

1. Particule libre

i) Utilisez l'équation d'évolution des moyennes quantiques obtenue au T.D. précédent pour prouver que, pour une particule libre ($\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m}$), les valeurs moyennes de $\hat{P}$ et de $\hat{P}^2$ sont constantes dans le temps :

$$\langle \hat{P} \rangle_{(t)} = \langle \hat{P} \rangle_{(t=0)} \quad \langle \hat{P}^2 \rangle_{(t)} = \langle \hat{P}^2 \rangle_{(t=0)}.$$

SOLUTION

L'évolution temporelle d'une observable $\hat{A}$ étant régie par l'équation : $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{A} \rangle_{(t)} = \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle_{(t)}$, on doit calculer le commutateur de $\hat{P}$ et de $\hat{P}^2$ avec l'hamiltonien du système.

Puisque $\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m}$, on trouve alors :

$$\left[\hat{P}, \frac{\hat{P}^2}{2m} \right] = \hat{P} \hat{P}^2 \frac{1}{2m} - \frac{1}{2m} \hat{P}^2 \hat{P} = \frac{1}{2m} (\hat{P}^3 - \hat{P}^3) = 0. \quad (1)$$

et identiquement pour P^2

ii) Identiquement, démontrez de façon générale que la position moyenne d'une particule libre est donnée par $\langle \hat{X} \rangle_{(t)} = \frac{\langle \hat{P} \rangle_{(t=0)}}{m} t + \langle \hat{X} \rangle_{(t=0)}$.

SOLUTION

Le commutateur $[\hat{P}, \hat{X}] = \hat{P}\hat{X} - \hat{X}\hat{P} = -i\hbar$ a été calculé au TD précédent. Il nous est donc possible de réécrire $\hat{P}\hat{X} = -i\hbar + \hat{X}\hat{P}$ et donc :

$$\begin{aligned} [\hat{X}, \hat{P}^2] &= \hat{X}\hat{P}^2 - \hat{P}^2\hat{X} = \hat{X}\hat{P}\hat{P} - \hat{P}\hat{P}\hat{X} \\ &= \hat{X}\hat{P}\hat{P} - \hat{P}(-i\hbar + \hat{X}\hat{P}) = \hat{X}\hat{P}\hat{P} + i\hbar\hat{P} - \hat{P}\hat{X}\hat{P} \\ &= \hat{X}\hat{P}\hat{P} + i\hbar\hat{P} - (-i\hbar + \hat{X}\hat{P})\hat{P} = 2i\hbar\hat{P}. \end{aligned} \quad (2)$$

Par conséquent,

$$[\hat{X}, \hat{H}] = \frac{1}{2m} [\hat{X}, \hat{P}^2] = \frac{1}{m} i\hbar\hat{P} \quad (3)$$

et l'équation du mouvement pour la position moyenne, s'écrit alors :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{X} \rangle_{(t)} = \langle [\hat{X}, \hat{H}] \rangle_{(t)} = \frac{1}{m} i\hbar \langle \hat{P} \rangle_{(t)}. \quad (4)$$

Puisque tel que prouvé précédemment, $\langle \hat{P} \rangle_{(t)} = \langle \hat{P} \rangle_{(t=0)}$ est conservé, on a alors :

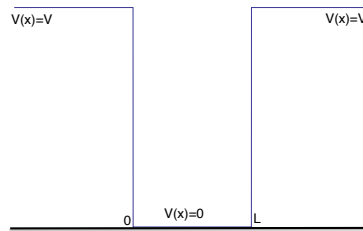
$$\frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{X} \rangle_{(t)} = \frac{\langle \hat{P} \rangle_{(t=0)}}{m}. \quad (5)$$

Le côté droit étant simplement une constante, on peut aisément intégrer l'équation pour trouver que la solution est bien :

$$\langle \hat{X} \rangle_{(t)} = \frac{\langle \hat{P} \rangle_{(t=0)}}{m} t + \langle \hat{X} \rangle_{(t=0)} \quad (6)$$

où la constante d'intégration à été choisie pour correspondre à la condition initiale de donner la position moyenne au temps $t = 0$.

2. Puits de potentiel carré infini



Pour une particule dans un potentiel carré infini ($V \rightarrow \infty$), on cherche à déterminer les solutions de l'équation de Schrödinger stationnaire :

$$\hat{H}\psi_n(x) = E_n\psi_n(x). \quad (7)$$

i) Quelles sont les conditions à $x = 0, L$ pour la fonction d'onde ?

SOLUTION

Le potentiel étant infini en 0 et L , la probabilité de présence de la particule (le carré de la fonction d'onde) doit s'y annuler. Sachez que cette condition aux frontières est particulière puisqu'habituellement on doit, aux interfaces entre

régions avoir la fonction d'onde et sa première dérivée qui soient continues. Par contre ici, on a tout simplement :

$$\psi(0) = \psi(L) = 0. \quad (8)$$

N.B. : Notez que si l'on était dans un boîte de dimension > 1 , la fonction d'onde devrait s'annuler dans toutes les régions de potentiel $V = \infty$. On trouverait donc, dans une boîte 3D de taille $[0, L_x], [0, L_y], [0, L_z]$ les conditions $\psi(0, y, z) = \psi(L_x, y, z) = \psi(x, 0, z) = \psi(x, L_y, z) = \psi(x, y, 0) = \psi(x, y, L_z) = 0$.

ii) Trouvez l'ensemble des fonctions d'onde $\psi_n(x)$ et les énergies propres E_n associées qui sont cohérentes avec ces conditions. Normalisez ces fonctions d'onde $\psi_n(x)$.

