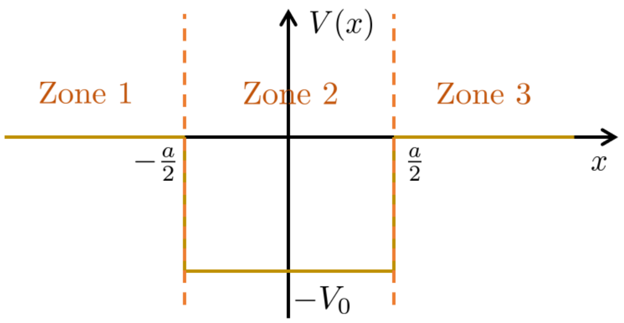
TD 1 - EQUATION DE SCHRÖDINGER

1. Puits de potentiel fini, carré - Etats liés

1.1. Mouvement classique

En mécanique classique, l'énergie mécanique de la particule s'écrit : $E_m = E_c + E_p$ avec E_p l'énergie potentielle et E_c l'énergie cinétique.

Rappels : sans forces non-conservatives, $\Delta E_m = 0$ (théorème de l'énergie mécanique).

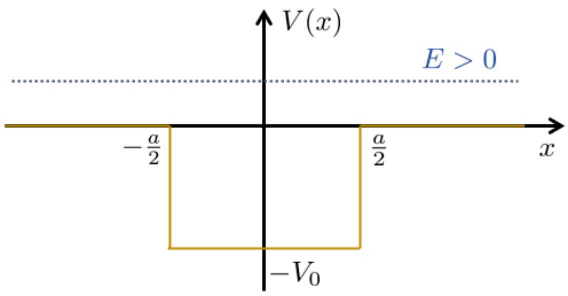


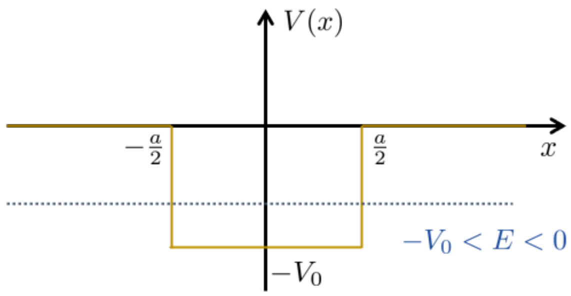
Ici $E_p = V(x)$ et $E_c = \frac{1}{2}mv(x)^2$

Cas $E_m = E > 0$:

— *Zone 1 et 3 :* $E = \frac{1}{2}mv(x)^2 \Rightarrow |v(x)| = \pm\sqrt{\frac{2E}{m}}$

— *Zone 2 :* $|v(x)| = \pm\sqrt{\frac{2}{m}(E + V_0)}$





Cas $-V_0 < E < 0$ **:**

— *Zone 1 et 3 :* pas de solution, $v(x)^2 < 0 \Rightarrow$ La particule est confinée dans le puit.

— *Zone 2 :* $|v(x)| = \pm\sqrt{\frac{2}{m}(E+V_0)} \Rightarrow$ La vitesse change de signe en $x = \pm a/2$.

1.2. Calcul des états liés

Fonction d'onde spatiale $\psi(\mathbf{r}, t)$

Définition : On associe à une particule une fonction d'onde $\psi(\mathbf{r}, t)$ qui contient toute l'information de la particule à un instant t.

Propriétés :

— ψ est une amplitude de probabilité de présence.

— $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$ est une densité de probabilité de présence telle que $\mathrm{d}\mathbb{P}(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 \mathrm{d}r^3$ est la probabilité de présence de la particule dans une sphère dans l'espace centrée en $\mathbf{r}$ et de diamètre $\mathrm{d}r$. On a alors

$$\int \mathrm{d}\mathbb{P}(\mathbf{r}, t) = \int |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 \mathrm{d}r^3 = 1.$$

Equation de Schrödinger

Soit une particule plongée dans un potentiel $V(\mathbf{r}, t)$. L'évolution temporelle de la fonction d'onde $\psi(\mathbf{r}, t)$ est donnée par l'équation de Schrödinger,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r}, t)\psi(\mathbf{r}, t)$$

avec

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}.$$

1.2.1 On se restreint à un système à 1 dimension avec un potentiel indépendant du temps :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x, t) + V(x)\psi(x, t)$$

