

SOLUTIONS DE LA SÉRIE DE TD N° 02

ONDES ET PARTICULES

EXERCICE 01 : Longueur d'onde de De Broglie

Relation de Louis de Broglie (en module).

$$p = \hbar k \quad \text{ou} \quad mv = \frac{h}{\lambda} \quad \Rightarrow \quad \boxed{\lambda = \frac{h}{mv}} \quad \text{avec} \quad h = 6,626 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$$

a. Un grain de poussière

$$T = 10^{-21} \text{ Joules} \quad ; \quad m = 10^{-15} \text{ kg}$$

$$T = \frac{1}{2}mv^2 \quad \Rightarrow \quad mv = \sqrt{2mT}$$

Donc

$$\boxed{\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mT}}} \quad \text{Numériquement :} \quad \boxed{\lambda = 4,6852 \times 10^{-16} \text{ m}}$$

b. Un neutron thermique

$$E_c = \frac{3}{2}k_B T \quad ; \quad T = 300 \text{ K} \quad ; \quad m_n = 1,674 \times 10^{-27} \text{ kg} \quad ; \quad k_B = 1,3806 \times 10^{-23} \text{ J/K}$$

$$E_c = \frac{1}{2}m_n v^2 \quad \Rightarrow \quad m_n v = \sqrt{2m_n E_c} = \sqrt{3m_n k_B T}$$

Donc

$$\boxed{\lambda = \frac{h}{\sqrt{3m_n k_B T}}} \quad \text{Numériquement :} \quad \boxed{\lambda = 1,4528 \times 10^{-10} \text{ m}}$$

c. Un électron accéléré dans une d.d.p.

$$V = 1000 \text{ Volts} \quad ; \quad m_e = 9,109 \times 10^{-31} \text{ kg}$$

Un électron accéléré dans une d.d.p. acquiert une énergie cinétique égale à

$$T = \frac{1}{2}mv^2 = e \cdot V \quad \Rightarrow \quad mv = \sqrt{2mT} = \sqrt{2me \cdot V}$$

Donc

$$\boxed{\lambda = \frac{h}{\sqrt{2me \cdot V}}} \quad \text{Numériquement :} \quad \boxed{\lambda = 3,8785 \times 10^{-11} \text{ m}}$$

d. Un électron dans un accélérateur de particule.

$$E = 1 \text{ GeV} = 1,602 \times 10^{-10} \text{ Joules} \quad ; \quad c = 2,9979 \times 10^8 \text{ m/s}$$

Pour des énergies de cet ordre ($E \gg m_0 c^2$) nous utilisons les lois de la relativité restreinte.

$$E = mc^2 \quad \text{et} \quad p^2 c^2 = m^2 c^4 - m_0^2 c^4 \approx m^2 c^4$$

Donc

$$p \approx mc = \frac{E}{c}$$

Et

$$\boxed{\lambda = \frac{hc}{E}} \quad \text{Numériquement :} \quad \boxed{\lambda = 1,2399 \times 10^{-15} \text{ m}}$$

EXERCICE 02 : Vitesse de phase et Vitesse de groupe**a. Relations de la vitesse de phase et de la vitesse de groupe dans un paquet d'onde.**

$$v_{\phi} = \frac{\omega}{k} \quad ; \quad v_g = \frac{d\omega}{dk}$$

La vitesse de phase est de chaque phase (onde plane) séparément.

La vitesse de groupe est la vitesse du maximum du paquet d'onde.

b. Relation de dispersion.

Equation de Schrödinger pour une particule libre (cas à une dimension)

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

En remplaçant par la solution en onde plane

$$\psi(x, t) = A. e^{i(kx - \omega t)}$$

On trouve

$$\omega(k) = \frac{\hbar. k^2}{2m}$$

Dans ce cas la vitesse de phase est

$$v_{\phi} = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar. k}{2m}$$

Et la vitesse de groupe est

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar. k}{m}$$

Dans ce cas particulier

$$v_g = 2v_{\phi}$$

c. Dans le cas où la longueur d'onde est liée à la fréquence par la relation.

$$\lambda = \frac{c}{\sqrt{v^2 - v_0^2}}$$

Comme $\lambda = 2\pi/k$ et $v = \omega/2\pi$, nous pouvons réécrire la relation sous la forme

$$\frac{1}{k} = \frac{c}{\sqrt{\omega^2 - \omega_0^2}}$$

Avec $v_0 = \omega_0/2\pi = \text{constante}$ et $\omega > \omega_0$

En inversant

$$\omega(k) = \sqrt{k^2 c^2 + \omega_0^2}$$

Dans ce cas la vitesse de phase est

$$v_{\phi} = \frac{\omega}{k} = \frac{\sqrt{k^2 c^2 + \omega_0^2}}{k}$$

Et la vitesse de groupe est

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{kc^2}{\sqrt{k^2 c^2 + \omega_0^2}}$$

Dans ce cas particulier

$$v_g v_{\phi} = c^2$$

d. Pour un paquet d'onde ou la vitesse de chaque phase est donnée par

$$v_{\phi} = \sqrt{\frac{g\lambda}{2\pi}} = \sqrt{\frac{g}{k}} \quad \text{avec} \quad \frac{\lambda}{2\pi} = \frac{1}{k}$$

Nous cherchons la relation de dispersion

$$v_{\phi} = \frac{\omega}{k} \quad \Rightarrow \quad \omega = v_{\phi} \cdot k = \sqrt{\frac{g}{k}} k$$

D'où

$$\omega(k) = \sqrt{gk}$$

Dans ce cas la vitesse de groupe est

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{g}{k}}$$

Dans ce cas particulier

$$v_{\phi} = 2v_g$$

EXERCICE 03 : Paquet d'onde libre

Rappeler l'expression d'un paquet d'ondes libres à une dimension.