SOLUTION

À l'extérieur du puits, le potentiel étant infini, on doit avoir $\psi(x < 0) = \psi(x > L) = 0$.

Dans la région centrale, on a $V(x) = 0$ et donc l'équation de Schrödinger unidimensionnelle s'y écrit donc :

$$\hat{H}\psi_n(x) = \frac{\hat{P}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_n(x) = E_n \psi_n(x). \quad (9)$$

Les solutions de cette équation différentielle sont de la forme (pour n'importe quelles $\tilde{A}_n, \tilde{B}_n$ complexes) :

$$\psi_n(x) = \tilde{A}_n e^{ik_n x} + \tilde{B}_n e^{-ik_n x} \quad (10)$$

ce qu'on vérifie aisément en prenant la deuxième dérivée :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_n(x) = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} \tilde{A}_n e^{ik_n x} + \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} \tilde{B}_n e^{-ik_n x} = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} \psi_n(x). \quad (11)$$

On trouve donc une de ces fonctions propre pour toutes les valeurs possibles de $E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}$. En principe, toutes les énergies réelles et positives seraient permises ce qui formerait le continuum d'onde planes définissant les fonctions propres d'une particule libre. Par contre, ici, les conditions en $x = 0, L$ quantifieront les états d'énergie acceptables, puisque seules les fonctions s'annulant en ces deux points seront permises.

Il est plus simple d'appliquer les conditions frontières en utilisant plutôt la forme de solutions :

$$\psi_n(x) = A_n \sin(k_n x) + B_n \cos(k_n x), \quad (12)$$

dont vous pouvez aisément démontrer l'équivalence à (10) en utilisant les représentations en exponentielles complexes des fonctions sin et cos.

Sous cette forme, la première condition ($\psi_n(x=0) = 0$) devient :

$$\psi_n(x=0) = A_n \sin(0) + B_n \cos(0) = B_n = 0 \quad (13)$$

et la seconde ($\psi_n(x=L) = 0$) devient donc :

$$\psi_n(x=L) = A_n \sin(k_n L) + B_n \cos(k_n L) = A_n \sin(k_n L) + 0 = 0. \quad (14)$$

Seules les valeurs de k_n telles que $\sin(k_n L) = 0$ sont donc permises, ce qui correspond à la restriction aux états définis par $k_n = \frac{\pi n}{L}$, pour tout $n = 1, 2, 3, \dots$. Les fonctions propres permises deviennent donc :

$$\psi_n(x) = A_n \sin k_n x, \quad \forall k_n = \frac{\pi n}{L} \quad (15)$$

auxquelles sont associées une énergie propre ($\hat{H}\psi_n(x) = E_n\psi_n(x)$) :

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}. \quad (16)$$

Gardons en tête qu'à l'extérieur du puits, on a $\psi(x) = 0$ alors qu'à l'intérieur, on trouve les solutions en $\sin k_n x$ telles qu'elles s'annulent aux bords.

La normalisation de ces fonctions d'onde se fait en choisissant la constante A_n de sorte que :

$$\begin{aligned} \int_0^L |\psi_n(x)|^2 dx &= 1 \\ A_n^2 \int_0^L \sin^2(k_n x) dx &= A_n^2 \frac{L}{2} = 1 \\ A_n &= \sqrt{\frac{2}{L}} \end{aligned} \quad (17)$$

N.B. : Encore une fois, dans une boîte 3D de taille $[0, L_x], [0, L_y], [0, L_z]$, on devrait trouver les fonctions propres telles que $\hat{H}\psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z)$. Seules

certaines d'entre elles seraient admises, soit celles qui sont telles que les conditions d'annulation aux bords soient respectées.

iii) Pour une particule dont l'état quantique initial correspond exactement à un de ces états stationnaires au temps $t = 0$ écrivez sa fonction d'onde en tout temps ultérieur.

SOLUTION

À chaque fonction propre solution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps $\hat{H}\psi_n(x) = E_n\psi_n(x)$ correspond une solution à l'équation de Schrödinger dépendante du temps $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_n(x, t) = \hat{H}\psi_n(x, t)$. Son évolution étant explicitement donnée par

$$\psi_n(x, t) = e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}\psi_n(x), \quad (18)$$

puisque l'on trouve :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_n(x, t) = (i\hbar)(-i/\hbar)E_ne^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}\psi_n(x) = E_n\psi_n(x, t) \quad (19)$$

qui est bien égal à :

$$\hat{H}\psi_n(x, t) = \hat{H}\left[e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}\psi_n(x)\right] = e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}\hat{H}\psi_n(x) = e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}E_n\psi_n(x) = E_n\psi_n(x, t) \quad (20)$$

iv) Quelle est alors sa position, sa quantité de mouvement et son énergie moyenne en un temps donné ?

SOLUTION Puisque la fonction d'onde est normalisée, elle le demeure à tout temps ultérieur et on peut donc calculer les valeurs moyennes comme :

$$\langle \hat{X} \rangle_{(t)} = \int_0^L dx \psi_n^*(x, t) \hat{X} \psi_n(x, t) = \int_0^L dx e^{i\frac{E_n}{\hbar}t} \psi_n^*(x) \cdot x \cdot \psi_n(x) e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} = \int_0^L dx \frac{2}{L} x \sin^2(k_n x) = L/2. \quad (21)$$

La particule est donc en moyenne au centre du puits et ce résultat demeure vrai en tout temps.

