J. COLLOT, M. ISMAIL ET J. MEYER

Exercice 1 Equation de Schrödinger dans un puits

Considérons un puits de potentiel *très profond*, à une seule dimension. Rappelons l'équation de Schrödinger dans ce cas-là :

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2},$$

où $\psi(x,t)$ représente la fonction d'onde recherchée. Considérons les conditions aux limites suivantes :
- sur les bords, à tout instant : $\psi(0,t) = \psi(L,t) = 0$,
- à l'instant initial, pour tout x : $\psi(x,0) = f(x)$,

où f est une fonction imposée, développable en série de Fourier, et $[0,L]$ est l'intervalle qui définit le puits.

1. Discuter de la signification physique de ces conditions aux limites, puis déterminer la forme des solutions de cette équation aux dérivées partielles. Indication : utiliser la séparation des variable $\psi(x,t) = \phi(x)\chi(t)$.

Solution de l'exercice 1

$|\psi(x)|^2$ est la densité de probablilité de trouver une particule à l'endroit x. Les conditions $\Psi(0,t) = \Psi(L,t) = 0$ signifient donc que la particule peut être seulement à l'intérieur du puits et non pas sur les bords.

Pour commencer on suppose que la fonction d'onde peut s'écrire sous la forme $\psi(x,t) = \phi(x)\chi(t)$. L'équation de Schrödinger prend donc la forme

$$i\hbar\phi(x)\dot\chi(t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\phi''(x)\chi(t) \qquad \text{ou} \qquad \frac{\phi''(x)}{\phi(x)} = -i\frac{2m}{\hbar}\frac{\dot\chi(t)}{\chi(t)}.$$

Le côté gauche de cette équation peut dépendre de x seulement tandis que le côté droit de cette équation peut dépendre de t seulement. Il s'agit donc d'une constante,

$$\frac{\phi''(x)}{\phi(x)} = -i\frac{2m}{\hbar}\frac{\dot\chi(t)}{\chi(t)} = -C.$$

L'équation $\phi''(x) + C\phi(x) = 0$ a pour solution

$$\phi(x) = \alpha\cos(\sqrt{C}x) + \beta\sin(\sqrt{C}x).$$

On note que la constante C doit être positive - sinon on ne peut pas vérifier les conditions aux bords. En outre, les conditions aux bords imposent $\alpha = 0$ et que la constante C ne peut prendre que les valeurs $\sqrt{C} = \pi n/L$, c'est-à-dire, $\phi_n(x) = \beta_n\sin(\pi n x/L)$.

L'équation $\dot\chi(t) + i\hbar C/(2m)\chi(t) = 0$ a pour solution

$$\chi(t) = ce^{-i\frac{\hbar C}{2m}t}.$$

C'est-à-dire,

$$\psi_n(x,t) = \beta_n\sin\left(\frac{\pi n x}{L}\right)e^{-i\frac{\hbar}{2m}\left(\frac{\pi n}{L}\right)^2 t}.$$

Comme $\{\sin(\pi n x/L)\}_{n\in\mathbb{N}_+}$ constitue une base, une solution générale s'écrit sous la forme

$$\psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} \beta_n \sin\left(\frac{\pi n x}{L}\right) e^{-i\frac{\hbar}{2m}\left(\frac{\pi n}{L}\right)^2 t}$$

ou les coéfficients α_n sont d'etérminés par la condition initiale

$$\psi(x,0) = \sum_{n=1}^{\infty} \beta_n \sin\left(\frac{\pi n x}{L}\right) = f(x).$$

Donc il s'agit des coefficients de la série de sinus de la fonction $f(x)$.

Exercice 2 Équation de la chaleur en environnement variable

Nous souhaitons déterminer la répartition de la température dans une barre sans perte latérale dont une des extrémités est maintenue à température nulle et l'autre à une température variable dans le temps. Nous supposons qu'initialement la barre est à température nulle. Nous devons donc résoudre l'équation de la chaleur,

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \tag{1}$$

avec les conditions suivantes :

$$\begin{aligned} u(0,t) &= 0, & (2)\\ u(L,t) &= h(t), & (3)\\ u(x,0) &= 0. & (4) \end{aligned}$$

Ici D est le coefficient de diffusion ; L la longueur de la barre ; $h(t)$ une fonction connue qui désigne la variation de la température à l'extrémité $x = L$ de la barre et nous supposons de plus que $h(0) = 0$.

1. Décomposer la fonction $f(x) = x/L$ en série de sinus sur l'intervalle $[0, L]$.

   Nous admettrons par la suite que les coefficients de la série de sinus de la fonction $g(x) = (x/L)[1 - (x/L)^2]$ sont :

   $$\beta_n = \frac{-12}{\pi^3}\frac{(-1)^n}{n^3}.$$

2. Il est évident que nous ne pouvons pas décomposer la fonction inconnue $u(x,t)$ en série de sinus directement : les conditions aux limites ne nous permettent pas d'effectuer les dérivations terme à terme. Considérons la fonction

   $$w(x,t) = u(x,t) - \frac{x}{L}h(t). \tag{5}$$

   Démontrer que $w(x,t)$ obéit à une équation de la chaleur avec un terme source,

   $$\frac{\partial w}{\partial t} = D\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} - \frac{x}{L}h'(t). \tag{6}$$

   Quelles sont les conditions aux limites *et* initiales pour la fonction w ?

