

TD1 : Ordres de grandeurs et puits de potentiel infini

1.1 Ordres de grandeur

1. Quelle est l'énergie, exprimée en eV, d'un photon du spectre visible (0,4 - 0,8 μm) ?

Solution

Pour fixer les idées, on prend un photon de 0,5 μm .

Planck-Einstein :

$$E = \hbar\omega$$

Pour une onde électromagnétique $\omega = 2\pi c/\lambda$ ainsi :

$$E_{\text{phot}} = \hbar 2\pi c \times \frac{1}{\lambda} \approx 6,626 \times 10^{-34} \times 3 \times 10^8 \times \frac{1}{\lambda} \approx 19,88 \times 10^{-26} \times \frac{1}{\lambda[m]} \text{ Joules}$$

On voit tout de suite que le Joule n'est pas l'unité adaptée à ce type de problème.

On utilise alors l'électron-volt (eV) qui est l'énergie d'un électron dans une différence de potentiel d'un volt :

$$E_{\text{phot}}[\text{eV}] \approx \frac{19,88 \times 10^{-26}}{1,6 \times 10^{-19}} \frac{1}{\lambda[m]} \approx 12,4 \times 10^{-7} \times \frac{1}{\lambda[m]}$$

Pour un photon de 0,5 μm , on trouve alors :

$$E_{\text{phot}} \approx 2,5 \text{ eV}$$

Attention, cette relation dans laquelle nous trouvons que l'énergie est inversement proportionnelle à la longueur d'onde est propre au photon, particule de masse nulle car alors $E = pc = \hbar kc = \hbar \frac{2\pi}{\lambda} c$.

2. Déterminer la longueur d'onde de de Broglie λ_{dB} associée à un neutron de même énergie cinétique que ce photon. Même question pour un électron.

Solution

Pour une particule massive telle que le neutron, s'il n'est pas relativiste, on écrit :

$$E_{\text{neut}} = \frac{1}{2}m_n v^2 = \frac{p^2}{2m_n} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n} = \frac{\hbar^2 (2\pi)^2}{2m_n} \frac{1}{\lambda^2} \approx 22 \times 10^{-68} \frac{1}{m_n \lambda^2} \approx 13,1 \times 10^{-41} \times \frac{1}{\lambda^2}$$

et

$$E_{\text{neut}}[\text{eV}] \approx 8,2 \times 10^{-22} \times \frac{1}{\lambda[\text{m}]^2}$$

La longueur d'onde d'un neutron ayant l'énergie du photon précédent est donc :

$$\lambda \approx 1,8 \times 10^{-11} \text{ m}$$

soit 0,18 Å.

Pour trouver la longueur d'onde d'un électron (toujours non relativiste), il suffit de remplacer par la masse de l'électron

$$E_{\text{elec}} \approx 22 \times 10^{-68} \frac{1}{m_e \lambda^2} \approx 2,4 \times 10^{-37} \times \frac{1}{\lambda^2}$$

et on trouve :

$$\lambda \approx 0,7 \times 10^{-9} \text{ m} = 0,7 \text{ nm}$$

3. Considérons un gaz monoatomique, ^4He par exemple, à la température ambiante. Les particules sont libres et on montrera plus loin dans ce cours que l'énergie cinétique moyenne par atome est $3/2 k_B T$.

- Quelle est la longueur d'onde λ_{dB} associée à chacun de ces atomes du gaz ?

- Sachant que la densité du gaz est environ $n = 10^{24} \text{ atomes.m}^{-3}$ (pression proche d'une atmosphère), comparer la longueur d'onde obtenue à la distance moyenne entre atomes, \bar{d} .

- Que se passe-t-il si la température est amenée à 10^{-6} K comme le permet la technique de refroidissement par LASER (Nobel 1997). On verra plus tard dans le cours que la condition $\lambda_{dB} \ll \bar{d}$ est une condition essentielle pour que la physique classique soit encore applicable.

Solution

Calculons déjà l'énergie caractéristique correspondant à la température ambiante. Cette valeur sera souvent utilisée dans la suite du cours.

La quantité $k_B T$ à 300 K vaut $4,14 \times 10^{-21}$ J soit $2,6 \times 10^{-2}$ eV. On retiendra donc approximativement $k_B T \approx 1/40$ eV à température ambiante. De ce fait, l'énergie de translation est environ 0,04 eV ou $6,2 \times 10^{-21}$ J.

