Mécanique quantique – L3

Pierre-François Cohadon - Tristan Villain - Qinhan Wang

TD 9 - 29/11/2024
Puits de potentiel 1D

1 Quelques propriétés générales des états liés à 1D

1.1 Parité

On définit l'opérateur $\widehat{\Pi}$ par son action sur les vecteurs de la base $|x\rangle$:

$$\widehat{\Pi}|x\rangle = |-x\rangle. \tag{1}$$

1. Montrer que $\widehat{\Pi}^2 = 1$ et que $\widehat{\Pi}$ est hermitique et unitaire.
2. Quelles sont les valeurs propres de $\widehat{\Pi}$? Que peut-on dire des opérateurs $\widehat{\Pi}_{\pm} = (1 \pm \widehat{\Pi})/2$?
3. Quelle est l'action de $\widehat{\Pi}$ sur les kets $|p_x\rangle$?
   Sur un ket $|\Psi\rangle$ en représentation position (resp. impulsion) ?
4. Calculer $\widehat{\Pi}\widehat{x}\widehat{\Pi}^\dagger$ et $\widehat{\Pi}\widehat{p}_x\widehat{\Pi}^\dagger$.
5. Montrer que si $\widehat{H} = \widehat{p}_x^2/2m + \widehat{V}(\widehat{x})$ où $V(x)$ est une fonction paire, alors $[\widehat{H}, \widehat{\Pi}] = 0$. Conséquence ?

1.2 Non-dégénérescence des états liés

6. Montrer qu'un niveau lié à une dimension est nécessairement non dégénéré.
   On pourra par exemple supposer qu'il existe deux fonctions d'ondes associées à la même énergie et montrer qu'elles sont alors nécessairement proportionnelles.
7. En déduire qu'il existe une base des états liés à parité définie (où chaque fonction d'onde est paire ou impaire).
8. En déduire qu'on peut choisir ces fonctions d'ondes réelles.

2 Un exemple de puits : le puits δ

2.1 Propriétés de la fonction d'onde autour d'une discontinuité de potentiel

On considère une particule dont le hamiltonien H s'écrit :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x), \tag{2}$$

où l'énergie potentielle V de la particule présente une discontinuité en $x = 0$.

1. Intégrer formellement l'équation aux valeurs propres de H sur $[-\varepsilon, +\varepsilon]$.
   En faisant tendre ε vers 0, montrer que si V reste bornée (c'est-à-dire si la discontinuité reste finie), la dérivée de la fonction propre $\varphi(x)$ en $x = 0$ reste continue.

2.2 Puits unique

Dans cette partie, on prendra $V(x) = -\alpha\delta(x)$, où $\alpha(> 0)$ est une constante dont on précisera la dimension. On pose pour la suite :

$$\mu = \frac{2m\alpha}{\hbar^2}. \tag{3}$$

2. Montrer que dans ce cas, $\partial\varphi/\partial x$ subit en $x = 0$ une discontinuité que l'on calculera.

On s'intéresse uniquement aux états liés : l'énergie de la particule est donc **négative**.

3. En intégrant l'équation de Schrödinger des états stationnaires séparément pour les deux demi-espaces, montrer que $\varphi(x)$ peut alors s'écrire :

$$x < 0 \qquad \varphi(x) = A_1 e^{\rho x} + A_1' e^{-\rho x} \tag{4}$$
$$x > 0 \qquad \varphi(x) = A_2 e^{\rho x} + A_2' e^{-\rho x}, \tag{5}$$

   où ρ est une constante que l'on calculera.

4. En écrivant que φ est continue en $x = 0$, alors que $\partial\varphi/\partial x$ ne l'est pas, établir des relations entre A_2, A_2', A_1 et A_1'.
5. Écrire alors que φ est de carré sommable, et en déduire les valeurs possibles de l'énergie. Calculer les fonctions d'onde normées correspondantes.
6. Représenter graphiquement ces fonctions d'onde. Donner un ordre de grandeur de leur largeur Δx. Quelle valeur donner à α pour que Δx soit égal au rayon de Bohr a_0 ?
   On rappelle que $a_0 = 4\pi\epsilon_0\hbar^2/me^2 \approx 0{,}05$ nm.
7. Quelle est la probabilité $dP(p_x)$ pour qu'une mesure de l'impulsion de la particule dans un des états stationnaires donne un résultat compris entre p_x et $p_x + dp_x$? Pour quelle valeur de p_x cette probabilité est-elle maximale ? Dans quel domaine, de dimension Δp_x, prend-elle des valeurs notables ? Donner un ordre de grandeur du produit $\Delta x \Delta p_x$.

2.3 Double puits

On considère maintenant un potentiel de la forme :

$$V(x) = -\alpha \left[\delta\left(x - \frac{l}{2}\right) + \delta\left(x + \frac{l}{2}\right) \right], \tag{6}$$

où l est une longueur. On ne s'intéresse par la suite qu'aux **états liés** (d'énergie négative).

8. Quelle est la forme générale des états propres du hamiltonien de la particule ?
   On cherchera à utiliser les **symétries** du problème.

Etat pair :

9. Montrer qu'il existe toujours un état lié pair, état dont l'énergie est donnée par l'équation :
   $$E = -\frac{\hbar^2 \rho^2}{2m}, \tag{7}$$
   où ρ vérifie :
   $$\mathrm{e}^{-\rho l} = \frac{2\rho}{\mu} - 1. \tag{8}$$
10. Montrer que son énergie est inférieure à $-m\alpha^2/2\hbar^2$ et représenter la fonction d'onde associée.

Etat impair

11. Montrer que lorsque l est supérieure à une valeur que l'on précisera, il existe un deuxième état lié, impair, et dont l'énergie vérifie :
    $$E = -\frac{\hbar^2 \rho^2}{2m}, \tag{9}$$
    avec
    $$\mathrm{e}^{-\rho l} = 1 - \frac{2\rho}{\mu}. \tag{10}$$
12. Vérifier que cette énergie est supérieure à $-m\alpha^2/2\hbar^2$ et représenter la fonction d'onde associée.

Force covalente

D'après ce qui précède, le niveau pair est l'état fondamental du système à deux puits. On suppose que le système se trouve dans cet état.

13. Développer l'équation (8) lorsque l est grand (préciser devant quoi).
    En déduire le développement asymptotique de l'énergie.
14. Montrer à partir de la question précédente qu'il s'exerce une force entre les deux centres attracteurs. Préciser le signe de cette force et son comportement à longue distance.