

FACULTÉ DES SCIENCES EXACTES ET INFORMATIQUE

CORRIGÉ DE L'ÉPREUVE DE RATRAPAGE

MODULE : MÉCANIQUE QUANTIQUE.

EXERCICE 01: (10 points)

$$\begin{cases} V(x) = 0 & \text{pour } x \in [-2a, -a] \cup [+a, +2a] \\ V(x) = V_0 & \text{pour } x \in [-a, +a] \\ V(x) = +\infty & \text{ailleurs} \end{cases}$$

1. Equation de Schrödinger indépendante du temps.

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

En remplaçant

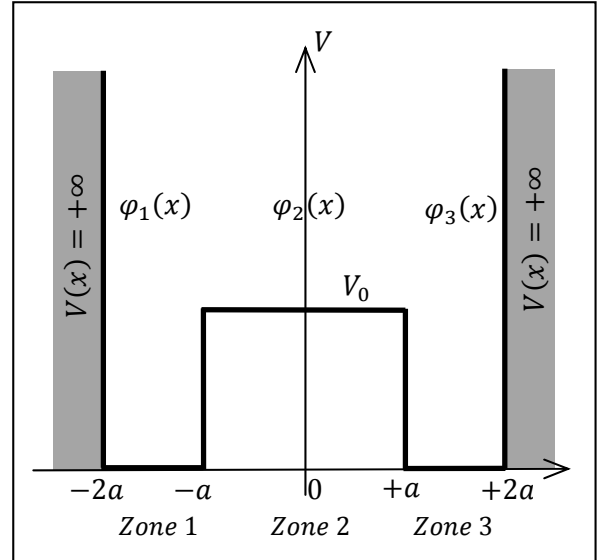
$$\begin{cases} \text{Zone 1 :} & -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi_1(x)}{dx^2} = E \cdot \varphi_1(x) \\ \text{Zone 2 :} & -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi_2(x)}{dx^2} + V_0 \cdot \varphi_2(x) = E \cdot \varphi_2(x) \\ \text{Zone 3 :} & -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi_3(x)}{dx^2} = E \cdot \varphi_3(x) \end{cases}$$

Et

$$\boxed{\varphi(x) = 0} \quad \text{ailleurs}$$

Dont les solutions sont pour $E < V_0$:

$$\begin{cases} \varphi_1(x) = A_1 \cdot e^{+ikx} + B_1 \cdot e^{-ikx} \\ \varphi_2(x) = A_2 \cdot e^{+\rho x} + B_2 \cdot e^{-\rho x} \\ \varphi_3(x) = A_3 \cdot e^{+ikx} + B_3 \cdot e^{-ikx} \end{cases} \quad \text{avec} \quad \boxed{k = \sqrt{2m \cdot E / \hbar^2}} \quad \text{et} \quad \boxed{\rho = \sqrt{2m \cdot (V_0 - E) / \hbar^2}}$$

**2. Détermination des constantes**Continuité de la fonction d'onde en $x = -2a$.

$$\varphi_1(x = -a) = 0 \quad \Rightarrow \quad A_1 \cdot e^{-2ika} + B_1 \cdot e^{2ika} = 0$$

Donc

$$\boxed{B_1 = -A_1 \cdot e^{-4ika}} \quad (1)$$

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

$$\varphi_1(x = -a) = \varphi_2(x = -a) \quad \Rightarrow \quad A_1 \cdot e^{-ika} + B_1 \cdot e^{+ika} = A_2 \cdot e^{-\rho a} + B_2 \cdot e^{+\rho a}$$

En remplaçant par l'équation (1)

$$A_1 \cdot e^{-ika} (1 - e^{-2ika}) = A_2 \cdot e^{-\rho a} + B_2 \cdot e^{+\rho a}$$

Ou

$$A_2 \cdot e^{-\rho a} + B_2 \cdot e^{+\rho a} = 2iA_1 \cdot e^{-2ika} \cdot \sin(ka) \quad (2)$$

