Mécanique Quantique 1 —– CORRIGÉ

Séance d'exercices 1 : États liés du puits carré à trois dimensions.

Exercice 1

L'équation de Schrödinger stationnaire pour une particule de masse m a la forme suivante :

$$H\psi = E\psi \qquad \Leftrightarrow \qquad \Big(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})\Big)\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$$

où le laplacien en coordonnées sphérique est

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\Big(r^2\frac{\partial}{\partial r}\Big) + \frac{1}{r^2}\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\Big(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\Big) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right)$$

Ainsi, l'équation de Schrödinger devient

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{\partial}{\partial r}\Big(r^2\frac{\partial}{\partial r}\Big) - \frac{\hbar^2}{2mr^2}\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\Big(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\Big) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right) + V(r)\right]\psi(r,\theta,\phi) = E\psi(r,\theta,\phi)$$

En multipliant l'équation par $2mr^2$, on peut rendre l'équation séparable :

$$\left[-\hbar^2\frac{\partial}{\partial r}\Big(r^2\frac{\partial}{\partial r}\Big) - \hbar^2\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\Big(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\Big) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right) + 2mr^2V(r)\right]\psi(r,\theta,\phi) = 2mr^2E\psi(r,\theta,\phi)$$

ou encore

$$\underbrace{\left[-\hbar^2\frac{\partial}{\partial r}\Big(r^2\frac{\partial}{\partial r}\Big) + 2mr^2\big(V(r)-E\big)\right]}_{\text{partie radiale}}\psi(r,\theta,\phi) = \underbrace{\hbar^2\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\Big(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\Big) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right)}_{\text{partie angulaire}}\psi(r,\theta,\phi)$$

Exercice 2

$$[energie] = \frac{[p^2]}{[2m]} = \frac{[(\hbar/longueur)^2]}{[2m]} = \frac{\hbar^2}{2ma^2}$$

où on utilise le fait que $\Delta x\Delta p \geq \hbar/2$ pour trouver que l'unité de p est celle de $\hbar/longueur$.
Si on choisit les unités telles que $\hbar = 2m = a = 1$, alors l'équation de Schrödinger devient

$$\underbrace{\left[-\frac{\partial}{\partial r}\Big(r^2\frac{\partial}{\partial r}\Big) + r^2\big(V(r)-E\big)\right]}_{\text{partie radiale}}\psi(r,\theta,\phi) = \underbrace{\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\Big(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\Big) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right)}_{\text{partie angulaire}}\psi(r,\theta,\phi)$$

Exercice 3

Posons $\psi(r,\theta,\phi) = r^{-1}u_l(r)Y_l^m(\Omega)$. L'équation de Schrödinger devient donc

$$\left[-\frac{\partial}{\partial r}\Big(r^2\frac{\partial}{\partial r}\Big) + r^2\big(V(r)-E\big)\right]r^{-1}u_l(r)Y_l^m(\Omega) = \left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\Big(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\Big) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right)r^{-1}u_l(r)Y_l^m(\Omega)$$

ou encore

$$\frac{r}{u_l(r)}\left[-\frac{\partial}{\partial r}\Big(r^2\frac{\partial}{\partial r}\Big) + r^2\big(V(r)-E\big)\right]r^{-1}u_l(r) = \frac{1}{Y_l^m(\Omega)}\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\Big(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\Big) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right)Y_l^m(\Omega)$$

On remarque que la partie gauche de l'équation ne dépend que de r alors que la dépendance de la partie droite de l'équation est uniquement angulaire. Cela signifie donc que chacun des côté de l'équation est égal à une constante. On choisi cette constante comme étant $-l(l+1)$. Bien sûr, ce choix n'est pas arbitraire. Il vient du fait que l'équation

$$\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\Big(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\Big) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right)Y_l^m(\Omega) = -l(l+1)Y_l^m(\Omega)$$

où

$$\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\Big(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\Big) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right) = L^2$$

est bien connue et ses solutions sont les harmoniques sphériques Y_m^l. Ainsi l'équation radiale devient

$$\begin{aligned}
\frac{r}{u_l(r)}\left[-\frac{\partial}{\partial r}\Big(r^2\frac{\partial}{\partial r}\Big) + r^2\big(V(r)-E\big)\right]r^{-1}u_l(r) &= -l(l+1)\\
-\frac{\partial}{\partial r}\Big(r^2\frac{\partial}{\partial r}\frac{u_l(r)}{r}\Big) + r^2\big(V(r)-E\big)\frac{u_l(r)}{r} &= -\frac{u_l(r)}{r}\,l(l+1)\\
-\frac{\partial}{\partial r}\Big(r\frac{\partial}{\partial r}u_l(r) - u_l(r)\Big) + r^2\big(V(r)-E\big)\frac{u_l(r)}{r} &= -\frac{u_l(r)}{r}\,l(l+1)\\
-r\frac{\partial^2}{\partial r^2}u_l(r) + r\big(V(r)-E\big)u_l(r) &= -\frac{u_l(r)}{r}\,l(l+1)\\
\left(-\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r)\right)u_l(r) &= E\,u_l(r)
\end{aligned}$$

