Séance 5 : Td particules dans un potentiel

vendredi 8 avril 2022 22:53

On considère une particule de masse m se déplaçant sur l'axe Ox et soumise à l'action d'un potentiel extérieur représenté par la barrière de potentiel de largeur a et de hauteur $V_0 > 0$:

$$V(x) = 0 \text{ Pour } x < 0 \text{ et } x > a \tag{2.4}$$
$$V(x) = V_0 \text{ Pour } 0 < x < a \tag{2.5}$$

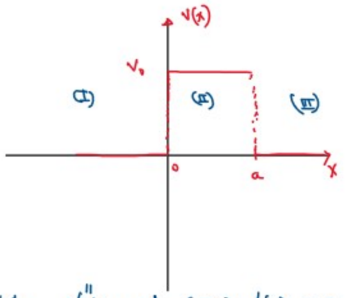
A) **On s'intéresse aux états de la particule d'énergie E > V0.**

1. Écrire et résoudre l'équation de Schrödinger indépendante du temps dans chacune des régions de l'espace définies par x < 0, 0 < x < a et x > a .
2. Écrire et résoudre l'équation de Schrödinger indépendante du temps dans chacune des régions de l'espace définies par x < 0, 0 < x < a et x > a .
3. Donner une identification des différentes composantes de la solution et éliminer les termes non physiques. En déduire la solution physique globale dans les 3 régions.
4. Écrire les conditions de raccordement aux points x = 0 et x = a .
5. Déterminer l'amplitude de l'onde réfléchie dans la région I et celle de l'onde transmise à l'extérieur de la barrière (région III) en fonction de l'amplitude de l'onde incidente. En déduire les expressions des coefficients de réflexion R et de transmission T ainsi que leur somme.

B) **Considérons maintenant les états de la particule où l'énergie E < V0 ;**

1. En utilisant les résultats précédents, donner la solution physique globale dans les 3 régions.
2. Écrire les conditions de raccordement aux points x = 0 et x = a.
3. En utilisant les résultats de cas précédent en déduire, sans faire les calculs, les expressions des coefficients de réflexion R et de Transmission T et leur somme. Conclure.

A) E > V :



$\Psi(x,t) = \Phi(x) \cdot f(t)$

$= e^{-iEt/\hbar} \cdot \Phi(x)$

?

1. l'E.S.I.S : $\phi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E-V)\,\phi(x) = 0$

$$\Phi(x) = \begin{cases} \Phi_I(x) & : x < 0 \\ \Phi_{II}(x) & : 0 < x < a \\ \Phi_{III}(x) & x > a \end{cases}$$

ds la région (I) : $\Phi_I''(x) + \frac{2m}{\hbar^2}\cdot(E-V)\,\Phi_I(x) = 0$

on pose : $k_I^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E)$: $\Phi_I''(x) + k_I^2 \cdot \Phi_I(x) = 0$

$\Rightarrow \Phi_I(x) = A e^{ik_I x} + B e^{-ik_I x}$.

région (II) $V = V_0$:

$\Phi_{II}''(x) + \frac{2m}{\hbar^2}\cdot(E-V_0)\,\Phi_{II}(x) = 0$

on pose : $k_{II}^2 = \frac{2m}{\hbar^2}\cdot(E-V)$

$\Phi_{II}''(x) + k_{II}^2 \cdot \Phi_{II}(x) = 0$

$\Phi_{II}(x) = C\cdot e^{ik_{II}x} + D e^{-ik_{II}\cdot x}$

région III : ($V = 0$) : $\Phi_{III}''(x) + k_{III}^2 \cdot \Phi_{III}(x) = 0$

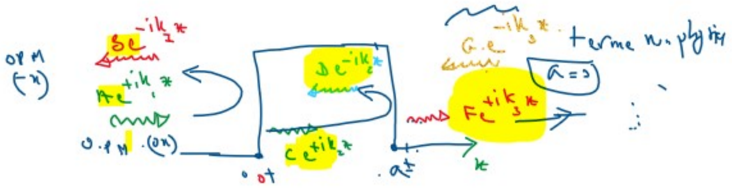
$k_{III}^2 = \frac{2m}{\hbar}\cdot E = k_I^2$

