Guilhem velve casquillas

Chapitre 1

Introduction aux fonctions de Bessel :

Particule dans une boite cylindrique

I.1 équations générales

I.1.1 équation de Schrödinger générale

Dans le cadre de la mécanique quantique une particule peut être considérée comme une onde. Cette description régit par des lois très précise permet de connaître avec précision le comportement de la particule dans la boite.

Une onde est caractérisé par sa fonction d'onde. Cette dernière est régit par l'équation de Schrödinger qui est de la forme :

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(\vec{r},t) + V(\vec{r},t)\Psi(\vec{r},t)} \qquad (1.1)$$

- $\hbar = \dfrac{h}{2\pi}$ h étant la constante de Planck.
- ψ étant la fonction d'onde.
- m et V représentant respectivement la masse de la particule et l'énergie potentielle du milieu.
- $i\hbar \dfrac{\partial}{\partial t}$ étant l'opérateur de l'énergie totale de la particule.
- $-\dfrac{\hbar^2}{2m}\Delta$ étant l'opérateur d'énergie cinétique.
- $V(\vec{r},t)$ étant l'opérateur d'énergie potentielle.

I.1.1 équation de Schrödinger indépendante du temps

Dans le cas ou l'énergie potentielle ne dépend pas du temps l'équation de Schrödinger peut s'écrire sous la forme

$$\boxed{\hat{H}\,\varphi(\vec{r}) = E\varphi(\vec{r})} \qquad (1.2)$$

avec $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r})$

- $\hat{H}$ est appelé opérateur Hamiltonien et E est une constante représentant l'énergie cinétique de la particule.

Résoudre l'équation (1.2) revient à trouver les énergies possibles de la particule auxquelles correspondent les états de la particule ($\varphi(\vec{r})$). A l'aide de ces équations simplifié nous allons maintenant pouvoir décrire le comportement d'une particule dans une boite cylindrique.

I.2 Equations dans le cas d'une symétrie cylindrique

I.2.1 conditions aux limites

Tout d'abord la particule étant confiné dans la boite nous pouvons poser des conditions aux limites qui nous serons utiles plus tard pour la caractérisation des solutions de nos équations différentielles. Les conditions sont les suivantes :

- $\varphi(R,\theta,z) = 0$
- $\varphi(r,\theta,0) = 0$
- $\varphi(r,\theta,L) = 0$

I.2.2 équation dans un cylindre

Dans notre problème la boite étant vide et le potentiel V étant nul l'équation qui régit la particule est indépendante du temps. Nous pouvons donc l'écrire sous la forme :

$$\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\,\varphi(r,\theta,z) + E\varphi(r,\theta,z) = 0$$

soit:

$$\Delta\varphi(r,\theta,z) + \frac{2mE}{\hbar^2}\varphi(r,\theta,z) = 0 \qquad (1,3)$$

Nous allons transposer l'équation en coordonnée cylindrique, ce qui donne :

$$\boxed{\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\varphi(r,\theta,z) + \frac{2mE}{\hbar^2}\varphi(r,\theta,z) = 0} \qquad (1,4)$$

I.2.3 séparation des variables

Afin de pouvoir séparer la variable axiale de la variable polaire nous allons chercher les solutions de la forme: $\varphi(r,\theta,z) = A(r,\theta)B(z)$

l'équation (1.3) devient:

$$B(z)\Delta A(r,\theta) + B''(z) A(r,\theta) + K^2 A(r,\theta)B(z) = 0 \qquad (1,5)$$

- avec $K^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

Apres simplification par $A(r,\theta)B(z)$, (1,5) devient :

$$\frac{\Delta A(r,\theta)}{A(r,\theta)} + \frac{B''(z)}{B(z)} + K^2 = 0 \qquad (1,6)$$

L'équation (1,6) est la somme d'une fonction de z et d'une fonction de r et θ. B(z) n'influant pas sur A(r,θ) et réciproquement je peut scinder l'équation (1,6) en deux de la manière suivante :

$$\boxed{\Delta A(r,\theta) + K_A^2 A(r,\theta) = 0} \qquad (1,7)$$

$$\boxed{B''(z) + K_B^2 B(z) = 0} \qquad (1,8)$$

- $K_A^2 + K_B^2 = K^2 = \frac{2m(E_A + E_B)}{\hbar^2}$

L'équation axiale n'étant pas primordiale dans le cadre de notre projet. Je ne traiterai, dans cette partie, que l'équation radiale.

I.3 Equation radiale

Dans notre cas, l'utilisation de coordonnées polaire semble indiquée. Dans ce cas A(r,θ) est 2π périodique, et peut donc être décomposé en série de Fourier. Nous pouvons donc poser :

$$A(r,\theta) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} c_n(r) e^{in\theta}$$

Apres le passage en coordonnées polaire et le remplacement de A(r,θ) par son développement en série de Fourier l'équation (1,7) devient :

$$\boxed{\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial \theta^2}\right) \sum_{n=-\infty}^{+\infty} c_n(r) e^{in\theta} + K_A^2 \sum_{n=-\infty}^{+\infty} c_n(r) e^{in\theta} = 0} \quad (1,9)$$

Apres simplification (1,9) devient

$$\sum_{n=-\infty}^{+\infty} \left(\frac{d^2}{dr^2} c_n(r) + \frac{1}{r}\frac{d}{dr} c_n(r) + (K_A^2 - \frac{n^2}{r^2}) c_n(r) \right) e^{in\theta} = 0 \qquad (1,10)$$

- le terme en $-\frac{n^2}{r^2}$ provient des deux dérivations successives de $e^{in\theta}$ par rapport à θ.

L'équation (1,10) ne peut être nulle que si les coefficients de sont nul. En effet $e^{in\theta}$ décrit un espace de fonctions orthogonales .

Nous cherchons donc tous les coefficients tel que pour tout n :

$$\frac{d^2}{dr^2} c_n(r) + \frac{1}{r}\frac{d}{dr} c_n(r) + (K_A^2 - \frac{n^2}{r^2}) c_n(r) = 0 \qquad (1,11)$$

on pose : z = K_Ar et $c_n(r) = f_n(K_{Ar})$
L'équation (1,11) devient :

$$\boxed{\frac{d^2}{dz^2} f_n(z) + \frac{1}{z}\frac{d}{dz} f_n(z) + (1 - \frac{n^2}{z^2}) f_n(r) = 0} \qquad (1,12)$$

Cette égalité est une équation de Bessel d'ordre n. La résolution de cette équation nécessite des outils que nous allons aborder dans les chapitres suivant.