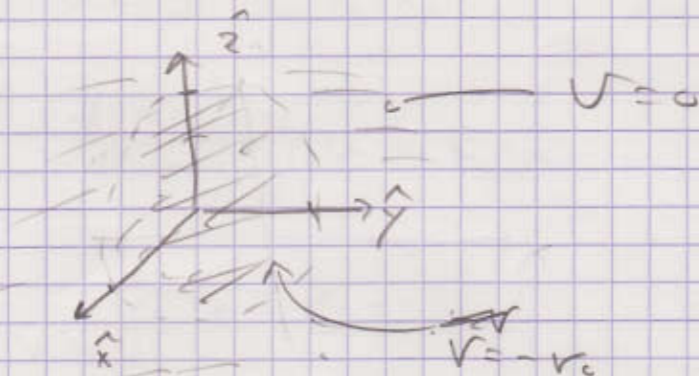
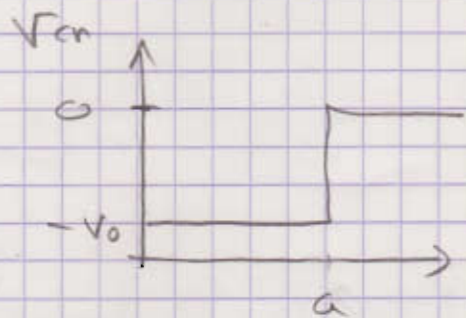


Puits Sphérique

1)

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & \text{si } 0 \leq r \leq a \quad (\text{region I}) \\ 0 & \text{si } r > a \quad (\text{region II}) \end{cases}$$



Coordonnées sphériques:

$$\nabla^2 = \frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} + \frac{d^2}{dz^2} =$$

$$= \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d}{d\theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \left(\frac{d^2}{d\varphi^2} \right)$$

Equation de Schrödinger: $-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V \psi = E \psi$

On cherche solution séparables: $\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) Y(\theta, \varphi)$

$$\Rightarrow \left\{ \frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2} (V(r) - E) \right\} +$$

$$+ \frac{1}{Y} \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{dY}{d\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{d^2 Y}{d\varphi^2} \right\} = 0$$

Deux termes indépendants, leur somme = 0

$\Rightarrow$ les deux termes sont constants: $\{ \ell(\ell+1) \}$

Le potentiel radial :

$$\frac{d}{dr} \left(\hbar^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{2m r^2}{\hbar^2} (V_{cr} - E) R = l(l+1) R$$

Change de variables : $u(r) = r R(r)$

$$\Rightarrow - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dr^2} + \left\{ V_{cr} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right\} u = E u$$

potentiel effectif : $V_{eff} = V_{cr} + \underbrace{\frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2}}_{\text{barrière centrifugale !}}$

ici, on a $s \Rightarrow l=0$

$$\Rightarrow - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} u(r) + (V_{cr} - E) u(r) = 0$$

C'est comme un puits "normal", une dimension !!

$$\Rightarrow \begin{cases} u_I = A \sin kr + B \cos kr \\ u_{II} = C e^{-Kr} \end{cases}$$

Mais ; $R(r) = \frac{u(r)}{r}$ et $\frac{\cos kr}{r} \rightarrow \infty$ quand $r \rightarrow 0$

$$\Rightarrow B=0 ; u_I = A \sin kr$$

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - |E|) ; K^2 = \frac{2m |E|}{\hbar^2}$$

continuité à $r=a$: $\psi_I(r) = \psi_{II}(r)$ et $\frac{d}{dr} \psi_I(r) = \frac{d}{dr} \psi_{II}(r)$

$$\Rightarrow \begin{cases} A \sin ka = C e^{-ka} \\ kA \cos ka = -K C e^{-ka} \end{cases} \Rightarrow K = -k \frac{\cos ka}{\sin ka} = -k \cot ka$$

$$\begin{cases} k^2 = \frac{2m(V_0 - |E|)}{\hbar^2} = \frac{2mV_0}{\hbar^2} - \frac{2m|E|}{\hbar^2} \\ K^2 = \frac{2m|E|}{\hbar^2} \end{cases}$$

