T.D. de Mécanique Quantique - SMP4
Correction Série N°2

Solution 1: *Seuil de potentiel*

On considère une particule de masse m animée d'une vitesse v soumise à un potentiel $V(r)$ indépendant du temps.

1) **L'équation de Schrödinger (dépendante du temps) de cette particule.**
Elle s'écrit

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{r},t) + V(\vec{r})\psi(\vec{r},t) \tag{1}$$

2) **Séparation des composantes spatiale et temporelle :**
Soit

$$\psi(\vec{r},t) = \phi(\vec{r})u(t) \tag{2}$$

insérons (2) dans l'équation de Schrödinger précédente (1) $\Longrightarrow$

$$i\hbar\phi(\vec{r})\frac{\partial}{\partial t}u(t) = u(t)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\phi(\vec{r})\right] + u(t)V(\vec{r})\phi(\vec{r}) \tag{3}$$

Divisons les deux membres de (3) par $\phi(\vec{r})u(t)$ $\Longrightarrow$:

$$\underbrace{\frac{i\hbar}{u(t)}\frac{\partial}{\partial t}u(t)}_{\text{partie temporelle}} = \underbrace{\frac{1}{\phi(\vec{r})}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\phi(\vec{r}) + V(\vec{r})\phi(\vec{r})\right]}_{\text{partie spaciale}}$$

L'égalité n'est possible que si chacune de ces fonctions est égale à une constante que nous appellerons : $E = \hbar\omega =$ Énergie
$\Longrightarrow$

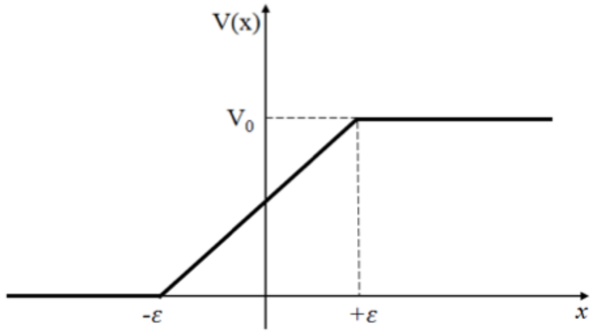
$$\begin{cases} \dfrac{i\hbar}{u(t)}\dfrac{d}{dt}u(t) = E \\ \dfrac{1}{\phi(\vec{r})}\left[-\dfrac{\hbar^2}{2m}\Delta\phi(\vec{r}) + V(\vec{r})\phi(\vec{r})\right] = E \end{cases} \iff \begin{cases} \dfrac{d\,u(t)}{dt} = -i\omega\,u(t) \implies u(t) = Ae^{-\frac{i}{\hbar}Et} = Ae^{-i\omega t} \\ -\dfrac{\hbar^2}{2m}\Delta\phi(\vec{r}) + V(\vec{r})\phi(\vec{r}) = E\phi(\vec{r}) \qquad (*) \end{cases}$$

L'équation $(*)$ est **l'équation de Schrödinger indépendante du temps** de la forme

$$H\phi(\vec{r}) = E\phi(\vec{r}),$$

et $\phi(\vec{r})$ est appelée **solution stationnaire** de l'équation de Schrödinger.

3) En se plaçant à une dimension et en prenant $V(x)$ comme indiqué



l'équation $(*)$ se re-écrit

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\phi''(x)+V(x)\phi(x)=E\phi(x) \iff -\frac{\hbar^2}{2m}\phi''(x)=[E-V(x)]\phi(x) \iff \phi''(x)=\frac{2m}{\hbar^2}[V(x)-E]\phi(x)$$

i) $\phi'(\epsilon)-\phi'(-\epsilon)$

L'intégration du dernière expression entre $-\epsilon$ et $+\epsilon$ donne

$$\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}\phi''(x)dx=\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}\frac{2m}{\hbar^2}[V(x)-E]\phi(x)dx \implies \left[\phi'(x)\right]_{-\epsilon}^{+\epsilon}=\frac{2m}{\hbar^2}\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}[V(x)-E]\phi(x)dx$$

et donc

$$\boxed{\phi'(\epsilon)-\phi'(-\epsilon)=\frac{2m}{\hbar^2}\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}[V(x)-E]\phi(x)dx}$$

ii) **La limite de cette quantité quand $\epsilon\to 0$ selon que V est fini ou infini.**

On a :

$$\lim_{\epsilon\to 0}\left[\phi'(\epsilon)-\phi'(-\epsilon)\right]=\frac{2m}{\hbar^2}\left[\lim_{\epsilon\to 0}\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}V(x)\phi(x)dx-\lim_{\epsilon\to 0}\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}E\phi(x)dx\right]$$

$\implies$

$$\phi'(0^+)-\phi'(0^-)=\frac{2m}{\hbar^2}\left[\lim_{\epsilon\to 0}\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}V(x)\phi(x)dx-\lim_{\epsilon\to 0}\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}E\phi(x)dx\right]$$

- <u>cas où V_0 est fini</u>

$$\epsilon\to 0,\quad V(x)\to V_0\ (\text{fini}) \implies \phi'(0^+)-\phi'(0^-)=0 \implies \phi'(0^+)=\phi'(0^-)$$

et donc ϕ' est <u>continue</u> en $x=0$.

On notera ici qu'on a utilisé le fait que $\boxed{\lim_{\epsilon\to 0}\int_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon}\phi(x)dx=\lim_{\epsilon\to 0}\left[2\epsilon\phi(x_0)\right]=0}$

- <u>cas où V_0 est infini</u>

$$\epsilon\to 0,\quad V(x)\to\infty\ (\text{infini}) \implies \phi'(0^+)-\phi'(0^-)\neq 0 \implies \phi'(0^+)\neq\phi'(0^-)$$

cela est du au fait que $\boxed{\lim_{\epsilon\to 0}\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}V(x)\phi(x)dx\neq 0}$, et donc ϕ' est <u>discontinue</u> en $x=0$.

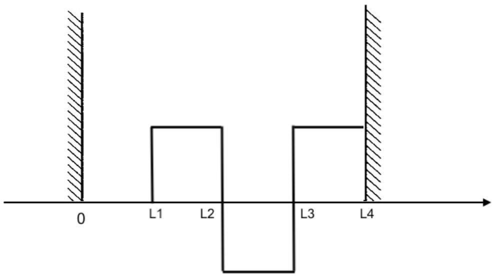
Conclusion

⋆ La fonction $\phi(x)$ est toujours continue $\forall V(x)$.

⋆ ϕ' est continue au point de discontinuité de $V(x)$ en $x=L$ si $V(L)$ est fini (passe d'une valeur finie $\to$ valeur finie).

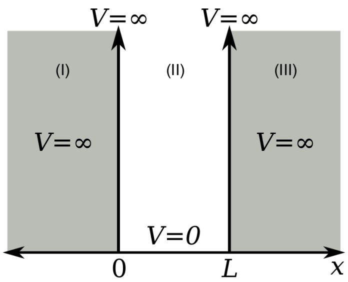
⋆ ϕ' est discontinue au point de discontinuité de $V(x)$ en $x=L$ si $V(L)=\infty$ est fini (passe d'une

valeur finie $\rightarrow$ valeur infinie).
Schéma explicatif



Solution 2: *Puits de potentiel infini*

Considérons une particule de masse m, astreint à se déplacer sur l'axe $x^{'}ox$ entre $x=0$ et $x=L$, comme montre la figure ci-dessous.



