

T.D. de Mécanique Quantique - SMP4
Série N°2

Exercice 1: Seuil de potentiel

On considère une particule de masse m animée d'une vitesse v soumise à un potentiel $V(r)$ indépendant du temps.

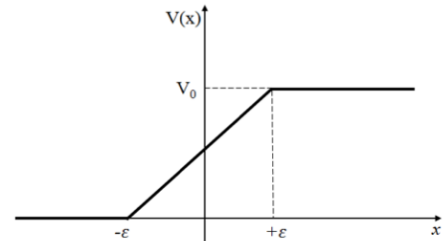
- 1) Écrire l'équation de Schrödinger de cette particule.
- 2) En posant les fonctions d'onde décrivant cette particule sous la forme : $\psi(\vec{r}, t) = \phi(\vec{r})u(t)$.

Montrer que : $u(t) = Ae^{-\frac{i}{\hbar}Et}$ et que $\phi(\vec{r})$ obéit à l'équation de Schrödinger indépendante du temps de la forme $H\phi(\vec{r}) = E\phi(\vec{r})$

- 3) En se plaçant à une dimension et en prenant $V(x)$ comme indiqué ci-contre

i) Exprimer $\phi'(\epsilon) - \phi'(-\epsilon)$

ii) Calculer la limite de cette quantité quand $\epsilon \rightarrow 0$ selon que V est fini ou infini. Conclure



Exercice 2: Puits de potentiel infini

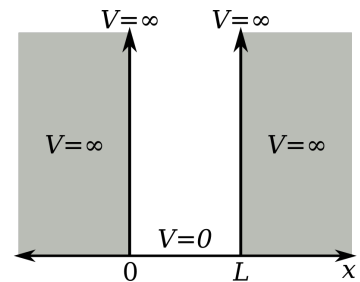
Considérons une particule de masse m , astreinte à se déplacer sur l'axe $x'ox$ entre $x = 0$ et $x = L$, comme montre la figure ci-contre.

- 1) Écrire l'équation de Schrödinger pour ce système.
- 2) Résoudre cette équation et montrer que l'énergie est quantifiée.
- 3) En déduire l'expression de la fonction d'onde d'une particule dans un puits de potentiel infini.
- 4) Calculer la probabilité de présence de la particule en un point quelconque du puits.

En quels points la densité de probabilité est maximale ?

- 5) Calculer la probabilité de présence de la particule dans les cas suivants $0 \leq x \leq L$; $0 \leq x \leq L/4$, $L/2 - \delta \leq x \leq L/2 + \delta$.

- 6) Calculer la séparation d'énergie pour deux niveaux voisins E_n et E_{n+1} . Que devient cette séparation si L devient très grand (dimension macroscopique). Qu'est ce qu'on peut dire de la quantification d'énergie ?



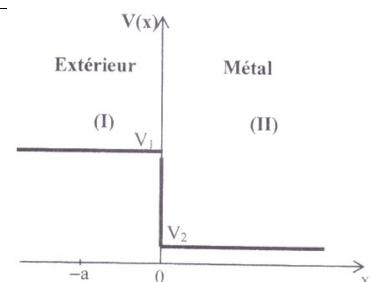
Exercice 3: Marche de potentiel "inversée"

Soit un système de masse m et d'énergie E soumis au potentiel $V(x)$ tel que : $V(x) = V_1$ pour $x < 0$ et $V(x) = V_2$ pour $x > 0$.

Un tel système pourrait par exemple représenter l'interaction d'un électron libre et la structure atomique d'un métal situé en $x > 0$. Considérons que l'électron est libéré du métal et se déplace vers les x négatifs.

A)-1^{er} cas : $E > V_1 > V_2$

- 1) Écrire l'équation de Schrödinger stationnaire dans chacune des régions (I) et (II).
- 2) Résoudre l'équation de Schrödinger et préciser la nature de chaque terme.
- 3) Écrire les conditions de continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée au point $x = 0$.
- 4) Définir le coefficient de transmission T , c'est-à-dire la probabilité pour que l'électron quitte



le métal. Expliciter T en fonction de k_1 et k_2 ; où k_1 et k_2 sont les vecteurs d'ondes (à définir).
Même question pour R et vérifier que $T + R = 1$.

5) Écrire T en fonction de V_1 , V_2 et E et faire application numérique avec : $E = 1 \text{ eV}$, $V_1 = 0 \text{ eV}$ et $V_2 = -10 \text{ eV}$. Commenter.

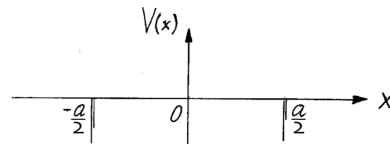
B)-2^{me} cas : $V_2 < E < V_1$

- 1) Que devient la solution de l'équation de Schrödinger dans la zone (I) ? Interpréter ce résultat.
- 2) Donner une explication qualitative du phénomène qui aura lieu si on considère que la zone (I) présente une 2^{me} discontinuité de potentiel (V_3) à $x = -a$ et que $V_2 < V_3 < E < V_1$ (barrière de potentiel).

