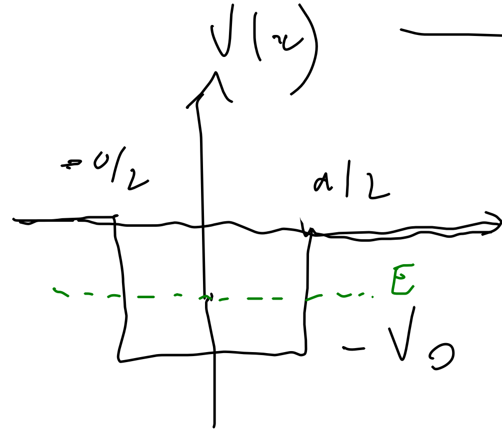
TD 3

3.1.3



$V(x) = V(-x)$

$\Rightarrow$ on peut chercher des sols stationnaires paires ou impaires.

1) On cherche à resoudre

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\,\psi(x) \qquad \underline{-V_0 < E < 0}$$

3 domaines : I : $x \leq -a/2$, II : $|x| \leq a/2$, III $x \geq a/2$

Saut fini de potentiel ψ et ψ' sont continues

$\Rightarrow$ Il faut ecrire la continuité de ψ et ψ' en $x = \pm a/2$

$$-V_0 \leq E < 0 \qquad k = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} > 0 \qquad K = \sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}} > 0$$

(I) $x \leq -a/2$ $\quad -\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) = E\,\psi(x) \Rightarrow \psi'' = k^2\psi$

(II) $|x| \leq a/2$ $\quad -\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' - V_0\psi = E\psi \Rightarrow \psi'' = -K^2\psi$

(III) $x \geq a/2$ $\quad -\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' = E\psi \Rightarrow \psi'' = k^2\psi$

$$\begin{cases} \text{I} & x \leq -a/2 & \psi'' = k^2\psi & \Rightarrow \psi(x) = A e^{kx} + B e^{-kx} \\ \text{II} & |x| \leq a/2 & \psi'' = -K^2\psi & \Rightarrow \psi(x) = C\cos Kx + D\sin Kx \\ \text{III} & x \geq a/2 & \psi'' = k^2\psi & \Rightarrow \psi(x) = A' e^{kx} + B' e^{-kx} \end{cases}$$

Non divergence à l'∞ $x \to -\infty$ $B e^{-kx} \to +\infty \Rightarrow B = 0$

$x \to +\infty$ $A' e^{kx} \to +\infty \Rightarrow A' = 0$

$x < -a/2$ (I) $\psi(x) = A e^{kx}$

$|x| \leq a/2$ (II) $\psi(x) = C\cos Kx + D\sin Kx$

$x > a/2$ (III) $\psi(x) = B' e^{-kx}$

On sait que ψ doit être ou impaire

Sols Paires $\psi(x) = \psi(-x) \Rightarrow$ I $\leftrightarrow$ III $\Rightarrow B' = A$

II $\Rightarrow D = 0$

$|x| \leq a/2$ $\psi(x) = C\cos Kx$

$|x| \geq a/2$ $\psi(x) = A e^{-k|x|}$

Sols impaires $\psi(x) = -\psi(-x) \Rightarrow$ I $\leftrightarrow$ III $B' = -A$

II $\Rightarrow C = 0$

$|x| \leq a/2$ $\psi(x) = D\sin Kx$

$x \leq -a/2$ $\psi(x) = A e^{kx}$, $x \geq a/2$ $\psi(x) = -A e^{-kx}$

Sols paires $|x| \leq a/2$ $\psi(x) = C\cos Kx$

$|x| \geq a/2$ $\psi(x) = A e^{-k|x|}$

Il faut écrire la continuité de ψ et ψ' en $x = \pm a/2$. Mais ψ est paire $\Rightarrow$ il suffit d'écrire la continuité en $x = a/2$.

$$\underbrace{\psi\left(\tfrac{a}{2}^-\right) = \psi\left(\tfrac{a}{2}^+\right)} \quad \text{et} \quad \psi'\left(\tfrac{a}{2}^-\right) = \psi'\left(\tfrac{a}{2}^+\right)$$

$$C\cos\frac{Ka}{2} = A e^{-\frac{ka}{2}} \qquad -KC\sin\frac{Ka}{2} = -kA e^{-\frac{ka}{2}}$$

Nous cherchons 1 sol $(A,C) \neq (0,0)$.

