

## Mécanique quantique : proposition de corrigé

### Exercice 1 : faisceaux continus de particules libres.

a) Pour les protons libres obtenus après accélération, on a :  $E = \frac{p^2}{2m}$ .

$$\text{Ainsi, } \lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE}} \text{ et } k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}.$$

APPLICATION NUMÉRIQUE :  $\lambda = 8,9 \cdot 10^{-15} \text{ m}$ .

La forme générale de la fonction d'onde est donnée par :

$$\psi(x, t) = \sqrt{n_l} \exp(ikx - iEt/\hbar)$$

où  $n_l$  est la densité linéique de protons.  $dN = |\psi(x, t)|^2 dx$  représente le nombre de protons présents à  $t$  entre  $x$  et  $x + dx$ .

b) Avec les mêmes calculs qu'en a),  $k = 2,4 \cdot 10^{15} \text{ m}^{-1}$ .

Ici  $\sqrt{n_l} = \psi_0$  peut être obtenu avec :

$$j_{\text{particules}} = \psi_0^2 \frac{p}{m} = \frac{I}{\pi a^2 e}$$

Le courant de charges s'en déduit ainsi :

$$|j_{\text{charges}}| = e \times |j_{\text{particules}}|$$

Soit :

$$\psi_0 = \left( \frac{I}{\pi a^2 e} \sqrt{\frac{m}{2E}} \right)^{1/2}$$

APPLICATION NUMÉRIQUE :  $\psi_0 = 1,4 \cdot 10^6 \text{ m}^{-1/2}$

### Exercice 2 : état non stationnaire d'un quanton dans un puits de profondeur infinie.

a) Avec la donnée :  $\sin^3\left(\frac{\pi x}{a}\right) = \frac{3}{4} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) - \frac{1}{4} \sin\left(\frac{3\pi x}{a}\right)$ .

Ainsi :

$$\Phi(x) = \frac{3}{\sqrt{10}} \Phi_1(x) - \frac{1}{\sqrt{10}} \Phi_3(x)$$

La connaissance de la fonction d'onde à  $t = 0$  permet sa détermination pour tout  $t$ . Cette fonction est solution de l'équation de Schrödinger (d'ordre 1 par rapport au temps). La linéarité permet ici d'utiliser la superposition :

$$\psi(x) = \frac{3}{\sqrt{10}} \psi_1(x, t) - \frac{1}{\sqrt{10}} \psi_3(x, t)$$

b) La densité de probabilité de présence  $\rho_p$  vérifie :  $\rho_p(x, t) = |\psi(x, t)|^2$ .

Il vient, en développant le résultat en a) :

$$\rho_p(x, t) = \frac{9}{10} |\psi_1|^2 + \frac{1}{10} |\psi_3|^2 - \frac{3}{10} \psi_1(x) \psi_3(x) \left( \exp\left(i \frac{(E_3 - E_1)t}{\hbar}\right) + \exp\left(-i \frac{(E_3 - E_1)t}{\hbar}\right) \right)$$

Soit :

$$\rho_p(x, t) = \frac{9}{10} |\psi_1|^2 + \frac{1}{10} |\psi_3|^2 - \frac{3}{5} \psi_1(x) \psi_3(x) \cos\left(\frac{(E_3 - E_1)t}{\hbar}\right)$$

**Exercice 3 : états stationnaires dans un potentiel uniforme par morceaux.**

Soit une particule de masse  $m$  qui évolue dans le potentiel  $V(x)$  de l'énoncé. L'équation de Schrödinger s'écrit :

$$\begin{aligned} \text{— dans la partie (2)} : i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(x, t) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}(x, t) \\ \text{— dans la partie (1)} : i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(x, t) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}(x, t) + V_0 \psi(x, t) \end{aligned}$$

a) La prise en compte de l'expression de la fonction d'onde :  $\psi(x, t) = \phi(x) \exp(-iE/\hbar t)$  conduit dans la région (2) à l'équation :

$$\frac{d^2 \phi_2}{dx^2}(x) + \frac{2mE}{\hbar^2} \phi_2(x) = 0$$

et dans la région (1) à l'équation :

$$\frac{d^2 \phi_1}{dx^2}(x) + \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} \phi_1(x) = 0$$

avec  $E < V_0$  pour les états liés.