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) \cdot e^{i(kx - \omega t)} dk$$

Forme d'un paquet d'ondes libres à $t = 0$.

$$\begin{cases} g(k) = A & \text{pour } k \in [k_0 - \Delta k/2, k_0 + \Delta k/2] \\ g(k) = 0 & \text{ailleurs} \end{cases}$$

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) \cdot e^{ikx} dk$$

En remplaçant $g(k)$

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left\{ \int_{-\infty}^{k_0 - \Delta k/2} 0 \cdot e^{ikx} dk + \int_{k_0 - \Delta k/2}^{k_0 + \Delta k/2} A \cdot e^{ikx} dk + \int_{k_0 + \Delta k/2}^{+\infty} 0 \cdot e^{ikx} dk \right\}$$

Donc

$$\psi(x, 0) = \frac{A}{\sqrt{2\pi}} \int_{k_0 - \Delta k/2}^{k_0 + \Delta k/2} e^{ikx} dk = \frac{A}{\sqrt{2\pi}} \left[\frac{e^{ikx}}{ix} \right]_{k_0 - \Delta k/2}^{k_0 + \Delta k/2}$$

Et

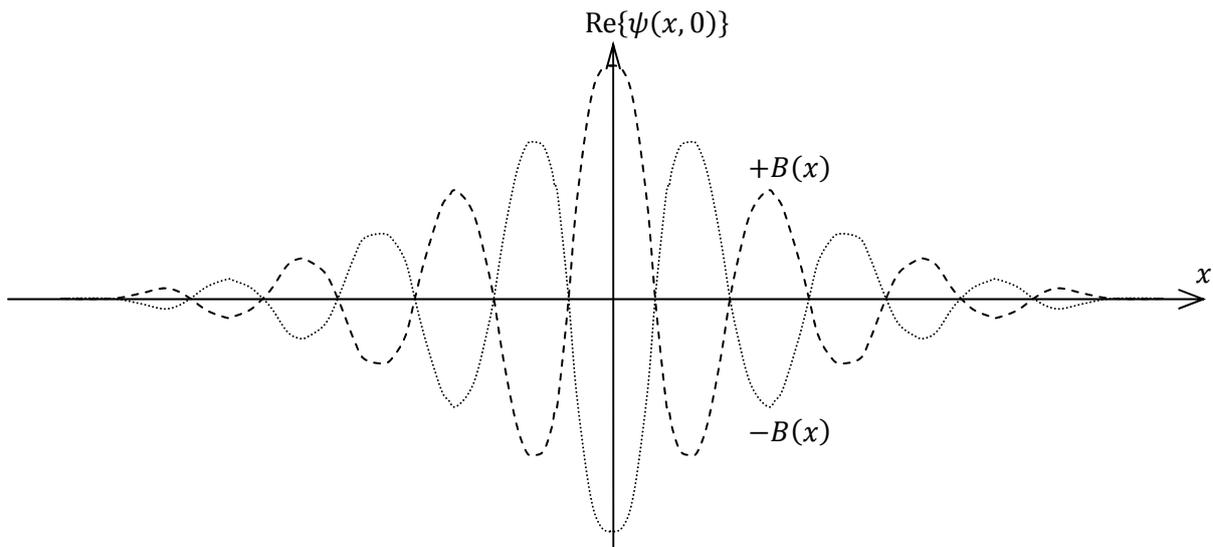
$$\psi(x, 0) = \frac{A}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{ik_0 x}}{ix} (e^{i(\Delta k/2)x} - e^{-i(\Delta k/2)x})$$

Ou

$$\psi(x, 0) = \frac{2A}{\sqrt{2\pi}} \frac{\sin(\Delta k \cdot x/2)}{x} e^{ik_0 x}$$

Pour représenter $\text{Re}\{\psi(x, 0)\}$, nous représentons d'abord l'amplitude $\pm B(x)$ (en pointillés)

$$B(x) = \frac{2A}{\sqrt{2\pi}} \frac{\sin(\Delta k \cdot x/2)}{x}$$



Condition de normalisation.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x, 0)|^2 dx = \frac{2A^2}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin^2(\Delta k \cdot x/2)}{x^2} dx = 1$$

EXERCICE 04 : Principe d'incertitude

1. Grain de poussière.

$$\Delta x = 0,01 \mu\text{m} \quad ; \quad D = 1 \mu\text{m} \quad ; \quad m = 10^{-15} \text{ kg}$$

La vitesse est calculée à partir de l'énergie cinétique

$$T = \frac{1}{2}mv^2 = 10^{-21} \text{ Joules} \quad \Rightarrow \quad v = \sqrt{\frac{2T}{m}} \quad ; \quad v = 1,4142 \times 10^{-3} \text{ m.s}^{-1}$$

