9 Particule dans une boîte à deux dimensions

Une particule de masse m est confinée dans un puit à deux dimensions, caractérisé par une énergie potentielle :

$$V(x,y) = \begin{cases} 0 & \text{si } (x,y) \in]0,a[\times]0,b[\\ +\infty & \textit{partout ailleurs} \end{cases}$$

On étudie un état stationnaire d'énergie $E > 0$: $\Psi(x,y,t) = \varphi(x,y)\,\exp\left(-i\frac{Et}{\hbar}\right)$.

1. *Montrer que la partie spatiale φ vérifie pour tout $(x,y) \in]0,a[\times]0,b[$ l'équation :*

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\,\Delta\varphi = E\,\varphi \qquad (1)$$

On substitue l'expression de Ψ dans l'équation de Schrödinger. Pour tout $(x,y) \in]0,a[\times]0,b[$ on a :

$$i\hbar\,\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\Delta\Psi$$

Or :

$$i\hbar\,\frac{\partial\Psi}{\partial t} = i\hbar\,\varphi(x,y)\,\frac{\partial}{\partial t}\left(e^{-iEt/\hbar}\right) = E\,\varphi(x,y)\,e^{-iEt/\hbar}$$

et

$$\Delta\Psi = e^{-iEt/\hbar}\,\Delta\varphi(x,y)$$

Après simplification par $e^{-iEt/\hbar}$, on trouve donc bien :

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\,\Delta\varphi = E\,\varphi}$$

2. *On cherche une solution de (1) par séparation des variables, sous la forme $\varphi(x,y) = f(x)\,g(y)$ où f et g sont deux applications à valeurs complexes. Comme φ n'est pas identiquement nulle, $\exists\, x_0 \in]0,a[,\ f(x_0) \neq 0$ et on pose :*

$$C_1 = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{f''(x_0)}{f(x_0)} \in \mathbb{C}$$

a) *Montrer que, pour tout $y \in]0,b[$, l'application g vérifie l'équation différentielle :*

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\,g''(y) = (E - C_1)\,g(y) \qquad (2)$$

Dans la suite on posera $C_2 = E - C_1$.

On a :

$$\Delta\varphi = g(y)\,f''(x) + f(x)\,g''(y)$$

ce qui donne, pour tout $(x,y) \in]0,a[\times]0,b[$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}f''(x)g(y) - \frac{\hbar^2}{2m}f(x)g''(y) = E\,f(x)g(y)$$

En prenant le cas particulier $x = x_0$ et en divisant l'équation par $f(x_0)$, on obtient pour tout $y \in]0,b[$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{f''(x_0)}{f(x_0)}g(y) - \frac{\hbar^2}{2m}g''(y) = E\,g(y)$$

ce qui s'écrit :

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}g''(y) = (E - C_1)\,g(y) = C_2\,g(y)}$$

b) *Montrer grâce aux conditions aux limites que $C_2 \neq 0$.*

Supposons que $C_2 = 0$. Dans ce cas on aurait $g''(y) = 0$, ce qui conduit à $g(y) = A_2 y + B_2$ où A_2 et B_2 sont deux constantes complexes. Comme φ doit s'annuler sur les parois de la boîte, nous avons en particulier pour $x = x_0$:

$$f(x_0)\,g(0) = f(x_0)\,g(b) = 0 \quad \text{d'où} \quad g(0) = g(b) = 0$$

Ceci impose : $\boxed{B_2 = 0}$ et $A_2 b = 0$ donc $\boxed{A_2 = 0}$ et conduit à $\varphi = 0$ dans toute la boîte, ce qu'on veut justement éviter.

En conclusion, si on veut $\varphi \neq 0$ dans la boîte, alors $C_2 \neq 0$.

c) *On pose $C_2 = |C_2|\,e^{i\beta}$, où $\beta = \arg C_2$. Déterminer la solution générale de (2). Montrer que les conditions aux limites imposent $\beta = 0$ et qu'il existe un entier $p \in \mathbb{N}^*$ tel que :*

$$C_2 = |C_2| = \frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\pi^2 p^2}{b^2}$$

