Travaux Dirigés n⁰1

Exercice 01

Dans un problème à une dimension, une particule est décrite à l'instant t=0 par la fonction d'onde :

$\Psi(x) = N \exp\left(-\frac{|x|}{a}\right)$,   Où **a** est une constante réelle.

(1) Calculer N ?

(2) Donner les dimensions des constantes a et N.

(3) Quelle est la probabilité de mesurer la particule entre -a/2 et +a/2 ?

(4) Calculer les valeurs moyennes $<x^2>$ et $<V(x)>$, où $\hat{V}(x) = -\frac{1}{x}$. On rappelle que : $\int_0^{\infty} x^n e^{-\alpha x} dr = \frac{n!}{(\alpha)^{n+1}}$

Exercice 02

1. On note H_{libre} l'énergie d'une particule libre de masse m en mécanique classique.
   - Exprimer H_{libre} en fonction de m, p_x
   - Ecrire l'opérateur correspondant $\widehat{H}_{libre}$ en mécanique quantique.
   - Qu'obtient-on si on applique $\widehat{H}_{libre}$ à la fonction d'onde $\psi(x)$?
2. Calculer les commutateurs suivants : $[\hat{x}, \hat{p}_x]$ et $[\hat{p}_x, \hat{H}_{libre}]$.
3. Est-il possible de mesurer simultanément la position et la quantité de mouvement d'une particule libre ? Justifier.

Exercice 03

On considère la fonction $\Psi_1(x)$, la résolution de l'équation de Schrödinger d'une particule libre à l'état stationnaire : $\Psi_1(x) = N \sin\left(\frac{\pi}{L}\right).x$

1. Déterminer le facteur de normalisation de la fonction $\Psi_1(x)$
2. Ecrire l'équation de Schrödinger d'une particule libre.
3. Déterminer les valeurs propres du système dans cet état.
4. Calculer les valeurs moyennes $<x>$ et $<P_x>$.
5. Etudier et tracer la courbe de la densité de probabilité de présence de la particule ($D(x) = \frac{dP}{dx}$) en fonction de x. En déduire la position probable de la particule.

On donne : $\sin^2\left(\frac{n.\pi}{L}\right).x = \frac{1}{2}\left(1 - \cos\left(\frac{2.n.\pi}{L}\right).x\right)$

Exercice 04

On considère la fonction $\Psi_0(x)$, la résolution de l'équation de Schrödinger d'un oscillateur harmonique à l'état fondamental (l'état stationnaire) selon une dimension : $\Psi_0(x) = N \exp\left(-\frac{x^2}{\alpha}\right)$ et $x \in]-\infty, +\infty[$

1. Déterminer le facteur de normalisation de la fonction $\Psi_0(x)$
2. Calculer l'énergie moyenne en fonction de α, où $\hat{V}(x) = \frac{1}{2} k.x^2$.

3. Pour quelle valeur de α, l'énergie est-elle minimale ? On donne :

$$\int_0^{\infty} x^{2n} e^{-\alpha x^2} dx = \frac{1\times3\times5\times\ldots\times(2n-1)}{2^{n+1}}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha^{2n+1}}} \ ; \ \int_0^{\infty} e^{-ax^2} dx = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{a}} \ ; \ \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

$\alpha = \sqrt{\dfrac{m.k}{\hbar}}$ et w $= \sqrt{\dfrac{k}{m}}$

……

Corrigé Type de Travaux Dirigés n⁰1

Exercice 01:

On a : $\Psi(x) = N \exp\left(-\dfrac{|x|}{a}\right)$, Où **a** est une constante réelle.

1. Calculer N

On applique la condition de normalisation : $\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x)|^2 .dx = 1 \Rightarrow N^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\dfrac{2|x|}{a}\right) dx = 1$

On a : $\Rightarrow 2N^2 \int_0^{+\infty} \exp\left(-\dfrac{2x}{a}\right) dx = 1 \Rightarrow 2N^2.\left(-\dfrac{a}{2}\right).\exp\left(-\dfrac{2x}{a}\right)\Big|_0^{+\infty} = 1$

$$\Rightarrow 2N^2.\left(-\frac{a}{2}\right).(0-1) = 1 \Rightarrow 2N^2.a = 1 \Rightarrow N = \frac{1}{\sqrt{a}}$$

