Potentiels ponctuels δ

$\hbar = 1$

1) Le puits δ

$V(x) = -\frac{K}{m}\delta(x) \Rightarrow -\frac{1}{2m}\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} - \frac{K}{m}\delta(x)\varphi(x) = E\varphi(x)$

- Si $x \neq 0 \Rightarrow -\frac{1}{2m}\frac{d^2\varphi}{dx^2} = E\varphi(x)$ (equation de Schrodinger pour un quanton libre)
- Si $x = 0 \Rightarrow -\frac{1}{2m}\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}\varphi''(x)\,dx - \frac{K}{m}\varphi(0) = E\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}\varphi(x)\,dx$

on fait $\varepsilon \to 0 \Rightarrow -\frac{1}{2}(\varphi'(0_+) - \varphi'(0_-)) - K\varphi(0) = 0$

- Etats liés : pour $E < 0$. on pose $k^2 = -2mE \Rightarrow \varphi''(x) = k^2\varphi(x)$

$\Rightarrow \varphi(x) = \alpha e^{kx} + \beta e^{-kx}$ mais $\varphi \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ donc $\varphi(x) = \alpha e^{kx}$ si $x < 0$

et $\varphi(x) = \beta e^{-kx}$ si $x > 0$. on doit avoir $\varphi(x)$ symétrique $\Rightarrow \alpha = \beta$ donc

$\varphi(x) = \alpha\, e^{-k|x|}$. Normalisation $\Rightarrow \alpha = \sqrt{k}$.

en $x = 0$: $-\frac{1}{2}(-k\alpha - k\alpha) - K\alpha = 0 \Rightarrow k = K \Rightarrow \varphi(x) = \sqrt{K}\, e^{-K|x|}$

on a un seul état lié d'energie $E_0 = -\frac{K^2}{2m}$

- Etats de diffusion : pour $E = \frac{k'^2}{2m} > 0 \Rightarrow -\varphi''(x) = k'^2\varphi(x)$

$\Rightarrow \varphi(x) = \alpha e^{ik'x} + \beta e^{-ik'x}$ si $x > 0$ et $\varphi(x) = \alpha' e^{ik'x} + \beta' e^{-ik'x}$ si $x < 0$

on a $\beta = 0$ et on prend $\alpha' = 1$ (intensité des quantons incidents) on pose $A_t = \alpha$

et $A_r = \beta'$ donc $\varphi(x>0) = A_t\, e^{ik'x}$ et $\varphi(x<0) = e^{ik'x} + A_r\, e^{-ik'x}$

continuité de $\varphi(x) \Rightarrow A_t = 1 + A_r$. On a : $-\frac{1}{2}\left(ik'\alpha - (ik' - ik'\beta')\right) - K\alpha = 0$

$\Rightarrow -ik'(\alpha - 1) - K\alpha = 0 \quad (\alpha = 1 + \beta') \Rightarrow \alpha = ik'/(ik' + K)$ et $\beta' = -K/(ik' + K)$

$\Rightarrow \mathcal{R} = |\beta'|^2 = K^2/(k'^2 + K^2)$ et $\mathcal{T} = |\alpha|^2 = k'^2/(k'^2 + K^2)$

2) La barrière δ

$V(x) = \frac{K}{m}\delta(x)$ on reprend le raisonnement precedent en faisant $K \to -K$

- Etats de diffusion : on aura $\alpha = ik'/(ik' - K)$ et $\beta = K/(ik' - K)$
- Etats liés : $E = -\frac{k^2}{2m}$

si $x \neq 0 \Rightarrow \varphi''(x) = k^2\varphi(x) \Rightarrow \varphi(x) = \alpha\, e^{-k|x|}$ avec $k > 0$

si $x = 0 \Rightarrow k = -K < 0$ impossibilité $\Rightarrow$ il n'y a pas d'états liés pour une barrière δ

3) Le peigne de Kronig-Penney.

