



Université Ibn Zohr  
Faculté des Sciences d'Agadir  
Département de Physique

## Correction de l'Examen de Méca. Quantique I - SMP4

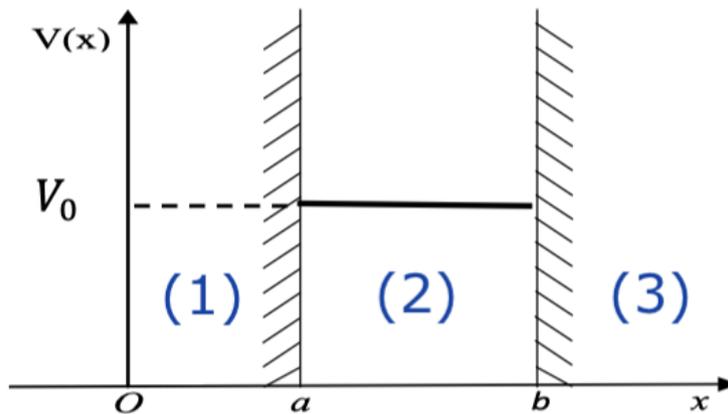
### Problème 1 Etude d'un puits de potentiel infini (10 pts)

Dans l'espace à une dimension, une particule quantique de masse  $m$  et d'énergie  $E$  est enfermée dans un puits de potentiel infini :

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{pour } a \leq x \leq b, \\ +\infty & \text{pour } x < a \text{ ou } x > b. \end{cases}$$

avec :  $0 < a < b$  et  $0 < V_0 < E$ .

1. L'allure de l'énergie potentielle est donnée par la figure ci-dessous



1pt

2. (a) À l'intérieur du puits, où  $a \leq x \leq b$  et  $V(x) = V_0$ , on note la fonction d'onde par  $\phi_2(x) \equiv \phi(x)$ , et on écrit l'équation de Schrödinger indépendante du temps comme :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \phi(x)}{dx^2} + V_0 \phi(x) = E \phi(x) \quad \text{soit encore} \quad \phi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) \phi(x) = 0 \quad (1) \quad (1\text{pt})$$

(b) **La fonction d'onde dans les régions  $x < a$  et  $x > b$  :**

Classiquement, la particule étant piégée dans le puits entre  $a$  et  $b$  (ne peut qu'osciller entre ces deux parois) et donc n'existe pas en dehors.

Quantiquement parlant sa probabilité de présence dans les régions  $x < a$  (1) et  $x > b$  (3) est nulle et par suite les fonctions d'onde ( $\phi_1$  et  $\phi_3$ ) dans ces régions (l'extérieur du puits) est identiquement nulle. (0.5pt)

(c) Dérivée première de la fonction d'onde est discontinue aux points  $x = a$  et  $x = b$

au point  $x=a$

Considérons un nombre  $\varepsilon$  très petit et intégrons l'équation (1) entre  $a - \varepsilon$  et  $a + \varepsilon$  :

$$\int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} \phi''(x) dx = \int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} \frac{2m}{\hbar^2} [V_0 - E] \phi(x) dx \implies \left[ \phi'(x) \right]_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} = \frac{2m}{\hbar^2} \int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} [V_0 - E] \phi(x) dx$$

ensuite faisons tendre  $\varepsilon$  vers 0, il s'en suit que

$$\phi'(a^+) - \phi'(a^-) = \frac{2m}{\hbar^2} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left[ \int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} [V(x) - E] \phi(x) dx \right] \rightarrow \infty$$

Donc la dérivée première n'est pas continue au point  $x = a$ .

Même raisonnement pour  $x = b$ .

1pt

3. La forme de la solution générale de l'équation de Schrödinger est de la forme

$$\phi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

Cela suggère que dans l'équation de Schrödinger, on doit poser :

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) \implies k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0)} \quad (E > V_0) \quad (2)$$

L'argument de l'exponentiel dans la solution doit être sans dimension :  $ikx$  sans dimension

$\implies$  la dimension de  $k$  est celle de l'inverse d'une distance ( $m^{-1}$ ).