Pour l'onde s, on a $l=0$ et donc l'équation se simplifie en

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial r^2} + V(r)\right)u_0(r) = E\,u_0(r)$$

ou encore

$$\begin{cases} -u_0''(r) - V_0u_0(r) = Eu_0(r) & r<1\\ -u_0''(r) = Eu_0(r) & r>1\end{cases}$$

Exercice 4

On suppose $-V_0 < E < 0$ et on pose $\alpha = \sqrt{V_0+E}$ et $\epsilon = \sqrt{-E}$. On peut donc réécrire nos équations

$$\begin{cases} u_0''(r) + \big(V_0+E\big)u_0(r) = 0 & r<1\\ u_0''(r) + Eu_0(r) = 0 & r>1\end{cases} \quad\Leftrightarrow\quad \begin{cases} u_0''(r) + \alpha^2u_0(r) = 0 & r<1\\ u_0''(r) - \epsilon^2u_0(r) = 0 & r>1\end{cases}$$

Les solutions de la première équation différentielle sont des exponentielles complexes de la forme $e^{\pm i\alpha r}$ ou encore des fonction $\cos(\alpha r)$ et $\sin(\alpha r)$ alors que les solutions de la seconde équation différentielle sont des exponentielles réelles de la forme $e^{\pm \epsilon r}$. Alors, pour avoir des solutions générales (équation différentielle du second ordre $\Rightarrow$ 2 constantes), on écrit :

$$\begin{cases} u_0(r) = A\sin(\alpha r) + B\cos(\alpha r) & r < 1 \\ u_0(r) = Ce^{-\epsilon r} + De^{\epsilon r} & r > 1 \end{cases}$$

Pour trouver la valeur des constantes, on utilise les conditions aux bords et les conditions de continuité :

1. Conditions aux bords
   (a) $\psi(0)$ doit être défini $\Rightarrow$ quand $r = 0$, il faut que $u(0) = 0 \quad \Rightarrow \quad B = 0$
   (b) À l'infini, $u(r)$ ne doit pas diverger $\Rightarrow$ le terme en $e^{\epsilon r}$ doit disparaître $\Rightarrow$ $D = 0$
2. Conditions de continuité
   (a) La fonction doit être continue $\Rightarrow$ $u_{r<1}(r=1) = u_{r>1}(r=1)$ $\Rightarrow$ $A\sin(\alpha) = Ce^{-\epsilon}$
   (b) La dérivée doit être continue $\Rightarrow$ $u'_{r<1}(r=1) = u'_{r>1}(r=1)$ $\Rightarrow$ $A\alpha\cos(\alpha) = -\epsilon Ce^{-\epsilon}$

Avec ces deux dernières équations on trouve

$$\tan(\alpha) = -\frac{\alpha}{\epsilon} \quad \Leftrightarrow \quad \tan(\sqrt{V_0 + E}) = -\frac{\sqrt{V_0 + E}}{\sqrt{-E}} \quad \Leftrightarrow \quad \tan(\sqrt{V_0 - \epsilon^2}) = -\sqrt{\frac{V_0}{\epsilon^2} - 1} \text{ ou } \tan(\alpha) = -\frac{\alpha}{\sqrt{V_0 - \alpha^2}}$$

C'est une équation transcendantale. Les valeurs de ϵ (ou de façon équivalente, celles de α) qui résolvent cette équations sont les seules valeurs possibles de l'énergie. En examinant cette équation, on voit bien qu'il y aura un nombre entier de solutions et non pas une continuité ce qui fait que l'énergie sera quantifiée. Pour trouver les solutions de cette équation, il faut la tracer.

