TD de tutorat 8 : puits de potentiel

Exercice 1 : puit de potentiel

1. Expérimentalement, les objets physiques sont restreints à une partie de l'espace, seulement (ex : dans la chambre à vide, dans la puce électronique, etc). La modélisation la plus simple est de considérer que cet espace est une boîte.

2. . On veut que le Hamiltonien quantique $\hat{H}$ corresponde au hamiltonien classique H_{class} dans la limite classique (i.e. quand l'énergie du système >> l'énergie fondamentale, ou que les incertitudes des opérateurs $\Delta A = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle \rightarrow 0$. Cela correspond formellement à $\hbar \rightarrow 0$.

Or on connait le hamiltonien classique d'une particule dans un potentiel $V(x)$, c'est $H_{class} = \frac{p^2}{2m} + V(x)$

Le processus pour écrire $\hat{H}$ (appelé quantification) est de remplacer les grandeurs par des observables : $p \rightarrow \hat{P}$, $x \rightarrow \hat{X}$, et les crochets de Poissons $\{ , \}$ par le commutateur $[,]$:

$\{x, p\} = 1 \quad \longrightarrow \quad [\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar \mathbb{1}$

Donc $\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + V(\hat{X})$

. On veut écrire $\hat{H}$ dans la base des positions puisque V est définit dans cette base, dans l'énoncé :

$\hat{H}_{position}\,\psi(x) = \langle x|\hat{H}|\psi\rangle$

or $\langle x|\hat{H}|\psi\rangle = \frac{1}{2m}\langle x|\hat{P}^2|\psi\rangle + \langle x|V(\hat{X})|\psi\rangle$

$$\langle x|\hat{P}|\psi\rangle = -i\hbar\frac{d}{dx}\langle x|\psi\rangle$$

donc $\langle x|\hat{P}^2|\psi\rangle = \langle x|\hat{P}(\hat{P}|\psi\rangle) = -i\hbar\frac{d}{dx}\langle x|\hat{P}|\psi\rangle = -\hbar^2\frac{d^2}{dx^2}\langle x|\psi\rangle$

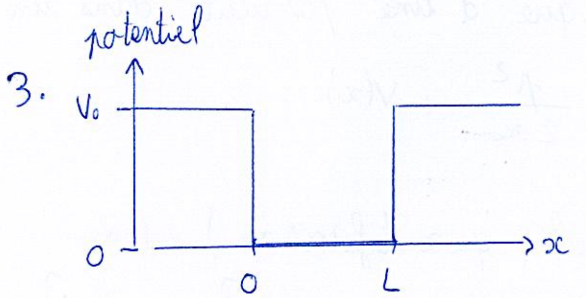
$$= -\hbar^2\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)$$

$$\langle x|V(\hat{X})|\psi\rangle = V(x)\,\psi(x)$$

donc $\hat{H}_{position}\,\psi(x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right)\psi(x)$

donc $\hat{H}_{position} = -\frac{\hbar^2 d^2}{2m\,dx^2} + V(x) \equiv H$

3.



Pour un potentiel V_0 en dehors du puit, en $x > L$

$\psi(x) = A\,e^{-\alpha x}$ avec $\alpha = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$

Or si $V_0 \to \infty$, $\alpha \to \infty$ donc $\psi(x) \to 0$ $\forall x > L$.

- Une autre manière est que $H\psi(x) = E\psi(x)$. Or E est finie, donc si $V(x) = \infty$, la seule façon de résoudre l'équation est $\psi(x) = 0$ $\forall x$.

Donc la fonction d'onde est identiquement nulle en dehors du puit.

