Particule dans un puits de potentiel

Le cas d'une particule dans un puits de potentiel est en mécanique quantique est très important et peut-être perturbant lorsque l'on essaye d'aller dans les détails. En particulier, c'est une situation simple sur laquelle on peut s'entrainer à bien comprendre l'utilisation des syémtries.

Énoncé. Considérons une particule de masse m à une dimension dans un *puits de potentiel* de largeur L :

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{si } x \in]-L/2, L/2[, \\ +\infty, & \text{si } x \notin]-L/2, L/2[. \end{cases} \tag{1}$$

On dit souvent que la particule est dans une boîte (unidimensionnelle). Nous cherchons à calculer les états stationnaires de ce système. L'équation à résoudre est donc

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\varphi(x) = E\varphi(x), \qquad E \in \mathbb{R} \tag{2}$$

où φ est la partie spatiale de la fonction d'onde, c'est-à-dire que la fonction d'onde est $\psi(x,t) = \varphi(x)e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$. La solution de (2) doit satisfaire deux propriétés :

1. **Conditions aux bords** : le fait que le potentiel soit infini hors du puits implique que la finction d'onde doit s'annuler dans cette partie de l'espace et donc que

$$\psi(L/2) = 0, \tag{3}$$
$$\psi(-L/2) = 0. \tag{4}$$

2. **Normalisation** : par définition, une fonction d'onde doit être normée, donc

$$\int_{-L/2}^{L/2} |\varphi(x)|^2 \mathrm{d}x = 1. \tag{5}$$

Symétrie. En analysant le potentiel, on peut voir que ce dernier est symétrique sur la transformation de coordonnées

$$x \mapsto -x. \tag{6}$$

Comme le terme cinétique est également invariant sous cette transformation, l'Hamiltonien au complet est invariant sous cette transformation. Cette dernière est donc une symétrie du système. ...

En général, les symétries d'un problème constituent un outil très important pour mieux comprendre ce dernier. Dans ntore cas les syémtries sont très pratiques pour simplifier la résolution du problème. Cepedant, il doit aussi être possible en principe, de résoudre le problème sans utiliser les symétries. Par exemple, si l'on n'a pas remarqué qu'une syémtrie était présente.

Dans la suite, nous allons résoudre le problème de trois manière différentes : d'abord sans utiliser les syémtries, et ensuite en utilisant les symétries, avec deux approches différentes.

1 Résolution sans symétrie

(work in progress)

2 Résolution avec symétrie

2.1 Méthode A

1. On résout l'équation (2) dans la région $[-L/2, L/2]$. La solution générale est

$$\varphi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \qquad A, B \in \mathbb{C}. \tag{7}$$

2. On impose que la solution soit paire ou impaire :

$$\text{Paire : } \varphi(x) = \varphi(-x) \Rightarrow A = B, \text{ donc } \varphi^{(\mathrm{P})}(x) = 2A^{(\mathrm{P})}\cos(kx) \tag{8}$$
$$\text{Impaire : } \varphi(x) = -\varphi(-x) \Rightarrow A = -B, \text{ donc } \varphi^{(\mathrm{I})}(x) = 2iA^{(\mathrm{I})}\sin(kx) \tag{9}$$

3. On impose les conditions aux bords :

$$\varphi^{(\mathrm{P})}(L/2) = 0 \Rightarrow k = \frac{2\pi}{L}\left(n + \frac{1}{2}\right) \equiv k_n^{(\mathrm{P})} (n \in \mathbb{N}) \tag{10}$$
$$\varphi^{(\mathrm{I})}(L/2) = 0 \Rightarrow k = \frac{2\pi}{L} n \equiv k_n^{(\mathrm{I})} (n \in \mathbb{N}_0) \tag{11}$$

   Il n'est nécessaire d'imposer que une des deux conditions car les fonctions sont paires ou impaires, l'autre condition sera automatiquement satisfaite.