En utilisant le résultat de la question précédente :

$$E_{\text{He}} = \frac{\hbar^2 (2\pi)^2}{2m_{\text{He}}} \frac{1}{\lambda_{dB}^2}$$

et $m_{\text{He}} = 4 \times 10^{-3} / (6,02 \times 10^{23}) = 0,66 \times 10^{-26}$ kg, on trouve : $\lambda_{dB} = 7,45 \times 10^{-11}$ m = 0,745 Å.

De manière à pouvoir comparer ce résultat à une longueur caractéristique du système, estimons maintenant la distance moyenne entre atomes du gaz. La densité est $n = 10^{24} \text{ m}^{-3}$, on en déduit une distance moyenne de l'ordre de $\bar{d} \approx n^{-1/3} \approx 10^{-8}$ m.

Puisque $\lambda_{dB} \ll \bar{d}$, ceci signifie qu'il sera en moyenne très difficile d'observer un quelconque effet d'interférence entre les ondes associées aux atomes du gaz. De ce fait, on peut s'attendre à ce que les effets quantiques soient alors négligeables. Nous reviendrons plus loin dans le cours sur les critères permettant de décider si la physique quantique est appropriée (et indispensable) à la description d'un système particulier.

On peut remarquer toutefois que si la longueur d'onde des atomes d'Helium est si faible c'est que la masse est plus importante que pour un simple électron mais aussi que l'énergie thermique n'est pas négligeable. Considérons donc ce qui se passe si l'on est capable de refroidir considérablement ce gaz, donc de le ralentir. L'énergie disponible est maintenant environ 10^{-8} fois plus faible. La longueur d'onde variant comme l'inverse au carré, elle sera alors 10^4 fois plus grande et de l'ordre de 10^{-7} m. La longueur n'est alors plus du tout négligeable devant la distance moyenne entre atomes. Les phénomènes d'interférences peuvent alors devenir observables. A ces très basses températures, la physique quantique devient indispensable car ce sont ses effets qui dictent le comportement du système.

4. Le zinc est un des métaux utilisés dans l'expérience de von Lenard pour mettre en évidence l'effet photo-électrique. Le travail de sortie d'un électron du zinc, c'est-à-dire l'énergie qu'il faut fournir pour libérer cet électron du potentiel attractif des ions du métal, est d'environ 4,3 eV. En illuminant le zinc avec un rayonnement de longueur d'onde $\lambda \approx 200$ nm (UV lointain) et de puissance 1 mW, quelle est la puissance maximale portée par le faisceau électronique ?

Solution

A une longueur d'onde de $\lambda \approx 200$ nm, l'énergie de chaque photon est de l'ordre de $12400/2000 \approx 6,2$ eV. Pour une puissance de 1 mW, il y a alors $10^{-3} / (6,2 \times 1,6 \times 10^{-19}) \approx 10^{15}$ ph/s incidents sur la surface du métal. En supposant que chacun est absorbé par un atome de zinc et sert à l'éjection d'un électron, on peut s'attendre à ce qu'il y ait aussi environ 10^{15} électrons émis par seconde. En revanche, les électrons auront chacun une énergie bien inférieure puisque 4,3 eV a chaque fois été dépensé pour libérer l'électron. Chacun ne peut donc repartir qu'avec 2 eV d'énergie cinétique. Ainsi, le faisceau électronique aura au mieux une puissance de l'ordre $2 \times 1,6 \times 10^{-19} \times 10^{15} \approx 0,3$ mW.

1.2 Fonction d'onde et énergies possibles d'une particule dans un puits de potentiel infini

Bien des aspects de la physique quantique peuvent se ramener au problème suivant : une particule de masse m est placée dans une région de l'espace de taille finie, dont elle ne peut s'échapper. Ceci est la base de nombreuses propriétés utilisées en nanotechnologies ; les "nano-puits", "nano-fils" (fig. 1.1), "quantum dots" etc..

