

Mécanique quantique

Lycée Thiers - Physique-Chimie - MPI/MPI*- 2024-2025

Table des matières

1	Approche ondulatoire de la mecanique quantique	1
2	Partie spatiale de la fonction d'onde dans un potentiel	3
3	Sujets d'oraux	6
4	Pour aller plus loin	6

1 Approche ondulatoire de la mécanique quantique

Exercice 1 - Ordre de grandeur des longueurs d'ondes de de Broglie :

- 1. Calculer la longueur d'onde de Broglie $\lambda = h/(mv)$ associée à...
 - \triangleright une personne de 60 kg qui court à une vitesse de 7 km \cdot h⁻¹;
 - \triangleright une basse de tennis de 60 g se déplaçant à 100 km \cdot h⁻¹;
 - \triangleright une poussière de 1 µg se déplaçant à 1 mm · s⁻¹;
 - ▷ un neutron « thermique », c'est-à-dire dont l'énergie cinétique est égale à l'énergie cinétique moyenne d'agitation thermique à température ambiante (300 K);
 - \triangleright un neutron refroidi à 1 µK, appelé neutron « ultra-froid » (température atteignable avec des techniques de refroidissement laser);
 - ▶ un électron se déplaçant au dixième de la vitesse de la lumière, sans tenir compte d'effets relativistes.
- 2. Commenter ces valeurs, en particulier leur évolution d'une particule à l'autre et leur position par rapport à des tailles connues (taille d'un noyau atomique, d'une structure moléculaire, d'une ouverture micrométrique...). En déduire les particules qui pourront donner lieu à d'éventuels phénomène de diffraction.

Données : Constante de Boltzmann $k_{\rm B} = 1.38 \times 10^{-23} \, {\rm J \cdot K^{-1}}$ Énergie cinétique d'agitation thermique d'une particule microscopique $\mathcal{E}_{\rm c} = 3k_{\rm B}T/2$ Constante de Planck $h = 6.626\,070\,15 \times 10^{-34} \, {\rm J \cdot s} \approx 6.63 \times 10^{-34} \, {\rm J \cdot s}$

Exercice 2 - Particule libre et paquet d'ondes : On considère une particule libre placée dans un potentiel nul.

- 1. Déterminer les fonctions d'onde $\Psi(x,t) = \Phi(x)f(t)$ représentant des états dynamiques pour lesquels l'énergie a la valeur \mathcal{E} .
- 2. Quelles sont les valeurs possibles de l'énergie?

On étudie par la suite la fonction d'onde $\Psi(x,t) = A \exp(i(k_0 x - \omega_0 t))$.

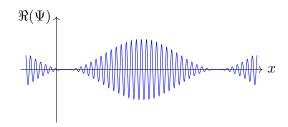
3. Pourquoi cette onde ne peut pas décrire la particule?

Pour résoudre la difficulté, on envisage un paquet d'onde qui est la superposition d'ondes planes sinusoïdales de pulsations voisines de ω_0 et de vecteurs d'ondes voisins de k_0 . On suppose que $\Delta\omega \ll \omega_0$ et $\Delta k \ll k_0$. Pour simplifier l'étude, on considère la superposition de trois ondes planes :

$$\Psi(x,t) = \frac{A}{2} \left[2 \exp(i(k_0 x - \omega_0 t)) + \exp(i((k_0 + \Delta k)x - (\omega_0 + \Delta \omega)t)) + \exp(i((k_0 - \Delta k)x - (\omega_0 - \Delta \omega)t)) \right].$$

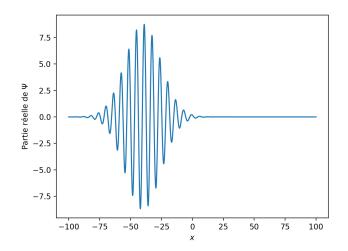
On représente ci-après le graphe représentant la partie réelle de la fonction d'onde en fonction de x à t=0. La fonction d'onde est alors une exponentielle complexe modulée par une enveloppe lentement variable

4. Déterminer la largueur Δx des « bouffées d'ondes », soit la longueur entre deux annulations de l'enveloppe, en fonction de Δk . Montrer que $\Delta k \Delta x \geqslant 2\pi$ et retrouver l'inégalité de Heisenberg spatiale.



