Équation de Schrödinger dans un potentiel uniforme par morceaux

PC Lycée Dupuy de Lôme

Forme générale des solutions

- Dans chaque domaine où le potentiel est uniforme (et indépendant du temps), on recherche des solutions stationnaires

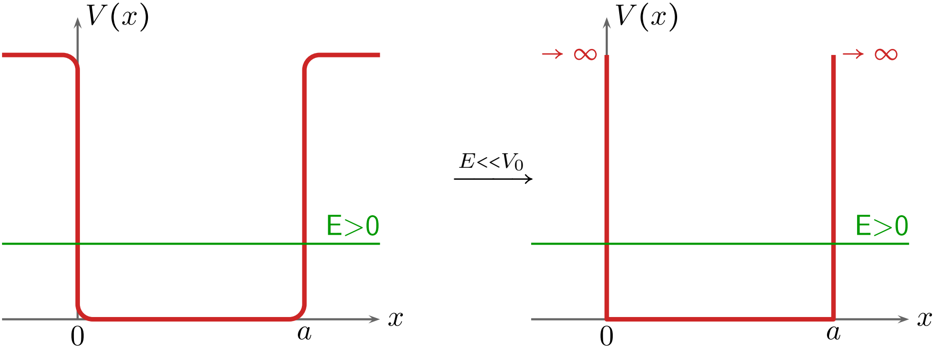
$$\Psi(x,t) = \varphi(x).e^{-i.\frac{E.t}{\hbar}}$$

- On doit vérifier en tout point la continuité de la fonction d'onde ainsi que de sa dérivée spatiale.

Équation de Schrödinger pour un état stationnaire

$\varphi(x)$ devant vérifier l'équation de Schrödinger, il en résulte

✍ $$-\frac{\hbar^2}{2.m}.\frac{\partial^2\varphi(x)}{\partial x^2} + V(x).\varphi(x) = E.\varphi(x)$$



Régions interdites

Dans les régions de l'espace où le potentiel est infini, la probabilité de présence de la particule quantique est nulle.

✍ $$\varphi\left(|x|\right) \geqslant a = 0$$

- Proposer la forme générale pour $\varphi(x)$
- Exploiter les CAL
- En déduire les modes possibles
- Normaliser la fonction d'onde

Fonction d'onde pour un puits infini

✍ $$\Psi(|x| < a = \sqrt{\frac{2}{a}}.e^{-i.\frac{E_n}{\hbar}t}.sin\frac{n.\pi.x}{a} \quad \texttt{avec} \quad E_n = n^2.\frac{\pi^2.\hbar^2}{2.m.a^2}$$

L'énergie dans un puits de potentiel infini est donc quantifiée.

- Proposer la forme générale pour $\varphi(x)$ $\varphi = A.coskx + B.sinkx$
- Exploiter les CAL $\varphi(0) = \varphi(a) = 0$
- En déduire les modes possibles $k_n = n.\dfrac{\pi}{a}$
- Normaliser la fonction d'onde $\int_0^a |\varphi|^2 .dx = 1$

Fonction d'onde pour un puits infini

$$\Psi(|x| < a = \sqrt{\frac{2}{a}}.e^{-i.\frac{E_n}{\hbar}t}.sin\frac{n.\pi.x}{a} \quad \textbf{avec} \quad E_n = n^2.\frac{\pi^2.\hbar^2}{2.m.a^2}$$

L'énergie dans un puits de potentiel infini est donc quantifiée.

Similitudes...

- Les CAL imposent une quantification des nombres d'onde
- Il existe des nœuds où la densité de probabilité de présence sera nulle
- On peut voir la solution comme une superposition d'ondes planes se propageant dans les deux sens opposés

... et différences

- Les énergies possibles de la particule quantique sont quantifiées, ce n'est pas le cas pour la corde

Au vu de l'étude précédente, les modes associés à une particule sont tels que $E_n = n^2.\dfrac{\pi^2.\hbar^2}{2.m.a^2}$

Énergie minimale

Le mode fondamental correspond au niveau d'énergie minimum pour une particule quantique dans un puits infini de potentiel.

