CY Tech
Projet numérique

Résolution analytique de l'équation de Schrödinger indépendante du temps

Yanis KASSOU, Gweltaz COLLIN et Valérie ROUX

Juin 2025

1 Résolution analytique

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

Equation de Schrödinger indépendante du temps

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\Psi = 0$$

1.1 Région 1 : $x < 0$ (Avant le puits)

Soit $k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$

$$\Rightarrow \frac{d^2\Psi}{dx^2} + k_1^2\Psi = 0$$

Soit $\tilde{\Psi} = \tilde{\Psi_0}e^{rx}$

$$\Rightarrow \tilde{\Psi_0}e^{rx}(r^2 + k_1^2) = 0$$

or $\forall x \in \mathbb{R}, \tilde{\Psi_0}e^{rx} \neq 0$

$$\Rightarrow r^2 + k_1^2 = 0$$

$$\Rightarrow r = \pm ik_1$$

Ainsi les deux solutions de l'Ansatz sont

$$\tilde{\Psi_1}(x) = e^{ik_1x}, \tilde{\Psi_2}(x) = e^{-ik_1x}$$

La solution générale est une combinaison linéaire entre $\tilde{\Psi_1}$ et $\tilde{\Psi_2}$

$$\tilde{\Psi_1}(x) = \tilde{A_1}e^{ik_1x} + \tilde{B_1}e^{-ik_1x}, k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

$$\Rightarrow \Psi_I(x) = A_1e^{ik_1x} + B_1e^{-ik_1x}$$

1.2 Région 2 : $0 \leq x \leq a$

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

$$\text{Soit } k_2^2 = \frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}$$

$$\tilde{\Psi}(x) = \tilde{\Psi_0}e^{rx}$$

$$\Rightarrow \tilde{\Psi_0}e^{rx}(r^2 + k_2^2) = 0$$

$$\forall x \in \mathbb{R}, \tilde{\Psi_0}e^{rx} \neq 0$$

$$\Rightarrow r^2 + k_2^2 = 0$$

$$\Rightarrow r = \pm ik_2$$

Ainsi, les deux solutions sont :

$$\tilde{\Psi}_3(x) = e^{ik_2x}, \tilde{\Psi}_4(x) = e^{-ik_2x}$$

La solution générale est une combinaison linéaire

$$\tilde{\Psi}_{II}(x) = \tilde{A_2}e^{ik_2x} + \tilde{B_2}e^{-ik_2x}$$

$$\Rightarrow \Psi_{II}(x) = A_2e^{ik_2x} + B_2e^{-ik_2x}$$

1.3 Région 3 : $x > a$

$$V(x) = 0 \Rightarrow \frac{d^2\Psi}{dx^2} + k_1^2\Psi = 0$$

$$\tilde{\Psi}(x) = \tilde{\Psi}_0e^{rx}$$

$$\Rightarrow \tilde{\Psi}_0e^{rx}(r^2 + k_1^2) = 0$$

$$\forall x \in \mathbb{R}, \tilde{\Psi}_0e^{rx} \neq 0$$

$$\Rightarrow r^2 + k_1^2 = 0$$

$$\Rightarrow r = \pm i k_1$$

$$\tilde{\Psi}_5(x) = e^{ik_1x}, \tilde{\Psi}_6(x) = e^{-ik_1x}$$

Or il n'y a pas d'ondes incidentes venant de $+\infty$. On a :

$$\Rightarrow \tilde{\Psi}_{III}(x) = \tilde{A}_3 e^{ik_1x}$$

$$\Rightarrow \Psi_{III}(x) = A_3 e^{ik_1x}$$

2 Conditions de continuité

$$\begin{aligned}
\Psi_I(x \to 0) &= \Psi_{II}(x \to 0) \\
A_1 + B_1 &= A_2 + B_2 \\
\left.\frac{\partial \Psi_I}{\partial x}\right|_{x=0} &= \left.\frac{\partial \Psi_{II}}{\partial x}\right|_{x=0} \\
k_1A_1 - k_1B_1 &= k_2A_2 - k_2B_2 \\
\Psi_{II}(x \to a) &= \Psi_{III}(x \to a) \\
A_2e^{ik_2a} + B_2e^{-ik_2a} &= A_3e^{ik_1a} \\
\left.\frac{\partial \Psi_{II}}{\partial x}\right|_{x=a} &= \left.\frac{\partial \Psi_{III}}{\partial x}\right|_{x=a} \\
ik_2(A_2e^{ik_2a} - B_2e^{-ik_2a}) &= ik_1A_3e^{ik_1a}
\end{aligned}$$

$$\begin{cases}
A_1 + B_1 = A_2 + B_2 & (1) \\
k_1A_1 - k_1B_1 = k_2A_2 - k_2B_2 & (2) \\
A_2e^{ik_2a} + B_2e^{-ik_2a} = A_3e^{ik_1a} & (3) \\
k_2A_2e^{ik_2a} - B_2e^{-ik_2a} = k_1A_3e^{ik_1a} & (4)
\end{cases}$$