4. L'équation de Schrödinger stationnaire correspond à l'équation des valeurs propres de H :

$$H\,\Psi(x) = E\,\Psi(x)$$

donc $\dfrac{-\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2}{dx^2}\Psi(x) + (V(x) - E)\,\Psi(x) = 0$

5. Dans le puit de potentiel, $0 < x < L$, $V(x) = 0$

donc $\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2}{dx^2}\Psi(x) + E\,\Psi(x) = 0$

. Pour $E < 0$, $\Psi(x) = A e^{-\alpha x} + B e^{\alpha x}$ avec $\alpha = \sqrt{2m|E|}/\hbar$

Or on doit avoir $\Psi(0) = \Psi(L) = 0$ donc $A = B = 0$, il n'y a pas de solutions possibles si $E < 0$

. Pour $E > 0$ $\Psi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$ avec $k = \sqrt{2mE}/\hbar$

$A, B \in \mathbb{R}$

6. On ne peut pas répondre à la question en intégrant l'équation du mouvement. Pour cela, il faut introduire les distributions $\delta(x)$, $\theta(x)$ (heaviside) et $\delta'(x)$.

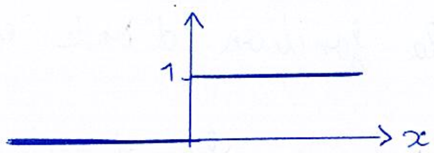
$\delta(x)$ est définie comme : $\int dx\, f(x)\,\delta(x) = f(0)$.

Alors $\delta'(x)$ est égal à : $\int dx\, f(x)\,\delta'(x) = \underbrace{\left[f(x)\,\delta(x)\right]_{-\infty}^{+\infty}}_{=0 \text{ car } \delta \text{ est nulle partout sauf en } 0} - \int f'(x)\,\delta(x)\,dx$

$$= -\int f'(x)\,\delta(x)\,dx = -f'(0)$$

$\rightarrow$ voilà comment $\delta'(x)$ agit sur les fonctions

$\theta(x)$ est la fonction de Heaviside :



$$\begin{cases} \theta(x \geq 0) = 1 \\ \theta(x < 0) = 0 \end{cases}$$

on a $\theta'(x) = \delta(x)$ (on peut le démontrer en calculant $\int \theta'(x) f(x) \dots$)

Alors, supposant que $\psi(x)$ soit discontinu en 0, on pourrait l'écrire
$\psi(x) = \varphi(x) + b\,\theta(x)$ autour de 0, où φ est une fonction continue en 0

(Ici, dans notre cas, on aurait $\varphi = 0$ car en $x < 0, \psi(x) = 0$
donc $\psi(x) = b\,\theta(x)$ autour de 0)

Alors $\psi'(x) = b\,\theta'(x) = b\,\delta(x)$
et $\psi''(x) = b\,\delta'(x)$

Dans l'équation de Schrödinger : $\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = (V(x) - E)\psi(x)$,

en $x > 0$, on aurait $\frac{\hbar^2}{2m} b\,\delta'(x) = E\,b\,\theta(x)$

or $\delta'(x) \neq \theta(x)$, donc on a nécessairement $b = 0$

$\Rightarrow$ donc ψ est continue

7. Par continuité, $\Psi(0) = \Psi(L) = 0$

donc $A + B = 0$

$A e^{ikL} + B e^{-ikL} = 0$ i.e. $A e^{2ikL} + B = 0$

donc $e^{2ikL} = 1$ puis $2kL = n \cdot 2\pi$

$kL = n\pi$

$k = \frac{n\pi}{L}$

alors $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) = E \Psi(x)$

$-\frac{\hbar^2}{2m} \left((ik)^2 A e^{ikx} + (-ik)^2 B e^{ikx} \right) = E \Psi(x)$

$+\frac{k^2 \hbar^2}{2m} \Psi(x) = E \Psi(x)$

donc $E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2 m L^2}$

8. On a $A + B = 0$

donc $\Psi(x) = A\left(e^{ikx} - e^{-ikx}\right) = 2i A \sin(kx)$

Par normalisabilité, $\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x)|^2 dx = 1 = \int_0^L |\Psi(x)|^2 dx$