1) **L'équation de Schrödinger pour ce système.**
à l'intérieur du puits, où la fonction d'onde est notée $\psi_2(x)$, on écrit :

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

à l'extérieur du puits, on écrit :

$$\frac{d^2\psi_{1,3}(x)}{dx^2}+\frac{2\,m}{\hbar^2}\left(E-V(x)\right)\psi_{1,3}(x)=0$$

avec $\psi_1(x)$ et $\psi_3(x)$ sont les deux fonctions d'onde respectivement dans les régions (I) et (III).
2) **Résolution des équations précédentes**
Classiquement, la particule ne peut qu'osciller entre les deux parois du puits.
Quantiquement parlant, la fonction d'onde de la particule doit être nulle à l'extérieur du puits

$$\Longrightarrow \quad \boxed{\psi_1(x)=\psi_3(x)=0}$$

et aussi doit être continue en $x=0$ et $x=L$. et montrer que l'énergie est quantifiée.
À l'intérieur du puits, l'équation de Schrödinger s'écrit, être nulle à l'extérieur du puits

$$\psi_2^{''}(x)+k^2\,\psi_2(x)=0 \quad \text{avec} \quad k^2=\frac{2\,m}{\hbar^2}E$$

Les fonctions d'onde de la particule sont donc de la forme :

$$\psi_2(x)=A\,e^{ikx}+B\,e^{-ikx}$$

Continuité en $x=0$ et $x=L$

$$\begin{cases}\psi_1(x=0)=\psi_2(x=0)\\ \psi_2(x=L)=\psi_3(x=L)\end{cases} \iff \begin{cases} A+B=0 \implies A=-B\\ Ae^{ikL}+Be^{-ikL}=0\end{cases}$$

$\implies \quad A(e^{ikL}-e^{-ikL})=0 \quad \implies 2i\,A\,\sin(kL)=0 \quad \implies \sin(kL)=0 \quad \implies kL=n\pi.$

On en déduit alors que

$$k^2=\frac{n^2\pi^2}{L^2}=\frac{2\,m\,E}{\hbar^2}$$

Finalement

$$\boxed{E=E_n=\frac{n^2\,\pi^2\,\hbar^2}{2\,m\,L^2}, \quad \text{et l'énergie est bien quantifiée}}$$

3) **L'expression de la fonction d'onde d'une particule dans un puits de potentiel infini.**
On a trouvé que $\psi_2(x)=A\,e^{ikx}+B\,e^{-ikx}$ et $A=-B$. Donc $\psi_2(x)=C\,\sin(\frac{n\,\pi}{L}x)$ avec $C=2iA$.
Soit alors

$$\psi_2(x)=\psi_n(x)=C\,\sin\Big(\frac{n\,\pi}{L}x\Big)$$

cette fonction d'onde $\psi_n(x)$ est de carré sommable, et d'où la probabilité total de la trouver le long de l'axe x vaut 1. On écrit :

$$\underbrace{\cancel{\int_{-\infty}^{0}|\psi_1(x)|^2dx}}_{=0}+\int_0^L|\psi_2(x)|^2dx+\underbrace{\cancel{\int_{L}^{+\infty}|\psi_3(x)|^2dx}}_{=0}=1 \quad\implies\quad \int_0^L C^2\sin^2\Big(\frac{n\,\pi}{L}x\Big)dx=1$$

$$\implies \int_0^L\frac{C^2}{2}\Big(1-\cos\Big(2\frac{n\,\pi}{L}x\Big)\Big)dx=1$$

$$\implies \frac{C^2}{2}\Big[x-\frac{L}{2\,n\,\pi}\sin\Big(2\frac{n\,\pi}{L}x\Big)\Big]_0^L=1 \quad\implies\quad \frac{C^2}{2}L=1 \quad\implies\quad C=\sqrt{\frac{2}{L}}\,e^{i\theta}$$

En prenant la phase $\theta=0$, on écrit

$$\boxed{\psi_2(x)=\psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\Big(\frac{n\,\pi}{L}x\Big)}$$

4) **La probabilité de présence** de la particule en un point quelconque du puits.
Cette probabilité s'écrit :

$$\mathcal{P}(x)=|\psi_n(x)|^2=\frac{2}{L}\sin^2(\frac{n\,\pi}{L}x)$$

En quels points la densité de probabilité est maximale ?

$$\mathcal{P}(x)\text{ est maximale} \iff \frac{d\mathcal{P}(x)}{dx}=0 \quad \implies \frac{2}{L}.2.\frac{n\,\pi}{L}\sin\Big(\frac{n\,\pi}{L}x\Big)\cos\Big(\frac{n\,\pi}{L}x\Big)=0$$

$$\implies \frac{4\,n\,\pi}{L^2}\frac{1}{2}\sin\Big(2\frac{n\,\pi}{L}x\Big)=0$$

$$\implies \sin\Big(2\frac{n\,\pi}{L}x\Big)=0$$

$$\implies 2\frac{n\,\pi}{L}x=p\,\pi \implies x=\frac{p\,L}{2n} \quad (p\in\mathbb{N})$$

on a

$$0<x<L \implies 0<\frac{pL}{2n}<L \implies 0<p<2n$$

Alors

- n = 1 :

$$E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2} \quad \text{et} \quad \psi_{n=1} = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\Big(\frac{\pi}{L}x\Big) \quad \text{et comme} \quad 0 < p < 2 \implies p = 1$$

donc la probabilité est maximale en $x = L/2$

- n = 2 :

$$E_2 = \frac{2\,\pi^2\hbar^2}{mL^2} \quad \text{et} \quad \psi_{n=2} = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\Big(2\frac{\pi}{L}x\Big) \quad \text{et comme} \quad 0 < p < 4 \implies p = 1,2,3$$

donc la probabilité est maximale en $x = L/4\,(p=1)$, $x = L/2\,(p=2)$ et $x = 3L/4\,(p=3)$.

5) **La probabilité de présence de la particule dans cahque cas**

Calculons tout d'abord la probabilité $\mathcal{P}$ pour trouver la particule entre x_1 et x_2. Soit alors,

$$\mathcal{P} = \mathcal{P}(x_1 \le x \le x_2) = \frac{2}{L}\int_{x_1}^{x_2} \sin^2\Big(\frac{n\,\pi}{L}x\Big)dx = \frac{1}{L}\Big[x - \frac{L}{2\,n\,\pi}\sin\Big(2\frac{n\,\pi}{L}x\Big)\Big]_{x_1}^{x_2}$$

c'est-à-dire

$$\mathcal{P} = \frac{1}{L}\Big[x_2 - x_1 - \frac{L}{2\,n\,\pi}\sin\Big(2\frac{n\,\pi}{L}x_2\Big) + \frac{L}{2\,n\,\pi}\sin\Big(2\frac{n\,\pi}{L}x_1\Big)\Big]$$

- $\boxed{0 \le x \le L}$

$$\mathcal{P}(0 \le x \le L) = \frac{1}{L}\Big[L - 0 - \frac{L}{2\,n\,\pi}\sin\Big(2\frac{n\,\pi}{L}L\Big) + \frac{L}{2\,n\,\pi}\sin\Big(2\frac{n\,\pi}{L}0\Big)\Big] = 1$$