La figure ci-contre représente la partie réelle de la fonction d'onde d'un paquet d'onde gaussien à t=0 en fonction de l'abscisse. Ce paquet d'ondes est la superposition d'une infinité d'onde planes de pulsations voisines de ω_0 et de vecteurs d'onde voisins de k_0 .

- 5. Est-ce que la condition de normalisation peut être résolue?
- 6. Déterminer la vitesse de la particule. Le milieu est-il dispersif? Le paquet d'onde se propage dans le sens des x > 0. Est-ce qu'il se déforme en cours du temps?



Exercice 3 - Temps d'évolution d'une poussière interstellaire : Soit une particule de poussière interstellaire est modélisée par une particule libre de masse $m=10^{-15}\,\mathrm{kg}$ de taille caractéristique $\ell=1\,\mathrm{\mu m}$ supposée correspondre à la largeur caractéristique d'un paquet d'ondes de matière.

- 1. Montrer que l'équation de Schrödinger donne, en ordre de grandeur le temps caractéristique d'étalement du paquet d'onde $\tau=\frac{2m\ell^2}{\hbar}.$ 2. Calculer numériquement ce temps et conclure.

Exercice 4 - Étude du paquet d'onde gaussien : On s'intéresse à une particule libre qui se déplace suivant l'axe Ox croissant.

1. Rappeler les formes ondes planes progressives monochromatiques solutions de l'équation de Schrödinger et montrer qu'on peut les réécrire sous la forme

$$\Psi(x,t) = \Psi_0 \exp\left(\frac{i}{\hbar}(px - \mathcal{E}(p)t)\right)$$
.

Pourquoi une telle fonction d'onde n'est-elle pas acceptable?

On va supposer que plusieurs quantité de mouvement existent autour de p_0 , à $\Delta p = p - p_0 \ll p_0$ près, et on construit le paquet d'onde suivant

$$\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} A(p) \exp\left(\frac{i}{\hbar}(px - \mathcal{E}(p)t)\right) dp$$

- 2. Exprimer $\mathcal{E}(p)$ au premier ordre.
- 3. Montrer que le petit paquet d'onde peut se réécrire

$$\Psi(x,t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \left[-\frac{p_0^2 t}{2m} + p_0 x \right] \right) \int_{-\infty}^{+\infty} A(p) \exp\left(\frac{i\Delta p}{\hbar} \left(x - \frac{p_0}{m} t\right)\right) dp.$$

On suppose que la paquet d'onde est gaussien, soit $A(p) = A_0 \exp\left(-\frac{(p-p_0)^2}{4\sigma_p^2}\right)$ avec $p_0 \gg \sigma_p$.

4. Est-ce que ce paquet d'onde donne une fonction d'onde normalisable On donne

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-\alpha x^2 - i\xi x) dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \exp\left(-\frac{\xi^2}{4\alpha}\right) .$$

- 5. Calculer la fonction d'onde et montrer que $|\Psi(x,t)| = C \exp\left(-\frac{(x-p_0t/m)^2}{4\Delta x^2}\right)$ avec C et Δx que l'on définira.
- 6. Est-ce cohérent avec l'inégalité de Heisenberg spatiale?
- 7. Où se trouve le maximum de la densité de probabilité à la date t? Interpréter sa dépendance en t.

Exercice 5 - Système à deux particules : Soit un système de 2 particules indépendantes d'amplitude de probabilité $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)$ avec \vec{r}_1 la position de la première particule et \vec{r}_2 la position de la seconde particule.

- 1. Justifier que l'on peut mettre la fonction d'onde sous la forme $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) = \Psi_1(\vec{r}_1, t)\Psi_2(\vec{r}_2, t)$.
- 2. Montrer que l'équation de Schrödinger appliquée à cette fonction peut se décomposer en 2 équations, l'une agissant sur Ψ_1 , l'autre sur Ψ_2 .
- 3. En déduire l'expression de l'énergie totale \mathcal{E} en fonction de l'énergie de chaque particule.

Exercice 6 - Démonstration de la relation de Heisenberg : Considérons une particule quantique décrite par une fonction d'onde Ψ telle que $\langle x \rangle = 0$ et $\langle p_x \rangle = 0$. On rappelle que Δx et Δp correspondent aux incertitudes-types des observables x et p_x pondérées par la distribution de probabilité.