$\Phi_{III}(x) = F e^{+ik_{III}x} + G\cdot e^{-ik_{III}\cdot x}$

$$\Phi(x) = \begin{cases} \Phi_I(x) = A e^{+ik_I x} + B e^{-ik_I x} & x < 0 \\ \Phi(x) = C e^{+ik_{II}x} + D e^{-ik_{II}x}. & 0 < x < a \end{cases}$$

$$\Phi(x) = \begin{cases} \Phi_I(x) = A \ldots \\ \Phi_{II}(x) = C e^{+ik_{II}x} + D e^{-ik_{II}x} & 0 < x < a \\ \Phi_{III}(x) = F e^{+ik_{III}x} + G e^{-ik_{III}x} & x > a \end{cases}$$

2) Identification des termes:

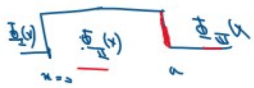


• par Analogie optique:

G = 0 : car pas d'onde réfléchie de la région (III).

$$\Phi(x) = \begin{cases} \Phi_I(x) = A e^{+ik_1x} + S e^{-ik_1x} & x < 0 \\ \Phi_{II}(x) = C e^{+ik_2x} + D e^{-ik_2x} & 0 < x < a \\ \Phi_{III}(x) = F \cdot e^{+ik_3x} & x > a \end{cases}$$

3) Conditions de raccordement:



* pt: x = 0:

$$\begin{cases} \Phi_I(0) = \Phi_{II}(0) \\ \Phi'_I(0) = \Phi'_{II}(0) \end{cases}$$

$$\begin{cases} A + S = C + D & (1) \\ \cancel{i}k_1 \cdot (A - S) = \cancel{i}k_2 \cdot (C - D) & (2) \end{cases}$$

* au pt x = a:

$$\begin{cases} \Phi_{II}(a) = \Phi_{III}(a) \\ \Phi'_{II}(a) = \Phi'_{III}(a) \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} C \cdot e^{+ik_2a} + D e^{-ik_2a} = F e^{+ik_3a} & (3) \\ C \cdot e^{+ik_2a} - D e^{-ik_2a} = \frac{k_3}{k_2} \cdot F e^{+ik_3a} & (4) \end{cases}$$

b)

$$\begin{cases} A + S = C + D & (1) \\ \frac{k_1}{k_2}(A - S) = C - D & (2) \end{cases}$$

(1) + (2) : $2C = A\left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right) + S\left(1 - \frac{k_1}{k_2}\right)$.

$$C = \frac{1}{2} \cdot \left\{ A\left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right) + S \cdot \left(1 - \frac{k_1}{k_2}\right) \right\} \quad (5)$$

(1) − (2) ⇒ $2D = A\left(1 - \frac{k_1}{k_2}\right) + S \cdot \left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right)$

$$D = \frac{1}{2} \cdot \left\{ A\left(1 - \frac{k_1}{k_2}\right) + S \cdot \left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right) \right\} \quad (6)$$

(3) + (4) ⇒ $2 \cdot C \, \cancel{e^{+ik_2a}} \, \cancel{e^{-ik_2a}} = F \left\{ 1 + \frac{k_3}{k_2} \right\} \cdot e^{+ik_3a} \, e^{-ik_2a}$.

$$C = \frac{1}{2} \cdot F \cdot \left\{ 1 + \frac{k_3}{k_2} \right\} \cdot e^{+ia(k_3 - k_2)} \quad (7)$$