Exercice 5

Pour se donner une idée, voici ce que cela donne quand on trace cette équation transcendantale. Ici, j'ai fait l'exercice 2 fois : une fois en traçant en fonction de ϵ et une autre en fonction de α. Évidemment, les deux méthodes mènent aux mêmes résultats.
Voici l'équation en fonction de ϵ (et donc de E) pour $V_0 = 400$ (une valeur totalement arbitraire).
On voit bien ici que l'énergie est quantifiée. En effet, il y aura toujours un nombre fini de points d'intersecrtction, c'est-à-dire de valeurs de ϵ (et donc de E) qui vérifient l'équation. En examinant un peu plus l'équation, on remarque qu'il y aura autant de solutions que le nombre de tangentes dont l'asymptote coupent l'axe entre 0 et ϵ_{max} où ϵ_{max} est la valeur pour laquelle l'équation $-\sqrt{\frac{V_0}{\epsilon^2} - 1}$ coupe l'axe des ϵ.
La tangentea une asymptote si

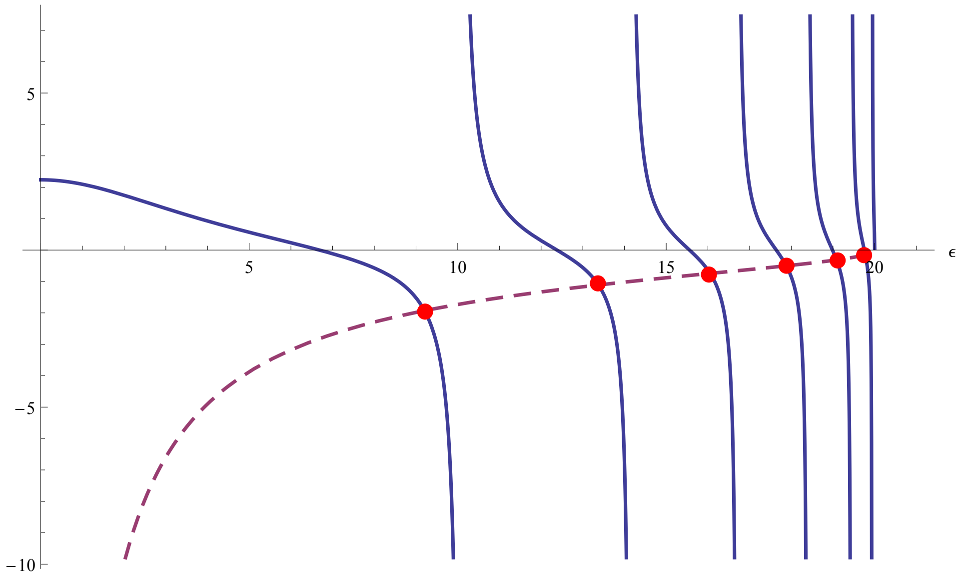
$$\tan(\sqrt{V_0 - \epsilon^2}) = \infty \quad \Leftrightarrow \quad \sqrt{V_0 - \epsilon^2} = \frac{(2n+1)\pi}{2} \quad \Leftrightarrow \quad \epsilon = \sqrt{V_0 - \frac{(2n+1)^2\pi^2}{4}}$$

La fonction $-\sqrt{\frac{V_0}{\epsilon^2} - 1}$ quant à elle coupe l'axe des ϵ quand

$$-\sqrt{\frac{V_0}{\epsilon^2} - 1} = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \epsilon_{max} = \sqrt{V_0}$$

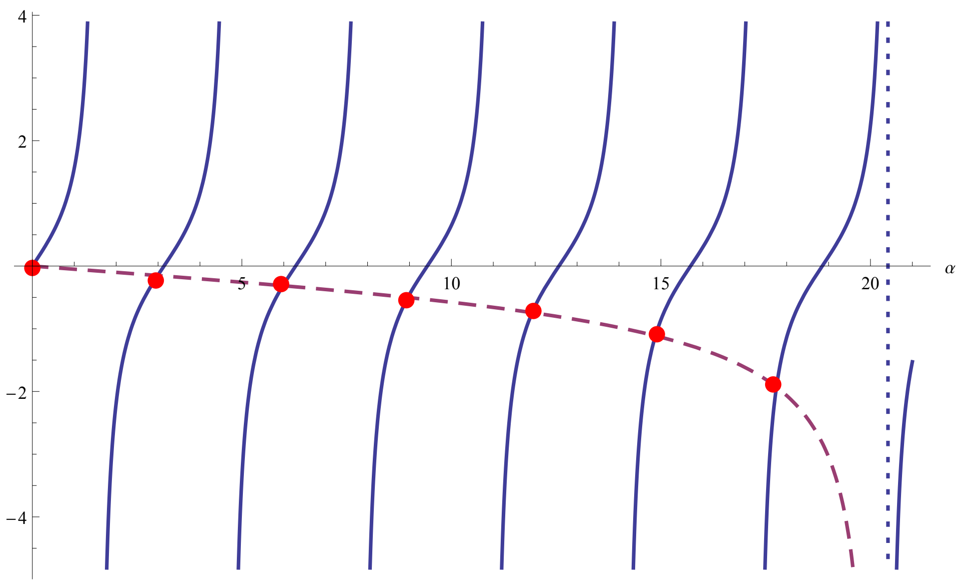
Ainsi, il y aura une solution pour tous les n tels que

$$0 < \sqrt{V_0 - \frac{(2n+1)^2\pi^2}{4}} < \sqrt{V_0} \quad \Leftrightarrow \quad -\frac{1}{2} < n < \sqrt{\frac{V_0}{\pi^2}} - \frac{1}{2}$$



