FACULTÉ DES SCIENCES EXACTES ET INFORMATIQUE

CORRIGÉ DE L'ÉPREUVE DE RATTRAPAGE

MODULE : MÉCANIQUE QUANTIQUE.

EXERCICE 01: (10 points)

1. Fonction d'onde.

$$V(x) = 0 \quad \text{pour} \quad x \in \left[-\frac{a}{2}, +\frac{a}{2}\right] \quad ; \quad V(x) = +\infty \quad \text{sinon}$$

On fait le changement de variable suivant : $x' = x + (a/2)$

D'où

$$V(x') = 0 \quad \text{pour} \quad x' \in [0, a] \quad ; \quad V(x') = +\infty \quad \text{sinon}$$

La fonction d'onde est nulle dans les zones où le potentiel est infini

$$\psi(x') = 0 \qquad \text{pour} \qquad x' \in]-\infty, 0] \cup [a, +\infty[$$

Il nous reste à calculer la fonction d'onde dans la zone où $x' \in [0, a]$.

L'équation de Schrödinger : $(V(x') = 0)$

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

La solution est de la forme :

$$\psi(x') = A.e^{+ikx'} + B.e^{-ikx'} \qquad \text{avec} \qquad \boxed{k = \sqrt{2m.E/\hbar^2}}$$

Condition de continuité en $x' = 0$: $\psi(x' = 0) = 0 \quad \Rightarrow \quad A + B = 0$ et $A = -B$

En remplaçant dans la fonction d'onde : $\psi(x') = A.2i.\sin(k.x')$

Condition de continuité en $x' = a$: $\psi(x' = a) = 0 \quad \Rightarrow \quad A.2i.\sin(k.a) = 0$

Donc $\boxed{k = n\frac{\pi}{a}}$ où n est un entier naturel non nul.

La constante A est calculée à partir de la condition de normalisation.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x')|^2.dx' = \int_0^a \psi^*(x').\psi(x').dx' = 1$$

Donc

$$4|A|^2 \int_0^a \sin^2(k.x').dx' = 2|A|^2 \int_0^a 1 - \cos(2k.x').dx' = 1$$

En intégrant

$$2|A|^2 \left[x' - \frac{\sin(2k.x')}{2k}\right]_0^a = 2|A|^2.a = 1 \qquad \text{avec} \qquad ka = n\pi$$

D'où $|A| = 1/\sqrt{2a}$ donc A s'écrit sous la forme $A = |A|.e^{i\phi} = \left(1/\sqrt{2a}\right)e^{i\phi}$

Et la fonction d'onde.

$$\psi(x') = \left(\sqrt{2/a}\right).e^{i\left(\phi+\frac{\pi}{2}\right)}.\sin(k.x')$$

$e^{i(\phi+\pi/2)}$ est un facteur de phase global qui n'influe pas sur le module de $\psi(x')$, donc

$$\psi_n(x') = \left(\sqrt{2/a}\right).\sin\left(n\frac{\pi}{a}x'\right)$$

Et en remplaçant $x' = x + (a/2)$, nous trouvons

$$\boxed{\psi_n(x) = \left(\sqrt{2/a}\right).\sin\left(n\frac{\pi}{a}x + n\frac{\pi}{2}\right)}$$

2. Equation de Schrödinger.

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

Avec $(V = 0)$ à l'intérieur de la boite de potentiel $(-a/2 \leq x \leq +a/2)$

En dérivant

$$\frac{d^2\psi_n(x)}{dx^2} = -\left(n\frac{\pi}{a}\right)^2\left(\sqrt{2/a}\right).\sin\left(n\frac{\pi}{a}x + n\frac{\pi}{2}\right) = -\left(n\frac{\pi}{a}\right)^2\psi_n(x)$$

Et en remplaçant dans l'équation de Schrödinger

$$\boxed{E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m.a^2}n^2}$$

3. On dit que l'énergie de la particule dans la boite de potentiel est quantifiée.

4. Normalisation

$$(\psi_n, \psi_n) = \int_{-\infty}^{+\infty}\psi_n^*(x).\psi_n(x).dx = \int_{-a/2}^{+a/2}\psi_n^*(x).\psi_n(x).dx$$

$$(\psi_n, \psi_n) = \frac{2}{a}\int_{-a/2}^{+a/2}\sin^2\left(n\frac{\pi}{a}x + n\frac{\pi}{2}\right).dx = \frac{1}{a}\int_{-a/2}^{+a/2}1 - \cos\left(2n\frac{\pi}{a}x + n\pi\right).dx$$

$$(\psi_n, \psi_n) = \frac{1}{a}\left[x - \frac{a}{2n\pi}\sin\left(2n\frac{\pi}{a}x + n\pi\right)\right]_{-a/2}^{+a/2} = \frac{1}{a}\left(\left(\frac{a}{2} - \left(-\frac{a}{2}\right)\right) - \frac{a}{2n\pi}(\sin(n\pi + n\pi) - \sin(n\pi - n\pi))\right)$$

Ce qui donne

$$\boxed{(\psi_n, \psi_n) = 1}$$

Les états $\psi_n(x)$ sont donc normés.