(3) − (4) ⇒ $2 \cdot D \, e^{-ik_2a} = F \left\{ 1 - \frac{k_3}{k_2} \right\} \cdot e^{ik_3a}$. (8)

$$C = \frac{1}{2} \cdot F \cdot \{ \ldots \frac{\ldots}{k_2}$$

$$(3)-(4) \Rightarrow \quad 2 \cdot D\, e^{-ik_2a} = F\left\{1 - \frac{k_3}{k_2}\right\} \cdot e^{ik_3a} \qquad (8)$$

$$D = \frac{F}{2}\left\{1 - \frac{k_3}{k_2}\right\} \cdot e^{+ia(k_3+k_2)}$$

$$(7) = (5) \Rightarrow \quad (k_1 = k_3)$$

$$A \cdot \left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right) + B\left(1 - \frac{k_1}{k_2}\right) = F \cdot \left\{1 + \frac{k_1}{k_2}\right\} \cdot e^{+ia(k_1-k_2)} \qquad (9)$$

$$(8) = (6) \Rightarrow \quad A\left(1 - \frac{k_1}{k_2}\right) + B \cdot \left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right) = F \cdot \left\{1 - \frac{k_1}{k_2}\right\} \cdot e^{+ia\cdot(k_1+k_2)} \qquad (10)$$

$$* \; R = \left|\frac{\phi_r}{\phi_i}\right|^2 = \left|\frac{B e^{-ik_1x}}{A e^{+ik_1x}}\right| = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left|\frac{B}{A}\right|^2$$

$$\frac{(9)}{(10)} : \quad A\left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right) + B \cdot \left(1 - \frac{k_1}{k_2}\right) = \left(A\left(1 - \frac{k_1}{k_2}\right) + B \cdot \left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right)\right) \cdot \frac{1 + k_1/k_2}{1 - \frac{k_1}{k_2}} \, \frac{e^{ia(k_1-k_2)}}{e^{ia(k_1+k_2)}}$$

$$\left(A\left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right) + B \cdot \left(1 - \frac{k_1}{k_2}\right)\right)\left(1 - \frac{k_1}{k_2}\right) e^{+ia(\cancel{k_1}+k_2)} = \left(A \cdot \left(1 - \frac{k_1}{k_2}\right) + B \cdot \left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right)\right)\left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right) e^{+ia(\cancel{k_1}-k_2)}$$

$$\left(A \cdot \left(1 - \left(\frac{k_1}{k_2}\right)^2\right) + B \cdot \left(1 - \frac{k_1}{k_2}\right)^2\right) e^{+ia\cdot k_2} = \left(A\left(1 - \left(\frac{k_1}{k_2}\right)^2\right) + B\left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right)^2\right) e^{-ia\cdot k_2}$$

$$A \cdot \left(\left(1 - \left(\frac{k_1}{k_2}\right)^2\right) e^{+iak_2} - \left(1 - \left(\frac{k_1}{k_2}\right)^2\right) e^{-iak_2}\right)$$

$$= B \cdot \left\{ \left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right)^2 e^{-iak_2} - \left(1 - \frac{k_1}{k_2}\right)^2 \cdot e^{+iak_2} \right\}$$

$$A \cdot 2\left(\frac{k_2^2 - k_1^2}{\cancel{k_2^2}} \cdot e^{+iak_2} - \left(\frac{k_2^2 - k_1^2}{\cancel{k_2^2}}\right) e^{-iak_2}\right\}.$$

$$= B\left\{ \frac{(k_2+k_1)^2}{\cancel{k_2^2}} e^{-iak_2} - \frac{(k_2-k_1)^2}{\cancel{k_2^2}} e^{+iak_2} \right\}.$$

$$e^{i\theta} = \cos\theta + i\sin\theta$$

$$e^{-i\theta} = \cos\theta - i\sin\theta.$$

$$A \cdot (k_2^2 - k_1^2)\left[\cancel{\cos ak_2} + i\sin ak_2 - (\cancel{\cos(ak_2)} - i\sin(ak_2))\right].$$

$$= B \cdot \left\{ \left(k_2^2 + k_1^2 + 2k_1k_2\right)\left(\cos(k_2a) - i\sin(k_2a)\right) - \left(k_2^2 + k_1^2 - 2k_2k_1\right)\left(\cos(ak_2) + i\sin(ak_2)\right) \right.$$