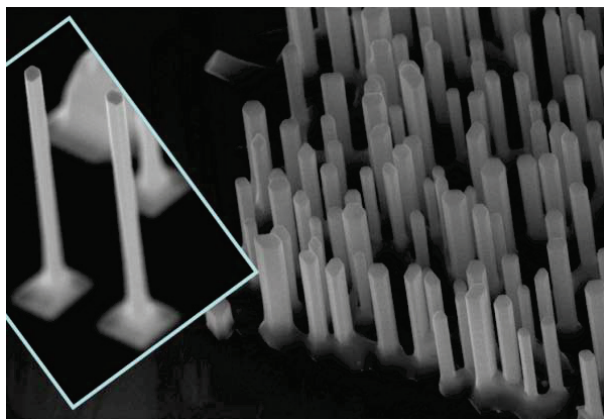


FIGURE 1.1 – Nanofils observés par MEB (images du Debye Institute). Chaque fil a une dimension transverse de l'ordre de 10 nm.

A une dimension, ce problème est formalisé en énonçant qu'il existe un segment, compris entre $x = 0$ et $x = a$ sur lequel l'énergie potentielle est prise égale à 0. Partout ailleurs, ce potentiel est infini. Autrement dit, il est impossible à une particule placée initialement entre 0 et a d'être détectée en dehors de ce segment.

1. Écrire l'équation à laquelle la fonction d'onde de cette particule doit satisfaire.

Solution

L'équation de Schrödinger pour ce problème s'écrit :

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + V_0(x) \psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t}$$

avec $V_0(x) = 0$ si $x \in [0, a]$. Ailleurs, la probabilité de présence est nulle donc la fonction d'onde doit être nulle.

2. Quelles sont les contraintes que la physique impose à la fonction d'onde ?

1.2. FONCTION D'ONDE ET ÉNERGIES POSSIBLES D'UNE PARTICULE DANS UN Puits DE POTENTIAL

Solution

La fonction d'onde doit être de carré sommable pour pouvoir être normalisée :

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

Par ailleurs, puisque la particule ne peut se trouver sur $] -\infty, 0]$ et $[a, +\infty[$, la densité de probabilité de présence doit y être nulle. De ce fait, la fonction doit aussi y être nécessairement nulle. On écrit alors simplement :

$$\int_0^a |\psi(x, t)|^2 dx = 1$$

La fonction d'onde doit être continue, alors $\psi(x = 0, t) = 0$ et $\psi(x = a, t) = 0$. Il n'y a pas ici de continuité de la dérivée de la fonction d'onde car il existe une discontinuité infinie du potentiel.

3. Chercher les fonctions d'onde possibles du système pour des états stationnaires sous la forme : $\phi(x)f(t)$. On donnera la forme générale des parties spatiale et temporelle.

Solution

Les solutions possibles sont cherchées grâce à la méthode de séparation des variables. On écrit alors :

$$\psi(x, t) = \phi(x)f(t)$$

En remplaçant dans l'équation de Schrödinger, on trouve :

$$\frac{-\hbar^2}{2m\phi(x)} \frac{\partial^2 \phi(x)}{\partial x^2} + V_0 = \frac{i\hbar}{f(t)} \frac{\partial f(t)}{\partial t}$$

où l'on a divisé l'équation par $\psi(x, t)$ partout où la fonction ne s'annule pas. Si l'on cherche des solutions valables en tout point et à chaque instant (stationnaires), les deux cotés de l'égalité doivent alors être constants. Ceci entraîne :

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi(x)}{\partial x^2} + V_0 \phi(x) = E \phi(x) \quad (1.1a)$$

$$i\hbar \frac{\partial f(t)}{\partial t} = E f(t) \quad (1.1b)$$

La constante E introduite ici a les dimensions d'une énergie. On remarque que la partie temporelle possède une forme très simple :

$$f(t) \propto e^{-iEt/\hbar}$$

L'onde solution est donc monochromatique de pulsation $\omega = E/\hbar$.

La partie spatiale se résout facilement car le potentiel est constant là où la particule existe et on trouve :

$$\phi(x) \propto e^{\pm ikx}$$

où l'on a posé $k = \sqrt{2mE}/\hbar$. La solution générale a donc la forme :

$$\psi(x, t) = A e^{i(kx - \omega t)} + B e^{-i(kx + \omega t)}$$

Il s'agit de deux ondes planes, de même pulsation, se propageant en sens opposés. Elles sont donc portées respectivement par deux vecteurs d'onde k et $-k$. Cette solution correspond à un comportement stationnaire (trouvé pour tout t).