3. Dorénavant, nous supposons que $h(t) = \alpha t$, où α est une constante. Résoudre l'équation (6) en utilisant les séries de sinus. Par résoudre, il faut entendre : "obtenir explicitement les coefficients de la série de sinus de la fonction w".
   Note 1 : Pour le cas particulier que nous sommes en train de résoudre, $h'(t) = \alpha$ est une constante. Décomposer $(h'(t)/L)\, x$ en série de $\sin(n\pi x/L)$ ne pose donc pas de difficultés particulières. Pour le cas général (par exemple dans le cas où l'extrémité L serait soumise à une température oscillante, $h(t) = \alpha \sin(\omega t)$), il est évident que $h'(t)$ ne dépend pas de x et intervient comme une constante dans la décomposition de $(h'(t)/L)\, x$.
   Note 2 : La solution de l'équation $y' + ay = g(t)$ est
   $$y(t) = \exp(-at) \left[y_0 + \int_0^t g(\tau) \exp(a\tau) d\tau \right], \tag{7}$$
   où $y_0 = y(t = 0)$.
4. Quelle est la solution stationnaire $w_s(x)$ de l'équation (6) ?
5. Quelle est la limite de la fonction $w(x,t)$ pour les temps grands, c'est-à-dire quand $t \to \infty$? En utilisant les résultats de la première question, en donner la forme analytique exacte. Comparer à la solution stationnaire trouvée plus haut. Tracer la forme de la fonction w dans cette limite.
6. Que vaut finalement la fonction que l'on cherche vraiment, c'est-à-dire $u(x,t)$? Quelle est sa forme asymptotique pour les temps larges ? Tracer la fonction $u(x,t)$ en fonction de x dans cette approximation – i.e., pour un temps (large) donné.

Solution de l'exercice 2

1. Soit
   $$\frac{x}{L} = \sum_{n=1}^{\infty} \beta_n \sin \frac{n\pi x}{L}$$
   alors, une simple intégration par partie nous donne
   $$\beta_n = \frac{2}{L} \int_0^L \frac{x}{L} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx = -\frac{2}{\pi} \frac{(-1)^n}{n}.$$
   La décomposition de la fonction $(x/L)(1 - x^2/L^2)$ aurait nécessité trois intégrations par parties
2. En utilisant la définition (5), nous avons d'une part $\partial_t w = \partial_t u - (x/L)h'(t)$ et d'autre part $\partial_x^2 w = \partial_x^2 u$. En remplaçant dans l'équation de la chaleur (1), on trouve bien l'expression (6). Par ailleurs, $w(0,t) = u(0,t) = 0$ et $w(L,t) = u(L,t) - h(t) = 0$. La fonction w est donc bien maintenue à zéro sur ses extrémités au cours du temps, ce qui nous permet d'utiliser les séries de sinus. Nous avons de plus la condition initiale $w(x,0) = u(x,0) - h(0) = 0$.
3. Soit $w(x,t) = \sum b_n(t) \sin(n\pi x/L)$. En posant $1/\tau_n = D(n\pi/L)^2$, nous obtenons
   $$b_n'(t) + \frac{1}{\tau_n} b_n(t) = -\beta_n h'(t) \tag{8}$$
   dont la solution est donnée par l'expression (7). Dans le cas qui nous préoccupe, $b_n(0) = 0$ et $h'(t) = \alpha$. Nous avons donc
   $$b_n(t) = -\beta_n \tau_n \alpha \left\{1 - \exp[-t/\tau_n]\right\}.$$

4. La solution stationnaire est donnée par l'équation $0 = D\partial^2 w_s/\partial_x^2 - (x/L)\alpha$, i.e.,

$$\frac{d^2 w_s}{dx^2} = \frac{\alpha}{LD} x$$

dont la solution qui respecte les conditions aux limites (nulle aux bords) est (en intégrant deux fois)

$$w_s(x) = -\frac{1}{6}\left(\frac{\alpha L^2}{D}\right)\frac{x}{L}\left(1 - \frac{x^2}{L^2}\right).$$

5. Quand $t \to \infty$, la solution trouvée en c) devient

$$b_n(t) \to -\beta_n \tau_n \alpha = 2\left(\frac{\alpha L^2}{D}\right)\frac{(-1)^n}{(\pi n)^3}.$$

Si on se reporte au résultat de la question a), on voit que ceux-ci sont simplement les coefficients de la série de Fourier de la fonction $w_s(x)$. Donc, $w(x,t) \to w_s(x)$ quand $t \to \infty$.