- $\boxed{0 \le x \le L/4}$

$$\mathcal{P}(0 \le x \le L/4) = \frac{1}{L}\Big[\frac{L}{4} - 0 - \frac{L}{2\,n\,\pi}\sin\Big(2\frac{n\,\pi}{L}\frac{L}{4}\Big) + \frac{L}{2\,n\,\pi}\sin\Big(2\frac{n\,\pi}{L}0\Big)\Big] = \frac{1}{4} - \frac{1}{2\,n\,\pi}\sin\Big(\frac{n\,\pi}{2}\Big)$$

- $\boxed{0 \le x \le L/2}$

$$\mathcal{P}(0 \le x \le L/2) = \frac{1}{L}\Big[\frac{L}{2} - 0 - \frac{L}{2\,n\,\pi}\sin\Big(2\frac{n\,\pi}{L}\frac{L}{2}\Big) + \frac{L}{2\,n\,\pi}\sin\Big(2\frac{n\,\pi}{L}0\Big)\Big] = \frac{1}{2}$$

- $\boxed{L/2 - \delta \le x \le L/2 + \delta}$

$$\mathcal{P}(L/2 - \delta \le x \le L/2 + \delta) = \frac{2\delta}{L} - \frac{1}{2\,n\,\pi}\Bigg[\sin\Bigg(2\frac{n\,\pi}{L}(\frac{L}{2} + \delta)\Bigg) - \sin\Bigg(2\frac{n\,\pi}{L}(\frac{L}{2} - \delta)\Bigg)\Bigg]$$

6) **La séparation d'énergie pour deux niveaux voisins E_n et E_{n+1}.**

On a

$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n = \frac{(n+1)^2\,\pi^2\,\hbar^2}{2\,m\,L^2} - \frac{n^2\,\pi^2\,\hbar^2}{2\,m\,L^2} = (2n+1)\frac{\pi^2\,\hbar^2}{2\,m\,L^2}$$

Séparation si L devient très grand (dimension macroscopique).

$$\text{Si} \quad L \to +\infty \;:\; \Delta E_n = 0 \implies E_{n+1} \approx E_n$$

Qu'est ce qu'on peut dire de la quantification d'énergie ?

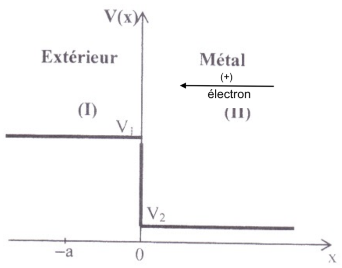
l'énergie dans ce cas est continue

Solution 3: *Marche de potentiel "inversée"*

Soit un système de masse m et d'énergie E soumis au potentiel $V(x)$ tel que : $V(x) = V_1$ pour

$x < 0$ et $V(x) = V_2$ 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.

A)-1^er cas : $E > V_1 > V_2$



Dans ce cas les électrons possèdent des énergies supérieurs à V_1 et V_2, comme montre la figure ci-dessus.

1) **L'équation de Schrödinger stationnaire dans chacune des régions (I) et (II).**
En général, telle équation s'écrit :

$$\phi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(x)]\phi(x) = 0 \qquad (1)$$

Dans la région (II), on notera la fonction d'onde par $\phi_{II}(x)$. L'équation (1) s'écrit

$$\phi''_{II}(x) + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V_2]\phi_{II}(x) = 0 \qquad (2)$$

Dans la région (I), on notera la fonction d'onde par $\phi_I(x)$. L'équation (1) s'écrit

$$\phi''_I(x) + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V_1]\phi_I(x) = 0 \qquad (3)$$

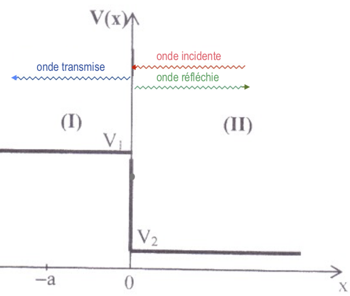
2) **Résolution de l'équation de Schrödinger**
En posant $k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_2) > 0$, la solution de l'éq.(2) est

$$\phi_{II}(x) = \underbrace{A\,e^{-ik_2x}}_{onde\,incidente} + \underbrace{B\,e^{+ik_2x}}_{onde\,r\,f\,l\,chie}$$

En posant $k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_1) > 0$, la solution de l'éq.(3)

$$\phi_I(x) = \underbrace{C\,e^{-ik_1x}}_{onde\,transmise} + \underbrace{D\,e^{+ik_1x}}_{onde\,r\,f\,l\,chie}$$

puisqu'il n'y a pas d'onde réfléchie lorsque $x \to -\infty$ (pas d'onde de retour), le coefficient D doit être pris égal à 0 $\implies$ $D = 0$. Et donc $\phi_I(x) = C\,e^{-ik_2x}$



3) **Les conditions de continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée au point** $x = 0$. Soit

$$\begin{cases} \phi_{II}(x=0) = \phi_I(x=0) \\ \phi'_{II}(x=0) = \phi'_I(x=0) \end{cases} \Longleftrightarrow \begin{cases} A + B = C \\ ik_2\,(B - A) = -ik_1\,C \end{cases} \Longleftrightarrow \begin{cases} A + B = C \\ A - B = \dfrac{k_1}{k_2}\,C \end{cases}$$

en éliminant B entre les deux équations, on trouve :

$$\begin{cases} 2\,A = \left(\dfrac{k_1 + k_2}{k_2}\right) C \implies \dfrac{C}{A} = \dfrac{2k_2}{k_1 + k_2} \\ B = C - A \implies \dfrac{B}{A} = \dfrac{C}{A} - 1 \implies \dfrac{B}{A} = \dfrac{k_2 - k_1}{k_1 + k_2} \end{cases}$$

4) **Coefficient de transmission** T
Il représente la probabilité pour que l'électron quitte le métal. Soit

$$T = \frac{|\varnothing_{tr}|^2}{|\varnothing_{in}|^2} \times \frac{v_{g,tr}}{v_{g,in}} \qquad R = \frac{|\varnothing_r|^2}{|\varnothing_{in}|^2} \times \frac{v_{g,r}}{v_{g,in}}$$

avec $\varnothing_{tr}$, $\varnothing_r$ et $\varnothing_{in}$ sont les flux d'électrons transmis, réfléchis et incidents respectivement, tandis que $v_{g,tr}$, $v_{g,r}$ et $v_{g,in}$ sont respectivement les vitesses de groupe du paquet d'ondes transmise, réfléchie et incidente. Comme le $|\varnothing|^2 = |\text{Amplitude}|^2$ et la $v_g = \hbar k/m$, on écrit:

$$T = \frac{|C|^2 \times \frac{\hbar k_1}{m}}{|A|^2 \times \frac{\hbar k_2}{m}} = \frac{|C|^2}{|A|^2}\frac{k_1}{k_2} \quad \text{et} \quad R = \frac{|B|^2 \times \frac{\hbar k_2}{m}}{|A|^2 \times \frac{\hbar k_2}{m}} = \frac{|B|^2}{|A|^2}$$

Remarque :
On trouvera le meme résultat en utilisant le courant de probabilité donné par la formule,

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2im}\left(\phi^*(x)\frac{d\phi(x)}{dx} - \phi\frac{d\phi^*(x)}{dx}\right)\vec{e_x}$$

Dans ce cas,

- Le courant incident :

$$\phi_i(x) = Ae^{ik_2x} \implies \vec{j_i} = -\frac{\hbar k_2}{m}|A|^2\vec{e_x}$$

- Le courant réfléchi :

$$\phi_r(x) = Be^{-ik_2x} \implies \vec{j_r} = +\frac{\hbar k_2}{m}|B|^2\vec{e_x}$$

- Le courant transmis :

$$\phi_t(x) = Ce^{ik_1x} \implies \vec{j_t} = -\frac{\hbar k_1}{m}|C|^2\vec{e_x}$$

et d'où les coefficients s'écrivent $T = |\vec{j_t}/\vec{j_i}|$ et $R = |\vec{j_r}/\vec{j_i}|$.