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

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

Donc

$$ik(A_1 \cdot e^{-ika} - B_1 \cdot e^{+ika}) = \rho(A_2 \cdot e^{-\rho a} - B_2 \cdot e^{+\rho a})$$

En remplaçant par l'équation (1)

$$A_2 \cdot e^{-\rho a} - B_2 \cdot e^{+\rho a} = \frac{ik}{\rho} A_1 \cdot e^{-ika} (1 + e^{-2ika})$$

Et

$$A_2 \cdot e^{-\rho a} - B_2 \cdot e^{+\rho a} = 2 \frac{ik}{\rho} A_1 \cdot e^{-2ika} \cos(ka) \quad (3)$$

En faisant la somme (2) + (3)

$$A_2 = iA_1 \cdot e^{-2ika} \cdot e^{+\rho a} \left(\sin(ka) + \frac{k}{\rho} \cos(ka) \right)$$

En faisant la différence (2) - (3)

$$B_2 = iA_1 \cdot e^{-2ika} \cdot e^{-\rho a} \left(\sin(ka) - \frac{k}{\rho} \cos(ka) \right)$$

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

$$\varphi_2(x = +a) = \varphi_3(x = +a) \Rightarrow A_2 \cdot e^{+\rho a} + B_2 \cdot e^{-\rho a} = A_3 \cdot e^{+ika} + B_3 \cdot e^{-ika}$$

Donc

$$A_3 \cdot e^{+ika} + B_3 \cdot e^{-ika} = iA_1 \cdot e^{-2ika} \left\{ e^{+2\rho a} \left(\sin(ka) + \frac{k}{\rho} \cos(ka) \right) + e^{-2\rho a} \left(\sin(ka) - \frac{k}{\rho} \cos(ka) \right) \right\}$$

Et

$$A_3 \cdot e^{+ika} + B_3 \cdot e^{-ika} = 2iA_1 \cdot e^{-2ika} \left(\sin(ka) \cosh(2\rho a) + \frac{k}{\rho} \cos(ka) \sinh(2\rho a) \right) \quad (4)$$

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

$$\left. \frac{d\varphi_2(x)}{dx} \right|_{x=+a} = \left. \frac{d\varphi_3(x)}{dx} \right|_{x=+a}$$

Donc

$$\rho(A_2 \cdot e^{+\rho a} - B_2 \cdot e^{-\rho a}) = ik(A_3 \cdot e^{+ika} - B_3 \cdot e^{-ika})$$

En remplaçant

$$A_3 \cdot e^{+ika} - B_3 \cdot e^{-ika} = \frac{\rho}{k} A_1 \cdot e^{-2ika} \left\{ e^{+2\rho a} \left(\sin(ka) + \frac{k}{\rho} \cos(ka) \right) - e^{-2\rho a} \left(\sin(ka) - \frac{k}{\rho} \cos(ka) \right) \right\}$$

Et

$$A_3 \cdot e^{+ika} - B_3 \cdot e^{-ika} = 2A_1 \cdot e^{-2ika} \left(\frac{\rho}{k} \sin(ka) \sinh(2\rho a) + \cos(ka) \cosh(2\rho a) \right) \quad (5)$$

En faisant la somme (4) + (5)

$$A_3 = A_1 \cdot e^{-2ika} \left(\cosh(2\rho a) + \sinh(2\rho a) \left(\frac{ik}{\rho} \cos(ka) + \frac{\rho}{k} \sin(ka) \right) e^{-ika} \right)$$

En faisant la différence (4) - (5)

$$B_3 = A_1 \cdot e^{-2ika} \left(\cosh(2\rho a) + \sinh(2\rho a) \left(\frac{ik}{\rho} \cos(ka) - \frac{\rho}{k} \sin(ka) \right) e^{+ika} \right)$$

3. Condition de quantification.

Continuité de la fonction d'onde en $x = +2a$.