Les solutions stationnaires sont les solutions dont la densité de probabilité ne dépend pas du temps *i.e.*

$$|\psi(x, t)|^2 = |\varphi(x)|^2$$

Elles sont obtenues en séparant la partie spatiale de la partie temporelle, *i.e.* $\psi(x, t) = \varphi(x)\chi(t)$. En réinjectant cette fonction dans l'équation de Schrödinger, on peut séparer la partie spatiale de la partie temporelle de telle sorte à avoir

$$i\hbar \frac{1}{\chi(t)}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\chi(t) = \frac{1}{\varphi(x)}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\varphi(x) + V(x)\varphi(x)\right) = E$$

où E est une énergie (par homogénéité) constante. On parle **d'énergie propre**. L'équation temporelle peut être résolue,

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\chi(t) = E\chi(t) \Rightarrow \chi(t) = A\exp\left(-i\frac{Et}{\hbar}\right)$$

On choisit librement $A = 1$ de sorte que $\int |\varphi(x)|^2 \mathrm{d}x = 1$. L'équation obtenue sur la position est **l'équation de Schrödinger stationnaire**,

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

Zone 1 : $V=0 \Rightarrow \varphi_1''(x) - \left(-\frac{2mE}{\hbar^2}\right)\varphi_1(x) = \varphi_1''(x) - \mathbf{k^2}\varphi_1(x) = 0 \Rightarrow \varphi_1(x) = A_1\mathrm{e}^{kx} + B_1\mathrm{e}^{-kx}$. $B_1 = 0$ pour éviter une divergence en $x \to -\infty$,

$$\varphi_1(x) = A_1\mathrm{e}^{kx}$$

Zone 3 : Idem que pour la zone 1, avec $A_3 = 0$ pour éviter une divergence en $x \to \infty$,

$$\varphi_3(x) = B_3\mathrm{e}^{-kx}$$

Zone 2 : $V = -V_0 \Rightarrow \varphi_2''(x) + \left(\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}\right)\varphi_2(x) = \varphi_2''(x) + \mathbf{K^2}\varphi_2(x) = 0$

$$\varphi_2(x) = A_2\mathrm{e}^{iKx} + B_2\mathrm{e}^{-iKx}$$

1.2.2 On utilise les conditions de continuitées en $\pm\frac{a}{2}$

Relations de continuité pour un puit de potentiel fini

On reprend l'équation stationnaire en $\pm\frac{a}{2}$: $\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\varphi(x) = \frac{2m}{\hbar^2}(V(x)-E)\varphi(x)$

On intègre enetre $\pm\frac{a}{2} - \epsilon$ et $\pm\frac{a}{2} + \epsilon$:

$$\varphi'\left(\pm\tfrac{a}{2} - \epsilon\right) - \varphi'\left(\pm\tfrac{a}{2} + \epsilon\right) = \frac{2m}{\hbar^2}\int_{\pm\frac{a}{2}-\epsilon}^{\pm\frac{a}{2}+\epsilon}(V(x)-E)\varphi(x)\mathrm{d}x$$

— $\varphi(x)$ est bornée : $\int|\varphi(x)|^2\mathrm{d}x = 1$

— E est fini, $V(x)$ est borné $\Rightarrow \int_{\pm\frac{a}{2}-\epsilon}^{\pm\frac{a}{2}+\epsilon}(V(x)-E)\varphi(x)\mathrm{d}x \xrightarrow[\epsilon\to 0]{} 0$

$\Rightarrow \varphi'$ est continue en $\pm\frac{a}{2}$. φ étant dérivable, elle est aussi continue.

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

$$\varphi_1\left(-\frac{a}{2}\right) = \varphi_2\left(-\frac{a}{2}\right) \Rightarrow A_1\mathrm{e}^{-k\frac{a}{2}} = A_2\mathrm{e}^{-iK\frac{a}{2}} + B_2\mathrm{e}^{iK\frac{a}{2}} \tag{1}$$

$$\varphi_1'\left(-\frac{a}{2}\right) = \varphi_2'\left(-\frac{a}{2}\right) \Rightarrow kA_1\mathrm{e}^{-k\frac{a}{2}} = iKA_2\mathrm{e}^{-iK\frac{a}{2}} - iKB_2\mathrm{e}^{iK\frac{a}{2}} \tag{2}$$

On veut ré-écrire A_2 et B_2 en fonction de A_1 : en faisant iK (1) + (2) et iK(1) - (2) on obtient

$$A_2 = \frac{iK+k}{2iK}\mathrm{e}^{\frac{a}{2}(iK-k)}A_1 \tag{3}$$

$$B_2 = \frac{iK-k}{2iK}\mathrm{e}^{\frac{a}{2}(-iK-k)}A_1 \tag{4}$$

Raccordement en $x = +\frac{a}{2}$:

$$\varphi_2\left(\frac{a}{2}\right) = \varphi_3\left(\frac{a}{2}\right) \Rightarrow B_3\mathrm{e}^{-k\frac{a}{2}} = A_2\mathrm{e}^{iK\frac{a}{2}} + B_2\mathrm{e}^{-iK\frac{a}{2}} \tag{5}$$