0.5pt

4. En utilisant la condition de raccordement (continuité) au point  $x = a$ , on écrit :

$$\phi_1(x = a^-) = \phi_2(x = a^+) \implies Ae^{ika} + Be^{-ika} = 0 \implies B = -Ae^{2ika}$$

et donc

$$\phi(x) = Ae^{ikx} - Ae^{2ika} e^{-ikx} = Ae^{ika} [e^{ikx-ika} - e^{-ikx+ika}] = Ae^{ika} [e^{ik(x-a)} - e^{-ik(x-a)}]$$

soit alors

$$\phi(x) = 2iAe^{ika} \sin [k(x-a)]$$

En posant  $\beta = 2iAe^{ika}$  et  $\alpha = a$ , on écrit finalement

$$\phi(x) = \beta \sin [k(x-\alpha)]$$

1pt

5. La continuité de la fonction d'onde au point  $x = b$  nous permet d'écrire :

$$\phi_2(x = b^-) = \phi_3(x = b^+) = 0 \implies \beta \sin [k(b-\alpha)] = 0 \implies k(b-a) = n\pi$$

ce qui donne :

$$k = \frac{n\pi}{b-a}$$

1pt

(3)

6. (a) expression de  $\phi_n(x)$  en fonction de  $n$ .

D'après ce qui précède, on écrit :

$$\phi(x) = \phi_n(x) = \beta \sin \left[ \frac{n\pi}{b-a} (x-a) \right]$$

0.5pt

(b) Les valeurs que peut prendre l'entier naturel  $n$

La fonction d'onde  $\phi(x)$  doit être non nulle car la probabilité de présence de la particule dans le puits est non nulle  $\implies n \neq 0$ ,  $n$  est donc un entier naturel non nul ( $n \in \mathbb{N}^*$ ).

0.5pt

(c) Les deux premières fonctions d'onde.

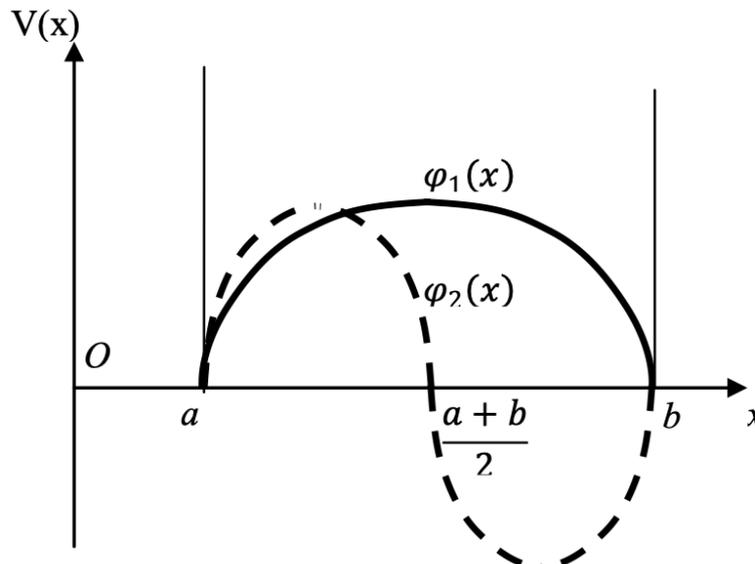
La première fonction d'onde correspond à  $n = 1$  et s'exprime par

$$\phi(x) = \phi_n(x) = \beta \sin \left[ \frac{\pi}{b-a} (x-a) \right]$$

et s'annule en deux points  $x = a$  et  $x = b$ . La deuxième fonction d'onde correspond à  $n = 2$  et s'exprime par

$$\phi(x) = \phi_n(x) = \beta \sin \left[ \frac{2\pi}{b-a} (x-a) \right]$$

et s'annule en trois points  $x = a$ ,  $x = (a+b)/2$  et  $x = b$ . Voir figure ci-dessous.



1.5pt

7. (a) Dédution

D'après l'expression de  $k$  et  $k^2$  données par les Eq (2) et (3) respectivement, on écrit:

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) \quad \text{et} \quad k^2 = \frac{n^2 \pi}{(b-a)^2} = k_n^2$$

il s'en suit que l'énergie de la particule s'écrit sous la forme :

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 + V_0 \implies E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{n^2 \pi}{(b-a)^2} + V_0 \quad (\text{Soit } D = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi}{(b-a)^2})$$

$$E_n = D n^2 + V_0$$

1pt

(b) Peut-on avoir  $E_n = V_0$  ?