L'incertitude sur la vitesse est donnée par la relation d'incertitude de Heisenberg

$$m\Delta v \cdot \Delta x \geq \hbar$$

Donc

$$\Delta v \geq \frac{\hbar}{m\Delta x} = 1,0545 \times 10^{-11} \text{ m.s}^{-1}$$

Ce qui représente une incertitude relative sur la vitesse de $\Delta v/v = 0,7456 \times 10^{-8}$

Pour une incertitude relative sur la position (par rapport au diamètre) $\Delta x/D = 0,01$

Ces deux incertitudes étant très faibles, nous pouvons donc connaître avec une bonne précision et en même temps la position et la vitesse du grain de sable.

L'effet quantique n'est pas perceptible à cette échelle de la matière.

2. Neutron thermique.

$$E_c = \frac{3}{2}k_B T \quad ; \quad T = 300 \text{ K} \quad ; \quad m_n = 1,674 \times 10^{-27} \text{ kg} \quad ; \quad k_B = 1,3806 \times 10^{-23} \text{ J/K}$$

La vitesse du neutron thermique à cette température.

$$E_c = \frac{1}{2}m_n v^2 \quad \Rightarrow \quad v = \sqrt{\frac{2E_c}{m_n}} = \sqrt{\frac{3k_B T}{m_n}} = 2,7244 \times 10^2 \text{ m.s}^{-1}$$

L'incertitude relative étant

$$\Delta v/v = 1 \% = 0,01 \quad \Rightarrow \quad \Delta v = 0,01 \cdot v = 2,7244 \text{ m.s}^{-1}$$

L'incertitude sur la vitesse est donnée par la relation d'incertitude de Heisenberg

$$m_n \Delta v \cdot \Delta x \geq \hbar$$

Donc

$$\Delta x \geq \frac{\hbar}{m_n \Delta v} = 2,3123 \times 10^{-8} \text{ m}$$

Cette incertitude sur la position d'un neutron est énorme, car elle représente une centaine de distance interatomique.

Donc, du fait de la relation d'incertitude, avoir une bonne précision sur la vitesse du neutron nous fait perdre toute précision sur sa position. A cette échelle nous percevons bien les effets quantiques.

EXERCICE 05 : Principe d'incertitude

Masse du virus de forme sphérique $R = 10 \text{ \AA}$ et de densité $\rho = 1 \text{ g.cm}^{-3}$

$$m = \rho \cdot \tau = \frac{4}{3}\pi R^3 \rho \quad \text{A. N.} \quad m = 4,1887 \times 10^{-24} \text{ kg}$$

Le principe d'incertitude

$$m\Delta v \cdot \Delta x \geq \hbar$$

Comme le virus est localisé approximativement dans une région égale à son diamètre.

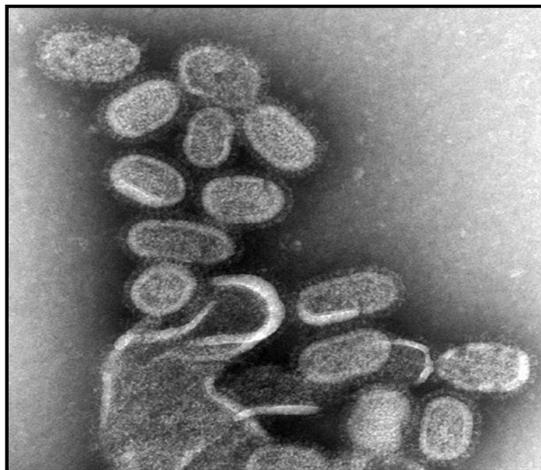
$$\Delta x \approx D = 2R$$

D'où

$$\Delta v \geq \frac{\hbar}{m\Delta x} = \Delta v_{\min}$$

$$\Delta v_{\min} = \frac{\hbar}{2mR}$$

$$\text{A. N.} \quad \Delta v_{\min} = 1,2588 \times 10^{-3} \text{ m/s}$$



Virions grippaux (*Myxovirus influenzae*) quittant leur cellule hôte, grossis cent mille fois.
Cliché de microscopie électronique en transmission issu de la bibliothèque d'images de Santé publique du Center for Disease Control (Atlanta, Géorgie).

EXERCICE 07 : Particule dans une boîte de potentiel à une dimension

Expression du potentiel.

$$\begin{cases} V(x) = 0 & \text{pour } x \in [0, a] \\ V(x) = +\infty & \text{ailleurs} \end{cases}$$

D'après la remarque que nous avons vu la fonction d'onde dans les zones I et III est nulle.

$$\begin{cases} \varphi_1(x) = 0 & \text{pour } x \in]-\infty, 0[\\ \varphi_3(x) = 0 & \text{pour } x \in [a, +\infty[\end{cases}$$

Il nous reste à calculer la fonction d'onde dans la zone II.

