MÉCANIQUE QUANTIQUE

Corrigé des TRAVAUX DIRIGÉS Nos. 5 (Durée: 2* 1 h)

Particule dans un puits de profondeur finie

On considère une particule de masse m, de fonction d'onde $\psi(x)$ astreinte à se mouvoir dans un puits unidimensionnel de profondeur U_0, de largeur $2a$, situé entre $x = -a$ et $x = a$.

Ce puits de potentiel peut par exemple modéliser un plot quantique ou une nanostructure telle que celles utilisées à l'heure actuelle pour réaliser des lasers infrarouges accordables.

1. Rappeler l'équation de Schrödinger dépendant du temps en fonction du Hamiltonien H de la particule

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = H\Psi$$

2. En déduire l'équation à laquelle obéissent les fonctions propres de la particule d'énergie E

$$H\Psi = E\Psi$$

3. Que vaut H dans le cas ici considéré ?

$$H = T + V$$

avec V nul en dehors du puits et $V = -|U_0|$ dans le puits

4. Résoudre alors l'équation du 2. Donner en particulier les fonctions propres $\psi_n(x)$, et les vecteurs et énergies E_n correspondantes. Représenter graphiquement les niveaux E_n.

on a donc trois zones ($x < -a$, $-a < x < a$ et $a < x$) où les solutions sont respectivement

$$\psi_1(x) = A_1 e^{-\chi x} + B_1 e^{\chi x}$$

$$\psi_2(x) = \frac{A_2}{2}e^{-ikx} + \frac{B_2}{2}e^{ikx}$$
$$\psi_3(x) = A_3 e^{-\chi x} + B_3 e^{\chi x}$$

avec $\chi = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ *et* $k = \sqrt{\frac{2m(U_0-E)}{\hbar^2}}$ *(si $U_O < E$ cette fonction se transforme automatiquement en exponentielle réelle) et des coefficients arbitraires (les $1/2$ sont là pour faire apparaître des cosinus par la suite)*

Par les postulats de la mécanique quantique, les fonctions d'onde appartiennent à L^2. Elles sont donc continues, de même que leur dérivée, et de carré sommable sur l'intervalle $[-\infty, \infty]$.

Comme les fonctions sont de carré intégrable $A_1 = B_3 = 0$.

La continuité de la fonction d'onde ainsi que de leur dérivée donne en $x = -a$ (et par symétrie paire ou impaire en $x = a$, le potentiel étant pair les fonctions d'onde sont paires ou impaires pour que la densité de probabilité de présence soit paire), si l'on prend le cas où la fonction est paire et donc $A_2 = B_2$

$$B_1 e^{-\chi a} = A_2 \cos(-ka)$$
$$\chi B_1 e^{-\chi a} = -kA_2 \sin(-ka)$$

donc en divisant une équation par l'autre

$$\tan(ka) = \frac{\chi}{k}$$

On peut s'arrêter là (on n'en demande pas plus en fait) et c'est ce que font la plupart des ouvrages, en remarquant que cette équation est transcendante et qu'elle nécessite une résolution numérique ou graphique. Si l'on trace l'intersection du graphe de $\tan(xa)$ *et d'une hyperbole on voit bien que l'on a des niveaux quantifiés.*

Mais si comme Cohen-Tannoudji et al. nous développons en élevant au carré et en substituant les expressions de χ et k

$$\tan^2(ka) = \frac{E}{U_0 - E}$$

or $\tan^2(\theta) = \frac{1-\cos^2(\theta)}{\cos^2(\theta)} = \frac{1}{\cos^2(\theta)} - 1$ *donc on arrive à*

$$\cos^2(ka) = \frac{U_0 - E}{U_0}$$

si l'on revient à l'expression de k et que l'on introduit $R = \sqrt{\frac{2mU_0}{\hbar^2}}$ *à l'image des autres expressions on obtient*