$V(x) = \frac{K}{m}\sum_{n=-\infty}^{+\infty}\delta(x-na)$, $K>0$; on pose $k^2 = 2mE$

$\varphi_n(x) = A_n e^{ik(x-na)} + B_n e^{-ik(x-na)}$; $\varphi_{n+1}(x) = A_{n+1} e^{ik(x-(n+1)a)} + B_{n+1} e^{-ik(x-(n+1)a)}$

$\varphi_{n+1}(x) = A_{n+1} e^{-ika} e^{ik(x-na)} + B_{n+1} e^{ika} e^{-ik(x-na)}$

on a la relation matricielle : $\begin{pmatrix}A_n\\B_n\end{pmatrix} = \check M \begin{pmatrix}A_{n+1}\\B_{n+1}\end{pmatrix}$ avec $\check M = \begin{pmatrix} M_1 e^{-ika} & \bar M_3 e^{ika} \\ M_3 e^{-ika} & \bar M_1 e^{ika}\end{pmatrix}$

et où $M_1 = 1/A_t$, $M_3 = A_r/A_t$ avec $A_t = ik/(ik-K)$, $A_r = K/(ik-K)$

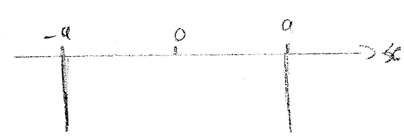
on doit avoir : $\varphi_{n+1}(x) = e^{i\delta}\cdot\varphi_n(x)$ (δ étant une phase) , donc :

$\begin{pmatrix}A_n\\B_n\end{pmatrix} = e^{-i\delta}\begin{pmatrix}A_{n+1}\\B_{n+1}\end{pmatrix} = \check M \begin{pmatrix}A_{n+1}\\B_{n+1}\end{pmatrix}$ où $\det \check M = 1$. Deux cas se présentent :

- on a 2 valeurs propres réelles (une <1, l'autre >1) mais alors $\check M^n \to \infty$
- on a 2 valeurs propres conjuguées de module 1 , dans ce cas on aura :

$|\mathrm{tr}\,\check M| \leq 2 \Rightarrow |\cos ka + \frac{K}{k}\sin ka| \leq 1$ ⇒ bandes permises et bandes interdites pour l'énergie.

4) puits de potentiel δ double



$V(x) = -\frac{K}{m}\delta(x-a) - \frac{K}{m}\delta(x+a)$

. États liés : $E > 0$, $E = -\frac{K'^2}{2m}$. on a les fonctions d'onde :

$\varphi(x>a) = \alpha e^{-K'x}$; $\varphi(x<-a) = \pm\alpha e^{K'x}$ (symétrie ou antisymétrie)

$\varphi(|x|<a) = \beta\,\mathrm{ch}\,K'x$ (symétrie) ou $\varphi(|x|<a) = \beta\,\mathrm{sh}\,K'x$ (antisymétrie)

. Cas où φ est symétrique. Schrödinger : $-\frac{1}{2m}\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} - \frac{K}{m}(\delta(x-a)+\delta(x+a))\varphi(x) = E\varphi(x)$

φ continue ⇒ $\alpha e^{-K'a} = \beta\,\mathrm{ch}\,K'a$

φ' discontinue ⇒ $-\frac{1}{2}(-K'\alpha e^{-K'a} - K'\beta\,\mathrm{sh}\,K'a) - K\alpha e^{-K'a} = 0 \Rightarrow \frac{1}{2}K'\beta\,\mathrm{sh}\,K'a = \alpha(K-\frac{1}{2}K')e^{-K'a}$

on fait le rapport ⇒ $K - \frac{1}{2}K' = \frac{1}{2}K'\,\mathrm{th}\,K'a$ ⇒ $\mathrm{th}\,K'a = 2\frac{Ka}{K'a} - 1$

. Cas où φ est antisymétrique.

on a : $\coth K'a = 2\frac{Ka}{K'a} - 1$

à l'origine : $K \sim 0 \Rightarrow \coth K'a \sim 1/K'a$

si $2Ka < 1$ → pas d'état lié

si $2Ka > 1$ → 1 état lié