Faculté
de physique et ingénierie
Université de Strasbourg

Université de Strasbourg

TD3 - Problèmes stationnaires à une dimension

Jean-Pascal Lavoine

Transcrit par
Pierre Guichard

L3 Semestre 5 2020

Exercice I.

1. Montrer que pour un système à une dimension, le spectre d'énergie des états liés n'est pas dégénéré. On rappelle que la fonction d'onde $\psi_n(x)$ associé à un état lié tend vers 0 à l'infini.

(Indication : On pourra raisonner par l'absurde en supposant qu'il existe $\psi_1(x)$ et $\psi_2(x)$, deux fonctions d'onde linéairement indépendantes associées à la même énergie E. En partant de l'équation de Schrödinger, on établira que $\psi_1'(x)\psi_2(x) = \psi_2'(x)\psi_1(x)$ et par une intégration supplémentaire on montrera qu'on aboutit à une contradiction).

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}\psi$$

Dans un premier temps on vas résoudre le problème aux valeurs propres :

$$\hat{H}\psi_n(x) = E_n\psi_n(x)$$

On peut très bien écrire

$$\psi(x,t) = \sum_n C_n(t)\psi_n(x)$$

On insère cette forme dans l'équation de Schrödinger :

$$\begin{aligned} i\hbar\sum_n \frac{\mathrm{d}C_n}{\mathrm{d}t}\psi_n(x) &= \sum_n C_n(t)\hat{H}\psi_n(x) \\ &= \sum_n C_n(t)E_n\psi_n(x) \end{aligned}$$

On a donc immédiatement

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}C_n}{\mathrm{d}t} = E_nC_n(t) \Rightarrow \frac{\mathrm{d}C_n}{\mathrm{d}t} = -\frac{i}{\hbar}E_nC_n(t)$$

D'où

$$C_n(t) = C_n(0)\exp^{-\frac{i}{\hbar}E_nt}$$

On peut alors écrire

$$\boxed{\psi(x,t) = \sum_n C_n(0)\exp^{-\frac{i}{\hbar}E_nt}\psi_n(x)}$$

On peut supposé qu'on prépare le système dans un état propre :

$$\psi(x,0) = \psi_m(x)$$

Ce qui veux dire que tout les $C_n(0)$ sont nulles excepté $C_m(0)$.

$$\psi(x,t) = \exp^{-\frac{i}{\hbar}E_m t}\, \psi_m(x)$$

C'est un état stationnaire.

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

Nous avons $\psi_1(x)$ et $\psi_2(x)$ associé à la même énergie E :

$$\begin{aligned}
-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi_1(x) + V(x)\psi_1(x) &= E\psi_1(x) \\
-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi_2(x) + V(x)\psi_2(x) &= E\psi_2(x)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\psi_1''(x) + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - V(x)\right)\psi_1(x) = 0 \\
\psi_2''(x) + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - V(x)\right)\psi_2(x) = 0
\end{aligned}$$

Et alors,

$$\psi_1''(x)\psi_2(x) - \psi_2''(x)\psi_1(x) = 0$$

Donc on remarque que cela est la derivée de la relation qu'on nous donne dans l'énoncé :

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(\psi_1'(x)\psi_2(x) - \psi_2'(x)\psi_1(x)\right) &= 0 \\
\left(\psi_1'(x)\psi_2(x) - \psi_2'(x)\psi_1(x)\right) &= \text{ constante}
\end{aligned}$$

On va supposé que quand on tend vers $\pm\infty$ ces quantité sont nulle, d'où cela montre que la constante est nulle.

$$\frac{\psi_1'(x)}{\psi_1(x)} = \frac{\psi_2'(x)}{\psi_2(x)}$$

On intègre,

$$\psi_1(x) = C\psi_2(x)$$

où C est une constante d'intégration.
Ce qui rentre en contradiction avec l'hypothèse de départ comme quoi $\psi_1(x)$ et $\psi_2(x)$ sont linéairement indépendant.

2. **On considère un système unidimensionnel dont l'énergie potentielle $V(x)$ est une fonction paire de x. Si $\psi(x)$ désigne la fonction d'onde associée à un état lié de ce système, montrer que $\psi(x)$ est de parité définie : elle est soit paire, soit impaire.**

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

D'après ce qu'on a fait dans la question 1. :

$$\psi(x) = C\psi(-x)$$

On posé $x = -x$ et inversement :

$$\psi(-x) = C\psi(x)$$

Ce qu'on remplace dans la première équation :

$$C[C\psi(x)] = C^2\psi(x)$$

Donc $C = \pm 1$.

Exercice II.

On considère une particule de masse m assujettie à se déplacer selon une direction Ox et dont l'énergie potentielle $V(x)$ est définie par

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

où a est une constante positive.

1. **Montrer que les solutions de l'équation de Schrödinger indépendante du temps sont données par**

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \quad n = 1, 2, 3.. & \text{pour } 0 \leq x \leq a \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

et les énergies associées s'écrivent

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

La fonction d'onde est toujours continue, et si le potentiel est borné sa dérivée aussi.

Dans la région I et la région III la fonction d'onde est nulle.

Région II :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi_{\mathrm{II}}(x) = E\psi_{\mathrm{II}}(x)$$

Alors,

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

- Si $E > 0 \qquad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

  $$\psi_{\mathrm{II}}(x) = A\exp^{ikx} + B\exp^{-ikx}$$

  Par continuité en 0 et en a :

  $$\begin{aligned} 0 &= A + B \Rightarrow A = -B \\ a &= A\exp^{ika} + B\exp^{-ika} \Rightarrow 2iA\sin(ka) \end{aligned}$$

  D'où

  $$\psi_{\mathrm{II}}(x) = 2iA\sin(kx)$$

  On doit avoir :

  $$ka = n\pi = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \Rightarrow E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

  Pour obtenir A on utilise la condition de normalisation :

  $$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 \mathrm{d}x = 1$$

  On pose $C = 2iA$:

  $$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 \mathrm{d}x = |C|^2 \int_0^a \sin^2(kx)\mathrm{d}x$$

  On linéarise le sinus et on obtient :

  $$C = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

  D'où

  $$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin kx \qquad 0 \leq x \leq a$$

  et 0 ailleurs.