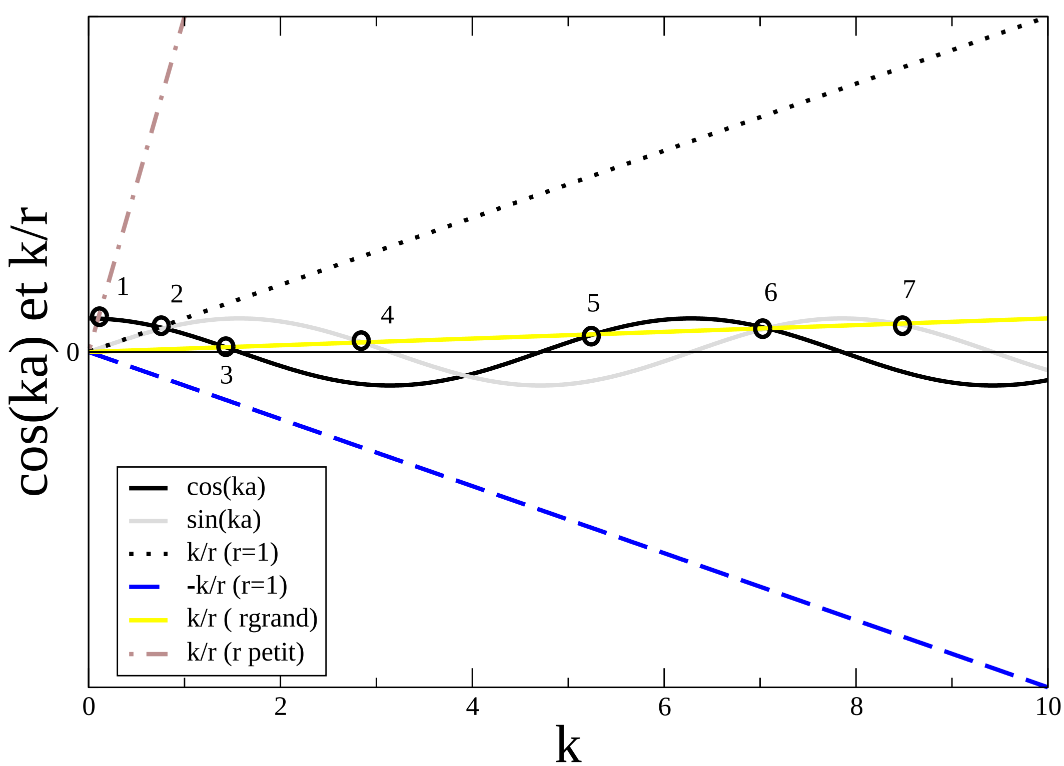
$$\cos^2(ka) = \frac{k^2}{R^2}$$

soit encore

$$\cos(ka) = \pm\frac{k}{R}$$

Si l'on considère le cas où la fonction d'onde est impaire, le cosinus est remplacé par un sinus avec des calculs similaires.

Sous cette forme élégante, on voit tout de suite que les niveaux sont donnés par l'intersection d'arcs de sinusoïde avec deux droites (±) passant par l'origine. Il y a donc au moins une solution quelle que soit la valeur de R et la profondeur du puits.



Solution graphique de l'équation pour $a = 1$ *unité. Pour R petit on n'a qu'une solution proche de l'origine (indiquée par le label 1), pour r grand on a de multiples solutions proches de* $n\frac{\pi}{2}$ *désignées par 3,4,5,6,7 avec intersections de* $\sin(ka)$ *comme de* $\cos(ka)$*, avec alternance des solutions paires et impaires. Le graphe de* $-k/r$ *n'a pas été dessiné dans ce cas mais on voit qu'il y aurait aussi des solutions.*

Dans le cas $r = 1$ *(label 2) il est difficile ici de trancher graphiquement et il faudrait une solution numérique.*

5. Quel est le nombre d'états de la particule dans le spectre discontinu suivant la profondeur du puits ?

   sur le graphe précédent, on voit que si le puits est peu profond (R petit soit U_0 *petit face à* $\frac{\hbar^2}{2m}$ *) on n'a qu'une solution proche de* $k = 0$*, mais qui existe toujours : il y a au moins un état de la particule piégé dans le puits quelle que soit sa profondeur. Sinon, le nombre d'états liés va croissant avec la profondeur du puits : si la droite* $y = k/r$ *se rapproche de l'axe des abscisses elle intersecte les graphes des sinus et cosinus de plus en plus souvent.*

