c. À partir de quelles valeurs de E faudrait-il tenir compte de la dimension finie des noyaux ?

Il faut tenir compte de la dimension finie des noyaux à partir du moment où $\lambda \sim l$, ce qui correspond à des énergies telles que :

$$\boxed{E = \frac{(2\pi\hbar)^2}{2M_n\lambda^2} \sim \frac{(2\pi\hbar)^2}{2M_n l^2} = \frac{E_1}{4}}$$

du fait que

$$E_1 = \frac{(2\pi\hbar)^2}{2M_n l^2 \sin^2\theta} \sim \frac{4(2\pi\hbar)^2}{2M_n l^2}$$

1.2 État lié d'une particule dans un « puits en fonction delta »

Énoncé.

On considère une particule dont l'hamiltonien H s'écrit :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} - \alpha\delta(x)$$

où α est une constante positive, dont on donnera les dimensions.

a. Intégrer l'équation aux valeurs propres de H entre $-\varepsilon$ et $+\varepsilon$; en faisant tendre ε vers 0, montrer que la dérivée de la fonction propre $\varphi(x)$ subit en $x = 0$ une discontinuité que l'on calculera en fonction de α, m et $\varphi(0)$.

b. On suppose que l'énergie E de la particule est négative (état lié) ; $\varphi(x)$ peut alors s'écrire :

$$\begin{array}{ll} x < 0 & \varphi(x) = A_1 e^{\rho x} + A_1' e^{-\rho x} \\ x > 0 & \varphi(x) = A_2 e^{\rho x} + A_2' e^{-\rho x} \end{array}$$

où ρ est une constante que l'on exprimera en fonction de E et m. En utilisant les résultats de la question précédente, calculer la matrice M définie par :

$$\begin{pmatrix} A_2 \\ A_2' \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} A_1 \\ A_1' \end{pmatrix}$$

Écrire alors que $\varphi(x)$ est de carré sommable, et en déduire les valeurs possibles de l'énergie. Calculer les fonctions d'onde normées correspondantes.

c. Représenter graphiquement ces fonctions d'onde. Donner un ordre de grandeur de leur largeur Δx.

d. Quelle est la probabilité $\overline{\mathrm{d}\mathscr{P}}(p)$ pour qu'une mesure de l'impulsion de la particule dans un des états stationnaires normés calculés plus haut donne un résultat compris entre p et $p + \mathrm{d}p$? Pour quelle valeur de p cette probabilité est-elle maximale ? Dans quel domaine, de dimension Δp, prend-elle des valeurs notables ? Donner un ordre de grandeur du produit $\Delta x \cdot \Delta p$.

Commentaires.

Cet exercice considère un potentiel « limité » : un puits de potentiel de profondeur infinie, mais infiniment étroit, c'est-à-dire un puits en fonction delta (Attention : la fonction delta n'est pas sans dimension, d'où la question préliminaire sur l'analyse dimensionnelle).
Avant de commencer à résoudre cet exercice, il est important de se demander ce que donnerait la mécanique classique dans cette situation. Du fait que l'énergie de la particule est négative, la mécanique classique impose à la particule de rester piégée dans le puits de potentiel en fonction delta, et donc d'être localisée en $x = 0$ dans un état lié.
Considérons maintenant le problème du point de vue de la mécanique quantique. Cet hamiltonien fournit des résultats et des interprétations très intéressants en utilisant des calculs directs dans un nombre très restreint de régions différentes de l'espace, ce qui signifie qu'il y a moins de constantes A_i à déterminer.
Les conditions aux limites (ou conditions de continuité) de chaque côté du puits ne sont néanmoins pas connues *a priori*. Elles doivent donc être établies en partant d'une situation connue et finie (question *a*).
Le reste de l'exercice est basé sur l'approche habituelle et constitue un superbe exercice d'application des notions fondamentales de la mécanique quantique, en plus d'offrir une interprétation des résultats analytiques.

Corrigé.

On considère une particule dont l'hamiltonien H s'écrit :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} - \alpha\delta(x)$$

où α est une constante positive, dont on donnera les dimensions.
L'hamiltonien H est l'opérateur énergie totale (du fait que $H\varphi(x) = E\varphi(x)$) et a donc les dimensions d'une énergie. On sait de plus que $\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x)\mathrm{d}x = 1$, et $\delta(x)$ a les dimensions de l'inverse d'une longueur. La constante α a donc les dimensions d'une énergie multipliée par une longueur et correspond à l'aire sous la courbe de la fonction delta.

a. Intégrer l'équation aux valeurs propres de H entre $-\varepsilon$ et $+\varepsilon$; en faisant tendre ε vers 0, montrer que la dérivée de la fonction propre $\varphi(x)$ subit en $x = 0$ une discontinuité que l'on calculera en fonction de α, m et $\varphi(0)$.

