MÉCANIQUE QUANTIQUE

Corrigé des TRAVAUX DIRIGÉS Nos. 6 (Durée: 1 h)

Spectre continu - barrières de potentiel

On considère une particule de masse m, de fonction d'onde $\psi(x)$, astreinte à se mouvoir suivant l'axe $(0x)$ et soumise à différents potentiels $U(x)$.

1. On considère d'abord une barrière impénétrable :

$$U(x) = \begin{cases} \infty\,,\ x < 0 \\ 0\,,\ x > 0 \end{cases}$$

Donner les fonctions d'onde des états stationnaires.

Dans la mesure où la barrière est impénétrable, la fonction d'onde ψ est nulle pour $x < 0$.

Pour $x > 0$ elle obéit à l'équation de Schrödinger pour une particule libre :

$$H\psi = E\psi$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi = E\psi$$

On reconnaît une équation différentielle ordinaire du second ordre à coefficients constants dont la solution est

$$\psi(x) = Ae^{-ikx} + Be^{ikx}$$

ou de façon équivalente dans la mesure où l'on peut considérer une fonction d'onde d'un état stationnaire réelle à un facteur de phase global près :

$$\psi(x) = A'\sin(kx + \phi)$$

avec $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

L'instinct dicte de prendre une forme en sinus car $\psi(x)$ est nul en $x = 0$ par continuité de la fonction d'onde ; on trouve tout de suite que $\phi = 0$ et donc

$$\psi(x) = A' sin(kx)$$

2. On considère désormais

$$U(x) = \begin{cases} 0\,,\ x < 0 \\ U_0\,,\ x > 0\ (U_0 > 0) \end{cases}$$

pour une énergie E de la particule inférieure à U_0. Donner les fonctions d'onde des états stationnaires. Vérifier l'orthogonalité de ces fonctions et les normer. A-t-on un système complet ?

De même on a deux formes pour la fonction d'onde ψ de la particule. Si $x < 0$ on a

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi = E\psi$$

donc

$$\psi(x) = A_1 \sin(kx + \phi)$$

avec $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

et pour $x > 0$ *on a*

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi + U_0\psi = E\psi$$

donc

$$\psi(x) = A_2 e^{-\chi x} + B_2 e^{\chi x}$$

avec $\chi^2 = \frac{2m(U_0-E)}{\hbar^2}$

(on peut noter au passage que le cas $U_0 > E$ pourrait se traiter automatiquement, avec la même écriture, en faisant apparaître des exponentielles complexes dues à la racine carrée d'un nombre négatif - Réciproquement, si nous avions pris une solution en $\sin(kx)$ *avec k imaginaire, apparaissent des* cosh *et* sinh*, c'est à dire des combinaisons linéaires d'exponentielles réelles).*

Les postulats de la mécanique quantique demandent que ψ appartienne à L^2 donc soit de carré sommable sur $[-\infty, \infty]$; par conséquent $B_2 = 0$ dans l'expression ci-dessus.

On détermine de même A_1, ϕ et A_2 par continuité de la fonction d'onde et sa dérivée en $x = 0$ ce qui donne

$$A_1 \sin(\phi) = A_2$$

et

$$A_1 k \cos(\phi) = -A_2 \chi$$

soit

$$\tan(\phi) = -\frac{k}{\chi}$$

puis en supposant que ϕ est dans le quatrième quadrant

$$A_2 = -A_1\sqrt{\frac{k^2}{k^2+\chi^2}}$$

pour normer les fonctions d'onde (et donc trouver A_1) il faut savoir que

$$\int_0^{\infty} cos(kx)dx = \pi\delta(k)$$

avec δ la distribution de Dirac.

On trouve donc avec les formules usuelles de trigonométrie

$$< \psi(k)|\psi(k') >= \int_0^{-\infty} A_1^2 \sin(kx+\phi)\sin(k'x+\phi)dx = A_1^2\frac{\pi}{2}\delta(k-k')$$

et on a un système de fonctions orthonormé si $A_1 = \sqrt{\frac{2}{\pi}}$ ce qui donne aussi A_2.

3. Toujours dans ce cas, donner le coefficient de réflexion pour une énergie $E > U_0$. Discuter les cas $E \to \infty$ et $E \to U_0$.

