

## Colle n° 22 : Mécanique quantique

**Exercice 1 - Étude du paquet d'onde gaussien :** On s'intéresse à une particule libre qui se déplace suivant l'axe  $Ox$  croissant.

- 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

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

- Exprimer  $\mathcal{E}(p)$  au premier ordre.
- 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  $p_0 \gg \sigma_p$ .

- Est-ce que ce paquet d'onde donne une fonction d'onde normalisable ?

On donne

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

- Calculer la fonction d'onde et montrer que  $|\Psi(x, t)| = C \exp\left(-\frac{(x - p_0 t/m)^2}{4\Delta x^2}\right)$  avec  $C$  et  $\Delta x$  que l'on définira.
- Est-ce cohérent avec l'inégalité de Heisenberg spatiale ?
- Où se trouve le maximum de la densité de probabilité à la date  $t$  ? Interpréter sa dépendance en  $t$ .

**Exercice 2 - 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.

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

**Exercice 3 - 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  $\Phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(n\pi \frac{x}{a}\right)$ .

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

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

Calculer  $\langle x^2 \rangle$ .

- En déduire  $(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$ .
- 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 ?

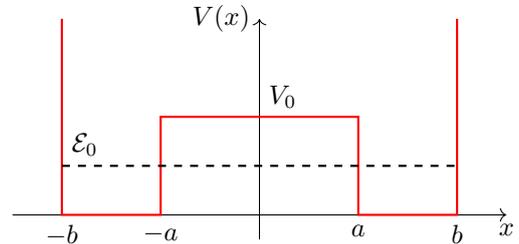
- De même, on a  $p^2\Phi_n = (i\hbar)^2 \frac{\partial^2 \Phi_n}{\partial x^2}$ . En déduire  $\Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2}$ .

6. Donner une borne inférieure pour  $\Delta x \Delta p$ . Conclure.

**Exercice 4 - Étude qualitative de la molécule d'ammoniac :** On étudie l'un des nombreux degrés de liberté de la molécule d'ammoniac  $\text{NH}_3$ . 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.

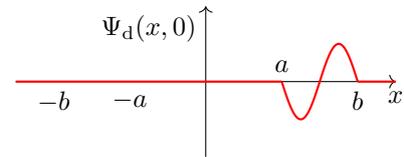
On donne  $h = 6.62 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$  et on considère une particule d'énergie  $0 < \mathcal{E}_0 < V_0$ .



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  $\Phi_d(x)$  la partie spatiale de la fonction d'onde  $\Psi_d(x, t)$  non nulle dans l'intervalle  $[a, b]$ .

2. Déterminer  $\Psi_d(x, t)$  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  $\alpha$  et  $\beta$ .

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  $\Psi_+$  et  $\Psi_-$  d'énergie  $\mathcal{E}_+$  et  $\mathcal{E}_-$  différentes et voisines de  $\mathcal{E}_0$ . On note  $\Phi_+$  et  $\Phi_-$  les parties spatiales et

$$\Phi_+(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Phi_g(x) + \Phi_d(x)) \quad \text{et} \quad \Phi_-(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Phi_g(x) - \Phi_d(x)) .$$

Les fonctions  $\Phi_g$  et  $\Phi_d$  sont légèrement différentes que dans le cas  $V_0$  infini pour tenir compte de l'effet tunnel.

4. Représenter graphiquement  $\Phi_+$  et  $\Phi_-$  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  $\Psi(x, 0) = \Phi_g(x)$ .

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  $\nu = 23\,870 \text{ MHz}$ . Calculer la différence d'énergie entre les niveaux  $\Delta \mathcal{E}$ .