# Physique Générale : Petite classe $n^o2$

**PARTICULE DANS UN PUITS DE POTENTIEL CARRE**

Cette séance est la première étude d'un **état lié stationnaire** . Nous nous restreignons ici à **une seule dimension** et nous cherchons à déterminer le comportement d'une particule **prisonnière d'un puits de potentiel attractif** «**carré**» . Il ne s'agit pas d'un problème purement scolaire ; ce peut être par exemple la modélisation (grossière mais conceptuellement utile) d'un électron de valence dans un cristal métallique.[1]

## 1 Position du problème

Une particule de masse $m$ est soumise au potentiel à une dimension défini en fonction de l'abscisse $x$ de la particule selon :

- $V(x) = 0$ pour $x < -\frac{a}{2}$ (région $E_1$) ;
- $V(x) = -V_0$ pour $-\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2}$ (région $P$ ou «puits de potentiel») ; $V_0 > 0$ ;
- $V(x) = 0$ pour $x > \frac{a}{2}$ (région $E_2$) .

On appelle $p$ l'impulsion de la particule. On se place dans le cas où son énergie totale $E$ (non relativiste) est **négative** , c'est-à-dire celui où la particule est prisonnière du puits. Décrire rapidement le mouvement correspondant en Physique Classique. Montrer qu'en Physique Quantique, un état stationnaire (donc stable) ne peut être un état de $x$ ou de $p$ bien défini. Montrer que l'énergie minimale est strictement supérieure à $-V_0$.

## 2 Quantification de l'énergie

On utilisera les notations suivantes :

$$\alpha^2 = \frac{2m \mid E \mid}{\hbar^2} \; ; \; k_0^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} \; ; \; k^2 = \frac{2m\,(V_0 - \mid E \mid)}{\hbar^2}$$

1. Ecrire le hamiltonien de la particule dans la représentation $x$, c'est-à-dire l'opérateur représentant l'énergie et agissant sur l'amplitude de probabilité (ou fonction d'onde) en $x$, soit $\psi(x)$. Ecrire l'équation aux valeurs propres du hamiltonien dans les trois régions $P, E_1, E_2$.

2. Comment se traduisent :

   – l'exigence que $\psi(x)$ soit de carré sommable ;
   – l'exigence que $\psi(x)$ soit continue et à dérivée continue?

   Que peut-on dire de la probabilité de présence de la particule dans les régions $E_1$ et $E_2$?

3. Montrer que ces conditions impliquent une contrainte sur l'énergie que l'on mettra sous la forme $F(k,a) = \frac{k}{k_0}$ , où :

   - $F(k,a) = \mid \cos(\frac{ka}{2}) \mid$ lorsque $\tan(\frac{ka}{2}) > 0$ ;

1. Nous retrouverons cet exemple dans le cours de Physique Statistique au Second Semestre.

- $F(k,a) = \mid \sin(\frac{ka}{2}) \mid$ lorsque $\tan(\frac{ka}{2}) < 0$.

Montrer graphiquement que l'énergie est quantifiée et qu'il existe toujours un nombre fini d'états liés stationnaires. Calculer ce nombre en fonction des caractéristiques du potentiel $k_0$ et $a$.

4. Montrer que les fonctions propres du hamiltonien trouvées précédemment sont soit paires, soit impaires. Pouvait-on le prévoir sans calcul?

## 3 Puits de potentiel infiniment profond

On se place maintenant dans le cas où la valeur de $V_0$ peut être considérée comme infinie et l'on exprime l'énergie à partir du «fond» du puits, c'est-à-dire par la quantité $\varepsilon = V_0 - \mid E \mid$ qui reste finie.

1. Montrer que les états stationnaires ont des énergies $\varepsilon_n$ dépendant d'un entier $n$. On définira cet entier de façon que la parité de la fonction d'onde associée $\psi_n(x)$ soit $(-1)^n$. Exprimer $\varepsilon_n$ en fonction de $m$, $a$ et $n$.

2. Montrer qu'on peut ici négliger la probabilité de présence de la particule dans les régions $E_1$ et $E_2$. Donner la forme de $\psi_n(x)$ dans la région $P$ ; on distinguera les cas des fonctions paires et impaires.

3. Trouver l'amplitude de probabilité en $p$ (soit $\phi_n(p)$) correspondant à l'état décrit par $\psi_n(x)$; on se placera par exemple dans le cas d'une fonction paire. Que peut-on dire de la loi de probabilité de l'impulsion $p$ quand $n$ est très grand (limite des grands nombres quantiques)? Quelle propriété classique retrouve-t-on alors?

## 4 Réflexions à approfondir après la Petite Classe

- Amplitudes de probabilité en $x$ (ou «fonction d'onde d'espace» ou «orbitale») et en $p$ (ou «fonction d'onde en impulsion») ; elles représentent **la même information** puisqu'elles se déduisent l'une de l'autre par transformation de Fourier. Cette relation entre les amplitudes implique pour les lois de probabilité de $x$ et de $p$ les inégalités de Heisenberg : $\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$.

- Les états propres du hamiltonien sont des états stationnaires donc stables au moins dans l'approximation utilisée; d'où leur importance dans l'étude de la matière stable (atomes,molécules etc...).

- Opérateur hamiltonien et constantes du mouvement : si une quantité physique est représentée par un opérateur commutant avec le hamiltonien, il existe des états stationnaires pour lesquels cette quantité est bien définie ; elle reste alors constante puisque l'état est stationnaire. Exemple de la «parité» dans l'exercice précédent.

- Origine de la quantification de l'énergie pour les états liés : rôle des conditions aux limites ; analogie avec la physique ondulatoire classique (cordes vibrantes etc...).

- Limite classique et grands nombres quantiques.