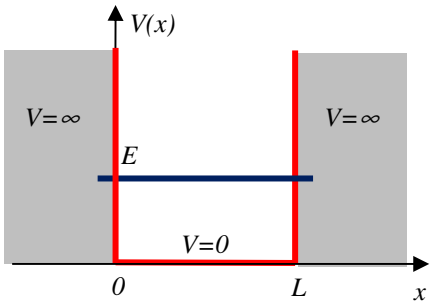
Puits de potentiel

Les questions sont liées les unes aux autres

Particule dans un puits de potentiel infini – Exercice n°1

On considère une particule libre de se déplacer entre deux plans d'équations $x = 0$ et $x = L$ mais confinée entre ces deux plans : sa fonction d'onde est nulle en dehors de ce domaine.
On a donc :

$$\psi(x \le 0, t) = 0 \quad \text{et} \quad \psi(x \ge L, t) = 0 .$$



Dans la suite on cherche des ***solutions stationnaires*** vérifiant ces conditions aux limites à tout instant et on cherche à mettre en évidence la ***quantification de l'énergie***.

1.1. Justifier que la particule est nécessairement dans le puits compte tenu de la modélisation du puits.

1.2. Rappeler la forme des solutions stationnaires pour la fonction d'onde ψ.

1.3. Exprimer les conditions aux limites sur φ à partir des conditions aux limites fournies pour ψ.

1.4. Rappeler l'équation de Schrödinger pour la partie spatiale dans un état stationnaire.

1.5. En raisonnant sur les formes des solutions de cette équation, montrer que E est nécessairement positive (i.e. solutions identiquement nulles pour $E \le 0$) (cf. discussion analogue pour les ondes stationnaires). On posera $k = \sqrt{\dfrac{2m|E|}{\hbar^2}}$.

1.6. En déduire la forme de $\varphi(x)$ sans chercher à déterminer la constante.

1.7. À l'aide des conditions aux limites, montrer que k est quantifié ; interpréter en introduisant la longueur d'onde de de Broglie.

1.8. Montrer que l'énergie est quantifiée et donner l'expression de E_n. Commenter.

1.9. Pour quelle raison peut-on écrire $\Delta x \approx L$?
Retrouver alors l'ordre de grandeur de E_n en utilisant l'inégalité de Heisenberg (vérifier que les dépendances en L et m sont bien les mêmes).

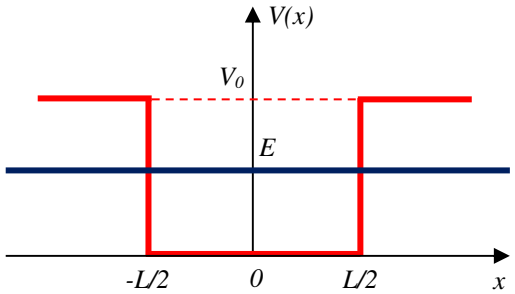
1.10. Ordres de grandeur : calculer E_2-E_1 pour un électron confiné dans un atome et pour une bille de 10 g confinée dans une boîte de 1 cm de côté.

1.11. Déduire $\psi(x, t)$ de 1.6 et 1.7 et écrire l'équation qui permet de déterminer la constante.

Particule dans un puits de potentiel fini – Exercice n°2

On considère une particule dans un puits de potentiel « carré » de largeur L de profondeur finie V_0 pour lequel le potentiel est défini par morceaux :

- domaine 1 : $V(x < -L/2) = V_0$;
- domaine 2 : $V(-L/2 < x < L/2) = 0$;
- domaine 3 : $V(x > L/2) = V_0$.



On recherche les ***états stationnaires liés*** tels que : $0 < E < V_0$ et on cherche à mettre en évidence la ***quantification de l'énergie***.

2.1. Rappeler l'équation de Schrödinger pour la partie spatiale dans un état stationnaire.

2.2. Donner la forme des solutions de l'équation de Schrödinger dans les domaines 1 et 3 sans chercher à déterminer les constantes d'intégration (notées A_i et B_i dans le domaine i) mais en tenant compte du fait que ces solutions ne doivent pas diverger lorsque $x \to \infty$ ou lorsque $x \to -\infty$. On posera $\alpha = \sqrt{\dfrac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$.

2.3. Donner la forme des solutions dans le domaine 2 sans chercher à déterminer les constantes d'intégration. On posera $k = \sqrt{\dfrac{2mE}{\hbar^2}}$.

2.4. Solutions ***paires***
On recherche des ***solutions paires***.

2.4.1. En déduire que deux constantes d'intégration sont égales et qu'une autre est nulle dans les solutions précédentes puis utiliser la continuité de $\varphi(x)$ et $d\varphi/dx$ pour obtenir un système linéaire homogène de deux équations à deux inconnues (les constantes restant à déterminer).