2. les dimensions des constantes **a** et N

$$a = [L] \text{ et } N = \frac{1}{\sqrt{a}} = \frac{1}{\sqrt{L}} = L^{-1/2}$$

3. la probabilité de mesurer la particule entre -a/2 et +a/2

$$dP = |\Psi(x)|^2 .dx \Rightarrow p\left(-\frac{a}{2}, \frac{a}{2}\right) = \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} |\Psi(x)|^2 .dx = N^2 \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \exp\left(-\frac{2|x|}{a}\right) dx$$

$$\Rightarrow P\left(-\frac{a}{2}, \frac{a}{2}\right) = N^2 \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \exp\left(-\frac{2|x|}{a}\right) dx = N^2 \int_0^{\frac{a}{2}} \exp\left(-\frac{2x}{a}\right) dx$$

$$\Rightarrow P\left(-\frac{a}{2}, \frac{a}{2}\right) = 2N^2.\left(-\frac{a}{2}\right).\exp\left(-\frac{2x}{a}\right)\Big|_0^{a/2} = 2N^2.\left(-\frac{a}{2}\right).\left(1/e - 1\right)$$

$$\Rightarrow P\left(-\frac{a}{2}, \frac{a}{2}\right) = 2\left(-\frac{a}{2}\right).\left(1/e - 1\right).1/a = 1 - e^{-1} = 0{,}6321$$

$$\Rightarrow P\left(-\frac{a}{2}, \frac{a}{2}\right) = 63{,}21\%$$

4. Calcul les valeurs moyennes $<x^2>$ et $<V(x)>$, et $\hat{V}(x) = -1/x$

4.1 $<x^2>$

- $x^2.\Psi(x) \neq const.\Psi(x)$
- $\langle \Psi(x) | \Psi(x) \rangle = 1$, (la condition est vérifiée dans la question1)

$$\bar{x}^2 = \int_E \Psi^*(x).x.^2\Psi(x)dx = N^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{|x|}{a}\right).x^2.\exp\left(-\frac{|x|}{a}\right)dx$$

- $$\bar{x}^2 = 2N^2 \int_0^{+\infty} x^2.\exp\left(-\frac{2|x|}{a}\right).dx = 2N^2.\left(\frac{2*1}{\left(2/a\right)^3}\right) = 2.\frac{1}{a}.\frac{a^3}{8} = \frac{a^2}{4}$$

$$\bar{x}^2 = \frac{a^2}{4}$$

4.2 $\langle \hat{V}(x) \rangle = -\frac{1}{x}$

- $-\frac{1}{x}.\Psi(x) \neq const.\Psi(x)$
- $\langle \Psi(x) | \Psi(x) \rangle = 1$, (la condition est vérifiée dans la question1)

$$\left\langle -\frac{1}{x} \right\rangle = \int_E \Psi^*(x).\left(-\frac{1}{x}\right)\Psi(x)dx = -N^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{|x|}{a}\right).\frac{1}{x}.\exp\left(-\frac{|x|}{a}\right)dx$$

$$\left\langle -\frac{1}{x} \right\rangle = 2N^2 \int_0^{+\infty} x^{-1}.\exp\left(-\frac{2x}{a}\right).dx = -2N^2.\left(\frac{-1}{\left(2/a\right)^0}\right) = 2.\frac{1}{a}. = \frac{2}{a}$$

$$\left\langle -\frac{1}{x} \right\rangle = \frac{2}{a}$$

Exercice 2 :

1. J'exprime H_{libre} en fonction de m, p_x

$$H_x = E_{c,x} + V(x) = E_{c,x} \text{ et } V(x) = 0 \text{ (particule libre)}$$

On a :

$$H_x = E_{c,x} = \frac{1}{2} m_e.v_x^2 = \frac{p_x^2}{2.m}$$

2. Ecrire l'opérateur correspondant $\widehat{H}_{libre}$ en mécanique quantique.

$$H_x \to \hat{H}_x \Rightarrow p_x = \hat{p}_x$$

$$\Rightarrow \hat{H}_x = \frac{\hat{p}_x^2}{2.m_e} = -\frac{\hbar^2}{2.m_e}\frac{d^2}{dx^2}$$

3. Applique $\widehat{H}_{libre}$ à la fonction d'onde $|\psi\rangle$:

$$\hat{H}_x|\psi\rangle = E|\psi\rangle \Rightarrow \left(-\frac{\hbar^2}{2.m_e}\frac{d^2}{dx^2}\right)|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

