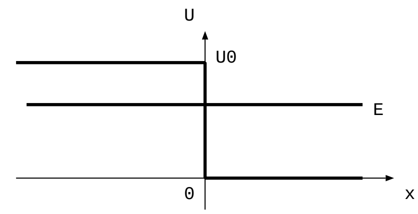
TD 1 mécanique quantique

I. Constante d'intégration nulle 1

Soit une particule dans un état stationnaire d'énergie E. Sa fonction d'onde s'écrit $\underline{\psi}(x,t) = \underline{\phi}(x,t)e^{-i\frac{Et}{\hbar}}$. La particule arrive de $+\infty$ et se déplace dans un potentiel donné sur la figure ci-contre. La partie spatiale de la fonction d'onde s'écrit:

$\phi_I(x,t) = A_I e^{-Kx} + B_I e^{+Kx}$ pour $x < 0$ et $\phi_{II}(x,t) = A_{II}e^{-ikx} + B_{II}e^{+ikx}$ pour $x > 0$.



1. Prévoir les valeurs de x où la particule peut se déplacer du point de vue de la mécanique classique.

2. Ajouter sur le schéma les ondes incidente, réfléchie et transmise associées à la particule.

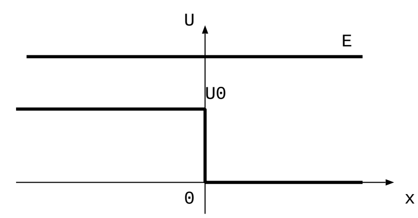
3. Identifier dans les expressions de $\underline{\psi}_I(x,t)$ et $\underline{\psi}_{II}(x,t)$, les termes associés à ces ondes et en déduire parmi les coefficients A_I, A_{II}, B_I et B_{II} celui qui est égal à 0.

4. La partie spatiale de l'équation d'onde vérifie l'équation différentielle $\underline{\phi}''(x) + \dfrac{2m}{\hbar^2}(E-U)\underline{\phi}(x) = 0$. Exprimer k et K en fonction de m, E et U_0.

II. Constante d'intégration nulle 2

Soit une particule dans un état stationnaire d'énergie E. Sa fonction d'onde s'écrit $\underline{\psi}(x,t) = \underline{\phi}(x,t)e^{-i\frac{Et}{\hbar}}$. La particule arrive de $+\infty$ et se déplace dans un potentiel donné sur la figure ci-contre. La partie spatiale de la fonction d'onde s'écrit:

$\phi_I(x,t) = A_I e^{-iKx} + B_I e^{+iKx}$ pour $x < 0$ et $\phi_{II}(x,t) = A_{II}e^{-ikx} + B_{II}e^{+ikx}$ pour $x > 0$.



1. Prévoir les valeurs de x où la particule peut se déplacer du point de vue de la mécanique classique.

2. Ajouter sur le schéma les ondes incidente, réfléchie et transmise associées à la particule.

3. Identifier dans les expressions de $\underline{\psi}_I(x,t)$ et $\underline{\psi}_{II}(x,t)$, les termes associés à ces ondes et en déduire parmi les coefficients A_I, A_{II}, B_I et B_{II} celui qui est égal à 0.

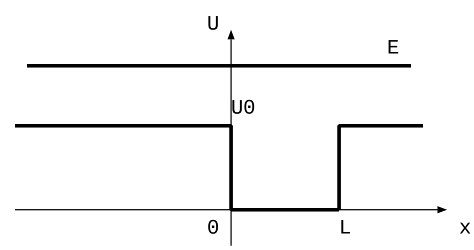
III. Constante d'intégration nulle 3

Soit une particule dans un état stationnaire d'énergie E. Sa fonction d'onde s'écrit $\underline{\psi}(x,t) = \underline{\phi}(x,t)e^{-i\frac{Et}{\hbar}}$. La particule est émise selon $+Ox$ à l'intérieur du puits soit pour $0 < x < L$. La partie spatiale de la fonction d'onde s'écrit:

$\phi_I(x,t) = A_I e^{-iKx} + B_I e^{+iKx}$ pour $x < 0$

$\phi_{II}(x,t) = A_{II}e^{-ikx} + B_{II}e^{+ikx}$ pour $0 < x < L$

et $\phi_{III}(x,t) = A_{III}e^{-iKx} + B_{III}e^{+iKx}$ pour $x > L$



1. Prévoir les valeurs de x où la particule peut se déplacer du point de vue de la mécanique classique.

2. Ajouter sur le schéma les ondes incidente, réfléchie et transmise associées à la particule.

3. Identifier dans les expressions de $\underline{\psi}_I(x,t)$, $\underline{\psi}_{II}(x,t)$ et $\underline{\psi}_{III}(x,t)$, les termes associés à ces ondes et en déduire parmi les coefficients A_I, A_{II}, A_{III}, B_I, B_{II} et B_{III}, ceux qui sont nuls.