- 1. Par définition, $\Delta x^2 = \langle x^2 \rangle$. Donner sa définition intégrale.
- 2. On admet que l'observable p_x appliquée à Ψ vérifie $p_x\Psi=i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial x}$. En déduire la définition intégrale de $\Delta p_x^2 = \langle p_x^2 \rangle$. 3. Montrer que

$$I(\lambda) = \int_{-\infty}^{+\infty} \left| x\Psi + \lambda \hbar \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right|^2 = \Delta x^2 - \lambda \hbar + \lambda^2 \Delta p_x^2.$$

4. En utilisant le fait que $I(\lambda)$ est un trinôme du second degré en λ , toujours positif ou nul, en déduire l'inégalité de Heisenberg spatiale.

Partie spatiale de la fonction d'onde dans un potentiel

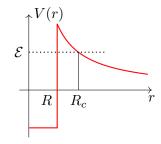
Exercice 7 - Numérique - Radioactivité alpha : La radioactivité α est l'émission par un noyau ${}^{A}_{A}X$ d'un noyau d'hélium 4_2 He ou particule α . La réaction nucléaire correspondante s'écrit

$$^{A}_{Z}X \longrightarrow ^{A-4}_{Z-2}Y + ^{4}_{2}\mathrm{He}$$
 .

Dans une théorie élémentaire de la radioactivité α proposée par Gamow en 1928, on considère que la particule α préexiste dans le noyau X, considéré comme résultant de la réunion du noyau Y et de la particule α .

La loi d'interaction entre ces deux particules est définie par leur énergie potentielle V(r) représentée en fonction de leur distance r:

 \triangleright si r est supérieur à une limite $R=r_0A^{1/3}$ (pratiquement égal au rayon du noyau Y car la particule α est quasi-ponctuelle), l'énergie potentielle V est due à la seule répulsion électrostatique entre les Z-2 protons de Y et les 2 protons de He : $V(r) = \frac{2(Z-2)e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$;



 \triangleright pour r < R, les interactions nucléaires attractives interviennent, que l'on schématise par un puits de potentiel très profond.

On donne $r_0 = 1.2 \times 10^{-15} \,\mathrm{m}$, $\varepsilon_0 = \frac{1}{36\pi} 10^{-9} \,\mathrm{F/m}$, $e = 1.6 \times 10^{-19} \,\mathrm{C}$ et $m_\mathrm{p} \approx m_\mathrm{n} = 1.67 \times 10^{-27} \,\mathrm{kg}$.

On considère un atome X de radium $^{226}_{88}$ Ra et une particule α d'énergie $\mathcal{E} = 4.78$ MeV.

1. Calculer R et R_c .

2. Expliquer pourquoi l'émission α ne peut se faire que par effet tunnel.

Dans le modèle proposé par Gamow, le coefficient de transmission peut se mettre sous forme approché

$$\ln T \approx -2 \int_{R}^{R_c} \sqrt{\frac{2m_{\alpha}(V(r) - \mathcal{E})}{\hbar^2}} dr .$$

3. Montrer numériquement que l'on peut supposer

$$\ln T \approx -\frac{314}{\sqrt{\mathcal{E}}} + 74.8$$

avec \mathcal{E} en MeV.

On considère que la particule α de vitesse v rebondit un certain nombre de fois sur la paroi. À chaque collision avec la paroi située en r = R, la probabilité pour que la particule franchisse la barrière est T. On appelle t_0 le temps mis entre deux collisions.

- 4. Calculer t_0 et $\tau = t_0/T$ le temps de vie de la particule α dans le puits de potentiel. Donner l'application numérique.
- 5. L'énergie \mathcal{E} des particules α peut varier entre 4 et 9 MeV pour les différents émetteurs α . Montrer avec le modèle précédent que t_0 est presque le même pour tous les émetteurs α . En déduire une formule approchée numérique de $\ln \tau$ en fonction de \mathcal{E} exprimé en MeV.

Exercice 8 - Particule dans un puits infini et relation de Heisenberg : On rappelle qu'une particule confinée dans un puits infini entre 0 et a est décrite par un mode propre $\Phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(n\pi \frac{x}{a}\right)$.

