PHYS2026-1: Physique 4 - Physique microscopique
TD1 - Correctif

abaret@uliege.be

Exercice 1: Fonction d'onde d'une particule

L'état d'une particule libre est décrit par la fonction d'onde suivante:

$$\psi(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < -b \\ A & \text{si } -b \leq x \leq 3b \\ 0 & \text{si } x > 3b \end{cases}$$

1. Déterminer A en exprimant la condition de normalisation (choisir par convention la phase de telle sorte que A est réel);
2. Calculer la probabilité de trouver la particule dans l'intervalle $[0, b]$;
3. Calculer la valeur moyenne de x et de x^2 pour cet état.

Correction :

- La fonction d'onde donne une information sur la densité de probabilité via le carré de son module. La probabilité de présence sur l'ensemble de l'espace possible doit forcément valoir 1. Il est important de garder en mémoire que la fonction d'onde est complexe et que donc A peut l'être aussi. $A = ai + b$ avec a et b des réels. On notera également que le carré du module d'une fonction d'onde s'écrit $|\psi(x)|^2 = \psi(x)^\star\psi(x)$ où $\psi(x)^\star$ est le complexe conjugué de $\psi(x)$.

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx &= 1 \\ \int_{-b}^{3b} |\psi(x)|^2 dx &= 1 \\ \int_{-b}^{3b} |A|^2 dx &= 1 \\ |A|^2 \left[x\right]_{-b}^{3b} &= 1 \\ A &= \sqrt{\frac{1}{4b}} e^{i\phi_0} \end{aligned} \tag{1}$$

ϕ_0 est la phase. A sera réel si $\phi_0 = n\pi$ avec n un entier. Et $A = \pm\sqrt{\frac{1}{4b}}$.

- La probabilité de trouver la particule est donnée par l'intégrale de la densité de probabilité sur le volume souhaité

$$\begin{aligned} P &= \int_0^b |\psi(x)|^2 dx \\ &= \int_0^b A^2 dx \\ &= \int_0^b \frac{dx}{4b} \\ &= \frac{1}{4} \end{aligned} \tag{2}$$

- Pour obtenir la valeur moyenne d'une observable sur un volume, il faut évaluer cette observable sur le volume en question

$$\begin{aligned}
< x > &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x).x.\psi^\star(x)dx \\
&= \int_{-b}^{3b} \frac{x}{4b} dx \\
&= \frac{1}{4b}\left[\frac{x^2}{2}\right]_{-b}^{3b} \\
&= \frac{9b^2 - b^2}{8b} = b
\end{aligned} \tag{3}$$

Exercice 2: Puits de potentiel fini

Une particule de masse m se déplace dans un potentiel unidimensionnel donné par

$$\begin{aligned} V(x) &= -V_0 \qquad \text{si } |x| < a, \\ &= 0 \qquad \text{si } |x| > a, \end{aligned}$$

où V_0 est une constante positive (Fig. 1).

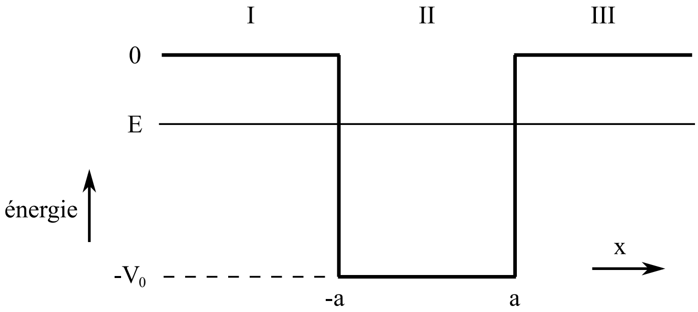

Figure 1: Puits de potentiel fini

1. Montrer que pour un état lié, l'énergie E satisfait aux relations

$$\begin{aligned} \tan(ja) &= \gamma/j \qquad \text{pour un état pair,} \\ \cot(ja) &= -\gamma/j \qquad \text{pour un état impair,} \end{aligned}$$

   où $j^2 = \dfrac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}$ et $\gamma^2 = \dfrac{-2mE}{\hbar^2}$.

2. Concevoir une méthode graphique permettant de déterminer les valeurs de E et montrer que, quelles que soient les valeurs de V_0 et a, il y a toujours au moins un état lié.