Orthogonalité

$$(\psi_n, \psi_{n'}) = \int_{-\infty}^{+\infty}\psi_n^*(x).\psi_{n'}(x).dx = \int_{-a/2}^{+a/2}\psi_n^*(x).\psi_{n'}(x).dx \qquad (n \neq n')$$

$$(\psi_n, \psi_{n'}) = \frac{2}{a}\int_{-\infty}^{+\infty}\sin\left(n\frac{\pi}{a}x + n\frac{\pi}{2}\right).\sin\left(n'\frac{\pi}{a}x + n'\frac{\pi}{2}\right).dx$$

En utilisant

$$2.\sin\alpha.\sin\beta = \cos(\alpha - \beta) - \cos(\alpha + \beta)$$

Nous avons

$$(\psi_n, \psi_{n'}) = \frac{1}{a}\int_{-a/2}^{+a/2}\cos\left((n - n')\frac{\pi}{a}x + (n - n')\frac{\pi}{2}\right).dx - \frac{1}{a}\int_{-a/2}^{+a/2}\cos\left((n + n')\frac{\pi}{a}x + (n + n')\frac{\pi}{2}\right).dx$$

$$(\psi_n, \psi_{n'}) = a\left(\frac{L}{(n - n')\pi}\left(\sin\left((n - n')\pi\right) - \sin(0)\right)\right) - a\left(\frac{L}{(n + n')\pi}\left(\sin\left((n + n')\pi\right) - \sin(0)\right)\right)$$

Et donc

$$\boxed{(\psi_n, \psi_{n'}) = 0} \qquad (n \neq n')$$

Les états $\psi_n(x)$ sont donc orthogonaux.

5. Valeur moyenne de l'opérateur impulsion P_x pour un état $\psi_n(x)$ normé.

$$\langle P_x \rangle = \int_{-a/2}^{+a/2} \psi_n^*(x). P_x \psi_n(x). dx$$

$$\langle P_x \rangle = \frac{2}{a} \int_{-a/2}^{+a/2} \sin\left(n\frac{\pi}{a}x + n\frac{\pi}{2}\right). \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\left(\sin\left(n\frac{\pi}{a}x + n\frac{\pi}{2}\right)\right). dx$$

$$\langle P_x \rangle = \frac{\hbar}{i}\frac{2}{a}\left(n\frac{\pi}{a}\right) \int_{-a/2}^{+a/2} \sin\left(n\frac{\pi}{a}x + n\frac{\pi}{2}\right). \cos\left(n\frac{\pi}{a}x + n\frac{\pi}{2}\right). dx$$

D'où

$$\langle P_x \rangle = \frac{\hbar}{i}\frac{2}{a}\left[\frac{1}{2}\sin^2\left(n\frac{\pi}{a}x + n\frac{\pi}{2}\right)\right]_{-a/2}^{+a/2} = \frac{\hbar}{i}\frac{2}{a}\left(\sin^2(n\pi) - \sin^2(0)\right) \qquad \Rightarrow \qquad \boxed{\langle P_x \rangle = 0}$$

Valeur moyenne de l'opérateur P_x^2 pour un état $\psi_n(x)$ normé.

$$\langle P_x^2 \rangle = \int_{-a/2}^{+a/2} \psi_n^*(x). P_x^2 \psi_n(x). dx$$

$$\langle P_x^2 \rangle = \frac{2}{a} \int_{-a/2}^{+a/2} \sin\left(n\frac{\pi}{a}x + n\frac{\pi}{2}\right). (-\hbar^2)\frac{d^2}{dx^2}\left(\sin\left(n\frac{\pi}{a}x + n\frac{\pi}{2}\right)\right). dx$$

$$\langle P_x^2 \rangle = \frac{2\hbar^2}{a}\left(n\frac{\pi}{a}\right)^2 \int_{-a/2}^{+a/2} \sin\left(n\frac{\pi}{a}x + n\frac{\pi}{2}\right). \sin\left(n\frac{\pi}{a}x + n\frac{\pi}{2}\right). dx$$

Comme l'état $\psi_n(x)$ est normé, nous avons

$$(\psi_n, \psi_n) = \frac{2}{a} \int_{-a/2}^{+a/2} \sin^2\left(n\frac{\pi}{a}x + n\frac{\pi}{2}\right). dx = 1$$

