Mécanique quantique – L3

Emmanuel Baudin – Tom Bienaimé – Sylvain Nascimbène

TD 3 : États liés, liaison covalente, localisation d'Anderson

1 Un exemple de puits de potentiel : le puits δ

1.1 Fonction d'onde autour d'une discontinuité de potentiel

On considère une particule dont le hamiltonien H s'écrit :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x), \tag{1}$$

où l'énergie potentielle V de la particule présente une discontinuité en $x = 0$.

1. Intégrer formellement l'équation aux valeurs propres de H sur $[-\varepsilon, +\varepsilon]$. En faisant tendre ε vers 0, montrer que si V reste bornée (c'est-à-dire si la discontinuité reste finie), la dérivée de la fonction propre $\varphi(x)$ en $x = 0$ reste continue.

1.2 Puits unique

Dans cette partie, on prendra $V(x) = -\alpha\delta(x)$, où $\alpha(> 0)$ est une constante dont on précisera la dimension. On pose pour la suite :

$$\mu = \frac{2m\alpha}{\hbar^2}. \tag{2}$$

2. Montrer que dans ce cas, $\partial\varphi/\partial x$ subit en $x = 0$ une discontinuité que l'on calculera.

On s'intéresse uniquement aux états liés : l'énergie de la particule est donc **négative**.

3. En intégrant l'équation de Schrödinger des états stationnaires séparément pour les deux demi-espaces, montrer que $\varphi(x)$ peut alors s'écrire :

$$x < 0 \qquad \varphi(x) = A_1 e^{\rho x} + A_1' e^{-\rho x} \tag{3}$$

$$x > 0 \qquad \varphi(x) = A_2 e^{\rho x} + A_2' e^{-\rho x}, \tag{4}$$

   où ρ est une constante que l'on calculera.

4. En écrivant que φ est continue en $x = 0$, alors que $\partial\varphi/\partial x$ ne l'est pas, établir des relations entre A_2, A_2', A_1 et A_1'.
5. Écrire alors que φ est de carré sommable, et en déduire les valeurs possibles de l'énergie. Calculer les fonctions d'onde normées correspondantes.

6. Représenter graphiquement ces fonctions d'onde. Donner un ordre de grandeur de leur largeur Δx. Quelle valeur donner à α de façon à ce que Δx soit égal au rayon de Bohr a_0 ? On rappelle que $a_0 = 4\pi\epsilon_0\hbar^2/me^2 \approx 0{,}05$ nm.
7. Quelle est la probabilité $dP(p_x)$ pour qu'une mesure de l'impulsion de la particule dans un des états stationnaires donne un résultat compris entre p_x et $p_x + dp_x$? Pour quelle valeur de p_x cette probabilité est-elle maximale ? Dans quel domaine, de dimension Δp_x, prend-elle des valeurs notables ? Donner un ordre de grandeur du produit $\Delta x \Delta p_x$.

2 Modèle simplifié de liaison covalente : le double puits δ

On considère maintenant un potentiel de la forme :

$$V(x) = -\alpha\left[\delta\left(x - \frac{l}{2}\right) + \delta\left(x + \frac{l}{2}\right)\right], \tag{5}$$

où l est une longueur. On ne s'intéresse par la suite qu'aux **états liés** (d'énergie négative).

8. Quelle est la forme générale des états propres du hamiltonien de la particule ?
On cherchera à utiliser les **symétries** du problème.

Etat pair :

9. Montrer qu'il existe toujours un état lié pair, état dont l'énergie est donnée par l'équation :
$$E = -\frac{\hbar^2\rho^2}{2m}, \tag{6}$$
où ρ vérifie :
$$\mathrm{e}^{-\rho l} = \frac{2\rho}{\mu} - 1. \tag{7}$$
10. Montrer que son énergie est inférieure à $-m\alpha^2/2\hbar^2$ et représenter la fonction d'onde associée.

Etat impair

11. Montrer que lorsque l est supérieure à une valeur que l'on précisera, il existe un deuxième état lié, impair, et dont l'énergie vérifie :
$$E = -\frac{\hbar^2\rho^2}{2m}, \tag{8}$$
avec
$$\mathrm{e}^{-\rho l} = 1 - \frac{2\rho}{\mu}. \tag{9}$$
12. Vérifier que cette énergie est supérieure à $-m\alpha^2/2\hbar^2$ et représenter la fonction d'onde associée.

Force covalente

D'après ce qui précède, le niveau pair est l'état fondamental du système à deux puits. On suppose que le système se trouve dans cet état.

13. Développer l'équation (7) lorsque l est grand (préciser devant quoi). En déduire le développement asymptotique de l'énergie.
14. Montrer à partir de la question précédente qu'il s'exerce une force entre les deux centres attracteurs. Préciser le signe de cette force et son comportement à longue distance.

3 Localisation d'Anderson

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 $t(k)$.
3. Trouver un autre état stationnaire linéairement indépendant en utilisant la symétrie de l'équation de Schrödinger par renversement du temps. Quelle est la dégénérescence du spectre du Hamiltonien ?
4. Quelle est l'interprétation de la solution

$$\begin{aligned} x &< -d/2 \qquad \psi_r(x) = t'(k)e^{-ikx} \\ x &> d/2 \qquad \psi_r(x) = e^{-ikx} + r'(k)e^{ikx}. \end{aligned}$$

5. Utiliser la dimension finie de l'espace de Hilbert des états de diffusion d'énergie E pour trouver les relations entre $r(k), r'(k), t(k)$ et $t'(k)$.
6. Pour une barrière de potentiel de support borné, $[-\frac{d}{2}, \frac{d}{2}]$ on définit les états de diffusion

$$\begin{aligned} x &< -\tfrac{d}{2} \qquad \psi(x) = ae^{ikx} + be^{-ikx} \\ x &> \tfrac{d}{2} \qquad \psi(x) = ce^{ikx} + de^{-ikx} \end{aligned}$$

   Vérifier que les amplitudes de part et d'autre de la barrière sont reliées par la relation

$$\begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{t} & -\frac{\bar{r}}{\bar{t}} \\ -\frac{r}{t} & \frac{1}{\bar{t}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} .$$

7. 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
   $$t = \frac{t_1 t_2 e^{ikd}}{1 + \bar{r}_1 r_2 e^{2ikd}} \, .$$

8. *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 $n+1$ et T_n la probabilité de transmission du potentiel formé par les n premières barrières. On supposera la variable aléatoire $\phi_n = kd_n$ équirépartie sur $[0, 2\pi]$. Montrer que la probabilité de transmission T_n satisfait la relation de récurrence aléatoire
   $$T_{n+1} = \frac{T_1 T_n}{|1 + \bar{r}_1 r_n e^{2i\phi_n}|^2} \, .$$
   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 $\alpha < 1$
   $$\int_0^{2\pi} \ln(1 + \alpha e^{i\phi}) \, d\phi = 0 \, .$$

9. Montrer que dans la limite des petites barrières, les états propres du Hamiltonien sont localisés sur une distance caractéristique $l = \bar{d}/R_1$.