particule classique d'énergie $0 < E < V_0$ ne peut exister que dans le domaine $|x| < a$.

2.3. Solutions stationnaires de l'équation :

Pour $|x| < a$ (région 2), la forme générale des solutions est identique au cas du puits infini :

$$\varphi_2(x) = A_2 \cdot e^{ik_2x} + B_2 \cdot e^{-ik_2x}$$

avec :

$$k_2 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \text{ avec } E > 0$$

Pour $|x| > a$, la fonction d'onde spatiale $\varphi(x)$ obéit à l'équation stationnaire :

$$\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\varphi(x) = (V_0 - E) \cdot \varphi(x)$$

qui a pour solution dans la région 1 :

$$\varphi_1(x) = A_1 \cdot e^{k_1x} + B_1 \cdot e^{-k_1x} \quad (\text{Attention : expo réelles !})$$

et dans la région 3 :

$$\varphi_3(x) = A_3 \cdot e^{k_1x} + B_3 \cdot e^{-k_1x}$$

avec :

$$k_1 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \text{ réel}$$

2.4. Conditions aux limites :

Pour que $\Psi(x,t)$ soit normalisable, $\varphi_1(x)$ doit rester finie lorsque x tend vers $-\infty$, ce qui impose :

$$B_1 = 0$$

De même, $\varphi_3(x)$ doit rester finie lorsque x tend vers $+\infty$, ce qui impose :

$$A_3 = 0$$

De plus, la fonction d'onde doit être continue en $x = -a$ et $x = a$, ainsi que sa dérivée spatiale.

Ces conditions aux limites donnent 4 équations.

Pour que A_1, A_2, B_2 et B_3 ne soient pas nulles, on doit vérifier les conditions suivantes :

$$k_1 a = k_2 a \tan(k_2 a) \quad (1)$$

Ou :

$$k_1 a = -k_2 a \cotan(k_2 a) \quad (2)$$

avec

$$k_1^2 + k_2^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}$$

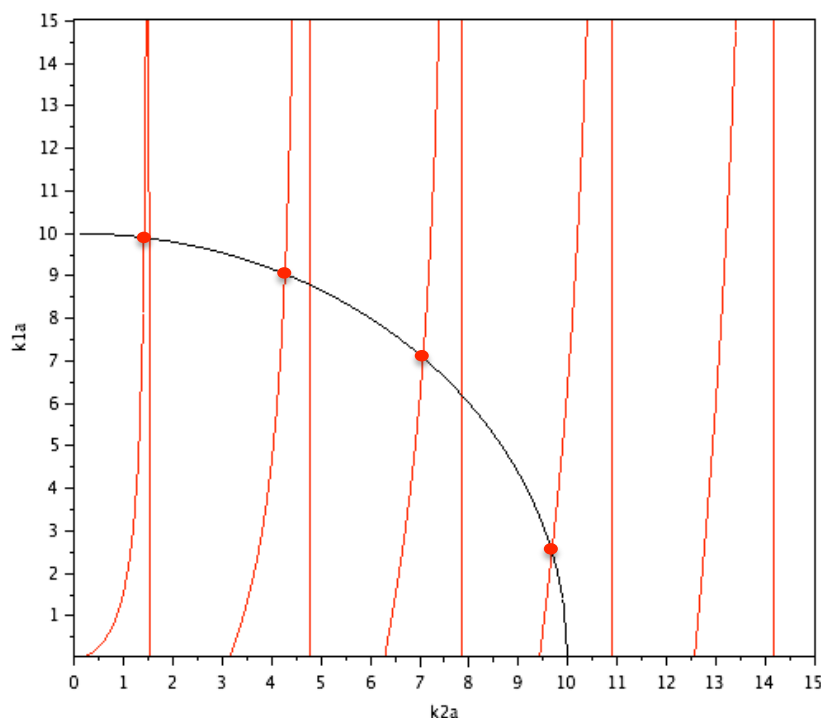
2.5. Résolution graphique : modes pairs et impairs :

a) Modes pairs :

On trace en fonction de $k_2 a$ (positive) les courbes :

- $k_2 a \tan(k_2 a)$
- $\sqrt{\left(\frac{2ma^2V_0}{\hbar^2}\right) - (k_2 a)^2}$

pour une valeur donnée de $\sqrt{\frac{2ma^2V_0}{\hbar^2}}$ (ici égale à 10).



Les solutions sont données par les intersections des deux courbes (points rouges, ici on obtient 4 valeurs).

On obtient des valeurs de l'énergie quantifiées, d'autant plus nombreuses que V_0 est élevé.

Il existe toujours au moins une valeur non nulle de l'énergie .