- 1. Justifier sans calcul que la valeur moyenne de x vaut a/2.
- 2. On rappelle que, pour un mode propre fixé,

$$\langle A \rangle = \int_0^a (\Phi_n(x)) \cdot (A\Phi_n(x)) dx$$
.

Calculer $\langle x^2 \rangle$.

- 3. En déduire $(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle \langle x \rangle^2$.
- 4. Pour mesurer la valeur moyenne de p (qui est une observable quantique donc un opérateur), on utilise la propriété $p\Phi_n=i\hbar\frac{\partial\Phi_n}{\partial x}$. On a donc

$$\langle p \rangle = \int_0^a (\Phi_n) \cdot (p\Phi_n) .$$

Que vaut cette valeur?

- 5. De même, on a $p^2 \Phi_n = (i\hbar)^2 \frac{\partial^2 \Phi_n}{\partial x^2}$. En déduire $\Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle \langle p \rangle^2}$.
- 6. Donner une borne inférieure pour $\Delta x \Delta p$. Conclure.

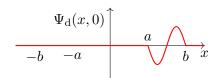
Exercice 9 - Étude qualitative de la molécule d'ammoniac : On étudie l'un des nombreux degrés de liberté de la molécule d'ammoniac NH₃. L'atome d'azote a la possibilité de se déplacer par rapport au plan des atomes d'hydrogène, sur l'axe du triangle équilatéral et en particulier d'osciller d'un côté à l'autre. Au cours d'un mouvement de ce type, le centre de masse reste fixe et le triangle des atomes d'hydrogène se déforme en se déplaçant en même temps que l'atome d'azote.

On modélise ce problème par le mouvement d'une particule dans un ensemble de deux puits de potentiel à une dimension, correspondant aux deux états d'équilibre possibles de la molécule, et séparés par une barrière de potentiel. On a donc un potentiel infini si $x>|b|,\,V_0$ si |x|< a et un potentiel nul sinon.

On donne $h = 6.62 \times 10^{-34} \, \text{J} \cdot \text{s}$ et on considère une particule d'énergie $0 < \mathcal{E}_0 < V_0$.

1. On considère d'abord le cas limite où V_0 est infini. Quels sont les niveaux d'énergies dans chaque puits de potentiel infini?

On définit $\Phi_{\rm d}(x)$ la partie spatiale de la fonction d'onde $\Psi_{\rm d}(x,t)$ non nulle dans l'intervalle [a,b].



2. Déterminer $\Psi_{\rm d}(x,t)$ correspondant au graphe ci-contre pour l'énergie \mathcal{E}_0 à t=0.

On définit $\Phi_{g}(x)$ la partie spatiale de la fonction d'onde $\Psi(x,t)$ non nulle dans l'intervalle [-b,-a] telle que $\Psi_{g}(x,t) = \Psi_{d}(-x,t)$. On considère $\Psi(x,t) = \alpha \Psi_{g}(x,t) + \beta \Psi_{d}(x,t)$.

3. Déterminer une relation entre α et β .

On suppose maintenant que V_0 est fini. Comme le potentiel est symétrique, on peut montrer que la fonction propre de l'hamiltonien doit être paire ou impaire. On obtient deux fonctions d'ondes normalisées Ψ_+ et Ψ_- d'énergie \mathcal{E}_+ et \mathcal{E}_- différentes et voisines de \mathcal{E}_0 . On note Φ_+ et Φ_- les parties spatiales et

$$\Phi_{+}(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\Phi_{g}(x) + \Phi_{d}(x) \right) \quad \text{et} \quad \Phi_{-}(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\Phi_{g}(x) - \Phi_{d}(x) \right) .$$

Les fonctions Φ_g et Φ_d sont légèrement différentes que dans le cas V_0 infini pour tenir compte de l'effet tunnel.

4. Représenter graphiquement Φ_+ et Φ_- en fonction de x à t=0.

On suppose qu'à t=0, la particule est dans la partie gauche du double puits avec une énergie \mathcal{E} , la fonction d'onde est approximativement $\Psi(x,0)=\Phi_{\rm g}(x)$.

