Résolution analytique

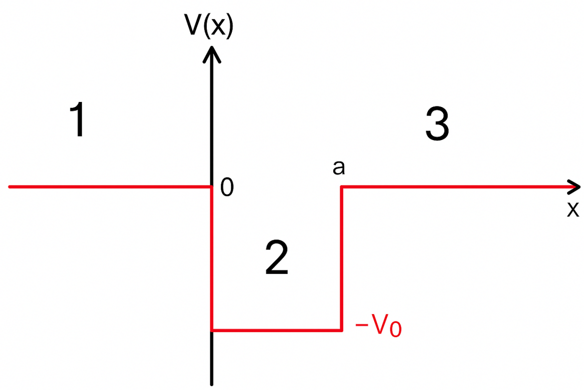

Figure 1: Puit de potentiel de profondeur V0

1 Définition du potentiel

Le potentiel V(x) est défini comme suit :

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

2 Équation de Schrödinger

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

Cherchons la solution générale pour les trois cas

$$\begin{cases} \text{cas 1} & x < 0 \\ \text{cas 2} & 0 < x < a \\ \text{cas 3} & x > a \end{cases}$$

2.1 Cas 1 : $x < 0$

Pour $x < 0$, on a $V(x) = 0$. L'équation de Schrödinger revient à :

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} = E\psi_1(x)$$
$$\Leftrightarrow \frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} = \frac{2mE}{-\hbar^2}\psi_1(x)$$
$$\Leftrightarrow \frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi_1(x) = 0$$

Posons $K_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$

$$\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} + K_1^2\psi_1(x) = 0$$

Alors

$$K_1^2 = 0 \quad \text{ou} \quad \psi_1(x) = 0$$

La solution générale est :

$$\psi_1(x) = Ae^{iK_1x} + Be^{-iK_1x}$$

où A et B sont des constantes complexes.

2.2 Cas 2 : $0 < x < a$

Pour $0 < x < a$, on a $V(x) = -V_0$. L'équation de Schrödinger revient à :

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2} - V_0\psi_2(x) = E\psi_2(x)$$
$$\Leftrightarrow \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2} = (E + V_0)\psi_2(x)$$
$$\Leftrightarrow \frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2} = \frac{2m(E + V_0)}{-\hbar^2}\psi_2(x)$$
$$\Leftrightarrow \frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2} + \frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2}\psi_2(x) = 0$$

Posons $K_2 = \sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}}$

$$\frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2} + K_2^2\psi_2(x) = 0$$

Alors

$$K_2^2 = 0 \quad \text{ou} \quad \psi_2(x) = 0$$

La solution générale est :

$$\psi_2(x) = Ce^{iK_2x} + De^{-iK_2x}$$

où C et D sont des constantes complexes.

2.3 Cas 3 : $x > a$

Pour $x > a$, on a $V(x) = 0$. L'équation de Schrödinger revient à :

$$\begin{aligned}
&\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_3(x)}{dx^2} = E\psi_3(x) \\
&\Leftrightarrow \frac{d^2\psi_3(x)}{dx^2} = \frac{2mE}{-\hbar^2}\psi_3(x) \\
&\Leftrightarrow \frac{d^2\psi_3(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi_3(x) = 0
\end{aligned}$$

Posons $K_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$

$$\frac{d^2\psi_3(x)}{dx^2} + K_1^2\psi_3(x) = 0$$

Alors

$$K_1^2 = 0 \quad \text{ou} \quad \psi_3(x) = 0$$

La solution générale est :

$$\psi_3(x) = Fe^{iK_1x} + Ge^{-iK_1x}$$

Or $G = 0$ car il n'y a pas de terme réfléchi, on a donc :

$$\psi_3(x) = Fe^{iK_1x}$$

où F est une constante complexe.

3 Conditions aux limites

Pour assurer la continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée aux points $x = 0$ et $x = a$, nous avons les conditions suivantes :

$$\begin{cases}
\psi_1(0) = \psi_2(0) \\
\psi_1'(0) = \psi_2'(0) \\
\psi_3(a) = \psi_2(a) \\
\psi_3'(a) = \psi_2'(a)
\end{cases}$$

Cela nous donne :

$$\begin{cases}
A + B = C + D \\
iK_1(A - B) = iK_2(C - D) \\
Fe^{iK_1a} = Ce^{iK_2a} + De^{-iK_2a} \\
iK_1Fe^{iK_1a} = iK_2(Ce^{iK_2a} - De^{-iK_2a})
\end{cases}$$

Résolution du système

$$\begin{aligned}
&K_1(A-B) = K_2(A+B-2D)\\
&\Leftrightarrow A(K_1-K_2) = B(K_1+K_2) - 2K_2D\\
&\Leftrightarrow A = \frac{B(K_1+K_2)-2K_2D}{K_1-K_2}
\end{aligned}$$

De même

$$C = \frac{2K_1B - (K_1+K_2)D}{K_1-K_2}$$

4 Coefficient de transmission

$$\begin{aligned}
&T = \frac{|C^2|}{|A^2|}\\
&\Leftrightarrow T = \frac{4K_1^2K_2^2}{4K_1^2K_2 + (K_1^2+K_2^2)^2\sin^2(K_2a)}\\
&\Leftrightarrow T = \frac{4E(V_0+E)}{4E(V_0+E)+V_0^2\sin^2(K_2a)}\\
&\Leftrightarrow T = \frac{1}{1+\frac{V_0^2}{4E(V_0+E)}\sin^2(K_2a)}
\end{aligned}$$

5 Transmission totale

$$\begin{aligned}
&T = 1\\
&\Leftrightarrow \sin(K_2a) = 0\\
&\Leftrightarrow K_na = n\pi \textbf{ avec } n \in \mathbb{Z}\\
&\Leftrightarrow \frac{2m(V_0+E_n)a^2}{\hbar^2} = (n\pi)^2\\
&\Leftrightarrow 2m(V_0+E_n)a^2 = (n\pi)^2\hbar^2\\
&\Leftrightarrow 2m(V_0+E_n)a^2 = (n\pi)^2\hbar^2\\
&\Leftrightarrow V_0+E_n = \frac{(n\pi)^2\hbar^2}{2ma^2}\\
\\
&\Leftrightarrow E_n = \frac{(n\pi)^2\hbar^2}{2ma^2} - V_0
\end{aligned}$$