La méthode générale : écrire 1 dét $= 0$
système homogène + sol non nulle
$\Leftrightarrow$ $|\ | = 0$

$$\begin{cases} C\cos\frac{Ka}{2} - A e^{-\frac{ka}{2}} = 0 & (1) \\ -KC\sin\frac{Ka}{2} + kA e^{-\frac{ka}{2}} = 0 & (2) \end{cases}$$

Méthode + simple faire le rapport des 2 éqs $\quad \frac{(2)}{(1)} : -\frac{K\sin\frac{Ka}{2}}{\cos\frac{Ka}{2}} = -\frac{k e^{-\frac{ka}{2}}}{e^{-\frac{ka}{2}}}$

$$\Leftrightarrow \boxed{K\,\mathrm{tg}\,\frac{Ka}{2} = k}$$

$\Rightarrow$ quelle est l'inconnue physique : c'est l'énergie $k(E)$ et $K(E)$

Comment trouver les solutions : méthode graphique

Posons : $X = \frac{Ka}{2}$ et $Y = \frac{ka}{2}$ $\quad$ X et Y sont des nombres

$$\frac{Ka}{2}\,\mathrm{tg}\,\frac{Ka}{2} = \frac{ka}{2} \Leftrightarrow \boxed{X\,\mathrm{tg}\,X = Y} \quad (I)$$

Il existe une autre relation entre X et Y

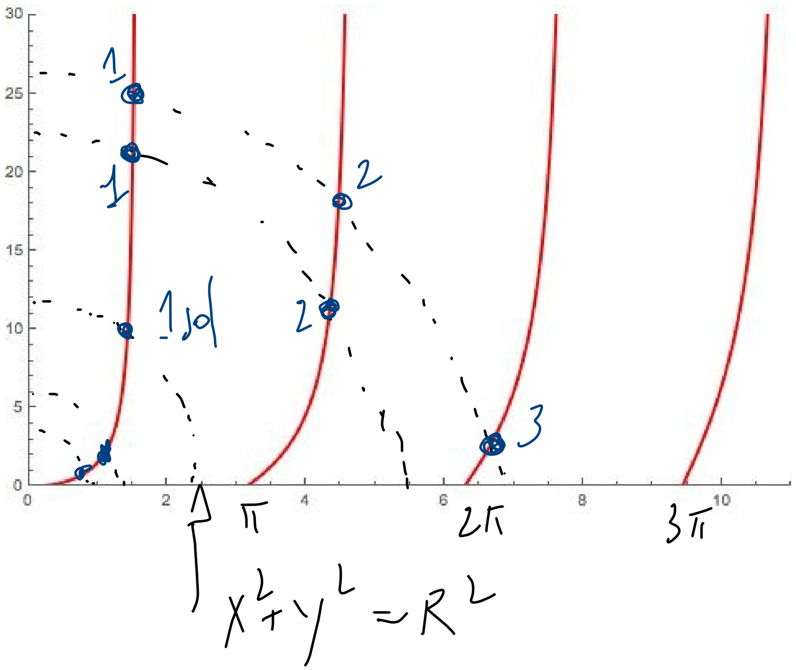
$$X^2 + Y^2 = \frac{a^2}{4}(K^2 + k^2) = \frac{a^2}{4}\left(\frac{2m}{\hbar^2}(E + V_0) - \frac{2mE}{\hbar^2}\right) = \frac{a^2}{4}\underbrace{\frac{2mV_0}{\hbar^2}}_{k_0^2}$$

$$X^2 + Y^2 = \left(\frac{k_0 a}{2}\right)^2 \Rightarrow \text{donnée du problème}$$

$$\boxed{X^2 + Y^2 = R^2} \quad (II)$$

Il faut trouver les intersections entre (I) et (II) cercle.

Rq $X \geq 0$ $Y \geq 0$ par déf.



$y = x \,\mathrm{tg}\, x$

Selon R on a 1 nbre différent de sols, mais ce nombre est toujours fini.