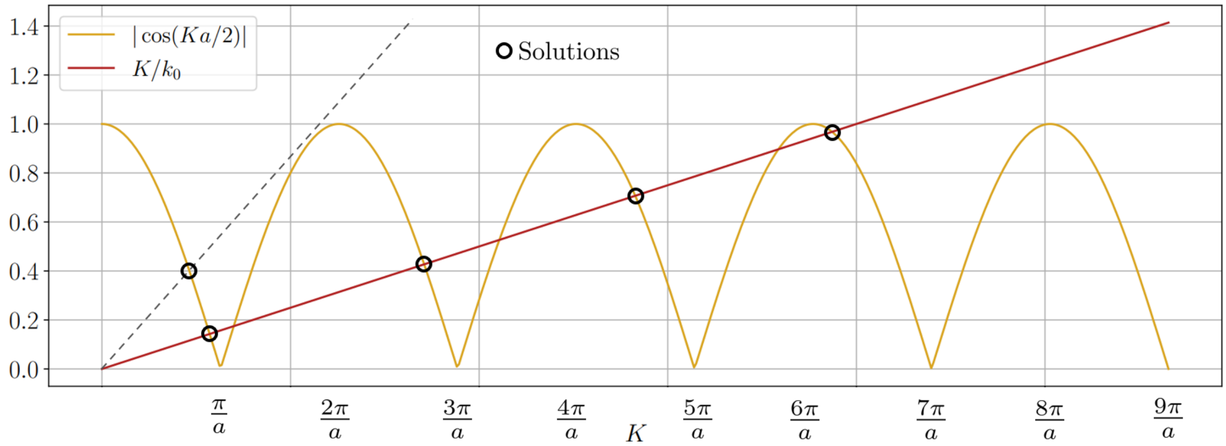
$$\varphi_2'\left(\frac{a}{2}\right) = \varphi_3'\left(\frac{a}{2}\right) \Rightarrow -kB_3\mathrm{e}^{-k\frac{a}{2}} = iKA_2\mathrm{e}^{iK\frac{a}{2}} - iKB_2\mathrm{e}^{-iK\frac{a}{2}} \tag{6}$$

On se débarrase des constantes en faisant k (5) + (6), puis en réécrivant A_2 et B_2 avec (3) et (4). On obtient

$$\left(\frac{k-iK}{k+iK}\right)^2 = \mathrm{e}^{2iKa} \Rightarrow \frac{k-iK}{k+iK} = \pm\mathrm{e}^{iKa}$$

Cas 1 : $\frac{k-iK}{k+iK} = -\mathrm{e}^{iKa} \Rightarrow k = K\tan\left(\frac{Ka}{2}\right)$ avec $\tan\left(\frac{Ka}{2}\right)$ positif car k et K sont définis positifs. De plus $k^2 + K^2 = \frac{2m}{\hbar^2}V_0 = k_0^2$. Alors

$$\frac{K}{k_0} = \left|\cos\left(\frac{Ka}{2}\right)\right| \text{ avec } \tan\left(\frac{Ka}{2}\right) > 0$$



Remarques :