Par exemple, pour $|\psi_1(x)\rangle = \sqrt{\frac{2}{L}}.\sin\left(\frac{\pi}{L}\right)$, on a :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2.m_e}\frac{d^2}{dx^2}\right)|\psi_1(x)\rangle = E_1|\psi_1(x)\rangle$$

Aprés de quelque manipulation, on trouve :

$$E_1 = \frac{h^2}{8.m_e.L^2}$$

4. Calcul les commutateurs suivants : $[\hat{x}, \hat{p}_x]$ et $[\hat{p}_x, \hat{H}_{libre}]$

   $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i.\hbar$ et $[\hat{p}_x, \hat{H}_{libre}] = 0$

5. On ne peut pas mesurer simultanément la position et la quantité de mouvement d'une particule libre, car le commutateur $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i.\hbar \neq 0$

<u>Exercice 3</u> :

On a : $\Psi_1(x) = N\sin\left(\frac{\pi}{L}\right).x$

1. Détermination le facteur de normalisation de la fonction $\Psi_1(x)$

   On applique la condition de normalisation : $\int_0^L \left||\Psi(x)|^2\right|.dx = 1 \Rightarrow N^2\int_0^L \sin^2\left(\frac{\pi}{L}\right).x.dx = 1$

   $$\Rightarrow N^2/2\int_0^L \left(1-\cos\left(\frac{2\pi}{L}\right).x\right).dx = 1 \Rightarrow \frac{N^2}{2}.\left[x - \frac{L}{2\pi}\sin\left(\frac{\pi}{L}\right).x\right]_0^L = 1$$

   $$\Rightarrow \frac{N^2}{2}.\left[L - \frac{L}{2\pi}(0-0)\right] = 1 \Rightarrow 2N^2.L = 1 \Rightarrow N = \sqrt{2/L}$$

2. Ecrire l'équation de Schrödinger d'une particule libre.

   On a : $\hat{H}_x|\psi_1(x)\rangle = E_1|\psi_1(x)\rangle \Rightarrow \left(-\frac{\hbar^2}{2.m_e}\frac{d^2}{dx^2}\right)|\psi_1(x)\rangle = E|\psi_1(x)\rangle$

3. Détermination des valeurs propres du système dans cet état.

$$\hat{H}_x\left|\psi_1(x)\right\rangle = E_1\left|\psi_1(x)\right\rangle \Rightarrow \left(-\frac{\hbar^2}{2.m_e}\frac{d^2}{dx^2}\right)\left|\psi_1(x)\right\rangle = E_1\left|\psi_1(x)\right\rangle$$

On a : $\left|\psi_1(x)\right\rangle = \sqrt{\frac{2}{\mathrm{L}}}.\sin\left(\frac{\pi}{\mathrm{L}}\right)x$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2.m_e}\frac{d^2}{dx^2}\right)\left|\psi_1(x)\right\rangle = E_1\left|\psi_1(x)\right\rangle$$

Aprés de quelque manipulation, on trouve :

$$E_1 = \frac{h^2}{8.m_e.L^2}$$

4. Calculer les valeurs moyennes <x> et <P_x>.

   4.1 <x>

$$1/\ \hat{A}.\psi_1(x) = x.\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{\pi}{L}x\right) \neq const\psi_1(x)$$

$$2/\ \left\langle\psi_1(x)\middle|\psi_1(x)\right\rangle = 1$$

$$3/\ \bar{x} = \int_E \psi_1(x)^*(x).x.\psi_1(x)dx = \frac{2}{L}\int_0^L x.\sin^2\left(\frac{\pi}{L}x\right).dx = \frac{2}{L}\int_0^L x.\left[\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\cos\left(\frac{2\pi}{L}x\right)\right].dx$$

$$\Rightarrow \bar{x} = \frac{2}{2L}\int_0^L \frac{x^2}{2}dx - \frac{2}{L}.\frac{1}{2}\int_0^L x.\cos\left(\frac{2\pi}{L}x\right)dx = \frac{L^2}{2.L} - \left[\frac{1}{L}.\int_0^L x.\cos\left(\frac{2\pi}{L}x\right).dx\right]_0^L = \frac{L}{2} - 0$$

$$\bar{x} = \frac{L}{2}$$

   4.2 <P_x>

$$1/\ \hat{p}_x.\psi_1(x) = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\left[\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{\pi}{L}x\right)\right] = \frac{\hbar}{i}.\frac{\pi}{L}\frac{d}{dx}\left[\sqrt{\frac{2}{L}}\cos\left(\frac{\pi}{L}x\right)\right] \neq const\psi_1(x)$$