On pose :  $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$  et  $\kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$ , on obtient les expressions suivantes :

$$\begin{cases} \phi_2(x) = A_2 e^{ikx} + B_2 e^{-ikx} \\ \phi_1(x) = A_1 e^{\kappa x} + B_1 e^{-\kappa x} \end{cases}$$

La non-divergence de la fonction d'onde à l'infini donne  $B_1 = 0$ , soit  $\phi_1(x) = A_1 e^{\kappa x}$ .

De plus, les conditions aux limites impliquent  $\phi(x=0) = 0$ , et la continuité de  $\phi$  et  $\phi'$  en  $x = a$ . Ces trois conditions donnent le système suivant :

$$\begin{cases} A_2 + B_2 = 0 \\ A_2 e^{ika} + B_2 e^{-ika} = A_1 e^{-\kappa a} \\ ikA_2 e^{ika} - ikB_2 e^{-ika} = -\kappa A_1 e^{-\kappa a} \end{cases}$$

D'où l'on déduit :

$$\begin{cases} A_2 = -B_2 \\ 2i \sin(ka) \times A_2 - A_1 e^{-\kappa a} = 0 \\ 2i \cos(ka) \times A_2 + \kappa A_1 e^{-\kappa a} = 0 \end{cases}$$

Ce système d'équations admet des solutions non-nulles ( $A_1$  et  $A_2$  tous les deux non-nuls) à condition d'avoir :

$$\tan(ka) = -\frac{k}{\kappa}$$

(quotient de la deuxième ligne du système avec la troisième). Ce qui donne bien le résultat demandé, à savoir :

$$\tan\left(\frac{a\sqrt{2mE}}{\hbar}\right) = -\sqrt{\frac{E}{V_0 - E}}$$

b) Les expressions de  $\phi(x)$  dans les deux régions sont :

$$\begin{aligned} \text{— dans la région (2)} : \phi_2(x) &= 2i A_2 \sin(kx) \\ \text{— dans la région (1)} : \phi_1(x) &= A_1 e^{-\kappa x} \end{aligned}$$

Pour esquisser le tracé de la fonction d'onde à l'état fondamental, il suffit d'avoir en  $x = a$  continuité de  $\phi$  et de sa dérivée (donc sa tangente). La fonction sinus ne doit posséder qu'un seul ventre dans la partie  $x < a$ , et pour la partie  $x > a$ , on a une exponentielle décroissante (voir FIGURE 1).

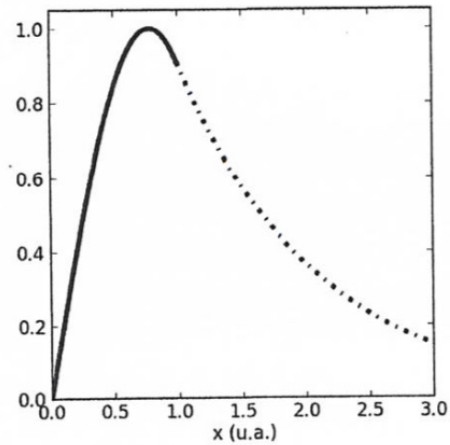


FIGURE 1: Esquisse de la fonction d'onde

**Exercice 4 : gaz quantique ou classique ?**

a) En notant simplement  $v$  la vitesse quadratique moyenne, on a :  $\frac{1}{2}mv^2 = \frac{3}{2}k_B T$  et donc :  $v = \sqrt{\frac{3k_B T}{m}}$ .