$$A \cdot (k_2^2 - k_1^2) \cdot \{2i\sin(ak_2)\} = B \cdot \left\{ (k_2^2 + k_1^2)\left(\cancel{\cos(k_2a)} - i\sin(k_2a) - (\cancel{\cos(ak_2)} + i\sin ak_2)\right.\right.$$
$$\left.\left. + 2k_1k_2\left(\cos(k_2a) - \cancel{i\sin(k_2a)} + \cos(ak_2) + \cancel{i\sin(ak_2)}\right)\right)\right.$$

$$A \cdot (k_2^2 - k_1^2)\{2i\sin(ak_2)\} = B \cdot \{-(k_1^2 + k_2^2) \cdot 2i\sin(ak_2) + 4k_1k_2\cos(k_2a)\}.$$

$$\frac{B}{A} = \frac{2i\left(k_2^2 - k_1^2\right) \cdot \sin(a k_2)}{4 k_1 k_2 \cos(k_2 a) - 2i\left(k_1^2 + k_2^2\right) \sin(a k_2)}$$

$$\frac{B}{A} = \frac{i\left(k_2^2 - k_1^2\right) \sin(a k_2)}{2 k_1 k_2 \cos(a k_2) - i\left(k_1^2 + k_2^2\right) \sin(a k_2)}.$$

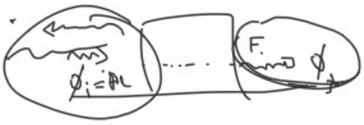
$$R = \left|\frac{B}{A}\right|^2 = \frac{\left(k_2^2 - k_1^2\right)^2 \cdot \sin^2(a k_2)}{4 k_1^2 k_2^2 \cdot \cos^2 a k_2 + \left(k_1^2 + k_2^2\right)^2 \cdot \sin^2(a k_2)}$$

$$\left|\frac{z}{z'}\right| = \frac{|z|}{|z'|}$$

$$|z| = |a + ib| = \sqrt{a^2 + b^2}$$

$$|z| = |ib| \Rightarrow \sqrt{b^2} = b.$$

$$* \quad T = \frac{|\phi_{3t}|^2}{|\phi_1|^2} \cdot \frac{k_3}{k_1} \quad \checkmark$$



$$= \frac{|F|^2}{|A|^2} \cdot \frac{k_3}{k_1}$$

$$R + T = 1 \Rightarrow T = 1 - R$$

$$T = \left|\frac{F}{A}\right|^2 \cdot \frac{k_3}{k_1}$$

$$T = 1 - R = 1 - \frac{\left(k_2^2 - k_1^2\right)^2 \cdot \sin^2(k_2 a)}{4 k_1^2 k_2^2 \cdot \cos^2(k_2 a) + \left(k_1^2 + k_2^2\right)^2 \cdot \sin^2(k_2 a)}$$

$$= \frac{4 k_1^2 k_2^2 \cdot \cos^2(k_2 a) + \left(\cancel{k_1^4} + \cancel{k_2^4} + 2 k_1^2 k_2^2\right) \sin^2(k_2 a) - \left(\cancel{k_1^4} + \cancel{k_2^4} - 2 k_1^2 k_2^2\right) \sin^2(a k_2)}{D}.$$

$$= \frac{4 k_1^2 k_2^2 \cdot \cos^2(k_2 a) + 4 k_1^2 k_2^2 \sin^2(k_2 a)}{D}$$

$$\| \; T = \frac{4 k_1^2 k_2^2}{D} \; \|$$

Exercice 2 : Marche de potentiel

Dans un problème à une dimension, on considère une particule de masse m se déplaçant dans le sens de croissance de x et soumise à la marche de potentiel :

