Etat non lié : $E > 0$

Equation de Schrodinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

Dans les regions I et III $V(x) = 0$

l'equation devient :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = E\psi(x)$$

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) = -k^2\psi(x)$$

solution dans la region I

$$\psi_I(x) = \underbrace{A_I e^{ikx}}_{\text{onde incidente}} + \underbrace{B_I e^{-ikx}}_{\text{onde reflechie}}$$

$$\psi_{III}(x) = \underbrace{A_{III} e^{ikx}}_{\text{onde transmise}} + \underbrace{B_{III} e^{-ikx}}_{\text{onde reflechie ou incidente de } x=+\infty}$$

$B_{III} = 0$ car aucune particule n'est transmis de $x = +\infty$ en direction du potentiel

La source de particules est en $x = -\infty$

Ainsi

$$\psi_{III}(x) = A_{III}\, e^{ikx}$$

Dans la region II

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) - V_0\psi(x) = E\psi(x)$$

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = -\frac{2m}{\hbar^2}(E+V_0)\psi(x) = -K^2\psi(x)$$

d'où $\psi_{II}(x) = A_{II}\, e^{iKx} + B_{II}\, e^{-iKx}$

Avec $K^2 = k^2 + k_0^2$ et $k_0^2 = \dfrac{2mV_0}{\hbar^2}$

Condition de Raccordement en $x = -\frac{a}{2}$

$$\left(A_I\, e^{-ik\frac{a}{2}} + B_I\, e^{ik\frac{a}{2}} = A_{II}\, e^{-iK\frac{a}{2}} + B_{II}\, e^{iK\frac{a}{2}}\right) \times i\,\cdot$$

$$ik A_I\, e^{-ik\frac{a}{2}} - B_I\, ik\, e^{ik\frac{a}{2}} = iK A_{II}\, e^{-iK\frac{a}{2}} - B_{II}\, iK\, e^{iK\frac{a}{2}}$$

Ce système d'équations permet d'exprimer A_I et B_I en fonction de A_{II} et B_{II}

L'addition des deux équations donne :

$$2ikA_I e^{-ik\frac{a}{2}} = A_{II}(ik+iK)e^{-iK\frac{a}{2}} + B_{II}(ik-iK)e^{iK\frac{a}{2}}$$

$$A_I = A_{II}\frac{(ik+iK)}{2ik}e^{i\frac{a}{2}(k-K)} + \frac{B_{II}(ik-iK)}{2ik}e^{i\frac{a}{2}(k+K)}$$

La soustraction donne :

$$2iB_I ik e^{ik\frac{a}{2}} = A_{II}(ik-iK)e^{-iK\frac{a}{2}} + B_{II}(ik+iK)e^{iK\frac{a}{2}}$$

$$B_I = A_{II}\frac{(ik-iK)}{2ik}e^{-i\frac{a}{2}(k+K)} + B_{II}\frac{(ik+iK)}{2ik}e^{i\frac{a}{2}(K-k)}$$

Conditions de raccordement au point $x=\frac{a}{2}$

$$\begin{cases} \left(A_{II}e^{iK\frac{a}{2}} + B_{II}e^{-iK\frac{a}{2}} = A_{III}e^{ik\frac{a}{2}}\right)\times ik \\ iKA_{II}e^{iK\frac{a}{2}} - iKB_{II}e^{-iK\frac{a}{2}} = ikA_{III}e^{ik\frac{a}{2}} \end{cases}$$

dans cette étape j'exprime A_{II} et B_{II} en fonction de A_{III}

La somme des deux equations donne

$$2iK\,A_{II}\,e^{iK\frac{a}{2}} = A_{III}\,(ik+iK)\,e^{ik\frac{a}{2}}$$

$$A_{II} = A_{III}\,\frac{(ik+iK)}{2iK}\,e^{i\frac{a}{2}(k-K)}$$

la soustraction des deux equations donne

$$2iK\,B_{II}\,e^{-iK\frac{a}{2}} = A_{III}(iK-ik)\,e^{ik\frac{a}{2}}$$

$$B_{II} = A_{III}\,\frac{(iK-ik)}{2iK}\,e^{i\frac{a}{2}(k+K)}$$

Dans ce qui suit, je substitue les expressions de A_{II} et B_{II} dans les expressions de A_I et B_I et ainsi, j'exprime A_I et B_I en fonction uniquement de A_{III}.

La substitution donne: voir TD exercice 1, serie 4

$$A_I = A_{III}\,\frac{e^{ika}}{4k^2K^2}\left[2(k^2+K^2)\,i\sin Ka + 4kK\cos Ka\right]$$

$$B_{III} = A_{III} \frac{(k^2 - K^2)}{4k^2K^2} \, 2i \sin Ka.$$

Ici, on introduit la notion de courant de probabilité

$$J(x,t) = \frac{1}{m} \mathrm{Re}\left[\psi^*\left(\frac{\hbar}{i}\nabla\right)\psi\right]$$

Dans notre cas $\frac{\hbar}{i}\nabla = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}$

On définit, $J_{in} = \frac{1}{m} \mathrm{Re}\left[A_1^* e^{-ikx} \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx} A_1 e^{ikx}\right]$

$$= \frac{1}{m}\left[A_1^* e^{-ikx} \frac{\hbar}{i} ik A_1 e^{ikx}\right]$$

$$= \frac{\hbar k}{m} |A_1|^2$$

On définit : $J_{ref} = \frac{1}{m} \mathrm{Re}\left[B_1^* e^{+ikx} \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx} B_1 e^{-ikx}\right]$

$$= \frac{1}{m}\left[B_1^* e^{ikx} \frac{\hbar}{i}(-ik) B_1 e^{-ikx}\right]$$

$$= \frac{-\hbar k}{m} |B_1|^2$$

Enfin, $J_t = \frac{Re}{m}\left[A_{III}^* e^{-ikx}\left(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx} A_{III} e^{ikx}\right)\right]$

$$= \frac{1}{m}\left[A_{III}^* e^{-ikx}\left(\frac{\hbar}{i} ik\right) A_{III} e^{ikx}\right]$$

$$= \frac{\hbar k}{m} |A_{III}|^2$$

La source de particules étant à l'infini ($-\infty$), la conservation du courant s'écrit

$$J_{inc} + J_{ref} = J_{tran}$$

$$\frac{\hbar k}{m} |A_1|^2 - \frac{\hbar k}{m} |B_1|^2 = \frac{\hbar k}{m} |A_{III}|^2$$

d'où $|A_1|^2 - |B_I|^2 = |A_{III}|^2$

Définition des coefficient de réflexion R et de transmission T.

$$R = \left|\frac{J_{ref}}{J_{inc}}\right| \quad \text{et} \quad T = \frac{J_{tran}}{J_{inc}}$$

Ainsi :

$$T = \frac{|A_{III}|^2}{|A_I|^2} = \frac{16\, k^2 K^2}{4\,(k^2+K^2)^2 \sin^2 Ka + 16\, k^2 K^2 \cos^2 Ka}$$

$$R = \frac{(k^2-K^2)^2\, 4 \sin^2 Ka}{4\,(k^2+K^2)^2 \sin^2 Ka + 16\, k^2 K^2 \cos^2 Ka}$$

Vérifier que $T + R = 1$

fin