Comme  $M_{He} = 4 \text{ g.mol}^{-1}$  et  $N_A k_B = R$  (constante des gaz parfaits), il vient :  $v = \sqrt{\frac{3RT}{M_{He}}}$ . A.N. :  $v = 1,4.10^3 \text{ m.s}^{-1}$ .  
La longueur d'onde de de Broglie vérifie :

$$\lambda_{DB} = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} = \frac{hN_A}{M_{He}v}$$

Soit :  $\lambda_{DB} = 7,3.10^{-11} \text{ m}$ . Une mole de gaz occupe  $V = 24 \text{ L}$ . Dans un modèle simple on peut alors relier la distance  $d$  interatomique en écrivant :  $V = N_A d^3$ , chaque atome occupant en moyenne un volume  $d^3$ . A.N. :  $d = 3,4 \text{ nm}$ .

b) Lorsque que  $\lambda_{DB}$  est de l'ordre de grandeur de la distance interatomique, chaque atome est décrit par un paquet d'onde d'extension spatiale de l'ordre de  $\lambda_{DB}$  et donc de l'ordre de  $d$ . On a alors recouvrement des différents paquets d'onde, ce qui donne lieu à des effets quantiques.

Ici :  $\lambda_{DB} \approx \frac{2}{100}d$  : un modèle quantique n'est pas nécessaire.

c) Pour la vitesse quadratique moyenne, on reprend l'expression établie en a).  
APPLICATION NUMÉRIQUE :  $v = 1,2.10^6 \text{ m.s}^{-1}$  et  $\lambda_{DB} = 6,1.10^{-10} \text{ m}$ .

Ici, on va écrire  $d \approx n^{-1/3}$  où  $n$  est la densité volumique en atomes de cuivre.  
De plus :

$$n = \frac{\mu_{Cu}}{m_{Cu}} = \frac{\mu_{Cu}N_A}{M_{Cu}}$$

APPLICATION NUMÉRIQUE :  $n = 8,5.10^{28} \text{ m}^{-3}$  et  $d = 2,3.10^{-10} \text{ m}$ .

Ici, on est dans le cas où on a des recouvrements de paquet d'onde. Une description classique (telle que le modèle de Drude) est donc insuffisante et fera apparaître des contradictions avec l'expérience. Cela impose d'utiliser un modèle quantique pour l'étude.

**Exercice 5 : modèle de Bohr de l'atome.**

a) Si on suppose que l'onde décrivant l'électron sur sa trajectoire circulaire ne disparaît pas par interférences destructives, on écrit l'accord de phase sur un tour comme :  $2\pi a_n = \lambda n$ .

Cela donne  $a_n = n\hbar/p_n$ , et donc :  $p_n = \frac{n\hbar}{a_n}$ .

Ici, on est dans le cas  $n = 1$ .

b) On écrit la loi de la quantité de mouvement pour une trajectoire circulaire uniforme :

$$m \frac{v^2}{a_0} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a_0^2}$$

Sachant qu'on a également  $p_0 = mv$ , il vient, tous calculs faits :

$$a_0 = \frac{\hbar^2 4\pi\epsilon_0}{me^2}$$

APPLICATION NUMÉRIQUE :  $a_0 = 0,53 \times 10^{-10}$  m.

c) L'énergie  $E$  de l'électron vérifie :

$$E = \frac{p_0^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a_0} = -\frac{p_0^2}{2m}$$

Il vient finalement, en utilisant la définition de  $p_0$  en fonction de  $a_0$ , et l'expression de  $a_0$  :

$$E = -\frac{m}{2\hbar^2} \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2$$

APPLICATION NUMÉRIQUE :  $E = -13,7$  eV (on retrouve l'énergie d'ionisation de l'atome d'hydrogène).

La norme  $L$  du moment cinétique vérifie :  $L = a_0 p_0 = \hbar$ .

APPLICATION NUMÉRIQUE :  $L = 1,05 \times 10^{-34}$  J;s.

c) On généralise la relation donnée par l'énoncé (que l'on a trouvée en question a) :  $p_n = n \frac{\hbar}{a_n}$ .