✍ $$E_{min} = \frac{\pi^2.\hbar^2}{2.m.a^2}$$

- $\Psi_n(x,t)$ peut être décrite comme l'association de 2 OPPH se propageant
- Ces deux ondes correspondent à des $q^{té}$ de mouvement $\overrightarrow{p_n}$ et
- Pour un mode n, $\langle p_x \rangle$ =
- On a alors Δp_x =
- Selon l'inégalité d'Heisenberg, comme Δx = , $\Delta p_x \geqslant$
- Alors $E_{c,min} \geqslant$

Énergie minimale dans un puits de potentiel infini

D'après l'inégalité d'Heisenberg, toute particule quantique placée dans un puits de potentiel infini aura une énergie minimale

$$E_{min} = \frac{\hbar^2}{2.m.a^2}$$

- $\Psi_n(x,t)$ peut être décrite comme l'association de 2 OPPH se propageant en sens opposé
- Ces deux ondes correspondent à des $q^{té}$ de mouvement $\overrightarrow{p_n}$ et $-\overrightarrow{p_n}$
- Pour un mode n, $\langle p_x \rangle = 0$
- On a alors $\Delta p_x = \sqrt{\left|\langle p_x^2 \rangle - \langle p_x \rangle^2\right|} = \sqrt{\langle p_x^2 \rangle}$
- Selon l'inégalité d'Heisenberg, comme $\Delta x = \frac{a}{2}$, $\Delta p_x \geqslant \frac{\hbar}{a}$
- Alors $E_{c,min} \geqslant \frac{\hbar^2}{2.m.a^2}$

Énergie minimale dans un puits de potentiel infini

D'après l'inégalité d'Heisenberg, toute particule quantique placée dans un puits de potentiel infini aura une énergie minimale

$$E_{min} = \frac{\hbar^2}{2.m.a^2}$$

- Un mode propre est caractérisé par sa fonction d'onde

$$\Psi(x,t) = \sqrt{\frac{2}{a}}.sin\frac{n.\pi.x}{a}.e^{-i.E_n.t/\hbar}$$

- A ce mode correspond une densité de probabilité de présence

$$P_n(x) = \frac{2}{a}.sin^2\frac{n.\pi.x}{a}$$

Propriétés

- La densité de probabilité de présence est indépendante du temps pour un mode propre
- La densité de probabilité de présence a les symétries du potentiel $V(x)$

Les symétries du potentiel entrainent par conséquent des propriétés de symétrie ou antisymétrie pour la fonction d'onde propre.

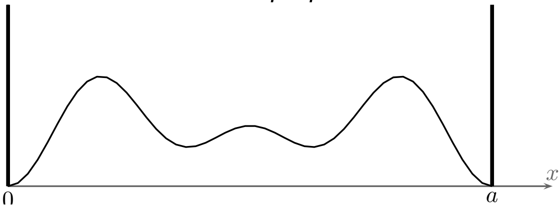
Superposition d'états stationnaires

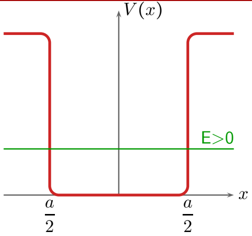
La solution générale peut être décrite comme une superposition des états stationnaires

$$\Psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n.\varphi_n(x).e^{-i.E_n.t/\hbar} \quad \textbf{avec} \quad \sum_{n=1}^{\infty} c_n^2 = 1$$

On peut alors obtenir une évolution non stationnaire.

Superposition des modes 1 et 3





$\xrightarrow{E<<V_0}$

États stationnaires - forme générale de la solution

- On recherche les états stationnaires pour lesquels la fonction d'onde prendra la forme

$$\Psi(x,t) = \varphi(x).e^{-i.\frac{E.t}{\hbar}}$$

- $\varphi(x)$ devant vérifier l'équation de Schrödinger, il en résulte

$$\frac{\partial^2\varphi(x)}{\partial x^2} + \frac{2.m}{\hbar^2}\left[E - V(x)\right].\varphi(x) = 0$$

- $\varphi(x)$ et $\dfrac{d\varphi(x)}{dx}$ doivent être continues en tout point.

