

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 $\tilde{\Psi}_2$

$$\tilde{\Psi}_1(x) = \tilde{A}_1 e^{ik_1 x} + \tilde{B}_1 e^{-ik_1 x}, k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

$$\Rightarrow \Psi_I(x) = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}$$

1.2 Région 2 : $0 \leq x \leq a$

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

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

$$\tilde{\Psi}(x) = \tilde{\Psi}_0 e^{rx}$$

$$\Rightarrow \tilde{\Psi}_0 e^{rx} (r^2 + k_2^2) = 0$$

$$\forall x \in \mathbb{R}, \tilde{\Psi}_0 e^{rx} \neq 0$$

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

$$\Rightarrow r = \pm i k_2$$

Ainsi, les deux solutions sont :

$$\tilde{\Psi}_3(x) = e^{ik_2 x}, \tilde{\Psi}_4(x) = e^{-ik_2 x}$$

La solution générale est une combinaison linéaire

$$\tilde{\Psi}_{II}(x) = \tilde{A}_2 e^{ik_2 x} + \tilde{B}_2 e^{-ik_2 x}$$

$$\Rightarrow \Psi_{II}(x) = A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x}$$

1.3 Région 3 : $x > a$

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

$$\tilde{\Psi}(x) = \tilde{\Psi}_0 e^{rx}$$

$$\Rightarrow \tilde{\Psi}_0 e^{rx} (r^2 + k_1^2) = 0$$

$$\forall x \in \mathbb{R}, \tilde{\Psi}_0 e^{rx} \neq 0$$

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

$$\Rightarrow r = \pm ik_1$$

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

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

$$\Psi_I(x \rightarrow 0) = \Psi_{II}(x \rightarrow 0)$$

$$A_1 + B_1 = A_2 + B_2$$

$$\left. \frac{\partial \Psi_I}{\partial x} \right|_{x=0} = \left. \frac{\partial \Psi_{II}}{\partial x} \right|_{x=0}$$

$$k_1 A_1 - k_1 B_1 = k_2 A_2 - k_2 B_2$$

$$\Psi_{II}(x \rightarrow a) = \Psi_{III}(x \rightarrow a)$$

$$A_2 e^{ik_2a} + B_2 e^{-ik_2a} = A_3 e^{ik_1a}$$

$$\left. \frac{\partial \Psi_{II}}{\partial x} \right|_{x=a} = \left. \frac{\partial \Psi_{III}}{\partial x} \right|_{x=a}$$

$$ik_2(A_2 e^{ik_2a} - B_2 e^{-ik_2a}) = ik_1 A_3 e^{ik_1a}$$

$$\begin{cases} A_1 + B_1 = A_2 + B_2 & (1) \\ k_1 A_1 - k_1 B_1 = k_2 A_2 - k_2 B_2 & (2) \\ A_2 e^{ik_2a} + B_2 e^{-ik_2a} = A_3 e^{ik_1a} & (3) \\ k_2 A_2 e^{ik_2a} - B_2 e^{-ik_2a} = k_1 A_3 e^{ik_1a} & (4) \end{cases}$$

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 :

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

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

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

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

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

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

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

$$\begin{aligned} \frac{A_3}{A_1} &= \frac{1}{e^{ik_1 a}} \left[\frac{e^{ik_2 a} + e^{-ik_2 a}}{2} + \frac{k_1}{k_2} \left(\frac{e^{ik_2 a} - e^{-ik_2 a}}{2} \right) \right] \\ &= \frac{1}{e^{ik_1 a}} \left[\cos(k_2 a) + \frac{k_1}{k_2} i \sin(k_2 a) \right] \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} \text{car } |e^{ik_1 a}|^2 &= |\cos(k_1 a) + i \sin(k_1 a)|^2 \\ &= \cos^2(k_1 a) + \sin^2(k_1 a) = 1 \end{aligned}$$

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

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

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

On sait que $1 - \sin^2(k_2a) = \cos^2(k_2a)$

$$\Rightarrow \left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2 = 1 - \sin^2(k_2a) + \left(\frac{k_1}{k_2} \right)^2 \sin^2(k_2a) = 1$$

$$\Rightarrow \left[\left(\frac{k_1}{k_2} \right)^2 - 1 \right] \sin(k_2a) = 0$$

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

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

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

$$\sin(k_2a) = 0$$

$$\Rightarrow k_2a = n\pi \text{ avec } n \in \mathbb{N}^*$$

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

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

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

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

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_I(x) = A_1 e^{ik_1x} + B_1 e^{-ik_1x} \\ \psi_{II}(x) = A_2 e^{ik_2x} + B_2 e^{-ik_2x} \\ \psi_{III}(x) = A_3 e^{ik_1x} \end{cases}$$

Si le puits commence pas en 0 mais en b
alors $X = x - b$

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