$$2/\ \left\langle\psi_1(x)\middle|\psi_1(x)\right\rangle = 1$$

$$3/\ \bar{p}_x = \int_E \psi_1(x)^*(x).\hat{p}_x.\psi_1(x)dx = \int_0^L \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{\pi}{L}x\right).\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\left[\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{\pi}{L}x\right)\right]dx = \frac{2}{2L}.\frac{\hbar}{i}.\frac{\pi}{L}\int_0^L 2.\sin\left(\frac{\pi}{L}x\right).\cos\left(\frac{\pi}{L}\right.$$

$$\Rightarrow \bar{p}_x = \frac{\hbar.\pi}{i.L^2}\int_0^L 2.\sin\left(\frac{\pi}{L}x\right).\cos\left(\frac{\pi}{L}x\right).dx = \frac{\hbar.\pi}{i.L^2}.\int_0^L \sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right).dx = \frac{\hbar.\pi}{i.L^2}.\frac{L}{2\pi}\left[\cos\left(\frac{2\pi}{L}x\right)\right]_0^L = 0$$

$$\Rightarrow \bar{p}_x = 0$$

5. Etude et traçage la courbe de la densité de probabilité de présence de la particule ($D(x) = \frac{dP}{dx}$) en fonction de x.

On a : $dp = \left|\psi_1(x)\right|^2 .dx \Rightarrow D(x) = \dfrac{dp}{dx} = \left|\psi_1(x)\right|^2 = \sin^2\left(\frac{n.\pi}{L}\right).x$

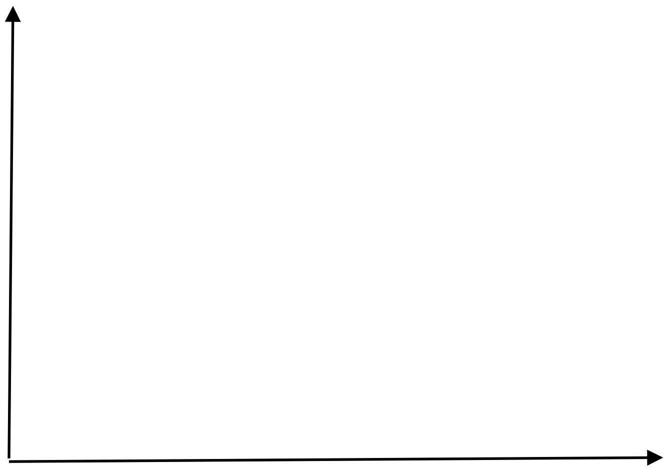
$D(x) = \sin^2\left(\frac{n.\pi}{L}\right).x$

$D'(x) = \left(\sin^2\left(\frac{2\pi}{L}\right).x\right)' \; = \; \frac{1}{2}\left(1-\cos\left(\frac{2.\pi}{L}\right).x\right)' \; = 0$

$\Rightarrow D'(x) = -\dfrac{L}{2.\pi}\sin\left(\frac{2\pi}{L}\right).x = 0 \Rightarrow \sin\left(\frac{2\pi}{L}\right).x = \sin\pi \Rightarrow x = \dfrac{L}{2}$

x	0		L/2		L
$D'(x)$		+		-	
$D'(x)$	0	$\nearrow$	2/L	$\searrow$	0

6. La courbe :



7. La position probable de la particule est : $x = \dfrac{L}{2}$

Exercice 04

On a : $\Psi_0(x) = N\exp\left(-\frac{x^2}{\alpha}\right)$ et x∈]-∞,+∞ [

1. Calcul le facteur de normalisation de la fonction $\Psi_0(x)$

$$\text{On applique la condition de normalisation : } \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi_0(x)|^2 .dx = 1 \Rightarrow N^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{2x^2}{\alpha}\right) dx = 1$$

On a :

$$\Rightarrow 2N^2 \int_0^{+\infty} \exp\left(-\frac{2x^2}{\alpha}\right) dx = 1 \Rightarrow 2N^2.\left(\frac{1}{2}\right).\sqrt{\frac{\pi}{a}} = 1 \Rightarrow N^2.\sqrt{\frac{\pi}{a}} = 1 \qquad \Rightarrow N = \left(\frac{2}{\alpha.\pi}\right)^{\frac{1}{4}}$$

