Corrigé de la petite classe $n^o 2$
PUITS DE POTENTIEL CARRÉ

1 Position du problème

La particule classique va et vient entre les deux "parois" qu'elle ne peut franchir puisque l'énergie cinétique doit rester non négative : $T = mv^2/2 = E - V = V_0 - \mid E \mid$. Le va-et-vient se fait à vitesse constante :

$$v = \left(\frac{2(V_0 - \mid E \mid)}{m} \right)^{1/2} \quad \text{et} \quad p = (2m(V_0 - \mid E \mid))^{1/2}$$

En physique quantique, le hamiltonien $\hat{H}$ ne commute ni avec $\hat{p}$ ($V(x)$ est variable), ni avec $\hat{x}$ (présence de $\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$ dans l'énergie cinétique). Donc, si E est fixée, ni x, ni p ne sont bien définis. On peut contraindre la valeur moyenne de l'énergie cinétique T à l'aide des inégalités de Heisenberg en se rappelant que $< p >= 0$ par symétrie :

$$< T >= \frac{< p^2 >}{2m} = \frac{\Delta p^2}{2m} \geq \frac{\hbar^2}{8m\Delta x^2}$$

Le dernier terme est de l'ordre de $\frac{\hbar^2}{ma^2}$. On a donc l'inégalité stricte : $E = T + V > -V_0$.

2 Quantification de l'énergie

1. Le hamiltonien s'écrit : $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)$. L'équation aux valeurs propres de $\hat{H}$ s'écrit alors dans les différentes régions :

   - $(E_1$ et $E_2)$: $-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi'' = - \mid E \mid \Psi$, soit $\Psi'' - \alpha^2 \Psi = 0$.
   - (P) : $-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi'' - V_0 \Psi = - \mid E \mid \Psi$, soit $\Psi'' + k^2\Psi = 0$.

2. Les solutions s'en déduisent immédiatement ; les exponentielles "explosives" ($e^{-\alpha x}$ dans E_1 et $e^{\alpha x}$ dans E_2) sont cependant exclues puisqu'on veut avoir des fonctions normalisables.

   - (E_1) : $\Psi = \lambda e^{\alpha x}$
   - (E_2) : $\Psi = \mu e^{-\alpha x}$
   - P : $\Psi = A \cos(kx + \phi)$.

On notera que la présence de la particule dans les régions E_1 et E_2 (interdites en physique classique) est maintenant possible, quoique confinée à des distances des parois de l'ordre de $1/\alpha$, soit quelques longueurs d'onde de de Broglie. On a finalement 4 constantes d'intégration (λ, μ, A et ϕ), mais aussi 4 relations spécifiant la continuité de Ψ et de sa dérivée première[1] en $x = a/2$ et $x = -a/2$. Si on avait écrit la solution dans la région P sous forme d'une combinaison linéaire de e^{ikx} et e^{-ikx}, ces conditions se traduiraient par un système linéaire et homogène dont il faut rejeter la solution banale en écrivant que le déterminant associé est nul. On va donc obtenir une relation entre α et k, c'est-à-dire une contrainte sur la valeur propre de l'énergie E. On vérifie ainsi que les conditions aux limites imposent la quantification de l'énergie comme celle de la fréquence en physique ondulatoire classique. Cette contrainte étant vérifiée, les solutions sont alors définies à une constante multiplicative près qui est fixée par la normalisation de $\Psi(x)$. Toutefois, il n'est pas nécessaire d'écrire un déterminant 4×4 pour arriver au résultat. Les conditions de continuité de Ψ et de Ψ' s'écrivent :

- en $x = -a/2$; sur Ψ : $A\cos(-ka/2 + \phi) = \lambda e^{-\alpha a/2}$;
  et sur Ψ' : $-kA\sin(-ka/2 + \phi) = \lambda\alpha e^{-\alpha a/2}$.

- en $x = a/2$; sur Ψ : $A\cos(ka/2 + \phi) = \mu e^{-\alpha a/2}$;
  et sur Ψ' : $-kA\sin(ka/2 + \phi) = -\mu\alpha e^{-\alpha a/2}$.

d'où l'on tire :

$$-k\tan(-ka/2 + \phi) = \alpha \quad \text{et} \quad -k\tan(ka/2 + \phi) = -\alpha$$

3. Il en résulte que : $-ka/2 + \phi = -ka/2 - \phi + n\pi$ où n est un entier, donc que $\phi = n\pi/2$. On distingue donc deux cas :

   – **Cas où n est pair** : $\phi = m\pi$
   Alors, $k\tan(ka/2) = \alpha = \sqrt{k_0^2 - k^2} > 0$ et $k_0^2 = \frac{k^2}{\cos^2(ka/2)}$ d'où $|\cos(ka/2)| = k/k_0$ avec $\tan(ka/2) > 0$; par suite, les intervalles permis pour ka sont $(0, \pi)$, $(2\pi, 3\pi)$ etc.

   – **Cas où n est impair** : $\phi = m\pi + \pi/2$
   Alors, $k\cot(ka/2) = -\alpha$ d'où $|\sin(ka/2)| = k/k_0$ avec $\tan(ka/2) < 0$; par suite, les intervalles permis pour ka sont $(\pi, 2\pi)$, $(3\pi, 4\pi)$ etc.