Son énergie moyenne, on le sait, doit être conservée (puisque $[\hat{H}, \hat{H}] = 0$) et ce pour tout état initial. Dans le cas qui nous intéresse ici (fonction d'onde composée d'un seul de ces états propres), le calcul explicite nous donne :

$$\begin{aligned} \langle \hat{H} \rangle_{(t)} &= \int_0^L dx \psi_n^*(x, t) \hat{H} \psi_n(x, t) = \int_0^L dx e^{i\frac{E_n}{\hbar}t} \psi_n^*(x) e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \hat{H} \psi_n(x) \\ &= \int_0^L dx \psi_n^*(x) E_n \psi_n(x) = E_n \int_0^L dx |\psi_n(x)|^2 = E_n, \end{aligned} \quad (22)$$

et son énergie (moyenne) est donc donnée par E_n . Notons aussi que l'on alors un seul état propre constituant la fonction d'onde et donc une mesure de l'énergie donnerait aussi toujours le même résultat soit la valeur propre correspondante E_n . Non seulement, l'énergie moyenne, mais aussi toutes les mesures de l'énergie donnent donc ce même résultat.

L'impulsion moyenne, quant à elle, s'obtient par un calcul similaire :

$$\begin{aligned}\langle \hat{P} \rangle_{(t)} &= \int_0^L dx \psi_n^*(x, t) \hat{P} \psi_n(x, t) = \int_0^L dx e^{i \frac{E_n}{\hbar} t} \psi_n^*(x) \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t} \psi_n(x) \\ &= -i\hbar \frac{2}{L} k_n \int_0^L dx \sin(k_n x) \cos(k_n x) = 0,\end{aligned}\tag{23}$$

et ce en tout temps.

v) Une superposition linéaire de ces solutions demeure aussi une solution. Pour une fonction d'onde initiale donnée par une superposition égale (et de même phase) des deux fonctions propres de plus basse énergie : $\psi(x, t = 0) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1(x) + \psi_2(x))$, quel est l'état à un temps ultérieur.

SOLUTION

On sait en effet qu'une superposition de solution d'une équation différentielle (ici l'éq. de Schrödinger dépendante du temps) est elle aussi une solution de cette équation. Une solution possible de l'éq. de Schrödinger dépendante du temps est donc donnée par :

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_1(x, t) + \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_2(x, t)\tag{24}$$

puisque en effet

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_1(x, t) + i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_2(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \hat{H} \psi_1(x, t) + \frac{1}{\sqrt{2}} \hat{H} \psi_2(x, t) = \hat{H} \psi(x, t).\tag{25}$$

Compte tenu de la relation entre $\psi_n(x, t)$ et la fonction propre indépendante du temps $\psi_n(x)$, soit : $\psi_n(x, t) = e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t} \psi_n(x)$, on sait donc que la solution précédente est bien celle dont l'état initial est donné par :

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_1(x, 0) + \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_2(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_1(x) + \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_2(x),\tag{26}$$

et elle correspond donc bien à la solution (unique) de l'éq. différentielle de Schrödinger dépendante du temps dont l'état initial à $t = 0$ est celui qui vous était donné.

vi) Comment évolue alors dans le temps l'énergie moyenne et la position moyenne ?

SOLUTION

Connaissant la fonction d'onde en tout temps, il devient simple de calculer, à l'aide des opérateurs, l'évolution temporelle des observables moyennes.

D'abord calculons la norme de la fonction d'onde proposée, au temps $t = 0$, puisqu'elle ne changera pas.

$$\begin{aligned} \int_0^L dx \psi^2(x, 0) \psi(x, 0) &= \frac{2}{L} \frac{1}{2} (\sin(k_1 x)^2 + \sin(k_2 x)^2 + 2 \sin(k_1 x) \sin(k_2 x)) \\ &= \frac{1}{L} \left(\frac{L}{2} + \frac{L}{2} + 0 \right) = 1, \end{aligned} \quad (27)$$

et la fonction d'onde est bien normalisée. Notons que le 0 dû au terme croisé $\psi_1 \psi_2$ peut être calculé explicitement en utilisant la quatrième intégrale donnée dans l'énoncé, mais puisque deux états propres différents sont (on l'a prouvé) orthogonaux, l'intégrale $\int dx \psi_n(x) \psi_m(x)$ doit être nulle pour $m \neq n$.

On a toujours conservation de l'énergie moyenne, puisque $\hat{H}$ commute avec lui-même ($[\hat{H}, \hat{H}] = 0$). En utilisant

$$\hat{H} \psi_n(x, t) = \hat{H} e^{i \frac{E_n}{\hbar} t} \psi_n(x) = e^{i \frac{E_n}{\hbar} t} \hat{H} \psi_n(x) = e^{i \frac{E_n}{\hbar} t} E_n \psi_n(x) = E_n \psi_n(x, t) \quad (28)$$

sa valeur nous est explicitement donnée par :

$$\begin{aligned} \langle \hat{H} \rangle_{(t)} &= \frac{1}{2} \int_0^L dx (\psi_1^*(x, t) + \psi_2^*(x, t)) \hat{H} (\psi_1(x, t) + \psi_2(x, t)) \\ &= \frac{1}{2} \int_0^L dx (\psi_1^*(x, t) + \psi_2^*(x, t)) (E_1 \psi_1(x, t) + E_2 \psi_2(x, t)) \\ &= \frac{1}{2} \int_0^L dx (E_1 |\psi_1(x, t)|^2 + E_2 |\psi_2(x, t)|^2 + E_1 \psi_1(x, t) \psi_2^*(x, t) + E_2 \psi_1^*(x, t) \psi_2(x, t)) \\ &= \frac{E_1 + E_2}{2}. \end{aligned} \quad (29)$$

Cette superposition égale des deux fonctions propres de plus basse énergie donne donc une énergie moyenne correspondant à la moyenne de ces deux énergies propres. La fonction d'onde est en effet décomposée en une superposition de ces deux fonctions propres, dont les coefficients sont $C_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i \frac{E_1}{\hbar} t}$

et $C_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i \frac{E_2}{\hbar} t}$. Par conséquent, une mesure de l'énergie nous donnerait avec probabilité $|C_1|^2 = \frac{1}{2}$ la première énergie propre E_1 et avec la même probabilité $|C_2|^2 = \frac{1}{2}$ on mesurerait E_2 , ce qui, au final donne bien la mesure moyenne calculée.