$$\varphi_3(x = +2a) = 0 \quad \Rightarrow \quad A_3 \cdot e^{+2ika} + B_3 \cdot e^{-2ika} = 0$$

En remplaçant par les valeurs trouvées de A_3 et B_3 .

$$\begin{aligned} & \left(\cosh(2\rho a) + \sinh(2\rho a) \left(\frac{ik}{\rho} \cos(ka) + \frac{\rho}{k} \sin(ka) \right) e^{-ika} \right) \cdot e^{+2ika} \\ & + \left(\cosh(2\rho a) + \sinh(2\rho a) \left(\frac{ik}{\rho} \cos(ka) - \frac{\rho}{k} \sin(ka) \right) e^{-ika} \right) \cdot e^{-2ika} = 0 \end{aligned}$$

Ce qui donne

$$\cosh(2\rho a) \cdot \cos(2ka) + i \sinh(2\rho a) \left(\frac{k}{\rho} \cos^2(ka) + \frac{\rho}{k} \sin^2(ka) \right) = 0$$

4. Dans le cas où ($V_0 = 0$).

La particule est alors dans une boîte de potentiel à une dimension de largeur $L = 4a$.

D'où les états stationnaires à l'intérieur de la boîte sont

$$\varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2a}} \sin\left(n \frac{\pi}{4a} x\right)$$

Les énergies de la particule sont

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{32ma^2} n^2$$

Et la condition de quantification

$$k = n \frac{\pi}{4a}$$

n étant le nombre quantique (un entier naturel non nul).

EXERCICE 02 : (10 points)**1. Opérateur adjoint dans l'espace des fonctions d'ondes.**

$$\int_{\text{espace}} \varphi^*(\vec{r}) \cdot A\psi(\vec{r}) \cdot d^3r = \left(\int_{\text{espace}} \psi^*(\vec{r}) \cdot A^+ \varphi(\vec{r}) \cdot d^3r \right)^*$$

Ou

$$\int_{\text{espace}} \varphi^*(\vec{r}) \cdot A\psi(\vec{r}) \cdot d^3r = \int_{\text{espace}} (A^+ \varphi(\vec{r}))^* \cdot \psi(\vec{r}) \cdot d^3r$$

2. Opérateur hermétique.Un opérateur est dit hermétique s'il est égal à son adjoint : $A = A^+$. Ou bien :

$$\int_{\text{espace}} \varphi^*(\vec{r}) \cdot A\psi(\vec{r}) \cdot d^3r = \int_{\text{espace}} (A\varphi(\vec{r}))^* \cdot \psi(\vec{r}) \cdot d^3r$$

3. En utilisant les propriétés suivantes de l'adjoint d'un opérateur.

- $A = (A^+)^+$
- $(\lambda \cdot A)^+ = \lambda^* \cdot A^+$
- $(A + B)^+ = A^+ + B^+$
- $(AB)^+ = B^+ A^+$

Donc

$$\begin{aligned} (A + A^+)^+ &= A^+ + (A^+)^+ = A^+ + A = A + A^+ && \text{hermétique} \\ (i(A - A^+))^+ &= -i(A^+ - (A^+)^+) = -i(A^+ - A) = i(A - A^+) && \text{hermétique} \\ (AA^+)^+ &= (A^+)^+ A^+ = AA^+ && \text{hermétique} \end{aligned}$$

$$\begin{cases} \psi(x) = A \cdot (x/a) & \text{pour } x \in [0, +a] \\ \psi(x) = A \cdot (2a - x)/a & \text{pour } x \in [+a, +2a] \\ \psi(x) = 0 & \text{ailleurs} \end{cases}$$