On a N solutions si $(N-1)\pi \leq R < N\pi$

$$R^2 = \left(\frac{k_0 a}{2}\right)^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}\frac{a^2}{4} = \frac{mV_0 a^2}{2\hbar^2}$$

« c'est le produit $V_0 a^2$ » qui détermine le nombre de solutions

Sols impaires $|x| \leq a/2 \quad \psi(x) = D \sin Kx$

$x \leq -a/2 \quad \psi(x) = A e^{kx}, \quad x \geq a/2 \quad \psi(x) = -A e^{-kx}$

Il faut écrire la continuité de ψ et ψ' en $x = a/2$

$$\underbrace{\psi(a/2^-) = \psi(a/2^+)}_{} \quad \text{et} \quad \psi'(a/2^-) = \psi'(a/2^+)$$

$$(1) \quad D \sin \frac{Ka}{2} = -A e^{-ka/2} \quad \text{et} \quad (2) \quad DK \cos \frac{Ka}{2} = kA e^{-\frac{ka}{2}}$$

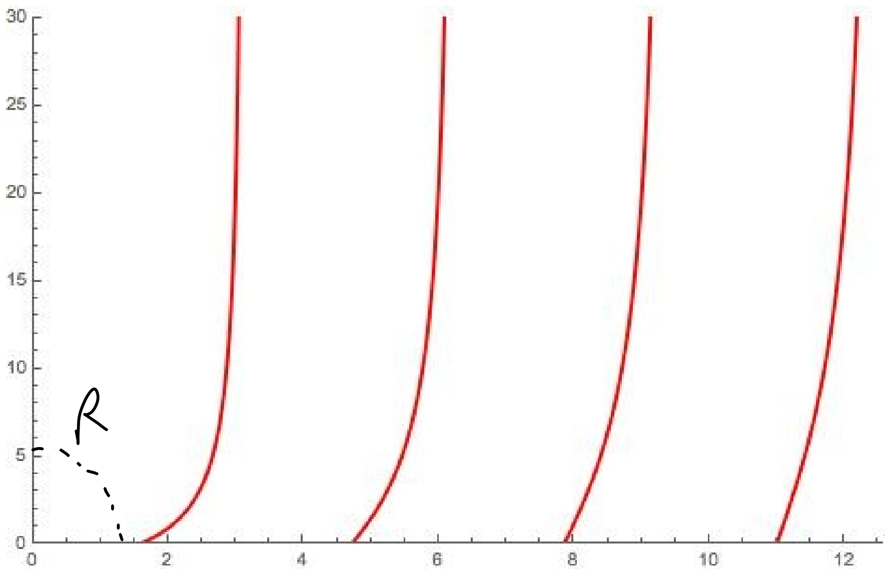
$$\frac{(2)}{(1)} \Rightarrow K \frac{\cos \frac{Ka}{2}}{\sin \frac{Ka}{2}} = -k \Leftrightarrow \boxed{k = -K \cot g \frac{Ka}{2}}$$

Même methode graphique de resolution

$$X = \frac{Ka^{(E)}}{2} \quad Y = \frac{ka^{(E)}}{2} \Rightarrow \boxed{Y = -X \cot g X}$$

Intersections?

Et on a encore $X^2 + Y^2 = \left(\frac{k_0 a}{2}\right)^2 = R^2$



Courbe $Y = -X \cot g X$

si $R < \frac{\pi}{2} \Rightarrow$ il n'y a pas de solution impaire, mais il y a 1 sol. paire.

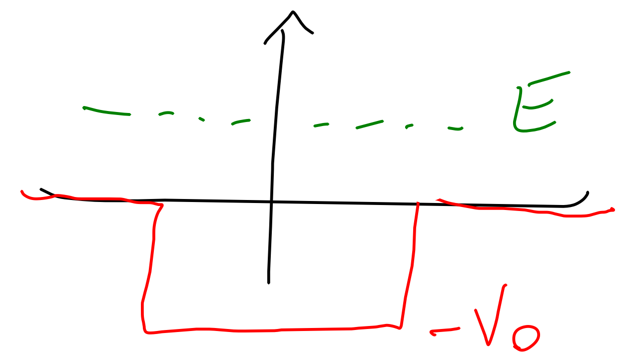
Dans le domaine $0 < R < \frac{\pi}{2}$ il y a 1 seule solution.

si $R > \pi/2$ il y a plusieurs sols impaires.

