TD 3: Particule dans un potentiel constant par morceaux

1 Puits quantiques

On s'intéresse au cas d'une particule d'énergie E piégée dans un puits de potentiel de hauteur $V_0 > E$. Ce puits est décrit par un potentiel constant par morceaux :

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{si } x < -L/2 & \text{zone I;} \\ 0 & \text{si } -L/2 \leq x \leq L/2 & \text{zone II;} \\ V_0 & \text{sinon.} & \text{zone III} \end{cases} \tag{1}$$

1.1 Généralités

1. Donner des exemples physiques de réalisations d'un puits quantique (non nécessairement carré).
2. Écrire l'équation aux valeurs propres vérifiée par une fonction propre $\varphi(x)$ dans chaque région de l'espace.
3. Résoudre ces équations. On posera

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \qquad \text{et} \qquad K^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}. \tag{2}$$

4. Quelles conditions vérifient la fonction d'onde aux points de raccordement $x = -L/2$ et $x = L/2$? En déduire quatre équations sur les coefficients indéterminés de φ.
5. Dans cette question, on se place dans le cas d'un puits infini ($V_0 = \infty$). Donner l'expression de la fonction d'onde dans ce cas. Quelles sont les énergies E_n accessibles à la particule ?
6. Ordonner selon vous les énergies propres dans le cas du puits infini et du puits fini.

Résoudre le cas du puits fini peut être fastidieux, mais une propriété de symétrie du hamiltonien justifie qu'on puisse chercher les fonctions comme symétriques ou antisymétriques.

1.2 États pairs

1. Justifier qu'on peut rechercher des fonctions propres étant soit paires soit impaires.
2. Dans la suite, on recherchera des solutions paires. Montrer qu'un état pair d'énergie E vérifie

$$k \tan\left(\frac{kL}{2}\right) = K. \tag{3}$$

3. On pose $u = kL/2$ et $W = K_0L/2$ où $K_0^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}$. En décomposant W^2, trouver une équation implicite vérifiée par u. Résoudre de façon graphique l'équation obtenue.

1.3 Cas limite du puits infini

1. Sur le graphique précédent, représenter le cas où $V_0 \gg E$. Que remarque-t-on sur les énergies propres du cas fini et infini ?
2. Montrer que ce résultat était attendu qualitativement à l'aide de l'inégalité d'Heisenberg.

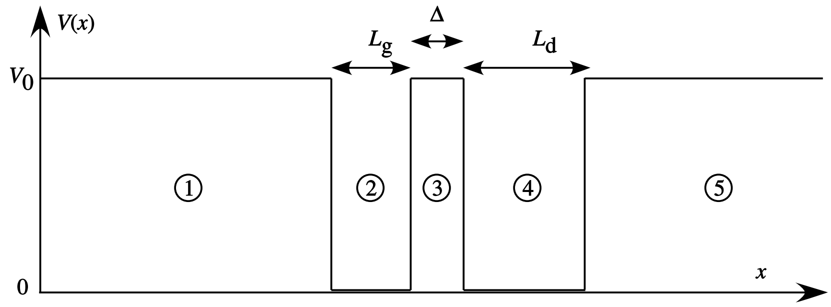

FIGURE 1 – Potentiel créé par un double puits quantique asymétrique.

2 Double puits quantique asymétrique

On s'intéresse maintenant au couplage entre deux puits carrés de largeur différentes (Fig. 1). On prendra dans la suit $L_d = \frac{3}{2}L_g$. Il est possible d'appliquer un champ électrique entre les deux puits, et on admettra qu'en première approximation, celui-ci a pour effet de décaler les niveaux d'énergie d'un deux deux puits d'une énergie $eE\ell$ avec ℓ la distance entre les centres des puits.

1. On se place d'abord dans le cas $V_0 = \infty$. Tracer le diagramme énergétique avec les six premiers niveaux du système. On notera $\alpha = \hbar^2\pi^2/2mL_g^2$. Préciser pour chaque niveau le puits dans lequel l'état est localisé.
2. Quel champ électrique devrait-on appliquer sur le système pour que l'état fondamental soit dégénéré ? On prendra $L_g = 10\,\mathrm{nm}$ et $\Delta = 3\,\mathrm{nm}$.
3. Décrire l'évolution du diagramme énergétique lorsqu'on passe d'un V_0 infini à une valeur finie.