4. Finalement, nous imposons que les fonction d'onde soient normées, on trouve

$$A^{(\mathrm{P})} = \frac{1}{\sqrt{2L}}, \tag{12}$$
$$A^{(\mathrm{I})} = -\frac{i}{\sqrt{2L}}. \tag{13}$$

Les solutions sont finalement

$$\varphi_n^{(\mathrm{P})}(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\cos\left(k_n^{(\mathrm{P})}x\right), \qquad (n \in \mathbb{N}) \tag{14}$$
$$\varphi_n^{(\mathrm{I})}(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(k_n^{(\mathrm{I})}x\right), \qquad (n \in \mathbb{N}_0). \tag{15}$$

2.2 Méthode B

1. On résout l'équation (2) dans la région $[0, L/2]$. La solution générale est

$$\varphi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \qquad A, B \in \mathbb{C}. \tag{16}$$

2. On prolonge cette solution sur tout $[-L/2, L/2]$. Il existe deux manières de la prolonger :

$$\text{Paire : } \varphi^{(\mathrm{P})}(x) = \begin{cases} A^{(\mathrm{P})}e^{-ikx} + B^{(\mathrm{P})}e^{ikx}, x < 0 \\ A^{(\mathrm{P})}e^{ikx} + B^{(\mathrm{P})}e^{-ikx}, x > 0 \end{cases} \tag{17}$$
$$\text{Impaire : } \varphi^{(\mathrm{I})}(x) = \begin{cases} -A^{(\mathrm{I})}e^{-ikx} - B^{(\mathrm{I})}e^{ikx}, x < 0 \\ A^{(\mathrm{I})}e^{ikx} + B^{(\mathrm{I})}e^{-ikx}, x > 0. \end{cases} \tag{18}$$

3. Après l'étape précédente, il faut s'assurer que la fonction résultat est toujours C^1 partout, et en particulier en $x = 0$. On commence donc par imposer que les solutions soient continues :

$$\varphi^{(\mathrm{P})}(0^+) - \varphi^{(\mathrm{P})}(0^-) = 0 : \text{ toujours satisfait} \tag{19}$$
$$\varphi^{(\mathrm{P})}(0^+) - \varphi^{(\mathrm{I})}(0^-) = 0 \Rightarrow A^{(\mathrm{I})} = -B^{(\mathrm{I})} \tag{20}$$

et ensuite qe leur dérivée soit continue :

$$\partial_x \varphi^{(\mathrm{P})}(0^+) - \partial_x \varphi^{(\mathrm{P})}(0^-) = 0 \Rightarrow A^{(\mathrm{P})} = B^{(\mathrm{P})} \tag{21}$$

$$\partial_x \varphi^{(\mathrm{P})}(0^+) - \partial_x \varphi^{(\mathrm{I})}(0^-) = 0 : \text{ toujours satisfait} \tag{22}$$

On obtient donc les solutions suivantes :

$$\varphi^{(\mathrm{P})}(x) = 2A^{(\mathrm{P})}\cos(kx), \tag{23}$$

$$\varphi^{(\mathrm{I})}(x) = 2iA^{(\mathrm{I})}\sin(kx). \tag{24}$$

À ce stade, nous avons obtenu exactement les mêmes expressins qu'à l'étape 2 de la méthode A. il ne reste plus qu'à imposer les conditions aux bords et la normalisation, exactement comme dans la méthode A, et tous els résultats seront les mêmes.

4. On impose les conditions aux bords : voir étape 3 de la méthode A.
5. Nous imposons la normalization : voir étape 4 de la méthode A.

Les solutions finales sont exactement les mêmes que celles obtenues par la méthode A : (14) et (15).

2.3 Comparaison des méthodes

Nous pouvons conclure que les deux méthodes sont exactement équivalentes. Cependant, cela vient du fait que, dans la méthode B, nous avons pensé à imposé que que la solution soit C^1 en $x = 0$. C'est ce critère qui nous permet de retrouver les mêmes expression que dans la méthode A. Cette étape n'était pas nécessaire dans la méthode A car, par construction [1], les solutions sont C^1 partout.

3 Ajout d'une barrière infiniment mince

Si l'on ajoute une barrière de potentielle infiniment mince au milieu du puit de potentiel, la fonction d'onde n'est plus C^1 en $x = 0$. Elle est continue, mais sa dérivée est discontinue et la condition de raccord dépend de la barrière de potentielle. Comme la fonction d'onde n'est plus C^1, on ne peut pas utiliser la méthode A, ni la méthode ou l'ont ne tient pas compte de la syémtire. En effet, ces méthodes ne peuvent que donner lieu que à des soltuion C^1 partout, par construction.

1. On résout directement dans le puit entier.