$$E > V_0 : \quad \frac{\partial^2 \varphi(x)}{\partial x^2} + \frac{2.m.\left[E - V_0\right]}{\hbar^2}.\varphi(x) = 0$$

- On définit $k_1 = \dfrac{\sqrt{2.m.(E - V_0)}}{\hbar}$
- La forme générale de la solution est
- On en déduit les formes des solutions dans les deux parties

Solutions progressives

Hors d'un puits de potentiel fini au niveau duquel se trouve le quanton d'énergie $E > V_0$, les solutions de la fonction d'onde propre sont des solutions progressives

$$\Psi(x,t) = A.e^{i.\left(\pm k_1.x - \frac{E.t}{\hbar}\right)}$$

La particule est donc libre de quitter le puits de potentiel. Elle se trouve dans un état de diffusion.

$$E > V_0 : \quad \frac{\partial^2 \varphi(x)}{\partial x^2} + \frac{2.m.\left[E - V_0\right]}{\hbar^2}.\varphi(x) = 0$$

- On définit $k_1 = \dfrac{\sqrt{2.m.\left(E - V_0\right)}}{\hbar}$
- La forme générale de la solution est $\varphi(x) = C_1.e^{i.k_1.x} + C_2.e^{-i.k_1.x}$
- On en déduit les formes des solutions dans les deux parties

Solutions progressives

Hors d'un puits de potentiel fini au niveau duquel se trouve le quanton d'énergie $E > V_0$, les solutions de la fonction d'onde propre sont des solutions progressives

$$\Psi\left(x,t\right) = A.e^{i.\left(\pm k_1.x - \frac{E.t}{\hbar}\right)}$$

La particule est donc libre de quitter le puits de potentiel. Elle se trouve dans un état de diffusion.

$$E < V_0 : \quad \frac{\partial^2 \varphi(x)}{\partial x^2} - \frac{2.m.\left[V_0 - E\right]}{\hbar^2}.\varphi(x) = 0$$

- On définit $K = \dfrac{\sqrt{2.m.\left(V_0 - E\right)}}{\hbar}$
- La forme générale de la solution est
- Physiquement la fonction d'onde ne peut pas tendre vers
- On en déduit les formes des solutions dans les deux parties

Solutions évanescentes

Hors d'un puits de potentiel fini au niveau duquel se trouve le quanton d'énergie $E < V_0$, les solutions de la fonction d'onde propre sont des solutions évanescentes

✍ $$\varphi\left(x \leqslant \frac{-a}{2}\right) = A.e^{K.x} \qquad \varphi\left(x \geqslant \frac{a}{2}\right) = B.e^{-K.x}$$

La particule ne peut donc pas quitter le puits de potentiel. Elle se trouve dans un état lié.

$$E < V_0 : \quad \frac{\partial^2 \varphi(x)}{\partial x^2} - \frac{2.m.\left[V_0 - E\right]}{\hbar^2}.\varphi(x) = 0$$

- On définit $K = \dfrac{\sqrt{2.m.(V_0 - E)}}{\hbar}$
- La forme générale de la solution est $\varphi(x) = C_1.e^{K.x} + C_2.e^{-K.x}$
- Physiquement la fonction d'onde ne peut pas tendre vers l'infini
- On en déduit les formes des solutions dans les deux parties

Solutions évanescentes

Hors d'un puits de potentiel fini au niveau duquel se trouve le quanton d'énergie $E < V_0$, les solutions de la fonction d'onde propre sont des solutions évanescentes

✍ $$\varphi\left(x \leqslant \frac{-a}{2}\right) = A.e^{K.x} \qquad \varphi\left(x \geqslant \frac{a}{2}\right) = B.e^{-K.x}$$

La particule ne peut donc pas quitter le puits de potentiel. Elle se trouve dans un état lié.

$$\frac{\partial^2 \varphi(x)}{\partial x^2} + \frac{2.m.E}{\hbar^2}.\varphi(x) = 0$$

Seules les conditions aux limites diffèrent du puits infini. La forme générale de la solution est identique.