- Si $E < 0$

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

on pose $\rho^2 = \frac{2m}{\hbar^2}|E|$

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

$$\psi(x) = A\exp^{\rho x} + B\exp^{-\rho x}$$

$$\begin{aligned} 0 &= A + B \Rightarrow A = -B \\ 0 &= A\exp^{\rho a} + B\exp^{-\rho a} \Rightarrow 2A\sinh(\rho a) = 0 \end{aligned}$$

Si $\rho = 0$ ça fonctionne.
Donc il n'y a pas de solution autre que la solution triviale $\rho = 0 \Leftrightarrow E = 0$.

2. Montrer que $\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m(x)^\star\psi_n(x)\mathrm{d}x = \delta_{m,n}$ où $\delta_{m,n}$ est le symbole de Kronecker.

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m(x)^\star\psi_n(x)\mathrm{d}x &= \int_0^a \psi_m^\star(x)\psi_n(x)\mathrm{d}x \\ &= \int_0^a \frac{2}{a}\sin\Big(\frac{m\pi x}{a}\Big)\sin\Big(\frac{n\pi x}{a}\Big)\mathrm{d}x \\ &= \frac{1}{a}\int_0^a \Big\{\cos\Big(\frac{\pi x}{a}(m-n)\Big) - \cos\Big(\frac{\pi x}{a}(m+n)\Big)\Big\}\,\mathrm{d}x \end{aligned}$$

Deux cas :

- $m = n$:

$$\begin{aligned} \frac{1}{a}\int_0^a \Big\{\cos\Big(\frac{\pi x}{a}(m-n)\Big) - \cos\Big(\frac{\pi x}{a}(m+n)\Big)\Big\}\,\mathrm{d}x &= \frac{1}{a}\int_0^a \Big\{1 - \cos\Big(\frac{\pi x}{a}(2m)\Big)\Big\}\,\mathrm{d}x \\ &= \frac{1}{a}\left[x - a\frac{\sin\big(\frac{\pi x}{a}(2m)\big)}{\pi 2m}\right]_0^a \\ &= \frac{1}{a}\left(a - \frac{a\sin(2\pi m)}{2m\pi}\right) \\ &= 1 \end{aligned}$$

- $m \neq n$:

$$\begin{aligned} \frac{1}{a}\int_0^a \Big\{\cos\Big(\frac{\pi x}{a}(m-n)\Big) - \cos\Big(\frac{\pi x}{a}(m+n)\Big)\Big\}\,\mathrm{d}x &= \left[\frac{\sin\big(\frac{x\pi}{a}(m-n)\big)}{\pi(m-n)} - \frac{\sin\big(\frac{x\pi}{a}(m+n)\big)}{\pi(m+n)}\right]_0^a \\ &= \frac{\sin(\pi(m-n))}{\pi(m-n)} - \frac{\sin(\pi(m+n))}{\pi(m+n)} \\ &= 0 \end{aligned}$$

D'où on retrouve effectivement

$$\boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m(x)^\star \psi_n(x)\mathrm{d}x = \delta_{m,n}}$$

Dans un premier temps, on suppose qu'à $t = 0$, l'état de la particule est donné par $\Psi_1(x, 0) = \psi_1(x)$.

3. **Déterminer $\Psi_1(x, t)$, l'état du système à un instant $t > 0$.**

$$\Psi(x,t) = \exp^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t}\psi_1(x)$$

4. **Calculer dans l'état $\Psi_1(x, t)$, la valeur moyenne $\langle \hat{x} \rangle(t)$ de l'opérateur position à l'instant t.**

$$\begin{aligned}
\langle \hat{x} \rangle &= \langle \Psi_1(x,t) | \hat{x} \Psi_1(x,t) \rangle \\
&= \langle \Psi_1(x,t) | x \Psi_1(x,t) \rangle \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} x |\Psi_1(x,t)|^2 \mathrm{d}x \\
&= \int_0^a x |\psi_1(x)|^2 \mathrm{d}x \\
&= \int_0^a x \frac{2}{a} \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\mathrm{d}x \\
&= \int_0^a \frac{x}{a}\left[1 - \cos\left(\frac{2\pi n}{a}x\right)\right]\mathrm{d}x \\
&= \int_0^a \frac{x}{a}\mathrm{d}x - \int_0^a \frac{x}{a}\cos\left(\frac{2\pi n}{a}x\right)\mathrm{d}x \\
&= \left[\frac{x^2}{2a}\right]_0^a - \left[\frac{x}{2\pi n}\sin\left(\frac{2\pi n x}{a}\right)\right]_0^a + \int_0^a \sin\left(\frac{2\pi n x}{a}\right)\frac{1}{2\pi n}\mathrm{d}x \\
&= \frac{a}{2} + \frac{a}{4\pi^2 n^2}\left[\frac{-\cos\left(\frac{2\pi n x}{a}\right)}{2\pi n}\right]_0^a \\
&= \frac{a}{2} + \frac{a}{4\pi^2 n^2}[-1+1] \\
&= \frac{a}{2}
\end{aligned}$$

D'où

$$\boxed{\langle \hat{x} \rangle = \frac{a}{2}}$$

5. Calculer l'écart quadratique moyen $\Delta\hat{x}$.

$$\begin{aligned}
\langle \hat{x}^2 \rangle &= \left\langle \Psi_1(x,t) \middle| \hat{x}^2 \Psi_1(x,t) \right\rangle \\
&= \left\langle \Psi_1(x,t) \middle| x^2 \Psi_1(x,t) \right\rangle \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 |\Psi_1(x,t)|^2 \mathrm{d}x \\
&= \int_0^a x^2 |\psi_1(x)|^2 \mathrm{d}x \\
&= \int_0^a x^2 \frac{2}{a} \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \mathrm{d}x \\
&= \int_0^a \frac{x^2}{a} \left[1 - \cos\left(\frac{2\pi n}{a}x\right)\right] \mathrm{d}x \\
&= \int_0^a \frac{x^2}{a} \mathrm{d}x - \int_0^a \frac{x^2}{a} \cos\left(\frac{2\pi n}{a}x\right) \mathrm{d}x \\
&= \left[\frac{x^3}{3a}\right]_0^a - \int_0^a \frac{x^2}{a} \cos\left(\frac{2\pi n}{a}x\right) \mathrm{d}x \\
&= \frac{a^2}{3} - \int_0^a \frac{x^2}{a} \cos\left(\frac{2\pi n}{a}x\right) \mathrm{d}x
\end{aligned}$$