   Pour calculer le coefficient de réflexion facilement et rapidement, on l'introduit directement dans la forme des fonctions d'onde.

   Ainsi si l'on suppose que l'on a une particule allant de gauche à droite (comme en optique une onde progressive abordant une discontinuité d'indice) pour $x < 0$ on a

$$\psi(x) = e^{ikx} + A(k)e^{-ikx}$$

   avec $(A(k)$ rapport des amplitudes des ondes incidentes et réfléchies et donc directement égal au coefficient de réflexion. Comme à la question précédente $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

   Pour $x > 0$

$$\psi(x) = B(k)e^{i\chi x}$$

   avec $\chi^2 = \frac{2m(E-U_0}{\hbar^2}$ car on suppose que l'on n'a pas d'onde venant de $+\infty$ et donc de terme en $-i\chi x$.

   Écrivant la continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée en $x = 0$ on trouve

$$1+A = B$$

$$k(1-A) = \chi B$$

   soit

$$A = \frac{k-\chi}{k+\chi}$$

   et

$$B = \frac{2k}{k+\chi}$$

   formules similaires à celles obtenues en optique.

On vérifie bien que si $k = \chi$ *(pas de discontinuité) on n'a pas de réflexion et transmission intégrale de l'onde.*

Calculons les coefficients de réflexion et de transmission en intensité : respectivement,

$$R = |A|^2 = \left(\frac{\sqrt{E} - \sqrt{E - U_0}}{\sqrt{E} + \sqrt{E - U_0}}\right)^2$$

et

$$T = 1 - |R|^2 = \frac{4\sqrt{E(E - U_0)}}{\left(\sqrt{E} + \sqrt{E - U_0}\right)^2}$$

On voit que pour $E \to \infty$ $R \to 0$ *et pour* $E \to U_0$ $T \to 0$ *. (réflexion totale)*

4. On considère la barrière rectangulaire

$$U(x) = \begin{cases} 0\,,\ x < 0 \text{ et } x > a \\ U_0\,,\ 0 < x < a\ (U_0 > 0) \end{cases}$$

Donner le coefficient de pénétration, et discuter les cas

(a) $E \to \infty$ $(E \gg U_0\ )$
(b) $(U_0 - E)ma^2/\hbar^2 \gg 1$
(c) $E \to 0$

On considère comme dans les questions précédentes que les particules se meuvent de la gauche vers la droite, et comme en optique on introduit directement le coefficient de réflexion en prenant garde aux origines $x = 0$ *ou* $x = a$ *afin de simplifier les calculs par la suite.*

Ainsi pour $x < 0$

$$\psi(x) = e^{ikx} + Ae^{-ikx}$$

pour $0 < x < a$

$$\psi(x) = Be^{i\chi x} + Ce^{-i\chi x}$$

pour $a < x$

$$\psi(x) = Ge^{ik(x-a)}$$

On écrit les conditions de continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée en $x = 0$ *et* $x = a$

$$1 + A = B + C$$
$$k(1 - A) = \chi(B - C)$$
$$Be^{i\chi a} + Ce^{-i\chi a} = G$$
$$\chi(Be^{i\chi a} - Ce^{-i\chi a}) = kG$$

et on résoud le système en partant de la fin (de G) par substitutions progressives en remontant vers A.

On trouve alors

$$A = \frac{(k^2 - \chi^2)\sin\chi a}{(\chi^2 + k^2)\sin\chi a + 2ik\chi\cos\chi a}$$
$$G = \frac{2i\chi k}{(\chi^2 + k^2)\sin\chi a + 2ik\chi\cos\chi a}$$

Dans le cas où χ *est imaginaire apparaît un* sinh *au dénominateur.*

On en déduit le coefficient de transmission en intensité

$$D = 1 - |A|^2 = \frac{4E(E-U_0)}{4E(E-U_0) + U_0^2 \sin^2\sqrt{2m(E-U_0)a^2/\hbar^2}}$$

et les limites demandées

(a) $E \to \infty$ *(*$E \gg U_0$ *)*
alors $D \to 1$

(b) $(U_0 - E)ma^2/\hbar^2 \gg 1$
alors $D \ll 1$ *(avec ici un* sinh *au dénominateur)*

(c) $E \to 0$ *alors aussi* $D \ll 1$ *(avec ici un* sinh *au dénominateur)*