Les conditions de continuité aux frontières entre les régions

Mécanique Quantique

Hossein Rahimzadeh

8/31/2008

Les conditions de continuité aux frontières entre les régions

La première condition

Toute fonction d'onde représentant un système physique doit être continue et différentiable en fonction de x :

$$\boxed{u_I(x_0) = u_{II}(x_0)}$$

La deuxième condition

Pour un potentiel $V(x) = V_0$ fini :

On intègre l'équation de Schrödinger de $x_0 - \varepsilon$ à $x_0 + \varepsilon$ où x_0 est la frontière :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u(x)}{dx^2} + V_0 u(x) = Eu(x)$$

$$\int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u(x)}{dx^2} + \int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} V_0 u(x) = \int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} Eu(x)$$

$$\int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} \frac{d^2u(x)}{dx^2} = \int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} dx \frac{2m}{\hbar^2}[V_0 - E]u(x)$$

$$\left[\frac{du(x)}{dx}\right]_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} = \int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} dx \frac{2m}{\hbar^2}[V_0 - E]u(x)$$

Si $\varepsilon \to 0$, puisque $u(x)$ est continue le terme de droite sera égal à zéro. Donc,

$$u_I'(x_0) - u_{II}'(x_0) = 0$$

$$\boxed{u_I'(x_0) = u_{II}'(x_0)}$$

Pour un potentiel $V(x) = V_0 \delta(x - x_0)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u(x)}{dx^2} + V_0\delta(x-x_0)u(x) = Eu(x)$$

$$\int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u(x)}{dx^2} + \int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} V_0\delta(x-x_0)u(x) = \int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} Eu(x)$$

$$\int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} \frac{d^2u(x)}{dx^2} = \int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} dx \frac{2m}{\hbar^2}\left[V_0\delta(x-x_0) - E\right]u(x)$$

$$\left[\frac{du(x)}{dx}\right]_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} = \int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} dx \frac{2m}{\hbar^2}\left[V_0\delta(x-x_0) - E\right]u(x)$$

Si $\varepsilon \to 0$, terme de droite sera égal à $\frac{2m}{\hbar^2}V_0u(x_0)$. Donc,

$$\boxed{u'_I(x_0) - u'_{II}(x_0) = \frac{2m}{\hbar^2}V_0u(x_0)}$$

La troisième condition

Le courent de probabilité, j des deux côtés de la frontière entre deux régions de potentiels différents sont égales :

$$\boxed{j_I(x_0) = j_{II}(x_0)}$$