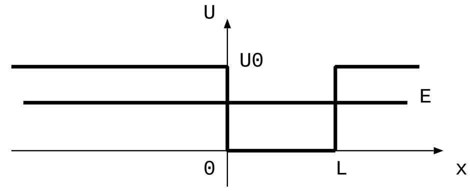
IV. **Constante d'intégration nulle 4**

Soit une particule dans un état stationnaire d'énergie E. Sa fonction d'onde s'écrit $\underline{\psi}(x,t) = \underline{\phi}(x,t)e^{-i\frac{Et}{\hbar}}$. La particule est émise selon $-Ox$ à l'intérieur du puits soit pour $0 < x < L$. La partie spatiale de la fonction d'onde s'écrit:

$\phi_I(x,t) = A_I e^{-Kx} + B_I e^{+Kx}$ pour $x < 0$,

$\phi_{II}(x,t) = A_{II} e^{-ikx} + B_{II} e^{+ikx}$ pour $0 < x < L$

et $\phi_{III}(x,t) = A_{III} e^{-Kx} + B_{III} e^{+Kx}$ pour $x > L$



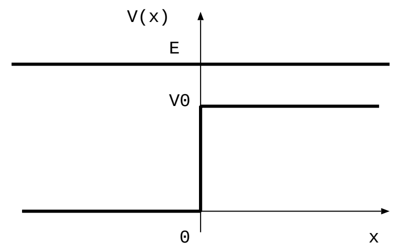
1. Prévoir les valeurs de x où la particule peut se déplacer du point de vue de la mécanique classique.

2. Ajouter sur le schéma les ondes incidente, réfléchie et transmise associées à la particule.

3. Identifier dans les expressions de $\underline{\psi}_I(x,t)$, $\underline{\psi}_{II}(x,t)$ et $\underline{\psi}_{III}(x,t)$, les termes associés à ces trois ondes et en déduire parmi les coefficients A_I, A_{II}, A_{III}, B_I, B_{II} et B_{III}, ceux qui sont nuls.

V. **Marche de potentiel 1**

Soit une particule de masse m et d'énergie E venant des x négatifs. Cette particule est soumise à un potentiel tel que $V(x < 0) = 0$ et $V(x > 0) = V_0 > 0$. On cherche la fonction d'onde de cette particule sous la forme $\psi(x,t) = \phi(x)e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$ avec $E > V_0$. Pour $x < 0$: $\phi(x) = \phi_1(x)$ et pour $x > 0$: $\phi(x) = \phi_2(x)$. On donne l'équation de Schrödinger: $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + V\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}$.



1. Décrire le mouvement de la particule du point de vue de la mécanique classique. Tracer notamment sa vitesse en fonction de x.

Du point de vue quantique, on associe une onde incidente à la particule venant des x négatifs, en $x = 0$, cette onde donne naissance à une onde réfléchie et à une onde transmise.

2. Etablir l'équation différentielle vérifiée par $\phi(x)$ pour $\psi(x,t) = \phi(x)e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$. En déduire les équations différentielles vérifiées par $\phi_1(x)$ et $\phi_2(x)$.

3. La résolution conduit à $\phi_1(x) = Ae^{-ikx} + Be^{+ikx}$ et $\phi_2(x) = Ce^{-iKx} + De^{+iKx}$. Exprimer k et K. Commenter les expressions de $\underline{\psi}_1$ et $\underline{\psi}_2$ en terme d'onde plane. Justifier que $C = 0$.

4. Ecrire les 2 équations de continuité concernant les fonctions $\phi_1(x)$ et $\phi_2(x)$, en déduire les expressions de A et D en fonction de B, k et K.

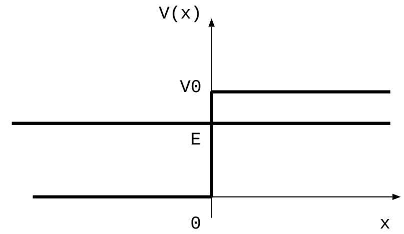
On définit le vecteur densité de courant par $\overrightarrow{J}(x,t) = |\underline{\psi}|^2\frac{\hbar\overrightarrow{k}}{m}$.

5. Exprimer les vecteurs $\overrightarrow{J_i}$, $\overrightarrow{J_r}$ et $\overrightarrow{J_t}$ respectivement, des ondes incidente, réfléchie et transmise. En déduire les coefficients $R = \frac{||\overrightarrow{J}_r(x=0^-,t)||}{||\overrightarrow{J}_i(x=0^-,t)||}$ et $T = \frac{||\overrightarrow{J}_t(x=0^+,t)||}{||\overrightarrow{J}_i(x=0^-,t)||}$ en fonction de k et K. Que représente ces coefficients? Quelle relation y a-t-il entre R et T? Commenter. Trouver une situation physique avec des coefficients semblables.