L'équation aux valeurs propres de H s'écrit :

$$H\varphi(x) = E\varphi(x) \Leftrightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\varphi(x)}{\mathrm{d}x^2} - \alpha\delta(x)\varphi(x) = E\varphi(x)$$

En intégrant cette équation entre $-\varepsilon$ et $+\varepsilon$, on obtient :

$$\begin{aligned}
& -\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon}\frac{\mathrm{d}^2\varphi(x)}{\mathrm{d}x^2}\mathrm{d}x - \alpha\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon}\delta(x)\varphi(x)\mathrm{d}x = E\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon}\varphi(x)\mathrm{d}x \\
\Leftrightarrow \quad & -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\mathrm{d}\varphi(+\varepsilon)}{\mathrm{d}x} - \frac{\mathrm{d}\varphi(-\varepsilon)}{\mathrm{d}x}\right] - \alpha\varphi(0) = E\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon}\varphi(x)\mathrm{d}x \\
\Leftrightarrow \quad & \frac{\mathrm{d}\varphi(+\varepsilon)}{\mathrm{d}x} - \frac{\mathrm{d}\varphi(-\varepsilon)}{\mathrm{d}x} = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\varphi(0) - \frac{2mE}{\hbar^2}\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon}\varphi(x)\mathrm{d}x
\end{aligned}$$

En faisant enfin tendre ε vers 0, on obtient :

$$\boxed{\lim_{\varepsilon\to 0}\left[\frac{\mathrm{d}\varphi(+\varepsilon)}{\mathrm{d}x} - \frac{\mathrm{d}\varphi(-\varepsilon)}{\mathrm{d}x}\right] = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\varphi(0)}$$

et la dérivée de la fonction propre $\varphi(x)$ subit en $x = 0$ une discontinuité valant $-\dfrac{2m\alpha}{\hbar^2}\varphi(0)$.

b. On suppose que l'énergie E de la particule est négative (état lié) ; $\varphi(x)$ peut alors s'écrire :

$$\begin{array}{ll} x < 0 & \varphi(x) = A_1 e^{\rho x} + A_1' e^{-\rho x} \\ x > 0 & \varphi(x) = A_2 e^{\rho x} + A_2' e^{-\rho x} \end{array}$$

où ρ est une constante que l'on exprimera en fonction de E et m. En utilisant les résultats de la question précédente, calculer la matrice M définie par :

$$\begin{pmatrix} A_2 \\ A_2' \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} A_1 \\ A_1' \end{pmatrix}$$

Écrire alors que $\varphi(x)$ est de carré sommable, et en déduire les valeurs possibles de l'énergie. Calculer les fonctions d'onde normées correspondantes.

Les fonctions d'onde de chaque côté du puits en fonction delta peuvent être calculées grâce à la relation établie à la question précédente, et ce sans avoir besoin de connaître l'expression de la fonction à l'intérieur du puits. Cela évite ainsi d'introduire deux constantes supplémentaires qui seraient nécessaires pour un puits de profondeur et de largeur finies. Notons :

$$\begin{array}{ll} x < 0 & \varphi_{\mathrm{I}}(x) = A_1 e^{\rho x} + A_1' e^{-\rho x} \\ x > 0 & \varphi_{\mathrm{II}}(x) = A_2 e^{\rho x} + A_2' e^{-\rho x} \end{array}$$

avec $\rho = \sqrt{\dfrac{-2mE}{\hbar^2}}$ du fait que l'équation aux valeurs propres de H peut s'écrire, pour $x < 0$ et $x > 0$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\varphi(x)}{\mathrm{d}x^2} - E\varphi(x) = 0 \Leftrightarrow \frac{\mathrm{d}^2\varphi(x)}{\mathrm{d}x^2} - \frac{-2mE}{\hbar^2}\varphi(x) = 0 \Leftrightarrow \frac{\mathrm{d}^2\varphi(x)}{\mathrm{d}x^2} - \rho^2\varphi(x) = 0$$

du fait que $E < 0$ par hypothèse. D'une part, la fonction $\varphi(x)$ est continue en $x = 0$, donc :

$$\varphi_{\mathrm{I}}(0) = \varphi_{\mathrm{II}}(0) \Leftrightarrow A_1 + A_1' = A_2 + A_2'$$

