MÉCANIQUE QUANTIQUE

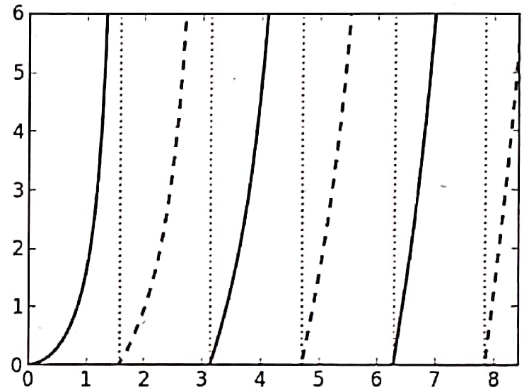
1. Normalisation de la fonction d'onde.

On se place en dimension 1 $(\psi(x,t))$ et on suppose que la fonction d'onde est normée dans l'état initial : $\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x,0)|^2\, dx = 1$. Montrer, que cela reste vrai au cours du temps. On suppose que ψ et $\frac{\partial \psi}{\partial x} \xrightarrow[\infty]{} 0$.

2. Existence d'états liés

On étudie le potentiel $V(x) = 0$ pour $|x| > a$, $V(x) = -V_0$ pour $|x| \le a$ (avec $V_0 > 0$). Étudier les états liés (états stationnaires d'énergie négative). Y en a-t-il toujours ? À quelle condition n'y en a-t-il qu'un ?

Conseil : Poser $k_0 = \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar}$, $k = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$, justifier la recherche de fonctions de dépendance spatiale de la forme $A\cos k_0 x + B \sin k_0 x$, $A' e^{k(x+a)}$, $B' e^{-k(x-a)}$ selon l'intervalle de valeurs de x étudié et déduire des conditions de continuité 2 équations donnant $A' + B'$ en fonction de A et B et deux équations donnant $A' - B'$ en fonction de A et B. Conclure avec l'aide du graphe des deux fonctions $X \mapsto X \tan X$ (traits pleins) et $X \mapsto -X \operatorname{cotan} X$ (traits pointillés).



3. État non stationnaire.

Dans un puits infini ($x \in [0, a]$), l'état initial d'une particule est caractérisé par $\psi(x, t=0) = A \sin^3(\pi x / a)$.

a. Déterminer A.

b. Déterminer $\psi(x,t)$.

c. Étudier l'évolution temporelle de la densité linéique de probabilité.

4. Taille et énergie caractéristiques dans un potentiel linéaire.

Évaluer la taille et l'énergie caractéristiques de la fonction d'onde du niveau fondamental d'une particule de masse m placée dans un potentiel linéaire à une dimension $V(x) = \alpha |x|$. On pourra considérer que $\langle |x| \rangle \approx \Delta x$.

5. Oscillateur harmonique quantique.

On étudie le potentiel harmonique $V(x) = \frac{m\omega_0^2 x^2}{2}$.

a. On cherche un état stationnaire sous la forme $\psi(x,t) = \varphi(x) e^{-i\omega t}$ où $\varphi(x) = A e^{-\alpha x^2}$. Déterminer la valeur de α.

b. Quelle est la valeur de l'énergie associée à cet état ? Montrer qu'il s'agit de l'état fondamental.

c. Pour le premier état excité, $\varphi(x) = B x e^{-\beta x^2}$. Déterminer son énergie.

d. Comment évolue au cours du temps un état superposition des deux états étudiés ? Interpréter.

6. Effet Ramsauer.

En 1921, Ramsauer avait constaté que pour certaines valeurs particulières de l'énergie incidente, des gaz rares, hélium, argon ou néon, étaient parfaitement transparents à des faisceaux d'électrons de basse énergie. Cela peut s'expliquer dans le modèle unidimensionnel suivant. On considère une solution stationnaire de l'équation de Schrödinger d'énergie positive E, pour une particule de masse m dans le potentiel suivant : $V(x) = 0$ pour $|x| > a$, $V(x) = -V_0$ pour $|x| \leq a$ (avec $V_0 > 0$). On pose $q = \dfrac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar}$, $k = \dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$.