6. Réexprimer les niveaux dans le cas où $U_0 \gg \hbar^2/ma^2$ et comparer au cas du puits infiniment profond

   On voit que dans ce cas la droite $y = k/r$ *se rapproche de l'axe des abscisses, et donc les solutions de* $ka = \frac{n\pi}{2}$ *avec n entier. On retrouve le cas du puits infiniment profond (de largeur* $2a$ *ici).*

7. Inversement, dans le cas $U_0 \ll \hbar^2/ma^2$, montrer qu'il existe un niveau lié. Fournir une expression approchée de l'énergie et de la fonction d'onde normée de cet état. Calculer les valeurs moyennes des énergies potentielles et cinétiques.

   Nous avons montré plus haut qu'il existait toujours un niveau lié. Dans ce cas la solution est paire, et obtenue pour ka petit. On peut donc faire un développement limité de l'équation

$$\tan(ka) = \frac{\chi}{k}$$

   soit

$$ka = \frac{\chi}{k}$$

   et après résolution avec les expressions de χ *et de k et compte tenu de* $U_0 \ll \hbar^2/ma^2$ *, on trouve après résolution de l'équation du second degré et développement limité*

$$E = -U_0$$

par conséquent comme la fonction d'onde de la particule dans le puits vaut

$$\psi = \frac{A_2}{2}\cos(kx)$$

elle est quasi-constante (k est proche et hors du puits elle vaut

$$\psi = Be^{-\chi|x|}$$

(car cette solution est paire). Dans le puits on peut donc considérer que la fonction d'onde est constante et a pour valeur celle obtenue en $x = a$.
Comme

$$< \psi|\psi >= \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$$

on obtient

$$\int_{-\infty}^{+\infty} B^2 e^{-2\chi|x|} \approx 1$$

et en développant l'intégrale de 0 à ∞ on trouve

$$B^2 = \sqrt{\frac{2m|U_0|}{\hbar^2}}$$

Pour la valeur moyenne de l'énergie cinétique

$$< T >= \frac{< \psi|T|\psi >}{< \psi|\psi >}$$

comme la fonction d'onde est normée, que $T = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ en représentation x il vient (la fonction d'onde étant symétrique)

$$< T >= 2\int_0^{+\infty} dx Be^{-\chi x} \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} Be^{-\chi x}$$

$$< T >= |U_0|$$

et pour l'énergie potentielle

$$< V >= \frac{< \psi|V|\psi >}{< \psi|\psi >}$$

Comme V est non nul pour $|x| < a$ uniquement il vient immédiatement

$$< V >= \int_a^a dx Be^{-\chi a}(-U_0)Be^{-\chi a}$$

$$< V >= 2a\chi e^{-2\chi a}(-U_0)$$

or χa étant petit, le développement limité donne

$$< V >= -2|U_0|$$

et on retrouve un théorème de cinétique physique qui dit que dans les cas simples la valeur moyenne de l'énergie potentielle vaut deux fois celle de l'énergie cinétique pour un système lié (exemple : atome d'hydrogène).

8. Dans ce dernier cas (puits peu profond), déterminer la probabilité de présence de la particule au fond du puits. Vérifier la relation d'incertitude de Heisenberg.

   La probabilité de présence dans le puits vaut

$$P = \frac{\int_a^a |\psi(x)|^2 dx}{\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx}$$

   car la densité de probabilité de présence est le carré de la norme de la fonction d'onde, cette fonction n'étant pas normalisée ici.

   on trouve d'après la fin de la question précédente (sur $< V >$)

$$P = 2\chi a$$

   qui est très faible par hypothèse.

   Dans le cas des faibles énergies on viole donc fortement l'intuition obtenue en physique classique qui nous dirait qu'une particule reste dans un puits de potentiel, même petit.

   En représentation d'impulsion (suivant p)

$$\Phi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) e^{-\frac{ipx}{\hbar}} dx \approx \frac{\sqrt{2\chi^3\hbar^3}}{\sqrt{\pi}(p^2 + \hbar^2\chi^2)}$$

soit

$< p >= 0$ *et* $< \Delta p^2 >=< p^2 >= (\chi\hbar)^2$ *donc*

$$< \Delta x^2 >< \Delta p^2 >= \hbar^2/2$$