Solutions dans le puits

Dans un puits de potentiel fini dans lequel est lié le quanton, les solutions de la fonction d'onde propre sont du type

✍ $$\varphi\left(x \leqslant \frac{-a}{2}\right) = C.cos\left(k.x\right) + D.sin\left(k.x\right) \qquad \texttt{avec} \quad k = \frac{\sqrt{2.m.E}}{\hbar}$$

Continuité

On exploite la continuité de $\phi(x)$ et $\dfrac{d\varphi}{dx}$ en $x = \pm\dfrac{a}{2}$

On arrive alors au système d'équations suivants :

Continuité de $\varphi(x)$

Continuité de $\dfrac{d\varphi}{dx}$

Continuité

On exploite la continuité de $\phi(x)$ et $\dfrac{d\varphi}{dx}$ en $x = \pm\dfrac{a}{2}$

On arrive alors au système d'équations suivants :

Continuité de $\varphi(x)$

$$A.e^{\frac{-K.a}{2}} = C.cos\left(\frac{k.a}{2}\right) - D.sin\left(\frac{k.a}{2}\right)$$
$$B.e^{\frac{-K.a}{2}} = C.cos\left(\frac{k.a}{2}\right) + D.sin\left(\frac{k.a}{2}\right)$$

Continuité de $\dfrac{d\varphi}{dx}$

$$A.K.e^{\frac{-K.a}{2}} = C.k.sin\left(\frac{k.a}{2}\right) + D.k.cos\left(\frac{k.a}{2}\right)$$
$$B.K.e^{\frac{-K.a}{2}} = C.k.sin\left(\frac{k.a}{2}\right) - D.k.cos\left(\frac{k.a}{2}\right)$$

Symétrie du potentiel

La symétrie de la cause engendre la symétrie des effets.
La densité de probabilité de présence $|\varphi(x)|^2$ doit donc être une fonction symétrique
$\varphi(x)$ est donc nécessairement une fonction paire ou impaire.

Modes symétriques

- Ils correspondent à $A =$ et $0 =$
- La résolution donne $\dfrac{K.a}{2} = \dfrac{k.a}{2}.tan\left(\dfrac{k.a}{2}\right)$

Modes antisymétriques

- Ils correspondent à $A =$ et $0 =$
- La résolution donne $\dfrac{K.a}{2} = -\dfrac{k.a}{2}.\dfrac{1}{tan\left(\dfrac{k.a}{2}\right)}$

Symétrie du potentiel

La symétrie de la cause engendre la symétrie des effets.
La densité de probabilité de présence $|\varphi(x)|^2$ doit donc être une fonction symétrique
$\varphi(x)$ est donc nécessairement une fonction paire ou impaire.

Modes symétriques

- Ils correspondent à $A = B$ et $0 = D$
- La résolution donne $\dfrac{K.a}{2} = \dfrac{k.a}{2}.tan\left(\dfrac{k.a}{2}\right)$

