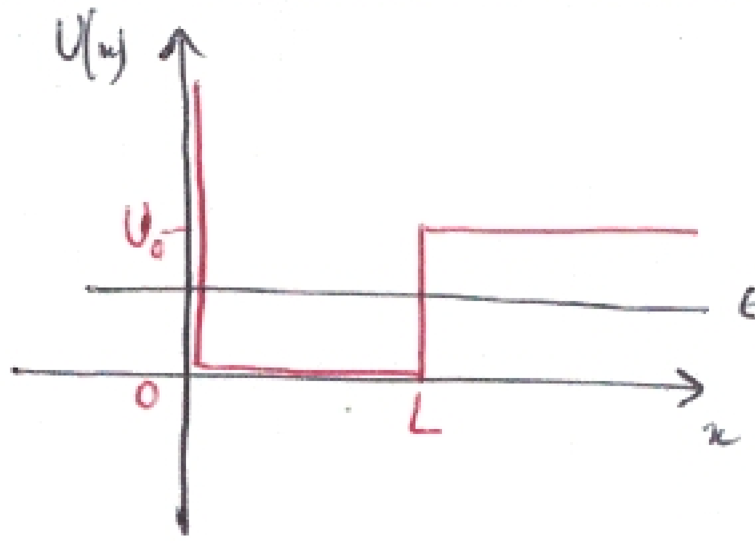
TD mécanique quantique

(VI) Particule dans un puits de potentiel

1)



Du point de vue classique :

$$E = \underbrace{\frac{1}{2}mv^2}_{\geq 0} + U$$

donc $E \geq U$: cette relation est vraie uniquement dans le domaine $0 \leq x \leq L$

La particule ne peut donc pas se trouver en $x<0$ ni en $x>L$, elle est confinée dans la zone $0 \leq x \leq L$.

---

2) $x<0$: $\psi_1 = 0$ la fonction d'onde est nulle dans la zone $x<0$

$0 \leq x \leq L$: $\psi_2 = \frac{1}{\sqrt{L}} \sin\left(\frac{kx}{L}\right) e^{-i\frac{Et}{\hbar}}$

$x>L$: $\psi_3 = \frac{A}{\sqrt{L}} e^{-x/L} e^{-iEt/\hbar}$

La normalisation s'écrit :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x,t)|^2 dx = 1 \quad \text{soit} \quad \int_{-\infty}^{0} \cancel{|\psi_1|^2} dx + \int_0^L |\psi_2|^2 dx + \int_L^{+\infty} |\psi_3|^2 dx = 1$$

cette égalité traduit le fait que la particule se trouve obligatoirement sur l'axe (Ox) donc la probabilité de la trouver sur (Ox) est égale à 1

$$\left|e^{-i\frac{Et}{\hbar}}\right|^2 = 1$$

d'où
$$\boxed{\int_0^L \left(\frac{1}{\sqrt{L}} \sin\left(\frac{kx}{L}\right)\right)^2 dx + \int_L^{+\infty} \left(\frac{A}{\sqrt{L}} e^{-x/L}\right)^2 dx = 1}$$

La continuité

En $x=0$, le potentiel diverge donc on doit juste vérifier que $\phi(x)$ est continue ($\phi'(x)$ ne l'est pas) :

$$\underbrace{\phi_1(x=0^-)}_{0} = \phi_2(x=0^+) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sin\left(\frac{k}{L} \times 0\right) = 0$$

En $x = L$: le potentiel est continu, on doit donc vérifier la continuité de $\phi(x)$ et de $\phi'(x)$ soit :

$$\phi_2(x=L^-) = \phi_3(x=L^+)$$

sin K se calcule en radian !

avec $\phi_2(x=L^-) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sin\left(K\frac{L}{L}\right) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sin K = \frac{0{,}897}{\sqrt{L}}$

$$\phi_3(x=L^+) = \frac{A}{\sqrt{L}} e^{-L/L} = \frac{A e^{-1}}{\sqrt{L}} = \frac{0{,}897}{\sqrt{L}}$$

$$\phi'_2(x=L^-) = \phi'_3(x=L^+)$$

avec $\phi'_2(x=L^-) = \frac{1}{\sqrt{L}} \frac{K}{L} \cos\left(\frac{KL}{L}\right) = \frac{1}{\sqrt{L}} \frac{K \cos K}{L} = \frac{-0{,}898}{L\sqrt{L}}$

$$\phi'_3(x=L^+) = \frac{A}{\sqrt{L}}\left(-\frac{1}{L}\right) e^{-L/L} = -\frac{A e^{-1}}{L\sqrt{L}} = -\frac{0{,}897}{L\sqrt{L}}$$

Ψ vérifie l'équation de Schrödinger

Pour $0 \leq x \leq L$: on a $\Psi_2 = \frac{1}{\sqrt{L}} \sin\left(\frac{Kx}{L}\right) e^{-i\frac{Et}{\hbar}}$

$$\frac{\partial \Psi_2}{\partial t} = -\frac{iE}{\hbar}\left[\frac{1}{\sqrt{L}} \sin\left(\frac{Kx}{L}\right) e^{-i\frac{Et}{\hbar}}\right]$$

$$\frac{\partial^2 \Psi_2}{\partial x^2} = \frac{1}{\sqrt{L}}\left(-\frac{K^2}{L^2}\right) \sin\left(\frac{Kx}{L}\right) e^{-i\frac{Et}{\hbar}}$$

ce terme se simplifie dans Schrödinger

En remplaçant dans l'équation de Schrödinger et après simplification par $\sin\left(\frac{Kx}{L}\right) e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{\sqrt{L}}\left(-\frac{K^2}{L^2}\right)\right] + 0 = i\hbar\left[-\frac{iE}{\hbar}\frac{1}{\sqrt{L}}\right]$$

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{K^2}{\cancel{\sqrt{L}} L^2}\right) = \frac{E}{\cancel{\sqrt{L}}}$$

d'où $\boxed{E = \frac{\hbar^2 K^2}{2mL^2}}$

Pour $x \geq L$: on a $\Psi_3 = \frac{A}{\sqrt{L}} e^{-x/L} e^{-iEt/\hbar}$

$$\frac{\partial \Psi_3}{\partial t} = -\frac{iE}{\hbar} \frac{A}{\sqrt{L}} e^{-x/L} e^{-iEt/\hbar}$$

$$\frac{\partial^2 \Psi_3}{\partial x^2} = \left(-\frac{1}{L}\right)^2 \frac{A}{\sqrt{L}} e^{-x/L} e^{-iEt/\hbar}$$

ce terme se simplifie dans Schrödinger

En remplaçant dans l'équation de Schrödinger et après simplification par $\frac{A}{\sqrt{L}} e^{-x/L} e^{-iEt/\hbar}$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{L^2}\right] + U_0 \times 1 = i\hbar\left(\frac{-iE}{\hbar}\right)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2mL^2} + U_0 = E$$

soit $$\boxed{U_0 = E + \frac{\hbar^2}{2mL^2}}$$

<u>Remarque</u> : cet exercice est fait "à l'envers"

En général on donne $U(x)$ et on trouve les fonctions d'onde en appliquant : l'équation de Schrödinger puis les condition de continuité puis la normalisation.

Ici on donne la fonction d'onde, on déduit de l'équation de Schrödinger le potentiel.