« Série n° 3»

La résolution de l'équation de Schrödinger à une dimension

Exercice 1

On considère une particule dans un puits de potentiel infini à une dimension, de largeur L, c'est-à-dire que le potentiel auquel est soumise la particule est :

$V(x) = 0$ si $0 \leq x \leq L$ $V(x) \to +\infty$ ailleurs.

1/Ecrire et résoudre l'équation de schrödinger indépendante du temps dans les trois régions de l'espace on posera $K = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$.

Et on donnera la forme générale des solutions stationnaires de la particule.

2/Ecrire les conditions de continuité des solutions. Montrer alors que l'énergie est quantifiée

3/ La particule est décrite à l'instant t =0 par la fonction d'onde

$$\psi(x,0) = A'(\sin\frac{\pi x}{L} + \sin\frac{2\pi x}{L}) \qquad \text{pour } 0 \leq x \leq L$$

a/Calculer la constante de normalisation *A'*.

b/Calculer la fonction d'onde à l'instant t.

4/ On suppose maintenant que à l'instant t=0 la particule a pour fonction d'onde $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin(\frac{n\pi}{L}x)$

Où n décrit les états possibles de la particule (n=1,2,3…) son énergie quantifiée est $E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$.

a-Quelle est l'expression de la densité de probabilité $\rho_2(x)$ pour le nombre quantique n=2 ?

b- Pour n=2 quelle est la valeur de la densité de probabilité de présence de la particule en x=L/2

c-Tracer $\psi_2(x)$ et $\rho_2(x)$.

d- Pour n=4, quelle est la valeur de la probabilité de présence de la particule dans l'intervalle L/4<x<L/2 ?

Exercice 2

On considère de masse m et d'énergie E se déplaçant selon de sens de croissance de x et soumise au potentiel :

$$V(x) = \begin{cases} -V & \text{si } x<0 \\ +V & \text{si } 0 \leq x \end{cases}$$

A/ On suppose que E > V

1- Ecrire et résoudre l'équation de Schrödinger indépendante du temps dans chacune des régions.

2- Chercher les fonctions d'onde d'états stationnaires de la particule.

On exprimera les amplitudes de différentes ondes associées à cette particule en fonction de l'amplitude de l'onde incidente.

3- Calculer les coefficients de réflexion R et de transmission T de cette marche de potentiel Conclure.

B/ Etudier le cas ou 0<E<V, on déterminera le coefficient de réflexion, conclure

Exercice 3

Une particule quantique d'énergie E est envoyée sur une barrière de potentiel de hauteur V_0 :

$$V_0 = \begin{cases} 0 \quad \text{pour } x \prec 0 \\ V_0 \text{ pour } 0 \prec x \prec a \\ 0 \quad \text{pour } a \prec x \end{cases}$$

1/ On prend $E<V_0$, décrire la dynamique d'une particule classique envoyée sur la barrière depuis $x=-\infty$

2/ Ecrire l'équation de Schrödinger indépendante du temps dans les trois régions de l'espace.

On introduira $K = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ et $\rho = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$.

3/On cherche une solution décrivant une onde incidente d'énergie E arrivant par la gauche.

Montrer qu'une telle solution est de la forme :

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{-iKx} + Be^{iKx} \\ Ce^{-\rho x} + De^{\rho x} \\ Fe^{iKx} \end{cases}$$

4/En écrivant les conditions de continuité, déduire des relations entre les amplitudes A, B, C, D et F.

5/ On définit les coefficients de transmission et réflexion par : $T=|\frac{F}{B}|^2$ et $R=|\frac{A}{B}|^2$. (pour calculer A/B et F/B on commence par éliminer C et D dans le système d'équations trouvé dans la question 4. Exprimer T et R en fonction de K et ρ puis en fonction de E et V_0 et a.

6/Application Numérique :

Calculer le coefficient de transmission d'une barrière de hauteur 2 eV et de largeur 3 A^0 pour des électrons d'énergie E=1eV. On donne $m_e=9.1\ 10^{-31}$Kg et $\hbar=1.05\ 10^{-34}$Js.

Exercice 4 supplémentaire

On considère une barrière de potentiel rectangulaire (largeur L et hauteur V) dans le cas où E=V. le vecteur d'onde de la particule incidente est k.

1/ Ecrire et résoudre l'équation de Schrödinger dans les trois régions.

Montrer que la forme de la fonction d'onde à l'intérieur de la barrière (région2) est

$\psi_2 = Cx+D$ où C et D sont des constantes complexe.

2/ Ecrire les différentes conditions aux limites et obtenir une expression pour le coefficient de transmission. Vérifier explicitement que le coefficient a le bon comportement lorsque L=0

Où $L\to\infty$.

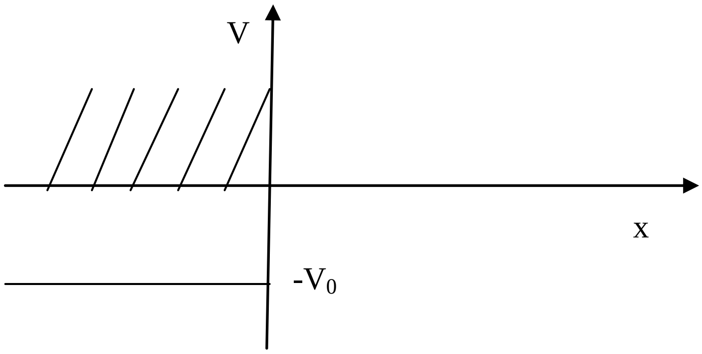
3/Pour quel valeur de KL le coefficient de transmission est-il égal ½

Exercice 5 supplémentaire

Les électrons de conduction dans les métaux sont piégés à l'intérieure du métal par un potentiel moyen appelé le potentiel interne du métal. Calculer pour un modèle à une dimension donné par V(x)= --V(0) si x<0 et V(x)=0 si x>0 (voir la fig), la probabilité de réflexion et de transmission pour un électron de conduction qui s'approche de la surface du métal avec une énergie totale E

a) Si E >0

b) Si $-V_0$ <E<0



.