4. Normalisation.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \cdot \psi(x) \cdot dx = 1$$

Donc

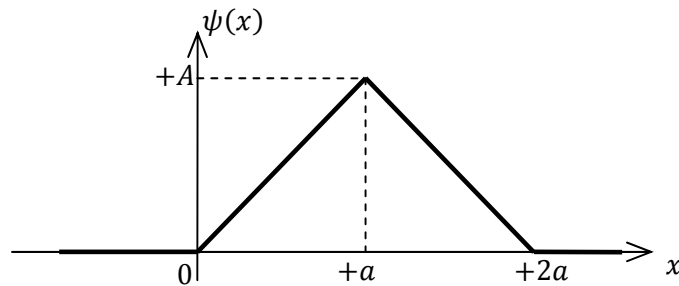
$$A^2 \int_0^{+a} \left(\frac{x}{a}\right)^2 \cdot dx + A^2 \int_{+a}^{+2a} \left(\frac{2a-x}{a}\right)^2 \cdot dx = 1$$

$$A^2 \frac{1}{a^2} \left\{ \int_0^{+a} x^2 \cdot dx + \int_{+a}^{+2a} (4a^2 + x^2 - 4ax) \cdot dx \right\} = A^2 \frac{1}{a^2} \left\{ \left[\frac{x^3}{3} \right]_0^{+a} + \left[4a^2x + \frac{x^3}{3} - 2ax^2 \right]_{+a}^{+2a} \right\} = 1$$

$$A^2 \frac{1}{a^2} \left\{ \frac{a^3}{3} + \left(4a^3 + \frac{7}{3}a^3 - 6a^3 \right) \right\} = \frac{2}{3} A^2 a = 1$$

$$A = \sqrt{\frac{3}{2a}}$$

5. Représentation.



6. Probabilité.

$$P(0 \leq x \leq a) = \int_0^{+a} |\psi(x)|^2 dx = A^2 \int_0^{+a} \left(\frac{x}{a}\right)^2 dx$$

$$P(0 \leq x \leq a) = A^2 \frac{1}{a^2} \int_0^{+a} x^2 dx = A^2 \frac{1}{a^2} \left[\frac{x^3}{3} \right]_0^{+a}$$

Et donc

$$P(0 \leq x \leq a) = \frac{3}{2a} \frac{a}{3} = \frac{1}{2}$$

Ce qui paraît évident puisque les surfaces sous les courbes de $|\psi(x)|^2$ entre $[0, +a]$ et $[+a, +2a]$ étant les mêmes et leur somme étant égale à 1.

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

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

Donc

$$\langle X \rangle = A^2 \int_0^{+a} x \left(\frac{x}{a}\right)^2 dx + A^2 \int_{+a}^{+2a} x \left(\frac{2a-x}{a}\right)^2 dx$$

$$\langle X \rangle = A^2 \frac{1}{a^2} \left\{ \int_0^{+a} x^3 dx + \int_{+a}^{+2a} (4a^2x + x^3 - 4ax^2) dx \right\}$$

$$\langle X \rangle = \frac{3}{2a} \frac{1}{a^2} \left\{ \left[\frac{x^4}{4} \right]_0^{+a} + \left[2a^2x^2 + \frac{x^4}{4} - \frac{4}{3}ax^3 \right]_{+a}^{+2a} \right\} = \frac{3}{2}a \left\{ \frac{1}{4} + \left(6 + \frac{15}{4} - \frac{28}{3} \right) \right\}$$

Et

$$\langle X \rangle = a$$

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

Donc

$$\langle P_x \rangle = \frac{\hbar}{i} A^2 \int_0^{+a} \frac{x}{a^2} dx - \frac{\hbar}{i} A^2 \int_{+a}^{+2a} \frac{2a-x}{a^2} dx = \frac{\hbar}{i} A^2 \frac{1}{a^2} \left\{ \left[\frac{x^2}{2} \right]_0^{+a} - \left[2ax - \frac{x^2}{2} \right]_{+a}^{+2a} \right\}$$

$$\langle P_x \rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{3}{2a} \left\{ \frac{1}{2} - \left(2 - \frac{3}{2} \right) \right\} \Rightarrow \langle P_x \rangle = 0$$