— Quantification des états liés

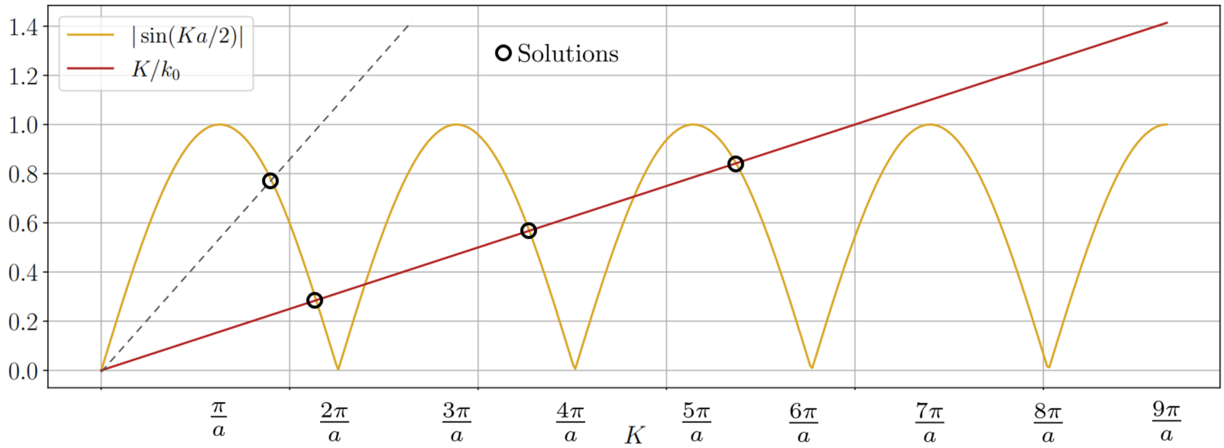
— Existence d'au moins un état lié

— Profondeur de puit $V_0 \to \infty \Rightarrow k_0 \to \infty \Rightarrow \frac{K}{k_0}$ tend à être parallèle à l'axe des abscisses : $K_n^{(P)} = \frac{\pi}{a}(2n+1), n \in \mathbb{N}$

— en réinjectant $\frac{k-iK}{k+iK} = -e^{iKa}$ dans (3) et (4), on trouve $A_2 = B_2 \Rightarrow \varphi_2(x) = 2A_2\cos(Kx) \Rightarrow \varphi(x) = \varphi(-x) \Rightarrow$ La fonction est **paire**.

Cas 2 : $\frac{k-iK}{k+iK} = e^{iKa} \Rightarrow k = -K\text{cotan}\left(\frac{Ka}{2}\right)$ avec $\tan\left(\frac{Ka}{2}\right)$ négatif. Alors

$$\frac{K}{k_0} = \left|\sin\left(\frac{Ka}{2}\right)\right| \text{ avec } \tan\left(\frac{Ka}{2}\right) < 0$$



Remarques :

— Profondeur de puit $V_0 \to \infty \Rightarrow K_n^{(I)} = \frac{2\pi}{a}n, n \in \mathbb{N}$

— $\varphi(x) = -\varphi(-x) \Rightarrow$ La fonction est **impaire**.

— Alternance de solutions paires et impaires.

1.3. Puits infiniment profonds

1.3.1 $V_0 \to \infty$: en prenant les solutions paires et impaires, $K_n = \frac{n\pi}{a}, n \in \mathbb{N}$.

Energies liées : $K_n = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E_n + V_0)} \Rightarrow E_n = \left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 \frac{\hbar^2}{2m} - V_0$.

Condition de puit profond : $E_1 \ll 0 \Rightarrow \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \ll V_0$ où on compare la profondeur du puit avec l'énergie du premier état lié par rapport à la profondeur du puit

$$\Rightarrow k_0^2a^2 \gg \pi$$

1.3.2 φ_1 et $\varphi_3 \sim \mathrm{e}^{\pm k_n x}$. On peut définir une *épaisseur de peau* $\delta = \frac{1}{k_n}$.

$k_n = \sqrt{-\frac{2mE_n}{\hbar^2}} \xrightarrow[V_0 \to \infty]{} \infty \Rightarrow \varphi_1(x) = \varphi_3(x) \to 0$

Relations de continuité :

$$\begin{cases} A_2 \mathrm{e}^{i\frac{Ka}{2}} + B_2 \mathrm{e}^{-i\frac{Ka}{2}} = 0 \\ A_2 \mathrm{e}^{-i\frac{Ka}{2}} + B_2 \mathrm{e}^{i\frac{Ka}{2}} = 0 \end{cases} \Rightarrow \mathrm{e}^{2iKa} = 1 \Rightarrow K_n = n\frac{\pi}{a}$$

Alors $\mathrm{e}^{iK_n a} = \mathrm{e}^{in\pi} = \pm 1$.

N pair : $\Rightarrow A_2 = -B_2 \Rightarrow \varphi_2(x) = 2iA_2 \sin(K_n x)$.

$$\frac{\mathrm{d}\varphi_2}{\mathrm{d}x}_{(\pm a/2)} = iK_n 2A_2 \cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right)_{(\pm a/2)} \neq 0 \Rightarrow \lim_{\epsilon \to 0} \varphi_2'(\pm\frac{a}{2} + \epsilon) \neq \lim_{\epsilon \to 0} \varphi_2'(\pm\frac{a}{2} - \epsilon)$$

N impair : $\Rightarrow A_2 = B_2 \Rightarrow \varphi_2(x) = 2A_2 \cos(K_n x)$.

$$\frac{\mathrm{d}\varphi_2}{\mathrm{d}x}_{(\pm a/2)} = -K_n 2A_2 \sin\left(K_n x\right)_{(\pm a/2)} \neq 0 \Rightarrow \lim_{\epsilon \to 0} \varphi_2'(\pm\frac{a}{2} + \epsilon) \neq \lim_{\epsilon \to 0} \varphi_2'(\pm\frac{a}{2} - \epsilon)$$

1.3.3 En prenant $V_0 \to \infty$ et $a \to 0$ avec $V_0 a = \nu$ constant, on peut réécrire $V(x) = -\nu\delta(x)$. On considère alors seulement les zones 1 et 3.