3. Si la particule est un électron et $V_0 = 10$ eV, $a = 4 \times 10^{-10}$m, calculer le nombre d'états liés.

Correction :

En suivant le même raisonnement que dans l'exercice précédent, les équations qui régissent chacune des trois zones sont

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}^2\phi_{I,III}}{\mathrm{d}x^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\phi_{I,III} &= 0 \qquad \text{si } |x| > a, \\ \frac{\mathrm{d}^2\phi_{II}}{\mathrm{d}x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E-(-V_0))\phi_{II} &= 0 \qquad \text{si } |x| < a, \end{aligned}$$

Nous en déduisons donc que

$$\begin{aligned} \phi_I(x) &= Ae^{\gamma x} + Be^{-\gamma x} \\ \phi_{II}(x) &= C\cos(jx) + D\sin(jx) \\ \phi_{III}(x) &= Fe^{\gamma x} + Ge^{-\gamma x} \end{aligned} \tag{4}$$

où $\gamma^2 = \dfrac{-2mE}{\hbar^2}$ et $j^2 = \dfrac{2m}{\hbar^2}(E+V_0)$. Notez que nous avons décidé de définir γ^2 avec un signe $-$ devant l'expression "habituelle". Ce choix n'est bien évidemment pas obligatoire (le choix est arbitraire), mais permet d'alléger les calculs. Ainsi, γ et j sont tous deux réels. Par ailleurs, le i attendu devant le $\sin(jx)$ est rentré dans la constante complexe D sans perte de généralité.

Le fait que la fonction d'onde doit être nulle à l'infini implique que B et F sont nuls. Notez que l'on choisit d'écrire ϕ_{II} sous une autre forme en utilisant la définition de l'exponentielle complexe. Avec ce modèle, il est possible de faire le tri entre les solutions qui seront paires ou impaires. Le fait que les solutions soient paires ou impaires est dû à la symétrie du puits de potentiel. Vu que le potentiel est pair, pourquoi les fonctions d'ondes impaires sont acceptables comme solutions? Parce que la solution physique est le carré du module (impair au carré devient pair). Si ϕ_{II} est paire, alors D doit être nul car la fonction sinus est impaire. De la même manière, si ϕ_{II} est impaire, alors C doit être nul. En appliquant maintenant les conditions de continuités aux deux "interfaces" (en $x = \pm a$), nous trouvons:

Solutions paires

$$\begin{aligned} Ae^{-\gamma a} &= C\cos(ja) \\ \gamma Ae^{-\gamma a} &= jC\sin(ja) \\ \tan(ja) &= \frac{\gamma}{j} \end{aligned} \tag{5}$$

Solutions impaires

$$\begin{aligned} Ge^{-\gamma a} &= D\sin(ja) \\ -\gamma Ge^{-\gamma a} &= jD\cos(ja) \\ \cot(ja) &= -\frac{\gamma}{j} \end{aligned} \tag{6}$$

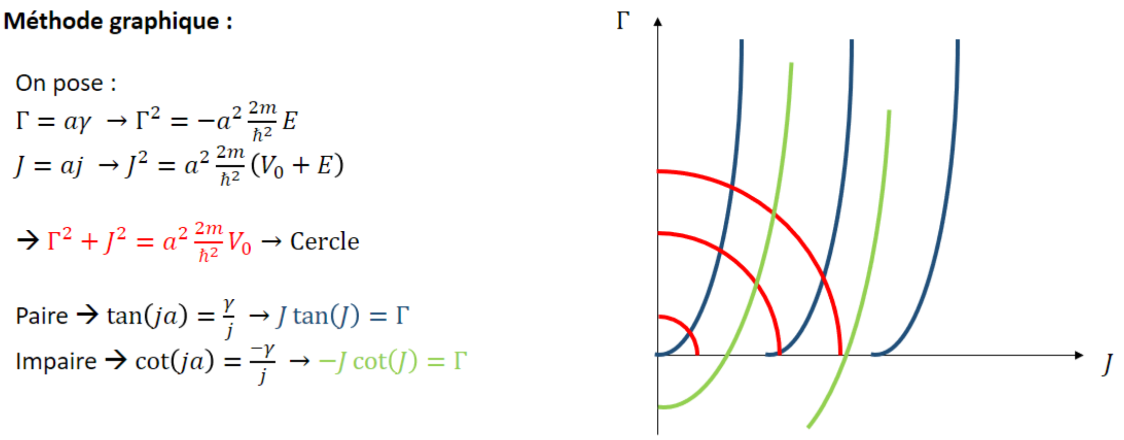

Figure 2: Méthode graphique pour trouver les états liés permis dans un puits de potentiel donné.

Pour calculer le nombre d'états permis, il faut tout d'abord définir le rayon du cercle de la méthode graphique

$$R = \sqrt{a^2\frac{2mV_0}{\hbar^2}} = \sqrt{(16E-20)\frac{(2)(9.11E-31)(1.6E-18)(4\pi^2)}{(6.6e(-34))^2}} = 6.47\ [m^{-2}kg^{-1}s] \tag{7}$$

Comme la tangente s'annule en $(k_1 - 1)\pi$ et la cotangente en $k_2\pi - \pi/2$, le nombre de niveau permis sera donné par la somme des valeurs maximales de $k_1 + k_2$. Notez que l'on doit également compter le passage en zéro en $J = 0$, d'où le fait que l'on écrive $(k_1 - 1)\pi$ et non pas $(k\pi)$. Ici donc $k_1 = 3$ et $k_2 = 2$. Il y aura donc 5 états liés permis.