On pose $\eta = 2\pi n$:

$$\begin{aligned}
\int_0^a \frac{x^2}{a} \cos\left(\frac{2\pi n}{a}x\right) \mathrm{d}x &= \left[\frac{x^2}{\eta} \sin\left(\frac{\eta x}{a}\right)\right]_0^a - \int_0^a \frac{2x}{\eta} \sin\left(\frac{\eta x}{a}\right) \mathrm{d}x \\
&= -\left[\frac{-2xa}{\eta^2} \cos\left(\frac{\eta x}{a}\right)\right]_0^a + \int_0^a \frac{-2a}{\eta^2} \cos\left(\frac{\eta x}{a}\right) \mathrm{d}x \\
&= \frac{2a^2}{\eta^2} + \left[\frac{-2a^2}{\eta^3} \sin\left(\frac{\eta x}{a}\right)\right]_0^a \\
&= \frac{2a^2}{\eta^2} \\
&= \frac{a^2}{2\pi^2 n^2}
\end{aligned}$$

On pourras posé $n = 1$,
On trouve bien

$$\boxed{\langle x^2 \rangle = a^2 \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2\pi^2 n^2}\right)}$$

D'où,

$$\begin{aligned}
\Delta\hat{x} &= \sqrt{\langle\hat{x}^2\rangle - \langle\hat{x}\rangle^2} \\
&= \sqrt{a^2\left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2\pi^2}\right) - \frac{a^2}{4}} \\
&= \sqrt{a^2\left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2\pi^2} - \frac{1}{4}\right)} \\
&= \sqrt{a^2\left(\frac{1}{12} - \frac{1}{2\pi^2}\right)} \\
&= \boxed{a\sqrt{\left(\frac{1}{12} - \frac{1}{2\pi^2}\right)}}
\end{aligned}$$

6. Calculer la valeur moyenne $\langle\hat{p}\rangle(t)$ de l'opérateur impulsion à un instant $t > 0$.

D'après les relation d'Ehrenfest, on sait que :

$$\begin{aligned}
\langle\hat{p}\rangle &= m\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\hat{x}\rangle \\
&= 0
\end{aligned}$$

7. Déterminer $\langle\hat{T}\rangle(t)$ la valeur moyenne de l'énergie cinétique du système.

$$\begin{aligned}
\langle\hat{H}\rangle &= \langle\hat{T}\rangle + \langle\hat{U}\rangle \\
&= \langle\hat{T}\rangle \\
&= \left\langle\psi\middle|(\hat{T}\psi)\right\rangle \\
&= \langle\psi|(E_1\psi)\rangle \\
&= E_1\langle\psi|\psi\rangle \\
&= E_1
\end{aligned}$$

D'où

$$\boxed{\langle\hat{T}\rangle = E_1} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

D'où

$$\boxed{\langle\hat{p}^2\rangle = 2m\langle\hat{T}\rangle = 2mE_1}$$

8. **Calculer l'écart quadratique moyen $\Delta\hat{p}$ et montrer que la relation d'Heisenberg est satisfaite.**

$$\begin{aligned}\Delta\hat{p} &= \sqrt{\langle\hat{p}^2\rangle - \langle\hat{p}\rangle^2}\\ &= \sqrt{2mE_1}\\ &= \sqrt{2m\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}}\\ &= \sqrt{\frac{\pi^2\hbar^2}{a^2}}\\ &= \boxed{\frac{\pi\hbar}{a}}\end{aligned}$$

$$\Delta\hat{x}\Delta p = \frac{\hbar}{2}\sqrt{\frac{\pi^2}{3} - 2} \geq \frac{\hbar}{2}$$

On suppose maintenant qu'à $t = 0$, l'état de la particule est donné par

$$\Psi(x,0) = A\left[\psi_1(x) + \psi_2(x)\right]$$

où A est une constante.

9. **Calculer à un terme de phase près la valeur de la constante A.**

$$\begin{aligned}1 = \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,0)|^2 \mathrm{d}x &= |A|^2\left(\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + 2\psi_1\psi_2 \mathrm{d}x\right)\\ &= |A|^2\left(2 + 2\int_0^a \psi_1\psi_2 \mathrm{d}x\right)\\ &= |A|\left(2 + \frac{4}{a}\int_0^a \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)\sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\mathrm{d}x\right)\\ &= |A|\left(2 + \frac{2}{a}\int_0^a \cos\left(\frac{x\pi}{a}\right) - \cos\left(\frac{3x\pi}{a}\right)\mathrm{d}x\right)\\ &= 2|A|\end{aligned}$$

D'où,

$$\boxed{A = \frac{1}{\sqrt{2}}}$$

10. **Déterminer $\Psi(x,t)$, l'état du système à un instant $t > 0$.**

$$\begin{aligned}\Psi(x,t) &= A\left(\exp^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t}\psi_1(x) + \exp^{-\frac{i}{\hbar}E_2 t}\psi_2(x)\right)\\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\exp^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t}\psi_1(x) + \exp^{-\frac{i}{\hbar}E_2 t}\psi_2(x)\right)\end{aligned}$$