D'où

$$\boxed{\langle P_x^2 \rangle = \hbar^2\left(n\frac{\pi}{a}\right)^2 = \hbar^2 k^2}$$

Nous aurions pu trouver le même résultat en utilisant l'opérateur Hamiltonien

$$\langle H \rangle = \langle T \rangle + \langle V \rangle = \langle T \rangle \qquad \text{puisque} \qquad V = 0$$

$$\langle H \rangle = \frac{\langle P_x^2 \rangle}{2m} = E_n$$

D'où

$$\boxed{\langle P_x^2 \rangle = 2m. E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{a^2} n^2}$$

EXERCICE 02 : (10 points)

$$\psi_{1s}(r) = N.\exp\left(-\frac{r}{a_0}\right) \quad ; \quad E_{1s} = -\frac{Ke^2}{2a_0} \quad \text{avec} \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e K e^2}$$

1. Normalisation

$$\int_{\text{espace}} \psi_{1s}^*(r).\psi_{1s}(r).d^3r = 1$$

$$\int_0^{+\infty}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} \psi_{1s}^*(r).\psi_{1s}(r).r^2.\sin\theta\,.drd\theta d\varphi = 1$$

$$\int_0^{+\infty}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} |N|^2 e^{-2r/a_0}.r^2.\sin\theta\,.drd\theta d\varphi = 4\pi|N|^2\int_0^{+\infty} r^2.e^{-2r/a_0}.dr = 1$$

On utilise

$$\int_0^{+\infty} x^n.\exp(-a.x)\,.dx = \frac{n!}{a^{n+1}}$$

Alors

$$4\pi|N|^2\frac{2!}{(2/a_0)^3} = \pi|N|^2.a_0^3 = 1$$

D'où

$$\boxed{|N| = \frac{1}{\sqrt{\pi.a_0^3}}} \quad \text{et} \quad \boxed{\psi_{1s}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi.a_0^3}}.\exp\left(-\frac{r}{a_0}\right)}$$

2. Energie moyenne de l'opérateur Hamiltonien $\boldsymbol{H}$.

$$\langle H\rangle = \int_{\text{espace}} \psi_{1s}^*(r).H\psi_{1s}(r).d^3r \quad \text{avec} \quad H\psi_{1s}(r) = E_{1s}.\psi_{1s}(r)$$

Puisque l'énergie E_{1s} est constante et l'état $\psi_{1s}(r)$ est normé, alors :

$$\langle H\rangle = E_{1s}\int_{\text{espace}} \psi_{1s}^*(r).\psi_{1s}(r).d^3r \quad \text{et} \quad \boxed{\langle H\rangle = E_{1s}}$$

3. Valeur moyenne de l'opéraeur énergie cinétique $\boldsymbol{T}$ à l'état normé $\boldsymbol{\psi_{1s}(r)}$.

$$T = \frac{P^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$$

En coordonnées sphériques le Laplacien Δ s'écrit

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{1}{r^2.\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{r^2.\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$

Mais comme la fonction $\psi_{1s}(r)$ ne dépend que de r.

$$\Delta\psi_{1s}(r) = \frac{\partial^2\psi_{1s}(r)}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial\psi_{1s}(r)}{\partial r} = \left(-\frac{1}{a_0}\right)^2\psi_{1s}(r) + \frac{2}{r}\left(-\frac{1}{a_0}\right)\psi_{1s}(r)$$

Et

$$T\psi_{1s}(r) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi_{1s}(r) = -\frac{\hbar^2}{2ma_0}\left(\frac{1}{a_0} - \frac{2}{r}\right)\psi_{1s}(r)$$

Et la valeur moyenne

$$\langle T\rangle = \int_{\text{espace}} \psi_{1s}^*(r).T\psi_{1s}(r).d^3r$$

Donc

$$\langle T\rangle = -\frac{\hbar^2}{2ma_0}\int_0^{+\infty}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\psi_{1s}^*(r).\left(\frac{1}{a_0}-\frac{2}{r}\right)\psi_{1s}(r).r^2.\sin\theta\,.dr d\theta d\varphi$$

Qui peut être écrite sous la forme d'une somme de deux intégrales

$$\langle T\rangle = -\frac{\hbar^2}{2ma_0^2}\int_0^{+\infty}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\psi_{1s}^*(r).\psi_{1s}(r).r^2.\sin\theta\,.dr d\theta d\varphi + \frac{\hbar^2}{ma_0}\int_0^{+\infty}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\psi_{1s}^*(r).\psi_{1s}(r).r.\sin\theta\,.dr d\theta d\varphi$$

Avec

$$\int_0^{+\infty}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\psi_{1s}^*(r).\psi_{1s}(r).r^2.\sin\theta\,.dr d\theta d\varphi = 1 \qquad \text{(normalisation)}$$