On étudie une solution de la forme $\psi(x,t) = \varphi(x)e^{-i\omega t}$ avec :

$$\begin{aligned} \varphi(x) &= e^{ikx} + Ae^{-ikx} && x \leq -a \\ \varphi(x) &= Be^{iqx} + Ce^{-iqx} && -a < x \leq a \\ \varphi(x) &= De^{ikx} && a < x \end{aligned}$$

a. Écrire les relations de continuité en $x = -a$ et $x = a$. OK

b. En posant $\Delta = (q+k)^2 - e^{4iqa}(q-k)^2$, calculer la probabilité de transmission $T = |D|^2$. Calculer la probabilité de réflexion $R = |A|^2$. Vérifier que $R + T = 1$. → calculs lourds

c. Montrer que $T = 1$ pour certaines valeurs de l'énergie. Interpréter ce résultat et l'effet Ramsauer. → interpret i+1/0 = énergie modifique

d. Pour l'hélium, l'énergie incidente à laquelle se produit le phénomène est $E = 0{,}7$ eV. En supposant que le rayon de l'atome d'hélium est $a = 0{,}1$ nm $= 10^{-10}$ m, calculer la profondeur V_0 du puits de potentiel à l'intérieur de l'atome. On donne, pour un électron, $mc^2 = 511$ keV. AN

e. Comment se comporte le coefficient de transmission T lorsque l'énergie E tend vers zéro ? Lorsqu'on envoie des atomes d'hydrogène très lents sur une surface d'hélium liquide, on constate que ces atomes rebondissent élastiquement au lieu d'être adsorbés. Interpréter qualitativement ce phénomène. Rebondissement

7. Puits de Dirac.

On étudie le puits de potentiel $V(x) = 0$ pour $|x| > \varepsilon$, $V(x) = -\dfrac{aV_0}{2\varepsilon}$ pour $|x| \leq \varepsilon$ (avec $V_0 > 0$) dans la limite où $\varepsilon \to 0$ (pic de Dirac). On s'intéresse aux états stationnaires liés (énergie négative).

a. Quelles sont les formes de la fonction d'onde pour $x < 0$ et $x > 0$?

b. En utilisant l'équation de Schrödinger, montrer que lors de la traversée du puits, la dérivée par rapport à x de la fonction d'onde subit une discontinuité. Donner sa valeur $\left.\dfrac{\partial\psi}{\partial x}\right|_{x=0^+} - \left.\dfrac{\partial\psi}{\partial x}\right|_{x=0^-}$ en fonction de $\psi(x=0)$ et des constantes pertinentes.

c. En déduire les états stationnaires possibles. Donner les fonctions d'onde normées associées.

d. Avec quelle marge l'inégalité de Heisenberg est-elle respectée ? On pourra utiliser $E = \dfrac{\langle p^2 \rangle}{2m} + \langle V \rangle$. On donne $\int_0^\infty u^2 e^{-u}\,du = 2$.

Exercices de mécanique quantique. Corrigé.

1. On peut reprendre la démonstration faite en cours pour introduire la densité de courant de probabilité ou bien partir directement du résultat : $\frac{\partial J}{\partial x}+\frac{\partial}{\partial t}(|\psi|^2)=0$. Par intégration sur $\mathbb{R}$, $\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\partial J}{\partial x}\mathrm{d}x+\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\partial}{\partial t}(|\psi|^2)=0$, c'est-à-dire $[J]_{-\infty}^{+\infty}+\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi|^2\,\mathrm{d}x=0$. Avec les hypothèses de l'énoncé, $\overline{\psi}\frac{\partial\psi}{\partial x}\xrightarrow[\infty]{}0$ donc $[J]_{-\infty}^{+\infty}=0$ d'où $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi|^2\,\mathrm{d}x=0$. $\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi|^2\,\mathrm{d}x$ est donc une constante (qui vaut 1 d'après l'état initial).

4. L'énergie d'une particule non relativiste vérifie $E=\frac{p^2}{2m}+\alpha|x|$. Pour un état stationnaire, l'énergie est définie sans imprécision donc $E=\langle E\rangle=\frac{\langle p^2\rangle}{2m}+\alpha\langle|x|\rangle$. Or $\langle p^2\rangle=\langle p\rangle^2+(\Delta p)^2\geq(\Delta p)^2\geq\frac{\hbar^2}{4(\Delta x)^2}$ (Heisenberg). Pour l'état fondamental du puits symétrique ($V(x)$ est pair), $\langle x\rangle=0$ donc $\Delta x=\sqrt{\langle x^2\rangle}$. En ordre de grandeur, on estime que $\sqrt{\langle x^2\rangle}\approx\langle|x|\rangle$ donc que $\Delta x\approx\langle|x|\rangle$. Alors $E\geq\frac{\hbar^2}{8m(\Delta x)^2}+\alpha\Delta x=f(\Delta x)$. La fonction f admet un minimum pour $-\frac{\hbar^2}{4m(\Delta x)^3}+\alpha=0$ c'est-à-dire $\frac{\hbar^2}{4m(\Delta x)^2}=\alpha\Delta x$ donc $f_{\min}=\frac{3}{2}\alpha\Delta x_{\min}=\frac{3}{2}\alpha\left(\frac{\hbar^2}{4m\alpha}\right)^{1/3}=\frac{3}{2}\left(\frac{\hbar^2\alpha^2}{4m}\right)^{1/3}$.