3 Marche de potentiel

On revient au cas plus simple où le potentiel $V(x)$ est simplement une marche d'escalier (fonction de Heavisde), telle que

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < 0 \\ V_0 & \text{si } x > 0 \end{cases} \tag{4}$$

3.1 États stationnaires

1. Donner la forme générale des solutions $\varphi(x)$ en séparant les cas $E > V_0$ et $E < V_0$. On introduira k et K comme dans l'exercice précédent.

3.1.1 Cas $E > V_0$

1. Calculer les coefficients de réflexion et de transmission en amplitude $\underline{r}$ et $\underline{t}$.
2. Rappeler la définition des coefficients en intensité, et les calculer, toujours dans le cas $E > V_0$. Donner un équivalent optique de cette situation.

3.1.2 Cas $E < V_0$

1. On se place dans le cas $E < V_0$. Calculer à nouveau les coefficients de réflexion en amplitude et en intensité.
2. Montrer que le rapport des amplitudes des ondes incidente $A_\mathrm{i}(k)$ et réfléchie $A_\mathrm{r}(k)$ au vecteur d'onde k peut s'écrire

$$\frac{A_\mathrm{r}(k)}{A_\mathrm{i}(k)} = e^{-2i\theta(k)} \qquad \text{avec} \qquad \tan\theta(k) = \sqrt{\frac{K_0^2}{k^2} - 1} \qquad \text{et} \qquad K_0^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}. \tag{5}$$

3.2 Bonus : Étude dynamique d'un paquet d'onde

Les états stationnaires, bien que fonctions propres du hamiltonien, ne sont pas des états physiques, puisqu'ils ne sont pas normalisables. Une particule est représentée par un paquet d'onde, superposition linéaire de tels états stationnaires centrée sur un vecteur d'onde k_0 incident, et d'élargissement $\Delta k \ll k_0$. Une particule incidente arrive sur la marche de potentiel de la gauche vers la droite.

3.2.1 Cas $k_0 + \Delta k \leq K_0$

Dans cette situation, toutes les OPPH composant le paquet d'onde sont dans le cas $E < V_0$.

1. À partir des résultats de la partie précédente, écrire la fonction d'onde du paquet d'onde $\psi(x, 0)$ puis $\psi(x, t)$ pour tout $x < 0$ comme la somme de deux intégrales sur k.
2. La vitesse de groupe est définie par la dérivée de ω par rapport à k. Cependant, en faisant le calcul, on peut avoir une définition plus générale : il s'agit de la vitesse pour laquelle la phase du paquet d'onde est extrémale. Avec cette définition, calculer la vitesse de groupe des deux paquets d'ondes incident et réfléchi, ainsi que leur position en fonction du temps. Proposer une explication physique de ce résultat.

3.2.2 Cas $k_0 - \Delta k \geq K_0$

Dans cette situation, toutes les OPPH composant le paquet d'onde vérifient $E > V_0$.

1. Écrire la fonction d'onde $\psi(x, t)$ comme une somme de trois paquets d'ondes.
2. Calculer leur position moyenne en fonction du temps. Comparer votre résultat à la sous-partie précédente.
3. On suppose le paquet d'onde spectralement fin ($\Delta k \ll k_0$). Un développement limité de $\sqrt{k^2 - K_0^2}$ au voisinage de k_0 et au premier ordre permet de comparer le paquet d'onde incident au paquet d'onde transmis (on posera $q_0 = \sqrt{k_0^2 - K_0^2}$). Montrer que le paquet d'onde transmis est plus condensé dans l'espace réel, et que son amplitude est plus grande que celle du paquet d'onde incident.

Références

[1] Cohen-Tannoudji et al., Mécanique quantique, Tome I, complément J_I.

[2] Sujet d'examen par J. Dalibard