Correction TD1 de mécanique quantique

I. Constante d'intégration nulle 4

1. Du point de vue de la mécanique classique, on a $E_m = E_c + E_p$ avec $E_c \geq 0$ donc la particule ne peut exister que pour les valeurs de x pour lesquelles $E_m \geq E_p$ soit ici $E_m = E$ et $E_p = U$ donc la particule ne peut se trouver que dans la zone $0 < x < L$ (les régions $z < 0$ et $z > L$ sont interdites).

2. La particule est émise selon $-Ox$ à l'intérieur du puits, les discontinuités de potentiel se comportent comme des dioptres donc l'onde incidente selon $-Ox$ dans le puits donne naissance à une onde transmise du côté $x < 0$ et une onde réfléchie dans le puits selon $+Ox$. Cette onde réfléchie donne naissance à une onde transmise du côté $x > L$ et une onde réfléchie dans le puits selon $-Ox$.

Donc finalement il y a des ondes selon $-Ox$ du côté $x < 0$, des ondes selon $+Ox$ du côté $x > L$ et des ondes selon $+Ox$ et $-Ox$ dans le puits.

3. On a :

Pour $x < 0$: $\underline{\psi}_I(x,t) = A_I e^{-Kx} e^{-iEt/\hbar} + B_I e^{+Kx} e^{-iEt/\hbar}$: ce sont des OS amorties (ondes évanescentes). Or dans cette zone x peut tendre vers $-\infty$ et le terme e^{-Kx} diverge en $-\infty$ donc on doit avoir $A_I = 0$.

Pour $0 < x < L$: $\underline{\psi}_I(x,t) = A_{II} e^{-i(kx+Et/\hbar)} + B_{II} e^{i(kx-Et/\hbar)}$: ce sont des $OPPH$, $OPPH^+$ (la particule et l'onde associée se propagent selon $+Ox$) pour le terme d'amplitude B_{II} et $OPPH^-$ (la particule et l'onde associée se propagent selon $-Ox$) pour le terme d'amplitude A_{II}.

Pour $x > L$: $\underline{\psi}_{III}(x,t) = A_{III} e^{-Kx} e^{-iEt/\hbar} + B_{III} e^{+Kx} e^{-iEt/\hbar}$: ce sont des OS amorties (ondes évanescentes). Or dans cette zone x peut tendre vers $+\infty$ et le terme e^{+Kx} diverge en $+\infty$ donc on doit avoir $B_{III} = 0$.

II. Marche de potentiel 1

1. Du point de vue de la mécanique classique, on a $E_m = E_c + E_p$ avec $E_c \geq 0$ donc $E_m \geq E_p$. Ici $E_m = E > E_p$ pour tout x donc la particule peut se trouver sur tout l'axe Ox.

On a $v = \sqrt{\dfrac{2E_c}{m}} = \sqrt{\dfrac{2(E_m - E_p)}{m}}$ soit pour $x < 0$: $E_p = 0$ donc $v = \sqrt{\dfrac{2E}{m}}$ et pour $x > 0$: $E_p = V_0$ donc $v = \sqrt{\dfrac{2(E - V_0)}{m}}$.

Du point de vue quantique, du côté $x < 0$ il y a une onde incidente et une onde réfléchie, du côté $x > 0$ il y a une onde transmise.

2. En remplaçant $\psi(x,t)$ par $\psi(x,t) = \phi(x) e^{-iEt/\hbar}$ dans l'équation de Schrödinger, on obtient $\phi'' + \dfrac{2m(E-U)}{\hbar^2}\phi = 0$.

Pour $x < 0$: $U = 0$ donc $\phi_1(x)$ vérifie l'équation $\phi_1'' + \dfrac{2mE}{\hbar^2}\phi_1 = 0$: c'est un OH de pulsation spatiale $k = \sqrt{\dfrac{2mE}{\hbar^2}}$.

Pour $x > 0$: $U = V_0$ donc $\phi_2(x)$ vérifie l'équation $\phi_2'' + \dfrac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}\phi_2 = 0$: c'est un OH de pulsation spatiale $K = \sqrt{\dfrac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}}$.

3. On a donc $\underline{psi}_1 = Ae^{-i(kx + \frac{Et}{\hbar})} + Be^{i(kx - \frac{Et}{\hbar})}$:

- le terme d'amplitude A correspond à une $OPPH^-$ (onde et particule se déplaçant selon $-Ox$): c'est l'onde réfléchie

- le terme d'amplitude B correspond à une $OPPH^+$ (onde et particule se déplaçant selon $+Ox$): c'est l'onde incidente.