Exercice 3 : Marche de potentiel

Un flux de particules de masse m et d'énergie E rencontre une marche de potentiel de hauteur $V_0(< E)$, représentée à la Figure 3.

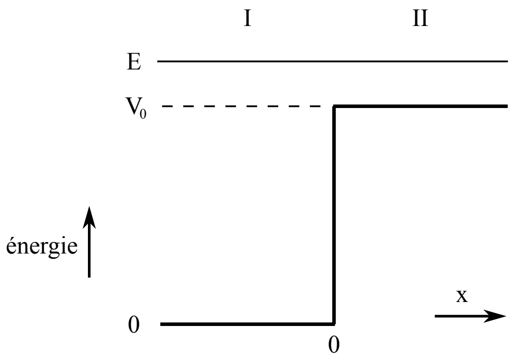

Figure 3: Marche de potentiel

1. Montrer que la fraction du faisceau réfléchi est
$$\mathscr{R} = \left(\frac{1-\mu}{1+\mu}\right)^2,$$
où $\mu = \frac{j}{k}$, $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ et $j^2 = \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}$;
2. Montrer que la somme des flux réfléchi et transmis est égale au flux de particules incidentes.

Correction :

Pour résoudre le problème suivant, on se base sur l'équation de Schrödinger et sur les propriétés des fonctions d'onde. On commence par évaluer la fonction qui décrit le potentiel V et on l'injecte dans l'équation de Schrödinger.

$$\begin{aligned} V(x) &= 0 \qquad \text{si } x < 0, \\ &= V_0 \qquad \text{si } 0 < x, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi_I}{\mathrm{d}x^2} &= E\psi_I \qquad \text{si } x < 0, \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi_{II}}{\mathrm{d}x^2} + V_0\psi_{II} &= E\psi_{II} \qquad \text{si } 0 < x, \end{aligned}$$

On peut réécrire les équations sous une forme facile à résoudre :

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}^2\psi_I}{\mathrm{d}x^2} + k^2\psi_I &= 0 \\ \frac{\mathrm{d}^2\psi_{II}}{\mathrm{d}x^2} + j^2\psi_{II} &= 0 \end{aligned}$$

avec $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ et $j^2 = \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}$ qui sont deux réels positifs car $E > V_0 > 0$.

Ces deux équations différentielles peuvent être écrites sous leur forme polynomiale $X_I^2 + k^2 = 0$ et $X_{II}^2 + j^2 = 0$. La solution des équations différentielles s'écrivent :

$$\begin{aligned} \psi_I(x) &= Ae^{X_{I,1}x} + Be^{X_{I,2}x} &= Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \\ \psi_{II}(x) &= Ce^{X_{II,1}x} + De^{X_{II,2}x} &= Ce^{ijx} + De^{-ijx} \end{aligned}$$

Il s'agit en fait d'ondes planes dont le signe de l'exponentielle traduit l'orientation du vecteur quantité de mouvement de l'onde, $\vec{p} = \vec{k}\hbar$. k et j sont les nombres d'ondes. Comme nous travaillons en 1D, l'exponentielle $A\exp(\vec{k}\cdot\vec{r})$ peut s'écrire $A\exp(\pm kx)$ selon si $\vec{x}$ est dans le même sens ou opposé à k. Dès lors, si le flux de particules arrive de la gauche, il est normal d'avoir un coefficient non-nul devant e^{+ikx}. En arrivant sur la barrière, l'onde peut être réfléchie ou transmise, ce qui implique que B et C sont également non-nuls. Par contre, D est nul car cela impliquerait qu'une onde se déplace vers la gauche depuis la droite de la barrière, ce qui n'est pas physique.

Les coefficients A, B et C sont **complexes** et peuvent être déterminés en utilisant la continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée. En l'interface ($x = 0$), cela donne:

$$\begin{aligned} \psi_I(0) &= \psi_{II}(0) \\ \frac{d\psi_I(0)}{dx} &= \frac{d\psi_{II}(0)}{dx} \end{aligned}$$

On obtient $A + B = C$ et $k(A - B) = jC$. Pour répondre à la question 1, il faut comprendre le sens physique de A, B et C ainsi que la notion d'onde incidente, transmise et réfléchie. Au vu de la quantité de mouvement de chacune des ondes planes, on peut identifier A comme l'amplitude de la fonction d'onde incidente, B la réfléchie et C la transmise. Cependant, l'amplitude d'un fonction d'onde n'a pas de sens physique réel. Il va donc falloir travailler avec le carré des modules de chacune de ces fonctions.

