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

Exercice 1: *Particule dans un puits semi-infini*

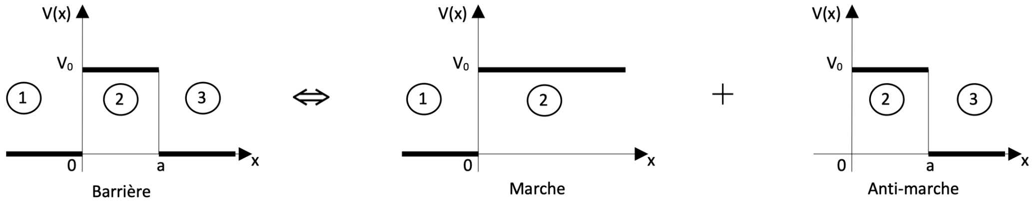
Une particule de masse m et d'énergie E est soumise à un potentiel $U(x)$ semi-infini tel que :

$$U(x) = \begin{cases} +\infty & \text{pour} \quad x < 0, \\ 0 & \text{pour} \quad 0 \leq x \leq a \quad \text{(région 1)}, \\ U_0 & \text{pour} \quad x > a \quad \text{(région 2)}. \end{cases}$$

1) Premièrement
   a) Tracer l'allure de $U(x)$; U_0 étant positif.
   b) Écrire l'équation de Schrödinger indépendante du temps dans chacune des régions. On désigne par $\phi_i(x)$ la fonction d'onde dans la région i; (i=1,2).
2) Dans la suite, on considère le cas où $0 < E < U_0$, correspondant aux états liés, que l'on numérote avec un entier $n \in N^*$;
   a) Donner la solution générale de $\phi_1(x)$ et montrer qu'elle peut s'écrire :
   $$\phi_1(x) = \text{A}.\sin(k.x)$$
   On précisera l'expression du vecteur d'onde k. A étant une constante.
   b) Justifier que dans la région 2, $\phi_2(x)$ décrit une "onde" évanescente de la forme :
   $$\phi_2(x) = \text{B}.\exp(-q.x)$$
   Préciser l'expression de q. B étant une constante.
   c) Utiliser les conditions de continuité au point $x = a$ et donner la relation liant k et q.
   d) En raisonnant graphiquement, répondre aux questions suivantes :
      1. Y a-t-il toujours des solutions en k ? Commenter physiquement.
      2. Quelle est la valeur minimale de U_0, U_0^{min}, telle qu'il existe au moins un état lié ?
      3. Quelle est la condition sur k_0 pour qu'il y ait N_b états liés ?
   e) Dans le cas ou $U_0 \gg \hbar^2/(ma^2)$, comment varie la difference $E_{n+1} - E_n$ de deux états de basse énergie ?
3) Densité de probabilité
   a) Calculer la densité de probabilité, que l'on note $\rho(x)$, de trouver la particule dans la région 2.
   b) Déterminer la profondeur de pénétration x_0 de la particule dans cette région. x_0 est telle que $\rho(x)$ est réduite d'un facteur e (base logarithmique) par rapport à sa valeur au point a.
4) On fait tendre maintenant U_0 vers l'infini. Que deviennent $\rho(x)$ et la profondeur x_0.

Exercice 2: *Facteur de transmission d'une barrière de potentiel*

Une particule ponctuelle de masse m et d'énergie $E > 0$. Au cours de son déplacement le long de l'axe Ox, elle rencontre une barrière de potentiel. On se propose de calculer, de manière approximative, le facteur de transmission de cette barrière de potentiel. Pour cela, on suppose que la barrière est la superposition d'une marche et d'une anti-marche de potentiel.



A)- Marche de potentiel

Le potentiel de la particule est tel que :

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{pour} \quad x<0 \\ V_0 > E & \text{pour} \quad x>0 \end{cases}$$

1) Ecrire l'équation de Schrödinger stationnaire dans les deux régions de l'espace.
2) Pour $x \leq 0$, la fonction d'onde $\phi_1(x)$ est la somme de deux ondes de vecteur d'onde $\vec{k}$, l'une d'amplitude A_1 se propageant dans le sens des x croissants, l'autre d'amplitude B_1 se propageant dans le sens inverse. Écrire $\phi_1(x)$ et donner l'expression du module du vecteur d'onde $\vec{k}$ en fonction des données du problème.
3) Pour $x \geq 0$, justifier que la fonction d'onde $\phi_2(x)$ est de la forme $A_2\, e^{-\alpha x}$, donner l'expression de α en fonction des données du problème.
4) Calculer numériquement k et α pour $E = 1\, eV$; $V_0 = 5\, E/4$; $m = 9,1.10^{-31}\, kg$; $\hbar = 1,05.10^{-34}\, J.s$ et $e = 1,6.10^{-19}\, C$.
5) En imposant à la fonction d'onde les relations de passage en $x = 0$, calculer les rapports :

$$\frac{B_1}{A_1}, \quad \frac{A_2}{A_1} \quad \text{puis} \quad \left|\frac{B_1}{A_1}\right|^2 \quad \text{et} \quad \left|\frac{A_2}{A_1}\right|^2$$

Quelle est la signification physique de $|B_1/A_1|^2$.
$|A_2/A_1|^2$ est-il nul ?
Comment interpréter les valeurs obtenues de $|B_1/A_1|^2$ et $|A_2/A_1|^2$.