$4 A^2 \int_0^L \sin^2(kx)\, dx = 4 A^2 \int_0^L \frac{1}{2}\left(1 - \cos(2kx)\right)$

$= 4A^2 \left(\frac{L}{2} - \frac{1}{2} \left[\frac{\sin(2kx)}{2k} \right]_0^L \right)$

or $\left[\sin(2kx)\right]_0^L = \sin\left(\frac{2\pi n L}{L}\right) - \sin(0) = \sin(2\pi n) - \sin(0) = 0$

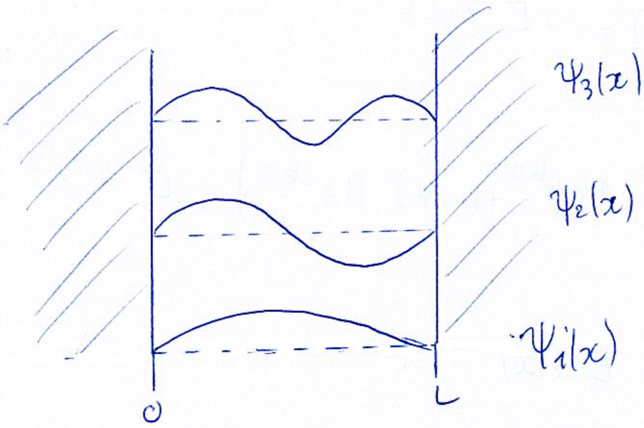
donc $1 = 4A^2 \times \frac{L}{2}$ donc $A = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{2}{L}}$,

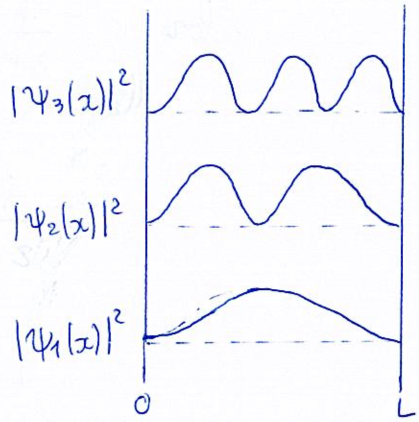
donc $\Psi(x) = i\sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$

i est une phase, on peut donc l'enlever :

$\Psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$

9.



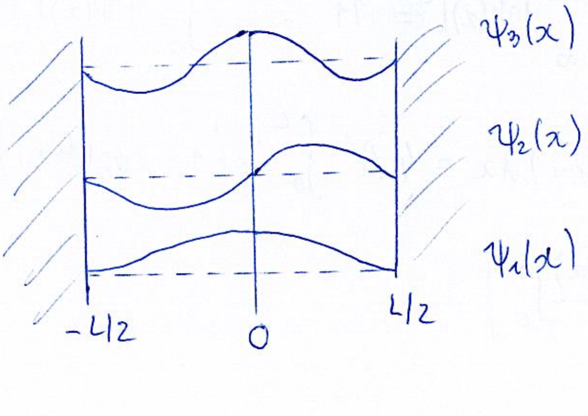


10. Pour le puit de potentiel entre $-L/2$ et $L/2$,

$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$ $\Longrightarrow$ mêmes énergies

$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$ pour n pair

$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$ pour n impair



$\rightarrow$ on a les mêmes fonctions d'ondes, avec une phase de différence, donc les mêmes états physiques

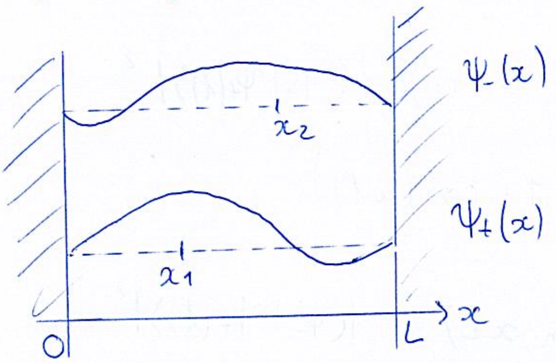
$\Rightarrow$ on retrouve bien les mêmes énergies et états pour un puit entre 0 et L et $-L/2$ et $L/2$