En terme de k_1 **et** k_2
tenant compte des expressions de C/A et B/A précédentes, on écrit

$$T = \frac{4\,k_1\,k_2}{(k_1 + k_2)^2} \quad \text{et} \quad R = \left(\frac{k_2 - k_1}{k_1 + k_2}\right)^2$$

Vérification
On montre facilement que

$$T + R = \frac{4k_1 k_2}{(k_1+k_2)^2} + \left(\frac{k_2-k_1}{k_1+k_2}\right)^2 = \frac{4k_1k_2 + k_1^2 + k_2^2 - 2k_1k_2}{(k_1+k_2)^2} = 1$$

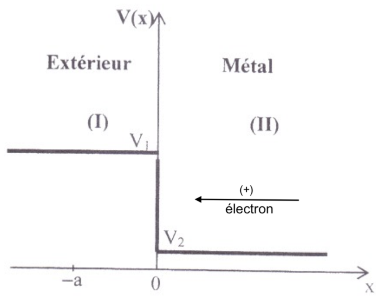
5) **T en fonction de V_1, V_2 et E**
On a

$$k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_1) \quad \text{et} \quad k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_2).$$

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

En faisant l'application numérique avec : $E = 1$ eV, $V_1 = 0$ eV et $V_2 = -10$ eV, on trouve $T \simeq 0.71 \simeq 71\%$. Donc la transmission n'est pas à 100%, et parmi 100 particules incidentes, 29 sont réfléchies.

B)-2^{me} cas : $V_2 < E < V_1$
Dans ce cas les électrons possèdent des énergies inférieurs à V_1 et supérieurs à V_2, comme montre la figure ci-dessous.



1) **La solution de l'équation de Schrödinger**
Dans la région (II) : toujours on a $k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_2) > 0$, et la solution de l'éq.(2) reste la meme,

$$\phi_{II}(x) = \underbrace{A\,e^{-ik_2x}}_{onde\,incidente} + \underbrace{B\,e^{+ik_2x}}_{onde\,rflchie}$$

Dans la région (I) ($x \to -\infty$) : En posant $\rho^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_1 - E) > 0$, l'équation (3) se re-écrit

$$\phi_I''(x) - \rho^2\phi_I(x) = 0 \qquad (4)$$

la solution de l'éq.(4)

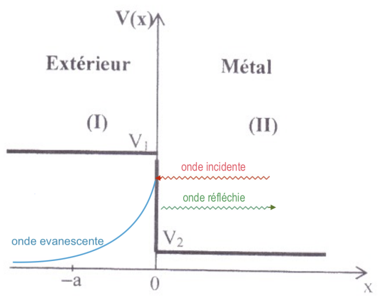
$$\phi_I(x) = \underbrace{C\,e^{-\rho x}}_{\text{div à } x\to-\infty} + \underbrace{D\,e^{+\rho x}}_{\text{cv à } x\to-\infty}$$

et comme la $\lim_{x\to-\infty}\phi_I(x)$ doit etre finie $\Longrightarrow$ on doit prendre $C = 0$ et donc

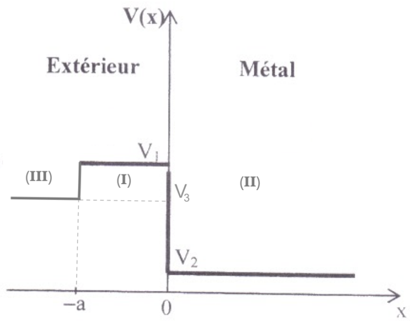
$$\phi_I(x) = D\,e^{+\rho x}$$

Interprétation
La fonction $\phi_I(x) = D\,e^{+\rho x}$ représente une onde évanescente dont l'amplitude diminue exponentiellement $x \to -\infty$ comme illustré dans la figure ci-dessous, et donc il n'y a pas de propagation dans la région (I). La probabilité de détecter les électrons à grande distance (vers le sens négatif

$x \to -\infty$) de la marche est nulle. Il y a néamoins une probabilité de présence non nulle au voisinage de la marche, sous la forme d'une onde évanescente.



2) Si on considère que la zone (1) présente une 2^{nd} discontinuité de potentiel (V_3) à $x = -a$ et que $V_2 < V_3 < E < V_1$ (barrière de potentiel) comme dans la figure ci-dessous,

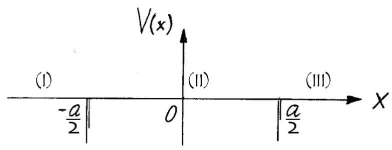


Dans la région (III), le potentiel de la barrière $V_{barriere} = V_3 < E$, donc dès que la particule puisse arriver à l'entrée de la région (III), elle pourra continuer son chemin. Donc ceci ni possible que si a est très faible $a \to 0$ (largueur de la région (I) est réduit).
Si a est très grande, l'onde évanescente n'arrive pas à l'entrée de la région (III) car sa probabilité de présence en $x = -a$ est quasi-nulle, c'est l'effet Tunnel.

Solution 4: *États liés de l'électron de l'ion H_2^+*

L'ion H_2^+ est constitué de deux protons p_1 et p_2 séparés par la distance a et d'un seul électron. On veut étudier les **états liés** de l'électron de masse m et d'énergie $E < 0$, sous l'attraction des deux protons supposés **immobiles**. Le potentiel ressenti par l'électron peut être modélisé par le **double puits 'delta' de Dirac** suivant

$$V(x) = -\alpha\delta(x + \frac{a}{2}) - \alpha\delta(x - \frac{a}{2})$$



où α est une constante positive.