Parallèlement,

$$\begin{aligned}
\langle \hat{X} \rangle_{(t)} &= \frac{1}{2} \int_0^L dx (\psi_1^*(x, t) + \psi_2^*(x, t)) x (\psi_1(x, t) + \psi_2(x, t)) \\
&= \frac{1}{2} \frac{L}{2} \int_0^L dx x \left(e^{i \frac{E_1}{\hbar} t} \sin(k_1 x) + e^{i \frac{E_2}{\hbar} t} \sin(k_2 x) \right) \left(e^{-i \frac{E_1}{\hbar} t} \sin(k_1 x) + e^{-i \frac{E_2}{\hbar} t} \sin(k_2 x) \right) \\
&= \frac{1}{L} \int_0^L dx x \left(\sin^2(k_1 x) + \sin^2(k_2 x) + \left(e^{i \frac{E_1 - E_2}{\hbar} t} + e^{-i \frac{E_1 - E_2}{\hbar} t} \right) \sin(k_1 x) \sin(k_2 x) \right) \\
&= \frac{1}{L} \int_0^L dx x \left(\sin^2(k_1 x) + \sin^2(k_2 x) + 2 \cos \left(\frac{E_1 - E_2}{\hbar} t \right) \sin(k_1 x) \sin(k_2 x) \right) \\
&= \frac{1}{L} \left(\frac{L^2}{4} + \frac{L^2}{4} - \frac{8}{9} \frac{L^2}{\pi^2} 2 \cos \left(\frac{E_1 - E_2}{\hbar} t \right) \right) = \frac{L}{2} - \frac{16}{9} \frac{L}{\pi^2} \cos \left(\frac{E_1 - E_2}{\hbar} t \right), \quad (30)
\end{aligned}$$

la dernière intégrale étant une des formes donnée dans l'énoncé.

Cette fois, la superposition de deux états propres, mène à un dynamique non-triviale des quantités physiques comme la position moyenne. En effet, on constate que cette dernière oscille, autour du centre du puits, à une fréquence donnée par la différence entre les deux énergies propres impliquées.

Un vidéo de l'évolution de la probabilité de présence en fonction de x : $|\psi(x, t)|^2$ devrait vous avoir été montrée.

Quelques intégrales :

$$\begin{aligned}
\int dx \sin^2(ax) &= \frac{x}{2} - \frac{\sin(2ax)}{4a} + C \\
\int dx x \sin^2(ax) &= \frac{x^2}{4} - \frac{x \sin(2ax)}{4a} - \frac{\cos(2ax)}{8a^2} + C \\
\int dx \sin(ax) \cos(ax) &= -\frac{\cos^2(ax)}{2a} + C \\
\int dx x \sin(ax) \sin(bx) &= \frac{\cos[(a-b)x]}{2(a-b)^2} - \frac{\cos[(a+b)x]}{2(a+b)^2} + \frac{x \sin[(a-b)x]}{2(a-b)} - \frac{x \sin[(a+b)x]}{2(a+b)} + C
\end{aligned}$$

3. La barrière de potentiel

Trouvez les solutions de l'équation de Schrödinger indépendante du temps pour un système dont le potentiel est constitué d'une barrière de largeur L et de hauteur V .

On cherche les solutions qui sont apte à décrire une flux de particules incidentes de $x = -\infty$ qui peuvent être réfléchies ou transmises à la barrière. Puisque qu'il ne peut y avoir de particules provenant de $x = +\infty$, on cherche spécifiquement les solutions pour lesquelles le coefficient devant une onde se propageant de $x = +\infty$ vers la barrière est choisi nul.

i) En appliquant les conditions aux deux interfaces trouvez les solutions stationnaires correspondant au problème d'intérêt dans les deux cas $E < V$, $E > V$.

SOLUTION

Il existe ici trois régions distinctes $x < 0$, $0 < x < L$ et $x > L$, dans lesquelles la particule est soumise à un potentiel constant valant respectivement $V_1 = 0, V_2 = V$ et $V_3 = 0$.

Dans la région $i (= 1, 2, 3)$, l'équation de Schrödinger indépendante du temps, pour une fonction d'énergie propre E s'écrit :

$$\begin{aligned}\hat{H}\psi_E(x) &= E\psi_E(x) \\ \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial}{\partial x^2} + V_i\right)\psi_E(x) &= E\psi_E(x) \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial}{\partial x^2}\psi_E(x) &= (E - V_i)\psi_E(x).\end{aligned}\tag{31}$$

Dans les régions 1 et 3, c'est encore et toujours la même équation que pour une particule libre $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial}{\partial x^2}\psi_n(x) = E\psi_n(x)$, dont on connaît les solutions générales pour une énergie propre E donnée.

$$\psi_E(x) = \begin{cases} A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x} & x < 0 \\ A_3 e^{ik_3 x} + B_3 e^{-ik_3 x} & x > L \end{cases}\tag{32}$$

avec le vecteur d'onde choisi pour que $\frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k_3^2}{2m} = E$.