On peut sans doute estimer que $E_{\text{fondamental}}\approx f_{\min}=\frac{3}{2}\left(\frac{\hbar^2\alpha^2}{4m}\right)^{1/3}$.

Remarque1 : on aurait pu arriver au même résultat (sans les facteurs $3/2$ et 4) par analyse dimensionnelle.

Remarque2 : en réalité, $E_{\text{fondamental}}\approx 0{,}86\times f_{\min}$. Notre estimation est donc bonne mais le fait de trouver $E<f_{\min}$ montre que l'accord est chanceux et est le fruit de deux « erreurs » se compensant : $\sqrt{\langle x^2\rangle}\approx\langle|x|\rangle$ et $E_{\text{fondamental}}\approx f_{\min}$.

6.a. C'est la même situation que l'effet tunnel vu en cours mais « à l'envers », en remplaçant une barrière de potentiel par un puits de potentiel. Les équations de continuité sont :

$$\begin{aligned}
&e^{-ika}+Ae^{ika}=Be^{-iqa}+Ce^{iqa} &&(1)\\
&k\left(-e^{-ika}+Ae^{ika}\right)=q\left(-Be^{-iqa}+Ce^{iqa}\right) &&(2)\\
&Be^{iqa}+Ce^{-iqa}=De^{ika} &&(3)\\
&q\left(Be^{iqa}-Ce^{-iqa}\right)=kDe^{ika} &&(4)
\end{aligned}
\quad\Longrightarrow\quad
\begin{aligned}
&q\times(1)-(2) \quad 2qBe^{-iqa}=(q+k)e^{-ika}+(q-k)Ae^{ika} &&(5)\\
&q\times(1)+(2) \quad 2qCe^{iqa}=(q-k)e^{-ika}+(q+k)Ae^{ika} &&(6)\\
&q\times(3)+(4) \quad 2qBe^{iqa}=(q+k)De^{ika} &&(7)\\
&q\times(3)-(4) \quad 2qCe^{-iqa}=(q-k)De^{ika} &&(8)
\end{aligned}$$

b.

$$\frac{(5)}{(6)}\times\frac{(8)}{(7)}\quad\Rightarrow\quad e^{-4iqa}=\frac{(q+k)e^{-ika}+(q-k)Ae^{ika}}{(q-k)e^{-ika}+(q+k)Ae^{ika}}\times\frac{q-k}{q+k}\qquad(9)$$

$$(q+k)(5)-(q-k)(6)\quad\Rightarrow\quad(q+k)^2e^{-ika}-(q-k)^2e^{-ika}=\left(e^{-2iqa}(q+k)^2-e^{2iqa}(q-k)^2\right)De^{ika}\qquad(10)$$

$$\text{Alors }(9)\Rightarrow Ae^{2ika}=\frac{(q^2-k^2)(e^{4iqa}-1)}{\Delta}\quad\Rightarrow\quad R=\frac{(q^2-k^2)^2\sin^2 2qa}{4q^2k^2+(q^2-k^2)^2\sin^2 2qa}$$

$$\text{et }De^{2ika}=\frac{\left((q+k)^2-(q-k)^2\right)e^{2iqa}}{\Delta}\quad\Rightarrow\quad T=\frac{4q^2k^2}{4q^2k^2+(q^2-k^2)^2\sin^2 2qa}$$

c. $T=1$ lorsque $\sin 2qa=0$ c'est-à-dire $E+V_0=n^2\frac{\hbar^2\pi^2}{8ma^2}$ soit exactement les niveaux d'énergie d'un puits infini de largeur $2a$ (effet de résonance). Le milieu traversé est alors parfaitement transparent.

d. $E+V_0=n^2\dfrac{\hbar^2\pi^2}{8ma^2}=n^2\times 9{,}5\text{ eV}$. Si on suppose qu'on est dans le cas $n=1$, alors $V_0=8{,}7\text{ eV}$. Les valeurs plus grandes de n conduisent à des valeurs trop élevées de V_0 par rapport aux énergies atomiques usuelles.

e. Lorsque $E\to 0$, $k\to 0$ et $T\to 0$. La probabilité de réflexion tend vers 1. Les atomes d'hydrogène rebondissent sur la surface d'hélium (malgré la présence d'un puits de potentiel attractif).