Dans ce qui suit, on posera :

$$q^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2}, \quad \mu = \frac{2m\alpha}{\hbar^2} \quad \text{et} \quad E_L = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}$$

1) **a)- L'équation de Schrödinger**
Elle s'écrit de manière générale :

$$\phi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2}[E + \alpha\delta(x + \frac{a}{2} + \alpha\delta(x - \frac{a}{2})]\phi(x) = 0 \quad (1)$$

Pour $x \neq \pm\frac{a}{2}$, le potentiel est nul et la particule est libre dans les trois régions (I), (II) et (III), donc :

$$\phi^{''}(x) + \frac{2\,m\,E}{\hbar^2}\phi(x) = 0 \tag{2}$$

b)- L'expression de la fonction d'onde $\phi(x)$ dans les trois régions de l'espace.
Comme l'énergie de l'électron est $E < 0$, posons $q^2 = -\frac{2\,m\,E}{\hbar^2} > 0$, alors :

$$\phi^{''}(x) - q^2\phi(x) = 0 \tag{3}$$

La fonction d'onde est alors de la forme :

$$\phi(x) = \begin{cases} \phi_I(x) = A\,e^{qx} + A^{'}\,e^{-qx} & : (I) \\ \phi_{II}(x) = B\,e^{qx} + B^{'}\,e^{-qx} & : (II) \\ \phi_{III}(x) = C\,e^{-qx} + C^{'}\,e^{qx} & : (III) \end{cases}$$

Conditions asymptotiques : l'état etant lié, la fonction $\phi(x)$ doit rester bornée quand x tend vers $\pm\infty$; puisque $A^{'}\,e^{-qx}$ et $C^{'}\,e^{-qx}$ divergent respectivement vers $-\infty$ et $+\infty$, il faut donc que $A^{'} = C^{'} = 0$. D'où :

$$\phi(x) = \begin{cases} \phi_I(x) = A\,e^{qx} & : (I) \\ \phi_{II}(x) = B\,e^{qx} + B^{'}\,e^{-qx} & : (II) \\ \phi_{III}(x) = C\,e^{-qx} & : (III) \end{cases}$$

2) **Fonctions d'onde symétriques $\phi_S(x)$ et antisymétriques $\phi_A(x)$:**
Le potentiel étant symétrique par rapport à l'origine, les états liés sont **symétriques** $\phi_S(x)$ ou antisymétriques $\phi_A(x)$.

$a)-$ **Fonctions d'onde symétriques $\phi_S(x)$**

$$\begin{cases} \phi_I(-x) = \phi_{III}(x) \\ \phi_{II}(-x) = \phi_{II}(x) \end{cases} \Longrightarrow \begin{cases} A\,e^{-qx} = C\,e^{-qx} & \forall|x| > a/2 \\ B\,e^{-qx} + B^{'}\,e^{+qx} = B\,e^{qx} + B^{'}\,e^{-qx} & \forall|x| < a/2 \end{cases}$$

$$\Longrightarrow \begin{cases} A = C & \forall|x| > a/2 \\ (B - B^{'})\,(e^{-qx} - e^{+qx}) = 0 & \forall|x| < a/2 \end{cases}$$

$$\Longrightarrow \begin{cases} A = C & \forall|x| > a/2 \\ B = B^{'} & \forall|x| < a/2 \end{cases}$$

d'où :

$$\phi_S(x) = \begin{cases} A\,e^{qx} & : (I) \\ B\,\cosh(qx) & : (II) \\ A\,e^{-qx} & : (III) \end{cases}$$

$b)-$ **Fonctions d'onde antisymétriques $\phi_A(x)$**

$$\begin{cases} \phi_I(-x) = -\phi_{III}(x) \\ \phi_{II}(-x) = -\phi_{II}(x) \end{cases} \Longrightarrow \begin{cases} A\,e^{-qx} = -C\,e^{-qx} & \forall|x| > a/2 \\ B\,e^{-qx} + B^{'}\,e^{+qx} = -B\,e^{qx} - B^{'}\,e^{-qx} & \forall|x| < a/2 \end{cases}$$

$$\Longrightarrow \begin{cases} A = -C & \forall|x| > a/2 \\ (B + B^{'})\,(e^{-qx} - e^{+qx}) = 0 & \forall|x| < a/2 \end{cases}$$

$$\Longrightarrow \begin{cases} A = -C & \forall|x| > a/2 \\ B = -B^{'} & \forall|x| < a/2 \end{cases}$$

d'où :

$$\phi_A(x) = \begin{cases} A\, e^{qx} & : (I) \\ B\, \sinh(qx) & : (II) \\ -\, A\, e^{-qx} & : (III) \end{cases}$$

3) **Discontinuité de la dérivée première $\phi'(x)$ au point $x = a/2$**

Montrons que la dérivée premiere $\phi'(x)$ subit une discontinuité aux points $x = \pm\frac{a}{2}$. Pour ce faire, et comme le potentiel est symétrique par rapport à l'origine, il suffit de montrer cette propriete au seul point $x = +\frac{a}{2}$. Au voisinage de $x = +\frac{a}{2}$, c'est-à-dire au voisinage du puits de droite, l'équation (1) devient :

$$\phi''(x) + \frac{2\,m}{\hbar^2}[E + \alpha\delta(x - \frac{a}{2})]\phi(x) = 0 \tag{4}$$

Considérons alors un nombre réel ϵ très petit et intégrons l'équation (3) entre $\frac{a}{2} - \epsilon$ et $\frac{a}{2} + \epsilon$, ensuite faisons tendre $\epsilon \to 0$.

$$\lim_{\epsilon\to 0}\int_{\frac{a}{2}-\epsilon}^{\frac{a}{2}+\epsilon} \phi''(x)dx = -\frac{2\,m\,\alpha}{\hbar^2}\lim_{\epsilon\to 0}\int_{\frac{a}{2}-\epsilon}^{\frac{a}{2}+\epsilon} \delta(x - \frac{a}{2})]\phi(x)dx - \frac{2\,m}{\hbar^2}E\lim_{\epsilon\to 0}\int_{\frac{a}{2}-\epsilon}^{\frac{a}{2}+\epsilon} \phi(x)dx$$

La fonction $\phi(x)$ reste bornée sur l'intervalle $[\frac{a}{2} - \epsilon, \frac{a}{2} + \epsilon]$, donc :

$$\lim_{\epsilon\to 0}\int_{\frac{a}{2}-\epsilon}^{\frac{a}{2}+\epsilon} \phi(x)dx = 0$$

Et on a :

$$\phi(\frac{a}{2}) = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - \frac{a}{2})]\phi(x)dx = \underbrace{\int_{-\infty}^{\frac{a}{2}-\epsilon} \delta(x - \frac{a}{2})]\phi(x)dx}_{=0} + \int_{\frac{a}{2}-\epsilon}^{\frac{a}{2}+\epsilon} \delta(x - \frac{a}{2})]\phi(x)dx + \underbrace{\int_{\frac{a}{2}+\epsilon}^{+\infty} \delta(x - \frac{a}{2})]\phi(x)dx}_{=0}$$

Par conséquent, à la limite $\epsilon \to 0$, on a :

$$\lim_{\epsilon\to 0}\left[\phi'(\frac{a}{2} + \epsilon) - \phi'(\frac{a}{2} - \epsilon)\right] = -\frac{2\,m\,\alpha}{\hbar^2}\phi(\frac{a}{2}) = -\mu\,\phi\left(\frac{a}{2}\right)$$

c'est-à-dire

$$\phi'\left(\frac{a^+}{2}\right) - \phi'\left(\frac{a^-}{2}\right) = \beta\,\phi\left(\frac{a}{2}\right) \tag{5}$$

où $\beta = -\mu$.

Cette relation traduit la discontinuité de $\phi'(x)$ au point $x = a/2$.