B)- Anti-marche de potentiel

Le potentiel de la particule est maintenant défini par :

$$V(x) = \begin{cases} V_0 > E & \text{pour} \quad 0<x<a \\ 0 & \text{pour} \quad x>a \end{cases}$$

1) Justifier que la fonction d'onde est de la forme :

$$\phi_2(x) = A_2\, e^{-\alpha x} + B_2\, e^{+\alpha x} \text{ pour } \quad 0 < x < a \quad \text{et} \quad \phi_3(x) = A_3\, e^{+ikx} \quad \text{pour} \quad x > a$$

2) Calculer les rapports B_2/A_2 et A_3/A_2 puis $|A_3/A_2|^2$ en fonction de a, k et α.
3) On se place dans le cas où $\alpha a \gg 1$, vérifier que le rapport B_2/A_2 est très inférieur à 1. (On pourra donc négliger le terme $B_2\, e^{+\alpha x}$ en $x = 0$).

C)- Barrière de potentiel

Le potentiel de la particule est :

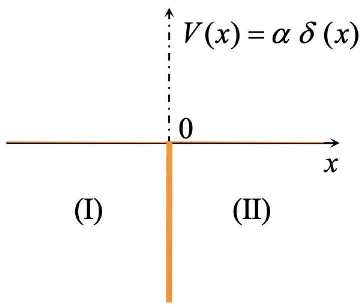
$$V(x) = \begin{cases} V_0 > E & \text{pour} \quad 0<x<a \\ 0 & \text{ailleurs} \end{cases}$$

Les expressions de la fonction d'ondes dans les 3 régions sont celles obtenues dans les parties **A)** et **B)**, on se place dans le cas où $\alpha\, a \gg 1$ pour négliger le terme $B_2\, e^{+\alpha\, x}$. Les résultats des questions de **A)** et **B)** peuvent être utilisés.

1) Exprimer le rapport $T = |A_3/A_1|^2$ en fonction de a, k et α, donner sa signification physique.
2) Calculer numériquement T avec les données de la question **A)**-4 et pour $a = 5\,\text{Å}$.

Exercice 3: *Transmission d'un puits de potentiel 'delta'*

Une particule de masse m et d'énergie E, issue d'une source située vers $-\infty$, se déplace sur l'axe $x'x$ où elle est soumise au potentiel $V(x) = \alpha\delta(x)$, α est une constante négative et $\delta(x)$ est la fonction de Dirac.



1) Équation de Schrödinger :
   a) Écrire l'équation de Schrödinger indépendante du temps satisfaite par la fonction d'onde $\psi(x)$ de la particule.
   b) Résoudre cette équation dans les deux régions (I) et (II) correspondant respectivement à $x < 0$ et $x > 0$. On posera $k^2 = 2\,m\,E/\hbar^2$.
2) Exprimer la discontinuité de la dérivée première $\psi'(x)$ de la fonction d'onde au point $x = 0$ en fonction de m, α et $\psi(0)$. On donne :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\delta(x - x_0)dx = f(x_0)$$

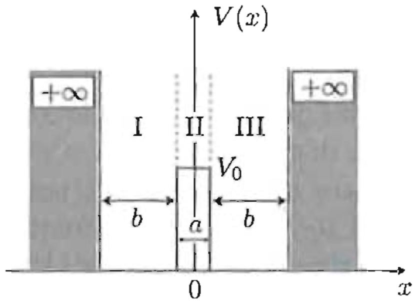
3) Écrire les conditions de raccordement au point $x = 0$ et exprimer le rapport de l'amplitude transmise dans la région (II) et de l'amplitude incidente dans la région (I).
4) Le courant de probabilité qui caractérise le flux de particules est défini, à 1 dimension, par :

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

Établir les expressions des courants de probabilité incident $\vec{j_i}$ et transmis $\vec{j_t}$.
5) Calculer le coefficient de transmission $T(E) = |\vec{j_t}|/|\vec{j_i}|$ du puits 'delta' défini par le rapport entre les courants transmis et incidents en fonction de m, α, $\hbar$ et E.
6) Représenter graphiquement le coefficient de transmission $T(E)$ en fonction de E.

Exercice 4: *Effet tunnel dans un double puits carré*

Une particule de masse m est située dans le puits représenté sur la figure ci-dessous.



Nous étudierons par la suite une solution stationnaire de l'équation de Schrödingerd'énergie E telle que $0 < E < V_0$ et on pose :

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \qquad V_0 - E = \frac{\hbar^2 q^2}{2m}$$

1) Équations aux valeurs propres :
   a) Écrire l'équation de Schrödinger pour ce système dans chaque région, et déduire l'expression de la fonction d'onde d'état stationnaire correspondante dans chaque région.
   b) Le potentiel étant **symétrique**, donner les fonctions d'onde paires $\psi_s(x)$ et impaires $\psi_a(x)$.
2) Conditions de raccordement :
   On s'intéresse par la suite aux cas des états paires $\psi_s(x)$, et on pose

$$v_0 \overset{\text{def}}{=} \frac{2\,m\,b^2}{\pi^2\,\hbar^2}\,V_0 \quad \text{et} \quad \eta \overset{\text{def}}{=} \frac{E}{V_0}$$

   a) Écrire les conditions de raccordement pour les états quantiques décrivant la particule aux points de discontinuité du potentiel.
   b) Déduire l'équation de quantification de l'énergie de la particule.
   c) Résoudre graphiquement cette relation qu'on représentera dans un même repère en fonction de η. Discuter
   d) Examiner notamment les deux cas $v_0 \gg 1$ et $v_0 \sim 1$. Commenter physiquement.
   e) Donner la condition pour qu'il y ait un seul état pair d'énergie inférieure à V_0.