Il y aura donc $\left[\sqrt{\frac{V_0}{\pi^2}} - \frac{1}{2}\right] + 1$ solutions où [...] représente la partie entière. Ce nombre de solution représente le nombre d'états liés, car pour chaque valeur de ϵ on a une valeur de E.

De façon équivalente, on peut choisir de tracer l'équation en fonction de α. On trouve alors le graphique suivant :



Cette fois-ci, on note qu'on aura une solution chaque fois que la tangente aura une asymptote avant que la fonction $-\frac{\alpha}{\sqrt{V_0-\alpha^2}}$ elle-même ne soit plus définie, ce qui se produira quand α deviendra plus grand que $\sqrt{V_0}$.
La tangente, elle, aura une asymptote si

$$\tan(\alpha) = \infty \qquad \Leftrightarrow \qquad \alpha = \frac{(2n+1)\pi}{2}$$

Ainsi, il y aura un état lié si

$$0 < \alpha < \sqrt{V_0} \qquad \Leftrightarrow \qquad 0 < \frac{(2n+1)\pi}{2} < \sqrt{V_0} \qquad \Leftrightarrow \qquad -\frac{1}{2} < n < \sqrt{\frac{V_0}{\pi^2}} - \frac{1}{2}$$

ce qui est bien la même chose qu'on a obtenu précédemment.

Exercice 6

Si on retourne à nos solution $u_0(r)$, on a trouvé :

$$\begin{cases} u_0(r) = A\sin(\alpha r) & r < 1 \\ u_0(r) = A\sin(\alpha)e^{\epsilon}e^{-\epsilon r} & r > 1 \end{cases}$$

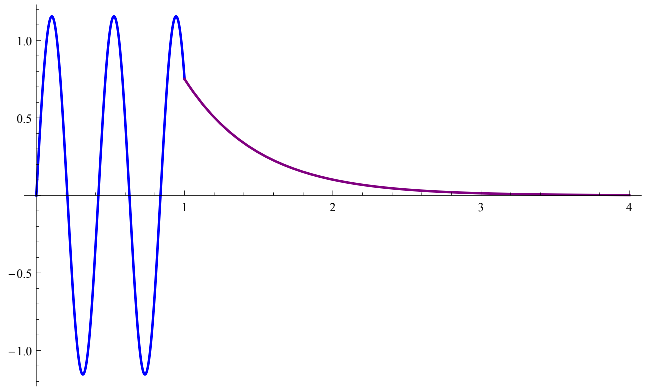
Pour normaliser la fonction, il faut que

$$\int_{-\infty}^{\infty} d^3x|\psi(x)|^2 = 1 \quad \Leftrightarrow \quad \int_0^{\infty}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} drd\theta d\phi r^2 \sin\theta \frac{|u_0(r)|^2}{r^2}|Y_0^0(\theta,\phi)|^2 = 1 \quad \Leftrightarrow \quad \Leftrightarrow \quad \int_0^{\infty} dr|u_0(r)|^2 = 1$$