Et

$$\int_0^{+\infty}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\psi_{1s}^*(r).\psi_{1s}(r).r.\sin\theta\,.dr d\theta d\varphi = \frac{4\pi}{\pi.a_0^3}\int_0^{+\infty} r.e^{-2r/a_0}.dr = \frac{4}{a_0^3}\frac{1!}{(2/a_0)^2} = \frac{1}{a_0}$$

Donc

$$\langle T\rangle = -\frac{\hbar^2}{2ma_0^2}1 + \frac{\hbar^2}{ma_0}\frac{1}{a_0} \qquad \Rightarrow \qquad \boxed{\langle T\rangle = \frac{\hbar^2}{2ma_0^2}}$$

4. Valeur moyenne du potentiel.

$$\langle H\rangle = \langle T\rangle + \langle V\rangle = E_{1s}$$

On peut écrire

$$\frac{\hbar^2}{2ma_0^2} + \langle V\rangle = -\frac{mK^2e^4}{2\hbar^2}$$

Comme $a_0 = \hbar^2/m_eKe^2$, nous avons donc

$$\boxed{\langle V\rangle = -\frac{\hbar^2}{2ma_0^2} - \frac{Ke^2}{2a_0} = -\frac{Ke^2}{a_0}}$$

$$V = -\frac{Ke^2}{R} \qquad \Rightarrow \qquad \langle V\rangle = -Ke^2\left\langle\frac{1}{R}\right\rangle = -\frac{Ke^2}{a_0} \qquad \Rightarrow \qquad \boxed{\left\langle\frac{1}{R}\right\rangle = \frac{1}{a_0}}$$

5. Valeur moyenne de l'opérateur position radiale $\langle \boldsymbol{R}\rangle$.

$$\langle R\rangle = \int_{\text{espace}} \psi_{1s}^*(r).R\psi_{1s}(r).d^3r$$

D'où

$$\langle R\rangle = \int_0^{+\infty}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\psi_{1s}^*(r).r.\psi_{1s}(r).r^2.\sin\theta\,.dr d\theta d\varphi$$

Et

$$\langle R\rangle = \int_0^{+\infty}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} r^3.e^{-2r/a_0}.\sin\theta\,.dr d\theta d\varphi = \frac{4\pi}{\pi.a_0^3}\int_0^{+\infty} r^3.e^{-2r/a_0}.dr = \frac{4\pi}{\pi.a_0^3}\frac{3!}{(2/a_0)^4}$$

Donc

$$\boxed{\langle R\rangle = \frac{3}{2}a_0}$$

6. Probabilité de présence dans une sphère de rayon $(2a_0)$.

$$P(0 \le r \le 4a_0) = \int_0^{2a_0}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} \psi_{1s}^*(r).\psi_{1s}(r).r^2.\sin\theta\,.drd\theta d\varphi$$

D'où

$$P(0 \le r \le 4a_0) = \frac{4\pi}{\pi.a_0^3}\int_0^{2a_0} r^2.e^{-2r/a_0}.dr$$

Qui s'intègre par parties

$$\int_0^{4a_0} r^2.e^{-2r/a_0}.dr = \left[r^2\frac{e^{-2r/a_0}}{-2/a_0}\right]_0^{2a_0} + a_0\int_0^{2a_0} r.e^{-2r/a_0}.dr = -2.a_0^3.e^{-4} + a_0\int_0^{2a_0} r.e^{-2r/a_0}.dr$$

$$\int_0^{2a_0} r.e^{-2r/a_0}.dr = \left[r\frac{e^{-2r/a_0}}{-2/a_0}\right]_0^{2a_0} + \frac{a_0}{2}\int_0^{2a_0} e^{-2r/a_0}.dr = -a_0^2.e^{-4} + \frac{a_0}{2}\left[\frac{e^{-2r/a_0}}{-2/a_0}\right]_0^{2a_0}$$

Donc

$$\int_0^{4a_0} r.e^{-2r/a_0}.dr = -a_0^2.e^{-4} - \frac{a_0^2}{4}(e^{-4}-1) = -\frac{5}{4}a_0^2.e^{-4} + \frac{a_0^2}{4}$$

$$\int_0^{4a_0} r^2.e^{-2r/a_0}.dr = -2.a_0^3.e^{-4} - \frac{5}{4}a_0^3.e^{-4} + \frac{a_0^3}{4} = -\frac{13}{4}a_0^3.e^{-4} + \frac{a_0^3}{4}$$

En remplaçant

$$P(0 \le r \le 2a_0) = \frac{4\pi}{\pi.a_0^3}\left(-\frac{13}{4}a_0^3.e^{-4} + \frac{a_0^3}{4}\right) = 1 - 13.e^{-4}$$

Et

$$\boxed{P(0 \le r \le 2a_0) = 0{,}7619}$$