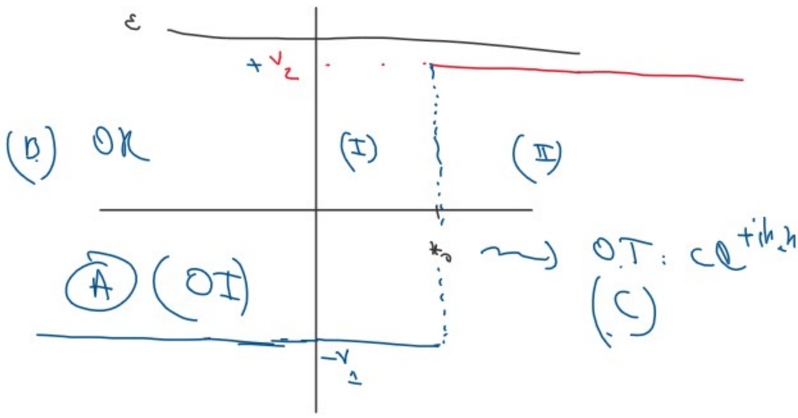
$$V(x) = -V_1 \quad \text{Pour } x < x_0 \tag{2.6}$$

$$V(x) = +V_2 \quad \text{Pour } x > x_0 \tag{2.7}$$

où V_1 et V_2 sont des énergies potentielles constantes et positives et x0 est une valeur positive de la position de cette particule.

A) **On se donne un état stationnaire de cette particule décrit par la fonction d'onde $\phi(x)$ d'énergie propre $E > V_2$.**
   1. Écrire et résoudre l'équation de Schrödinger indépendante du temps dans chacune des régions de l'espace définies par $x < x_0$ et $x > x_0$.
   2. En identifiant chacun des termes de la solution et en écrivant les conditions de raccordement au point x = x0, déterminer les amplitudes des différentes ondes planes monochromatiques associées à cette particule en fonction de l'amplitude de l'onde incidente.
   3. Calculer les coefficients de réflexion r et de transmission t ainsi que leur somme. Conclure.

B) **On s'intéresse maintenant à un état stationnaire de cette particule d'énergie propre positive $E <$ V2 décrit par la fonction d'onde $\phi(x)$.**
   1. Écrire et résoudre l'équation de Schrödinger indépendante du temps dans chacune des régions de l'espace.
   2. En identifiant chacun des termes de la solution et en écrivant les conditions de raccordement au point $x = x_0$, calculer les différentes constantes d'intégration en fonction de l'amplitude de l'onde incidente.
   3. Calculer le coefficient de réflexion R et en déduire celui de transmission T. Conclure.



A) 1) $V_1 > V_2$: $(E = V_1)$

i) région (I) : $x < x_0$:

E.S.I.T : $\varphi''_I + \frac{2m}{\hbar^2}(E + V_1)\,\varphi_I(x) = 0$.

$$\varphi''_I(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(\varepsilon + V_1)\,\varphi_I(x) = 0$$

$k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(\varepsilon + V_1)$: $\varphi''_I(x) + k_1^2\,\varphi_I(x) = 0$

$$\varphi_I(x) = Ae^{+ik_1x} + Be^{-ik_1x}.$$

ii) Ds la région (II) :

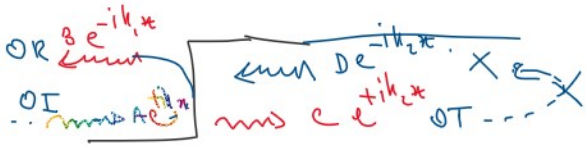
$$\varphi''_{II}(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(\varepsilon - V_2)\,\varphi_{II}(x) = 0 \qquad (\varepsilon > V_2)$$

$k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(\varepsilon - V_2)$ $\qquad \varphi''_{II}(x) + k_2^2\,\varphi_{II}(x) = 0$

$$\varphi_{II}(x) = Ce^{+ik_2x} + De^{-ik_2x}.$$

$$\varphi(x) = \begin{cases} \varphi_I(x) = Ae^{+ik_1x} + Be^{-ik_1x} & x < x_0 \\ \varphi_{II}(x) = C\,e^{+ik_2x} + De^{-ik_2x}. & x > x_0 \end{cases}$$