Compte tenu des conditions aux limites (continuité de la fonction d'onde) :

$$\psi(x = 0, t) = 0 = (A + B)e^{-iEt/\hbar}$$

La solution est alors, avec $A = -B = C/(2i)$:

$$\psi(x, t) = C \sin[kx] e^{-iEt/\hbar}$$

Il reste une condition limite à exploiter avant de passer à la normalisation :

$$\psi(x = a, t) = C \sin[ka] e^{-iEt/\hbar} = 0$$

Ceci est vrai pour tout instant t et il en découle :

$$k = n \frac{\pi}{a} \quad \text{avec } n \in \mathbb{N}^*$$

1.2. FONCTION D'ONDE ET ÉNERGIES POSSIBLES D'UNE PARTICULE DANS UN Puits DE POTENTIAL

Solution (suite)

Nous avons exclu les solutions correspondant à $n = 0$. En effet, ceci reviendrait à prendre des vecteurs d'onde $k = 0$ ce qui aurait pour effet très néfaste de rendre la fonction d'onde identiquement nulle. La conséquence serait qu'alors la probabilité de trouver la particule dans le puits serait elle aussi nulle. On peut alors s'interroger sur la pertinence qu'il y a à essayer de résoudre un problème concernant une particule dans un endroit dont elle est toujours absente.

Nous avons aussi décidé de nous passer des n entiers négatifs. Les solutions associées à ces valeurs sont celles pour lesquelles k serait aussi négatif. Mais notre solution contient déjà, à poids égaux, les deux ondes correspondant à $k > 0$ et $k < 0$ puisque sont présentes deux ondes planes de sens opposées. Ainsi, la partie $n < 0$ ne ferait que nous donner des solutions physiquement identiques à ce que fournit $n > 0$.

4. Donner les énergies possibles associées aux états stationnaires

Solution

Puisque nous avons posé $k = \sqrt{2mE}/\hbar$, on trouve que la constante initialement choisie ne peut prendre n'importe quelle valeur :

$$E_n = n^2 \hbar^2 \frac{\pi^2}{2ma^2} \text{ avec } n \in \mathbb{N}^*.$$

Il existe donc autant d'équations décrivant des comportements stationnaires qu'il existe de constantes E_n et, en conséquence, qu'il existe de valeurs possibles pour n , c'est-à-dire une infinité.

5. Normer les fonctions d'onde des états stationnaires puis exprimer une fonction d'onde générale sur la base des fonctions stationnaires.

Solution

Il convient maintenant de normer la fonction d'onde pour que celle-ci puisse avoir une interprétation en terme d'amplitude de densité de probabilité :

$$\int_0^a |\psi(x, t)|^2 dx = |C|^2 \int_0^a |\sin[n\pi x/a]|^2 dx = |C|^2 \frac{a}{2}$$

La fonction d'onde est donc normée si

$$C = \sqrt{\frac{2}{a}} e^{i\alpha}$$

où α est une phase arbitraire. Ainsi, la fonction d'onde d'un état stationnaire s'écrit :

$$\psi_n(x, t) = \sqrt{\frac{2}{a}} e^{i\alpha} \sin[n\pi x/a] e^{-iE_n t/\hbar}$$

Le terme de phase ne dépend ni de t ni de x , il n'intervient donc ni dans le calcul de l'impulsion moyenne, ni dans celui de l'énergie moyenne. Les mesures sur la fonction d'onde ne se font que par son module au carré qui, bien sûr, fait disparaître ce terme de phase. Aussi, nous avons toute liberté pour le choisir et, privilégiant les solutions de simplicité, nous poserons :

$$\psi_n(x, t) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin[n\pi x/a] e^{-iE_n t/\hbar}$$

Cette fonction d'onde correspond à un état stationnaire particulier pour lequel l'énergie moyenne est fixée à tout instant à une valeur déterminée par le nombre n . Une solution générale de l'équation de Schrödinger pour une particule de masse m dans ce potentiel est alors :

$$\psi(x, t) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sum_n c_n \sin[n\pi x/a] e^{-iE_n t/\hbar}$$

Le facteur de normalisation est alors inutile car les coefficients c_n de la combinaison linéaire peuvent l'intégrer.

6. Exprimer l'énergie moyenne de la particule lorsqu'elle se trouve décrite par une fonction d'onde quelconque en fonction des énergies des états stationnaires trouvées précédemment.