Comme l'argument β n'est défini que modulo 2π, nous allons convenir que $\beta \in [0, 2\pi[$. L'équation différentielle vérifiée par g se met sous la forme :

$$g"(y) + \frac{2mC_2}{\hbar^2}\,g(y) = 0$$

et son équation caractéristique est : $X^2 + \frac{2mC_2}{\hbar^2} = 0$, c'est à dire :

$$X^2 = -\,\frac{2mC_2}{\hbar^2} = -\,\frac{2m|C_2|}{\hbar^2}\,e^{i\beta} \quad \text{d'où} \quad X = \pm i\sqrt{\frac{2m|C_2|}{\hbar^2}}\,e^{i\beta/2}$$

En posant $\underline{k} = \sqrt{\frac{2m|C_2|}{\hbar^2}}\,e^{i\beta/2}$, la solution générale de l'éqaution différentielle s'écrit :

$$\boxed{g(y) = A_2\,e^{i\underline{k}y} + B_2\,e^{-i\underline{k}y}}$$

Les conditions aux limites $g(0) = g(b) = 0$ conduisent à :

$$\begin{cases} A_2 + B_2 &= 0 \\ A_2\,e^{i\underline{k}b} + B_2\,e^{-i\underline{k}b} &= 0 \end{cases} \iff \begin{cases} B_2 &= -\,A_2 \\ A_2\left(e^{i\underline{k}b} - e^{-i\underline{k}b}\right) &= 0 \end{cases}$$

Afin que φ ne soit pas identiquement nulle dans la boîte, on veut que $A_2 \neq 0$, ce qui entraîne :

$$e^{i\underline{k}b} = e^{-i\underline{k}b} \quad \text{d'où} \quad \boxed{e^{2i\underline{k}b} = 1}$$

Il existe donc $p \in \mathbb{Z}$ tel que :

$$2\underline{k}b = 2p\pi \iff \sqrt{\frac{2m|C_2|}{\hbar^2}}\,e^{i\beta/2} = \frac{p\pi}{b}$$

On a donc :

$$\frac{2m|C_2|}{\hbar^2}\,e^{i\beta} = \left(\frac{p\pi}{b}\right)^2 \in \mathbb{R}_+$$

ce qui entraîne $\boxed{\beta = 0}$ et, de plus :

$$\frac{p\pi}{b} = \sqrt{\frac{2m|C_2|}{\hbar^2}} > 0 \quad \text{d'où} \quad \boxed{p \in \mathbb{N}^*}$$

En conclusion, on a bien :

$$\boxed{C_2 = |C_2| = \frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\pi^2 p^2}{b^2},\ p \in \mathbb{N}^*}$$

Remarque :

L'étude précédente montre que $g(y)$ s'écrit sous la forme (A_2 étant une constante complexe) :

$$\boxed{g(y) = 2i\,A_2 \sin\left(\frac{p\pi\,y}{a}\right)}$$

d) *Montrer que pour tout $x \in]0, a[$, l'application f vérifie l'équation différentielle :*

$$-\,\frac{\hbar^2}{2m}\,f"(x) = C_1\,f(x) \qquad (3)$$

En déduire qu'il existe un entier $n \in \mathbb{N}^*$ tel que :

$$C_1 = \frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\pi^2 n^2}{a^2}$$

On repart de l'équation (1). Pour tout $(x, y) \in]0, a[\times]0, b[$ on a :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}f"(x)g(y) - \frac{\hbar^2}{2m}f(x)g"(y) = E\,f(x)g(y)$$

avec $-\frac{\hbar^2}{2m} g"(y) = C_2\, g(y)$. En substituant dans l'équation précédente on obtient :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} f"(x) g(y) = (E - C_2)\, f(x) g(y)$$

Comme φ n'est pas identiquement nulle dans la boîte, il existe $y_0 \in]0, b[$ tel que $g(y_0) \neq 0$. En prenant l'équation précédente en y_0 et en simplifiant par $g(y_0)$, on obtient finalement pour tout $x \in]0, a[$:

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} f"(x) = (E - C_2)\, f(x) = C_1\, f(x)}$$

On doit donc résoudre l'équation différentielle :

$$f"(x) + \frac{2m\, C_1}{\hbar^2}\, f(x) = 0$$

avec $C_1 \in \mathbb{R}$. De plus, pour $y = y_0$, l'annulation de φ sur les parois de la boîte se traduit par :

$$g(y_0) f(0) = g(y_0) f(a) = 0 \quad \text{d'où} \quad \boxed{f(0) = f(a) = 0}$$

On doit alors distinguer trois cas :

- $C_1 = 0$:

$$f"(x) = 0 \quad \text{d'où} \quad f(x) = A_1 x + B_1$$

  Les conditions aux limites entraînent alors $A_1 = 0$ et $B_1 = 0$. Ce cas ne convient donc pas.