La région 2 quant à elle aura des solutions différentes selon que l'énergie propre nous intéressant E soit $> V$ ou $< V$.

Pour des énergies $E > V$ l'équation de Schrödinger dans cette région devient alors :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial}{\partial x^2}\psi_n(x) = (E - V)\psi_n(x),\tag{33}$$

et le terme $E - V$ est alors positif. Dans ce cas, les solutions sont alors de la même forme que précédemment, mais les vecteurs d'onde dans la région de la barrière doivent être choisis afin que $\frac{\hbar^2 k_2^2}{2m} = E - V$. Le vecteur d'onde k_2 est donc plus petit que celui trouvé dans les deux autres régions et la fonction propre totale s'écrit alors :

$$\psi_{E>V}(x) = \begin{cases} A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x} & x < 0 \\ A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x} & 0 < x < L \\ A_3 e^{ik_1 x} + B_3 e^{-ik_1 x} & x > L \end{cases} \quad (34)$$

avec $k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ et $k_2 = \sqrt{\frac{2m(E-V)}{\hbar^2}}$.

Des solutions existent aussi pour des énergies propres $E < V$ et bien qu'elles soient identiques dans les régions extérieures à la barrière, elles diffèrent sous la barrière, puisque dans ce cas, $E - V$ devient alors négatif. Par conséquent, $-\frac{\hbar^2}{2m}$ multipliant la deuxième dérivée des exponentielles doit cette fois donner une valeur négative. Alors que pour $E > V$ on trouvait des exponentielles complexes (et le carré de $(-ik)$ donnant des valeurs positives), ici on doit utiliser des exponentielles réelles afin d'obtenir un préfacteur négatif.

En effet, dans la région de la barrière, la solution générale :

$$\psi_2(x) = A_2 e^{\kappa x} + B_2 e^{-\kappa x}, \quad (35)$$

est bien telle que

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_2(x) = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} A_2 e^{\kappa x} - \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} B_2 e^{-\kappa x} = (E - V) \psi_2(x), \quad (36)$$

du moment que κ est tel que $\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} = |E - V|$.

Il nous reste à utiliser les conditions aux interfaces afin de relier entre eux les divers coefficients.

Dans les deux cas, la fonction d'onde doit être continue ainsi que sa première dérivée. Ceci nous assure l'existence de la deuxième dérivée à chacune des interfaces, deuxième dérivée que l'équation de Schrödinger relie à la valeur de la fonction en ces points.

On doit donc avoir $\psi_1(0) = \psi_2(0)$ et $\frac{\partial \psi_1}{\partial x}(0) = \frac{\partial \psi_2}{\partial x}(0)$ ainsi que $\psi_2(L) = \psi_3(L)$ et $\frac{\partial \psi_2}{\partial x}(L) = \frac{\partial \psi_3}{\partial x}(L)$.

De plus, tel que mentionné dans l'énoncé, on s'intéresse ici à un flux de particules incidentes de $x = -\infty$, pouvant être réfléchies ou transmises à travers la barrière. Puisque aucune particule ne peut revenir de l'infini, on cherche des

solution pour lesquelles le coefficient $B_3 = 0$, puisque l'onde associée ayant comme vecteur d'onde $-k_1$, se propage vers la gauche (ayant une impulsion $-\hbar k_1$).

- Cas $E > V$

En 0, on trouve donc pour $E > V$ les conditions :

$$\begin{aligned} A_1 e^{ik_1 0} + B_1 e^{-ik_1 0} &= A_2 e^{ik_2 0} + B_2 e^{-ik_2 0} \rightarrow A_1 + B_1 = A_2 + B_2 \\ ik_1 A_1 e^{ik_1 0} - ik_1 B_1 e^{-ik_1 0} &= ik_2 A_2 e^{ik_2 0} - ik_2 B_2 e^{-ik_2 0} \rightarrow k_1 A_1 - k_1 B_1 = k_2 A_2 - k_2 B_2 \end{aligned} \quad (37)$$

En $x = L$, les deux équations obtenues deviennent (puisque $B_3 = 0$) :

$$\begin{aligned} A_2 e^{ik_2 L} + e^{-ik_2 L} B_2 &= e^{ik_1 L} A_3 \\ ik_2 A_2 e^{ik_2 0} - ik_2 B_2 e^{-ik_2 0} &= ik_1 A_3 e^{ik_1 L} \rightarrow k_2 (A_2 e^{ik_2 L} - B_2 e^{-ik_2 L}) = k_1 e^{ik_1 L} A_3 \end{aligned} \quad (38)$$

Nous trouvons donc un système de 4 équations pour 4 inconnues B_1, A_2, B_2, A_3 . En effet, A_1 demeure un paramètre libre, puisqu'il décrit la quantité de particules incidentes qui est librement choisi dans l'expérience selon le flux incident de particules. Les divers coefficients donc donc reliés par le fait qu'ils doivent être solution du système :

$$\begin{aligned} A_1 + B_1 &= A_2 + B_2 \\ k_1 A_1 - k_1 B_1 &= k_2 A_2 - k_2 B_2 \\ A_2 e^{ik_2 L} + B_2 e^{-ik_2 L} &= e^{ik_1 L} A_3 \\ k_2 (A_2 e^{ik_2 L} - B_2 e^{-ik_2 L}) &= k_1 e^{ik_1 L} A_3 \end{aligned} \quad (39)$$

- Cas $E < V$

Pour des énergies sous la barrière, on trouve identiquement les 4 équations suivantes :

$$\begin{aligned} A_1 + B_1 &= A_2 + B_2 \\ (A_1 - B_1) &= \kappa (A_2 - B_2) \\ (A_2 e^{\kappa L} - B_2 e^{-\kappa L}) &= e^{ik_1 L} A_3 \\ \kappa (A_2 e^{\kappa L} - B_2 e^{-\kappa L}) &= ik_1 e^{ik_1 L} A_3 \end{aligned} \quad (40)$$

ii) En calculant les rapports entre les divers coefficients, déduisez les coefficients de réflexion et de transmission de la barrière pour un état d'énergie donnée.