11. **Calculer dans l'état $\Psi(x,t)$, la valeur moyenne $\langle \hat{x} \rangle(t)$ de l'opérateur position à l'instant t. Montrer que cette quantité oscille au cours du temps et préciser l'amplitude et la fréquence de cette oscillation.**

$$\begin{aligned}
\langle \hat{x}(t) \rangle &= \langle \Psi | \hat{x} \Psi \rangle \\
&= \langle \Psi | x \Psi \rangle \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} x |\Psi|^2 \mathrm{d}x \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{x}{2} \left[\exp^{\frac{i}{\hbar} E_1 t} \psi_1^*(x) + \exp^{\frac{i}{\hbar} E_2 t} \psi_2^*(x) \right] \left[\exp^{-\frac{i}{\hbar} E_1 t} \psi_1(x) + \exp^{-\frac{i}{\hbar} E_2 t} \psi_2(x) \right] \mathrm{d}x \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty}
\end{aligned}$$

$$\langle \hat{x} \rangle = \frac{a}{2} \left(1 - \frac{32}{9\pi^2} \cos(3\omega t) \right)$$

12. **Calculer la valeur moyenne $\langle \hat{p} \rangle(t)$ de l'opérateur impulsion.**

$$\begin{aligned}
\langle \hat{p} \rangle &= m \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \langle \hat{x} \rangle \\
&= \frac{8\hbar}{3a} \sin(3\omega t)
\end{aligned}$$

13. **Calculer l'énergie moyenne de la particule dans l'état $\Psi(x,t)$.**

$$\begin{aligned}
\langle \hat{H} \rangle &= \frac{1}{2} \left\langle \psi_1(x) + \psi_2(x) \middle| \hat{H}(\psi_1(x) + \psi_2(x)) \right\rangle \\
&= \frac{1}{2} \langle \psi_1 + \psi_2 | E_1 \psi_1 + E_2 \psi_2 \rangle \\
&= \frac{1}{2} (E_1 + E_2)
\end{aligned}$$

14. **On veut mesurer l'énergie de cette particule. Quelles valeurs peut-on obtenir et avec quelles probabilités ?**

On peut avoir uniquement E_1 et E_2 comme résultat de la mesure. C'est à dire que l'on prépare le système dans cet état. ici la probabilité est la même pour les deux, 1/2.

Exercice III - Puits carré de potentiel.

Une particule de masse m astreinte à se déplacer le long de l'axe Ox est soumise au potentiel $V(x)$ défini par

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & \text{si } |x| < \frac{a}{2} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

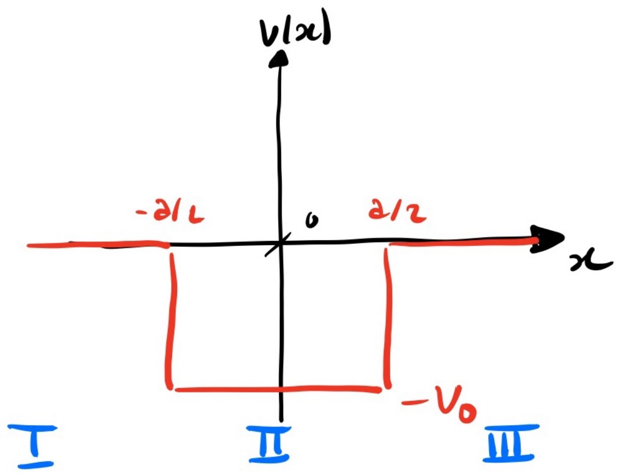
où V_0 et a sont des constantes positives. On se limitera au cas où l'énergie E de la particule vérifie $-V_0 < E < 0$ et on posera $k_0 = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}}$.

1. **On définit $\hbar k = \sqrt{2m(E + V_0)}$. Montrer que E ne peut prendre que certaines valeurs (quantification de l'énergie) qui sont, pour les états pairs, solutions de l'équation**

$$\left|\cos\left(\frac{ka}{2}\right)\right| = \frac{k}{k_0} \qquad \text{avec } \tan\left(\frac{ka}{2}\right) > 0$$

et solutions de

$$\left|\sin\left(\frac{ka}{2}\right)\right| = \frac{k}{k_0} \qquad \text{avec } \tan\left(\frac{ka}{2}\right) < 0$$



$$\boxed{\psi_{\mathrm{I}} = A_{\mathrm{I}} \exp^{\rho x} + B_{\mathrm{I}} \exp^{-\rho x}}$$

avec

$$\rho = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}$$

$$\boxed{\psi_{\mathrm{II}} = A_{\mathrm{II}} \exp^{ikx} + B_{\mathrm{II}} \exp^{-ikx}}$$

avec

$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E + V_0)}$$

$$\boxed{\psi_{\mathrm{III}} = A_{\mathrm{III}} \exp^{\rho x} + B_{\mathrm{II\ I}} \exp^{-\rho x}}$$

A cause des conditions aux limites $\pm\infty$,

$$B_{\mathrm{I}} = A_{\mathrm{III}} = 0$$

En $x = -\frac{a}{2}$:

$$A_{\mathrm{I}} \exp^{-\rho a/2} = A_{\mathrm{II}} \exp^{-ika/2} + B_{\mathrm{II}} \exp^{ika/2} \tag{1}$$

$$\rho A_{\mathrm{I}} \exp^{-\rho a/2} = ikA_{\mathrm{II}} \exp^{-ika/2} - ikB_{\mathrm{II}} \exp^{ika/2} \tag{2}$$

$$(1) \text{ et } (2) \Rightarrow \boxed{(\rho - ik)A_{\mathrm{II}} \exp^{-ika/2} + (\rho + ik)B_{\mathrm{II}} \exp^{ika/2} = 0}$$

En $x = \frac{a}{2}$:

$$B_{\mathrm{III}} \exp^{-\rho a/2} = A_{\mathrm{II}} \exp^{ika/2} + B_{\mathrm{II}} \exp^{-ika/2} \tag{3}$$

$$-\rho B_{\mathrm{III}} \exp^{-\rho a/2} = ikA_{\mathrm{II}} \exp^{ika/2} - ikB_{\mathrm{II}} \exp^{-ika/2} \tag{4}$$

$$(3) \text{ et } (4) \Rightarrow \boxed{(\rho + ik)A_{\mathrm{II}} \exp^{ika/2} + (\rho - ik)B_{\mathrm{II}} \exp^{-ika/2} = 0}$$

