

Exercice 1 (8 points)

Soit une particule de masse m et d'une énergie E en mouvement dans un potentiel $V(x)$, tel que :

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

Où V_0 et a sont des constantes positives.

- On s'intéresse aux états liés d'énergie E , telle que : $-V_0 < E < 0$.

- Représenter graphiquement l'allure du potentiel $V(x)$.
- Ecrire l'équation de Schrödinger aux états stationnaires dans chaque région.
 - Résoudre ces équations et établir les expressions de $\Psi(x)$.
- Appliquer les conditions de continuités de la fonction d'onde $\Psi(x)$ aux points $x=0$ et $x=a$ et montrer que :

$$\Psi_{II}(x) = 2iA \sin(k_1x)$$

$$\Psi_{III}(x) = 2iA \sin(k_1x)e^{-k_2(x-a)}$$

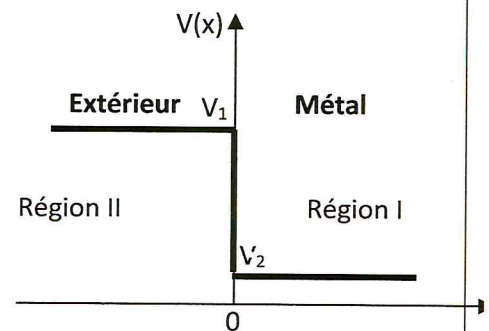
- Représenter l'allure de la densité de probabilité de présence de la particule.

Exercice 2 (12 points)

Soit un système de masse m et d'énergie E soumis au potentiel $V(x)$ tel que :

$$V(x) = V_1 \text{ pour } x < 0, \text{ et } V(x) = V_2 \text{ pour } x > 0$$

Un tel système pourrait par exemple représenter l'interaction d'un électron libre et la structure atomique d'un métal situé en $x > 0$. Considérons que l'électron est libéré du métal et se déplace vers les x négatifs.



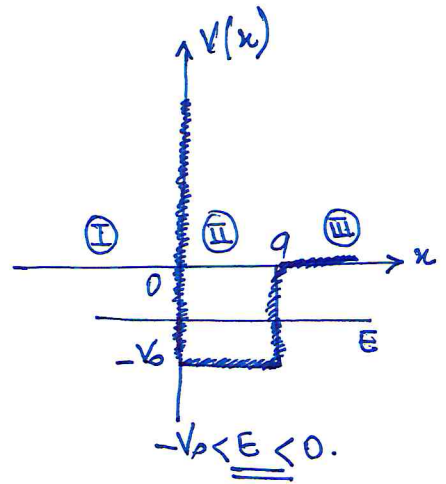
- Cas : $E > V_1 > V_2$**

- Ecrire l'équation de Schrödinger stationnaire dans chacune des régions (I) et (II).
- Résoudre l'équation de Schrödinger et préciser la nature de chaque terme.
- Ecrire les conditions de continuités de la fonction d'onde et de sa dérivée au point $x = 0$.
- Définir le coefficient de transmission T , c'est-à-dire la probabilité pour que l'électron quitte le métal. Expliciter T en fonction de k_1 et k_2 où k_1 et k_2 sont les vecteurs d'ondes (à définir).
- Même question pour R et vérifier que $T + R = 1$.
- Ecrire T en fonction de V_1 , V_2 et E et faire application numérique avec :
 $E = 1 \text{ eV}$, $V_1 = 0 \text{ eV}$ et $V_2 = -10 \text{ eV}$. Commenter.

Ex01:

1°/ Représentation graphique du potentiel $V(x)$:

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



On a 3 régions:

- région I: $x < 0$: $\psi_I(x) = 0$.
- région II: $0 \leq x \leq a$.
- région III: $x > a$.

2°/ Equation de Schrödinger des états stationnaires:

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

• Dans la région I, le potentiel est infini ($V(x) = \infty$) \Rightarrow alors la probabilité de présence de la particule est nulle dans cette région \Rightarrow par conséquent la fonction d'onde est nulle $|\psi_I(x) = 0|$.

• Dans la région II, $V(x) = -V_0$, donc:

$$\frac{d^2 \psi_{II}(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E + V_0) \psi_{II}(x) = 0, \quad k_1^2 = \frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2}.$$

• Dans la région III, $V(x) = 0$, donc:

$$\frac{d^2 \psi_{III}(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi_{III}(x) = 0, \quad k_2^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2}.$$

3°/ Expressions de $\psi(x)$ dans chaque région (Solution de l'équation de Schrödinger):

a. Solution de l'éq de Sch:

$$\begin{cases} \psi_I(x) = 0, & x < 0 \\ \psi_{II}(x) = A \cdot e^{ik_1 x} + B \cdot e^{-ik_1 x}, & 0 \leq x \leq a \\ \psi_{III}(x) = C \cdot e^{k_2 x} + D \cdot e^{-k_2 x}, & x > a. \end{cases}$$

