

Puits de potentiel infini entre $-a$ et a

Mécanique Quantique

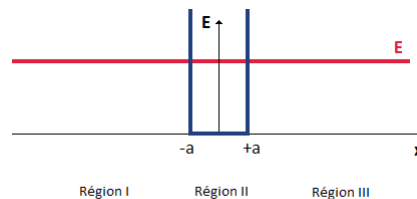
Hossein Rahimzadeh

8/30/2008

Puits de potentiel infini en une dimension entre -a et a

$$V(x) = \begin{cases} \infty & , \quad x < -a \\ 0 & , \quad -a < x < a \\ \infty & , \quad x > a \end{cases}$$

Le cas $E > 0$



Région I			Région II			Région III		
$\hat{H}u(x) = Eu(x)$			$\hat{H}u(x) = Eu(x)$			$\hat{H}u(x) = Eu(x)$		
$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] u(x) = Eu(x)$			$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] u(x) = Eu(x)$			$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] u(x) = Eu(x)$		
$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} u(x) + V(x)u(x) = Eu(x)$			$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} u(x) + V(x)u(x) = Eu(x)$			$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} u(x) + V(x)u(x) = Eu(x)$		
$V(x) = \infty$			$V(x) = 0$			$V(x) = \infty$		
			$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} u(x) = Eu(x)$					
			$\frac{d^2}{dx^2} u(x) + \frac{2mE}{\hbar^2} u(x) = 0$					
			$\frac{d^2}{dx^2} u(x) + k^2 u(x) = 0 \text{ où } k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$					
Pour les états pairs et impairs : $u_I(x) = 0$			Pour les états pairs : $u_{II}(x) = B \cos(kx) \text{ où } k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ Pour les états impairs : $u_{II}(x) = A \sin(kx) \text{ où } k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$			Pour les états pairs et impairs : $u_{III}(x) = 0$		

Première possibilités, les solutions paires :

Puisqu'il y a une symétrie selon l'axe $y = 0$, on aura :

$$A = 0$$

Donc,

$$u_I(x) = 0$$

$$u_{II}(x) = B \cos(kx) \text{ où } k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$u_{III}(x) = 0$$

Les conditions de continuités :

Puisque le potentiel est symétrique on aura besoin aux conditions de continuités à seulement une borne :

À $x = a$:

$$u_{II}(a) = u_{III}(a) \Rightarrow B \cos(ka) = 0 \Rightarrow \cos(ka) = 0 \Rightarrow k_n a = \frac{n\pi}{2}, n = 1, 3, 5, \dots \Rightarrow k_n = \frac{n\pi}{2a}, n = 1, 3, 5, \dots$$

On trouve E_n :

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \Rightarrow \left(\frac{n\pi}{2a} \right)^2 = \frac{2mE_n}{\hbar^2}, n = 1, 3, 5, \dots$$

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{8ma^2}, n = 1, 3, 5, \dots$$

On trouve les fonctions propres $u_n(x)$:

$$u_n(x) = B_n \cos\left(\frac{n\pi}{2a}x\right), n = 1, 3, 5, \dots$$

On trouve B_n :

Les fonctions propres $u_n(x)$ sont orthonormées :

$$\int_{-a}^a dx u_m^*(x) u_n(x) = \delta_{mn}$$

$$\int_{-a}^a dx \left[B_m \cos\left(\frac{m\pi}{2a}x\right) \right]^* B_n \cos\left(\frac{n\pi}{2a}x\right) = \delta_{mn}$$

$$B_m B_n \int_{-a}^a dx \cos\left(\frac{m\pi}{2a}x\right) \cos\left(\frac{n\pi}{2a}x\right) = \delta_{mn}$$

$$B_n^2 \int_{-a}^a dx \cos^2\left(\frac{n\pi}{2a}x\right) = 1, m = n$$

$$B_n^2 a = 1$$

Donc,

$$B_n = \frac{1}{\sqrt{a}}, n = 1, 2, 3, \dots$$

Les fonctions propres :

$$u_n(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \cos\left(\frac{n\pi}{2a}x\right), n = 1, 3, 5, \dots$$

Deuxième possibilités, les solutions impaires :

Puisqu'il y a une symétrie selon l'origine, on aura :

$$B = 0$$

Donc,

$$u_l(x) = 0$$

$$u_{II}(x) = A \sin(kx) \text{ où } k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$u_{III}(x) = 0$$

Les conditions de continuités :

Puisque le potentiel est symétrie on aura besoin aux conditions de continuités à seulement une borne :

À $x = a$:

$$u_{II}(a) = u_{III}(a) \Rightarrow A \sin(ka) = 0 \Rightarrow \sin(ka) = 0 \Rightarrow k_n a = \frac{n\pi}{2}, n = 2, 4, 6, \dots \Rightarrow k_n = \frac{n\pi}{2a}, n = 2, 4, 6, \dots$$

On trouve E_n :

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \Rightarrow \left(\frac{n\pi}{2a} \right)^2 = \frac{2mE_n}{\hbar^2}, n = 2, 4, 6, \dots$$

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{8ma^2}, n = 2, 4, 6, \dots$$

On trouve les fonctions propres $u_n(x)$:

$$u_n(x) = A_n \sin\left(\frac{n\pi}{2a} x\right), n = 2, 4, 6, \dots$$

On trouve A_n :