Solution

L'énergie moyenne est :

$$\langle E \rangle = \int \psi^*(x, t) i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) dx = \sum_{n_1, n_2} E_{n_1} e^{-i(E_{n_1} - E_{n_2})t/\hbar} c_{n_1} c_{n_2}^* \frac{2}{a} \int_0^a \sin[n_2 \pi x/a] \sin[n_1 \pi x/a]$$

La dernière intégrale vaut :

$$\begin{aligned} \frac{2}{a} \int_0^a \sin[n_2 \pi x/a] \sin[n_1 \pi x/a] dx = \\ \frac{-1}{2a} \left\{ \int_0^a e^{i(n_1+n_2)\pi x/a} dx + \int_0^a e^{-i(n_1+n_2)\pi x/a} dx - \int_0^a e^{i(n_1-n_2)\pi x/a} dx - \int_0^a e^{-i(n_1-n_2)\pi x/a} dx \right\} \end{aligned}$$

Trois cas se présentent alors :

- (a) $n_1 = n_2$, les deux premières intégrales sont nulles car il y a un nombre entier de période sur le domaine d'intégration. Les deux autres intégrales donnent chacune $-a$ et l'intégrale totale vaut alors 1.
- (b) $n_1 \neq n_2$ et $n_1 + n_2$ est pair. De ce fait, $n_1 - n_2$ est aussi pair. Toutes les intégrales sont donc nulles car il y a encore un nombre entier de périodes sur le $[0, a]$.
- (c) $n_1 \neq n_2$ et $n_1 + n_2$ est impair. Aucune intégrale n'est nulle. En revanche les intégrales s'annulent mutuellement et, de ce fait, l'intégrale totale est donc encore identiquement nulle.

Finalement, on ne retient que les termes pour lesquels $n_1 = n_2$ et :

$$\langle E \rangle = \int \psi^*(x, t) i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) dx = \sum_{n_1, n_2} E_{n_1} e^{-i(E_{n_1} - E_{n_2})t/\hbar} c_{n_1} c_{n_2}^* \delta_{n_1, n_2} = \sum_{n_1} |c_{n_1}|^2 E_{n_1}$$

L'énergie moyenne est donc la somme des énergies de chaque état stationnaire pondérée par son poids dans la fonction d'onde pris en module au carré. Ce poids dans la combinaison linéaire, peut donc être interprété comme une probabilité d'occurrence de l'énergie associée lorsque la particule est décrite par la fonction d'onde $\psi(x, t)$. On aura alors $\sum_n |c_n|^2 = 1$.

7. Donner l'écart entre les deux niveaux de plus basses énergies pour un électron placé dans un puits de largeur $a = 1$ mm et un puits de largeur $a = 10$ Å. Comparer cette valeur à l'énergie cinétique d'un électron soumis à un potentiel de 1 Volt.

Solution

L'expression de l'énergie pour une particule dans un puits de potentiel infini de largeur a est donc :

$$E_n = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$$

où n est un entier positif non nul. Les deux niveaux d'énergies les plus basses sont donc trouvés pour $n = 1$ et $n = 2$ et l'écart est ainsi :

$$\Delta E_{1,2} = \frac{3\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$$

L'écart d'énergie entre les niveaux les plus bas est donc inversement proportionnel au carré de la largeur du puits. Pour un électron, dont la masse est environ $m \approx 10^{-30}$ kg :

$$\Delta E_{1,2} \approx \frac{15 \times 10^{-38}}{a^2}$$

Ainsi,

$$\Delta E_{1,2} \approx \begin{cases} 15 \times 10^{-32} \text{ J} & \text{si } a = 1 \text{ mm} \\ 15 \times 10^{-20} \text{ J} & \text{si } a = 1 \text{ nm} \end{cases}$$

L'énergie d'un électron dans un potentiel de 1 Volt est $qV = 1,6 \times 10^{-19}$ J. Ceci fixe l'unité des "électron-volts" : 1 eV = $1,6 \times 10^{-19}$ J. On voit que les écarts d'énergies sont totalement négligeables devant tout type de potentiel que l'on pourrait imaginer si la taille du puits est macroscopique. Tout se passe comme si l'énergie n'était pas quantifiée.

En revanche, pour des puits de très basse dimension, tels ceux de la figure 1.1, l'écart énergétique est alors d'environ $1,5 \times 10^{-19} \approx 1$ eV. Ceci implique que pour faire passer un électron de son niveau d'énergie le plus bas à celui immédiatement supérieur, il faut par exemple lui appliquer un potentiel de 1 Volt. En particulier, à température ambiante, la réserve d'énergie thermique $k_B T \approx 1/40$ eV n'est pas suffisante pour amener l'électron sur le premier état excité.