Il faut que (déterminant nul sinon on a des soucis)

$$(\rho - ik)^2 \exp^{-ika} - (\rho + ik)^2 \exp^{ika} = 0$$

Ce qui veux dire

$$\frac{(\rho - ik)^2}{(\rho + ik)^2} = \exp^{2ika}$$

Cela pose une condition sur E puisque ρ et k dépende de E.
On vas supposé que

$$\frac{\rho - ik}{\rho + ik} = -\exp^{ika}$$

$$\begin{aligned}
\rho - ik = -\exp^{ika}(\rho + ik) \Rightarrow \rho(1 + \exp^{ika}) &= ik(1 - \exp^{ika}) \\
\Rightarrow \frac{\rho}{k} &= i\frac{1 - \exp^{ika}}{1 + \exp^{ika}} = i\frac{\exp^{-ika/2} - \exp^{ika/2}}{\exp^{-ika/2} + \exp^{ika/2}} \\
&= i\frac{-2i\sin(ka/2)}{2\cos(ka/2)} \\
&= \tan(ka/2)
\end{aligned}$$

Alors,

$$\boxed{\frac{\rho}{k} = \tan\left(\frac{ka}{2}\right)}$$

$$1+\tan^2\left(\frac{ka}{2}\right) = \frac{1}{\cos^2(ka/2)} = 1+\frac{\rho^2}{k^2} = \frac{k^2+\rho^2}{k^2} = \frac{1}{k^2}k_0^2$$

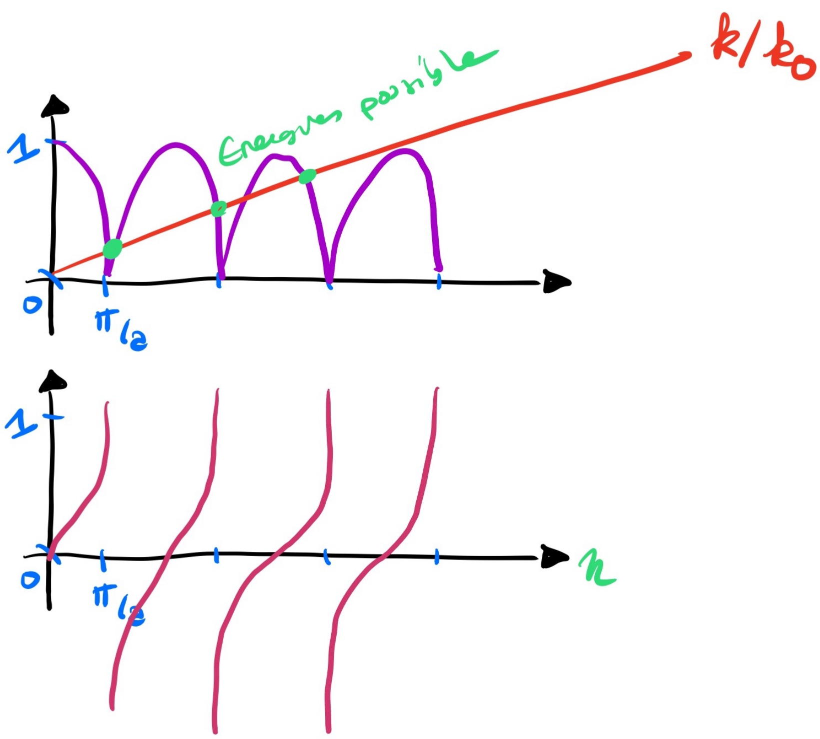
$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E+V_0) \quad ; \quad \rho^2 = \frac{2m|E|}{\hbar^2} = \frac{-2mE}{\hbar^2}$$

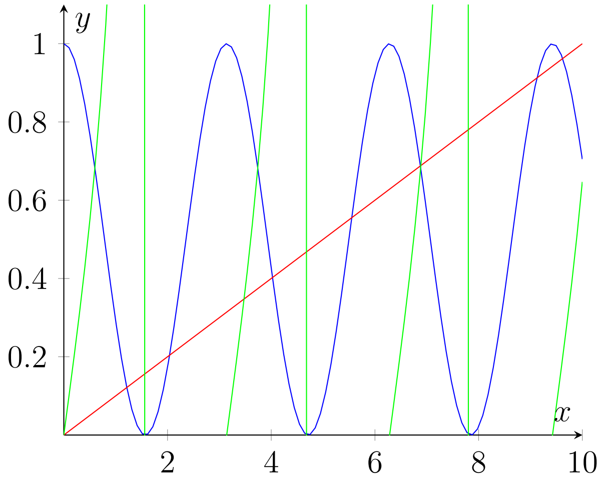
On trouve alors

$$k_0^2 = \frac{2m}{\hbar^2}V_0$$

d'où,

$$\boxed{\left|\cos\left(\frac{ka}{2}\right)\right| = \frac{k}{k_0} \text{ pour } \tan(ka/2) > 0}$$





On a la condition sur la positivité de la tangente, car dans le déroulé du calcul précédemment, nous avons perdu l'information concernant le signe, on peut refaire la même chose en supposant :

$$\frac{\rho - ik}{\rho + ik} = \exp^{ika}$$

$$\begin{aligned}
\rho - ik = \exp^{ika}(\rho + ik) &\Rightarrow \rho(1 - \exp^{ika}) = ik(1 + \exp^{ika}) \\
&\Rightarrow \frac{\rho}{k} = i\frac{1 + \exp^{ika}}{1 - \exp^{ika}} = i\frac{\exp^{-ika/2} + \exp^{ika/2}}{\exp^{-ika/2} - \exp^{ika/2}} \\
&= i\frac{2\cos(ka/2)}{-2i\sin(ka/2)} \\
&= -\cot(ka/2)
\end{aligned}$$