L'équation de Schrödinger : ($V = 0$)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} = E \cdot \varphi(x)$$

La solution est de la forme :

$$\varphi_2(x) = A \cdot e^{+ikx} + B \cdot e^{-ikx} \quad \text{avec} \quad k = \sqrt{\frac{2m \cdot E}{\hbar^2}}$$

Condition de continuité en $x = 0$: $\varphi_1(0) = \varphi_2(0) = 0 \Rightarrow A + B = 0$ et $A = -B$

En remplaçant dans la fonction d'onde : $\varphi_2(x) = A \cdot 2i \cdot \sin(k \cdot x)$

Condition de continuité en $x = a$: $\varphi_2(a) = \varphi_3(a) = 0 \Rightarrow A \cdot 2i \cdot \sin(k \cdot a) = 0$

Donc $k = n \frac{\pi}{a}$ où n est un entier naturel non nul.

En remplaçant dans l'expression de l'énergie on trouve

$$E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m \cdot a^2} n^2$$

La constante A est calculée à partir de la condition de normalisation.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x, t)|^2 \cdot dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi(x)|^2 \cdot dx = \int_0^a |\varphi_2(x)|^2 \cdot dx = 1$$

En remplaçant $\varphi_2(x)$, on trouve $|A| = 1/\sqrt{2a}$ donc A s'écrit sous la forme

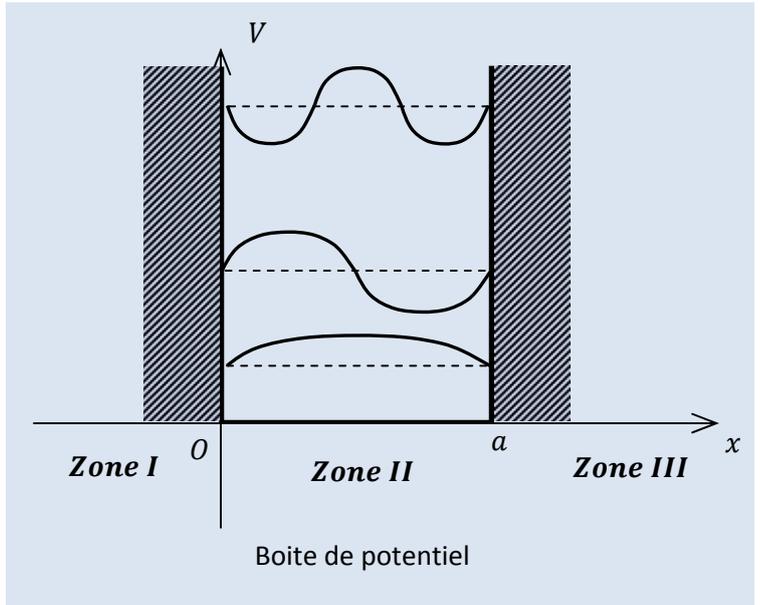
$$A = |A| \cdot e^{i\phi} = (1/\sqrt{2a}) e^{i\phi}$$

Et la fonction d'onde (dans la zone II).

$$\varphi(x) = (1/\sqrt{2a}) \cdot e^{i(\phi + \frac{\pi}{2})} \cdot \sin(k \cdot x)$$

$e^{i(\phi + \pi/2)}$ est un facteur de phase constant qui n'influe pas sur le module de $\varphi(x)$, donc il n'influe pas sur la probabilité de présence, la fonction d'onde peut s'écrire sous la forme

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \cdot \sin\left(n \frac{\pi}{a} x\right)$$



EXERCICE 08 : Particule dans une boîte de potentiel à 3 dimensions (densité d'états)

1. Boite de potentiel tridimensionnelle

$$V(x, y, z) = 0 \text{ pour } (x \in [0, a], y \in [0, a], z \in [0, a]) ; V(x, y, z) = +\infty \text{ sinon}$$

L'équation de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \varphi(x, y, z) + V(x, y, z) \cdot \varphi(x, y, z) = E \cdot \varphi(x, y, z)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \varphi(x, y, z) = E \cdot \varphi(x, y, z)$$

En posant

$$\varphi(x, y, z) = \phi_1(x) \times \phi_2(y) \times \phi_3(z)$$

On obtient

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\phi_2(y) \cdot \phi_3(z) \frac{\partial^2 \phi_1(x)}{\partial x^2} + \phi_1(x) \cdot \phi_3(z) \frac{\partial^2 \phi_2(y)}{\partial y^2} + \phi_1(x) \cdot \phi_2(y) \frac{\partial^2 \phi_3(z)}{\partial z^2} \right) = E \cdot \phi_1(x) \cdot \phi_2(y) \cdot \phi_3(z)$$

Et en divisant par $\phi_1(x) \cdot \phi_2(y) \cdot \phi_3(z)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{\phi_1(x)} \frac{\partial^2 \phi_1(x)}{\partial x^2} + \frac{1}{\phi_2(y)} \frac{\partial^2 \phi_2(y)}{\partial y^2} + \frac{1}{\phi_3(z)} \frac{\partial^2 \phi_3(z)}{\partial z^2} \right) = E$$

Qui s'écrit sous la forme de trois fonctions de variables (x, y, z) indépendantes dont la somme est constante, donc, chaque fonction est constante