Exercice 4: États liés de l'électron de l'ion H_2^+

L'ion H_2^+ est constitué de deux protons p_1 et p_2 séparés par la distance a et d'un seul électron. On veut étudier les états liés de l'électron de masse m et d'énergie $E < 0$, sous l'attraction des deux protons supposés **immobiles**. Le potentiel ressenti par l'électron peut être modélisé par le double puits 'delta' de Dirac suivant

$$V(x) = -\alpha\delta(x + \frac{a}{2}) - \alpha\delta(x - \frac{a}{2})$$



où α est une constante positive.

Dans ce qui suit, on posera :

$$q^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2}, \quad \mu = \frac{2m\alpha}{\hbar^2} \quad \text{et} \quad E_L = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}$$

- 1) Écrire l'équation de Schrödinger et donner l'expression de la fonction d'onde $\phi(x)$ de l'électron en présence du potentiel $V(x)$ dans les trois régions de l'espace.
- 2) En tenant compte de la symétrie du potentiel, donner les états liés **symétriques** (ou **pairs**) $\phi_S(x)$ et **antisymétriques** (ou **impairs**) $\phi_A(x)$
- 3) Montrer que la dérivée première $\phi'(x)$ subit une discontinuité au point $x = a/2$ de la forme :

$$\phi'\left(\frac{a}{2}^+\right) - \phi'\left(\frac{a}{2}^-\right) = \beta\phi\left(\frac{a}{2}\right)$$

où β est une constante que l'on déterminera en fonction de la constante μ .

- 4) En écrivant les équations de raccordement de $\phi(x)$ et de $\phi'(x)$ en $x = a/2$, montrer que les énergies possibles des états liés symétriques et antisymétriques sont données par

$$e^{-qa} = \pm(\gamma q - 1)$$

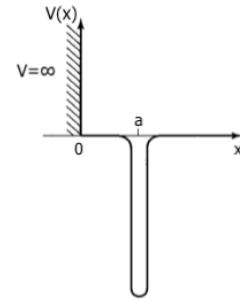
où γ est une constante que l'on déterminera en fonction de μ .

- 5) a) Donner une résolution graphique de cette équation
- b) En déduire que les deux solutions possibles, que l'on note q_S et q_A , se situent de part et d'autre d'une certaine valeur q_0 que l'on déterminera en fonction de μ
- c) En déduire que l'énergie E_S de l'état symétrique (état fondamental) est inférieure à l'énergie $-E_L$, et que l'énergie E_A de l'état antisymétrique (état excité) est supérieure à l'énergie $-E_L$.

Exercice 5: Puits de potentiel infini + delta (facultatif)

Considérons une particule de masse m et d'énergie $E < 0$, astreint à se déplacer sur l'axe ox de $x = 0$ à l'infini, dans le potentiel $V(x)$ de la forme (voir figure ci-contre)

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x < 0 \\ -\alpha\delta(x-a) & x > 0 \end{cases} \quad \text{où } \alpha \text{ est positive}$$



- 1) Écrire l'équation de Schrödinger pour ce système dans les deux régions : $x \in]0, a[$ et $x \in]a, +\infty[$, en donnant les valeurs de l'énergie $E < 0$ et les fonctions d'onde $\psi(x)$ représentant des états liés de la particule. En déduire la forme générale de $\psi(x)$. On posera $k^2 = -2mE/\hbar^2$ (N.B : on tiendra compte de la limite asymptotique lorsque $x \rightarrow +\infty$).
- 2) Quelle est la valeur de $\psi(0)$? Justifier votre réponse. Que devient dans ce cas l'expression de $\psi(x)$ dans la région $x \in]0, a[$?
- 3) Écrire la condition satisfaite par $\psi(x)$ au point $x = a$.
- 4) Exprimer la discontinuité de la dérivée première $\psi'(x)$ de la fonction d'onde au point $x = a$ en fonction de $\psi(a)$ et de la constante $k_0 = 2m\alpha/\hbar^2$. On donne :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\delta(x-x_0)dx = f(x_0)$$

- 5) Déduire des questions précédentes l'équation de quantification donnant les valeurs possibles de k sous la forme $x \coth(x) = h(x)$, où x et $h(x)$ sont à déterminer en fonction de k , k_0 et a .
- 6) Résoudre graphiquement cette équation et donner la condition sur α exprimant l'existence d'un état lié de la particule.

Exercice 6: États liés (facultatif)

Une particule de masse m se déplace dans un puits de potentiel asymétrique unidimensionnel, $V(x)$, donné par

$$V(x) = \begin{cases} U_1 & \text{for } x < 0, \\ 0 & \text{for } 0 < x < a, \\ U_2 & \text{for } x > a. \end{cases}$$

avec $0 < U_1 < U_2$.

Déterminer le spectre d'énergie discrète de cette particule, on suppose que $0 < E < U_1 < U_2$.