SOLUTION

On s'intéresse maintenant aux rapports entre l'amplitude de la fonction réfléchie et de celle incidente $r = \frac{B_1}{A_1}$ et entre la fonction transmise et celle incidente $t = \frac{A_3}{A_1}$.

Dans le cas $E > V$, les équations :

$$\begin{aligned} A_2 e^{ik_2 L} + B_2 e^{-ik_2 L} &= e^{ik_1 L} A_3 \\ k_2 (A_2 e^{ik_2 L} - B_2 e^{-ik_2 L}) &= k_1 e^{ik_1 L} A_3 \end{aligned} \quad (41)$$

peuvent être combinées en multipliant la première par k_1 pour trouver :

$$\begin{aligned} k_1 A_2 e^{ik_2 L} + k_1 B_2 e^{-ik_2 L} &= k_2 (A_2 e^{ik_2 L} - B_2 e^{-ik_2 L}) \\ A_2 e^{ik_2 L} (k_1 - k_2) &= -B_2 e^{-ik_2 L} (k_2 + k_1) \\ B_2 &= -A_2 e^{i2k_2 L} \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \end{aligned} \quad (42)$$

qui relie A_2 et B_2 .

Les deux autres équations de départ :

$$\begin{aligned} A_1 + B_1 &= A_2 + B_2 \\ k_1 A_1 - k_1 B_1 &= k_2 A_2 - k_2 B_2 \end{aligned} \quad (43)$$

peuvent donc être réécrites comme :

$$\begin{aligned} A_1 + B_1 &= A_2 \left(1 - e^{i2k_2 L} \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right) \\ k_1 A_1 - k_1 B_1 &= k_2 A_2 \left(1 + e^{i2k_2 L} \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right) \end{aligned} \quad (44)$$

On peut donc annuler la présence de A_2 en multipliant la première équation par $\frac{k_2 \left(1 + e^{i2k_2 L} \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)}{\left(1 - e^{i2k_2 L} \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)}$ en en la soustrayant de la seconde. L'équation résultante (ne vous souciez pas du long calcul algébrique) nous donne alors le rapport $r = \frac{B_1}{A_1}$ donné par :

$$r = \frac{(k_1 - k_2)(k_1 + k_2) \sin(k_2 L)}{2ik_1 k_2 \cos(k_2 L) + (k_1^2 + k_2^2) \sin(k_2 L)} = \frac{(k_1^2 - k_2^2) \sin(k_2 L)}{2ik_1 k_2 \cos(k_2 L) + (k_1^2 + k_2^2) \sin(k_2 L)} \quad (45)$$

Identiquement, on trouve le rapport

$$t = \frac{A_3}{A_1} = \frac{4e^{i(k_2-k_1)L}k_1k_2}{(k_1+k_2)^2 - (k_1-k_2)^2e^{i2k_2L}}. \quad (46)$$

Ces deux coefficients représente le rapport entre l'amplitude de l'onde incidente (A_1) et celle des ondes réfléchies B_1 et de celle transmise par la barrière A_3 . Ce ne sont pas encore les coefficients de réflexion et de transmission qui eux sont définis comme leur norme au carré. En effet, puisque c'est la norme au carré des fonctions d'onde qui définissent la probabilité de présence, c'est le rapport de ces amplitudes au carré $R = |r|^2$ et $T = |t|^2$ qui sont les coefficients de réflexion et de transmission.

On a donc :

$$\begin{aligned} R &= rr^* = \frac{(k_1^2 - k_2^2) \sin(k_2L)}{2ik_1k_2 \cos(k_2L) + (k_1^2 + k_2^2) \sin(k_2L)} \frac{(k_1^2 - k_2^2) \sin(k_2L)}{-2ik_1k_2 \cos(k_2L) + (k_1^2 + k_2^2) \sin(k_2L)} \\ &= \frac{(k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2(k_2L)}{4k_1^2k_2^2 \cos^2(k_2L) + (k_1^2 + k_2^2)^2 \sin^2(k_2L)} \end{aligned} \quad (47)$$

et

$$\begin{aligned} T &= tt^* = \frac{4e^{i(k_2-k_1)L}k_1k_2}{(k_1+k_2)^2 - (k_1-k_2)^2e^{i2k_2L}} \frac{4e^{-i(k_2-k_1)L}k_1k_2}{(k_1+k_2)^2 - (k_1-k_2)^2e^{-i2k_2L}} \\ &= \frac{4^2k_1^2k_2^2}{(k_1+k_2)^4 + (k_1-k_2)^4 - (k_1+k_2)^2(k_1-k_2)^2(e^{i2k_2L} + e^{-i2k_2L})} \end{aligned} \quad (48)$$

qui se simplifie (péniblement) pour donner :

$$T = \frac{4k_1^2k_2^2}{4k_1^2k_2^2 \cos^2(k_2L) + (k_1^2 + k_2^2)^2 \sin^2(k_2L)}. \quad (49)$$

Une dernière vérification algébrique peut être faite pour prouver que $T+R=1$. On doit interpréter ici ces fonctions propres comme décrivant un flux de particules de vecteur d'onde k_1 et donc d'impulsion ($p = \hbar k_1$) et d'énergie bien définie ($E = \frac{p^2}{2m}$) provenant de $-\infty$. Même si l'énergie des particules est telle que $E > V$, la mécanique quantique implique qu'une partie de ces particules seront réfléchies.