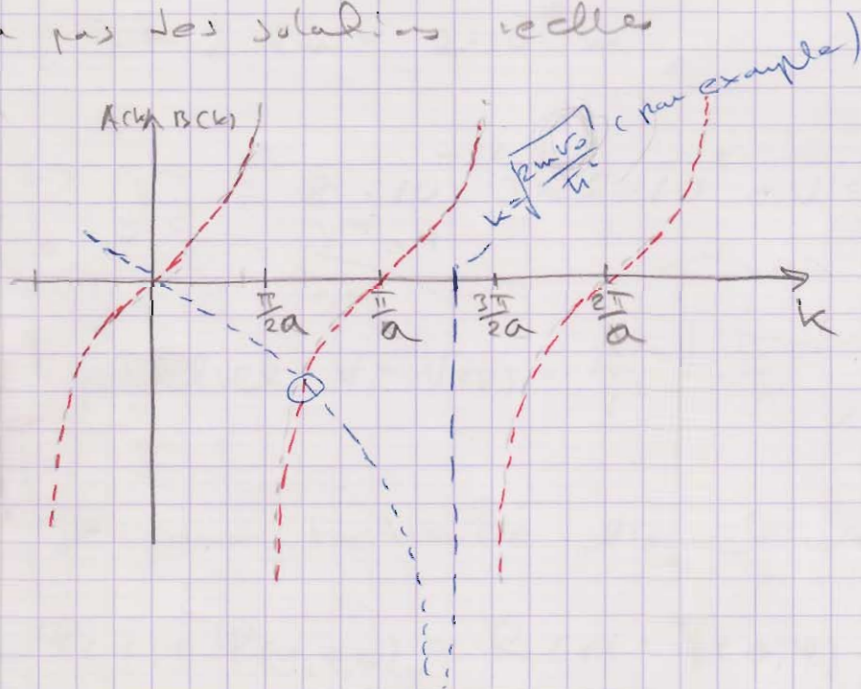
$$\Rightarrow K^2 + k^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} \Rightarrow K = \left(\frac{2mV_0}{\hbar^2} - k^2 \right)^{1/2}$$

$$\Rightarrow \cot ka = -\frac{1}{k} \left(\frac{2mV_0}{\hbar^2} - k^2 \right)^{1/2}$$

$A(k)$ $B(k)$

$$\tan ka = - \frac{k}{\left(\frac{2mV_0}{\hbar^2} - k^2 \right)^{1/2}}$$

Pour R constante, les 2 équations sont des fonctions de k . La droite : une négative fonction linéaire, divisée par une racine. Quand la racine $= 0$, la fonction à droite $\rightarrow -\infty$. Pour la racine < 0 , il n'y a pas des solutions réelles



$$B(k) \rightarrow -\infty$$

$$\text{si } k = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}}$$

$$\Rightarrow \text{si } \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} < \frac{\pi}{2a} \Rightarrow \text{pas de solutions!}$$

$$\Rightarrow \text{et si } k < \frac{\pi}{2a} \Rightarrow \text{---}$$

cela correspond au cas impair du pair à 1 dimension.

(il n'y a pas de cas pair!)

2) une seule solution si : $\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} = \frac{\pi}{2R}$

$$\Rightarrow V_0 = \frac{\pi^2}{4R^2} \cdot \frac{\hbar^2}{2m} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8mR^2}$$

$$m = \frac{m_n m_p}{m_n + m_p} \approx m_p \approx m_n \approx 1.7 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$$

$$R \approx 2.5 \text{ fm} = 2 \cdot 10^{-15} \text{ m}$$

$$\Rightarrow V_0 \approx 8 \cdot 10^{-11} \text{ J} \approx 5 \cdot 10^8 \text{ eV} = 500 \text{ MeV} \gg B$$

3) Le potentiel $V = V(r) = \frac{A}{r^2} - \frac{B}{r}$, $A, B > 0$

si je peux factoriser l'équation d'onde :

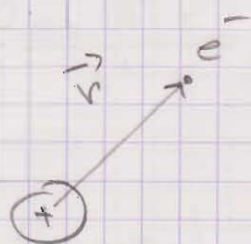
$$\Psi(\vec{r}) = \Psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r) \cdot Y(\vartheta, \varphi)$$

La partie radiale :

$$\left(-\frac{1}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \left(\frac{A}{r^2} - \frac{B}{r} \right) \right) R(r) = E R(r)$$

Comparaison avec l'atome d'hydrogène

H :



Potential Coulomb,
 $V(r)$

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 + V(r) \right\} \Psi = E \Psi$$

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r \frac{d}{dr} \right) - \frac{1}{r^2} \vec{e}^2$$

$$\vec{e}^2 = \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d}{d\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{d^2}{d\varphi^2} \right\}$$

Factorisation : $\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r) Y(\theta, \varphi)$

$$\underbrace{\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{2m_e r^2}{\hbar^2} (V(r) - E)}_r = \underbrace{\frac{1}{Y} \vec{e}^2 Y}_{\theta, \varphi} = \text{constante}$$

→ sphérique harmonique

le partie radiale :

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{2m_e r^2}{\hbar^2} (V(r) - E) = \ell(\ell+1)$$

avec $V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$

avec on substitue : $p(r) = r R(r)$

$$\Rightarrow \frac{d^2 p}{ds^2} + \left\{ -\frac{\ell(\ell+1)}{s^2} + \frac{\lambda}{s} - 1 \right\} p = 0$$

$$\left(s^2 = \frac{2m_e |E| r^2}{\hbar^2}, \quad \lambda = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sqrt{\frac{2m_e}{\hbar^2 |E|}} \right)$$

Même forme !

Solutions:

$$(\lambda = 2a, n \text{ entier})$$

$$E_n = - \frac{2me}{\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{1}{\lambda^2} = -hcR_\infty \frac{1}{n^2}$$

R_∞ = constante de Rydberg

$$hcR_\infty = \frac{me}{2\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 = 13.6 \text{ eV}$$

$$\Rightarrow E_n = -13.6 \text{ eV} \cdot \frac{1}{n^2}$$