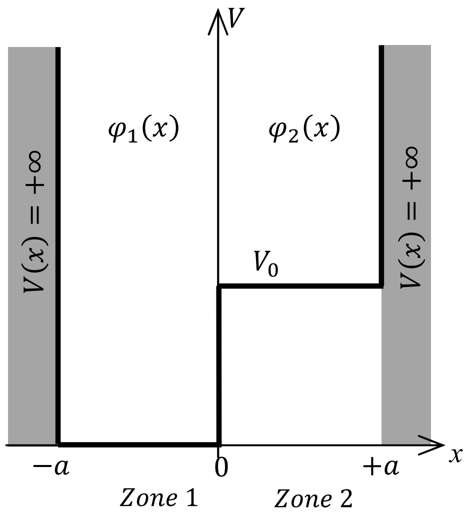
FACULTÉ DES SCIENCES ET TECHNOLOGIES

CORRIGÉ DE L'ÉPREUVE SEMESTRIELLE

MODULE : MÉCANIQUE QUANTIQUE.

EXERCICE 01: (10 points)

$$\begin{cases} V(x) = 0 & \text{pour} \quad x \in [-a, 0] \\ V(x) = V_0 & \text{pour} \quad x \in [0, +a] \\ V(x) = +\infty & \text{ailleur} \end{cases}$$



1. Equation de Schrödinger indépendante du temps.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi(x) + V(x).\varphi(x) = E.\varphi(x)$$

En remplaçant

$$\begin{cases} Zone\ 1: & -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2\varphi_1(x)}{dx^2} = E.\varphi_1(x) \\ Zone\ 2: & -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2\varphi_2(x)}{dx^2} + V_0.\varphi_2(x) = E.\varphi_2(x) \end{cases}$$

Dont les solutions sont

$$\boxed{\begin{cases} \varphi_1(x) = A_1.e^{ik_1x} + B_1.e^{-ik_1x} \\ \varphi_2(x) = A_2.e^{ik_2x} + B_2.e^{-ik_2x} \end{cases}} \quad \text{avec} \quad \boxed{k_1 = \sqrt{2m.E/\hbar^2}} \quad ; \quad \boxed{k_2 = \sqrt{2m.(E - V_0)/\hbar^2}}$$

2. Détermination des constantes

Continuité de la fonction d'onde en $x = -a$ (sa dérivée première n'est pas continue car $V \to +\infty$).

$$\varphi_1(x = -a) = 0 \quad \Rightarrow \quad A_1.e^{-ik_1a} + B_1.e^{ik_1a} = 0 \quad \text{et} \quad \boxed{B_1 = -A_1.e^{-2ik_1a}}$$

Continuité de la fonction d'onde en $x = 0$

$$\varphi_1(x = 0) = \varphi_2(x = 0) \quad \Rightarrow \quad A_1 + B_1 = A_2 + B_2 \quad \text{et} \quad A_2 + B_2 = A_1.\left(1 - e^{-2ik_1a}\right) \dots\dots (1)$$

Continuité de la dérivée première de la fonction d'onde en $x = 0$

$$\varphi_1'(x = 0) = \varphi_2'(x = 0) \quad \text{avec} \quad \begin{cases} \varphi_1'(x) = ik_1\left(A_1.e^{ik_1x} - B_1.e^{-ik_1x}\right) \\ \varphi_2'(x) = ik_2\left(A_2.e^{ik_2x} - B_2.e^{-ik_2x}\right) \end{cases}$$

Donc

$$ik_1(A_1 - B_1) = ik_2(A_2 - B_2) \quad \text{et} \quad A_2 - B_2 = \frac{k_1}{k_2}A_1.\left(1 + e^{-2ik_1a}\right) \dots\dots (2)$$

En faisant la somme $(1) + (2)$

$$2A_2 = A_1.\left(1 + \frac{k_1}{k_2} - e^{-2ik_1a} + \frac{k_1}{k_2}e^{-2ik_1a}\right) = A_1e^{-ik_1a}.\left(e^{ik_1a} - e^{-ik_1a} + \frac{k_1}{k_2}e^{ik_1a} + \frac{k_1}{k_2}e^{-ik_1a}\right)$$