6. $u(x,t) = w(x,t) + \alpha(x/L)t$. Donc, pour les temps larges, $u(x,t) \approx w_s(x) + \alpha(x/L)t$.

Exercice 3 Série de Fourier complexe

1. Décomposer $f(x)$ en série de Fourier complexe et, en identifiant terme à terme avec la série de Fourier en cos et sin, déterminer la relation entre les c_n et c_{-n} et les a_n et b_n ($n \geq 0$).
2. En utilisant les résultats ci-dessus et la définition de a_n et b_n, déterminer l'expression (forme intégrale) des c_n.
3. Calculer la série de Fourier en cos et sin pour $f(x) = x$ sur $[0, L]$ et en déduire les c_n d'après la formule précédente.
4. Vérifier en calculant directement les c_n de la série de Fourier complexe pour $f(x) = x$ sur $[0, L]$.

Solution de l'exercice 3

1. Série de Fourier complexe

$$\begin{aligned}
f(x) &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{2\pi i n x/L} \\
&= c_0 + \sum_{n=1}^{\infty}\left\{c_n\left[\cos\left(\frac{2\pi n x}{L}\right) + i\sin\left(\frac{2\pi n x}{L}\right)\right] + c_{-n}\left[\cos\left(\frac{2\pi n x}{L}\right) - i\sin\left(\frac{2\pi n x}{L}\right)\right]\right\} \\
&= c_0 + \sum_{n=1}^{\infty}\left\{(c_n + c_{-n})\cos\left(\frac{2\pi n x}{L}\right) + i\,(c_n - c_{-n})\sin\left(\frac{2\pi n x}{L}\right)\right\}.
\end{aligned}$$

Donc

$$a_0 = c_0, \qquad a_n = c_n + c_{-n} \qquad et \qquad b_n = i(c_n - c_{-n}).$$

Ou

$$c_0 = a_0, \qquad c_n = \frac{1}{2}(a_n - ib_n) \qquad et \qquad c_{-n} = \frac{1}{2}(a_n + ib_n).$$

2. Formule pour les coefficients avec $n > 0$:

$$\begin{aligned}
c_0 &= \frac{1}{L}\int_0^L dx\ f(x) = \frac{1}{L}\int_0^L dx\ f(x)e^{-i\frac{2\pi 0x}{L}},\\
c_n &= \frac{1}{L}\int_0^L dx\ f(x)\left[\cos\left(\frac{2\pi nx}{L}\right) - i\sin\left(\frac{2\pi nx}{L}\right)\right] = \frac{1}{L}\int_0^L dx\ f(x)e^{-i\frac{2\pi nx}{L}},\\
c_{-n} &= \frac{1}{L}\int_0^L dx\ f(x)\left[\cos\left(\frac{2\pi nx}{L}\right) + i\sin\left(\frac{2\pi nx}{L}\right)\right] = \frac{1}{L}\int_0^L dx\ f(x)e^{i\frac{2\pi nx}{L}} = \frac{1}{L}\int_0^L dx\ f(x)e^{-i\frac{i2\pi(-n)x}{L}}.
\end{aligned}$$

Donc pour tous $n \in \mathbb{Z}$:

$$c_n = \frac{1}{L}\int_0^L dx\ f(x)e^{-i\frac{2\pi nx}{L}}.$$

3. Calcul des coefficients a_n et b_n pour $f(x) = x$:

$$\begin{aligned}
a_0 &= \frac{1}{L}\int\limits_0^L x = \frac{L}{2},\\
a_n &= \frac{2}{L}\int\limits_0^L dx\ x\cos\left(\frac{2\pi nx}{L}\right) = \frac{1}{\pi n}\left\{\left[x\sin\left(\frac{2\pi nx}{L}\right)\right]_0^L - \int\limits_0^L dx\ \sin\left(\frac{2\pi nx}{L}\right)\right\} = 0,\\
b_n &= \frac{2}{L}\int\limits_0^L dx\ x\sin\left(\frac{2\pi nx}{L}\right) = -\frac{1}{\pi n}\left\{\left[x\cos\left(\frac{2\pi nx}{L}\right)\right]_0^L - \int\limits_0^L dx\ \cos\left(\frac{2\pi nx}{L}\right)\right\} = -\frac{L}{\pi n}.
\end{aligned}$$

Donc $c_0 = L/2$ et $c_{n\neq 0} = iL/(2\pi n)$.

4. Calcul des coefficients c_n pour $f(x) = x$:

$$\begin{aligned}
c_0 &= \frac{L}{2},\\
c_{n\neq 0} &= \frac{1}{L}\int\limits_0^L dx\ xe^{-i\frac{2\pi nx}{L}} = \frac{i}{2\pi n}\left\{\left[xe^{-i\frac{2\pi nx}{L}}\right]_0^L - \int\limits_0^L dx\ e^{-i\frac{2\pi nx}{L}}\right\} = \frac{iL}{2\pi n},
\end{aligned}$$

en accord avec ce qu'on a trouvé ci-dessus.