Réponses : $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$, $D = \frac{2k}{k+K}B$ *et* $A = \frac{k-K}{k+K}B$, $R + T = 1$

VI. **Marche de potentiel 2**

Soit une particule de masse m et d'énergie E venant des x négatifs. Cette particule est soumise à un potentiel tel que $V(x<0)=0$ et $V(x>0)=V_0>0$ avec $0<E<V_0$. On cherche la fonction d'onde de cette particule sous la forme d'un état stationnaire $\psi(x,t)=\phi(x)e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$. Pour $x<0$: $\phi(x)=\phi_1(x)$ et pour $x>0$: $\phi(x)=\phi_2(x)$. On donne l'équation de Schrödinger: $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+V\psi=i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}$.



1. Décrire le mouvement de la particule du point de vue de la mécanique classique.

Du point de vue quantique, on associe une onde incidente à la particule venant des x négatifs, en $x=0$, cette onde donne naissance à une onde réfléchie et à une onde transmise.

2. Etablir l'équation différentielle vérifiée par $\phi(x)$ pour $\psi(x,t)=\phi(x)e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$. En déduire les équations différentielles vérifiées par $\phi_1(x)$ et $\phi_2(x)$.

3. Donner les formes générales de $\phi_1(x)$ et $\phi_2(x)$ en introduisant quatre constantes d'intégration, $\underline{A}_1$ et $\underline{B}_1$ pour ϕ_1 puis $\underline{A}_2$ et $\underline{B}_2$ pour ϕ_2. A_1 correspond à la particule se déplaçant selon $+Ox$. En déduire les fonctions d'onde $\underline{\psi}_i$, $\underline{\psi}_r$ et $\underline{\psi}_t$ associées aux ondes incidente, réfléchie et transmise.

4. Ecrire les équations de continuité en $x=0$ et en déduire le coefficient de réflexion $\underline{r}=\frac{B_1}{A_1}$ ainsi que son module.

On définit le vecteur densité de courant de probabilité par $\overrightarrow{J}(x,t)=\frac{i\hbar}{2m}(\underline{\psi}\frac{\partial\underline{\psi}*}{\partial x}-\underline{\psi}^*\frac{\partial\underline{\psi}}{\partial x})\overrightarrow{e_x}$.

5. Que représente $||\overrightarrow{J}(x,t)dt||$?

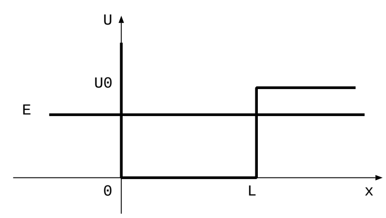
6. Exprimer les vecteurs densité de courant de probabilité $\overrightarrow{J_i}(x,t)$ et $\overrightarrow{J_r}(x,t)$ respectivement pour l'onde incidente et pour l'onde réfléchie. En déduire le coefficient de réflexion R défini par $R=\frac{||\overrightarrow{J}_r(x=0^-,t)||}{||\overrightarrow{J}_i(x=0^-,t)||}$. Commenter.

7. Exprimer le vecteur densité de courant de probabilité $\overrightarrow{J_t}(x,t)$ pour l'onde transmise et conclure sur la valeur de T, le coefficient de transmission.

Réponses: $\underline{\psi}_i=\underline{A}_1e^{i(kx-Et/\hbar)}$, $\underline{\psi}_r=\underline{B}_1e^{-i(kx+Et/\hbar)}$, $\underline{\psi}_t=\underline{A}_2e^{-Kx}e^{-iEt/\hbar}$, $\underline{r}=\frac{K+ik}{-K+ik}$, $R=1$, $T=0$

VII. **Particule dans un puits de potentiel**

On considère une particule de masse m et d'énergie E décrite par sa fonction d'onde: $\psi(x,t)=\phi(x)e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$ qui se déplace dans le puits suivant: $U(x<0)=\infty$, $U(0<x<L)=0$ et $U(x>L)=U_0>0$. L'énergie de la particule est telle que $0<E<U_0$.



1. Montrer que du point de vue de la mécanique classique, la particule est confinée dans un domaine de valeurs de x à préciser.

2. On donne: $\phi(0<x<L)=\frac{1}{\sqrt{L}}\sin(\frac{Kx}{L})$ avec $K=2,029$ et $\phi(x>L)=\frac{A}{\sqrt{L}}e^{-\frac{x}{L}}$ avec $A=2,438$

L'équation de Schrödinger $i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+V(x)\psi(x,t)$.

Poser l'équation qui permet de vérifier que la fonction d'onde est bien normalisée (on ne demande pas de faire le calcul pour vérifier le résultat).

Vérifier que les conditions aux limites sont respectées et représenter la densité de probabilité de présence en fonction de x.

Déduire des fonctions d'onde et de l'équation de Schrödinger, les expressions de E et U_0.

Réponses : $E_1=\frac{h^2}{8mL^2}$, $\phi_1(x)=\sqrt{2}\sin(\frac{\pi x}{L})$, $E=\frac{K^2h^2}{8\pi^2mL^2}$ *et* $U_0=\frac{h^2}{8mL^2}+E$