3.2 Etats dits "libres" (la particule peut aller à l'∞)

$\Rightarrow$ l'énergie n'est pas quantifiée

Domaine ici $E > 0$



On va supposer que les particules viennent de $-\infty$

$$E > 0 > -V_0 \qquad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} > 0$$

$$K = \sqrt{+\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}} > 0$$

$x \leq -a/2$ $\quad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \Rightarrow \psi'' = -k^2\psi$

$|x| \leq a/2$ $\quad -\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' - V_0\psi = E\psi \Rightarrow \psi'' = -K^2\psi$

$x \geq a/2$ $\quad \Rightarrow \psi'' = -k^2\psi$

$x < -a/2 \quad \psi'' = -k^2\psi \Rightarrow \psi(x) = \underset{\longrightarrow}{Ae^{ikx}} + \underset{\longleftarrow}{Be^{-ikx}}$

$|x| < a/2 \quad \psi'' = -K^2\psi \Rightarrow \psi(x) = \underset{\longrightarrow}{Ce^{iKx}} + \underset{\longleftarrow}{De^{-iKx}}$

$x > a/2 \quad \psi'' = -k^2\psi \Rightarrow \psi(x) = \underset{\longrightarrow}{A'e^{ikx}} + \underset{\longleftarrow}{B'e^{-ikx}}$

<u>Hypothèse</u> : particules venant de $-\infty$ et pas de $+\infty$ $\Rightarrow$ $B' = 0$

Ae^{ikx} : onde incidente (flux de particules envoyé)

Be^{-ikx} : " réfléchie

$A'e^{ikx}$: onde transmise.

$\frac{B}{A}$: coef de reflexion en <u>amplitude</u>

$\frac{A'}{A}$: " de transmission en <u>amplitude</u>

) coefs interessants.

$\Rightarrow$ il faut ecrire les conditions de continuité pour determiner $\frac{B}{A}$ et $\frac{A'}{A}$.

$x \leq -a/2 \qquad \psi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$

$|x| \leq a/2 \qquad \psi(x) = C e^{iKx} + D e^{-iKx}$

$x \geq a/2 \qquad \psi(x) = A_1 e^{ikx}$

Continuité de ψ et ψ' en $x = -a/2$ et $x = a/2$

En $-a/2$ (S1) $\begin{cases} A e^{-ik\frac{a}{2}} + B e^{ik\frac{a}{2}} = C e^{-iK\frac{a}{2}} + D e^{iK\frac{a}{2}} \\ ik\left(A e^{-ik\frac{a}{2}} - B e^{ik\frac{a}{2}}\right) = iK\left(C e^{-iK\frac{a}{2}} - D e^{iK\frac{a}{2}}\right) \end{cases}$

En $a/2$ (S2) $\begin{cases} C e^{iK\frac{a}{2}} + D e^{-iK\frac{a}{2}} = A_1 e^{ik\frac{a}{2}} \\ iK\left(C e^{iK\frac{a}{2}} - D e^{-iK\frac{a}{2}}\right) = ik A_1 e^{ik\frac{a}{2}} \end{cases}$

A est 1 donnée ⇒ on prend comme vars $\frac{B}{A}, \frac{C}{A}, \frac{D}{A}, \frac{A_1}{A}$

Avec (S2) on peut éliminer A_1 pour trouver 1 rel. entre $\frac{C}{A}$ et $\frac{D}{A}$ ⇒ Exprimer $\frac{D}{A}$ en fct de $\frac{C}{A}$.

- Avec cette relation on peut exprimer $\frac{C}{A}$ en fct de $\frac{A_1}{A}$ avec la 1ère eq de S2 et on déduit $\frac{D}{A}$ en fct de $\frac{A_1}{A}$
- On injecte les expressions de $\frac{C}{A}$ et $\frac{D}{A}$ en fct de $\frac{A_1}{A}$ dans S1

⇒ A partir de "cette version de S1" on peut calculer $\frac{A_1}{A}$!!!

Coef. de transmission en flux $T = \left|\frac{A_1}{A}\right|^2$

⇒ on en déduit le coef de réflexion en flux $R = \left|\frac{B}{A}\right|^2 = 1 - T$