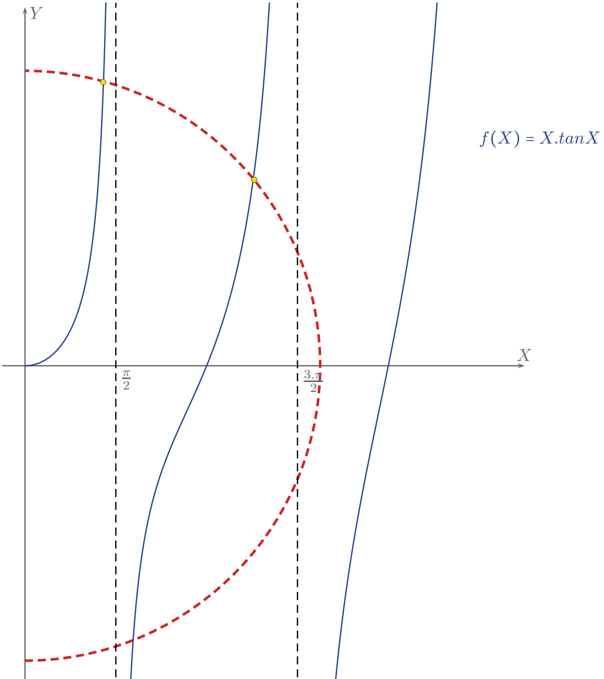
Modes antisymétriques

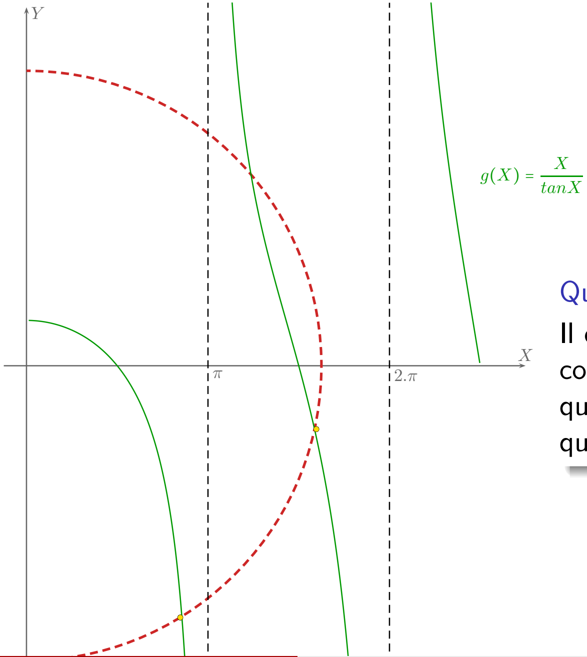
- Ils correspondent à $A = -B$ et $0 = C$
- La résolution donne $\dfrac{K.a}{2} = -\dfrac{k.a}{2}.\dfrac{1}{tan\left(\dfrac{k.a}{2}\right)}$

- On pose $X = \dfrac{k.a}{2}$ et $Y = \dfrac{K.a}{2}$
- $k = \dfrac{\sqrt{2.m.E}}{\hbar}$ et $K = \dfrac{\sqrt{2.m.(V_0 - E)}}{\hbar}$ donc $x^2 + y^2 = \dfrac{L^2.m.V_0}{2.\hbar^2} = R^2$
- Mode symétrique : $Y = f(X) = X.tan(X)$
- Mode antisymétrique : $Y = -g(X) = -\dfrac{X}{tan(X)}$

Résolution graphique

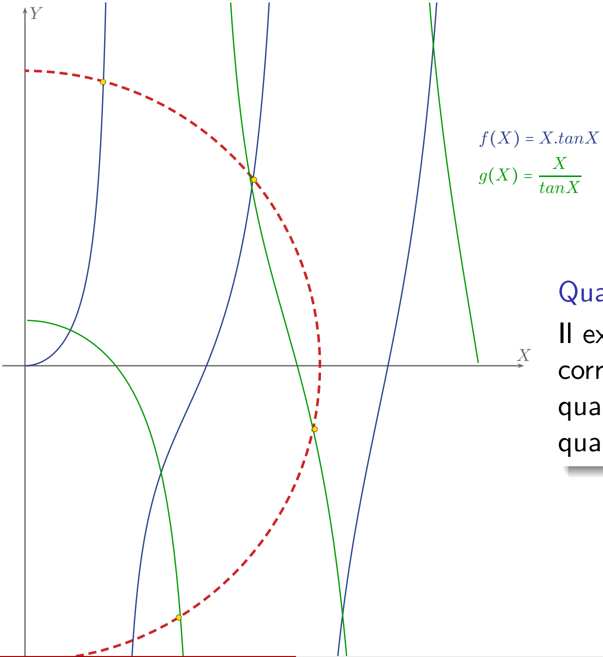
La recherche des modes se fera par résolution graphique. On recherchera l'intersection du cercle de rayon R avec la fonction $f(X) > 0$ pour les modes symétriques ou avec la fonction $g(X) < 0$ pour les modes antisymétriques.


Y
X
π/2
3.π/2
f(X) = X.tanX



Quantification

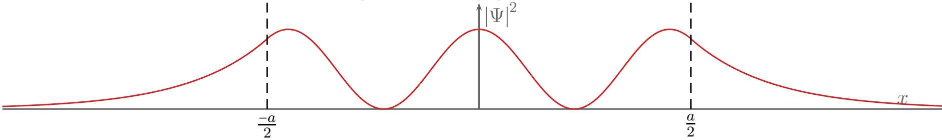
Il existe dans ce cas 4 modes correspondant à 4 valeurs quantifiées de l'énergie du quanton.