7.a. Dans les zones où le potentiel est nul, pour un état stationnaire, $E\varphi(x)=-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2\varphi}{dx^2}$. On s'intéresse à un état d'énergie $E<0$ (état lié c'est-à-dire d'énergie inférieure à la limite de $V(x)$ à l'infini). Les solutions bornées à l'infini sont donc, en posant $E=-\dfrac{\hbar^2k^2}{2m}$, de la forme $\varphi(x)=Ae^{-kx}$ pour $x>\varepsilon$ et $\varphi(x)=A'e^{+kx}$ pour $x<\varepsilon$.

Par passage à la limite $\varepsilon\to 0$, $\boxed{\varphi(x)=Ae^{-kx}\text{ pour } x>0 \text{ et } \varphi(x)=A'e^{+kx}\text{ pour } x<0}$.

b. Le problème délicat est maintenant de comprendre ce que devient la zone $]-\varepsilon,+\varepsilon[$. Dans cette zone :

$$E\varphi(x)=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi}{dx^2}+V\varphi(x) \qquad \text{équation 1}$$

Le potentiel V est uniforme mais devient infini dans la limite $\varepsilon\to 0$. Dans le passage à la limite, d'après l'équation 1, $\dfrac{d^2\varphi}{dx^2}$ va tendre vers l'infini. Du coup, la dérivée <u>première</u> de $\varphi(x)$ va présenter une discontinuité. Par contre, cette dérivée première va rester bornée et la fonction $\varphi(x)$ va rester continue. On retrouve le même phénomène pour le puits infini étudié en cours. Sur les bords du puits, la fonction d'onde tend vers 0. Elle est continue mais sa dérivée première n'est pas nulle au bord, contrairement à ce qui se passe à l'extérieur.

<u>La dérivée n'est donc pas continue là où le potentiel diverge.</u>

De façon plus quantitative, on intègre sur $]-\varepsilon,+\varepsilon[$ les deux membres de l'équation 1 :

$$E\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon}\varphi(x)dx=-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon}\frac{d^2\varphi}{dx^2}dx+V\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon}\varphi(x)dx=-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{d\varphi}{dx}\right]_{-\varepsilon}^{+\varepsilon}-\frac{aV_0}{2\varepsilon}\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon}\varphi(x)dx$$

Lorsque $\varepsilon\to 0$, et, puisque φ est continue, $\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon}\varphi(x)dx\sim 2\varepsilon\varphi(0)\to 0$. On obtient alors :

$0=-\dfrac{\hbar^2}{2m}\left[\dfrac{d\varphi}{dx}\right]_{-\varepsilon}^{+\varepsilon}-aV_0\varphi(0)$ c'est-à-dire, avec $\varepsilon\to 0$, $\boxed{\dfrac{d\varphi}{dx}(0^+)-\dfrac{d\varphi}{dx}(0^-)=-\dfrac{2maV_0}{\hbar^2}\varphi(0)}$

c. Avec les expressions de la question **a**, la continuité de φ en 0 impose $A=A'$ soit $\varphi(x)=Ae^{-k|x|}$ sur tout $\mathbb{R}$ et la relation sur les dérivées impose que $-2kA=-\dfrac{2maV_0}{\hbar^2}A$ donc $\boxed{k=\dfrac{maV_0}{\hbar^2}}$ d'où on déduit que $\boxed{E=-\dfrac{ma^2V_0^2}{2\hbar^2}}$. Il y a une seule énergie possible. <u>Il y a un seul état stationnaire lié dans le puits de Dirac.</u>

Un calcul d'intégrale élémentaire montre que, pour que $\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi^2(x)dx=1$, il suffit que $\boxed{\varphi(x)=\sqrt{k}e^{-k|x|}}$.

d. $\langle x\rangle=\int_{-\infty}^{+\infty}x\varphi^2dx=0$ $\quad\langle x^2\rangle=2\int_0^{\infty}x^2\varphi^2dx=2k\int_0^{\infty}x^2e^{-2kx}dx=\dfrac{1}{2k^2}=\dfrac{1}{2}\dfrac{\hbar^4}{m^2a^2V_0^2}$ donc $\Delta x=\dfrac{1}{\sqrt{2}}\dfrac{\hbar^2}{maV_0}$.

$\langle V\rangle=\int V(x)\varphi^2dx=\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon}V(x)\varphi^2dx\sim\varphi(0)^2\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon}V(x)dx\sim -aV_0k$. D'où $\langle p^2\rangle=2m(E-\langle V\rangle)=\dfrac{m^2a^2V_0^2}{\hbar^2}$.

Ici $\langle p\rangle=0$ (pas de mouvement privilégié dans le sens $\pm$ de l'axe x donc $\Delta p=\dfrac{maV_0}{\hbar}$ et $\Delta p\Delta x=\dfrac{\hbar}{\sqrt{2}}\approx\dfrac{\hbar}{2}\times 1{,}4$.