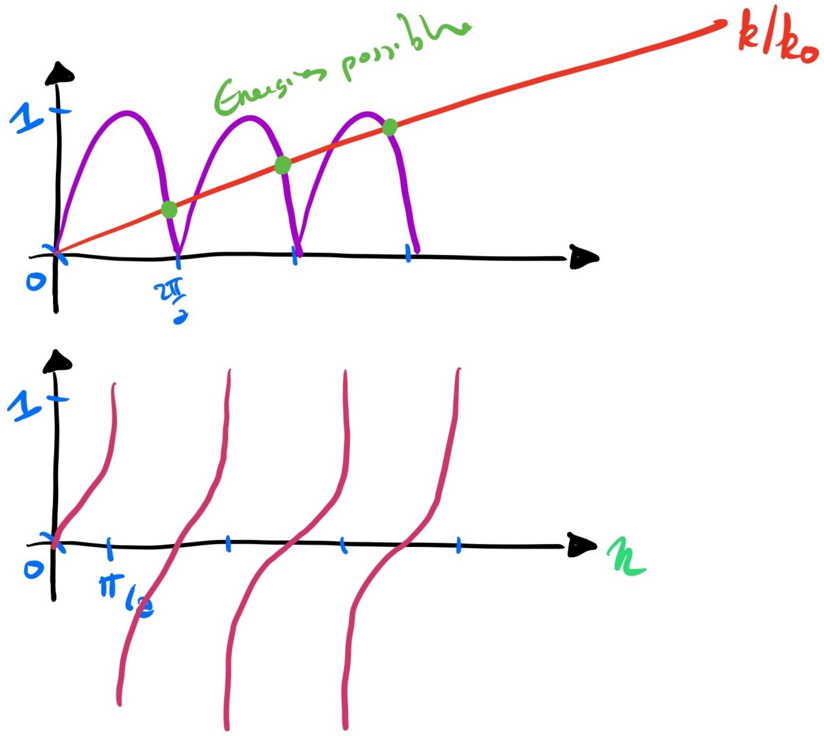
Alors,

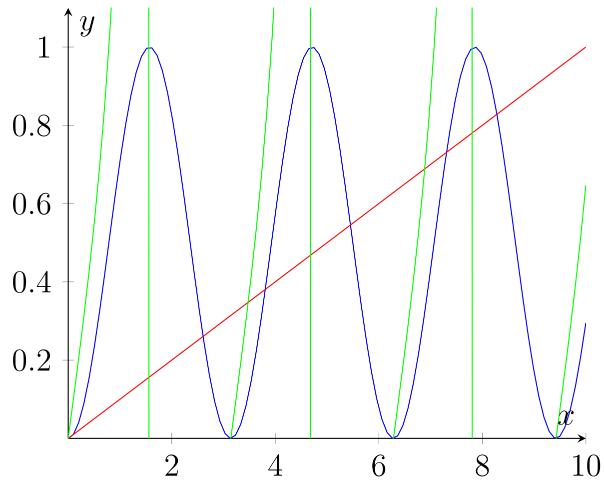
$$\boxed{\frac{\rho}{k} = -\cot\left(\frac{ka}{2}\right)}$$

$$1 + \cot\left(\frac{ka}{2}\right) = \frac{\sin^2(ka/2) + \cos^2(ka/2)}{\sin^2(ka/2)} = \frac{1}{\sin^2(ka/2)} = 1 + \frac{\rho^2}{k^2} = \frac{k_0}{k^2}$$

d'où

$$\boxed{\left|\sin\left(\frac{ka}{2}\right)\right| = \frac{k}{k_0} \text{ pour } \tan(ka/2) < 0}$$





Par étude graphique on remarque effectivement la discrétisation et ainsi la quantification de l'énergie.

2. Donner les conditions pour que le système n'ait qu'un seul état lié.

Si $k_0 \leq \pi/a$, alors k/k_0 coupera qu'une seule fois les fonctions, et alors, il existe alors qu'un seul état lié.

$$\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} = k_0 \leq \frac{\pi}{a}$$

Ainsi, cela nous donne la condition sur la profondeur du puit :

$$V_0 \leq \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

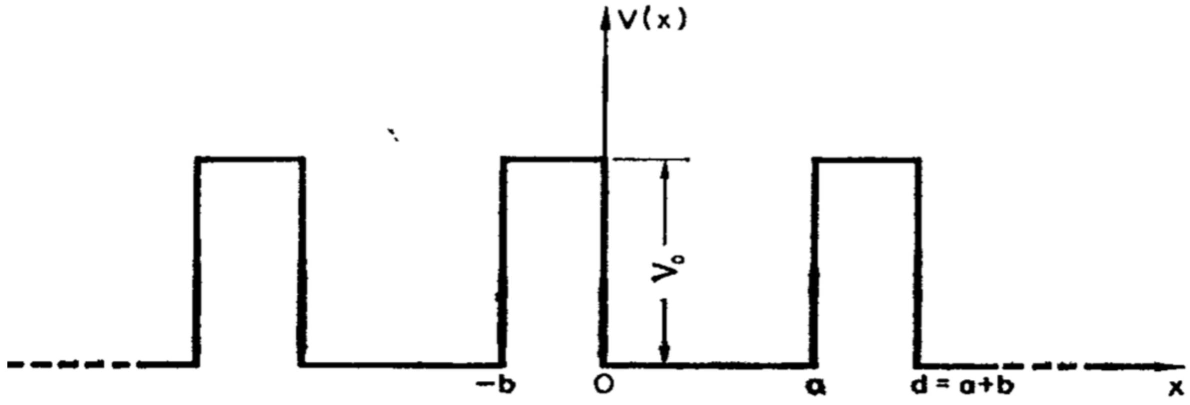
3. Déterminer les énergies propres du système lorsque le puits est infiniment profond.

Dans ce cas la, $k = n\pi/a$, alors

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} - V_0$$

Exercice IV - Potentiel périodique.

