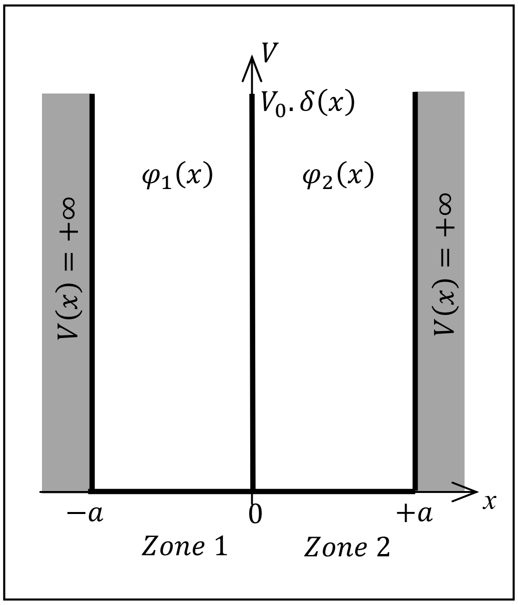
FACULTÉ DES SCIENCES EXACTES ET INFORMATIQUE

CORRIGÉ DE L'ÉPREUVE SEMESTRIELLE

MODULE : MÉCANIQUE QUANTIQUE.

EXERCICE 01: (10 points)

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



1. Equation de Schrödinger indépendante du temps.

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

En remplaçant

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

Dont les solutions sont pour $E > 0$:

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

2. Discontinuité de la dérivée première

Equation de Schrödinger entre les deux zones

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + V_0.\delta(x).\varphi(x) = E.\varphi(x)$$

En intégrant entre $-\varepsilon$ et $+\varepsilon$, nous obtenons

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon}\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2}dx + V_0\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon}\delta(x).\varphi(x).dx = E\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon}\varphi(x).dx$$

La première intégrale donne

$$\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon}\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2}dx = \left[\frac{d\varphi(x)}{dx}\right]_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} = \left.\frac{d\varphi_2(x)}{dx}\right|_{x=+\varepsilon} - \left.\frac{d\varphi_1(x)}{dx}\right|_{x=-\varepsilon}$$

La deuxième intégrale

$$\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon}\delta(x).\varphi(x).dx = \int_{-\infty}^{+\infty}\delta(x).\varphi(x).dx = \varphi_1(0) = \varphi_2(0)$$

Car la fonction d'onde est continue en $(x = 0)$.

La troisième intégrale donne

$$\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon}\varphi(x).dx = [\Phi(x)]_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} = \Phi(+\varepsilon) - \Phi(-\varepsilon)$$

$\Phi(x)$ étant la primitive de $\varphi(x)$.

D'où

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\left.\frac{d\varphi_2(x)}{dx}\right|_{x=+\varepsilon} - \left.\frac{d\varphi_1(x)}{dx}\right|_{x=-\varepsilon}\right) + V_0.\varphi_1(0) = E\big(\Phi(+\varepsilon) - \Phi(-\varepsilon)\big)$$

Et en faisant tendre ε vers 0.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\left.\frac{d\varphi_2(x)}{dx}\right|_{x=0}-\left.\frac{d\varphi_1(x)}{dx}\right|_{x=0}\right)+V_0.\varphi_1(0)=E\big(\Phi_+(0)-\Phi_-(0)\big)$$

Or : $\Phi_+(0)-\Phi_-(0)=0$ car la fonction $\Phi(x)$ est continue (car elle est dérivable) en $(x=0)$.

Nous obtenons finalement

$$\boxed{\left.\frac{d\varphi_2(x)}{dx}\right|_{x=0}-\left.\frac{d\varphi_1(x)}{dx}\right|_{x=0}=\rho_0.\varphi_1(0)} \quad \text{avec} \quad \boxed{\rho_0=\frac{2mV_0}{\hbar^2}}$$

3. Détermination des constantes

Continuité de la fonction d'onde en $x=-a$.

$$\varphi_1(x=-a)=0 \quad \Rightarrow \quad A_1.e^{-ika}+B_1.e^{ika}=0$$

Donc

$$\boxed{B_1=-A_1.e^{-2ika}} \qquad (1)$$

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

$$\varphi_1(x=0)=\varphi_2(x=0) \quad \Rightarrow \quad A_1+B_1=A_2+B_2$$

En remplaçant par l'équation (1)

$$A_2+B_2=A_1\big(1-e^{-2ika}\big)=A_1.e^{-ika}\big(e^{+ika}-e^{-ika}\big)$$

Ou

$$A_2+B_2=2iA_1.e^{-ika}.\sin(ka) \qquad (2)$$

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

$$\left.\frac{d\varphi_2(x)}{dx}\right|_{x=0}-\left.\frac{d\varphi_1(x)}{dx}\right|_{x=0}=\rho_0.\varphi_1(0)$$