Cela donne directement  $L_n = n\hbar$  (moment cinétique).

En appliquant une nouvelle fois la loi de la quantité de mouvement à l'électron :

$$m \frac{v^2}{a_n} = \frac{p_n^2}{ma_n} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a_n^2} = \frac{n^2 \hbar^2}{ma_n^3}$$

Ce qui donne  $a_n = n^2 a_0$  et  $p_n = \frac{p_0}{n}$ , et enfin :  $E = -\frac{p_n^2}{m} = +\frac{E}{n^2}$ .

d) Pour que l'on puisse parler de trajectoire, on doit avoir  $\Delta r \ll a_0$  et  $\Delta p \ll p_0$  afin que la position sur la trajectoire soit clairement définie (et de même pour la quantité de mouvement).

Si l'on suppose ces deux conditions remplies, on a alors :  $\Delta r \Delta p \ll \hbar$  ce qui contredit l'inégalité de Heisenberg spatiale. Le modèle ne peut donc pas être validé.

### Exercice 6 : laser à rubis.

Pour un puits infini de largeur  $a$ , les modes propres vérifient :  $k_n = n \frac{\pi}{a}$ . La relation de de Broglie fournit :  $p_n = \hbar k_n$ .

Il vient :

$$E_n = \frac{p_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2$$

Le photon émis est associé à une transition  $2 \rightarrow 1$  :

$$E_2 - E_1 = \frac{hc}{\lambda} = \frac{3\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$$

On isole  $a$  :

$$a = \frac{1}{2} \left( \frac{3h\lambda}{2mc} \right)^{1/2}$$

APPLICATION NUMÉRIQUE :  $a = 795$  pm.

**Exercice 7 : proton dans un noyau.**

Pour un puits infini de largeur  $a$ , les modes propres vérifient :  $k_n = n\frac{\pi}{a}$ . La relation de de Broglie fournit :  $p_n = \hbar k_n$ .

Il vient :

$$E_n = \frac{p_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2$$

APPLICATION NUMÉRIQUE :  $E_1 = 8,2$  MeV;  $E_2 = 32,9$  MeV et  $E_3 = 74,0$  MeV.

Le photon émis est associé à une transition  $2 \rightarrow 1$  :

$$E_2 - E_1 = \frac{hc}{\lambda_{21}} = \frac{3\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$$

APPLICATION NUMÉRIQUE :  $\lambda_{21} = 50$  fm.

Le photon émis est associé à une transition  $3 \rightarrow 1$  :

$$E_3 - E_1 = \frac{hc}{\lambda_{31}} = \frac{8\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$$

APPLICATION NUMÉRIQUE :  $\lambda_{31} = 19$  fm.

**Exercice 8 : puits infiniment profond et infiniment mince.**

a) L'équation de Schrödinger indépendante du temps donne, en reprenant l'expression de l'énoncé et pour  $|x| < a/2$  :

$$\phi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2} (E + V_0) \phi(x) = 0$$

On raisonne avec une énergie  $E$  fixe (ou du moins bornée) et on va intégrer la relation ci-dessus :

$$\int_{-a/2}^{a/2} \phi''(u) du = \phi'(a/2) - \phi'(-a/2) = -\frac{2m}{\hbar^2} (E + V_0) \int_{-a/2}^{a/2} \phi(u) du$$

Compte tenu de la continuité de  $\phi$  :

$$\int_{-a/2}^{a/2} \phi(u) du = a \langle \phi \rangle = a \times \phi(x_0)$$

avec  $x_0 \in [-a/2, a/2]$ .

