NOM : Christophe Texier L3 - Physique-Chimie

Test de mécanique quantique – 29 octobre 2015

1/ Rappeler l'équation de Schrödinger dépendant du temps pour la fonction d'onde $\psi(x,t)$ décrivant l'état quantique d'une particule de masse m sur une ligne, soumise au potentiel $V(x)$.

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t) + V(x)\psi(x,t)$$

2/ Quel est le sens physique de $\psi(x,t)$?

$|\psi(x,t)|^2\mathrm{d}x = \text{Proba}\,\{\text{particule } \in [x, x+\mathrm{d}x]\}$

i.e. $\psi(x,t)$ est une *amplitude* de densité de probabilité.

3/ Marche de potentiel.– On considère la situation où le potentiel est $V(x) = 0$ pour $x < 0$ et $V(x) = V_0 > 0$ pour $x > 0$.

a) Justifier que la fonction d'onde $\psi(x,t) = \varphi(x)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}$ décrit une particule d'énergie E bien déterminée. Comment dépend-t-elle de ω ? Comment appelle-t-on un tel état ? À quelle équation différentielle obéit $\varphi(x)$?

une unique pulsation $\omega \Leftrightarrow$ une unique énergie $E = \hbar\omega$ (Planck-Einstein)

$\psi(x,t) = \varphi(x)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Et/\hbar}$ est un *état stationnaire*. $\varphi(x)$ obéit à l'équation différentielle

$$\varphi''(x) = \frac{2m}{\hbar^2}(V(x) - E)\varphi(x) \tag{1}$$

b) On considère le cas où $E < V_0$. Montrer que la fonction d'onde $\varphi(x)$ est de la forme

$$\varphi(x) = \mathrm{e}^{+\mathrm{i}kx} + r\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} \qquad \text{pour } x < 0 \tag{2}$$
$$= (1+r)\,\mathrm{e}^{-qx} \qquad \text{pour } x > 0 \tag{3}$$

où k et q sont **réels** et **positifs**. Que représentent les différents termes de $\varphi(x)$? Comment k et q sont-ils reliés à E et V_0 ? Pourquoi n'y a-t-il pas de terme e^{+qx} ?

$$\begin{cases} \mathrm{e}^{+\mathrm{i}kx} & : \text{onde incidente} \\ r\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} & : \text{onde réfléchie} \\ (1+r)\,\mathrm{e}^{-qx} & : \text{onde évanescente} \end{cases}$$

• Pour $x < 0$ (région permise classiquement), en posant $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, l'éq. (1) prend la forme

$$\varphi''(x) = -k^2\varphi(x) \qquad \Rightarrow \quad \text{solutions } \mathrm{e}^{+\mathrm{i}kx} \text{ ou } \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}$$

• Pour $x > 0$ (région interdite classiquement), en posant $E = V_0 - \frac{\hbar^2 q^2}{2m}$, l'éq. (1) prend la forme

$$\varphi''(x) = +q^2\varphi(x) \qquad \Rightarrow \quad \text{solutions } \mathrm{e}^{+qx} \text{ ou } \mathrm{e}^{-qx}$$

on élimine la première qui n'est pas normalisable.

c) On impose la continuité de la dérivée à l'origine : $\varphi'(0^+) = \varphi'(0^-)$. Déduire r en fonction de k et q. Que vaut $|r|$? Justifier *physiquement*.

$\varphi(x)$ est déjà continue en $x = 0$. Reste à imposer la continuité de $\varphi'(x)$
$\Rightarrow -(1+r)q = \mathrm{i}k(1-r)$, d'où

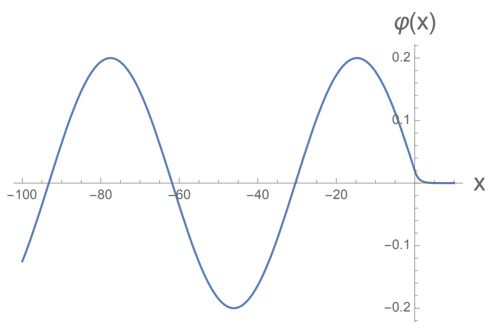
$$\boxed{r = \frac{\mathrm{i}k + q}{\mathrm{i}k - q}} \text{ où l'on rappelle que } q = \sqrt{k_0^2 - k^2} \text{ avec } V_0 = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} \tag{4}$$

$|\mathrm{i}k + q| = |\mathrm{i}k - q| \Rightarrow |r| = 1$, i.e. la probabilité de réflexion est $R = |r|^2 = 1$.
On s'y attendait puisque la fonction d'onde ne pénètre que sur une distance *finie* $\sim 1/q$ dans la marche de potentiel.
On peut facilement vérifier que le courant $J_\varphi = \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im}\left[\varphi^*(x)\varphi'(x)\right]$ est nul pour $x > 0$, donc également pour $x < 0$, ce qui implique que $r = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}$.

d) BONUS : Que vaut r dans la limite $E \to 0$ et $E \to V_0^-$; dessiner l'allure de la fonction d'onde dans les deux cas.

- Pour $E \to 0$ (précisément $E \ll V_0$ ou $k \ll k_0$), on a $k \to 0$ et $q \to k_0$, donc $r \to -1$ la marche devient effectivement impénétrable puisque la fonction d'onde prend la forme

$$\varphi(x) \simeq 2\mathrm{i} \sin kx \quad \text{pour } x < 0$$



- Pour $E \to V_0^-$ (précisément $E - V_0 \ll V_0$ ou $q \ll k_0$), on a $k \to k_0$ et $q \to 0$, donc $r \to +1$. Dans cette situation la fonction d'onde pénètre dans la marche de potentiel sur une distance $\sim 1/q$ beaucoup plus grande que la longueur d'onde $\lambda = 2\pi/k$. La fonction d'onde est de la forme

$$\varphi(x) \simeq 2 \cos kx \quad \text{pour } x < 0$$