D'autre part, d'après les résultats de la question précédente, $\dfrac{\mathrm{d}\varphi(x)}{\mathrm{d}x}$ subit en $x = 0$ une discontinuité valant $-\dfrac{2m\alpha}{\hbar^2}\varphi(0)$, donc :

$$\frac{\mathrm{d}\varphi_{\mathrm{II}}(0)}{\mathrm{d}x} - \frac{\mathrm{d}\varphi_{\mathrm{I}}(0)}{\mathrm{d}x} = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\varphi(0) \Leftrightarrow \rho(A_2 - A_2' - A_1 + A_1') = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}(A_1 + A_1')$$

On a donc

$$\left\{\begin{array}{l} A_2 + A_2' = A_1 + A_1' \\ A_2 - A_2' = \left(1 - \dfrac{2m\alpha}{\rho\hbar^2}\right) A_1 - \left(1 + \dfrac{2m\alpha}{\rho\hbar^2}\right) A_1' \end{array}\right.$$

$$\Leftrightarrow \quad \left\{\begin{array}{l} A_2 = \left(1 - \dfrac{m\alpha}{\rho\hbar^2}\right) A_1 - \dfrac{m\alpha}{\rho\hbar^2} A_1' \\ A_2' = \dfrac{m\alpha}{\rho\hbar^2} A_1 + \left(1 + \dfrac{m\alpha}{\rho\hbar^2}\right) A_1' \end{array}\right.$$

Au final,

$$\begin{pmatrix} A_2 \\ A_2' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 - \dfrac{m\alpha}{\rho\hbar^2} & -\dfrac{m\alpha}{\rho\hbar^2} \\ \dfrac{m\alpha}{\rho\hbar^2} & 1 + \dfrac{m\alpha}{\rho\hbar^2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ A_1' \end{pmatrix}$$

et la matrice M telle que

$$\begin{pmatrix} A_2 \\ A_2' \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} A_1 \\ A_1' \end{pmatrix}$$

a pour expression

$$\boxed{M = \begin{pmatrix} 1 - \dfrac{m\alpha}{\rho\hbar^2} & -\dfrac{m\alpha}{\rho\hbar^2} \\ \dfrac{m\alpha}{\rho\hbar^2} & 1 + \dfrac{m\alpha}{\rho\hbar^2} \end{pmatrix}}$$

Pour être de carré sommable, $\varphi(x)$ doit être bornée lorsque $x \to \pm\infty$, ce qui implique $A_1' = A_2 = 0$ et donc

$$\begin{pmatrix} 0 \\ A_2' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 - \dfrac{m\alpha}{\rho\hbar^2} & -\dfrac{m\alpha}{\rho\hbar^2} \\ \dfrac{m\alpha}{\rho\hbar^2} & 1 + \dfrac{m\alpha}{\rho\hbar^2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

ce qui implique les deux conditions

$$\frac{m\alpha}{\rho\hbar^2} = 1 \text{ et } A_2' = A_1 = A$$

Les valeurs possibles de l'énergie sont données par

$$\rho = \frac{m\alpha}{\hbar^2} = \sqrt{\frac{-2mE}{\hbar^2}} \Rightarrow \frac{-2mE}{\hbar^2} = \frac{m^2\alpha^2}{\hbar^4} \Leftrightarrow \boxed{E = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}}$$

et il existe donc un seul état lié d'énergie $E = -\dfrac{m\alpha^2}{2\hbar^2}$. On peut calculer la valeur de A en écrivant que la fonction propre $\varphi(x)$ est normalisée :

$$\begin{aligned}
& \int_{-\infty}^{0} |\varphi_{\mathrm{I}}(x)|^2 \mathrm{d}x + \int_{0}^{+\infty} |\varphi_{\mathrm{II}}(x)|^2 \mathrm{d}x = 1 \\
\Leftrightarrow \quad & |A|^2 \int_{-\infty}^{0} e^{2\rho x} \mathrm{d}x + |A|^2 \int_{0}^{+\infty} e^{-2\rho x} \mathrm{d}x = 1 \\
\Leftrightarrow \quad & |A|^2 \left[\frac{1}{2\rho} + \frac{1}{2\rho}\right] = 1 \Leftrightarrow A = \sqrt{\rho} e^{i\varphi} = \sqrt{\frac{m\alpha}{\hbar^2}} e^{i\varphi}
\end{aligned}$$

