

Puits de Dirac

Une particule qui se déplace sur un axe (Ox) est soumise au potentiel représenté suivant :

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } |x| > \varepsilon \\ -\frac{aV_0}{2\varepsilon} & \text{sinon, avec } V_0 > 0 \end{cases}$$

On s'intéresse aux états stationnaires liés au puits (donc $E < 0$). Les fonctions d'onde peuvent s'écrire sous la forme :

$$\psi(x, t) = \varphi(x) e^{-iEt/\hbar}$$

- 1) Expliquer la forme proposée de $\psi(x, t)$.
- 2) Donner l'expression générale de $\varphi(x)$ dans tout l'espace.
- 3) Écrire les relations de continuités permettant, sans chercher à le faire, de déterminer l'expression complète de $\varphi(x)$ dans tout l'espace.

On cherche désormais à déterminer ce qu'il se passe lorsque $\varepsilon \rightarrow 0$: le puits de Dirac.

4) En exploitant la continuité de la fonction d'onde ainsi que sa normalisation, déterminer complètement $\varphi(x)$ dans tout l'espace. On pourra à ce stade laisser l'énergie E dans l'expression de $\varphi(x)$, elle sera déterminée dans la question suivante.

5) Pour déterminer la valeur de E il faut repartir de l'équation de Schrödinger. Intégrer l'équation de Schrödinger sur l'intervalle $]-\varepsilon, \varepsilon[$ et en déduire que, dans la limite où $\varepsilon \rightarrow 0$, on a :

$$\varphi'(0^+) - \varphi'(0^-) = \frac{2maV_0}{\hbar^2} \varphi(0)$$

Conclure sur la continuité de φ' en 0. En déduire l'unique valeur de E autorisée.



Correction

1) On cherche des états stationnaires, on peut donc écrire :

$$\psi(x, t) = \varphi(x) \times f(t)$$

On injecte cette solution dans l'équation de Schrödinger :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x) \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \varphi'' f + V(x) \varphi f = i\hbar \varphi f'$$

On sépare les variables :

$$\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\varphi''}{\varphi} + V(x)}_{\text{fonction de } x} = \underbrace{i\hbar \frac{f'}{f}}_{\text{fonction de } t} = E$$

Une fonction de x ne peut être égale à une fonction de t que si ces fonctions sont constantes. On pose E la constante, car homogène à une énergie. Ainsi :

$$\frac{df}{dt} = -\frac{iE}{\hbar} f(t) \Rightarrow \boxed{f(t) = e^{-iEt/\hbar}}$$

2) On sépare l'espace en 3 zones :

- Zone n°1 : $x < -\varepsilon$ où $V = 0$;
- Zone n°2 : $-\varepsilon < x < \varepsilon$ où $V = -\frac{aV_0}{2\varepsilon}$;
- Zone n°3 : $x > \varepsilon$ où $V = 0$.

Zone n°1 et 3 : hors du puits

L'équation de Schrödinger donne (rappel : $E < 0$) :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} = E\varphi \Rightarrow \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} - K'^2 \varphi = 0 \quad \text{avec : } K' = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$$

Ainsi :

$$\varphi(x) = A e^{K'x} + B e^{-K'x}$$

La fonction ne peut pas diverger en $\pm\infty$. On a donc :

$$\boxed{\varphi_1(x) = A e^{K'x} \quad \text{et} \quad \varphi_3(x) = B e^{-K'x}}$$

Zone n°2 : dans le puits

L'équation de Schrödinger donne (rappel : $E < 0$) :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} - \frac{aV_0}{2\varepsilon} \varphi = E\varphi$$

On ne s'intéresse qu'aux énergies comprise entre 0 et la profondeur du puits de potentiel (sinon $\psi = 0$), ie : $-\frac{aV_0}{2\varepsilon} < E < 0$. Ainsi :

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + K^2 \varphi = 0 \quad \text{avec : } K = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m \left(\frac{aV_0}{2\varepsilon} + E \right)}$$

Ainsi :

$$\boxed{\varphi_2(x) = C \cos(Kx) + D \sin(Kx)}$$

3) On a continuité de φ et de la dérivée en tout point de l'espace. Ainsi :

$$\begin{cases} \varphi(-\varepsilon^-) = \varphi(-\varepsilon^+) & \Rightarrow A e^{-K'\varepsilon} = C \cos(K\varepsilon) - D \sin(K\varepsilon) \\ \varphi(\varepsilon^-) = \varphi(\varepsilon^+) & \Rightarrow B e^{-K'\varepsilon} = C \cos(K\varepsilon) + D \sin(K\varepsilon) \\ \varphi'(-\varepsilon^-) = \varphi'(-\varepsilon^+) & \Rightarrow K' A e^{-K'\varepsilon} = K [C \sin(K\varepsilon) + D \cos(K\varepsilon)] \\ \varphi'(\varepsilon^-) = \varphi'(\varepsilon^+) & \Rightarrow -K' B e^{-K'\varepsilon} = K [-C \sin(K\varepsilon) + D \cos(K\varepsilon)] \end{cases}$$

4) Dans la limite où $\varepsilon \rightarrow 0$, les deux premières relations donne : $\boxed{A = B = C}$. On en déduit que :

$$\varphi(x) = \begin{cases} A & \text{si : } x = 0 \\ A e^{-K'|x|} & \text{sinon} \end{cases}$$

On détermine finalement A grâce à la normalisation de la fonction d'onde :

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x, t)|^2 dx \\ &= A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2K'|x|} dx \\ &= A^2 \left(\int_{-\infty}^0 e^{-2K'x} dx + \int_0^{+\infty} e^{2K'x} dx \right) \\ &= A^2 \left(\left[\frac{e^{2K'x}}{2K'} \right]_{-\infty}^0 + \left[\frac{e^{-2K'x}}{-2K'} \right]_0^{+\infty} \right) = \frac{A^2}{K'} \end{aligned}$$

Finalement :

$$\varphi(x) = \begin{cases} \sqrt{K'} & \text{si : } x = 0 \\ \sqrt{K'} e^{-K'|x|} & \text{sinon} \end{cases} \quad \text{avec : } K' = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$$

4) On se situe strictement dans le puits, donc :

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + K^2 \varphi = 0 \Rightarrow \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} dx + \frac{2m}{\hbar^2} \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} \left(\frac{aV_0}{2\varepsilon} + E \right) \varphi dx = 0$$

Puisque $\varepsilon \rightarrow 0$ et que φ est continue :

$$\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} \left(\frac{aV_0}{2\varepsilon} + E \right) \varphi dx = \left(\frac{aV_0}{2\varepsilon} + E \right) \times 2\varepsilon \varphi(0) = aV_0 \varphi(0)$$

On en déduit :

$$\left[\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right]_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} + \frac{2m}{\hbar^2} aV_0 \varphi(0) = 0 \Rightarrow \varphi'(0^+) - \varphi'(0^-) = -\frac{2maV_0}{\hbar^2} \varphi(0)$$

On constate donc que φ' est discontinu.

La relation précédente impose :

$$-2(K')^{3/2} = -\frac{2maV_0}{\hbar^2} (K')^{1/2} \Rightarrow K' = \frac{maV_0}{\hbar^2} \Rightarrow E = -\frac{ma^2V_0^2}{2\hbar^2}$$

Il y a bien un seul état stationnaire lié dans le puits de Dirac.