

Travaux Dirigés de Physique quantique Texte 2 – ETATS LIES

I - Puits de potentiel infiniment profond à trois dimensions : (1heure)

1. Rappeler l'expression des fonctions d'onde $\Phi_n(x)$ et des énergies E_n des états stationnaires d'une particule de masse m piégée dans un puits de potentiel infiniment profond unidimensionnel de largeur L .
2. En déduire l'expression des fonctions d'onde $\Phi_{n_1, n_2, n_3}(x, y, z)$ et des énergies E_{n_1, n_2, n_3} des états stationnaires de cette particule dans un puits de potentiel cubique infiniment profond tridimensionnel de largeur L . Faire la liste des 5 niveaux de plus basse énergie. Donnez la dégénérescence de chacun de ces niveaux ainsi que les nombres quantiques n_1 , n_2 et n_3 correspondants.
3. Ordres de grandeur : Calculer l'énergie des deux niveaux les plus bas dans les deux cas suivants :
 - Cas d'un électron ($m=9.1 \times 10^{-31} \text{kg}$) piégé dans une nanoparticule de côté $L=5 \text{nm}$.
 - Cas d'un électron piégé par une lacune anionique dans un cristal de NaCl . La largeur du puits est dans ce cas de l'ordre du paramètre de maille du cristal de NaCl : $L=0.564 \text{nm}$.
4. La boîte quantique précédemment décrite subit légère déformation qui affecte très peu son volume mais lui donne les dimensions $L_x=L_y=L(1+\varepsilon)$, $L_z=L(1-2\varepsilon)$ avec $\varepsilon \ll 1$. Décrire comment évoluent les niveaux d'énergie calculés à la question 2. Que devient la dégénérescence de ces niveaux ?

II – Modèle de la molécule HCl : (1heure)

A l'état électronique fondamental de la molécule HCl , l'énergie potentielle d'interaction entre les noyaux des atomes d'hydrogène et de chlore est représenté sur la figure 1a, où V_0 désigne l'énergie de liaison de la molécule. L'atome de chlore est supposé immobile à l'origine, sa masse étant bien supérieure à la masse m de l'atome d'hydrogène.

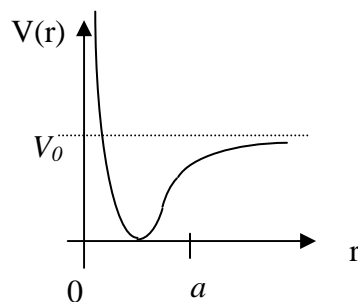


Figure 1a

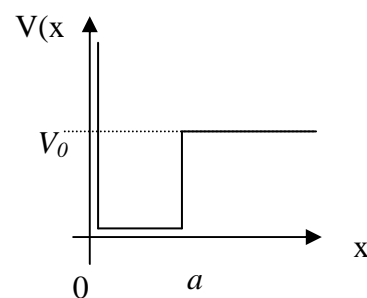


Figure 1b

Une approximation grossière consiste à modéliser cette énergie potentielle par le modèle unidimensionnel de potentiel discontinu constant par morceaux représenté sur la figure 2b, où a désigne la portée de l'interaction. C'est dans cette approximation, où l'énergie potentielle de l'atome d'hydrogène est donnée par

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x < 0 \\ 0 & 0 < x < a, \\ V_0 & x > a \end{cases}$$

que vont être étudiées les énergies de vibration de la molécule HCl .

