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.

1 Résolution sans symétrie

2 Résolution avec symétrie : méthode A

3 Résolution avec symétrie : méthode B

4 Ajout d'une barrière infiniment maince