$T + R = 1$ est une conséquence inévitable du fait que ce qui n'est pas transmis doit être réfléchi, quand on parle d'une quantité conservée comme la norme au carré d'une fonction d'onde incidente.

Dans le cas $E < V$, notez que les calculs sont **ABSOLUMENT** identiques aux précédents. La seule différence étant le remplacement, dans la région de la barrière, de k_2 par $-i\kappa$. Le remplacement direct nous donne donc :

$$\begin{aligned}
T &= \frac{4k_1^2(-i\kappa)^2}{4k_1^2(-i\kappa)^2 \cos^2(-i\kappa L) + (k_1^2 + (-i\kappa)^2)^2 \sin^2(-i\kappa L)} \\
&= \frac{-4k_1^2\kappa^2}{-4k_1^2\kappa^2 \cosh^2(\kappa L) - (k_1^2 - \kappa^2)^2 \sinh^2(\kappa L)} \\
&= \frac{4k_1^2\kappa^2}{4k_1^2\kappa^2 \cosh^2(\kappa L) + (k_1^2 - \kappa^2)^2 \sinh^2(\kappa L)}, \tag{50}
\end{aligned}$$

alors que R serait toujours donné par :

$$R = 1 - T \tag{51}$$

L'existence d'une transmission au travers de la barrière même pour des particules d'énergies $E < V$ est connue sous le nom d'effet tunnel et est due à la capacité qu'ont les particules quantiques d'avoir une probabilité non-nulle de présence dans des régions qui leur seraient classiquement interdites.

4. Puits de potentiel fini

Pour une particule dans un puits de potentiel carré fini (de profondeur V) défini par 3 régions de potentiel $V(x) = V$ pour $x < -L/2$ et $x > L/2$ et $V(x) = 0$ pour $-L/2 < x < L/2$, on cherche à déterminer les solutions stationnaires de l'équation de Schrödinger indépendante du temps :

$$\hat{H}\psi_n(x) = E_n\psi_n(x) \tag{52}$$

On dénote alors deux types de solutions selon que $E < V$ (dans le puits) ou $E > V$ (au dessus du puits). On s'intéressera ici spécifiquement aux états liés pour lesquels $E < V$.

i) Écrivez les solutions possibles dans chacune des trois régions et les conditions aux interfaces $x = 0$ et $x = L$. Que conclure du comportement des solutions à $x \rightarrow \pm\infty$.

SOLUTION

Selon les régions on aura $E < V(x)$ à l'extérieur du puits ou $E > V(x)$ dans le puits. Ces deux cas ont déjà été discutés dans l'exercice précédente et les

solutions de l'équation de Schrödinger y sont respectivement données par les ondes planes ($E > V(x)$) ou par les ondes exponentielles ($E < V(x)$).

$$\psi_{E>V}(x) = \begin{cases} A_1 e^{\kappa x} + B_1 e^{-\kappa x} & x < -L/2 \\ A_2 e^{ikx} + B_2 e^{-ikx} & -L/2 < x < L/2 \\ A_3 e^{ikx} + B_3 e^{-ikx} & x > L/2 \end{cases} \quad (53)$$

avec $\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} = |E - V|$ et $\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E$.

Les conditions aux interfaces sont toujours les mêmes, soit la continuité de la fonction d'onde et de sa première dérivée.

$$\begin{aligned} \psi_1(-L/2) &= \psi_2(-L/2) \\ \psi'_1(-L/2) &= \psi'_2(-L/2) \\ \psi_2(L/2) &= \psi_3(L/2) \\ \psi'_2(L/2) &= \psi'_3(L/2) \end{aligned} \quad (54)$$

Lorsque $x \rightarrow \pm\infty$ une des exponentielles $e^{\mp\kappa x}$ diverge à l'infini. Ceci mènerait donc à une situation où la probabilité de trouver la particule à l'infini devient infinie, ce qui demeure contraire même aux lois étranges de la mécanique quantique. On se doit donc pour des raisons physiques d'annuler les coefficients correspondant à ces solutions mathématiquement correctes, mais physiquement inadmissibles. La solution générale se réduit donc à :

$$\psi_{E<V}(x) = \begin{cases} A_1 e^{\kappa x} & x < -L/2 \\ A_2 e^{ikx} + B_2 e^{-ikx} & -L/2 < x < L/2 \\ B_3 e^{-\kappa x} & x > L/2 \end{cases} \quad (55)$$

toujours avec $\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} = |E - V|$ et $\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E$.

Les conditions de continuité peuvent donc s'écrire comme :

$$\begin{aligned} A_1 e^{-\kappa L/2} &= A_2 e^{-ikL/2} + B_2 e^{ikL/2} \\ -\kappa A_1 e^{-\kappa L/2} &= -ik A_2 e^{-ikL/2} + ik B_2 e^{ikL/2} \\ A_2 e^{ikL/2} + B_2 e^{-ikL/2} &= B_3 e^{-\kappa L/2} \\ ik A_2 e^{ikL/2} - ik B_2 e^{-ikL/2} &= -\kappa B_3 e^{-\kappa L/2} \end{aligned} \quad (56)$$

ii) Les conditions imposées impliquent la quantification des niveaux d'énergie et des fonctions d'onde stationnaires associées. Deux types de solutions existent, celle qui sont symétriques et celle qui sont antisymétriques (les deux coefficients dans le puits sont reliés

par $B_2 = \pm A_2$). Le sachant trouvez les équation transcendantes dont la solution nous donnerait les niveaux d'énergie.