   On construira sans peine le graphe de la fonction $F(ka)$ qui vaut $|\cos(ka/2)|$ dans les intervalles $(0, \pi)$, $(2\pi, 3\pi)$ etc. et qui vaut $|\sin(ka/2)|$ dans les intervalles $(\pi, 2\pi)$, $(3\pi, 4\pi)$ etc. De fait, c'est toujours le même arc de courbe qui est translaté de π à partir de l'intervalle $(0, \pi)$. Une solution graphique du problème consiste à chercher l'intersection de ces arcs de courbe avec la droite de pente $1/k_0 a$. On vérifie immédiatement que si $k_0 < \pi/a$, il n'y a qu'un état lié. Plus généralement, le nombre d'états liés est donné par $E(k_0 a/\pi) + 1$ où $E(u)$ désigne la partie entière de u. Le

[1] L'équation aux valeurs propres montre que la dérivée seconde peut avoir des discontinuités finies, celles du potentiel, ce qui implique la continuité de Ψ et de sa dérivée première.

nombre d'états liés augmente si V_0 croît (puits de potentiel plus profond) ou si la largeur a augmente.

3 Puits de potentiel infiniment profond

1. Lorsque $V_0 \to \infty$, alors $k_0 \to \infty$ et $\alpha \to \infty$ mais k reste fini. La quantité $\epsilon = \hbar^2 k^2/(2m)$ mesure l'énergie prise à partir du fond du puits. Le nombre d'onde k est quantifié selon $k_n = (n+1)\pi/a$, l'entier n étant positif ou nul. Cette convention où n part de la valeur 0 présente l'avantage que la parité de n est aussi celle de la fonction $\Psi_n(x)$. On a donc :

$$\epsilon_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}(n+1)^2 \quad \text{avec} \quad n \geq 0 \quad \text{entier}$$

2. La petite partie des régions E_1 et E_2 où l'on pouvait trouver la particule a une dimension de l'ordre de $1/\alpha$ qui tend vers 0. L'amplitude de probabilité ne subsiste que dans le puits et s'annule sur les bords du puits ; la dérivée première de $\Psi_n(x)$ est maintenant discontinue en ces points : c'est la conséquence de la discontinuité *infinie* du potentiel.

$$\text{Pour } n \text{ pair on a : } \quad \Psi_n(x) = A \cos\left(\frac{(n+1)\pi}{a}x\right)$$

$$\text{Pour } n \text{ impair on a : } \quad \Psi_n(x) = A \sin\left(\frac{(n+1)\pi}{a}x\right)$$

La normalisation de $\Psi(x)$, c'est-à-dire la condition $\int_{-a/2}^{a/2} \mid \Psi_n(x) \mid^2 \; dx = 1$ impose la valeur de A, soit $A = \sqrt{2/a}$. On construira sans peine les courbes représentatives de la densité de probabilité de présence $\mid \Psi_n(x) \mid^2$: pour les valeurs élevées de n, on observera des franges comme dans les phénomènes d'ondes stationnaires en acoustique ou en optique. C'est que nous avons recherché les états propres du hamiltonien , donc des états stationnaires. Les états quasi-classiques où la particule va et vient entre deux parois ne sont pas stationnaires ; on peut les obtenir comme combinaisons linéaires d'états stationnaires.

3. Pour avoir la distribution statistique de l'impulsion de la particule, il faut calculer d'abord son amplitude de probabilité $\Phi_n(p)$ qui est la transformée de Fourier de $\Psi_n(x)$. Faisons le calcul dans le cas de n pair. On a donc :

$$\Phi_n(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-a/2}^{a/2} \exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right) \sqrt{2/a} \, \cos\left(\frac{(n+1)\pi}{a}x\right) \, dx$$

L'intégrale est prise uniquement sur la région P puisque la fonction $\Psi_n(x)$ est nulle en dehors. On développe alors le cosinus en demi-somme d'exponentielles à exposant imaginaire et on intègre sans difficulté pour trouver :

$$\Phi_n(p) = \frac{1}{\sqrt{\pi a \hbar}} \left[\frac{\sin\left(\frac{pa}{2\hbar} + (n+1)\pi/2\right)}{\frac{p}{\hbar} + (n+1)\pi/a} + \frac{\sin\left(\frac{pa}{2\hbar} - (n+1)\pi/2\right)}{\frac{p}{\hbar} - (n+1)\pi/a} \right]$$

Quand n est grand, les fonctions oscillatoires au second membres sont affectées d'un coefficient qui tend vers 0, sauf pour les deux valeurs de p qui annulent chacune un dénominateur : $p = \pm\frac{(n+1)\pi\hbar}{a}$. Pour ces valeurs, le terme entre crochets vaut 1 (limite de $(\sin u)/u$ quand $u \to 0$). La densité de probabilité $\mid \Phi_n(p) \mid^2$ présente donc deux pics étroits autour de ces valeurs et une allure oscillatoire avec une amplitude tendant vers 0 entre les deux pics. On retrouve ici (mais toujours sous forme stationnaire) les deux valeurs possibles (et opposées) de l'impulsion de la particule qui, à la limite classique, va et vient entre les deux "parois" $x = \pm a/2$.