

Mécanique Quantique 1 — CORRIGÉ

Séance d'exercices 7 : 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 :

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

où le laplacien en coordonnées sphérique est

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

Ainsi, l'équation de Schrödinger devient

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

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

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

ou encore

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

Exercice 2

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

où on utilise le fait que $\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$ pour trouver que l'unité de p est celle de $\hbar/\text{longueur}$.

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

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

Exercice 3

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

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

ou encore

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

Mais on sait que

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

et donc l'équation radiale devient

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

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

$$\begin{cases} -u_0''(r) - V_0 u_0(r) = E u_0(r) & r < 1 \\ -u_0''(r) = E u_0(r) & r > 1 \end{cases}$$

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

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

Les solutions de la première équation différentielle sont des exponentielles complexes de la forme $e^{\pm i\alpha r}$ 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 :

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

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

1. Conditions aux bords

(a) $u(0) = 0 \Rightarrow B = 0$

(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 $\Rightarrow u_{r < 1}(r = 1) = u_{r > 1}(r = 1) \Rightarrow A \sin(\alpha) = C e^{-\epsilon}$

(b) La dérivée doit être continue $\Rightarrow u'_{r < 1}(r = 1) = u'_{r > 1}(r = 1) \Rightarrow A \alpha \cos(\alpha) = -\epsilon C e^{-\epsilon}$

Avec ces deux dernières équations on trouve

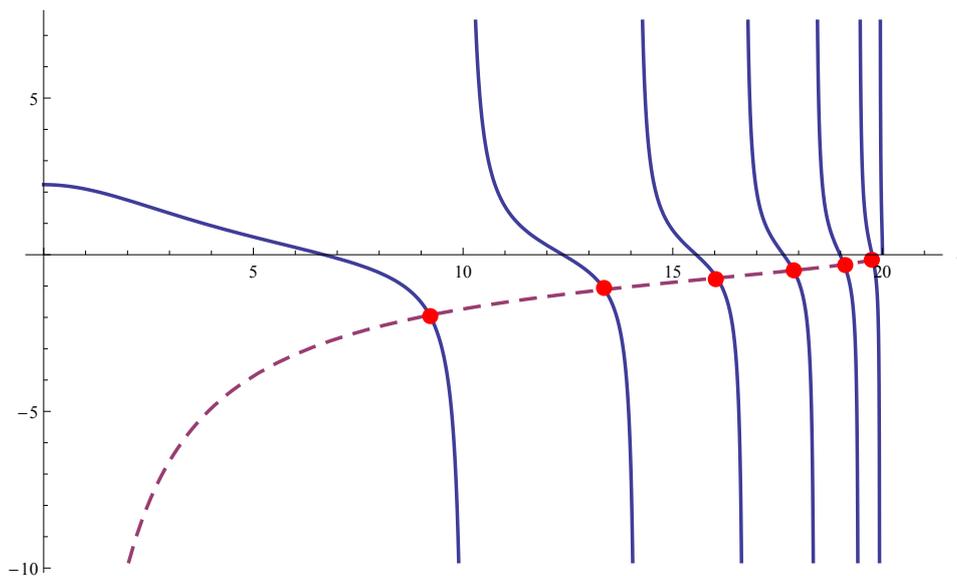
$$\tan(\alpha) = -\frac{\alpha}{\epsilon} \Leftrightarrow \tan(\sqrt{V_0 + E}) = -\frac{\sqrt{V_0 + E}}{\sqrt{-E}} \Leftrightarrow \tan(\sqrt{V_0 - \epsilon^2}) = -\sqrt{\frac{V_0}{\epsilon^2} - 1} \text{ ou } \tan(\alpha) = -\frac{\alpha}{\sqrt{V_0 - \alpha^2}}$$

C'est une équation transcendantale. Les valeurs de ϵ (ou de façon équivalente, celles de α) qui résolvent cette équation 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'intersection, 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 coupe 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 tangente a une asymptote si

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

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

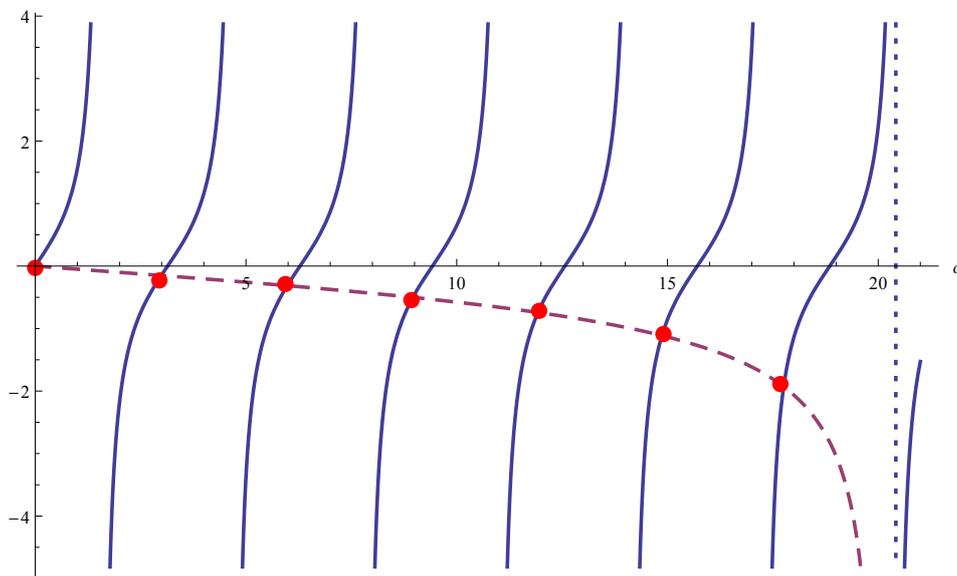
$$-\sqrt{\frac{V_0}{\epsilon^2}} - 1 = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \epsilon_{max} = \sqrt{V_0}$$

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

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

Ainsi, il y aura un état lié si

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

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 :

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

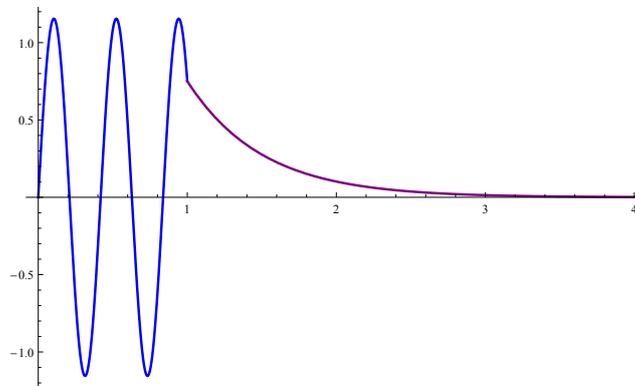
Pour normaliser la fonction, il faut que

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

car les harmoniques sphériques sont déjà normalisées. Ainsi

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

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 décroît. 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

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

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 transcendante 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

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

alors, le nombre d'états liés devient

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

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

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

d)

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

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