- $C_1 < 0$: on pose $q = \sqrt{-\frac{2m\, C_1}{\hbar^2}} > 0$, ce qui permet de mettre l'équation différentielle sous la forme $f"(x) - q^2\, f(x) = 0$ dont la solution générale est :

$$f(x) = A_1\, e^{-qx} + B_1\, e^{qx}$$

  Les conditions aux limites donnent $A_1 + B_1 = 0$ et $A_1\, e^{-qa} + B_1\, e^{qa} = 0$, ce qui conduit à $2 B_1 \,\mathrm{sh}(qa) = 0$ d'où $B_1 = 0$ et $A_1 = 0$. Ce cas ne convient donc pas non plus.

- $C_1 > 0$: on pose $k = \sqrt{\frac{2m\, C_1}{\hbar^2}} > 0$ et donc :

$$f(x) = A_1\, e^{ikx} + B_1\, e^{-ikx}$$

  Les conditions aux limites donnent :

$$\begin{cases} A_1 + B_1 &= 0 \\ A_1\, e^{ika} + B_1\, e^{-ika} &= 0 \end{cases} \iff \begin{cases} B_1 &= -A_1 \\ A_1 \left(e^{ika} - e^{-ika}\right) &= 0 \end{cases}$$

  et donc $2i\, A_1 \sin(ka) = 0$. Si on veut éviter $\varphi = 0$, c'est à dire $A_1 = 0$, il est nécessaire qu'il existe $n \in \mathbb{N}^*$ tel que :

$$ka = n\pi \quad \text{donc} \quad k = \frac{n\pi}{a}$$

  et finalement :

$$\boxed{C_1 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2 n^2}{a^2},\ n \in \mathbb{N}^*}$$

Remarque :

L'étude précédente montre que $f(x)$ s'écrit sous la forme (A_1 étant une constante complexe) :

$$\boxed{f(x) = 2i\, A_1 \sin(kx) = 2i\, A_1 \sin\left(\frac{n\pi\, x}{a}\right)}$$

3. *Déterminer l'expression complète de l'énergie E.*

Comme $E = C_1 + C_2$, on obtient :

$$\boxed{E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n^2}{a^2} + \frac{p^2}{b^2}\right),\ (n, p) \in \mathbb{N}^* \times \mathbb{N}^*}$$

Remarque :

Dans une boîte à 3 dimension définissant un volume $[0,a] \times [0,b] \times [0,c]$, les valeurs de l'énergie se généralisent facilement et sont données par :

$$\boxed{E = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\left(\frac{n^2}{a^2}+\frac{p^2}{b^2}+\frac{q^2}{c^2}\right),\ (n,p,q) \in \mathbb{N}^* \times \mathbb{N}^* \times \mathbb{N}^*}$$

4. *L'état stationnaire peut donc s'écrire :*

$$\Psi(x,y,t) = A\,\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)\,\sin\left(\frac{p\pi y}{b}\right)\,\exp\left(-i\frac{Et}{\hbar}\right)$$

et on supposera qu'on peut toujours s'arranger pour que A soit une constante réelle positive. Déterminer l'expression de A en fonction de a et b.

On remarquera que l'étude précédente conduit à

$$\varphi(x,y) = f(x)g(y) = -4A_1A_2\sin\left(\frac{n\pi\,x}{a}\right)\sin\left(\frac{p\pi\,y}{b}\right)$$

On peut alors poser $A = -4A_1A_2$ et s'arranger pour que $A \in \mathbb{R}_+^*$ en utilisant l'indétermination de phase de la fonction d'onde.

La condition de normalisation de la probabilité conduit à (grâce au théorème de Fubini) :

$$\begin{aligned} 1 &= \iint |\Psi(x,y,t)|^2\,\mathrm{d}x\mathrm{d}y \\ &= A^2\int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi\,x}{a}\right)\,\mathrm{d}x\,\int_0^b \sin^2\left(\frac{p\pi\,y}{a}\right)\,\mathrm{d}y \\ &= A^2\,\frac{ab}{4} \end{aligned}$$

en linéarisant $\sin^2(u) = \frac{1-\cos(2u)}{2}$. On a donc :

$$\boxed{A = \frac{2}{\sqrt{ab}}}$$