N.B. Les états obtenus pour $E > V$ formeraient un continuum absolument équivalent aux résultats obtenus pour la barrière de potentiel. En effet, le puits est mathématiquement équivalent à une barrière de hauteur V négative. Pour chaque énergie, on trouverait les vecteurs d'ondes $k_1 = k_3$ et k_2 dans chaque région et les conditions aux interfaces $x = 0, L$ fixeraient les divers coefficients en fonction de l'amplitude incidente A_1 . Tout aussi spectaculaire que pour la barrière la réflexion d'une particule incidente par un PUIITS de potentiel devient possible en mécanique quantique.

SOLUTION

Dans le cas symétrique, on a $A_2 = B_2$ et par conséquent, les deux premières équations se réduisent à :

$$\begin{aligned} A_1 e^{-\kappa L/2} &= 2A_2 \cos(kL/2) \\ -\kappa A_1 e^{-\kappa L/2} &= -2A_2 k \sin(kL/2) \end{aligned} \quad (57)$$

Leur rapport nous donne donc :

$$\frac{\kappa}{k} = \tan(kL/2). \quad (58)$$

Puisque κ et k dépendent tous deux de l'énergie, c'est bien une équation transcendante où notre seule approche serait de rechercher numériquement ou graphiquement les valeurs d'énergie auxquelles se croisent les deux courbes.

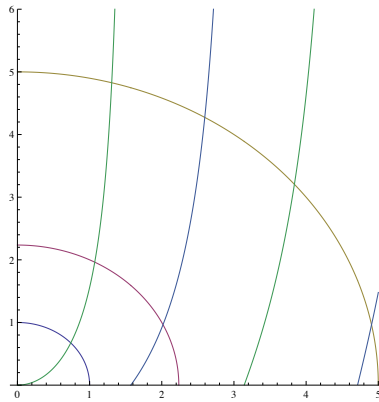
Identiquement pour les solutions antisymétriques, on aura cette fois $B_2 = -A_2$. Par conséquent, on trouve plutôt :

$$\begin{aligned} A_1 e^{-\kappa L/2} &= -2iA_2 \sin(kL/2) \\ -\kappa A_1 e^{-\kappa L/2} &= -2ikA_2 \cos(kL/2). \end{aligned} \quad (59)$$

dont le rapport nous indique ce ces solutions n'existent que si :

$$\frac{\kappa}{k} = -\cot(kL/2) \quad (60)$$

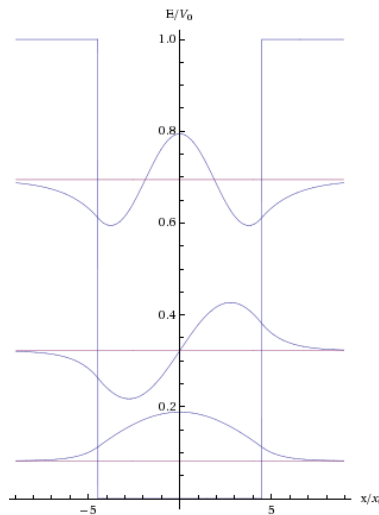
À la figure suivante on trace un exemple de solution graphique de ces équations. On a en bleu rose et jaune, des segment de cercles $f_1(v) = \sqrt{u_0^2 - v^2}$ dont le rayon est donné par $u_0 = \frac{mL^2V}{2\hbar^2}$. En vert et en bleu pâle on trouve les diverses branches des fonction $v \tan(v)$ et $-v \cot(v)$. Le tout étant tracé en fonction de la variable $v = \frac{kL}{2}$.



Les points de croisement se font donc à certaines valeurs discrètes de v et donc de k et donc de E . Notez que pour des potentiel plus profonds, on trouvera alors plus de solutions possibles, c'est-à-dire plus d'états liés quantiques dans ce puits. Par contre, de par la géométrie des choses, on comprend bien que pour un potentiel arbitrairement peu profond (cercle de rayon très petit), il existera toujours au moins un croisement et donc un état confiné dans ce puits. Ce dernier croisera la branche $\tan(kL/2)$ et sera donc associé à une fonction d'onde symétrique. En augmentant la profondeur du puits suffisamment, on pourra alors trouver 2 états liés, un symétrique et un antisymétrique et ainsi de suite.

iii) Faites un schéma de l'allure de quelques fonctions d'onde pour des états stationnaires de basse énergie.

SOLUTION



Notez l'extension des fonction d'ondes dans les régions classiquement interdites de potentiel plus élevé que l'énergie de la particule, mais qu'elle demeurent limités dans l'espace et donc normalisables.

Le confinement dû au puits est responsable de la quantification des énergies propres de ce système. Les conditions aux interfaces forçant le système à n'être compatible qu'avec certaines valeurs de k (et donc de κ et donc de l'énergie). C'était la même chose dans le puits infini où le confinement avait la même conséquence.

Par contre, les fonctions calculées pour la barrière et celles que l'on trouverait ici pour des énergies E/V forment un continuum. Ces fonctions propres du continuum n'étant pas normalisables elles ne peuvent représenter un état physique d'une particule unique. Par contre, elles peuvent servir de base de fonctions sur laquelle on pourra décomposer des fonctions d'ondes qui elle seraient normalisables.

Pour la particule libre, les fonctions propres sont les ondes planes. Par contre toute fonction normalisable (une gaussienne par exemple) peut-être décomposée comme une somme (infinie) d'ondes plane. C'est la transformée de Fourier.