$$\begin{aligned} |\phi_{I,A}|^2 &= |A|^2 e^{ikx} e^{-ikx} = |A|^2 \\ |\phi_{I,B}|^2 &= |B|^2 e^{ikx} e^{-ikx} = |B|^2 \\ |\phi_{II,C}|^2 &= |C|^2 e^{ijx} e^{-ijx} = |C|^2 \end{aligned} \tag{8}$$

On peut alors exprimer la fraction de particules réfléchies comme la densité de probabilité de l'onde réfléchie sur celle de l'onde incidente. On aura

$$f_R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left|\frac{B}{A}\right|^2 \tag{9}$$

En partant des équations de continuité, il est possible de mettre en évidence le rapport $\frac{B}{A}$ et donc f_R

$$\begin{aligned} A + B = C &= \frac{k}{j}(A - B) \\ A(1 - \frac{k}{j}) &= -B(1 + \frac{k}{j}) \\ \frac{B}{A} &= \frac{\frac{k}{j} - 1}{1 + \frac{k}{j}} \\ \frac{B}{A} &= \frac{1 - \frac{j}{k}}{\frac{j}{k} + 1} \\ f_R = \left|\frac{B}{A}\right|^2 &= \left|\frac{1 - \frac{j}{k}}{1 + \frac{j}{k}}\right|^2 \end{aligned} \tag{10}$$

Approche matricielle

Repartons des solutions trouvées lors du précédemment, soient

$$\begin{aligned} \psi_I(x) &= Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \\ \psi_{II}(x) &= Ce^{ijx} + De^{-ijx} \end{aligned}$$

Et utilisons les conditions de continuité en $x = a$, soient $\psi_I(a) = \psi_{II}(a)$ et $\psi'_I(a) = \psi'_{II}(a)$. On trouve donc, en toute généralité:

$$\begin{aligned} Ae^{ika} + Be^{-ika} &= Ce^{ija} + De^{-ija} \\ ikAe^{ika} - ikBe^{-ika} &= ijCe^{ija} - ijDe^{-ija} \end{aligned}$$

Ces conditions peuvent être écrites de manière tout à fait équivalente sous forme matricielle:

$$\begin{pmatrix} e^{ika} & e^{-ika} \\ ike^{ika} & -ike^{-ika} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{ija} & e^{-ija} \\ ije^{ija} & -ije^{-ija} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} \tag{11}$$

En définissant les matrices multipliant les vecteurs $(A, B)^T$ et $(C, D)^T$ comme respectivement M_I et M_{II}, on peut exprimer cette équation sous la forme:

$$\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = M_{II}^{-1} M_I \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \tag{12}$$

S'il existe une seconde marche en $x = 2a$, il nous faut également écrire les conditions de continuité en ce point. De la même manière que précédemment, on trouve alors

$$\begin{pmatrix} e^{ij2a} & e^{-ij2a} \\ ije^{ij2a} & -ije^{-ij2a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{i\gamma 2a} & e^{-i\gamma 2a} \\ i\gamma e^{i\gamma 2a} & -i\gamma e^{-i\gamma 2a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E \\ F \end{pmatrix} \tag{13}$$

Et en posant que les matrices multipliant les vecteurs $(C, D)^T$ et $(E, F)^T$ comme respectivement M'_{II} et M_{III}, on peut exprimer cette équation sous la forme:

$$\begin{pmatrix} E \\ F \end{pmatrix} = M_{III}^{-1} M'_{II} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} \tag{14}$$

Et en utilisant l'expression trouvée précédemment, on a finalement

$$\begin{pmatrix} E \\ F \end{pmatrix} = M_{III}^{-1} M'_{II} M_{II}^{-1} M_I \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \tag{15}$$

Numériquement, pour un nombre arbitraire n de marches, il suffit donc de calculer la matrice résultante

$$M = M_n^{-1} M'_{n-1} ... M_{II}^{-1} M_I \tag{16}$$

Afin de représenter l'ensemble des conditions de continuité reliant les coefficient des fonctions d'onde.

Données:

- $h = 6.626 \times 10^{-34}$ m^2 kg/s
- $e = -1.6022 \times 10^{-19}$ C
- $m_e = 9.11 \times 10^{-31}$ kg
- $c = 299\ 792\ 458$ m/s

Relations utiles:

- $\cosh\theta = \frac{1}{2}\{\exp(\theta) + \exp(-\theta)\}$
- $\sinh\theta = \frac{1}{2}\{\exp(\theta) - \exp(-\theta)\}$
- $\cosh^2\theta = 1 + \sinh^2\theta$