Par passage à la limite,  $E$  étant bornée :

$$\phi'(0^+) - \phi'(0^-) = -\frac{2m}{\hbar^2} V_0 \phi(0)$$

b)  $E < 0$ , donc de part et d'autre du puits, les solutions seront évanescantes et on cherche donc des solutions sous forme d'exponentielles réelles. Ces solutions ne pouvant diverger, on a donc :

$$\begin{cases} \text{pour } x > 0 : & \phi(x) = Ae^{-Kx} \\ \text{pour } x < 0 : & \phi(x) = Ae^{Kx} \end{cases}$$

avec  $K = \left(\frac{-2mE}{\hbar^2}\right)^{1/2}$ .

La continuité de  $\phi$  en  $x = 0$  est bien vérifiée. On va ici traduire la discontinuité de sa dérivée avec l'expression obtenue en a), donnant ainsi l'unicité de l'énergie de la solution et son expression littérale :

$$-2AK = -\frac{2mV_0a}{\hbar^2}A$$

En remplaçant  $K$  par son expression, il vient :

$$E = -(V_0 \times a)^2 \frac{m}{2\hbar^2}$$

Pour un état impair, on devrait avoir

$$\begin{cases} \text{pour } x > 0: & \phi(x) = Ae^{-Kx} \\ \text{pour } x < 0: & \phi(x) = -Ae^{Kx} \end{cases}$$

La continuité de  $\phi$  en 0 donne :  $A = -A = 0$ . Il n'existe donc pas d'états impairs.

### Exercice 9 : courant de probabilité.

a) On a :

$$\partial_x j = \frac{i\hbar}{2m} (\psi\psi^{*''} - \psi^* \psi'')$$

L'équation de Schrödinger donne (avec un potentiel  $V(x)$  réel) :

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x, t) + V(x)\psi(x, t) = i\hbar\partial_t\psi(x, t) \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\psi^{*''}(x, t) + V(x)\psi^*(x, t) = -i\hbar\partial_t\psi^*(x, t) \end{cases}$$

Avec  $-\frac{\hbar^2}{2m} = i\hbar\left(\frac{i\hbar}{2m}\right)$ , il vient :

$$\frac{i\hbar}{2m} (\psi\psi^{*''} - \psi^* \psi'') = -\partial_t\psi^* \psi - \psi^* \partial_t\psi$$

et donc :

$$\partial_x j = -\partial_t(\psi\psi^*) = -\partial_t|\psi|^2$$

ce qui achève la preuve.

Cette équation traduit la conservation de la probabilité. En effet, à  $t$  fixé, la probabilité sur tout l'espace vérifie :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dP = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dx = 1$$

Sa valeur étant indépendante du temps, il ne peut y avoir de terme source associé (c'est ce que montre bien l'équation que l'on a démontré).

b) Pour  $V(x) = V_0$ , il n'y a pas de solution associée à  $E < V_0$  car ce serait une onde évanescence qui divergerait en  $\pm\infty$ . On a donc  $E > V_0$ . La solution est alors une onde progressive harmonique.

En posant  $k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)}$ , on a :

$$\begin{cases} \psi(x, t) = \psi_0 \exp\left(i\left(kx - \frac{E}{\hbar}t\right)\right) \\ \psi^*(x, t) = \psi_0^* \exp\left(-i\left(kx - \frac{E}{\hbar}t\right)\right) \end{cases}$$

On peut en déduire que :  $\psi^{*'} = -ik\psi^*$  et  $\psi' = ik\psi$ .

D'où :

$$j = \frac{i\hbar}{2m} (-2ik\psi\psi^*) = |\psi|^2 \frac{\hbar k}{m} = |\psi|^2 \frac{p}{m}$$

On retrouve bien ici que c'est la vitesse classique de la particule qui est associée au courant de probabilité.