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\phi_1(x)} \frac{\partial^2 \phi_1(x)}{\partial x^2} = E_1 \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\phi_2(y)} \frac{\partial^2 \phi_2(y)}{\partial y^2} = E_2 \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\phi_3(z)} \frac{\partial^2 \phi_3(z)}{\partial z^2} = E_3 \end{cases} \quad \text{ou} \quad \begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi_1(x)}{\partial x^2} = E_1 \cdot \phi_1(x) \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi_2(y)}{\partial y^2} = E_2 \cdot \phi_2(y) \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi_3(z)}{\partial z^2} = E_3 \cdot \phi_3(z) \end{cases}$$

Avec

$$E_1 + E_2 + E_3 = E$$

Les trois équations obtenus et les conditions limites qui leurs sont associées sont celles de trois boites de potentiel à une dimension chacune, suivant les trois axes respectifs OX, OY, OZ . Les solutions sont donc de la forme

$$\phi_1(x) = \sqrt{2/a} \cdot \sin\left(n \frac{\pi}{a} x\right) ; \phi_2(y) = \sqrt{2/a} \cdot \sin\left(m \frac{\pi}{a} y\right) ; \phi_3(z) = \sqrt{2/a} \cdot \sin\left(p \frac{\pi}{a} z\right)$$

Avec comme composantes du vecteur d'onde

$$k_x = n \frac{\pi}{a} ; k_y = m \frac{\pi}{a} ; k_z = p \frac{\pi}{a} \quad \text{tel que } n, m, p \in \mathbb{N}^*$$

Et les énergies

$$E_1 = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2 ; E_2 = \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} m^2 ; E_3 = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} p^2$$

D'où la fonction d'onde d'une particule dans une boîte tridimensionnelle cubique de coté a est

$$\varphi_{n,m,p}(x, y, z) = \left(\frac{2}{a}\right)^{3/2} \sin\left(n \frac{\pi}{a} x\right) \cdot \sin\left(m \frac{\pi}{a} y\right) \cdot \sin\left(p \frac{\pi}{a} z\right)$$

Le vecteur d'onde associé à cette particule est

$$\vec{k} = \frac{\pi}{a} (n \cdot \vec{e}_x + m \cdot \vec{e}_y + p \cdot \vec{e}_z) \quad \text{tel que } n, m, p \in \mathbb{N}^*$$

Et l'énergie de la particule s'écrit

$$E_{n,m,p} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} (n^2 + m^2 + p^2)$$

2. Calculer le nombre d'états d'énergie inférieure à une valeur E .

Les états (fonction d'ondes) permis à la particule peuvent être représenté dans l'espace (k_x, k_y, k_z) comme le montre la figure ci-dessous, où chaque point représente un état de la particule défini par les nombres quantiques (n, m, p) .

Si on fixe une valeur de l'énergie E on fixe alors la valeur du module du vecteur d'onde k . dans l'espace des états (k_x, k_y, k_z) les point correspondants à $(k = \text{constante})$ sont donnés par

$$k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = k^2 = \text{constante}$$

Ils forment une sphère de rayon $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$.

Les états ayant une énergie inférieure à une valeur E donnée se trouvent à l'intérieur de cette sphère.

Pour calculer le nombre de ces états, il suffit de diviser le volume total des états à l'intérieur de la sphère (le huitième de la sphère correspondant aux valeurs positives de n, m, p) par le volume correspondant à chaque état et qui est égal à $(\pi/a)^3$.

$$1 \text{ état} \rightarrow \left(\frac{\pi}{a}\right)^3$$

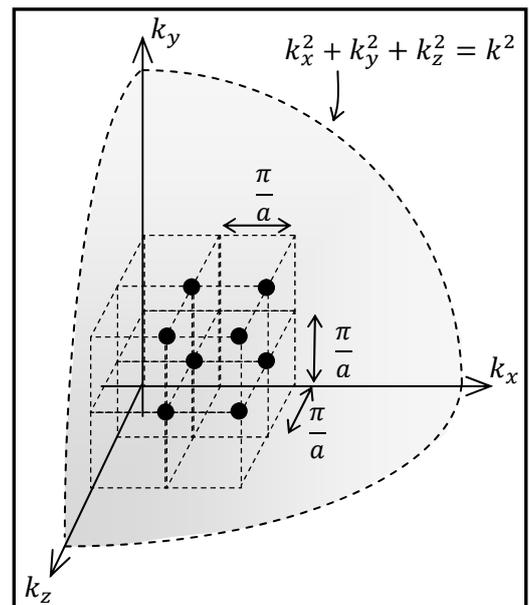
$$N \text{ états} \rightarrow \left(\frac{1}{8}\right) \frac{4}{3} \pi k^3$$

D'où

$$N(k) = \frac{a^3}{6\pi^2} k^3$$

Ce qui donne

$$N(E) = \frac{a^3}{6\pi^2} \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{3/2}$$



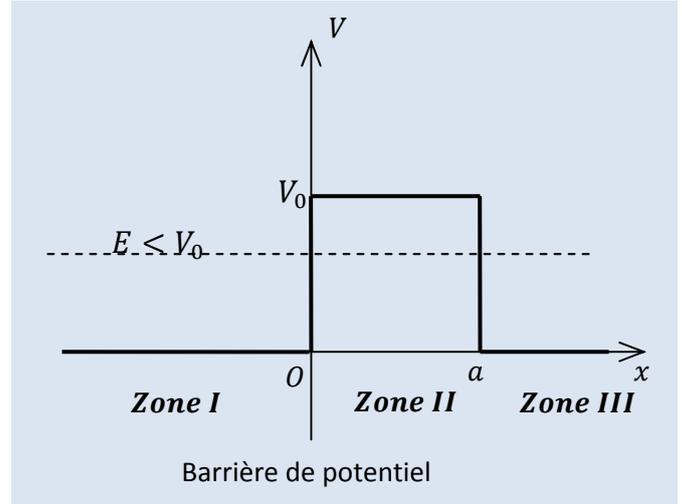
3. En déduire la densité d'état.

