Mécanique quantique – L2

Antoine Bourget – Alain Comtet - Antoine Tilloy

Séance du 5 Décembre 2014 - www.lkb.ens.fr/rubrique327

TD 8 : Potentiels à une dimension

1 Transmission par un potentiel périodique

On considère une particule de masse m se déplaçant dans un potentiel $V(x)$ tel que :

$$\begin{aligned} x &\in \left[-\frac{d}{2}, \frac{d}{2}\right] \qquad V(x) \neq 0 \\ x &\notin \left[-\frac{d}{2}, \frac{d}{2}\right] \qquad V(x) = 0. \end{aligned}$$

1. Écrire l'équation de Schrödinger stationnaire d'énergie $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$.

2. On considère les états stationnaires de diffusion

$$\begin{aligned} x &< -d/2 \qquad \psi_l(x) = e^{ikx} + r(k)e^{-ikx} \\ x &> d/2 \qquad \psi_l(x) = t(k)e^{ikx}. \end{aligned}$$

   En utilisant la conservation du courant montrer que $|r(k)|^2 + |t(k)|^2 = 1$. Donner l'interprétation physique des coefficients $r(k)$ et $t(k)$.
   La phase du coefficient de transmission $t(k) = |t(k)|e^{i\delta}$ est appelée déphasage.

3. On suppose dorénavant le potentiel symétrique $V(x) = V(-x)$. Quelle est l'interprétation de la solution

$$\begin{aligned} x &< -d/2 \qquad \psi_r(x) = t(k)e^{-ikx} \\ x &> d/2 \qquad \psi_r(x) = e^{-ikx} + r(k)e^{ikx}. \end{aligned}$$

4. Soient ψ_1 et ψ_2 deux solutions de même énergie de l'équation de Schrödinger. On définit le Wronskien des deux solutions par l'expression $W(x) = \psi_1'\psi_2 - \psi_1\psi_2'$. Montrer que $W(x)$ est indépendant de x et non nul si les deux solutions sont linéairement indépendantes. Calculer le Wronskien de ψ_l et ψ_r et montrer que

$$r(k) = \pm i|r|e^{i\delta}$$

5. On étudie la diffusion d'une particule par le potentiel périodique

$$U(x) = \sum_{p\in\mathbb{Z}} V(x - pd)$$

   En utilisant le théorème de Bloch, montrer que les fonctions propres communes de $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{U}$ et de l'opérateur de translation $\hat{T}_d$ satisfont

$$\begin{aligned} \psi(x+d) &= e^{iqd}\psi(x) \\ \psi'(x+d) &= e^{iqd}\psi'(x). \end{aligned}$$

6. Décomposer ces fonctions propres sur la base ψ_r, ψ_l et en déduire que
$$\cos qd = \frac{t^2 - r^2}{2t} e^{ikd} + \frac{1}{2t} e^{-ikd} \tag{1}$$
7. En utilisant la question 4 montrer que
$$\cos qd = \frac{\cos(kd + \delta)}{|t|} \tag{2}$$
Pourquoi les états de nombre d'onde k tel que $kd + \delta = 2n\pi$ ne sont-ils pas dans le spectre ? Discuter qualitativement les états accessibles.
8. Application : calculer $t(k)$ et $r(k)$ dans le cas d'une série de barrières delta telle que
$$V(x) = \frac{\hbar^2 \mu}{2m} \delta(x) \tag{3}$$
et retrouver la structure de bandes obtenue au TD 7.

2 Localisation d'Anderson

1. Pour une barrière de potentiel de support borné $[-\frac{d}{2}, \frac{d}{2}]$ on définit les états de diffusion
$$\begin{array}{llll} x & < -\frac{d}{2} & & \psi(x) = ae^{ikx} + be^{-ikx} \\ x & > \frac{d}{2} & & \psi(x) = ce^{ikx} + de^{-ikx} \end{array}$$
Vérifier que les amplitudes de part et d'autre de la barrière sont reliées par la relation
$$\begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\bar{t}} & -\frac{\bar{r}}{\bar{t}} \\ -\frac{r}{t} & \frac{1}{t} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$
2. On considère deux potentiels disjoints V_1 et V_2 de supports bornés. On note d la distance séparant les supports des deux potentiels et on considère l'évolution d'une particule dans le potentiel $V = V_1 + V_2$.
Montrer que le coefficient de transmission de la barrière est
$$t = \frac{t_1 t_2 e^{ikd}}{1 - r_1 r_2 e^{2ikd}}$$
3. *Transmission par un potentiel désordonné.* On considère une succession de potentiels identiques séparés d'une distance aléatoire . On désigne par d_n la distance séparant le potentiel n du potentiel $n+1$. On supposera la variable aléatoire $\phi_n = kd_n$ équirépartie sur $[0, 2\pi]$. Montrer que la probabilité de transmission satisfait la relation de récurrence aléatoire
$$T_{n+1} = \frac{T_1 T_n}{|1 - r_1 r_n e^{2i\phi_n}|^2}$$
En moyennant sur ϕ_n montrer que
$$< \ln T_{n+1} >=< \ln T_n > + \ln T_1$$
En déduire $< \ln T_n >$.
On admettra que pour $\alpha < 1$
$$\int_0^{2\pi} \ln(1 + \alpha e^{i\phi}) \, d\phi = 0$$