Colle n° 11 : Mécanique quantique

Exercice 1 - Étude d'un paquet d'onde à spectre plat : On s'intéresse à une particule libre qui se déplace suivant l'axe Ox croissant. On va supposer que plusieurs quantité de mouvement existent autour de p_0, à $\Delta p \ll p_0$ près, et on construit le paquet d'onde suivant

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

On suppose que $A(p)$ vaut A_0 si $p \in [p_0 - \Delta p/2, p_0 + \Delta p/2]$ et 0 sinon.
1. Exprimer $\mathcal{E}(p)$ au premier ordre.
2. Montrer que le petit paquet d'onde peut se réécrire

$$\Psi(x,t) = A_0 \exp\left(-\frac{ip_0^2 t}{2m\hbar}\right) \int_{p_0-\Delta p/2}^{p_0+\Delta p/2} \exp\left(\frac{ip}{\hbar}\left(x - \frac{p_0}{m}t\right)\right) \mathrm{d}p\ .$$

3. Calculer la fonction d'onde et donner son module.
4. Où se trouve le maximum de la densité de probabilité à la date t ? Interpréter sa dépendance en t.
5. Évaluer qualitativement la largeur Δx de la densité de probabilité. Est-ce compatible avec l'inégalité de Heisenberg ?

Exercice 2 - Particule libre à 3 dimensions : On considère une particule libre de se déplacer dans les 3 directions de l'espace. La fonction d'onde Ψ dépend donc de x, y, z et t.
1. On cherche une solution stationnaire sous la forme $\Psi(t, \vec{r}) = \chi(t)\Phi(x, y, z)$. Donner l'expression de χ.
2. On suppose que $\Phi(x, y, z) = \Phi_x(x)\Phi_y(y)\Phi_z(z)$. Montrer que

$$-\frac{\mathrm{d}^2\Phi_x}{\mathrm{d}x^2} = \frac{2mk_x^2}{\hbar^2}\Phi_x$$

   et donner des expressions similaires pour y et z.
3. En déduire la relation entre $|\vec{k}|^2$ et $\mathcal{E}$.
4. On cherche une solution au problème sous forme d'une onde plane $\exp(i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t))$, retrouver le résultat précédent.

Exercice 3 - Superposition de fonctions d'onde : Une particule qui se déplace sur un axe Ox est soumise à un potentiel V tel que $V = 0$ pour $0 < x < a$ et $V = +\infty$ pour $x < 0$ et $x > a$. Les fonctions d'onde normées des états stationnaires peuvent se mettre sous la forme

$$\Psi_n(x,t) = \Phi_n(x) \exp\left(-i\frac{\mathcal{E}_n t}{\hbar}\right) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(n\pi\frac{x}{a}\right) \exp\left(-i\frac{\mathcal{E}_n t}{\hbar}\right)\ .$$

On place le système à $t = 0$ dans l'état représenté par

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\Phi_1(x) + \Phi_2(x)\right]\ .$$

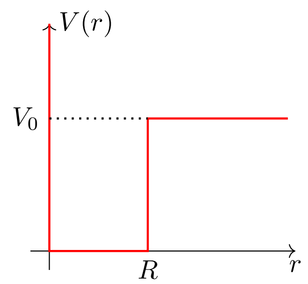
1. Donner l'expression de $\Psi(x,t)$. On posera $\omega = (\mathcal{E}_2 - \mathcal{E}_1)/\hbar$.
2. Établir l'expression de la densité linéique de probabilité $|\Psi(x,t)|^2$.

On donne les graphes représentant cette densité linéique de présence en fonction de x à $t = 0$, $t = t_1 = \pi/(2\omega)$ et $t = t_2 = \pi/\omega$.

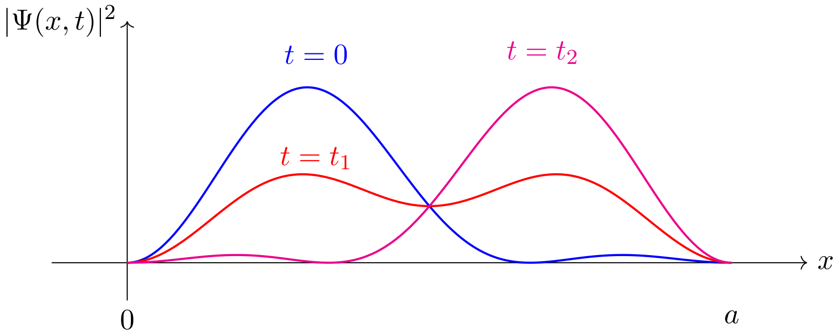
3. Interpréter les graphes. Que se passe-t-il pour $t > \pi/\omega$?
4. La valeur moyenne de x à l'instant t peut s'écrire sous la forme $\langle x\rangle = \int_0^a x|\Psi|^2 \mathrm{d}x$. En déduire une estimation de l'intervalle de temps Δt au bout duquel le système a évolué de façon appréciable.