Ce qui donne

$$\boxed{A_2 = A_1e^{-ik_1a}.\left\{i.\sin(k_1a) + \frac{k_1}{k_2}\cos(k_1a)\right\}}$$

En faisant la différence $(1) - (2)$

$$2B_2 = A_1.\left(1 - \frac{k_1}{k_2} - e^{-2ik_1a} - \frac{k_1}{k_2}e^{-2ik_1a}\right) = A_1e^{-ik_1a}.\left(e^{ik_1a} - e^{-ik_1a} - \frac{k_1}{k_2}e^{ik_1a} - \frac{k_1}{k_2}e^{-ik_1a}\right)$$

Ce qui donne

$$\boxed{B_2 = A_1 e^{-ik_1 a}.\left\{i.\sin(k_1 a) - \frac{k_1}{k_2}\cos(k_1 a)\right\}}$$

3. Condition de quantification.

Continuité de la fonction d'onde en $x = +a$ (sa dérivée première n'est pas continue car $V \to +\infty$).

$$\varphi_2(x = +a) = 0 \quad \Rightarrow \quad A_2.e^{ik_2 a} + B_2.e^{-ik_2 a} = 0$$

En remplaçant A_2 et B_2.

$$A_1 e^{-ik_1 a}.e^{ik_2 a}.\left\{i.\sin(k_1 a) + \frac{k_1}{k_2}\cos(k_1 a)\right\} = -A_1 e^{-ik_1 a}.e^{-ik_2 a}.\left\{i.\sin(k_1 a) - \frac{k_1}{k_2}\cos(k_1 a)\right\}$$

Donc

$$e^{ik_2 a}.\left\{i.\sin(k_1 a) + \frac{k_1}{k_2}\cos(k_1 a)\right\} = -e^{-ik_2 a}.\left\{i.\sin(k_1 a) - \frac{k_1}{k_2}\cos(k_1 a)\right\}$$

$$i.\sin(k_1 a).\left(e^{ik_2 a} + e^{-ik_2 a}\right) = -\frac{k_1}{k_2}\cos(k_1 a).\left(e^{ik_2 a} - e^{-ik_2 a}\right)$$

Et

$$\boxed{\sin(k_1 a).\cos(k_2 a) = -\frac{k_1}{k_2}\cos(k_1 a).\sin(k_2 a)}$$

Avec

$$\boxed{k_1 = \sqrt{2m.E/\hbar^2}} \quad ; \quad \boxed{k_2 = \sqrt{2m.(E - V_0)/\hbar^2}}$$

4. Pour $\boldsymbol{V_0 = 0}$, nous avons : $k_1 = k_2 = k = \sqrt{2m.E/\hbar^2}$

La condition de quantification devient

$$\sin(ka).\cos(ka) = -\cos(ka).\sin(ka) \quad \Rightarrow \quad 2\sin(ka).\cos(ka) = \sin(2ka) = 0$$

D'où

$$2ka = n\pi \quad \Rightarrow \quad \boxed{k = n\frac{\pi}{2a}} \quad \text{et} \quad \boxed{E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2\pi^2}{8m.a^2}n^2} \quad \text{avec} \quad n \in \mathbb{N}^*$$

5. Pour $\boldsymbol{V_0 = 0}$, nous avons : $\boxed{k_1 = k_2 = k = \sqrt{2m.E/\hbar^2}}$

$$B_1 = -A_1.e^{-2ika}$$

$$A_2 = A_1 e^{-ika}.\{i.\sin(ka) + \cos(ka)\} = A_1 e^{-ika}.e^{ika} \quad \Rightarrow \quad \boxed{A_2 = A_1}$$

$$B_2 = A_1 e^{-ika}.\{i.\sin(ka) - \cos(ka)\} = -A_1 e^{-ika}.e^{-ika} \quad \Rightarrow \quad \boxed{B_2 = B_1}$$

Donc finalement

$$\varphi(x) = \varphi_1(x) = \varphi_2(x) = A_1 e^{ikx} - A_1 e^{-2ika}e^{-ikx}$$