En effet, ici,  $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0)$  donne :

$$E = \frac{p^2}{2m} + V_0$$

et une relation de dispersion qui s'en déduit :

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V_0$$

et donc :

$$\frac{d\omega}{dk} = \frac{p}{m}$$

(ce qui reste valable, comme quand  $V_0 = 0$ ).

c) Pour  $E < V_0$ , on a :

$$\psi = \psi_0 e^{-\kappa x} e^{-iE/\hbar t}$$

avec  $\kappa$  réel ( $\kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$ ). Dans ce cas :

$$\begin{cases} \psi'(x, t) = \kappa\psi(x, t) \\ \psi'^*(x, t) = -\kappa\psi^* \end{cases}$$

Cela donne donc que les termes  $\psi\psi'^*$  et  $\psi^*\psi'$  se compensent, et donc :  $j = 0$ .

d) Dans ce cas, le domaine étant borné, on écrit  $\psi$  sous la forme :

$$\psi = (\psi_{01} e^{-\kappa x} + \psi_{02} e^{+\kappa x}) e^{-i\frac{E}{\hbar} t}$$

Dans le calcul de  $j$ , les termes associés à l'onde 1 seule (resp. à l'onde 2 seule) donnent une contribution nulle comme on l'a vu en c). Il ne reste donc que les termes croisés, d'interférences des deux ondes de probabilité.

On vérifie que :

$$j = \frac{i\hbar}{2m} (2\kappa(\psi_{01}\psi_{02}^* - \psi_{02}\psi_{01}^*))$$

On écrit  $\psi_{01} = |\psi_{01}|e^{i\alpha}$  et  $\psi_{02} = |\psi_{02}|e^{i\beta}$ . Il vient :

$$j = \frac{2\hbar\kappa}{m} |\psi_{01}||\psi_{02}| \sin(\alpha - \beta)$$

C'est le déphasage entre les ondes évanescentes, associé au caractère complexe des pré-facteurs, qui assure un courant de probabilité non-nul.

### Exercice 10 : étalement d'un paquet d'ondes.

On considère un quanton libre de masse  $m$ .

a) Pour un quanton libre, on a :  $E = \hbar\omega = \frac{p^2}{2m}$ , avec  $p = \hbar k$ . La relation de dispersion est donc :  $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$ .

b) La vitesse de groupe  $v_g$  est la vitesse de déplacement du paquet d'ondes (de son maximum).

Elle vérifie :  $v_g = \frac{d\omega}{dk}$ .

Ici, on fait la différentielle de la relation de dispersion et on évalue en  $k_0$  :

$$d\omega = \frac{2\hbar k_0 dk}{2m}$$

il vient :

$$v_g = \frac{d\omega}{dk}(k_0) = \frac{\hbar k_0}{m}$$

c) Si on tient compte d'une largeur spatiale  $\Delta k$  importante du paquet d'onde, le développement limite à l'ordre 1 utilisé dans la description spatiale du paquet d'onde ne suffit plus. On peut soit développer  $\omega(k)$  à l'ordre 2, soit redécouper le paquet en sous-paquets spectralement plus petits (de largeur  $\delta k \ll \Delta k$ ). L'étalement spatial du paquet initial résulte de la dispersion des vitesses de groupe, les unes par rapport aux autres. On peut écrire :

$\Delta v_g = \frac{dv_g}{dk} \Delta k = \frac{\hbar \Delta k}{m}$ . Pour les centres du paquet d'onde, on a :  $\Delta x_C = \Delta v_g t$ .

Soit :  $\Delta x(t) = \Delta x_0 + \Delta v_g t$

d) Pour la détermination de  $t_0$  :

$$t_0 = \frac{\Delta x_0}{\Delta v_g} = \frac{\Delta x_0 m}{\hbar \Delta k}$$

Or, l'inégalité d'Heisenberg spatiale donne :  $\Delta p \Delta x \geq \hbar/2 \iff \Delta k \Delta x \geq 1/2$ . On prend donc ici :  $\Delta k \Delta x_0 = \frac{1}{2}$ .

Il vient ainsi :

$$t_0 = \frac{2m}{\hbar} (\Delta x_0)^2$$

L'application numérique donne, pour un électron :  $t_0 \approx 2.10^{-16}$  s.