Le cas  $E_n = V_0$  est à écarter car il entraîne  $n = 0$  et donc fonction nulle (réponse 6-b).

0.5pt

**Problème 2 (10 pts)**

On considère l'électron d'une molécule formée de deux atomes  $A$  et  $B$ . Soient  $|\phi_A\rangle$  et  $|\phi_B\rangle$  les deux kets orthonormés qui décrivent l'état de cet électron lorsqu'il est localisé autour de  $A$  et de  $B$  respectivement. L'hamiltonien  $H$  qui décrit l'état d'énergie de l'électron est de la forme :

$$H = H_0 + W$$

$H_0$  décrit l'électron lorsqu'il est localisé autour des atomes  $A$  et  $B$ . L'observable  $W$  rend compte de la possibilité pour l'électron de passer d'un atome à l'autre. Ces deux observables sont définies dans la base  $\{|\phi_A\rangle, |\phi_B\rangle\}$  par :

$$\begin{aligned} H_0 |\phi_A\rangle &= E_0 |\phi_A\rangle & , & & H_0 |\phi_B\rangle &= E_0 |\phi_B\rangle \\ W |\phi_A\rangle &= -a |\phi_B\rangle & , & & W |\phi_B\rangle &= -a |\phi_A\rangle \end{aligned}$$

$E_0$  et  $a$  sont des constantes réelles.

1. (a) Dans la base  $\{|\phi_A\rangle, |\phi_B\rangle\}$ , la matrice  $\hat{H}$  représentant l'hamiltonien  $H$  s'écrit :

$$\hat{H} = \begin{matrix} & \begin{matrix} |\phi_A\rangle & |\phi_B\rangle \end{matrix} \\ \begin{matrix} \langle\phi_A| \\ \langle\phi_B| \end{matrix} & \begin{pmatrix} E_0 & -a \\ -a & E_0 \end{pmatrix} \end{matrix} \quad (0.5pt)$$

- (b) Les valeurs propres  $E_+$  et  $E_-$  de l'observable  $H$  sont les valeurs propres de la matrice  $\hat{H}$ . Elles sont déterminées en calculant le déterminant de  $\hat{H}$  comme suite :

$$\begin{aligned} \det(\hat{H} - \lambda \mathbb{I}_{2 \times 2}) &= \begin{vmatrix} E_0 - \lambda & -a \\ -a & E_0 - \lambda \end{vmatrix} = 0 \\ \iff & (E_0 - \lambda)^2 - a^2 = 0 \\ \iff & (E_0 - \lambda - a)(E_0 - \lambda + a) = 0 \end{aligned}$$

Les valeurs propres de  $\hat{H}$  sont alors

$$E_- = E_0 - a \quad (\text{simple}) \quad (0.5pt)$$

$$E_+ = E_0 + a \quad (\text{simple}) \quad (0.5pt)$$

- (c) Soient  $|\phi_-\rangle$  et  $|\phi_+\rangle$  les deux états propres de  $H$  correspondant aux deux valeurs propres ci-dessus. Alors, d'après la définition, on peut écrire

- $|\phi_-\rangle = \alpha_1 |\phi_A\rangle + \beta_1 |\phi_B\rangle$  le vecteur propre associé à  $\rightarrow E_- = E_0 - a$ .
- $|\phi_+\rangle = \alpha_2 |\phi_A\rangle + \beta_2 |\phi_B\rangle$  le vecteur propre associé à  $\rightarrow E_+ = E_0 + a$ .