Les fonctions propres $u_n(x)$ sont orthonormées :

$$\int_{-a}^a dx u_m^*(x) u_n(x) = \delta_{mn}$$

$$\int_{-a}^a dx \left[A_m \sin\left(\frac{m\pi}{2a}x\right) \right]^* A_n \sin\left(\frac{n\pi}{2a}x\right) = \delta_{mn}$$

$$A_m A_n \int_{-a}^a dx \sin\left(\frac{m\pi}{2a}x\right) \sin\left(\frac{n\pi}{2a}x\right) = \delta_{mn}$$

$$A_n^2 \int_{-a}^a dx \sin^2\left(\frac{n\pi}{2a}x\right) = 1, \quad m = n$$

$$A_n^2 a = 1$$

Donc,

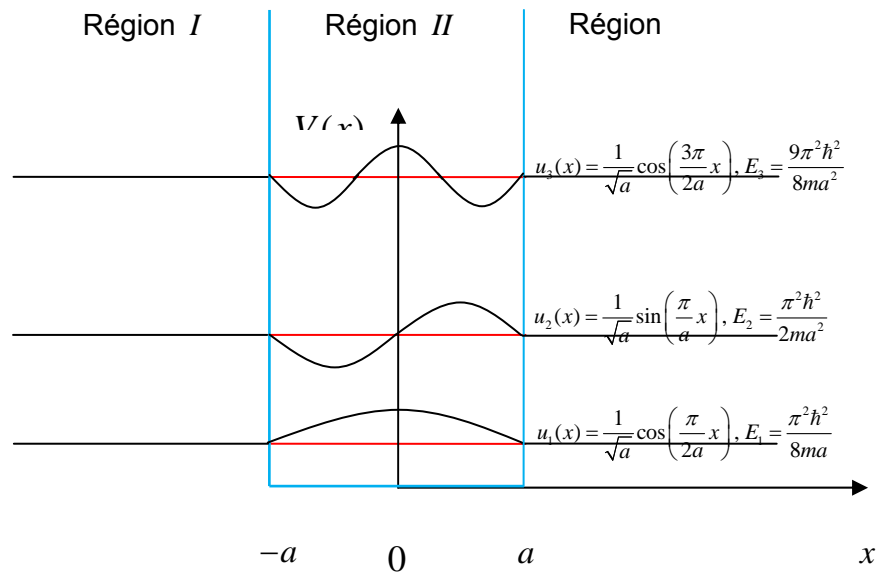
$$A_n = \frac{1}{\sqrt{a}}, \quad n = 2, 4, 6, \dots$$

Les fonctions propres :

$$u_n(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{2a}x\right), \quad n = 2, 4, 6, \dots$$

Alors,

$$u_n(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{a}} \cos\left(\frac{n\pi}{2a}x\right), & n = 1, 3, 5, \dots \\ \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{2a}x\right), & n = 2, 4, 6, \dots \end{cases}, \quad E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{8ma^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$



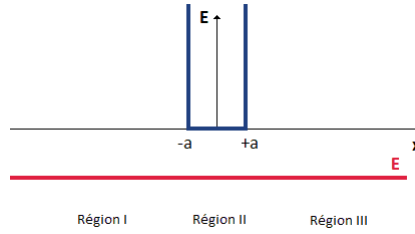
La solution générale :

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \left[\cos\left(\frac{\pi}{2a}x\right) + \sin\left(\frac{\pi}{a}x\right) + \cos\left(\frac{3\pi}{2a}x\right) + \sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right) + \dots \right]$$

Et dans le temps :

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{a}} \left[\cos\left(\frac{\pi}{2a}x\right) + \sin\left(\frac{\pi}{a}x\right) + \cos\left(\frac{3\pi}{2a}x\right) + \sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right) + \dots \right] e^{\frac{-iE_n t}{\hbar}}, E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{8ma^2}$$

Le cas $E < 0$



Région I		Région II		Région III
$\hat{H}u(x) = Eu(x)$		$\hat{H}u(x) = Eu(x)$		$\hat{H}u(x) = Eu(x)$
$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] u(x) = Eu(x)$		$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] u(x) = Eu(x)$		$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] u(x) = Eu(x)$
$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} u(x) + V(x)u(x) = Eu(x)$		$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} u(x) + V(x)u(x) = Eu(x)$		$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} u(x) + V(x)u(x) = Eu(x)$
$V(x) = \infty$		$V(x) = 0$		$V(x) = \infty$
	Frontière $X = -a$	$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} u(x) = Eu(x)$	Frontière $X = a$	
		$\frac{d^2}{dx^2} u(x) - \frac{2m E }{\hbar^2} u(x) = 0$		
		$\frac{d^2}{dx^2} u(x) + \kappa^2 u(x) = 0$ où $\kappa^2 = \frac{2m E }{\hbar^2}$		
$u_I(x) = 0$		$u_{II}(x) = Ae^{\kappa x} + Be^{-\kappa x}$ où $\kappa^2 = \frac{2m E }{\hbar^2}$		$u_{III}(x) = 0$

Les conditions de continuités :

À $x = -a$:

$$1. \quad u_I(-a) = u_{II}(-a) \Rightarrow 0 = Ae^{-\kappa a} + Be^{\kappa a}$$

À $x = a$:

$$2. \quad u_{II}(a) = u_{III}(a) \Rightarrow Ae^{\kappa a} + Be^{-\kappa a} = 0$$

$$\begin{pmatrix} e^{-\kappa a} & e^{\kappa a} \\ e^{\kappa a} & e^{-\kappa a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{Alors, Il n'y a pas de solution pour } E < 0$$