Mécanique Quantique 1 —– CORRIGÉ

<u>Séance d'exercices 1</u> : 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 $\Delta x\Delta p \geq \hbar$ pour trouver que l'unité de p est celle de $\hbar/longueur$.
Notez qu'on veut rendre r également sans dimension. Pour ceci on définit une variable $r' = r/a$ qui est sans dimension. Alors, $\frac{\partial}{\partial r'} = a\frac{\partial}{\partial r}$ et $\frac{\partial}{\partial r'}\left(r'^2\frac{\partial}{\partial r'}\right) = \frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)$ et l'équation de Schrödinger devient

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

ou encore (en renommant r'=r)

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

Si on choisit les unités telles que $\hbar = 2m = a = 1$, alors l'équation de Schrödinger devient

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

Exercice 3

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

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

ou encore

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

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

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

où

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

est bien connue et ses solutions sont les harmoniques sphériques Y_m^l où l est le nombre quantique azimutal et m le nombre quantique magnétique. Rappelez-vous qu'il y a une solution différente pour chaque valeur de m et l.
Revenons maintenant à l'équation radiale qui devient

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

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

Dans ce problème, on cherche les états liés, c'est-à-dire ce qui ont une énergie qui se trouve dans le puits. On suppose donc que $-V_0 < E < 0$ et on pose $\alpha = \sqrt{V_0 + E}$ et $\epsilon = \sqrt{-E}$. Ces deux constantes sont ainsi toujours positive et on peut donc réécrire nos équations

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

Les solutions de la première équation différentielle sont des exponentielles complexes de la forme $e^{\pm iar}$ 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 $\quad \Rightarrow \quad$ le terme en $e^{\epsilon r}$ doit disparaître $\quad \Rightarrow \quad D = 0$
2. Conditions de continuité
   (a) La fonction doit être continue $\quad \Rightarrow \quad u_{r<1}(r = 1) = u_{r>1}(r = 1) \quad \Rightarrow \quad A\sin(\alpha) = Ce^{-\epsilon}$
   (b) La dérivée doit être continue $\quad \Rightarrow \quad u'_{r<1}(r = 1) = u'_{r>1}(r = 1) \quad \Rightarrow \quad A\alpha\cos(\alpha) = -\epsilon Ce^{-\epsilon}$

La condition de continuité nous permet d'écrire A en fonction de C, mais pas de trouver leur valeur. On trouvera A en utilisant les condition de normalisation dans l'exercice 6. En attendant, en divisant les deux équations précédentes on trouve :

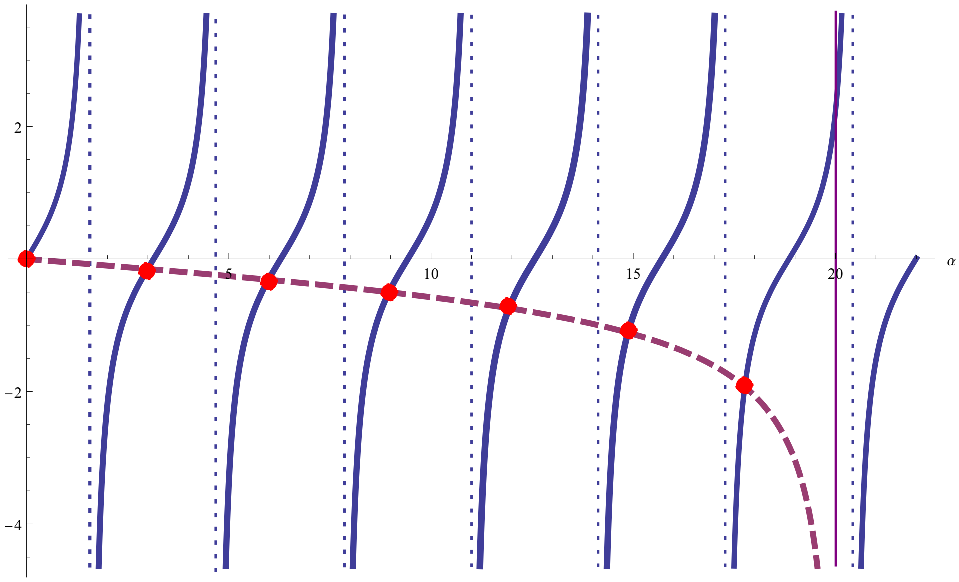
$$\tan(\alpha) = -\frac{\alpha}{\epsilon} \quad \Leftrightarrow \quad \tan(\sqrt{V_0 + E}) = -\frac{\sqrt{V_0 + E}}{\sqrt{-E}}$$