Donc

$$ik(A_2-B_2)-ik(A_1-B_1)=\rho_0(A_1+B_1)$$

$$A_2-B_2=\frac{\rho_0}{ik}(A_1+B_1)+(A_1-B_1)$$

En remplaçant par l'équation (1)

$$A_2-B_2=\frac{\rho_0}{ik}A_1\big(1-e^{-2ika}\big)+A_1\big(1+e^{-2ika}\big)=A_1.e^{-ika}\left(\frac{\rho_0}{ik}2i.\sin(ka)+2\cos(ka)\right)$$

Et

$$A_2-B_2=2A_1.e^{-ika}\left(\frac{\rho_0}{k}\sin(ka)+\cos(ka)\right) \qquad (3)$$

En faisant la somme $(2)+(3)$

$$\boxed{A_2=A_1.e^{-ika}\left(\left(\frac{\rho_0}{k}+i\right)\sin(ka)+\cos(ka)\right)}$$

En faisant la différence $(2)-(3)$

$$\boxed{B_2=-A_1.e^{-ika}\left(\left(\frac{\rho_0}{k}-i\right)\sin(ka)+\cos(ka)\right)}$$

4. Condition de quantification.

Continuité de la fonction d'onde en $x = +a$.

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

En remplaçant par les valeurs trouvées de A_2 et B_2.

$$e^{ika}\left(\left(\frac{\rho_0}{k} + i\right)\sin(ka) + \cos(ka)\right) - e^{-ika}\left(\left(\frac{\rho_0}{k} - i\right)\sin(ka) + \cos(ka)\right) = 0$$

Ce qui donne

$$\left[\frac{\rho_0}{k}\left(e^{ika} - e^{-ika}\right) + i\left(e^{ika} + e^{-ika}\right)\right]\sin(ka) + \left(e^{ika} - e^{-ika}\right)\cos(ka) = 0$$

Donc

$$\left[\frac{\rho_0}{k}2i\sin(ka) + 2i\cos(ka)\right]\sin(ka) + 2i.\sin(ka).\cos(ka) = 0$$

$$\left[\frac{\rho_0}{k}\sin(ka) + 2\cos(ka)\right]\sin(ka) = 0$$

Nous obtenons alors les conditions suivantes

$$\sin(ka) = 0 \quad \text{ou} \quad \tan(ka) = -\frac{2k}{\rho_0}$$

Ce qui donne

$$\boxed{k = n\frac{\pi}{a} \quad ; \quad n \in \mathbb{N}^*} \quad \text{ou} \quad \boxed{\tan(ka) = -\frac{2k}{\rho_0}}$$

EXERCICE 02 : (10 points)

1. **Opétrateurs postion et quantité de mouvement .**

$$\boxed{X\psi(x) = x.\psi(x)} \quad \text{et} \quad \boxed{P_x\psi(x) = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi(x)}{\partial x}}$$

2. **Commutateurs.**

$$[X, P_x]\psi(x) = (XP_x - P_xX)\psi(x)$$

$$[X, P_x]\psi(x) = X\big(P_x\psi(x)\big) - P_x\big(X\psi(x)\big)$$

$$[X, P_x]\psi(x) = X\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi(x)}{\partial x}\right) - P_x\big(x.\psi(x)\big)$$

$$[X, P_x]\psi(x) = x.\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi(x)}{\partial x}\right) - \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\big(x.\psi(x)\big)$$

$$[X, P_x]\psi(x) = \frac{\hbar}{i}x\frac{\partial\psi(x)}{\partial x} - \frac{\hbar}{i}\left(\psi(x) + x\frac{\partial\psi(x)}{\partial x}\right)$$

$$[X, P_x]\psi(x) = i\hbar\psi(x)$$

$$\boxed{[X, P_x] \equiv i\hbar}$$

$$P_x^2\psi(x) = P_xP_x\psi(x) = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi(x)}{\partial x}\right) = -\hbar^2\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2}$$

$$[X, P_x^2]\psi(x) = X\big(P_x^2\psi(x)\big) - P_x^2\big(X\psi(x)\big)$$

$$[X, P_x^2]\psi(x) = x.\left(-\hbar^2\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2}\right) + \hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\big(x.\psi(x)\big)$$

$$[X, P_x^2]\psi(x) = -\hbar^2 x\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} + \hbar^2\frac{\partial}{\partial x}\left(\psi(x) + x\frac{\partial\psi(x)}{\partial x}\right) = -\hbar^2 x\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} + \hbar^2\left(2\frac{\partial\psi(x)}{\partial x} + x\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2}\right)$$