1. Ecrire l'équation de Schrödinger pour les états stationnaires d'énergie $0 < E < V_0$ à laquelle satisfait la fonction d'onde $\Phi(x)$ dans les différentes régions de l'espace en fonction de $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$ et $K = \sqrt{2m(V_0 - E)/\hbar^2}$.
2. Etablir une relation entre $X = ka$, $Y = Ka$ et $R = a\sqrt{2mV_0/\hbar^2}$ (relation 1).
3. En déduire l'expression générale de la fonction d'onde dans les 3 régions de l'espace.
4. Ecrire les conditions satisfaites par la fonction d'onde en $x=0$ et $x \rightarrow \infty$, puis en $x=a$. En déduire l'expression de $\Phi(x)$ en fonction de k , K , a et d'une constante de normalisation.
5. Ecrire la condition de continuité de $d\Phi(x)/dx$ en $x=a$. En déduire une relation entre X et Y (relation 2).
6. Montrer, à partir des relations (1) et (2) que la condition de quantification qui donne les valeurs possibles de E devient : $\sin X = \pm X/R$ avec $\tan X < 0$.
7. Montrer qu'il ne peut exister d'états liés que si le puits de potentiel est suffisamment profond ou suffisamment large. Ecrire l'inégalité qui doit être satisfaite pour qu'au moins un état lié puisse exister.
8. Résoudre graphiquement la condition de quantification pour $V_0 = 2,0eV$, $a = 0,1nm$ et $m = 1,67 \times 10^{-27}kg$.

III – Puits de potentiel fini et symétrique : (1heure)

On considère une particule de masse m se déplaçant sur l'axe (Ox) où elle est soumise à l'énergie potentielle:

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & x < -a/2 \\ 0 & -a/2 < x < a/2 \\ V_0 & x > a/2 \end{cases}$$

avec $V_0 > 0$. On cherche à caractériser les états stationnaires d'énergie $0 < E < V_0$ pour lesquels la particule reste piégée dans ce puits.

1. Ecrire l'équation de Schrödinger pour les états stationnaires d'énergie $0 < E < V_0$ à laquelle satisfait la fonction d'onde $\Phi(x)$ dans les différentes régions de l'espace en fonction de $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$ et $K = \sqrt{2m(V_0 - E)/\hbar^2}$.

2. En déduire la forme générale (physiquement acceptable) de la fonction d'onde dans les trois régions de l'espace.
3. L'énergie potentielle $V(x)$ étant paire, la densité de probabilité de présence de la particule sera également une fonction paire de x . Les fonctions d'onde solutions de l'équation de Schrödinger stationnaire sont donc obligatoirement paires ou impaires. Montrer que les fonctions d'ondes stationnaires paires sont de la forme

$$\Phi_{\text{paire}}(x) = \begin{cases} A \cos(ka/2) \exp[K(a/2+x)] & x < -a/2 \\ A \cos(kx) & -a/2 < x < a/2 \\ A \cos(ka/2) \exp[K(a/2-x)] & x > a/2 \end{cases}$$

et que les fonctions d'ondes impaires sont de la forme

$$\Phi_{\text{impaire}}(x) = \begin{cases} -B \sin(ka/2) \exp[K(a/2+x)] & x < -a/2 \\ B \sin(kx) & -a/2 < x < a/2 \\ B \sin(ka/2) \exp[K(a/2-x)] & x > a/2 \end{cases}$$

Où A et B sont des constantes de normalisation.

4. Ecrire la condition de continuité de $d\Phi(x)/dx$ en $x=a$. En déduire la condition de quantification pour les états pairs, puis pour les états impairs. On introduira pour cela les variables $X=ka/2$ et $Y=Ka/2$ ainsi que le paramètre $R=(a/2)\sqrt{2mV_0/\hbar^2}$.
5. Montrer que l'état lié pair de plus basse énergie peut exister quelles que soient la largeur et la profondeur du puits. Quelle est l'énergie de cet état si $V_0 \rightarrow 0$?
6. Montrer que le premier état lié impair ne pourra exister que si $V_0 > V_{1,\text{impair}}$ et que le second état lié pair ne pourra exister que si $V_0 > V_{2,\text{pair}}$. Exprimer $V_{1,\text{impair}}$ et $V_{2,\text{pair}}$ en fonction de a et m . Application numérique : Calculer $V_{1,\text{impair}}$ et $V_{2,\text{pair}}$ dans le cas d'un électron dans un puits de potentiel de largeur $a=0,2\text{nm}$.