Exercice 4 - Puits semi-infini :
Pour modéliser de la force nucléaire entre un proton et un neutron, notamment dans le cadre d'une des réactions de la nucléosynthèse primordiale où un neutron et un proton fusionnent pour donner un noyau de deutérium, on utilise le modèle du puits semi-infini. La loi d'interaction est définie par leur énergie potentielle $V(r)$ représentée en fonction de leur distance r :

- si r est supérieur à une limite R, le potentiel est V_0 une constante ;
- si r est négatif, le potentiel est infini ;
- sinon, le potentiel est nul.



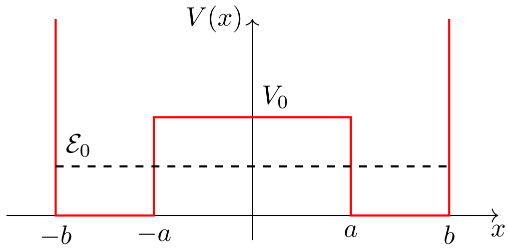
On étudie une particule stationnaire confinée dans le puits, soit $\mathcal{E} < V_0$.



1. Donner l'expression de la partie temporelle de la fonction d'onde.
2. En utilisant la condition aux limites en $r = 0$, donner l'expression de la fonction d'onde entre 0 et R.
3. En utilisant la condition de normalisation, donner l'expression de la fonction d'onde pour $r > R$.
4. En utilisant les relations de continuité, montrer qu'il faut résoudre l'équation $K = -k\cot(kR)$ où on définira chacun des termes.
5. On pose $u = \sqrt{2mV_0}\dfrac{R}{\hbar}$. Montrer que le nombre d'énergies possibles est fini.
6. Donner les valeurs possibles de $x = kR$ pour $u = 10$.

Exercice 5 - Étude quantitative de la molécule d'ammoniac : On étudie l'un des nombreux degrés de liberté de la molécule d'ammoniac NH_3. 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 $h = 6.62 \times 10^{-34}\,\mathrm{J\cdot s}$ et on considère une particule d'énergie $0 < \mathcal{E}_0 < V_0$.

1. Justifier, à partir des symétries du potentiel, que les solutions de l'équation de Schrödinger sont soit paires (symétriques), soit impaires (anti-symétriques).
2. Donner les expressions de la partie spatiale de la fonction d'onde les différentes zones.

Dans les puits gauche (resp. droit), on note la fonction d'onde sous la forme $\Phi_\mathrm{g}(x) = \alpha_\mathrm{g}\sin(kx+\varphi_\mathrm{g})$ (resp. $\Phi_\mathrm{d}(x) = \alpha_\mathrm{d}\sin(kx+\varphi_\mathrm{d})$).

1. Donner l'expression de k.
2. Quelle est la valeur de φ pour respecter les conditions aux limites en $x = \pm b$. Quelle sont les relations entre α_g et α_d dans les cas des solutions paires et impaires.
3. On se restreint à l'étude d'une solution paire, montrer que les contraintes conduisent à
$$k\coth(Ka) = -K\tan[k(b-a)]$$
avec k et K à déterminer.
4. On se restreint à l'étude d'une solution impaire, montrer que les contraintes conduisent à
$$k\tanh(Ka) = -K\tan[k(b-a)]$$
avec k et K à déterminer.
5. Dans le cas d'une barrière infinie $V_0 = +\infty$, que peut-on dire de l'énergie des niveaux symétriques et anti-symétriques ? Quelles sont les valeurs du nombre d'onde k ? Représenter les états possibles pour l'énergie minimale.
6. Prenons maintenant $V_0 \gg \mathcal{E}$ mais non infini. Montrer graphiquement que les états de même énergie de la barrière infini se séparent en états d'énergie distincte.