Mécanique Quantique I, Corrigé 9

Assistants : joseph.saliba@epfl.ch & pierre.lugan@epfl.ch

Exercice 1 : Puits de potentiel asymétrique

1. Le hamiltonien du système est donnée par

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) \tag{1}$$

La projection sur la base $|x\rangle$ de l'équation de Schrödinger est donc donnée par :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right]\varphi(x) = E\varphi(x) \tag{2}$$

2. Dans la région I, $V(x) = 0$ et dans la région II, $V(x) = V_0$. Dans la région I, on trouve donc :

$$\varphi_I(x) = A_I e^{ikx} + B_I e^{-ikx} \qquad \text{où} \qquad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \tag{3}$$

Dans la région II, on trouve

$$\varphi_{II}(x) = A_{II} e^{ik'x} + B_{II} e^{-ik'x} \qquad \text{où} \qquad k' = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}} \tag{4}$$

Notez que si l'on est dans le cas $E < V_0$, cette formule reste correcte et k' devient imaginaire pur !

3. Afin que l'état soit lié, il faut que la fonction d'onde soit de carré sommable. Si k' est réel, l'intégrale de $|\varphi(x)|^2$ entre L et $+\infty$ diverge. On doit donc exiger que $E < V_0$.
4. Dans le cas d'un état lié,
   (a) Les conditions aux bords sont données par $\varphi(0) = 0$ et $\varphi(+\infty) = 0$. Ces deux conditions imposent $A_I + B_I = 0$ et $B_{II} = 0$ (dans la région 2, on choisit la racine k' telle que $\mathrm{Im}(k') > 0$). On a donc

$$\varphi_I(x) = 2iA_I \sin(kx) \qquad \text{et} \qquad \varphi_{II}(x) = A_{II} e^{-\kappa x} \tag{5}$$

   où $\kappa = -ik'$.

   (b) Les conditions de raccordement en L sont données par la continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée : $\varphi_I(L) = \varphi_{II}(L)$ et $\varphi'_I(L) = \varphi'_{II}(L)$. Ces conditions peuvent s'écrire sous forme matricielle comme :

$$\begin{pmatrix} 2i\sin(kL) & -e^{-\kappa L} \\ 2ik\cos(kL) & \kappa e^{-\kappa L} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_I \\ A_{II} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{6}$$

   Ce n'est qu'une écriture commode d'un système homogène de deux équations.

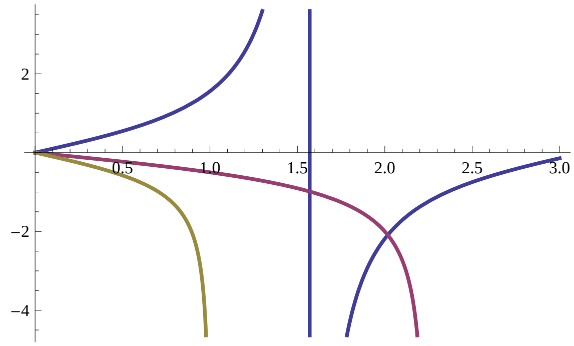
   (c) Il faut que le déterminant de la matrice précédente soit nul. Si tel n'était pas le cas, le système serait inversible et la solution serait donnée par $A_I = A_{II} = 0$ (solution triviale). On trouve donc

$$\tan(kL) = -\frac{k}{\kappa} \tag{7}$$

   où κ dépend de k ! En effet, on a :

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2} - k^2} \tag{8}$$

(d) Voici un exemple de résolution graphique avec $L = 1$ et $\frac{2mV_0}{\hbar^2} = 1$ (jaune) et 5 (violet) :



Pour qu'il n'existe pas d'état lié, il faut que l'équation

$$\tan(kL) = -\frac{\alpha k}{\sqrt{1-\alpha^2 k^2}} \quad \text{où} \quad \alpha = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2mV_0}} \tag{9}$$

n'admette pas de solution pour k. Le côté droit de l'équation est négatif et admet une asymptote verticale en $k = k_{\text{max}}$ avec $k$max $= 1/\alpha$ (pour rappel $k\alpha < 1$ puisque $E = \hbar^2 k^2/(2m) < V_0$). Si cette asymptote intervient avant que l'argument kL de la tangente soit $\pi/2$ alors il n'existe pas de solution liée (condition nécessaire et suffisante). La condition nécessaire et suffisante pour qu'il n'existe pas d'état lié s'écrit donc

$$\frac{1}{\alpha} = k_{\text{max}} < \frac{\pi}{2L} \tag{10}$$

ou encore

$$\frac{\pi^2\hbar^2}{8mL^2V_0} > 1. \tag{11}$$

Autrement dit, le potentiel n'a pas d'état lié lorsque le puits de la région I est trop peu profond (V_0 petit), ou trop étroit (L petit) ; qualitativement, c'est un résultat attendu puisque le confinement, dans un puits quantique de largeur L, relève d'autant plus les niveaux d'énergie par rapport au fond du puits (ici $E = 0$) que le puits est étroit, et les états ne demeurent liés dans le présent potentiel que tant que leur énergie est inférieure à V_0 ; on notera néanmoins que ce raisonnement n'est que qualitatif puisque les conditions aux bords dans la région I sont modifiées par rapport à celles qui s'imposeraient dans le cas d'un puits de potentiel de profondeur finie (ouvert des deux côtés) ou infinie.