4) **Les équations donnant les énergies possibles de l'électron**

Les deux conditions de raccordement au point $x = a/2$ sont :

$$\begin{cases} \phi_{II}(\frac{a}{2}) = \phi_{III}(\frac{a}{2}) \\ \phi'_{III}\left(\frac{a}{2}\right) - \phi'_{II}\left(\frac{a}{2}\right) = -\mu\,\phi\left(\frac{a}{2}\right) \end{cases}$$

a) Cas symétrique

$$\begin{cases} B\cosh\left(\frac{qa}{2}\right) = A\,e^{-\frac{qa}{2}} \\ q\,A\,e^{-\frac{qa}{2}} + q\,B\sinh\left(\frac{qa}{2}\right) = \mu\,B\cosh\left(\frac{qa}{2}\right) \end{cases} \implies q\,B\cosh\left(\frac{qa}{2}\right) + q\,B\sinh\left(\frac{qa}{2}\right) = \mu\,B\cosh\left(\frac{qa}{2}\right)$$

$$\implies q\left[\cosh\left(\frac{qa}{2}\right) + \sinh\left(\frac{qa}{2}\right)\right] = \mu\cosh\left(\frac{qa}{2}\right)$$

$$\implies 2\,q\,e^{\frac{qa}{2}} = \mu\left(e^{\frac{qa}{2}} + e^{-\frac{qa}{2}}\right)$$

$$\implies \left(\frac{2\,q}{\mu} - 1\right)e^{\frac{qa}{2}} = e^{-\frac{qa}{2}}$$

d'où

$$\boxed{e^{-qa} = \frac{2\,q}{\mu} - 1 = f_S(q)} \tag{6}$$

a) Cas antisymétrique

$$\begin{cases} B\sinh\left(\frac{qa}{2}\right) = -A\,e^{-\frac{qa}{2}} \\ q\,A\,e^{-\frac{qa}{2}} - q\,B\cosh\left(\frac{qa}{2}\right) = -\mu\,B\sinh\left(\frac{qa}{2}\right) \end{cases} \implies q\,B\left[\cosh\left(\frac{qa}{2}\right) + \sinh\left(\frac{qa}{2}\right)\right] = \mu\,B\sinh\left(\frac{qa}{2}\right)$$

$$\implies 2\,q\,e^{\frac{qa}{2}} = \mu\left(e^{\frac{qa}{2}} - e^{-\frac{qa}{2}}\right)$$

$$\implies \left(\frac{2\,q}{\mu} - 1\right)e^{\frac{qa}{2}} = -e^{-\frac{qa}{2}}$$

d'où

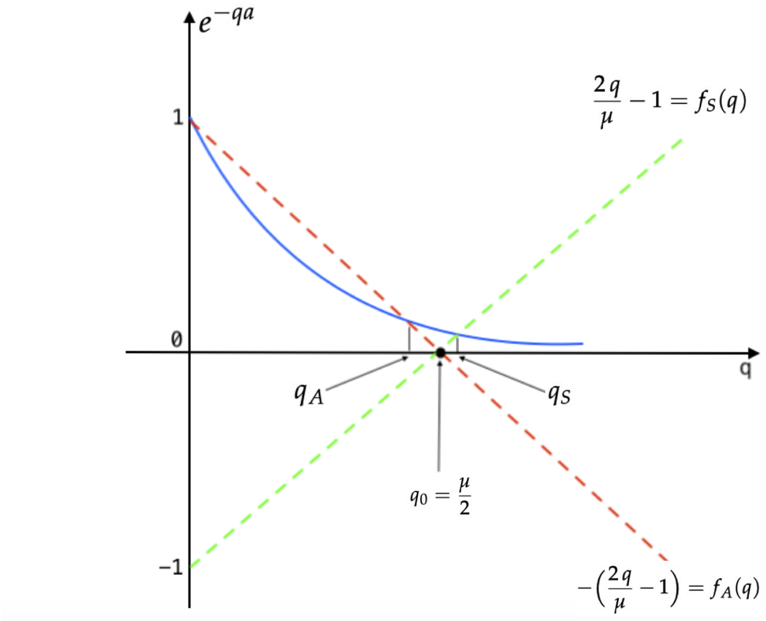
$$\boxed{e^{-qa} = -\left(\frac{2\,q}{\mu} - 1\right) = f_A(q)} \tag{7}$$

les deux relations (6) et (7) peuvent s'écrire comme suit :

$$e^{-qa} = \pm(\gamma q - 1)$$

où γ est une constante **qui s'écrit** : $\gamma = 2/\mu$.

a) **Résolution graphique de cette équation**



b) **Les deux solutions possibles q_S et q_A**

LEs solutions graphiques des équations $e^{-qa} = f_{A,S}(q)$ sont données par les deux points d'intersection de la courbe représentant la fonction e^{-qa} avec chacune des deux droites $f_S(q) = \frac{2q}{\mu} - 1$ et $f_A(q) = -\frac{2q}{\mu} + 1$.

Soient q_S et q_A les abscisses de ces deux points d'intersection. Nous constatons que q_S et q_A se situent de part et d'autre d'une certaine valeur q_0 qui représente le point d'intersection de deux droite $f_S(q)$ et $f_A(q)$:

$$\frac{2\,q_0}{\mu} - 1 = -\frac{2\,q_0}{\mu} + 1 \implies q_0 = \frac{\mu}{2}$$

Ainsi

$$q_A < q_0 < q_S \tag{8}$$

c) **Déduction**

Prenons le carré de l'inégalité (8), puis multiplions-la par le facteur négatif $-\frac{\hbar^2}{2m}$:

$$q_A^2 < q_0^2 = \frac{\mu^2}{4} < q_S^2 \implies -\frac{\hbar^2}{2m}q_A^2 > -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mu^2}{4} > -\frac{\hbar^2}{2m}q_S^2$$

Or

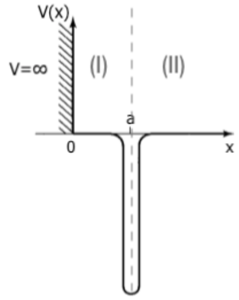
$$\frac{\hbar^2}{8m}\mu^2 = \frac{\hbar^2}{8m}\frac{4m^2\alpha^2}{\hbar^4} = \frac{m\alpha^2}{2\hbar^2} = E_L$$

Alors :

$$-\frac{\hbar^2\,q_S^2}{2m} = E_S < -E_L < -\frac{\hbar^2\,q_A^2}{2m} = E_A \implies \boxed{E_S < -E_L < E_A}$$

Solution 5: *Puits de potentiel infini+ delta (facultatif)*

Considérons une particule de masse m et d'énergie $E < 0$, astreint à se déplacer sur l'axe ox de $x = 0$ à l'infini, dans le potentiel $V(x)$ de la forme (voir figure ci-contre)



$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{x<0} \\ -\alpha\delta(x-a) & \text{x>0} \quad \text{où } \alpha \text{ est positive} \end{cases}$$

1) **L'équation de Schrödinger pour ce système dans les deux régions :**
En général, telle équation s'écrit :

$$\psi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(x)]\psi(x) = 0$$

soit donc

$$\psi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2}[E + \alpha\delta(x-a)]\psi(x) = 0 \qquad (1)$$

dans les deux régions (I) et (II) où $x \neq a$, le potentiel est nul et la particule est libre dans ces régions. L'équation (1) s'écrit alors

$$\psi''(x) + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) = 0$$

comme $E < 0$, on pose $k^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2} > 0$, alors :

$$\psi''(x) - k^2\psi(x) = 0 \qquad (2)$$

La forme générale de la fonction d'onde $\psi(x)$ est alors :

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_I(x) = A\,e^{kx} + B\,e^{-kx} & : \quad 0 < x < a \\ \psi_{II}(x) = C\,e^{-kx} + D\,e^{kx} & : \quad x > a \end{cases}$$