Ou

$$\varphi(x) = \varphi_1(x) = \varphi_2(x) = A_1 e^{-ika}\left(e^{ik(x+a)} - e^{-ik(x+a)}\right) \quad \Rightarrow \quad \varphi(x) = 2i.A_1 e^{-ika}.\sin\left(k(x+a)\right)$$

Mais puisque $2ka = n\pi$

$$e^{-ika} = e^{-in\pi/2} = \cos(n\pi/2) - i.\sin(n\pi/2) = -i(-1)^n$$

Ce qui donne

$$\boxed{\varphi(x) = (-1)^n.2A_1.\sin\left(n\frac{\pi}{2a}(x+a)\right)}$$

6. Condition de normalisation

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

Donc

$$4A_1^2 \int_{-a}^{+a} \sin^2\big(k(x+a)\big).dx = 1$$

$$2A_1^2 \int_{-a}^{+a} 1 + \cos\big(2k(x+a)\big).dx = 2A_1^2 \left[x + \frac{\sin\big(2k(x+a)\big)}{2k}\right]_{-a}^{+a} = 1$$

En remplaçant et en utilisant que $2ka = n\pi$

$$2A_1^2 \left(2a + \frac{\sin(4ka) - \sin(0)}{2k}\right) = 4a.A_1^2 = 1$$

Donc

$$\boxed{A_1 = \frac{1}{2\sqrt{a}}} \qquad \text{et} \qquad \boxed{\varphi(x) = \frac{(-1)^n}{\sqrt{a}}.\sin\left(n\frac{\pi}{2a}(x+a)\right)}$$

EXERCICE 02 : (10 points)

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \qquad ; \qquad \psi(x) = A.x.e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}$$

1. Normalisation :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x).\psi(x).dx = 1 \qquad \Rightarrow \qquad A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} x^2.e^{-\frac{m\omega x^2}{\hbar}} dx = 1$$

En utilisant

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-a.x^2} dx = \sqrt{\pi}/2a^{3/2} \qquad \text{avec} \qquad a = m\omega/\hbar \qquad \text{on a} \qquad \int_{-\infty}^{+\infty} x^2.e^{-\frac{m\omega x^2}{\hbar}} dx = \sqrt{\pi\hbar^3/4m^3\omega^3}$$

D'où

$$\boxed{A = \left(\frac{4m^3\omega^3}{\pi\hbar^3}\right)^{\frac{1}{4}}} \qquad \text{et} \qquad \boxed{\psi(x) = \left(\frac{4m^3\omega^3}{\pi\hbar^3}\right)^{\frac{1}{4}} x.e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}}$$

2. Equation de Schrödinger :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E.\psi(x)$$

Comme

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{d}{dx}\left(A.e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} - A.x\frac{m\omega x}{\hbar}e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}\right) = A\frac{d}{dx}\left\{\left(1 - \frac{m\omega}{\hbar}x^2\right)e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}\right\}$$

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = A\left\{\left(-2\frac{m\omega}{\hbar}x\right)e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} - \frac{m\omega x}{\hbar}\left(1 - \frac{m\omega}{\hbar}x^2\right)e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}\right\} = \left(-3\frac{m\omega}{\hbar} + \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}x^2\right)\psi(x)$$

En remplaçant

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(-3\frac{m\omega}{\hbar} + \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}x^2\right)\psi(x) + \left(\frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right)\psi(x) = E.\psi(x)$$

Puisque $\psi(x) \neq 0$ on peut ecrire

$$\left(\frac{3}{2}\hbar\omega - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right) + \left(\frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right) = E \qquad \text{donc} \qquad \boxed{E = \frac{3}{2}\hbar\omega}$$

3. Valeurs moyennes $\langle X \rangle$ et $\langle P \rangle$

$$\langle X \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x).X\psi(x).dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x).x\psi(x).dx$$

Donc

$$\langle X \rangle = A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} x^3.e^{-\frac{m\omega x^2}{\hbar}} dx \qquad \text{d'où} \qquad \boxed{\langle X \rangle = 0}$$