5. Considérons maintenant un état non-lié.

(a) Nous avons à nouveau $\varphi(0) = 0$, mais plus de condition en $+\infty$. On trouve donc :

$$\varphi_I(x) = 2iA_I \sin(kx) \qquad \text{et} \qquad \varphi_{II}(x) = A_{II}e^{ik'x} + B_{II}e^{-ik'x} \tag{12}$$

(b) Les conditions de raccordement en L sont cette fois données par :

$$2iA_I \sin(kL) = A_{II}e^{ik'L} + B_{II}e^{-ik'L} \quad \text{et} \quad 2A_I k\cos(kL) = k'\left(A_{II}e^{ik'L} - B_{II}e^{-ik'L}\right) \tag{13}$$

(c) On a deux équations pour trois inconnues, le système est sous-déterminé et donc l'énergie n'est pas quantifiée. Pour ceux qui veulent s'en convaincre on peut comme auparavant écrire ce système sous forme matricielle et obtenir :

$$\begin{pmatrix} 2i\sin(kL) & -e^{ik'L} & -e^{-ik'L} \\ 2k\cos(kL) & -k'e^{ik'L} & k'e^{-ik'L} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_I \\ A_{II} \\ B_{II} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{14}$$

Comme le déterminant de la matrice est automatiquement nul, il n'y a pas de contrainte sur k et donc pas de quantification de l'énergie.

Exercice 2 : Puits de potentiel δ

1. L'équation de Schrödinger indépendante du temps projetée sur la base $|x\rangle$ est donnée par :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \alpha\delta(x)\right]\varphi(x) = E\varphi(x) \tag{15}$$

   Comme la distribution $\delta(x)$ ne contribue qu'en $x = 0$, le problème se résume à une particule libre si l'on ne considère que les régions $x > 0$ et $x < 0$. Dans ce cas on obtient :

$$\varphi_>(x) = A_> e^{ikx} + B_> e^{-ikx} \qquad \text{et} \qquad \varphi_<(x) = A_< e^{ikx} + B_< e^{-ikx} \tag{16}$$

   avec $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$. Si $E < 0$, cette solution reste valable avec k imaginaire pur.

2. Les conditions de raccordement en $x = 0$ sont les suivantes : la continuité de la fonction d'onde est exigée : $\varphi_>(0) = \varphi_<(0)$. Si l'on intègre l'équation de Schrödinger entre $-\epsilon$ et $+\epsilon$ et que l'on prend la limite $\epsilon \to 0$, on trouve :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi'(x)\Big|_{-\epsilon}^{+\epsilon} - \alpha\varphi(0) = 0 \quad \to \quad \varphi'_>(0) - \varphi'_<(0) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\varphi(0) \tag{17}$$

3. Si $E < 0$, on a

$$\varphi_>(x) = A_> e^{\kappa x} + B_> e^{-\kappa x} \qquad \text{et} \qquad \varphi_<(x) = A_< e^{\kappa x} + B_< e^{-\kappa x} \tag{18}$$

   avec $\kappa = \sqrt{\frac{-2mE}{\hbar^2}}$. Afin que l'état soit de carré sommable, il faut imposer $A_> = B_< = 0$. On a alors :

$$\varphi_>(x) = B_> e^{-\kappa x} \qquad \text{et} \qquad \varphi_<(x) = A_< e^{\kappa x} \tag{19}$$

4. Afin de trouver les niveaux d'énergie, il nous faut encore expliciter les conditions de raccordement en $x = 0$:

$$\begin{cases} \varphi_>(0) = \varphi_<(0) \quad \to \quad A_< = B_> \equiv A \\ \varphi'_>(0) - \varphi'_<(0) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\varphi(0) \quad \to \quad \kappa = \frac{m\alpha}{\hbar^2} \end{cases} \tag{20}$$

   En utilisant la définition de κ, on trouve que l'énergie est donnée par

$$\kappa = \sqrt{\frac{-2mE}{\hbar^2}} = \frac{m\alpha}{\hbar^2} \quad \to \quad E = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2} \tag{21}$$

   On constate donc qu'un puits δ ne contient qu'un seul état lié ! Les énergies $E > 0$ ne sont quant à elles pas quantifiées.