Séance de travaux pratiques X

Le jeudi 21 novembre 2013

1. Soit $f \in \mathcal{C}^0([a,b]_x \times [c,d]_t)$. Pour $t_0 \in [c,d]$ fixé, montrer que $f(x, t_0+h) \to f(x,t_0)$ uniformément en x lorsque $h \to 0$, c'est-à-dire que $\forall\ \epsilon > 0$, $\exists\ \delta > 0$ tel que
$$t_0 + h \in [c,d],\ |h| < \delta \quad \Longrightarrow \quad |f(x,t_0+h) - f(x,t_0)| < \epsilon \quad \forall\ x \in [a,b].$$

2. Soit $f \in \mathcal{C}^1([a,b]_x \times [c,d]_t)$.
   (a) Pour $t_0 \in [c,d]$, montrer que lorsque h tend vers 0, $\dfrac{f(x,t_0+h)-f(x,t_0)}{h}$ converge vers $\dfrac{\partial f(x,t_0)}{\partial t}$ uniformément en x, c'est-à-dire que pour tout $\epsilon > 0$, il existe $\delta > 0$ tel que pour $h \neq 0$ avec $t_0 + h \in [c,d]$, on a
$$|h| < \delta \quad \Longrightarrow \quad \left| \frac{f(x,t_0+h)-f(x,t_0)}{h} - \frac{\partial f(x,t_0)}{\partial t} \right| < \epsilon \quad \forall\ x \in [a,b].$$
   Indice : $\dfrac{f(x,t_0+h)-f(x,t_0)}{h} - \dfrac{\partial f(x,t_0)}{\partial t} = \dfrac{1}{h}\displaystyle\int_{t_0}^{t_0+h} \left(\frac{\partial f(x,t)}{\partial t} - \frac{\partial f(x,t_0)}{\partial t} \right) dt.$

   (b) En déduire que $\dfrac{d}{dt}\displaystyle\int_a^b f(x,t)dx = \int_a^b \frac{\partial f}{\partial t}(x,t)dx.$

3. On considère l'équation de Schrödinger décrivant l'évolution de la fonction d'onde d'une particule en une dimension confinée à l'intervalle $[0,\ell]$,
$$\begin{cases} i\hbar\frac{\partial \psi}{\partial t}(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}(x,t), & x \in [0,\ell], \quad t \in \mathbb{R}, \\ \psi(0,t) = \psi(\ell,t) = 0, & \forall t \in \mathbb{R},\ \text{(conditions aux bords)} \\ \psi(x,0) = u(x), & \text{(fonction d'onde initiale)} \end{cases} \tag{*}$$
   où $\psi(x,t) \in \mathbb{C}$ est la valeur de la fonction d'onde en x au temps t et $\hbar$ et m sont des constantes positives, respectivement la constante de Planck et la masse de la particule.
   (a) Montrer que si $\psi \in \mathcal{C}^{2,1}([0,\ell] \times \mathbb{R})$ est une solution de (*) à valeurs dans $\mathbb{C}$, alors la fonction
$$G_\psi(t) := \int_0^\ell |\psi(x,t)|^2 dx$$
   ne dépend pas du temps, où $|z|^2 = z\overline{z} = a^2 + b^2$ est la norme au carré du nombre complexe $z = a + ib \in \mathbb{C}$, $a, b \in \mathbb{R}$.
   Remarque : En pratique, on normalise la solution ψ de sorte que $G_\psi \equiv 1$. De cette façon, $|\psi|^2$ est une densité de probabilité telle que $\displaystyle\int_{x_1}^{x_2} |\psi(x,t)|^2 dx$ représente la probabilité qu'en effectuant une mesure au temps t, on retrouve la particule dans l'intervalle $[x_1, x_2]$.

(b) Supposons que la fonction d'onde initiale est telle que $u \in \mathcal{C}^2([0,\ell])$ avec $u(0) = u(\ell) = 0$. Montrer alors que (*) possède au plus une solution ψ dans l'espace $\mathcal{C}^{2,1}([0,\ell] \times \mathbb{R})$.

(c) En utilisant la méthode de séparation des variables et en ne tenant pas compte de la fonction d'onde initiale, trouver les solutions de (*) de la forme $\psi(x,t) = f(x)g(t)$ avec

$$-\frac{\hbar^2 f''(x)}{2m} = Ef(x), \quad ig'(t) = \frac{E}{\hbar}g(t), \tag{**}$$

pour une certaine constante $E > 0$. Montrer en particulier que les valeurs possibles de E sont données par $E_n = \dfrac{\hbar^2}{2m}\left(\dfrac{\pi n}{\ell}\right)^2$ pour $n \in \mathbb{N}$.

Remarque : En mécanique quantique, les valeurs possibles de E dans (**) représentent les valeurs possibles de l'énergie de la particule. Contrairement à ce qui ce passe en mécanique classique, il n'y a pas un continuum de valeurs possibles, mais seulement un ensemble discret (les quanta d'énergie).

(d) Supposons que la fonction d'onde initiale u soit donnée par une fonction $u \in \mathcal{C}^4([0,\ell])$ à valeur dans $\mathbb{C}$ telle que $u^{(2j)}(0) = u^{(2j)}(\ell)$ pour $j = 0,1,2$. Montrer alors que l'équation de Schrödinger (*) possède une solution unique $T \in \mathcal{C}^{2,1}([0,\ell] \times \mathbb{R})$ donnée par

$$T(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} b_n \sin\left(\frac{\pi n}{\ell}x\right) e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \quad \text{où} \quad b_n = \frac{2}{\ell}\int_0^{\ell} u(x)\sin\left(\frac{\pi n}{\ell}x\right) ds.$$

(e) Montrer que pour la solution précédente, $\displaystyle\sum_{n=1}^{\infty} |b_n|^2 = \frac{2}{\ell}$ si initialement $\displaystyle\int_0^{\ell} |u(x)|^2 dx = 1$.

Remarque : Dans ce cas, $\dfrac{\ell |b_n|^2}{2}$ représente la probabilité qu'en mesurant l'énergie de la particule on obtienne E_n. Cette probabilité ne dépend pas du temps, ce qui correspond en mécanique classique au fait que l'énergie totale d'un système fermé ne dépende pas du temps.