$0 \leftarrow \psi_{III}(x)$ doit tendre vers 0 qd $x \rightarrow +\infty$, car la fonction d'onde est bornée

• Finalement, on a :

$$\begin{cases} \psi_I(x) = 0 & , x < 0 \\ \psi_{II}(x) = A \cdot e^{ik_1 x} + B \cdot e^{-ik_1 x} & , 0 \leq x \leq a \\ \psi_{III}(x) = D \cdot e^{-k_2 x} & , x > a \end{cases}$$

b. Conditions de continuité aux points $x=0$, et $x=a$:

• La continuité de la fonction d'onde au $x=0$ s'écrit :

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0) = 0 \Rightarrow A + B = 0 \Rightarrow \boxed{B = -A}$$

• Les équations de continuité au point $x=a$:

$$\begin{cases} \psi_{II}(a) = \psi_{III}(a) \\ \psi'_{II}(a) = \psi'_{III}(a) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} A \cdot e^{ik_1 a} + B \cdot e^{-ik_1 a} = D \cdot e^{-k_2 a} \\ ik_1 A \cdot e^{ik_1 a} - ik_1 B \cdot e^{-ik_1 a} = -k_2 D \cdot e^{-k_2 a} \end{cases}$$

En remplaçant $B = -A$, on trouve :

$$\begin{cases} 2iA \sin(k_1 a) = D \cdot e^{-k_2 a} & \dots\dots\dots (1) \\ 2iA k_1 \cos(k_1 a) = -k_2 D \cdot e^{-k_2 a} & \dots\dots\dots (2) \end{cases}$$

D'autre part :

$$\psi_{II}(x) = A e^{ik_1 x} + B e^{-ik_1 x} \quad (B = -A)$$

$$\underline{\psi_{II}(x) = 2iA \sin(k_1 x) = A' \sin(k_1 x)}$$

$$(1) \Leftrightarrow D = 2iA \sin(k_1 a) e^{k_2 a}$$

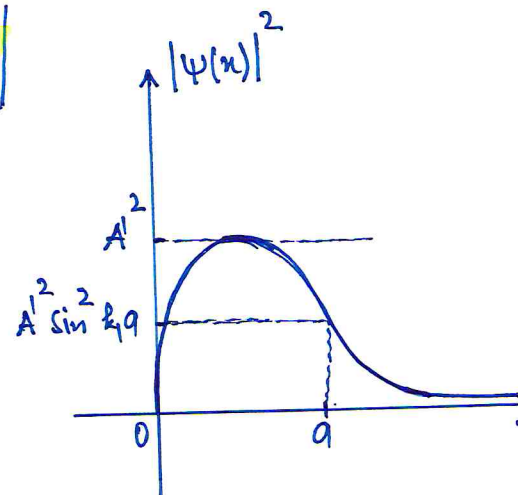
$$\Rightarrow \psi_{III}(x) = 2iA \sin(k_1 a) \cdot e^{k_2 a} \cdot e^{-k_2 x}$$

$$\boxed{\psi_{III}(x) = A' \sin(k_1 a) e^{-k_2(x-a)}}$$

4°/ La densité de probabilité :

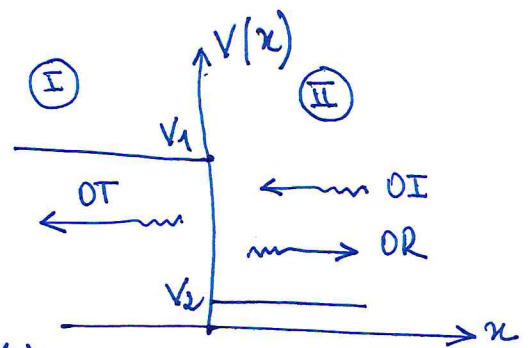
$$|\psi_{II}(x)|^2 = A'^2$$

$$|\psi_{III}(x)|^2 = A'^2 \sin^2(k_1 a)$$



- Corrige' EXO 2 :

Cas: $E > V_1 > V_2$



1°/ L'eq de Schrödinger

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

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) \psi(x) = 0. \leftarrow \text{Eq de Sch. ind. du T.}$$

a. Région II :

$$\psi_{II}''(x) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_2) \psi_{II}(x) = 0.$$

On pose: $k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_2).$

$$\psi_{II}''(x) + k_2^2 \psi_{II}(x) = 0.$$

Solution

$$\psi_{II}(x) = \underbrace{A \cdot e^{-ik_2 x}}_{\substack{\text{Onde} \\ \text{Incidente} \\ \text{OI}}} + \underbrace{B \cdot e^{ik_2 x}}_{\substack{\text{Onde} \\ \text{Réfléchie} \\ \text{OR}}}.$$

b. Région I :

$$\psi_I''(x) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_1) \psi_I(x) = 0.$$