C'est une équation transcendantale. Les valeurs de E 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 discret 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 (ou la résoudre numériquement) et pour rendre le problème plus simple, on peut réécrire cette équation en terme de ϵ ou de α :

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

Exercice 5

Pour résoudre l'équation transcendantale, on trace un graphique en fonction de α :



Premièrement, on note qu'on aura une solution chaque fois que $0 \leq \alpha < \sqrt{V_0}$ (la racine doit être ≥ 0, mais comme elle est au numérateur, elle ne peut pas valoir 0 donc $\sqrt{V_0}$ n'est pas inclus). On note ensuite qu'on aura une solution chaque fois que la tangente aura une asymptote qui se trouve entre 0 et $\sqrt{V_0} + \pi$ (pour bien vous en convaincre, tracez le graphique pour différentes valeurs de V_0 et observez comment évolue le nombre de solutions) . La tangente, aura une asymptote si

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

Ainsi, il y aura un état lié si

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

Il y aura donc $\left[\sqrt{\frac{V_0}{\pi^2}} + \frac{1}{2}\right] + 1$ états liées.

Exercice 6

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

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

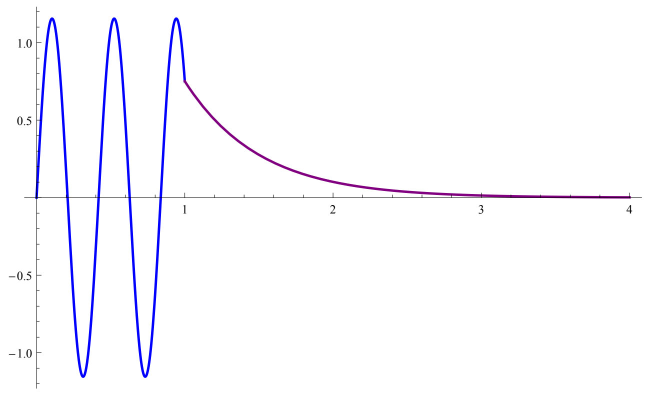
où, dans la seconde équation, on a écrit C en fonction de A en utilisant les conditions de continuité de la fonction. La condition de normalisation va nous permettre de trouver la valeur de A. Pour normaliser la fonction, il faut que

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

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

$$\frac{\hbar^2}{2ma^2} = \frac{(1.054\times 10^{-34})^2}{2\times 8.37\times 10^{-28}\times(1.5\times 10^{-15})^2} = 2.92\times 10^{-12}J = 18.23MeV$$

ou on utilise la conversion $1J = 6,242\times 10^{18}eV$. Alors, le nombre d'états liés devient

$$\left[\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2\pi^2}}a+1/2\right]+1 = \left[\sqrt{\frac{1}{18.23MeV}\frac{59.64MeV}{\pi^2}}+1/2\right]+1 = [0.58+0.5]+1 = 2$$

c)
Puisqu'il n'y a que deux états liés, il y a une seule énergie de liaison non nulle. Numériquement, en résolvant l'équation

$$\tan(\alpha) = -\frac{\alpha}{\sqrt{\frac{2ma^2}{\hbar^2}V_0-\alpha^2}}$$

pour $V_0 = 59.64$ MeV, on trouve que $\alpha = 0$ et $\alpha = 1.77188$ et donc l'énergie de liaison non-nulle est

$$E = \frac{\hbar^2}{2ma^2}\alpha^2 - V_0 = -2.41MeV$$

d)

$$P(r > 1) = \frac{V_0 + E}{V_0(1 + \sqrt{-E\frac{2ma^2}{\hbar^2}})} = 85\%$$