L'intérêt du système obtenu ne réside pas dans la détermination des constantes mais dans le fait que les conditions d'existence de ces solutions imposent une relation de quantification à k et donc à E.

2.4.2. En déduire que $\alpha = k \tan\left(\dfrac{kL}{2}\right)$ (1)

2.4.3. En utilisant les expressions de α et k ci-dessus, vérifier que :

$$\alpha^2 + k^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} \quad (2)$$

2.4.4. Éliminer α dans (1) en utilisant (2) et montrer que $\left|\cos\left(\frac{kL}{2}\right)\right| = k\sqrt{\frac{\hbar^2}{2mV_0}}$.

2.4.5. Montrer que les valeurs de k s'obtiennent à l'intersection des graphes de deux fonctions à préciser (représenter l'allure de ces graphes).

2.4.6. Cependant l'équation (1) impose que les valeurs de kL soient comprises dans certains intervalles car $\alpha > 0$. Placer sur le graphe les solutions permises.

2.4.7. Justifier que ce graphe impose bien une quantification de l'énergie pour les solutions paires de l'équation de Schrödinger.

2.5. Solutions ***impaires***

On recherche des ***solutions impaires***.

2.5.1. Mener un travail analogue pour les solutions impaires et conclure en traçant le graphe complet (solutions paires et impaires).

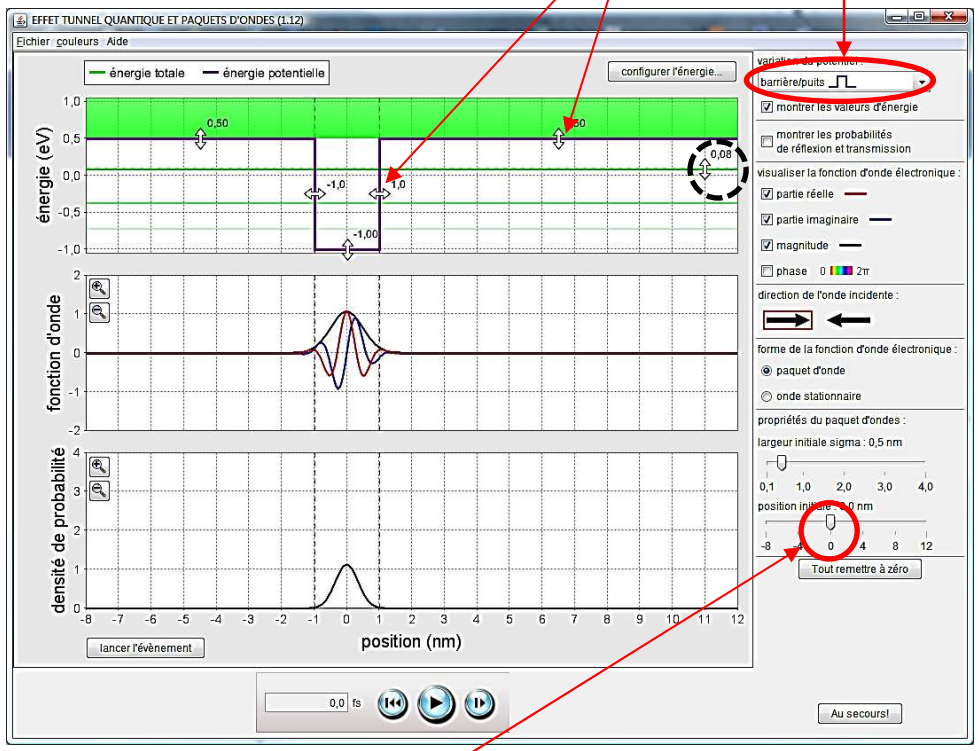
2.6. Comparaison avec le puits infini.

Comparer les expressions obtenues pour le puits fini et le puits infini, k_n et $k_{n\infty}$ puis E_n et $E_{n\infty}$. Interpréter en termes d'énergie de confinement (cf. 1.7).

Exercice n°3 – Simulations https://phet.colorado.edu/fr/simulation/legacy/quantum-tunneling

Réglages

Choisir un potentiel barrière/puits et utiliser les curseurs de façon à créer un puits symétrique autour de l'abscisse 0.



Placer le paquet d'onde à l'abscisse 0.

3.1. Observer l'évolution des niveaux d'énergie en fonction de la largeur du puits (applet sur pause : on observe seulement le graphe de l'énergie en haut).

3.2. Observer l'évolution des niveaux d'énergie lorsque le puits n'est plus symétrique (abaissement du potentiel à droite par exemple, applet en pause).

Complément

3.3. Placer le curseur correspondant à l'énergie du système sur le niveau d'énergie le plus bas (curseur le plus à droite, ellipse en pointillés sur la copie d'écran ci-dessus) et observer l'évolution du paquet d'onde (applet sur marche).
Comment le paquet d'onde évolue-t-il si on augmente son énergie ?