$$[X, P_x^2]\psi(x) = 2\hbar^2\frac{\partial\psi(x)}{\partial x}$$

$$\boxed{[X, P_x^2] \equiv 2\hbar^2\frac{\partial}{\partial x} = 2i\hbar P_x}$$

On pouvait aussi utiliser

$$[X, P_x^2] = [X, P_xP_x] = P_x[X, P_x] + [X, P_x]P_x = 2i\hbar P_x$$

3. **Opérateurs hermétiques**

$$(P_x^2)^+ = (P_xP_x)^+ = P_x^+P_x^+ = P_xP_x = P_x^2 \qquad \text{hermétique}$$

$$(XP_x)^+ = P_x^+X^+ = P_xX \neq XP_x \qquad \text{non hermétique}$$

$$(XP_x^2)^+ = {P_x^2}^+X^+ = P_x^2X \neq XP_x^2 \qquad \text{non hermétique}$$

$$\begin{cases}\psi(x) = A.(a^2 - x^2) & \text{pour} \quad x \in [-a, +a] \\ \psi(x) = 0 & \text{pour} \quad x \in]-\infty, -a] \cup [+a, +\infty[\end{cases}$$

4. Normalisation.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x).\psi(x).dx = 1 \quad \Rightarrow \quad |A|^2 \int_{-a}^{+a} (a^2 - x^2)^2.dx = 1$$

$$|A|^2 \int_{-a}^{+a} (a^4 + x^4 - 2a^2x^2).dx = |A|^2 \left[a^4 x + \frac{1}{5}x^5 - \frac{2}{3}a^2x^3\right]_{-a}^{+a} = 1$$

$$|A|^2 2a^5 \left(1 + \frac{1}{5} - \frac{2}{3}\right) = \frac{16}{15}|A|^2 a^5 = 1$$

$$\boxed{|A| = \sqrt{\frac{15}{16}\frac{1}{a^5}}}$$

5. Valeurs moyennes $\langle X \rangle$ et $\langle P_x \rangle$.

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

Donc

$$\langle X \rangle = |A|^2 \int_{-a}^{+a} x.(a^2 - x^2)^2.dx = \frac{15}{16}\frac{1}{a^5}\left[-\frac{1}{6}(a^2 - x^2)^3\right]_{-a}^{+a} \qquad \text{d'où} \qquad \boxed{\langle X \rangle = 0}$$

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

Donc

$$\langle P_x \rangle = \frac{\hbar}{i}|A|^2 \int_{-a}^{+a} -2x.(a^2 - x^2).dx = \frac{\hbar}{i}\frac{15}{16}\frac{1}{a^5}\left[\frac{1}{2}(a^2 - x^2)^2\right]_{-a}^{+a} \qquad \text{d'où} \qquad \boxed{\langle P_x \rangle = 0}$$

6. Valeurs moyennes $\langle X^2 \rangle$ et $\langle P_x^2 \rangle$.

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

D'où

$$\langle X^2 \rangle = |A|^2 \int_{-a}^{+a} x^2.(a^2 - x^2)^2.dx = \frac{15}{16}\frac{1}{a^5}\int_{-a}^{+a} (a^4x^2 + x^6 - 2a^2x^4).dx$$

$$\langle X^2 \rangle = \frac{15}{16}\frac{1}{a^5}\left[\frac{1}{3}a^4x^3 + \frac{1}{7}x^7 - \frac{2}{5}a^2x^5\right]_{-a}^{+a} = 2\frac{15}{16}\frac{a^7}{a^5}\left(\frac{1}{3} + \frac{1}{7} - \frac{2}{5}\right)$$

Donc

$$\boxed{\langle X^2 \rangle = \frac{1}{7}a^2}$$

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

D'où

$$\langle P_x^2 \rangle = 2\hbar^2|A|^2 \int_{-a}^{+a} (a^2 - x^2).dx = 2\hbar^2 \frac{15}{16}\frac{1}{a^5}\left[a^2x - \frac{1}{3}x^3\right]_{-a}^{+a}$$

$$\langle P_x^2 \rangle = 2\hbar^2 \frac{15}{8}\frac{a^3}{a^5}\left(1 - \frac{1}{3}\right)$$

Donc

$$\boxed{\langle P_x^2 \rangle = \frac{5}{2}\frac{\hbar^2}{a^2}}$$

7. Ecart quadratiques moyens.

$$\boxed{\Delta X = \sqrt{\langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2} = \frac{1}{\sqrt{7}}a}$$

$$\boxed{\Delta P_x = \sqrt{\langle P_x^2 \rangle - \langle P_x \rangle^2} = \sqrt{\frac{5}{2}}\frac{\hbar}{a}}$$

8. Principe d'incertitude de Heisenberg.

$$\boxed{\Delta X \Delta P_x = \sqrt{\frac{5}{14}}\hbar > \frac{\hbar}{2}}$$