Equations de Schrödinger :

$$\begin{cases} \varphi_1(x) = A_1 \mathrm{e}^{kx} \\ \varphi_3(x) = B_3 \mathrm{e}^{-kx} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \varphi_1'(x) = kA_1 \mathrm{e}^{kx} \\ \varphi_3'(x) = -kB_3 \mathrm{e}^{-kx} \end{cases}$$

Conditions de raccordement :

— $\varphi_1(0^-) = \varphi_3(0^+) \Rightarrow A_1 = B_3$

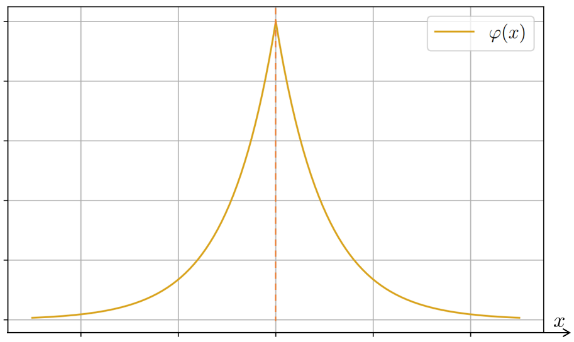
— **Attention :** la dérivée n'est pas continue en 0 : $\varphi_3'(0^+) - \varphi_1'(0^-) = -\frac{2m}{\hbar^2}\nu A_1 = -2kA_1$

Conclusion : $k^2 = \frac{mv}{\hbar^2} \Rightarrow$ un seul état lié.

On peut obtenir ce même résultat en reprenant le cas du puit fini et en faisant tendre $V_0 \to \infty$ et $V_0 a = V$ On prend les solutions obtenues pour un puit fini $\left(\frac{k-iK}{k+iK}\right)^2 = \mathrm{e}^{2iKa}$ avec $K \to \infty$ et $Ka \to 0$.

$$\left(\frac{1+\frac{ik}{K}}{1-\frac{ik}{K}}\right)^2 \approx 1 + \frac{4ik}{K} = 1 + 2iKa \Rightarrow k = \frac{1}{2}K^2 a = \frac{mv}{\hbar^2} \Rightarrow E = -\frac{m}{2\hbar^2}V^2$$

Remarque : on peut aussi redériver E en utilisant la continuité de la fonction d'onde en $x = 0$ et la condition de raccordement de la dérivée.



2. Puits de potentiel fini, carré - Etats libres

2.1 $E > 0, k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, K = \sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}}$

Equation de Schrödinger :

$$\begin{cases} \varphi_1(x) = A_1 \mathrm{e}^{ikx} + B_1 \mathrm{e}^{-ikx} \\ \varphi_2(x) = A_2 \mathrm{e}^{iKx} + B_2 \mathrm{e}^{-iKx} \\ \varphi_3(x) = A_3 \mathrm{e}^{ikx} + B_3 \mathrm{e}^{-ikx} \end{cases}$$

Relations de continuités :

$$\begin{cases} \varphi_1\left(-\frac{a}{2}\right) = \varphi_2\left(-\frac{a}{2}\right) \\ \varphi_1'\left(-\frac{a}{2}\right) = \varphi_2'\left(-\frac{a}{2}\right) \\ \varphi_2\left(\frac{a}{2}\right) = \varphi_3\left(\frac{a}{2}\right) \\ \varphi_2'\left(\frac{a}{2}\right) = \varphi_3'\left(\frac{a}{2}\right) \end{cases}$$

2.2 On a 6 inconnues et 4 relations de continuité $\Rightarrow$ 2 paramètres sont libres $\Rightarrow$ **les solutions forment un espace vectoriel de dimension 2**.

On choisit de prendre B_1 et A_3 nuls de telles sortes que φ_1 et φ_3 soient deux ondes planes contra-propageantes.

Attention : les ondes planes ne sont pas des solutions normalisables (pas de sens physique).