On a $\underline{psi}_2 = Ce^{-i(Kx + \frac{Et}{\hbar})} + De^{i(Kx - \frac{Et}{\hbar})}$:

-le terme d'amplitude C correspond à une $OPPH^-$ (onde et particule se déplaçant selon $-Ox$): elle n'existe pas donc $C = 0$

- le terme d'amplitude D correspond à une $OPPH^+$ (onde et particule se déplaçant selon $+Ox$): c'est l'onde transmise.

4. En $x = 0$ le potentiel est discontinu et fini donc en $x = 0$, $\underline{\psi}$ et donc $\underline{\phi}$ est continu ainsi que $\frac{\partial \underline{\psi}}{\partial x}$ soit $\underline{\phi}'$.

On a donc $\underline{\phi}_1(x = 0) = \underline{\phi}_2(x = 0)$ qui donne $A + B = D$.

On a aussi $\underline{\phi}_1'(x = 0) = \underline{\phi}_2'(x = 0)$ qui donne $-ikA + ikB = iKD$.

soit à résoudre le système: $B + A = D$ et $B - A = \frac{K}{k}D$.

On fait la somme: $2B = (1 + \frac{K}{k})D$ soit $D = \frac{2B}{1 + \frac{K}{k}} = \frac{2k}{k + K}B$.

On en déduit $A = D - B = \frac{k - K}{k + K}B$.

Analogie avec la réflexion et la transmission d'une onde em à la traversée d'un dioptre qui sépare les milieux d'indice n_1 et n_2 (paragraphe III chapitre EM11), on a trouvé $r = \frac{n_1 - n_2}{n_1 + n_2}$ et $\tau = \frac{2n_2}{n_1 + n_2}$. Ici le coefficient de réflexion r est $\frac{A}{B}$ et le coefficient de transmission τ est $\frac{D}{B}$. On a $k = \frac{n_1\omega}{c}$ et $K = \frac{n_2\omega}{c}$.

5. La fonction d'onde incidente est $\underline{\psi}_i = Be^{i(kx - \frac{Et}{\hbar})}$, la fonction d'onde réfléchie est $\underline{\psi}_r = Ae^{-i(kx + \frac{Et}{\hbar})}$ et la fonction d'onde transmise est $\underline{\psi}_t = De^{i(Kx - \frac{Et}{\hbar})}$.

On a $|\underline{\psi}_i|^2 = B^2$, $|\underline{\psi}_r|^2 = A^2$ et $|\underline{\psi}_t|^2 = D^2$.

Pour l'onde incidente: $\overrightarrow{k_i} = +k\overrightarrow{e_x}$, pour l'onde réfléchie: $\overrightarrow{k_r} = -k\overrightarrow{e_x}$ et pour l'onde transmise: $\overrightarrow{k_t} = +K\overrightarrow{e_x}$.

Soit $\overrightarrow{J_i} = \frac{\hbar B^2 k}{m}\overrightarrow{e_x}$, $\overrightarrow{J_r} = -\frac{\hbar A^2 k}{m}\overrightarrow{e_x}$ et $\overrightarrow{J_t} = \frac{\hbar D^2 K}{m}\overrightarrow{e_x}$.

On a donc les coefficient de réflexion et de transmission:

$R = \frac{A^2}{B^2} = (\frac{k - K}{k + K})^2$ et $T = \frac{D^2 K}{B^2 k} = \frac{4kK}{(k + K)^2}$.

La relation $R + T = 1$ traduit la conservation de la particule, la particule se trouve obligatoirement sur l'axe Ox.

III. **Particule dans un puits de potentiel**

1. Du point de vue de la mécanique classique, on a $E_m = E_c + E_p$ avec $E_c \geq 0$ donc la particule ne peut exister que pour les valeurs de x pour lesquelles $E_m \geq E_p$ soit ici $E_m = E$ et $E_p = U$ donc la particule ne peut se trouver que dans la zone $0 < x < L$ (les régions $z < 0$ et $z > L$ sont interdites).

2. La normalisation traduit que la particule se trouve obligatoirement sur l'axe Ox donc la probabilité de trouver la particule selon $0x$ vaut 1 soit $\int_{-\infty}^{+\infty} |\underline{\psi}|^2 dx = 1$.