Le nombre d'états compris entre une énergie E et $E + dE$ par unité d'énergie dE

$$D(E) = \frac{N(E + dE) - N(E)}{dE} \Rightarrow D(E) = \frac{dN(E)}{dE} = \frac{a^3}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \sqrt{E}$$

EXERCICE 09 : Barrière de Potentiel – effet tunnel.

$$\begin{cases} V(x) = V_0 & \text{pour } x \in [0, a] \\ V(x) = 0 & \text{ailleurs} \end{cases}$$



1. Equation de Schrödinger indépendante du temps.

$$\begin{cases} \text{zone I :} & -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi_1(x)}{dx^2} = E \cdot \varphi_1(x) \\ \text{zone II :} & -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi_2(x)}{dx^2} + V_0 \cdot \varphi_2(x) = E \cdot \varphi_2(x) \\ \text{zone III :} & -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi_3(x)}{dx^2} = E \cdot \varphi_3(x) \end{cases}$$

2. Solutions des équations pour $E < V_0$.

$$\begin{cases} \varphi_1(x) = A_1 \cdot e^{+ikx} + B_1 \cdot e^{-ikx} \\ \varphi_2(x) = A_2 \cdot e^{+\rho x} + B_2 \cdot e^{-\rho x} \\ \varphi_3(x) = A_3 \cdot e^{+ikx} + B_3 \cdot e^{-ikx} \end{cases} \quad \text{avec} \quad k = \sqrt{\frac{2m \cdot E}{\hbar^2}} \quad \text{et} \quad \rho = \sqrt{\frac{2m \cdot (V_0 - E)}{\hbar^2}}$$

Pour une particule provenant de $x = -\infty$, l'onde plane $B_3 \cdot e^{-ikx}$ n'a pas de sens physique. Donc, nous posons $B_3 = 0$.

La continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée première en $x = 0$ donne :

$$\begin{cases} A_1 + B_1 = A_2 + B_2 & \dots \dots \dots (1) \\ A_1 - B_1 = \frac{\rho}{ik} (A_2 - B_2) & \dots \dots \dots (2) \end{cases}$$

La continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée première en $x = a$ donne :

$$\begin{cases} A_2 \cdot e^{+\rho a} + B_2 \cdot e^{-\rho a} = A_3 \cdot e^{+ika} & \dots \dots \dots (3) \\ A_2 \cdot e^{+\rho a} - B_2 \cdot e^{-\rho a} = \frac{ik}{\rho} A_3 \cdot e^{+ika} & \dots \dots \dots (4) \end{cases}$$

$$(3) + (4) \quad \Rightarrow \quad A_2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{ik}{\rho} \right) A_3 \cdot e^{i(k+i\rho)a}$$

$$(3) - (4) \quad \Rightarrow \quad B_2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{ik}{\rho} \right) A_3 \cdot e^{i(k-i\rho)a}$$

$$(1) + (2) \quad \Rightarrow \quad A_1 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{i\rho}{k} \right) A_2 + \frac{1}{2} \left(1 + \frac{i\rho}{k} \right) B_2$$

$$(1) - (2) \quad \Rightarrow \quad B_1 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{i\rho}{k} \right) A_2 + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{i\rho}{k} \right) B_2$$

En remplaçant A_2 et B_2 on trouve :

$$\boxed{A_1 = A_3 \cdot e^{ika} \left(\cosh \rho a - \frac{i k^2 - \rho^2}{2 k \rho} \sinh \rho a \right)} \quad \text{et} \quad \boxed{B_1 = A_3 \cdot e^{ika} \left(-\frac{i k^2 + \rho^2}{2 k \rho} \sinh \rho a \right)}$$

La constante A_3 est calculée à partir de la condition de normalisation.

3. Coefficient de transmission T .

$$T = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2} = \frac{4\rho^2 k^2}{4\rho^2 k^2 \cdot \cosh^2 \rho a + (k^2 - \rho^2)^2 \cdot \sinh^2 \rho a}$$

Ou

$$T = \frac{4E(V_0 - E)}{4E(V_0 - E) \cdot \cosh^2(\sqrt{2m(V_0 - E)} \cdot a/\hbar) + V_0^2 \cdot \sinh^2(\sqrt{2m(V_0 - E)} \cdot a/\hbar)}$$