Alors

- On cherche le vecteur  $|\phi_-\rangle$  vérifiant  $\hat{H} |\phi_-\rangle = E_- |\phi_-\rangle$  tel que  $\langle\phi_-|\phi_-\rangle = \alpha_1^2 + \beta_1^2 = 1$ . On obtient alors le système :

$$\begin{aligned} \hat{H} |\phi_-\rangle = E_- |\phi_-\rangle = (E_0 - a) |\phi_-\rangle &\implies \begin{pmatrix} E_0 & -a \\ -a & E_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \beta_1 \end{pmatrix} = (E_0 - a) \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \beta_1 \end{pmatrix} \\ &\implies \begin{cases} E_0 \alpha_1 - a \beta_1 = E_0 \alpha_1 - a \alpha_1 \\ -a \alpha_1 + E_0 \beta_1 = E_0 \beta_1 - a \beta_1 \end{cases} \implies \beta_1 = \alpha_1 \end{aligned}$$

Aussi

$$\alpha_1^2 + \beta_1^2 = 1 \implies \alpha_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\theta} = \beta_1; \text{ avec } \theta \in \mathbb{R}.$$

Donc

$$|\phi_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|\phi_A\rangle + |\phi_B\rangle] \quad (1.5\text{pt})$$

○ On cherche le vecteur  $|\phi_+\rangle$  vérifiant  $\hat{H}|\phi_+\rangle = E_+|\phi_+\rangle$  tel que  $\langle\phi_+|\phi_+\rangle = \alpha_2^2 + \beta_2^2 = 1$  et  $\langle\phi_-|\phi_+\rangle = 0$ . On obtient alors le système :

$$\begin{aligned} \hat{H}|\phi_+\rangle = E_+|\phi_+\rangle = (E_0 + a)|\phi_+\rangle &\implies \begin{pmatrix} E_0 & -a \\ -a & E_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_2 \\ \beta_2 \end{pmatrix} = (E_0 + a) \begin{pmatrix} \alpha_2 \\ \beta_2 \end{pmatrix} \\ &\implies \begin{cases} E_0\alpha_2 - a\beta_2 = E_0\alpha_2 + a\alpha_2 \\ -a\alpha_2 + E_0\beta_2 = E_0\beta_2 + a\beta_2 \end{cases} \implies \beta_2 = -\alpha_2 \end{aligned}$$

Aussi

$$\alpha_2^2 + \beta_2^2 = 1 \implies \alpha_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\theta} = -\beta_2; \text{ avec } \theta \in \mathbb{R}.$$

Donc

$$|\phi_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|\phi_A\rangle - |\phi_B\rangle] \quad (1.5\text{pt})$$

On suppose qu'à l'instant initial  $t = 0$ , l'électron est localisé autour de l'atome  $B$ , c'est-à-dire que son état initial est  $|\psi(0)\rangle = |\phi_B\rangle$ .

2. (a) État  $|\psi(t)\rangle$  de l'électron à l'instant  $t > 0$ , dans la base  $\{|\phi_A\rangle, |\phi_B\rangle\}$  :  
L'hamiltonien  $H$  étant indépendant du temps, l'état du système à l'instant  $t$  peut être déterminé en appliquant l'opérateur d'évolution  $U(t, 0) = e^{\frac{-i}{\hbar} H t}$  sur l'état initial  $|\psi(0)\rangle$  :

$$|\psi(t)\rangle = U(t, 0) |\psi(0)\rangle = e^{\frac{-i}{\hbar} H t} |\psi(0)\rangle \quad (0.5\text{pt})$$

Comme  $|\phi_B\rangle$  n'est pas état propre de  $H$ , il faut exprimer  $|\phi_B\rangle$  dans la base propre de  $H$ . On écrit alors,

$$\left. \begin{aligned} |\phi_+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} [|\phi_A\rangle - |\phi_B\rangle] \\ |\phi_-\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} [|\phi_A\rangle + |\phi_B\rangle] \end{aligned} \right\} \implies |\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [-|\phi_+\rangle + |\phi_-\rangle]$$

et donc l'état  $|\psi(t)\rangle$  devient :

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} e^{\frac{-i}{\hbar} H t} [-|\phi_+\rangle + |\phi_-\rangle] = \frac{1}{\sqrt{2}} [-e^{\frac{-i}{\hbar} E_+ t} |\phi_+\rangle + e^{\frac{-i}{\hbar} E_- t} |\phi_-\rangle] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} e^{\frac{-i}{\hbar} E_0 t} [-e^{\frac{-i}{\hbar} a t} |\phi_+\rangle + e^{\frac{i}{\hbar} a t} |\phi_-\rangle] \end{aligned}$$