Le but est de trouver les amplitudes :

$$\frac{A_2}{A_1}, \frac{B_2}{A_2}, \frac{A_3}{A_2}, \frac{B_2}{A_2}$$

Dans le cadre de l'effet Ramsauer-Townsend on observe que l'électron traverse l'atome sans être dévié pour certaines énergies. Cela signifie qu'il n'y a pas d'onde réfléchie. Ainsi,

$$R = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2} = 0$$

$$\Rightarrow |B_1|^2 = 0 \Rightarrow B_1 = 0$$

Donc :

$$\begin{cases} A_1 = A_2 + B_2 & (1) \\ k_1 A_1 = k_2 A_2 - k_2 B_2 & (2) \quad L_2 \leftarrow \frac{1}{k_2} L_2 \end{cases}$$

$$\Leftrightarrow \begin{cases} A_1 = A_2 + B_2 \\ \frac{k_1}{k_2} A_1 = A_2 - B_2 \quad L_2 \leftarrow L_2 + L_1 \end{cases}$$

$$\Leftrightarrow \begin{cases} B_2 = A_1 - A_2 \\ 2A_2 = A_1(1 + \frac{k_1}{k_2}) \end{cases}$$

$$\Leftrightarrow \begin{cases} B_2 = A_1 - A_2 \\ A_2 = \frac{1}{2} A_1(1 + \frac{k_1}{k_2}) \end{cases}$$

$$\Leftrightarrow \begin{cases} B_2 = -\frac{1}{2} A_1 \left[1 - 2 + \frac{k_1}{k_2}\right] = \frac{1}{2} A_1 \left(1 - \frac{k_1}{k_2}\right) \\ A_2 = \frac{1}{2} A_1 \left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right) \end{cases}$$

$$A_3 e^{ik_1 a} = \frac{1}{2} A_1 \left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right) e^{ik_2 a} + \frac{1}{2} A_1 \left(1 - \frac{k_1}{k_2}\right) e^{-ik_2 a}$$

$$A_3 = \frac{1}{2} A_1 \underbrace{\left[\left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right) e^{ik_2 a} + \left(1 - \frac{k_1}{k_2}\right) e^{-ik_2 a}\right]}_{e^{-ik_1 a}}$$

ou T=1 $\Rightarrow \left|\frac{A_3}{A_1}\right|^2 = 1$

$$\frac{A_3}{A_1} = \frac{1}{e^{ik_1 a}} \left[\frac{e^{ik_2 a} + e^{-ik_2 a}}{2} + \frac{k_1}{k_2} \left(\frac{e^{ik_2 a} - e^{-ik_2 a}}{2}\right)\right]$$

$$= \frac{1}{e^{ik_1 a}} \left[\cos(k_2 a) + \frac{k_1}{k_2} i \sin(k_2 a)\right]$$

$$\left|\frac{A_3}{A_1}\right|^2 = \frac{\left|\cos(k_2 a) + \frac{k_1}{k_2} i \sin(k_2 a)\right|^2}{|e^{ik_1 a}|^2}$$

$$= \cos^2(k_2 a) + \left(\frac{k_1}{k_2}\right)^2 \sin^2(k_2 a)$$

car $|e^{ik_1 a}|^2 = |\cos(k_1 a) + i \sin(k_1 a)|^2$

$$= \cos^2(k_1 a) + \sin^2(k_1 a) = 1$$

$$\left(\frac{k_1}{k_2}\right)^2 = \frac{2mE/\hbar^2}{2m(E + V_0)/\hbar^2} = \frac{2mE}{2m(E + V_0)} = 1 + \frac{2mE}{2mV_0} = 1 + \frac{E}{V_0} \text{ si } V_0 \neq 0$$

$$\left(\frac{k_1}{k_2}\right)^2 = 1 \text{ si } V_0 = 0 \Rightarrow A_1 = A_2 = A_3$$

Il s'agit de la solution d'onde plane progressive

On sait que $1 - \sin^2(k_2 a) = \cos^2(k_2 a)$

$$\Rightarrow \left|\frac{A_3}{A_1}\right|^2 = 1 - \sin^2(k_2 a) + \left(\frac{k_1}{k_2}\right)^2 \sin^2(k_2 a) = 1$$

$$\Rightarrow \left[\left(\frac{k_1}{k_2}\right)^2 - 1\right] \sin(k_2 a) = 0$$

$$\left(\frac{k_1}{k_2}\right)^2 - 1 = 0 \Rightarrow k_1^2 = k_2^2$$

$$\Rightarrow \frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2} \Rightarrow V_0 = 0$$

Sans potentiel, il n'y a rien à diffuser. L'onde incidente continue sans jamais être perturbée. La section efficace est donc nulle partout.

$$\sin(k_2 a) = 0$$

$$\Rightarrow k_2 a = n\pi \text{ avec } n \in \mathbb{N}^*$$

$$\Rightarrow k_2 = \frac{n\pi}{a} = \sqrt{\frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2}}$$

$$\Rightarrow 2m(E + V_0) = \left(\frac{n\pi\hbar}{a}\right)^2$$

$$\Rightarrow E_n = \frac{1}{2m}\left(\frac{n\pi\hbar}{a}\right)^2 - V_0$$

Ainsi, il s'agit de l'énergie pour laquelle l'électron peut traverser le puits sans être réfléchi.

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_I(x) = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x} \\ \psi_{II}(x) = A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x} \\ \psi_{III}(x) = A_3 e^{ik_1 x} \end{cases}$$

Si le puits commence pas en 0 mais en b

alors $X = x - b$

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_I(x) = A_1 e^{ik_1 (x-b)} + B_1 e^{-ik_1 (x-b)} \\ \psi_{II}(x) = A_2 e^{ik_2 (x-b)} + B_2 e^{-ik_2 (x-b)} \\ \psi_{III}(x) = A_3 e^{ik_1 (x-b)} \end{cases}$$