Or ici le potentiel est infini pour $x < 0$ donc la fonction d'onde est nulle pour $x < 0$ soit $\int_O^{+\infty} |\underline{\psi}|^2 dx = 1$ ou encore $\int_O^L |\underline{\psi}|^2 dx + \int_L^{+\infty} |\underline{\psi}|^2 dx = 1$ soit $\int_O^L (\frac{1}{\sqrt{L}} \sin(\frac{Kx}{L}))^2 dx + \int_L^{+\infty} (\frac{A}{\sqrt{L}} e^{-x/L})^2 dx = 1$. On ne demande pas de résoudre.

Les conditions aux limites sont:

Pour $x = 0$ (le potentiel diverge du côté $x < 0$) donc on doit avoir uniquement la continuité de $\phi(x)$ soit $\phi(x = 0^-) = 0$ et $\phi(x = 0^+) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sin(\frac{K0}{L}) = 0$: continuité vérifiée.

Pour $x = L$ (le potentiel ne diverge pas) donc on doit avoir la continuité de $\phi(x)$ et de $\phi'(x)$ soit:

- $\phi(x = L^-) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sin(\frac{KL}{L}) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sin K = \frac{0,897}{\sqrt{L}}$ et $\phi(x = L^+) = \frac{A}{\sqrt{L}} e^{-L/L} = \frac{Ae^{-1}}{\sqrt{L}} = \frac{0,897}{\sqrt{L}}$: continuité vérifiée.

- $\phi'(x=L^-) = \frac{K}{L\sqrt{L}}\cos(\frac{KL}{L}) = \frac{K}{L\sqrt{L}}\cos K = \frac{-0,897}{L\sqrt{L}}$ et $\phi'(x=L^+) = \frac{-A}{L\sqrt{L}}e^{-L/L} = \frac{-Ae^{-1}}{L\sqrt{L}} = \frac{-0,897}{L\sqrt{L}}$: continuité vérifiée.

Dans la zone $0 < x < L$ on a $\underline{\psi}(x,t) = \frac{1}{\sqrt{L}}\sin(\frac{Kx}{L})e^{-iEt/\hbar}$ et $U = 0$. On remplace dans l'équation de Schrödinger $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\underline{\psi}}{\partial x^2} + 0 = i\hbar\frac{\partial\underline{\psi}}{\partial t}$.

$\frac{\partial\underline{\psi}}{\partial x} = \frac{K}{L\sqrt{L}}\cos(\frac{Kx}{L})e^{-iEt/\hbar}$ et $\frac{\partial^2\underline{\psi}}{\partial x^2} = \frac{-K^2}{L^2\sqrt{L}}\sin(\frac{Kx}{L})e^{-iEt/\hbar} = -\frac{K^2}{L^2}\underline{\psi}$.

$\frac{\partial\underline{\psi}}{\partial i} = -\frac{iE}{\hbar}\underline{\psi}$.

Soit en remplaçant dans l'équation de Schrödinger : $-\frac{\hbar^2}{2m}(-\frac{K^2}{L^2}\underline{\psi}) = i\hbar(-\frac{iE}{\hbar})\underline{\psi}$ soit $E = \frac{\hbar^2K^2}{2mL^2} = \frac{h^2}{8\pi^2mL^2}$.

On fait la même chose dans la zone $x > L$ où $\underline{\psi}(x,t) = \frac{A}{\sqrt{L}}e^{-x/L}e^{-iEt/\hbar}$ et $U = U_0$. On remplace dans l'équation de Schrödinger $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\underline{\psi}}{\partial x^2} + U_0\underline{\psi} = i\hbar\frac{\partial\underline{\psi}}{\partial t}$.

$\frac{\partial\underline{\psi}}{\partial x} = \frac{-A}{L\sqrt{L}}e^{-x/L}e^{-iEt/\hbar}$ et $\frac{\partial^2\underline{\psi}}{\partial x^2} = \frac{A}{L^2\sqrt{L}}e^{-x/L}e^{-iEt/\hbar} = \frac{1}{L^2}\underline{\psi}$.

$\frac{\partial\underline{\psi}}{\partial i} = -\frac{iE}{\hbar}\underline{\psi}$.

Soit en remplaçant dans l'équation de Schrödinger : $-\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{1}{L^2}\underline{\psi}) + U_0\underline{\psi} = i\hbar(-\frac{iE}{\hbar})\underline{\psi}$ soit $\frac{-\hbar^2}{2mL^2} + U_0 = E$.