2. Calcul l'énergie moyenne en fonction de α, où $\hat{V}(x) = \frac{1}{2} k.x^2$.

$$\text{On a : } \overline{E} = \frac{\langle \Psi_0(x) | \hat{H}. | \Psi_0(x) \rangle}{\langle \Psi_0(x) \| \Psi_0(x) \rangle} \text{ et } \langle \Psi_0(x) \| \Psi_0(x) \rangle = 1 \text{ (la condition de normalisation est vérifiée)}$$

$$\Rightarrow \overline{E} = \langle \Psi_0(x) | \hat{H}. | \Psi_0(x) \rangle$$

$$\text{On a : } \hat{H} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{2}\mathrm{k.x}^2\right) \text{ et } \frac{d^2\Psi_0(x)}{dr^2} = \left(\frac{4x^2}{\alpha^2} - \frac{2}{\alpha}\right).\Psi_0(x)$$

$$\text{et on a ; } \hat{H}.|\Psi_0(x)\rangle = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{4x^2}{\alpha^2} - \frac{2}{\alpha}\right) + \frac{1}{2}\mathrm{k.x}^2\right).|\Psi_0(x)\rangle = \left(\left(\frac{1}{2}\mathrm{k} - \frac{2\hbar^2}{m.\alpha^2}\right)x^2 + \frac{\hbar^2}{m.\alpha}\right).|\Psi_0(x)\rangle$$

$$\overline{E} = 2N^2 \int_0^{+\infty} \left(\left(\frac{1}{2}\mathrm{k} - \frac{2\hbar^2}{m.\alpha^2}\right)x^2 + \frac{\hbar^2}{m.\alpha}\right) \exp\left(-\frac{2}{\alpha}x^2\right).dx$$

$$\Rightarrow \overline{E} = 2N^2 \left[\left(\frac{1}{2}\mathrm{k} - \frac{2\hbar^2}{m.\alpha^2}\right) * \frac{1}{4}\sqrt{\frac{\pi}{(2a)^3}} + \frac{\hbar^2}{m.\alpha}\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{2a}}\right]$$

$$\Rightarrow \overline{E} = 2\sqrt{\frac{2}{\alpha.\pi}} \left[\left(\frac{1}{2}\mathrm{k} - \frac{2\hbar^2}{m.\alpha^2}\right) * \frac{1}{4}\sqrt{\frac{\pi}{\left(\frac{2}{\alpha}\right)^3}} + \frac{\hbar^2}{m.\alpha}\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\frac{2}{\alpha}}}\right]$$

$$\Rightarrow \overline{E} = \left(\frac{1}{2}\mathrm{k} - \frac{2\hbar^2}{m.\alpha^2}\right)\left(\frac{\alpha}{4}\right) + \frac{\hbar^2}{m.\alpha} \Rightarrow \overline{E} = \frac{k.\alpha}{8} + \frac{\hbar^2}{2.m.\alpha}$$

3. Pour quelle valeur de α, l'énergie est-elle minimale ?

$$\overline{E}_{\min} = \frac{d}{d\alpha}\left(\frac{k.\alpha}{8} + \frac{\hbar^2}{2.m.\alpha}\right) = 0 \Rightarrow \left(\frac{k}{8} - \frac{\hbar^2}{2.m.\alpha}\right) = 0 \Rightarrow \alpha = \frac{2\hbar}{\sqrt{m.k}}$$

4. Calculer la valeur de l'énergie minimale

On a : $\overline{E} = \dfrac{k.\alpha}{8} + \dfrac{\hbar^2}{2.m.\alpha}$

$$\overline{E}_{\min}\left(\alpha = \frac{2\hbar}{\sqrt{m.k}}\right) = \overline{E} = \frac{2\hbar}{\sqrt{m.k}}.\frac{k.}{8} + \frac{\hbar^2}{2.m.\dfrac{2\hbar}{\sqrt{m.k}}} =$$

$$\Rightarrow \overline{E}_{\min}\left(\alpha = \frac{2\hbar}{\sqrt{m.k}}\right) = \frac{\hbar}{4}\sqrt{\frac{k}{m}} + \frac{\hbar}{4}\sqrt{\frac{k}{m}} \Rightarrow \overline{E}_{\min} = \frac{\hbar}{2}\sqrt{\frac{k}{m}} = \frac{\hbar}{2}.w / w = \sqrt{\frac{k}{m}}$$