Finalement, exprimons  $|\psi(t)\rangle$  dans la base  $\{|\phi_A\rangle, |\phi_B\rangle\}$ , en remplaçant les kets  $|\phi_+\rangle$  et  $|\phi_-\rangle$  par leurs expressions dans cette base :

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} e^{\frac{-i}{\hbar} E_0 t} \left\{ -e^{\frac{-i}{\hbar} a t} \frac{1}{\sqrt{2}} [|\phi_A\rangle - |\phi_B\rangle] + e^{\frac{i}{\hbar} a t} \frac{1}{\sqrt{2}} [|\phi_A\rangle + |\phi_B\rangle] \right\} \\ &= \frac{1}{2} e^{\frac{-i}{\hbar} E_0 t} \left[ \left( e^{\frac{i}{\hbar} a t} - e^{\frac{-i}{\hbar} a t} \right) |\phi_A\rangle + \left( e^{\frac{i}{\hbar} a t} + e^{\frac{-i}{\hbar} a t} \right) |\phi_B\rangle \right] \end{aligned}$$

Soit alors

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} E_0 t} \left[ i \sin\left(\frac{at}{\hbar}\right) |\phi_A\rangle + \cos\left(\frac{at}{\hbar}\right) |\phi_B\rangle \right] \quad (1.5\text{pt})$$

Ou bien, puisque  $e^{-\frac{i}{\hbar} E_0 t}$  est un facteur de phase global :

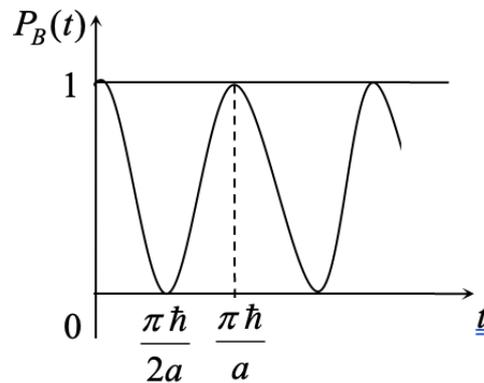
$$|\psi(t)\rangle = i \sin\left(\frac{at}{\hbar}\right) |\phi_A\rangle + \cos\left(\frac{at}{\hbar}\right) |\phi_B\rangle$$

- (b) Probabilités  $P_A(t)$  et  $P_B(t)$  pour que l'électron soit localisé autour des atomes  $A$  et  $B$  à l'instant  $t > 0$ .

$$P_A(t) = |\langle \phi_A | \psi(t) \rangle|^2 = \left| i \sin\left(\frac{at}{\hbar}\right) \right|^2 = \sin^2\left(\frac{at}{\hbar}\right) \quad (1\text{pt})$$

$$P_B(t) = |\langle \phi_B | \psi(t) \rangle|^2 = \left| \cos\left(\frac{at}{\hbar}\right) \right|^2 = \cos^2\left(\frac{at}{\hbar}\right) \quad (1\text{pt})$$

- (c) Allure de  $P_B(t)$  en fonction du temps.



(0.5pt)

Conclusion :

Les probabilités  $P_A(t)$  et  $P_B(t)$  qu'à l'électron d'être localiser autour des atomes  $A$  et  $B$ , sont des fonctions périodiques du temps. Ainsi, l'électron oscille de façon périodique entre les deux atomes.

- (d) Instants  $t_n$  où l'électron est parfaitement localisé autour de l'atome  $B$ .  
L'électron est parfaitement localisé autour de l'atome  $B$  quand  $P_B(t) = 1$ . Donc

$$P_B(t) = 1 \quad \implies \quad \cos^2\left(\frac{at}{\hbar}\right) = 1 \quad \implies \quad \frac{at}{\hbar} = n\pi$$

Il s'en suit alors que

$$t_n = n \frac{\pi\hbar}{a} ; \quad n \in \mathbb{N} \quad (0.5\text{pt})$$

- (e) Période d'oscillation de l'électron entre les atomes  $A$  et  $B$  est donc :

$$T = \frac{\pi\hbar}{a} \quad (0.5\text{pt})$$