En posant $\varphi = 0$ pour que A soit réel et positif, il n'existe donc qu'une seule fonction d'onde normalisée telle que :

$$\begin{aligned}
x < 0 \quad & \varphi_{\mathrm{I}}(x) = \sqrt{\frac{m\alpha}{\hbar^2}} e^{\frac{m\alpha}{\hbar^2} x} \\
x > 0 \quad & \varphi_{\mathrm{II}}(x) = \sqrt{\frac{m\alpha}{\hbar^2}} e^{-\frac{m\alpha}{\hbar^2} x}
\end{aligned}$$

que l'on peut écrire sous forme simplifiée

$$\boxed{\varphi(x) = \sqrt{\frac{m\alpha}{\hbar^2}} e^{-\frac{m\alpha}{\hbar^2}|x|}}$$

Les fonctions $\varphi_{\mathrm{I}}(x)$ et $\varphi_{\mathrm{II}}(x)$ sont toutes les deux des fonctions exponentielles décroissantes du fait que $E < 0$. Il s'agit en effet d'un état lié : la probabilité de trouver la particule en l'infini est nulle, et cette dernière reste au voisinage du puits en fonction delta et s'aventure dans la région qui est « interdite » par la mécanique classique.

c. Représenter graphiquement ces fonctions d'onde. Donner un ordre de grandeur de leur largeur Δx.

La fonction d'onde déterminée à la question *b* est représentée sur la figure 1.2.

En définissant Δx comme la largeur à mi-hauteur, on obtient :

$$\varphi(x) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{m\alpha}{\hbar^2}} \Leftrightarrow \sqrt{\frac{m\alpha}{\hbar^2}} e^{-\rho|x|} = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{m\alpha}{\hbar^2}} \Leftrightarrow -\rho|x| = -\ln 2 \Leftrightarrow |x| = \frac{\ln 2}{\rho}$$

et l'on a donc

$$\boxed{\Delta x = \frac{2\ln 2}{\rho} \simeq \frac{1{,}39}{\rho} \sim \frac{1}{\rho}}$$

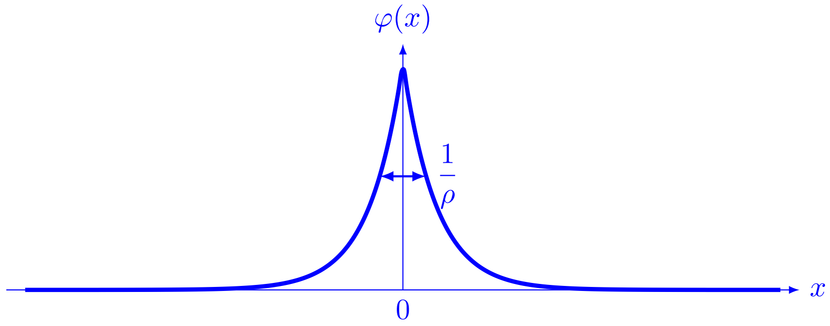

FIG. 1.2 – Représentation graphique de la fonction d'onde déterminée à la question *b*.

Ce résultat est cohérent avec l'idée selon laquelle la particule n'explore la région « interdite » que sur une distance caractéristique de l'ordre de $\dfrac{1}{\rho} = \dfrac{\hbar^2}{m\alpha}$ (l'analyse dimensionnelle de ρ montre que ρ a les dimensions de l'inverse d'une longueur).

d. Quelle est la probabilité $\overline{\mathrm{d}\mathscr{P}}(p)$ pour qu'une mesure de l'impulsion de la particule dans un des états stationnaires normés calculés plus haut donne un résultat compris entre p et $p + \mathrm{d}p$? Pour quelle valeur de p cette probabilité est-elle maximale ? Dans quel domaine, de dimension Δp, prend-elle des valeurs notables ? Donner un ordre de grandeur du produit $\Delta x \cdot \Delta p$.