4. A.N. : $E = 1 \text{ eV}$, $V_0 = 2 \text{ eV}$ ($V_0 - E = 1 \text{ eV}$), $a = 1 \text{ \AA}$.

$$T = \frac{1}{\cosh^2(\sqrt{2m(V_0 - E)} \cdot a/\hbar) + \sinh^2(\sqrt{2m(V_0 - E)} \cdot a/\hbar)} = \frac{1}{\cosh(2\sqrt{2m(V_0 - E)} \cdot a/\hbar)}$$

Dans le cas d'un électron : $m = m_e = 9,1 \times 10^{-31} \text{ kg}$

$$T = 0,9868$$

Dans le cas d'un proton : $m = m_p = 1,67 \times 10^{-27} \text{ kg}$

$$T = 0,0018$$

EXERCICE 10 : Potentiel delta

$$V(x) = V_0 \cdot \delta(x - a)$$

Équation de Schrödinger indépendante du temps

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + V_0 \cdot \delta(x - a) \cdot \varphi(x) = E \cdot \varphi(x)$$

En intégrant l'équation de Schrödinger indépendante du temps entre $a - \varepsilon$ et $a + \varepsilon$.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} dx + V_0 \cdot \int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} \delta(x - a) \cdot \varphi(x) \cdot dx = E \cdot \int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} \varphi(x) \cdot dx$$

Les intégrales du premier membre

$$\int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} dx = \left[\frac{d\varphi(x)}{dx} \right]_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} = \frac{d\varphi_2(x)}{dx} \Big|_{a+\varepsilon} - \frac{d\varphi_1(x)}{dx} \Big|_{a-\varepsilon}$$

Et

$$\int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} \delta(x - a) \cdot \varphi(x) \cdot dx = \int_{-\infty}^{a-\varepsilon} 0 \cdot \varphi(x) \cdot dx + \int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} \delta(x - a) \cdot \varphi(x) \cdot dx + \int_{a+\varepsilon}^{+\infty} 0 \cdot \varphi(x) \cdot dx$$

$$\int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} \delta(x - a) \cdot \varphi(x) \cdot dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - a) \cdot \varphi(x) \cdot dx = \varphi(a)$$

Et l'intégrale du second membre

$$\int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} \varphi(x) \cdot dx = [\Phi(x)]_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} = \Phi(a + \varepsilon) - \Phi(a - \varepsilon)$$

Ce qui donne

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d\varphi_2(x)}{dx} \Big|_{a+\varepsilon} - \frac{d\varphi_1(x)}{dx} \Big|_{a-\varepsilon} \right) + V_0 \cdot \varphi(a) = E \cdot (\Phi(a + \varepsilon) - \Phi(a - \varepsilon))$$

En faisant tendre ε vers 0.

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{d\varphi_2(x)}{dx} \Big|_{a+\varepsilon} = \frac{d\varphi_2(x)}{dx} \Big|_{x=a} \quad \text{et} \quad \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{d\varphi_1(x)}{dx} \Big|_{a-\varepsilon} = \frac{d\varphi_1(x)}{dx} \Big|_{x=a}$$

$\varphi(a)$ étant constante

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} (\varphi(a)) = \varphi(a) = \varphi_1(a) = \varphi_2(a)$$

La primitive $\Phi(x)$ étant dérivable en a , elle est donc continue.

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \Phi(a + \varepsilon) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \Phi(a - \varepsilon) = \Phi(a)$$

En remplaçant dans l'équation de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d\varphi_2(x)}{dx} \Big|_{x=a} - \frac{d\varphi_1(x)}{dx} \Big|_{x=a} \right) + V_0 \cdot \varphi(a) = 0$$

Ce qui donne la discontinuité de la dérivée première en $(x = a)$.

$$\boxed{\frac{d\varphi_2(x)}{dx} \Big|_{x=a} - \frac{d\varphi_1(x)}{dx} \Big|_{x=a} = \frac{2mV_0}{\hbar^2} \cdot \varphi(a)}$$

Les états stationnaires d'une telle particule peuvent être écrits sous la forme :

$$\begin{aligned} \varphi_1(x) &= A_1 \cdot e^{ikx} + B_1 \cdot e^{-ikx} && \text{pour } x < a \\ \varphi_2(x) &= A_2 \cdot e^{ikx} + B_2 \cdot e^{-ikx} && \text{pour } x > a \end{aligned}$$

Avec $k = \sqrt{2m \cdot E / \hbar^2}$

En écrivant la continuité de la fonction d'onde

$$\begin{aligned} \varphi_2(a) &= \varphi_1(a) \\ A_2 \cdot e^{ika} + B_2 \cdot e^{-ika} &= A_1 \cdot e^{ika} + B_1 \cdot e^{-ika} \quad \dots \dots \dots (1) \end{aligned}$$