↳ logique, car on a juste fait une translation de l'espace, mais ça ne doit rien changer car on peut définir l'origine des x de façon arbitraire

11. Pour n impair, on a un nombre pair de noeuds (et impair de ventre). Et $|\Psi|^2$ est non nul au centre

Pour n pair, on a un nombre impair de noeuds (et pair de ventre). Et $|\Psi|^2$ est nul au centre : la probabilité de trouver la particule au centre est nulle.

12. $\Psi_\pm(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{2}{L}}\left(\sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) \pm \sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right)\right) = \frac{1}{\sqrt{L}}\left(\sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) \pm \sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right)\right)$



Le point où la probabilité de trouver la particule est nulle s'est décalé à droite ou à gauche du centre du puit, par rapport à $|\Psi_1\rangle$, où c'était au centre. La particules a une plus grande probabité d'être localisée à droite (Ψ_+) ou à gauche (Ψ_-)

13. $|\Psi_+(t=0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\Psi_1\rangle + |\Psi_2\rangle\right)$

$$|\Psi_+(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(e^{-iE_1t/\hbar}|\Psi_1\rangle + e^{-iE_2t/\hbar}|\Psi_2\rangle\right)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-iE_1(t)/\hbar}\left(|\Psi_1\rangle + e^{-i(E_2-E_1)t/\hbar}|\Psi_2\rangle\right)$$

$$\simeq \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\Psi_1\rangle + e^{-i(E_2-E_1)t/\hbar}|\Psi_2\rangle\right)$$

$$\omega = \frac{E_2 - E_1}{\hbar} = \frac{1}{\hbar}\left(\frac{4\pi^2\hbar^2}{2mL^2} - \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}\right) = \frac{3\pi^2\hbar}{2mL^2}$$

$$\psi_+(t,x) = \frac{1}{\sqrt{L}}\left(\sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) + e^{i\omega t}\sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right)\right)$$

et $|\psi_+(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\psi_1\rangle + e^{-i\omega t}|\psi_2\rangle\right)$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{|\psi_+\rangle + |\psi_-\rangle}{\sqrt{2}} + e^{-i\omega t}\left(\frac{|\psi_+\rangle - |\psi_-\rangle}{\sqrt{2}}\right)\right)$$

$$= \frac{1}{2}\left(|\psi_+\rangle\left(1 + e^{-i\omega t}\right) + |\psi_-\rangle\left(1 - e^{-i\omega t}\right)\right)$$

$$= \frac{1}{2}e^{-i\omega t/2}\left(|\psi_+\rangle\left(e^{i\omega t/2} + e^{-i\omega t/2}\right) + |\psi_-\rangle\left(e^{i\omega t/2} - e^{-i\omega t/2}\right)\right)$$

$$\simeq \left(\cos\left(\frac{\omega t}{2}\right)|\psi_+\rangle + i\sin\left(\frac{\omega t}{2}\right)|\psi_-\rangle\right)$$

donc $P(\text{particule localisée en } x_1) = |\langle\psi_+|\psi_+(t)\rangle|^2$

$$= \cos^2\left(\frac{\omega t}{2}\right) = \frac{1}{2}\left(1 + \cos(\omega t)\right)$$