La fonction propre en impulsion est la transformée de Fourier de la fonction propre en position, et l'on a donc

$$\begin{aligned}
\overline{\varphi}(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(x) e^{-ipx/\hbar} \mathrm{d}x \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{0} \varphi_{\mathrm{I}}(x) e^{-ipx/\hbar} \mathrm{d}x + \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{0}^{+\infty} \varphi_{\mathrm{II}}(x) e^{-ipx/\hbar} \mathrm{d}x \\
&= \frac{A}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{0} e^{\rho x} e^{-ipx/\hbar} \mathrm{d}x + \frac{A}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{0}^{+\infty} e^{-\rho x} e^{-ipx/\hbar} \mathrm{d}x \\
&= \frac{A}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{0} e^{(\rho - ip/\hbar)x} \mathrm{d}x + \frac{A}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{0}^{+\infty} e^{-(\rho + ip/\hbar)x} \mathrm{d}x \\
&= \frac{A}{\sqrt{2\pi\hbar}} \left[\frac{e^{(\rho - ip/\hbar)x}}{\rho - \dfrac{ip}{\hbar}} \right]_{-\infty}^{0} + \frac{A}{\sqrt{2\pi\hbar}} \left[- \frac{e^{-(\rho + ip/\hbar)x}}{\rho + \dfrac{ip}{\hbar}} \right]_{0}^{+\infty} \\
&= \frac{A}{\sqrt{2\pi\hbar}} \left(\frac{\hbar}{\rho\hbar - ip} + \frac{\hbar}{\rho\hbar + ip} \right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{2\rho A \hbar^2}{p^2 + \rho^2\hbar^2}
\end{aligned}$$

La probabilité $\overline{\mathrm{d}\mathscr{P}}(p)$ pour qu'une mesure de l'impulsion de la particule dans l'unique état stationnaire normé calculé à la question b donne un résultat compris entre p et $p + \mathrm{d}p$ peut donc s'exprimer comme

$$\boxed{\overline{\mathrm{d}\mathscr{P}}(p) = |\overline{\varphi}(p)|^2 \mathrm{d}p = \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{2\rho A\hbar^2}{p^2 + \rho^2\hbar^2}\right)^2 \mathrm{d}p}$$

Cette probabilité est maximale lorsque $p = 0$ et vaut

$$\boxed{\overline{\mathrm{d}\mathscr{P}}(0) = \frac{2A^2}{\pi\hbar\rho^2}\mathrm{d}p}$$

En définissant Δp comme la largeur à mi-hauteur de $\overline{\mathrm{d}\mathscr{P}}(p)$, on obtient :

$$\begin{aligned}
\overline{\mathrm{d}\mathscr{P}}(p) = \frac{A^2}{\pi\hbar\rho^2}\mathrm{d}p \quad &\Leftrightarrow \quad \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{2\rho A\hbar^2}{p^2 + \rho^2\hbar^2}\right)^2 = \frac{A^2}{\pi\hbar\rho^2} \Leftrightarrow \frac{2\rho^2 A^2\hbar^4}{\pi\hbar(p^2 + \rho^2\hbar^2)^2} = \frac{A^2}{\pi\hbar\rho^2} \\
&\Leftrightarrow \quad (p^2 + \rho^2\hbar^2)^2 = 2\rho^4\hbar^4 \\
&\Leftrightarrow \quad p^2 = (\sqrt{2} - 1)\rho^2\hbar^2 \Leftrightarrow p = \pm\sqrt{\sqrt{2} - 1}\rho\hbar
\end{aligned}$$

et l'on a donc

$$\boxed{\Delta p = 2\sqrt{\sqrt{2} - 1}\rho\hbar \simeq 0{,}644\rho\hbar \sim \rho\hbar}$$

On obtient donc au final :

$$\boxed{\Delta x \cdot \Delta p \sim \hbar}$$

qui est du même ordre de grandeur que la limite de Heisenberg. Le fait que $\Delta x \cdot \Delta p \sim \hbar$ montre que ce problème ne peut être résolu qu'en utilisant la mécanique quantique, du fait que la particule explore une région de l'espace, en l'occurrence l'extérieur du puits en fonction delta, qui lui est « interdite » par la mécanique classique. Tenter de localiser la particule à l'intérieur de la fonction delta, c'est-à-dire dans la « région autorisée » par la mécanique classique, n'est pas compatible avec le principe de Heisenberg, qui est au cœur de la mécanique quantique.

1.3 Transmission d'une barrière de potentiel en « fonction delta »

Énoncé.

On considère une particule placée dans le même potentiel que dans l'exercice précédent, mais qui cette fois se propage de gauche à droite sur l'axe Ox, avec une énergie E positive.

a. Montrer qu'un état stationnaire de la particule peut s'écrire :

$$\begin{cases} \text{si} \quad x < 0 \quad \varphi(x) = e^{ikx} + Ae^{-ikx} \\ \text{si} \quad x > 0 \quad \varphi(x) = Be^{ikx} \end{cases}$$