TD Physique Statistique n°2 - Particule dans un puits de potentiel infini

La démarche employée en physique statistique n'est pas limitée aux systèmes *classiques*. Elle s'applique tout aussi bien aux systèmes *quantiques*. Ce TD revient sur un des rares systèmes quantiques résolvables analytiquement : le puits de potentiel. Même si une approche statistique n'est pas utilisée ici, les résultats obtenus pourront être utilisés ultérieurement dans l'étude des gaz fermioniques, constitués d'un très grand nombre de particules.

Nous considérons une particule, de masse m, dans un puits de potentiel *unidimensionnel* et *infini*, orienté selon x. Le puits est localisé entre sur la zone $\left[-\frac{L}{2},+\frac{L}{2}\right]$. Le potentiel V est nul dans cette zone et infini hors de celle-ci (voir la figure).

Rappels de mécanique quantique : Il est impossible de décrire simultanément la particule en termes de position et de vitesse. La particule est alors caractérisée par sa fonction d'onde $\psi\left(\vec{r},t\right)$, qui dépend à la fois de l'espace et du temps. La quantité $\left|\psi\left(\vec{r},t\right)\right|^2$ décrit alors la densité de probabilité de présence la particule au point $\vec{r}$ et à l'instant t. La fonction d'onde est alors régie par l'équation de Schrödinger

$$i\hbar\frac{\partial\psi\left(\vec{r},t\right)}{\partial t}=\widehat{H}\psi\left(\vec{r},t\right)\ , \tag{1}$$

où $\widehat{H}$ est l'hamiltonien du système. L'hamiltonien est un opérateur qui décrit le système en termes énergétiques (énergies cinétique et potentielle). En mécanique classique, l'énergie cinétique d'une particule de masse m est donnée par $\frac{p^2}{2m}$, où p est la quantité de mouvement de la particule. En mécanique quantique, la quantité de mouvement est décrite par l'opérateur $\widehat{p}=-i\hbar\nabla$, où ∇ est l'opérateur vectoriel $\left(\frac{\partial .}{\partial x},\frac{\partial .}{\partial y},\frac{\partial .}{\partial z}\right)$. L'énergie potentielle est, elle, décrite de manière similaire en mécanique classique et en mécanique quantique. L'hamiltonien du système vaut alors $\widehat{H}=\frac{1}{2m}\widehat{p}^2+V$.

1. Dans quelle région de l'espace la particule est-elle localisée ? Écrire alors l'équation de Schrödinger *unidimensionnelle* vérifiée par $\psi\left(x,t\right)$ pour la particule. Donner les valeurs de la fonction d'onde $\psi\left(x,t\right)$ en $x=-\frac{L}{2}$ et $x=\frac{L}{2}$ (conditions aux limites).
2. Vérifier que la fonction d'onde $\psi\left(x,t\right)=A\cos\left(kx\right)\exp(-i\omega t)$ (où A est une constante) est une *solution stationnaire* du problème. En déduire la relation entre k et ω. De la même manière, on peut montrer que les fonctions d'onde de la forme $\psi\left(x,t\right)=B\sin\left(kx\right)\exp(-i\omega t)$ sont solutions.
3. On cherche la forme générale des solutions stationnaires de l'équation de Schrödinger pour la particule. Les solutions stationnaires peuvent s'écrire sous la forme $\psi\left(x,t\right)=$

$\varphi(x)\,\chi(t)$, avec $|\chi(t)| = \mathrm{c}^{\mathrm{te}}$. La fonction $\varphi(x)$ vérifie alors l'équation de Schrödinger indépendante du temps $\widehat{H}\varphi(x) = E\varphi(x)$, où les différentes valeurs possibles de E sont les énergies propres de la particule.
Vérifier que la solution générale de l'équation de Schrödinger indépendante du temps prend la forme $\varphi(x) = A\cos(kx + \phi)$. Donner alors la relation entre k et E.

4. En utilisant les conditions aux limites, montrer que k vérifie nécessairement $k = n\frac{\pi}{L}$, $, n \in \mathbb{Z}^*$. Quelles sont les énergies associées à ces différentes valeurs de k ?
5. Calculer A pour que $\psi(x,t)$ (ou de manière équivalente $\varphi(x)$) soit normalisé.
6. Calculer l'écart-type $\Delta x = \sqrt{\overline{(\Delta x)^2}}$ de la variable position x de la particule dans le puits de potentiel. On rappelle que $\overline{(\Delta x)^2} = \overline{x^2} - \overline{x}^2$.
7. Calculer l'écart-type $\Delta p = \sqrt{\overline{(\Delta p)^2}}$ de la variable quantité de mouvement p de la particule dans le puits de potentiel. Pour cela il sera judicieux de remarquer que $\overline{p} = 0$. Quel argument physique permet d'affirmer cela ?
8. Que vaut la quantité $\Delta x \Delta p$? Vérifie-t-elle la relation d'indétermination d'Heisenberg $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$?