- 5. Montrer que la particule oscille d'un côté à l'autre du puits. Déterminer la période d'oscillation de la molécule en fonction de $\Delta \mathcal{E} = \mathcal{E}_+ \mathcal{E}_-$.
- 6. Dans le maser à ammoniac (ancêtre du laser), on utilise une transition entre deux niveaux résultant du dédoublement de son état fondamental avec émission de photons de fréquence $\nu=23\,870\,\mathrm{MHz}$. Calculer la différence d'énergie entre les niveaux $\Delta\mathcal{E}$.

Exercice 10 - Niveaux d'énergie d'une particule confinée par un puits de hauteur finie :

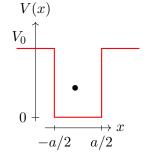
On étudie un puits de potentiel fini modélisé par le potentiel suivant

 \triangleright si |x| > a/2 le potentiel vaut V_0 une constante;

⊳ sinon, le potentiel est nul.

On étudie une particule stationnaire confinée dans le puits, soit $\mathcal{E} < V_0$.

- 1. Donner les expressions de la partie spatiale de la fonction d'onde les différentes zones.
- Justifier que la fonction d'onde complète est déterminée à l'aide de 4 constantes.



- 3. Justifier que les contraintes du système imposent une quantification de l'énergie.
- 4. Donner les équations reliant ces constantes.
- 5. Montrer que le système conduit à

$$\tan(ka) = \frac{2kK}{k^2 - K^2}$$

avec k et K à déterminer.

6. On pose x = ka et $u = \sqrt{2mV_0}a/\hbar$. Montrer que le système précédent devient

$$\tan x = \frac{2x\sqrt{u^2 - x^2}}{2x^2 - u^2} \ .$$

En déduire que le nombre de modes accessibles est fini.

- 7. Donner les valeurs possibles de x = kR pour u = 10.
- 8. Que valent les valeurs de l'énergie si on suppose que $V_0 \gg \mathcal{E}$?

$$\begin{array}{lll} \textbf{\'Elements de r\'eponse:} & & & & 8 - 2. \ \langle x^2 \rangle = a^2 \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2(n\pi)^2}\right); \ 5. \ \Delta p = & & \times \exp\left(-i\frac{\mathcal{E}_0}{\hbar}t\right); \ 3. \ \alpha^2 + \beta^2 = 1; \ 5. \ T = \\ & & nh/a; \ 6. \ \Delta x \Delta p > \alpha \frac{\hbar}{2} \ \text{avec} \ \alpha \approx 2.27. \\ & & & \tau = 1.7 \times 10^{14} \, \text{s.} \end{array} & & & & \pi h \ 4. \ t_0 = 9.7 \times 10^{-22} \, \text{s} \ \text{et} \\ & & & & 9 - 2. \ \Psi_{\rm d}(x,t) = -\sqrt{\frac{2}{b-a}} \sin\left(2\pi\frac{x-a}{b-a}\right) \end{array} & & & \mathbf{10} - 7. \ 4 \ \text{solutions:} \ 2.61 - 5.19 - 7.67 - 9.81. \end{array}$$

3 Sujets d'oraux

Exercice 11 - Potentiel en Dirac (Centrale) : Le potentiel étudié, supposé borné, est donné par $V(x) = \delta(x)V_0$ avec δ la distribution de Dirac définie par $\int_{0^-}^{0^+} f(x)\delta(x) = f(0)$. La marche de potentielle est donc considérée comme infiniment fine.

On considère une particule incidente venant de $-\infty$.

Déterminer les coefficients de réflexion et de transmission.

Élements de réponse :
$$11$$
 - Réflexion : $\frac{mV_0}{\hbar^2 ik - mV_0}$; transmis- $\sin : \frac{\hbar^2 ik}{\hbar^2 ik - mV_0}$

4 Pour aller plus loin...

Exercice 12 - Confinement d'un gaz d'électron dans un métal : Considérons un électron confiné dans un métal, représenté par une boîte cubique de volume L^3 . Le potentiel de confinement est nul si $(x,y,z) \in [0,L]^3$ et infini sinon. Le potentiel s'écrit $V(x,y,z) = V_0(x) + V_0(y) + V_0(z)$ avec V_0 le potentiel à une dimension.