On montre dans ce cas que :

$$A_1 = B_3 ; A_2 = B_2$$

Soit :

$$\Psi(x) = \Psi(-x)$$

C'est pourquoi ces solutions constituent les modes pairs.

b) Modes impairs :

On trace en fonction de k_2a (positive) les courbes :

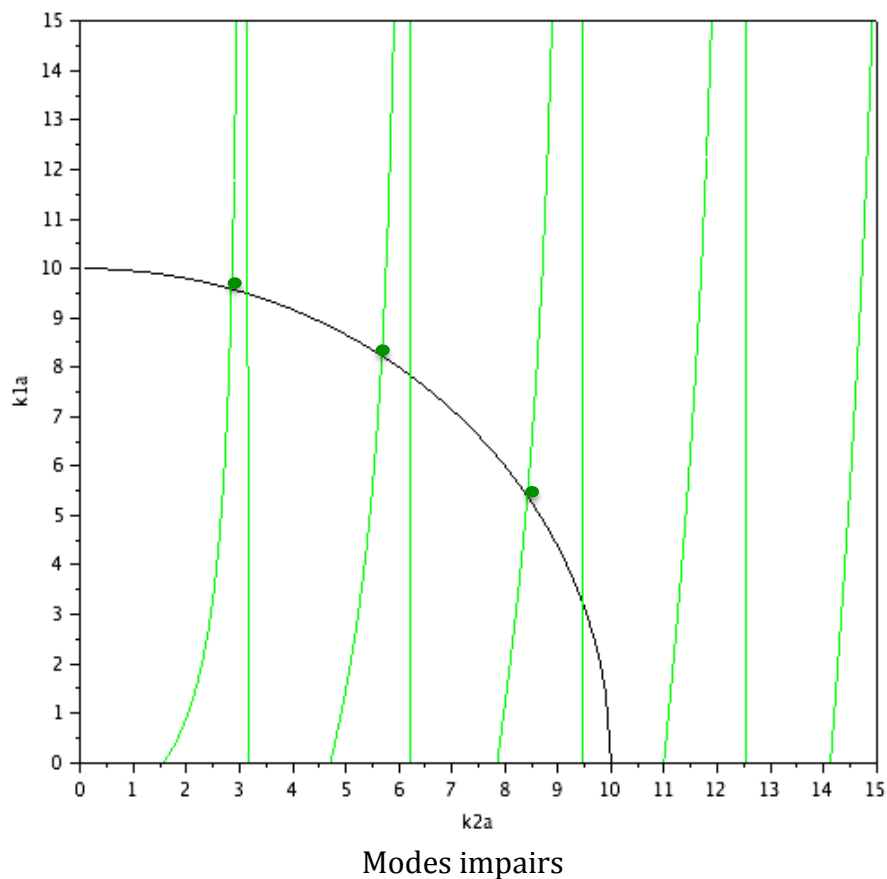
- $-k_2.a.\cotan(k_2a)$
- $\sqrt{\left(\frac{2ma^2V_0}{\hbar^2}\right) - (k_2a)^2}$

Le calcul montre que :

$$A_1 = -B_3 \text{ et } A_2 = -B_2$$

Soit :

$$\Psi(x) = -\Psi(-x)$$



Les solutions sont données par les intersections des deux courbes (points verts, ici on obtient 3 valeurs). Les solutions pour une valeur de V_0 donnée sont successivement paires et impaires.

2.6. Elargissement par les ondes évanescentes :

On a :

$$\varphi_1(x) = A_1 \cdot e^{k_1 x} ; \varphi_3(x) = \pm A_1 \cdot e^{-k_1 x}$$

Les ondes dans les régions 1 et 3 sont dites **évanescents**.

Contrairement au cas classique, la particule quantique peut exister dans les domaines 1 et 3.

La profondeur de pénétration est :

$$\delta = \frac{1}{k_1} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}$$

Cette profondeur de pénétration est d'autant plus grande que :

- E est proche de V_0 ;
- la particule a une masse faible.

2.7. Comparaison puits infini/puits fini :

Le puits infini correspond à k_1 infini, soit $\tan(k_2 a)$ ou $\cotan(k_2 a)$ infini, soit :

$$k_2 a = n\pi/2$$

$$\Leftrightarrow k_2(2a) = n\pi$$

On est donc les asymptotes verticales des graphiques précédents : on constate que les valeurs de k_2 sont plus élevées dans le cas du puits infini, donc que :

Les valeurs de l'énergie pour le puits de profondeur finie sont inférieures à celles du puits infini.

On peut interpréter ce résultat en remarquant que la particule dans le puits voit une largeur effective $2a + 2\delta$

Le puits étant plus large, les valeurs de l'énergie sont abaissées, en vertu de l'inégalité de Heisenberg.