Un électron de masse m, d'énergie $E > 0$, se déplaçant dans un cristal à une dimension est soumis à un potentiel périodique $V(x)$ de période d modélisé par



On note $\psi(x)$ la fonction d'onde associée à un état stationnaire de l'électron.

1. **Justifier que $\psi(x)$ vérifie la relation : $\psi(x+d) = \exp^{i\Phi} \psi(x)$ où Φ est une constante.**

   Le système vas avoir les mêmes propriétés à gauche et à droite, alors on peut écrire une fonction d'onde en séparant le cas négatif et positif et ainsi c'est bien la même fonction d'onde à une phase près.

2. **Montrer que pour $-b \leq x \leq a$ et $E > V_0$, $\psi(x)$ est de la forme**

$$\psi(x) = \begin{cases} A\exp^{i\beta x} + B\exp^{-i\beta x} & \text{pour } -b \leq x \leq 0 \\ C\exp^{ikx} + D\exp^{-ikx} & \text{pour } 0 \leq x \leq a \end{cases}$$

   où A, B, C, D sont des constantes et β et k des quantités que l'on précisera.

   - On se place ici dans la situation où $V_0 < E$, on peut alors écrire l'équation de Schrödinger sur les deux régions :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi_{\mathrm{I}}(x) + V_0\psi_{\mathrm{I}}(x) = E\psi_{\mathrm{I}}(x) \qquad \text{pour } -b \leq x \leq 0$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi_{\mathrm{II}}(x) = E\psi_{\mathrm{II}}(x) \qquad \text{pour } 0 \leq x \leq a$$

     De la première équation, on trouve :

$$\psi_{\mathrm{I}}''(x) + \beta^2\psi_{\mathrm{I}}(x) = 0 \qquad \boxed{\beta = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}}$$

De la seconde équation on trouve :

$$\psi''_{\mathrm{II}} + k^2\psi_{\mathrm{II}}(x) = 0 \qquad \boxed{k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}}$$

On peut alors synthétisé cela :

$$\psi(x) = \begin{cases} A\exp^{i\beta x} + B\exp^{-i\beta x} & \text{pour } -b \leq x \leq 0 \\ C\exp^{ikx} + D\exp^{-ikx} & \text{pour } 0 \leq x \leq a \end{cases}$$

3. Montrer que pour $-b \leq x \leq a$ et $0 < E < V_0$, $\psi(x)$ est de la forme

$$\psi(x) = \begin{cases} A'\exp^{\rho x} + B'\exp^{-\rho x} & \text{pour } -b \leq x \leq 0 \\ C'\exp^{ikx} + D'\exp^{-ikx} & \text{pour } 0 \leq x \leq a \end{cases}$$

où A', B', C', D' sont des constantes et ρ une quantité que l'on précisera.

- On se place ici dans la situation où $0 < E < V_0$, on peut alors écrire l'équation de Schrödinger sur les deux régions :

$$\psi''_{\mathrm{I}}(x) + \frac{2m}{\hbar}(E - V_0)\psi_{\mathrm{I}}(x) = 0$$
$$\psi''_{\mathrm{I}}(x) - \frac{2m}{\hbar}(V_0 - E)\psi_{\mathrm{I}}(x) = 0$$

On pose alors,

$$\psi''_{\mathrm{I}}(x) - \rho^2\psi_{\mathrm{I}}(x) = 0 \qquad \boxed{\rho^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)}$$

Et $\psi_{\mathrm{II}}(x)$ est inchangé entre les deux situations.

Et on remarque, que pour obtenir la réponse à la question précédente on peut faire la substitution : $\rho \leftrightarrow i\beta$.

On peut alors synthétisé cela :

$$\psi(x) = \begin{cases} A'\exp^{\rho x} + B'\exp^{-\rho x} & \text{pour } -b \leq x \leq 0 \\ C'\exp^{ikx} + D'\exp^{-ikx} & \text{pour } 0 \leq x \leq a \end{cases}$$

4. En appliquant les conditions de continuité en $x = 0$ et $x = a$, montrer que

$$\cos\Phi = \begin{cases} \cosh b\rho \cos ka - \frac{k^2-\rho^2}{2k\rho} \sinh b\rho \sin ka & \text{si } 0 < E < V_0 \\ \cos b\beta \cos ka - \frac{k^2+\beta^2}{2k\beta} \sin b\beta \sin ka & \text{si } E > V_0 \end{cases} \quad (1a)\ (1b)$$

Puisque les deux situations ($E > V_0$ et $0 < E < V_0$) sont équivalente par la substitution précédemment évoqué, on peut considérer le cas où $E > V_0$ dans la suite des calculs,

$$\psi(x) \begin{cases} A \exp^{i\beta x} + B \exp^{-i\beta x} & -b \leq x \leq 0 \\ C \exp^{ikx} + C \exp^{-ikx} & 0 \leq x \leq a \end{cases}$$

Nous avons la condition de continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée en 0 (point changement de région).

Continuité en 0 :

$$\boxed{A + B = C + D}$$

$$\boxed{\beta(A - B) = k(C - D)}$$

Et on peut écrire également la condition de continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée au point a puisque elle est périodique.

Continuité en a :

D'après la question 1. on à la relation entre la fonction d'onde de la région initiale et d'une translation de période d :

$$a < x < a + d \qquad \psi(x) = \exp^{i\Phi} \psi(x - d)$$

$$\psi_{\mathrm{I}}(x) = \exp^{i\Phi} \left(A \exp^{i\beta(x-d)} + B \exp^{-i\beta(x-d)}\right)$$
$$\psi_{\mathrm{II}}(x) = \exp^{i\Phi} \left(C \exp^{ik(x-d)} + C \exp^{-ik(x-d)}\right)$$

On sait que $a + b = d$, alors $a - d = -b$.

$$\boxed{C \exp^{ika} + D \exp^{-ika} = \exp^{i\Phi} \left(A \exp^{-i\beta b} + B \exp^{i\beta b}\right)}$$

$$\boxed{ikC \exp^{ika} - ikD \exp^{-ika} = \exp^{i\Phi} \left(Ai\beta \exp^{-i\beta b} - Bi\beta \exp^{i\beta b}\right)}$$