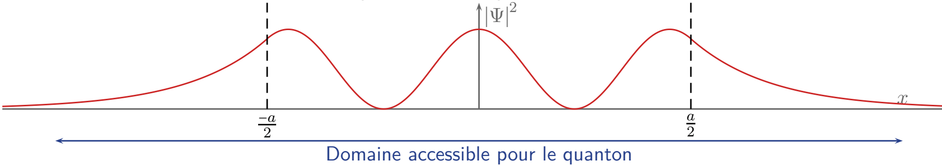
Quantification

Il existe dans ce cas 4 modes correspondant à 4 valeurs quantifiées de l'énergie du quanton.

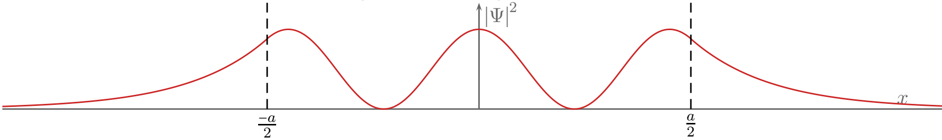
On observe le premier mode (symétrique)



On observe le premier mode (symétrique)



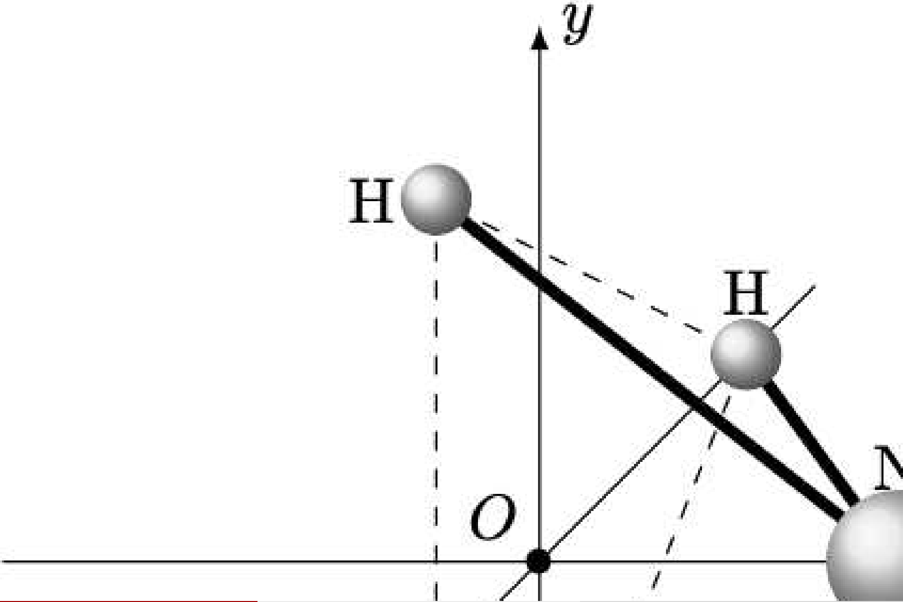
On observe le premier mode (symétrique)