Limite asymptotique $x \to +\infty$:
Puisque les états liés sont des états normalisables, alors la fonction $\psi(x)$ doit rester bornée quand x tend vers $+\infty$; l'exponentielle divergente $D\,e^{kx}$ doit alors être éliminée, c'est-à-dire on doit prendre $D = 0$. D'où :

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_I(x) = A\,e^{kx} + B\,e^{-kx} & : \quad 0 < x < a \\ \psi_{II}(x) = C\,e^{-kx} & : \quad x > a \end{cases}$$

2) **La valeur de $\psi(0)$**
Dans la région $x < 0$ le potentiel $V \to +\infty$, donc la fonction d'onde dans cette région est nulle :

$$\psi(x) = 0 \quad \text{pour} \quad x < 0$$

Comme la fonction d'onde est continue au point $x = 0$, alors :

$$\psi(0) = 0$$

Par conséquent : $\psi_I(0) = A + B = 0 \quad \Longrightarrow \quad A = -B$, donc **l'expression de** $\psi(x)$:

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_I(x) = 2A\sinh(kx) & : \quad 0 < x < a \\ \psi_{II}(x) = C\,e^{-kx} & : \quad x > a \end{cases}$$

3) **La condition satisfaite par $\psi(x)$ au point $x=a$.**
La fonction d'onde est continue au point $x=a$: $\psi_I(a)=\psi_{II}(a)$, donc :

$$2A\sinh(k\,a)=C\,e^{-k\,a}$$

4) **La discontinuité de la dérivée première $\psi'(x)$ de la fonction d'onde au point $x=a$**
Reprenons l'èquation (1) précédente

$$\psi''(x)+\frac{2\,m}{\hbar^2}[E+\alpha\delta(x-a)]\psi(x)=0 \qquad (1)$$

Considérons un nombre ϵ très petit et intégrons cette équation entre $a-\epsilon$ et $a+\epsilon$, ensuite faisons tendre ϵ vers 0 :

$$\lim_{\epsilon\to 0}\int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon}\psi''(x)dx=-\frac{2\,m\,\alpha}{\hbar^2}\lim_{\epsilon\to 0}\int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon}\delta(x-a)]\psi(x)dx-\frac{2\,m}{\hbar^2}E\lim_{\epsilon\to 0}\int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon}\psi(x)dx$$

La fonction $\psi(x)$ reste bornée sur l'intervalle $[a-\epsilon,a+\epsilon]$, donc :

$$\lim_{\epsilon\to 0}\int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon}\psi(x)dx=0$$

Et on a :

$$\psi(a)=\int_{-\infty}^{+\infty}\delta(x-a)]\psi(x)dx=\underbrace{\int_{-\infty}^{a-\epsilon}\delta(x-a)]\psi(x)dx}_{=0}+\int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon}\delta(x-a)]\psi(x)dx+\underbrace{\int_{a+\epsilon}^{+\infty}\delta(x-a)]\psi(x)dx}_{=0}$$

Par conséquent, à la limite $\epsilon\to 0$, on a :

$$\lim_{\epsilon\to 0}\left[\psi'(a+\epsilon)-\psi'(a-\epsilon)\right]=-\frac{2\,m\,\alpha}{\hbar^2}\psi(a)$$

c'est-à-dire

$$\psi'_{II}(a)-\psi'_I(a)=k_0\psi(a)\quad\text{avec}\quad k_0=-\frac{2\,m\,\alpha}{\hbar^2}\qquad (2)$$

Cette relation traduit la discontinuité de ψ' au point $x=a$.

5) **Déduction : l'équation de quantification donnant les valeurs possibles de k**
L'équation (2) s'écrit en tenant compte des expressions de $\psi_I(x)$ et $\psi_{II}(x)$

$$-k\,\underbrace{C\,e^{-k\,a}}_{=2\,A\sinh(k\,a)}\;-2kA\cosh(k\,a)=-2k_0A\sinh(k\,a)\implies k\sinh(k\,a)+k\cosh(k\,a)=k_0\sinh(k\,a)$$

donc

$\boxed{k\cosh(k\,a)=(-k+k_0)\sinh(k\,a)}$ d'où l'équation de quantification de k : $\boxed{k\coth(k\,a)=-k+k_0}$

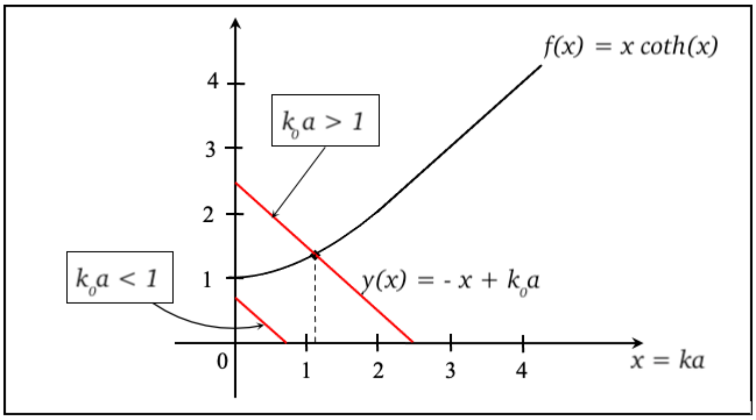
Ou bien en multipliant les deux membres par a :

$$ka\coth(k\,a)=-ka+k_0a\;;\;x=ka$$

6) **Résolution graphique de l'équation de quantification**
On reporte sur le même graphe les fonctions :

$$f(ka)=ka\coth(k\,a)\quad\text{et}\quad y(ka)=-ka+k_0a$$

Les points d'intersection de la courbe $\mathcal{C}_f$ de $f(ka) = ka\coth(k\,a)$ avec la droite $y(ka) = -ka + k_0 a$ donne les valeurs possibles du vecteur d'onde k.

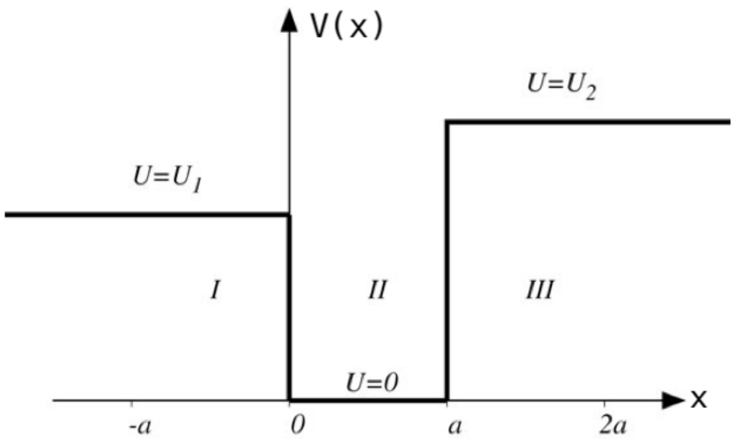


La condition sur α exprimant l'existence d'un état lié de la particule.
La résolution graphique montre qu'il y a une et une seule solution si $k_0\,a > 1$ et aucune solution si $k_0\,a < 1$. Il y a donc un seul état lié si :

$$k_0\,a = \frac{2\,m\,\alpha\,a}{\hbar^2} > 1. \quad \text{Soit donc} \quad \boxed{\alpha > \frac{\hbar^2}{2\,m\,a}}$$

Solution 6: *États liés (facultatif)*

Une particule de masse m se déplace dans un puits de potentiel asymétrique unidimensionnel, $V(x)$, donné par l'allure suivante