On s'intéresse à la partie spatiale de la fonction d'onde $\Phi(x, y, z)$. Par symétrie, on celle-ci peut s'écrire sous la forme $\Phi(x, y, z) = \Phi_x(x)\Phi_y(y)\Phi_z(z)$. On note \mathcal{E} l'énergie totale de l'état.

- 1. Montrer que les fonctions Φ_i vérifient une équation différentielle de la forme $-\frac{\hbar^2}{2m}\Phi_i'' + V_0(x_i)\Phi_i = \mathcal{E}_i\Phi_i$.
- 2. Résoudre ces équations différentielles. Montrer que l'énergie totale dépend de trois nombres entiers positifs.
- 3. On souhaite dénombrer le nombre de configurations possibles d'énergie inférieure à \mathcal{E} . Montrer que ce nombre N(E) correspond au volume d'un huitième d'une certaine sphère que l'on précisera.

Il faut en réalité multiplier la valeur précédente par 2 pour tenir compte du spin des électrons.

L'énergie du gaz d'électrons dans le métal est appelée énergie de Fermi \mathcal{E}_F . Elle correspond à l'énergie du dernier niveau rempli.

4. Pour l'or, il y a $n = 5.9 \times 10^{28} \,\mathrm{m}^{-3}$ électrons disponibles par unité de volume. En déduire l'énergie de Fermi correspondante.

Données : masse de l'électron $m_{\rm e}=9.11\times 10^{-31}\,{\rm kg}$ - constante de Planck $h=6.63\times 10^{-34}\,{\rm J\cdot s}$.

Exercice 13 - Étude de l'oscillateur harmonique : L'étude de l'oscillateur harmonique est un problème majeur en physique. En effet, on montre qu'autour de toute position d'équilibre stable, le potentiel peut, au moins au second ordre, être assimilé à une fonction quadratique en la position.

Considérons donc un potentiel $V(x) = \frac{m\omega^2}{2}x^2$ avec m la masse de la particule et, par analogie avec la mécanique classique, ω la pulsation d'oscillation autour de l'équilibre.

1. Montrer que, par un changement de variable, l'équation de Schrödinger spatiale peut se réduire à une équation adimensionnée

$$\frac{\mathrm{d}^2\Phi}{\mathrm{d}\widetilde{x}^2} + (\varepsilon - \widetilde{x}^2)\Phi = 0$$

où on donnera la définition de ε et entre \widetilde{x} et x.

- 2. Montrer que $\Phi_0(\tilde{x}) = C_0 \exp(-\tilde{x}^2/2)$ est une solution de cette équation. C est une constante de normalisation que l'on ne cherchera pas à déterminer. Donner l'énergie correspondant à cette solution.
- 3. On cherche les autres solutions de cette équation sous la forme $\Phi(\tilde{x}) = CH(\tilde{x}) \exp(-\tilde{x}^2/2) = \alpha H(\tilde{x}) \Phi_0(\tilde{x})$ avec H une fonction polynomiale et α la constante de normalisation. Donner l'équation différentielle vérifiée par H.
- 4. La famille de polynôme vérifiant cette équation est appelée polynôme de Hermite, construire les polynômes de degré 0, 1 et 2 correspondants et tracer numériquement les fonctions d'ondes correspondantes (on prendra le coefficient devant le monôme de plus haut degré égal à 1). Donner l'énergie des états décrits par les polynômes de degré 1 et 2.

On cherche les relations entre les coefficients du polynôme, on pose donc H_n le polynôme de degré n que l'on écrit $H_n(\tilde{x}) = \sum_{i=0}^n a_i \tilde{x}^i$ où $a_n = 1$.

- 5. Justifier que, au vu de la symétrie du potentiel, les polynômes sont soit pairs, soit impairs. En déduire que la moitié des coefficients a_i sont nuls.
- 6. En utilisant l'équation différentielle vérifiée par les polynômes, donner la relation de récurrence entre les coefficients a_{2i} et a_{2i-2} .
- 7. En utilisant le fait que H_n est un polynôme d'ordre n, en déduire que $\varepsilon_n = 2n + 1$. En déduire les niveaux d'énergies accessibles d'une particule confinée par un puits de potentiel harmonique.