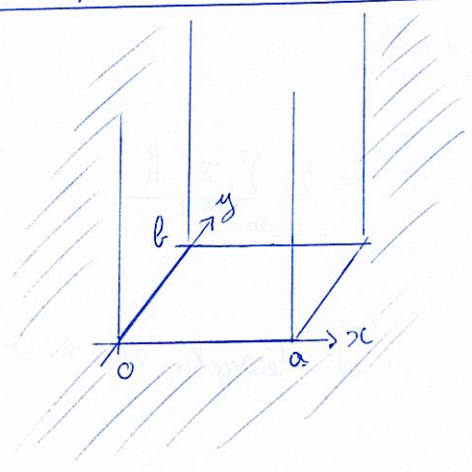
$P(\text{particule localisée en } x_2) = |\langle\psi_-|\psi_+(t)\rangle|^2$

$$= \sin^2\left(\frac{\omega t}{2}\right) = \frac{1}{2}\left(1 - \cos(\omega t)\right)$$

→ la particule oscille entre une localisation autour de x_1 et une localisation autour de x_2

Exercice 2 : puits de potentiel 2D

1.



2. $$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{P}}^2}{2m} + V(\hat{\vec{R}})$$

$$\hat{\vec{R}} = \hat{X} \otimes \mathbb{1}\, \vec{e_x} + \mathbb{1} \otimes \hat{Y}\, \vec{e_y}$$

$$\hat{\vec{P}} = \hat{P_x} \otimes \mathbb{1}\, \vec{e_x} + \mathbb{1} \otimes \hat{P_y}\, \vec{e_y}$$

$$\hat{\vec{P}}^2 = (\hat{P_x} \otimes \mathbb{1})^2 + (\hat{P_y} \otimes \mathbb{1})^2 = \hat{P_x}^2 + \hat{P_y}^2$$

$$V(\hat{\vec{R}}) = V_a(\hat{X}) + V_b(\hat{Y})$$

puis $$\langle \vec{r} | \hat{H} | \psi \rangle = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} \right) + V_a(x) + V_b(x) \right) \psi(\vec{r})$$

$$= \left(\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_a(x) \right) + \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dy^2} + V_b(x) \right) \right) \psi(\vec{r})$$

$$= (H_x + H_y)\, \psi(\vec{r})$$

→ H peut être découplé selon une partie qui dépend de x et une autre qui dépend de y

3. alors $E = E_x + E_y$

Avec H_x, H_y les hamiltoniens étudiés à l'exercice 1 et E_x, E_y les énergies correspondantes

$$E_{x,n} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2 m a^2} \qquad E_{y,n'} = \frac{(n')^2 \pi^2 \hbar^2}{2 m b^2}$$

et $|\psi_\cdot\rangle = |\psi_x\rangle \otimes |\psi_y\rangle$ car H est découplée en x et y

$$|\psi_{n,n'}\rangle = |\psi_{x,n}\rangle \otimes |\psi_{y,n'}\rangle$$

que l'on peut noter $|n,n'\rangle = |n\rangle \otimes |n'\rangle$

et $\psi_{n,n'}(\vec{r}) = \langle \vec{r} \,|\, \psi_{n,n'}\rangle = \psi_{x,n}(x) \cdot \psi_{y,n'}(y)$

4. Si $a = b$, $E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2 m a^2}\left(n^2 + n'^2\right)$

$E / \left(\frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}\right)$	$n = 1$	$n = 2$	$n = 3$
$n' = 1$	$1^2+1^2 = 2$	$2^2+1^2 = 5$	$3^2+1^2 = 10$
$n' = 2$	$1^2+2^2 = 5$	$2^2+2^2 = 8$	$3^2+2^2 = 13$
$n' = 3$	$1^2+3^2 = 10$	$2^2+3^2 = 13$	$3^2+3^2 = 18$

donc $E_0 = E_{1,1} = \frac{2\pi^2 \hbar^2}{2 m a^2}$ → dégénérescence $= 1$

$E_1 = E_{1,2} = E_{2,1} = \frac{5\pi^2 \hbar^2}{2 m a^2}$ → dégénérescence $= 2$

$E_2 = E_{2,2} = 8\frac{\pi^2 \hbar^2}{2 m a^2}$ → dégénérescence $= 1$

. Pour $a = b$, chaque niveau a une dégénérescence de 1, dans le cas général