Mécanique quantique

TD 5: Marche de potentiel – correction

1 Marche de potentiel

On revient au cas plus simple où le potentiel $V(x)$ est simplement une marche d'escalier (fonction de Heavisde), telle que

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < 0 \\ V_0 & \text{si } x > 0 \end{cases} \tag{1}$$

1.1 États stationnaires

1. Donner la forme générale des solutions $\varphi(x)$ en séparant les cas $E > V_0$ et $E < V_0$. On introduira des notations équivalentes à l'exercice précédent (en particulier k, K et $K_0^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}$).

On sépare l'espace en deux régions $x < 0$ et $x > 0$. En écrivant l'équation aux valeurs propres dans les deux situations, on trouve

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \varphi_-}{\partial x^2} + E\varphi_- = 0 \qquad \text{et} \qquad \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \varphi_+}{\partial x^2} + (E - V_0)\varphi_+ = 0 \tag{2}$$

On peut exclure le cas où $E < 0$ qui ne permettrait pas à la particule de se trouver dans cette marche de potentiel. Alors, $\varphi_-(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ avec $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$. La fonction en $+ikx$ représente l'onde incidente, alors que celle en $-ikx$ représente l'onde réfléchie sur la barrière.

1.1.1 Cas $E > V_0$

2. Calculer les coefficients de réflexion et de transmission en amplitude $\underline{r}$ et $\underline{t}$.

Dans ce cas, l'équation vérifiée par φ_+ est similaire à celle vérifiée par φ_-, en remplaçant k^2 par $K^2 = \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}$. On peut cependant ne pas prendre en compte la solution en $-iKx$ si on suppose qu'aucune onde ne provient de $x = +\infty$. Ainsi $\varphi_+(x) = Ce^{iKx}$.
Par définition,

$$\boxed{\underline{r} = \frac{\text{Ampl. réfléchie}}{\text{Ampl. incidente}} = \frac{B}{A}} \qquad \text{et} \qquad \boxed{\underline{t} = \frac{\text{Ampl. transmise}}{\text{Ampl. incidente}} = \frac{C}{A}} \tag{3}$$

Pour déterminer les relations entre A, B et C, on écrit les relations de continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée en $x = 0$ (la dérivée étant continue puisque le potentiel ne subit pas une discontinuité infinie) :

$$\begin{cases} A + B = C \\ ik(A - B) = iKC \end{cases} \qquad \text{c'est-à-dire} \qquad \begin{cases} 1 + \underline{r} = \underline{t} \\ 1 - \underline{r} = \frac{K}{k}\underline{t} \end{cases} \tag{4}$$

Ainsi

$$\boxed{\underline{r} = \frac{k - K}{k + K}} \qquad \text{et} \qquad \boxed{\underline{t} = \frac{2k}{k + K}} \tag{5}$$

3. Rappeler la définition des coefficients en intensité, et les calculer, toujours dans le cas $E > V_0$. Donner un équivalent optique de cette situation.

La définition des coefficients de réflexion et de transmission en intensité se fait à l'aide du courant de probabilité d'un état ψ : $\vec{j}_\psi = \frac{i\hbar}{2m}\left(\psi\vec{\nabla}\psi^\star - \psi^\star\vec{\nabla}\psi\right) = \frac{\hbar}{m}\mathrm{Im}(\psi^\star\vec{\nabla}\psi)$:

$$R = \frac{|j_r|}{j_i} \qquad \text{et} \qquad T = \frac{j_t}{j_i} \tag{6}$$

Pour une onde plane $\psi = Ae^{ikx}$, on montre que le vecteur densité de courant s'écrit : $\vec{j} = |A|^2\vec{v}_\varphi = \frac{\hbar\vec{k}}{m}|A|^2$ (expression habituelle d'un vecteur densité de flux d'une quantité physique, qui serait ici le module carré de la fonction d'onde). On trouve ainsi

$$\boxed{R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = |\underline{r}|^2} \qquad \text{et} \qquad \boxed{T = \frac{K}{k}\frac{|C|^2}{|A|^2} = \frac{K}{k}|\underline{t}|^2} \neq |\underline{t}|^2. \tag{7}$$

On peut facilement vérifier que $R + T = 1$. Il s'agit de l'interaction entre une onde et une interface, très classique en optique lorsqu'on change d'indice optique, mais aussi en électronique, acoustique, mécanique des fluides lors d'un changement d'impédance du milieu.

1.1.2 Cas $E < V_0$

4. On se place dans le cas $E < V_0$. Calculer à nouveau les coefficients de réflexion en amplitude et en intensité.

Dans cette situation, l'onde dans la partie $x > 0$ est une fonction réelle, et $\underline{r}$ est un nombre complexe. Vue la définition du vecteur densité de courant comme une partie imaginaire, celui-ci est strictement nul pour une fonction d'onde réelle. On trouve donc $\boxed{T = 0}$ et $\boxed{R = 1 - T = 1}$. Toute l'énergie de l'onde est réfléchie.

5. Montrer que le rapport des amplitudes des ondes incidente $A_\mathrm{i}(k)$ et réfléchie $A_\mathrm{r}(k)$ au vecteur d'onde k peut s'écrire

$$\frac{A_\mathrm{r}(k)}{A_\mathrm{i}(k)} = e^{-2i\theta(k)} \qquad \text{avec} \qquad \tan\theta(k) = \sqrt{\frac{K_0^2}{k^2} - 1}. \tag{8}$$

Soit $\tilde{K}^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}$, on montre de la même façon que dans la partie précédente

$$\underline{r} = \frac{k - i\tilde{K}}{k + i\tilde{K}} = e^{-2i\theta(k)} \tag{9}$$

où $\theta(k)$ est l'argument du nombre complexe $k + i\tilde{K}$, et peut donc s'écrire

$$\tan\theta(k) = \frac{K}{k} = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)/\hbar^2}{2mE/\hbar^2}} = \sqrt{\frac{K_0^2}{k^2} - 1} \tag{10}$$

Si l'énergie est totalement réfléchie, l'amplitude de l'onde subit un déphasage de $-2\theta(k)$ qui dépend de l'importance relative entre k et $\tilde{K}$. Dans le cas d'une haute barrière $V_0 \gg E$, $\underline{r} \approx \frac{-i\tilde{K}}{i\tilde{K}} = -1$. L'onde subit un déphasage de π (classique également en optique).