L'objet de cette exercice est d'établir les conditions pour avoir un état lié. Pour ce faire, on suppose que $0 < E < U_1 < U_2$ et on cherche la résolution de l'équation de Schrödinger.
L'équation de Schrödinger, de manière globale, s'écrit :

$$\phi''(x) + \frac{2\,m}{\hbar^2}[E - V(x)]\phi(x) = 0 \tag{1}$$

dans les trois régions : $x \leq 0$ (région I), $0 < x \leq a$ (région II) et $x \geq a$ (région III), cette équation s'écrit :

$$\phi_1''(x) + \frac{2\,m}{\hbar^2}[E-U_1]\phi_1(x) = 0 \qquad (k_1^2 = \frac{2\,m}{\hbar^2}[U_1-E] > 0) \qquad \Longrightarrow \phi_1''(x) - k_1^2\phi_1(x) = 0$$
$$\phi_2''(x) + \frac{2\,m}{\hbar^2}[E-0]\phi_2(x) = 0 \qquad (\rho^2 = \frac{2\,m}{\hbar^2}E > 0) \qquad \Longrightarrow \phi_2''(x) + \rho^2\,U_2\phi_2(x) = 0$$
$$\phi_3''(x) + \frac{2\,m}{\hbar^2}[E-U_2]\phi_3(x) = 0 \qquad (k_2^2 = \frac{2\,m}{\hbar^2}[U_2-E] > 0) \qquad \Longrightarrow \phi_3''(x) - k_2^2\phi_3(x) = 0$$

Dans la région (I) :
la fonction d'onde s'écrit

$$\phi_1(x) = A\,e^{+k_1\,x} + A'\,e^{-k_1\,x} = A\,e^{+k_1\,x} \quad (\text{car } \phi_1 \text{ doit être bornée à } -\infty)$$

Dans la région (II) :
la fonction d'onde s'écrit

$$\phi_2(x) = C_1\,e^{+i\rho\,x} + C_2\,e^{-i\rho\,x} = C\sin(\rho\,x+\delta)$$

Dans la région (III) :
la fonction d'onde s'écrit

$$\phi_3(x) = B'\,e^{+k_2\,x} + B\,e^{-k_2\,x} = B\,e^{-k_2\,x} \quad (\text{car } \phi_3 \text{ doit être bornée à } +\infty)$$

En imposant les conditions de continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée en $x=0$ et $x=a$. On obtient :
au point $x=0$

$$\begin{cases}\phi_1(x=0) = \phi_2(x=0)\\ \phi_1'(x=0) = \phi_2'(x=0)\end{cases} \Longleftrightarrow \begin{cases}A = C\sin(\delta)\\ A\,k_1 = C\rho\cos(\delta)\end{cases}$$

au point $x=a$

$$\begin{cases}\phi_2(x=a) = \phi_3(x=a)\\ \phi_2'(x=a) = \phi_3'(x=a)\end{cases} \Longleftrightarrow \begin{cases}C\sin(\rho\,a+\delta) = B\,e^{-k_2\,a}\\ C\rho\cos(\rho\,a+\delta) = -B\,k_2\,e^{-k_2\,a}\end{cases}$$

De ces équations on tire que

$$\tan(\delta) = \frac{\rho}{k_1}$$
$$\tan(\rho a+\delta) = -\frac{\rho}{k_2}$$

ce qui implique que

$$\delta = \arctan\left(\frac{\rho}{k_1}\right) + n_1\pi$$
$$\rho a+\delta = -\arctan\left(\frac{\rho}{k_2}\right) + n_2\pi$$

avec n_1 et n_2 sont des entiers. En utilisant la relation

$$\arctan(x) = \arcsin\left(\frac{x}{\sqrt{1+x^2}}\right)$$

aussi le fait que

$$\frac{\frac{\rho}{k_1}}{1+(\frac{\rho}{k_1})^2} = \sqrt{\frac{E}{U_1}} = \frac{\rho\hbar}{\sqrt{2\,m\,U_1}} \quad \text{et} \quad \frac{\frac{\rho}{k_2}}{1+(\frac{\rho}{k_2})^2} = \sqrt{\frac{E}{U_2}} = \frac{\rho\hbar}{\sqrt{2\,m\,U_2}}$$

on obtient :

$$\delta = \arcsin\left(\frac{\rho\hbar}{\sqrt{2\,m\,U_1}}\right) + n_1\pi$$

$$\rho a + \delta = -\arcsin\left(\frac{\rho\hbar}{\sqrt{2\,m\,U_2}}\right) + n_2\pi$$

la soustraction de ces deux équations donne comme résultat ($n = n_2 - n_1$) :

$$n\pi - \rho a = \arcsin\left(\frac{\rho\hbar}{\sqrt{2\,m\,U_1}}\right) + \arcsin\left(\frac{\rho\hbar}{\sqrt{2\,m\,U_2}}\right)$$

Si on définit encore $x = \rho\hbar/\sqrt{2\,m\,U_1} = \rho/b_0 = \sqrt{E/U_1}$, l'équation précédente s'écrit :

$$n\pi - ab_0 x = \arcsin(x) + \arcsin\left(x\sqrt{\frac{U_1}{U_2}}\right) = \arcsin(x) + \arcsin(x\sin\gamma)$$

où on a définit $\sin\gamma = \sqrt{U_1/U_2}$ $(0 \leq \gamma \leq \pi/2)$ puisque on sait que $U_1 < U_2$ et que $0 \leq \sqrt{U_1/U_2} \leq 1$. De plus de ça on définit :

$$y_n(x) = n\pi - ab_0 x$$

comme ça l'équation finale devient :

$$y_n(x) = y(x) = \arcsin(x) + \arcsin(x\sin\gamma)$$

Alors pour avoir des états liés d'énergie discrète, la condition $0 \leq E \leq U_1$ est indispensable.
En outre, quand E varie dans $[0, U_1] \implies 0 \leq x \leq 1$ et $0 \leq \arcsin(x) \leq \pi/2$.
Aussi, pour $0 \leq x \leq 1$, ça se voit que $y(x)$ est une fonction monotone croissante qui possède la propriété :

$$0 \leq y(x) = \arcsin(x) + \arcsin(x\sin\gamma) \leq \frac{\pi}{2} + \gamma$$

Pour les fonctions, $y_n(x) = n\pi - ab_0 x$, qui sont des fonctions monotones croissantes. Elles possèdent la propriété

$$n\pi \geq y(x) = y_n(x) = n\pi - ab_0 x \geq n\pi - ab_0$$

Les solutions sont alors données par l'intersection des deux courbes $y_n(x)$ et $y(x)$, soit la condition $y_n(x) = y(x)$.
À titre d'exemple, on trace le cas correspond à une valeur fixe de $n = 1$ (positif), en raison de la propriété de y(x), la condition qu'il y ait au moins une intersection est

$$n\pi - ab_0 \leq \frac{\pi}{2} + \gamma$$

cela implique que la valeur minimale de $y_n(x)$ est inférieure à la valeur maximale de $y(x)$. En prenant en plus $\gamma = \frac{\pi}{10}$ et $ab_0 = 2$, la courbe qui traduit la condition corresponde à l'existence d'un état lié pour une particule de masse m dans le puits de potentiel asymétrique de départ est représentée ci-dessous.