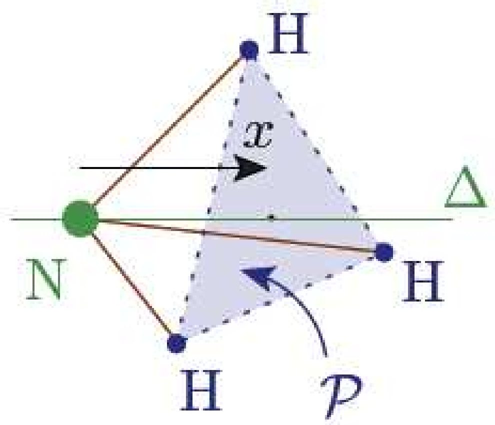


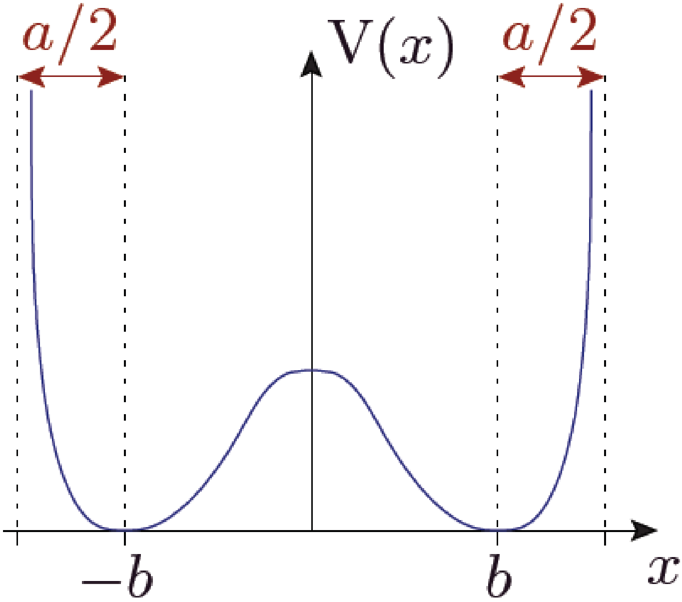
- Par analogie avec le raisonnement tenu pour le puits infini, on aura toujours
$$E_{c,min} = \frac{\Delta p^2}{2.m} \text{ et } \Delta p \geqslant \frac{\hbar}{\Delta x}$$
- Ici l'incertitude sur la position est supérieure à la largeur du puits

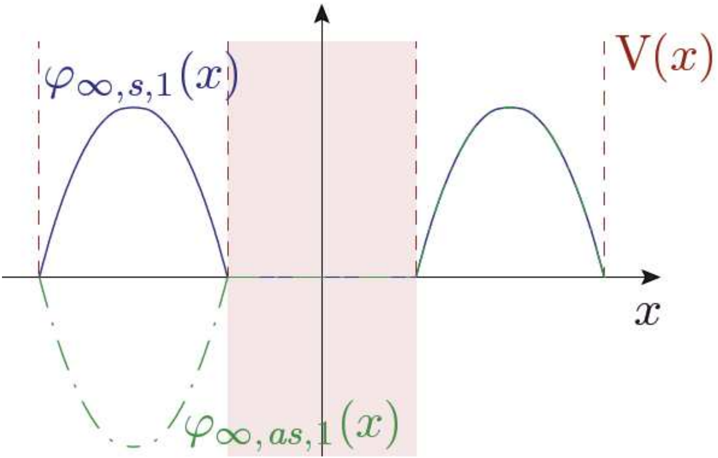
Abaissement de l'énergie minimale

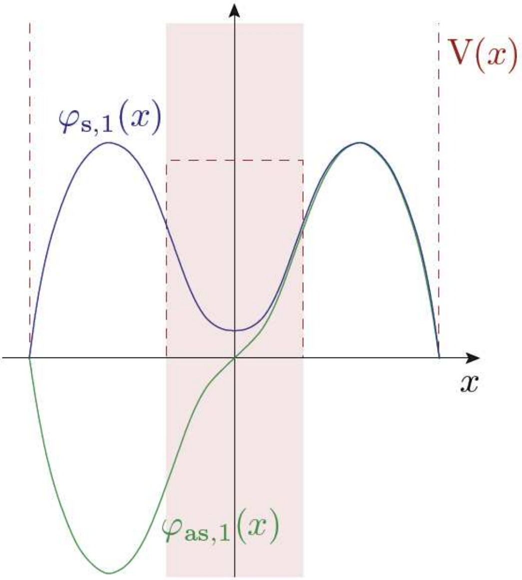
Le niveau d'énergie minimal d'un quanton dans un puits de potentiel fini sera inférieur à celui du même quanton dans un puits de même largeur mais de potentiel infini. Il en sera de même pour les niveaux excités.


y
H
H
O
N


H
x
Δ
N
H
H
$\mathcal{P}$


a/2
V(x)
a/2
−b
b
x


$\varphi_{\infty,s,1}(x)$
$V(x)$
x
$\varphi_{\infty,as,1}(x)$



$V(x)$
$\varphi_{s,1}(x)$
$\varphi_{as,1}(x)$
x