2) Analogie optique :



$\boxed{D = 0}$: pas de changement de potentiel qd $x > x_0$

$$\varphi(x) = \begin{cases} A e^{+ik_1 x} + B e^{-ik_1 x} & x \leq x_0 \\ C e^{+ik_2 x} & x > x_0 \end{cases}$$

2) ii) Condition de raccordement :

$$\begin{cases} \varphi_I(x_0) = \varphi_{II}(x_0) \\ \varphi'_I(x_0) = \varphi'_{II}(x_0) \end{cases}$$

$$\begin{cases} A\, e^{ik_1 x_0} + B e^{-ik_1 x_0} = C\, e^{+ik_2 x_0} & (1) \\ A e^{ik_1 x_0} - B e^{-ik_1 x_0} = \frac{k_2}{k_1} \cdot C e^{ik_2 x_0} & (2) \end{cases}$$

$(1) + (2) \Rightarrow \quad 2A e^{ik_1 x_0} = \left(1 + \frac{k_2}{k_1}\right) C \cdot e^{+ik_2 x_0}$

$$\boxed{C = 2 \cdot A \left(1 + \frac{k_2}{k_1}\right)^{-1} \cdot e^{i(k_1 - k_2) x_0}}$$

$(1) - (2) \Rightarrow \quad 2B e^{-ik_1 x_0} = \left(1 - \frac{k_2}{k_1}\right) \cdot C\, e^{ik_2 x_0}$

$\Rightarrow \cancel{2} B e^{-ik_1 x_0} = \left(\frac{k_1 - k_2}{\cancel{k_1}}\right) \cdot e^{\cancel{ik_2 x_0}} \cdot \cancel{2} A \cdot \frac{\cancel{k_1}}{k_1 + k_2} \cdot e^{i(k_1 - \cancel{k_2}) x_0}$

$\Rightarrow \quad \boxed{B = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \cdot e^{2ik_1 x} \cdot A} \Rightarrow \quad \frac{B}{A} = \frac{k_1 - k_2}{k_2 + k_1}\, e^{2ik_1 x}$

3) $R = \frac{|\phi_r|^2}{|\phi_i|^2} = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left|\frac{B}{A}\right|^2 = \left|\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right|^2 = \frac{(k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2} \qquad |e^{i\theta}| = 1$

$$t = 1 - R = 1 - \frac{(k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2} = \frac{\cancel{k_1^2} + \cancel{k_2^2} + 2k_1 k_2 - (\cancel{k_1^2} + \cancel{k_2^2} - 2k_1 k_2)}{(k_1 + k_2)^2}$$

$$\boxed{t = \frac{4 k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}}$$

Cas 2: $\boxed{E < V_2 :}$

(I) $\varphi_I''(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E+V_1)\,\varphi_I(x) = 0$

$$\varphi_I(x) = A e^{+ik_1 x} + B e^{-ik_1 x}.$$

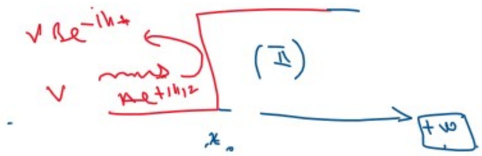
(II) $\varphi_{II}''(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E-V_2)\,\varphi_{II}(x) = 0$

$$-\alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E-V_2)$$

$$\varphi_{II}''(x) - \alpha^2 \cdot \varphi_{II}(x) = 0$$

$$\varphi_{II}(x) = C e^{\alpha x} + D e^{-\alpha x}$$: (ondes évanescentes).

2) condition de convergence



$x \to +\infty \Rightarrow$ $C.e^{\alpha x} \to +\infty$ $\Rightarrow$ n'est pas physique. $\Rightarrow \boxed{C = 0}$

$e^{-\alpha x} \to 0$

$$\| \varphi_{II}(x) = D e^{-\alpha x} \|$$