On a bien 4 équations et 4 inconnues, on impose le déterminent nulle

$$\begin{cases} A + B & = C + D \\ \beta(A - B) & = k(C - D) \\ C \exp^{ika} + D \exp^{-ika} & = \exp^{i\Phi} \left(A \exp^{-i\beta b} + B \exp^{i\beta b}\right) \\ ikC \exp^{ika} - ikD \exp^{-ika} & = \exp^{i\Phi} \left(Ai\beta \exp^{-i\beta b} - Bi\beta \exp^{i\beta b}\right) \end{cases}$$

$$\begin{cases} A+B-C-D & =0 \\ \beta(A-B)-k(C-D) & =0 \\ C\exp^{ika}+D\exp^{-ika}-\exp^{i\Phi}\left(A\exp^{-i\beta b}+B\exp^{i\beta b}\right) & =0 \\ ikC\exp^{ika}-ikD\exp^{-ika}-\exp^{i\Phi}\left(Ai\beta\exp^{-i\beta b}-Bi\beta\exp^{i\beta b}\right) & =0 \end{cases}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ \beta & -\beta & -k & k \\ -\exp^{i\Phi}\exp^{-i\beta b} & -\exp^{i\Phi}\exp^{i\beta b} & \exp^{ika} & \exp^{-ika} \\ -i\beta\exp^{i\Phi}\exp^{-i\beta b} & i\beta\exp^{i\Phi}\exp^{i\beta b} & ik\exp^{ika} & -ik\exp^{-ika} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} A \\ B \\ C \\ D \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} A & B & -C & -D \\ A\beta & -B\beta & -Ck & Dk \\ -A\exp^{i\Phi}\exp^{-i\beta b} & -B\exp^{i\Phi}\exp^{i\beta b} & C\exp^{ika} & D\exp^{-ika} \\ -Ai\beta\exp^{i\Phi}\exp^{-i\beta b} & Bi\beta\exp^{i\Phi}\exp^{i\beta b} & Cik\exp^{ika} & -Dik\exp^{-ika} \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

On calcul le déterminant de la matrice de gauche, et on l'impose nul, ce qui nous permet d'obtenir la seconde relation, pour obtenir la première il suffit de faire la substitution déjà évoqué précédemment.

5. **On considère le cas particulier où $0 < E < V_0$, et on se limite au cas où $b \to 0$ et $V_0 \to +\infty$ la quantité $V_0 b$ restant constante avec $V_0 b = S$, S étant une constante. Montrer la relation**

$$\cos\Phi = \cos ka + P\frac{\sin ka}{ka} \quad \text{avec } P = \frac{mSa}{\hbar^2}$$

et discuter les valeurs possibles pour l'énergie E.

$$\cos\Phi = \cosh(b\rho)\cos(ka) - \frac{k^2-\rho^2}{2k\rho}\sinh(b\rho)\sin(ka)$$

On fait tendre $b \to 0$, $V_0 \to +\infty$ et on pose $S = V_0 b$ comme étant une constante.

$$\rho b = \frac{\sqrt{2mb(S-Eb)}}{\hbar} \to 0$$

On remarque alors que $\rho b \to 0$

D'où

$$\cos\Phi = \cos(ka) - \frac{k^2-\rho^2}{2k} b \sin ka$$

Car la limite :

$$\lim_{z\to 0}\frac{\sinh(az)}{z} = a$$

$$
\begin{aligned}
(k^2-\rho^2)b &= \left[\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{2m}{\hbar^2}(V_0-E)\right] b \\
&= \frac{2m}{\hbar^2}\left[Eb - S\right] \to -\frac{2m}{\hbar^2} S
\end{aligned}
$$

On obtient alors :

$$
\begin{aligned}
\cos\Phi &= \cos(ka) + \frac{m}{\hbar^2}\frac{S}{k}\sin(ka) \\
&= \cos(ka) + \frac{m}{\hbar^2} Sa \frac{\sin(ka)}{ka} \\
&= \cos(ka) + P\frac{\sin(ka)}{ka}
\end{aligned}
$$

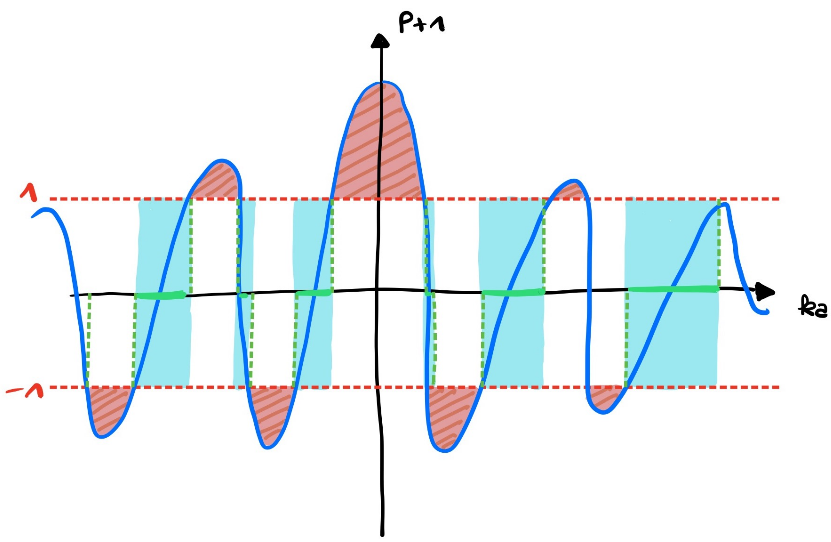
D'où,

$$
\boxed{\cos\Phi = \cos(ka) + P\frac{\sin(ka)}{ka}}
$$

$$
-1 \leq \cos\Phi \leq 1
$$

Alors,

$$
\boxed{-1 \leq \cos(ka) + P\frac{\sin(ka)}{ka} \leq 1}
$$



Les zone bleu sont donc les zone acceptable de niveau d'énergie.