En écrivant la discontinuité de la dérivée première

$$\begin{aligned} \left. \frac{d\varphi_2(x)}{dx} \right|_{x=a} - \left. \frac{d\varphi_1(x)}{dx} \right|_{x=a} &= \frac{2mV_0}{\hbar^2} \cdot \varphi_1(a) = \frac{2mV_0}{\hbar^2} \cdot \varphi_2(a) \\ A_2 \cdot e^{ika} - B_2 \cdot e^{-ika} - A_1 \cdot e^{ika} + B_1 \cdot e^{-ika} &= \frac{1}{ik} \frac{2mV_0}{\hbar^2} (A_1 \cdot e^{ika} + B_1 \cdot e^{-ika}) \\ A_2 \cdot e^{ika} - B_2 \cdot e^{-ika} &= \left(1 + \frac{1}{ik} \frac{2mV_0}{\hbar^2}\right) A_1 \cdot e^{ika} + \left(-1 + \frac{1}{ik} \frac{2mV_0}{\hbar^2}\right) B_1 \cdot e^{-ika} \quad \dots \dots \dots (2) \end{aligned}$$

$$(1) + (2) \quad \Rightarrow \quad A_2 = \left(1 + \frac{1}{ik} \frac{mV_0}{\hbar^2}\right) A_1 + \left(\frac{1}{ik} \frac{mV_0}{\hbar^2}\right) B_1 \cdot e^{-2ika}$$

$$(1) - (2) \quad \Rightarrow \quad B_2 = \left(-\frac{1}{ik} \frac{mV_0}{\hbar^2}\right) A_1 \cdot e^{+2ika} + \left(1 - \frac{1}{ik} \frac{mV_0}{\hbar^2}\right) B_1$$

D'où la matrice définie par :

$$\begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad M = \begin{pmatrix} 1 + \frac{1}{ik} \frac{mV_0}{\hbar^2} & \left(\frac{1}{ik} \frac{mV_0}{\hbar^2}\right) e^{-2ika} \\ \left(-\frac{1}{ik} \frac{mV_0}{\hbar^2}\right) e^{+2ika} & 1 - \frac{1}{ik} \frac{mV_0}{\hbar^2} \end{pmatrix}$$

EXERCICE 11 : Potentiel delta

$$V(x) = V_0 \cdot \delta(x - a)$$

Pour $E < 0$ la discontinuité de la dérivée première est la même que pour l'exercice précédent.

$$\boxed{\left. \frac{d\varphi_2(x)}{dx} \right|_{x=a} - \left. \frac{d\varphi_1(x)}{dx} \right|_{x=a} = \frac{2mV_0}{\hbar^2} \cdot \varphi(a)}$$

Les états stationnaires d'une telle particule peuvent être écrits sous la forme :

$$\begin{aligned} \varphi_1(x) &= A_1 \cdot e^{\rho x} + B_1 \cdot e^{-\rho x} && \text{pour } x < a \\ \varphi_2(x) &= A_2 \cdot e^{\rho x} + B_2 \cdot e^{-\rho x} && \text{pour } x > a \end{aligned}$$

Avec $\rho = \sqrt{-2m \cdot E / \hbar^2}$

En écrivant la continuité de la fonction d'onde

$$\begin{aligned} \varphi_2(a) &= \varphi_1(a) \\ A_2 \cdot e^{\rho a} + B_2 \cdot e^{-\rho a} &= A_1 \cdot e^{\rho a} + B_1 \cdot e^{-\rho a} \quad \dots \dots \dots (1) \end{aligned}$$

En écrivant la discontinuité de la dérivée première

$$\begin{aligned} \left. \frac{d\varphi_2(x)}{dx} \right|_{x=a} - \left. \frac{d\varphi_1(x)}{dx} \right|_{x=a} &= \frac{2mV_0}{\hbar^2} \cdot \varphi_1(a) = \frac{2mV_0}{\hbar^2} \cdot \varphi_2(a) \\ A_2 \cdot e^{\rho a} - B_2 \cdot e^{-\rho a} - A_1 \cdot e^{\rho a} + B_1 \cdot e^{-\rho a} &= \frac{1}{\rho} \frac{2mV_0}{\hbar^2} (A_1 \cdot e^{\rho a} + B_1 \cdot e^{-\rho a}) \\ A_2 \cdot e^{\rho a} - B_2 \cdot e^{-\rho a} &= \left(1 + \frac{1}{\rho} \frac{2mV_0}{\hbar^2}\right) A_1 \cdot e^{\rho a} + \left(-1 + \frac{1}{\rho} \frac{2mV_0}{\hbar^2}\right) B_1 \cdot e^{-\rho a} \quad \dots \dots \dots (2) \end{aligned}$$

$$(1) + (2) \quad \Rightarrow \quad A_2 = \left(1 + \frac{1}{\rho} \frac{mV_0}{\hbar^2}\right) A_1 + \left(\frac{1}{\rho} \frac{mV_0}{\hbar^2}\right) B_1 \cdot e^{-2\rho a}$$

$$(1) - (2) \quad \Rightarrow \quad B_2 = \left(-\frac{1}{\rho} \frac{mV_0}{\hbar^2}\right) A_1 \cdot e^{+2\rho a} + \left(1 - \frac{1}{\rho} \frac{mV_0}{\hbar^2}\right) B_1$$

D'où la matrice définie par :

$$\begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad \boxed{M = \begin{pmatrix} 1 + \frac{1}{\rho} \frac{mV_0}{\hbar^2} & \left(\frac{1}{\rho} \frac{mV_0}{\hbar^2}\right) e^{-2\rho a} \\ \left(-\frac{1}{\rho} \frac{mV_0}{\hbar^2}\right) e^{+2\rho a} & 1 - \frac{1}{\rho} \frac{mV_0}{\hbar^2} \end{pmatrix}}$$