On pose: $k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_1).$

$$\psi_I''(x) + k_1^2 \psi_I(x) = 0.$$

Solution

$$\psi_I(x) = \underbrace{C \cdot e^{-ik_1 x}}_{\substack{\text{Onde} \\ \text{Transmise} \\ \text{OT}}} + \underbrace{D \cdot e^{ik_1 x}}_0.$$

Solutions: $\rightarrow \boxed{\psi_I(x) = C \cdot e^{-ik_1 x}}$

$$\left| \begin{array}{l} \psi_{II}(x) = A \cdot e^{-ik_2 x} + B \cdot e^{ik_2 x} \\ \psi_I(x) = C \cdot e^{-ik_1 x} \end{array} \right|$$

2°/ Les conditions de continuité au point $x=0$:

$$\begin{cases} \psi_I(x) = C \cdot e^{-ik_1 x} \\ \psi_{II}(x) = A \cdot e^{-ik_2 x} + B \cdot e^{ik_2 x} \end{cases}$$

$$\begin{cases} \psi_I(0) = \psi_{II}(0) \\ \psi'_I(0) = \psi'_{II}(0) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} C = A + B \dots\dots\dots \\ -ik_1 C = ik_2 (B - A) \end{cases}$$

3°/ Le coefficient de transmission T:

Onde incidente: $A \cdot e^{-ik_2 x}$

Onde réfléchie: $B \cdot e^{ik_2 x}$

Onde transmise: $C \cdot e^{-ik_1 x}$

$$T = \frac{|\psi_t|^2}{|\psi_i|^2} \cdot \frac{V_{g_t}}{V_{g_i}} = \frac{C^2}{A^2} \cdot \frac{\frac{\hbar \cdot k_1}{m}}{\frac{\hbar \cdot k_2}{m}} = \left(\frac{C}{A}\right)^2 \cdot \frac{k_1}{k_2}$$

* A partir des équations précédentes, on a:

$$\begin{cases} C = A + B \dots\dots ① \\ \frac{k_1}{k_2} C = A - B \dots\dots ② \end{cases}$$

$$① + ② \Rightarrow \left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right) C = 2A$$

$$\Rightarrow \frac{C}{A} = \frac{2}{1 + \frac{k_1}{k_2}} \Rightarrow \boxed{\frac{C}{A} = \frac{2k_2}{k_2 + k_1}}$$

donc T:

$$T = \frac{4k_2^2 k_1}{(k_2 + k_1)^2 k_2} \Rightarrow \boxed{T = \frac{4k_2 k_1}{(k_2 + k_1)^2}}$$

• Le coefficient de réflexion:

$$R = \frac{|\psi_r|^2}{|\psi_i|^2} \cdot \frac{V_{g_r}}{V_{g_i}} = \frac{B^2}{A^2} \cdot \frac{\frac{\hbar k_2}{m}}{\frac{\hbar k_2}{m}} = \left(\frac{B}{A}\right)^2$$

On a:

$$\begin{cases} C = A + B \\ \frac{C}{A} = \frac{2k_2}{k_2 + k_1} \end{cases} \Rightarrow$$

$$B = C - A$$

$$\frac{B}{A} = \frac{C}{A} - 1 \Rightarrow \frac{B}{A} = \frac{2k_2}{k_2 + k_1} - 1$$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{B}{A} = \frac{k_2 - k_1}{k_2 + k_1}}$$

Donc:

$$\boxed{R = \left(\frac{k_2 - k_1}{k_2 + k_1}\right)^2}$$

• On vérifie que $T + R = 1$:

$$\frac{4k_2k_1}{(k_2+k_1)^2} + \frac{k_2^2 - 2k_2k_1 + k_1^2}{(k_2+k_1)^2}$$

$$= \frac{k_2^2 + 2k_2k_1 + k_1^2}{(k_2+k_1)^2} = \frac{(k_2+k_1)^2}{(k_2+k_1)^2} = 1.$$

4°/

$$T = \frac{4k_1k_2}{(k_1+k_2)^2} \quad \text{sachant que:} \quad k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_1)$$

$$k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_2).$$

$$T = \frac{4 \frac{2m}{\hbar^2} \sqrt{(E - V_1)(E - V_2)}}{\left(\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_1)} + \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_2)} \right)^2}$$

$$T = \frac{4 \cdot \frac{2m}{\hbar^2} \sqrt{(E - V_1)(E - V_2)}}{\left[\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (\sqrt{E - V_1} + \sqrt{E - V_2})} \right]^2} = \frac{4 \sqrt{(E - V_1)(E - V_2)}}{(\sqrt{E - V_1} + \sqrt{E - V_2})^2}$$

• Application numérique:

$$E = 1 \text{ eV.}$$

$$V_1 = 0 \text{ eV}$$

$$V_2 = -10 \text{ eV}$$

$$\Rightarrow T = 0,71$$

$$T = 71\%$$

* 71% l'électron quitte le métal.

* 29% " sera réfléchi

R. CHABANE.