car les harmoniques sphériques sont déjà normalisées. Ainsi

$$\begin{aligned}
\int_0^{\infty} dr|u_0(r)|^2 &= 1 \\
\int_0^1 dr|A|^2\sin^2(\alpha r) + \int_1^{\infty} dr|A|^2\sin^2(\alpha)e^{2\epsilon(1-r)} &= 1 \\
|A|^2\int_0^1 \frac{1-\cos(2\alpha r)}{2} - \frac{|A|^2\sin^2(\alpha)}{2\epsilon}e^{2\epsilon(1-r)}\Big|_1^{\infty} &= 1 \\
|A|^2\Big(\frac{r}{2} - \frac{\sin(2\alpha r)}{4\alpha}\Big)\Big|_0^1 + \frac{|A|^2\sin^2(\alpha)}{2\epsilon} &= 1 \\
|A|^2\Big(\frac{1}{2} - \frac{\sin(2\alpha)}{4\alpha}\Big) + \frac{|A|^2\sin^2(\alpha)}{2\epsilon} &= 1 \\
|A|^2\Big(\frac{1}{2} - \frac{\sin(2\alpha)}{4\alpha} + \frac{\sin^2(\alpha)}{2\epsilon}\Big) &= 1 \\
|A|^2\Big(\frac{1}{2} - \frac{2\sin(\alpha)\cos(\alpha)}{4\alpha} + \frac{\sin^2(\alpha)}{2\epsilon}\Big) &= 1 \\
|A|^2\Big(\frac{1}{2} + \frac{2\alpha\cos(\alpha)\cos(\alpha)/\epsilon}{4\alpha} + \frac{\sin^2(\alpha)}{2\epsilon}\Big) &= 1 \qquad \text{car } \tan\alpha = -\alpha/\epsilon \Leftrightarrow \sin\alpha = -\alpha\cos\alpha/\epsilon \\
|A|^2\Big(\frac{1}{2} + \frac{\cos^2(\alpha)}{2\epsilon} + \frac{\sin^2(\alpha)}{2\epsilon}\Big) &= 1 \\
|A|^2\Big(\frac{1}{2} + \frac{1}{2\epsilon}\Big) &= 1 \\
A &= \sqrt{\frac{2\epsilon}{1+\epsilon}}
\end{aligned}$$

Graphiquement, les fonctions auront l'air de ceci :
À l'intérieur du puits, on a une fonction sinusoïdale et à l'extérieur, une exponentielle qui décroit. Ainsi, contrairement au cas classique, il y a une probabilité non nulle de se trouver à l'extérieur du puits. Toutefois, cette probabilité diminue quand on s'éloigne du puits.



Exercice 7

$$\begin{aligned} P &= \int_1^\infty dr|A|^2 \sin^2(\alpha) e^{2\epsilon(1-r)} \\ &= \int_1^\infty dr \frac{2\epsilon}{1+\epsilon} \sin^2(\alpha) e^{2\epsilon(1-r)} \\ &= \frac{2\epsilon}{1+\epsilon} \frac{\sin^2(\alpha)}{2\epsilon} e^{2\epsilon(1-r)}\Big|_1^\infty \\ &= \frac{\sin^2(\alpha)}{1+\epsilon} \end{aligned}$$

Or

$$\frac{1}{\sin^2(\alpha)} = 1 + \frac{\cos^2(\alpha)}{\sin^2(\alpha)} = 1 + \frac{\epsilon^2}{\alpha^2} = \frac{\alpha^2+\epsilon^2}{\alpha^2} = \frac{E}{V_0+E}$$

Et donc

$$P = \frac{V_0+E}{V_0(1+\sqrt{-E})}$$

Exercice 8

a)
r représente le rayon entre les deux particules.
m représente la masse réduite

$$m = \frac{m_n m_p}{m_n + m_p} = 8.36887 \times 10^{-28} kg$$

b)
Si on reprend les équations dérivées plus tôt, mais pour des valeurs arbitraires de a, $\hbar$ et $2m$, alors il faut poser $\alpha = \sqrt{\frac{2ma^2}{\hbar^2}(V_0+E)}$ et $\epsilon = \sqrt{-\frac{2ma^2}{\hbar^2}E}$ et l'équation transcendantale devient

$$\tan(\alpha) = \frac{-\epsilon}{\alpha}$$

Le nombre d'états liés est alors $\left[\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2\pi^2}}a - \frac{1}{2}\right] + 1$.

Notons que

$$\frac{\hbar^2}{2ma^2} = \frac{(1.054\times10^{-34})^2}{2\times8.37\times10^{-28}\times(1.5\times10^{-15})^2} = 2.92\times10^{-12}J = 18.23MeV$$

alors, le nombre d'états liés devient

$$\left[\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2\pi^2}}a-\frac{1}{2}\right]+1 = \left[\sqrt{\frac{1}{18.23MeV}\frac{59.64MeV}{\pi^2}}-\frac{1}{2}\right]+1 = [0.08]+1 = 1$$

c)
Puisqu'il n'y a qu'un seul état lié, il y a une seule énergie de liaison. Numériquement, on trouve que $\alpha = 1.7689$ et donc l'énergie de liaison est

$$E = \frac{\hbar^2}{2ma^2}\alpha^2 - V_0 = -2.38MeV$$

d)

$$P(r>1) = \frac{V_0+E}{V_0(1+\sqrt{-E\frac{2ma^2}{\hbar^2}})} = 38\%$$

Il y a donc bien plus de chances que la particule se trouve à l'intérieur du puits.