(Nous avons utilisé $\int_{-\infty}^{+\infty} x^{(2n+1)} e^{-a.x^2} dx = 0 \quad (n \in \mathbb{N})$)

$$\langle P \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x).P\psi(x).dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x).\frac{\hbar}{i}\frac{d\psi(x)}{dx}.dx$$

Donc

$$\langle P \rangle = A^2\frac{\hbar}{i}\int_{-\infty}^{+\infty} x.e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}\left(1 - \frac{m\omega}{\hbar}x^2\right)e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} dx$$

Donc

$$\langle P\rangle = A^2\frac{\hbar}{i}\left\{\int_{-\infty}^{+\infty} x.e^{-\frac{m\omega x^2}{\hbar}}dx - \frac{m\omega}{\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} x^3.e^{-\frac{m\omega x^2}{\hbar}}dx\right\}$$

En utilisant aussi $\int_{-\infty}^{+\infty} x^{(2n+1)}e^{-a.x^2}dx = 0$ $(n \in \mathbb{N})$, nous avons : $\boxed{\langle P\rangle = 0}$

4. Valeurs moyennes $\langle X^2\rangle$ et $\langle V\rangle$

$$\langle X^2\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x).X^2\psi(x).dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x).x^2\psi(x).dx$$

Donc

$$\langle X^2\rangle = A^2\int_{-\infty}^{+\infty} x^4.e^{-\frac{m\omega x^2}{\hbar}}dx$$

En utilisant

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^4e^{-a.x^2}dx = \frac{3\sqrt{\pi}}{4a^{5/2}} \quad \text{avec} \quad a = m\omega/\hbar \quad \text{on a} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} x^2.e^{-\frac{m\omega x^2}{\hbar}}dx = \frac{3\sqrt{\pi}}{4}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{\frac{5}{2}}$$

En replaçant on trouve :

$$\langle X^2\rangle = \left(\frac{4m^3\omega^3}{\pi\hbar^3}\right)^{\frac{1}{2}}\frac{3\sqrt{\pi}}{4}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{\frac{5}{2}} \quad \Rightarrow \quad \boxed{\langle X^2\rangle = \frac{3}{2}\frac{\hbar}{m\omega}}$$

Valeur moyenne de l'énergie potentielle

$$V(X) = \frac{1}{2}m\omega^2X^2 \quad \Rightarrow \quad \boxed{\langle V\rangle = \frac{1}{2}m\omega^2\langle X^2\rangle = \frac{3}{4}\hbar\omega}$$

5. Valeurs moyennes $\langle T\rangle$ et $\langle P^2\rangle$

En écrivant l'opérateur Hamiltonien

$$H = T + V = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)$$

Donc

$$\langle H\rangle = \langle T\rangle + \langle V\rangle$$

Or

$$\langle H\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x).H\psi(x).dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x).E\psi(x).dx = E\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x).\psi(x).dx$$

Puisque la fonction d'onde est normée

$$\langle H\rangle = E = \frac{3}{2}\hbar\omega \quad \text{et} \quad \boxed{\langle T\rangle = \langle H\rangle - \langle V\rangle = \frac{3}{4}\hbar\omega}$$

Comme

$$T = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} = \frac{P^2}{2m} \quad \Rightarrow \quad \langle T\rangle = \frac{1}{2m}\langle P^2\rangle \quad \text{et} \quad \boxed{\langle P^2\rangle = \frac{3}{2}m\hbar\omega}$$

6. Ecarts quadratiques moyens

$$\Delta X = \sqrt{\langle X^2\rangle - \langle X\rangle^2} \quad \Rightarrow \quad \boxed{\Delta X = \sqrt{\langle X^2\rangle} = \sqrt{3\hbar/2m\omega}}$$

$$\Delta P = \sqrt{\langle P^2\rangle - \langle P\rangle^2} \quad \Rightarrow \quad \boxed{\Delta P = \sqrt{\langle P^2\rangle} = \sqrt{3\hbar m\omega/2}}$$

On trouve alors : $\boxed{\Delta X.\Delta P = 3\hbar/2}$