Conforme avec le programme des FST et FS

Be In Sciences

Centre de soutien en-ligne

Hamza ICHOU

# Mécanique Quantique 1

**Inscription ouverte : préparation aux examens :**

## Les notions abordées dans ce document :

- Corps Noir, Catastrophe UV, Dualité onde-corpuscule
- Effet photo-électrique, Effet Comptons, Diffraction des électrons,
- Barrière de potentiel, puit de potentiel, Effet Tunnel, Potentiel Delta
- Formalisme mathématique
- Postulats de la mécanique quantique

# Série 2 :

## Exercice 1

Durant l'étude d'un paquet d'onde particulier, on va avoir besoin d'un outil mathématique très puissant appelé la transformée de Fourier. On définit la transformée de Fourier d'une fonction f par :

$$F(p) = TF(f(x)) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) e^{\frac{-ipx}{\hbar}} dx$$

De même, on démontre que la transformée de Fourier inverse s'écrit :

$$f(x) = TF^{-1}(F(p)) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} F(p) e^{+\frac{ipx}{n}} dp$$

On se donne une microparticule libre (aucune force n'agit sur cette particule) de masse m en mouvement sur l'axe Ox. La fonction d'onde associée à cette particule est, à l'instant $t = 0$ : N est la constante de normalisation et $p_0$ une constante positive.

1) Calculer la transformée de Fourier de $\psi(x, 0)$ notée $\varphi(p, 0)$
2) Calculer $\psi(x, 0)$ et déterminer N
3) On pose $\rho_x(x, 0) = |\psi(x, 0)|^2$
   a) Quelle est l'interprétation physique de $\rho_x(x, 0)$.
   b) Tracer la courbe $\rho_x(x, 0)$.
4) On pose $\rho_p(p, 0) = |\varphi(p, 0)|^2$
   a) Quelle est l'interprétation physique de $\rho_p(p, 0)$.
   b) Tracer la courbe $\rho_p(p, 0)$.
5) Déterminer la valeur x' qui vérifie $|\psi(x', 0)|^2 = \frac{1}{e}|\psi(0, 0)|^2$.
6) Déterminer la valeur p' qui vérifie $|\varphi(p', 0)|^2 = \frac{1}{e}|\varphi(0, 0)|^2$.
7) On définit : $\Delta x = 2|x'|$ et $\Delta p = 2|p'|$. Calculer le produit $\Delta x \Delta p$
8) Calculer
   a) Les valeurs moyennes la position x et de l'impulsion p notées respectivement $\bar{x}$ et $\bar{p}$.
   b) En déduire les écarts quadratiques E(x) et E(p).
   c) Comparer avec les valeurs $\Delta x$ et $\Delta p$ et du produit $\Delta x \Delta p$.

## Exercice 2

On imagine une particule qui serait décrite à $t = 0$, par la fonction d'onde $\psi(x, 0) = A(L^2 - x^2)$, si $x$ est compris entre −L et +L et 0 ailleurs. A est une constante réelle positive, de même que $L$.

1) Quelle est la densité de probabilité de trouver la particule en un point $x$.
2) Nommer la fonction d'onde. En déduire la dimension de A.
3) Tracer la fonction d'onde en fonction de $\boldsymbol{x}$.
4) Quelle est la valeur moyenne de $x$, notée $\langle x \rangle$.
5) Calculer $\Delta x$ après $l'$ avoir relié à 2 valeurs moyennes. Expliquer son sens physique.
6) Calculer $\langle p_x \rangle$, $\Delta p_x$ puis $\Delta x \Delta p_x$, commenter.

## Exercice 3

En mécanique quantique, **x** désigne la position d'une particule dans les problèmes à une dimension et **k** désigne le nombre d'onde de l'onde associée à cette particule en mouvement. **k** est lié à l'impulsion p de la particule par $p = \hbar k$, où $h$ est la constante de Planck réduite : h $= \frac{h}{2\pi}$, h étant la constante de Planck. En termes de l'impulsion, la transformée de Fourier de la fonction d'onde $\psi(x)$ sera définie par :

$$\bar{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) e^{-i\frac{p.x}{\hbar}} dx$$

De même, on peut déduire $\psi(x)$ à partir de $\bar{\psi}(p)$ à l'aide de la transformation de Fourier inverse.

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\psi}(p) e^{+i\frac{p.x}{\hbar}} dp$$

1) Calculer les transformées de Fourier:
   1) $\psi(x) = \frac{1}{a}$ pour $|x| < \frac{a}{2}$ et $\psi(x) = 0$ pour $|x| > \frac{a}{2}$
   2) $\psi(x) = e^{-\frac{|x|}{a}}$, a étant une constante positive.

   La largeur à mi-hauteur $\Delta x$ d'une fonction $\psi(x)$ admettant un maximum central au point $x_0$ et symétrique par rapport à l'axe x = x$_0$ est définie par :

   $$\psi\left(x_0 \pm \frac{\Delta x}{2}\right) = \frac{1}{2}\psi\left(x_0\right)$$

   Dans chacun des cas précédents, déterminer les largeurs à mi-hauteur **Δx** et **Δp** des courbes $\psi(x) et \bar{\psi}(p)$ et montrer que le produit ΔxΔp est proportionnel à h.
2) Établir la relation de Récurrence: $\overline{\psi^n}(p) = \left(\frac{ip}{\text{n}}\right)^n \bar{\psi}(p)$ où $\psi^n(x)$ est la dérivée $n^{\text{ieme}}$ de $\psi(x)$ dont les limites sont supposées être nulles lorsque $x$ tend vers $\pm\infty$.
3) Démontrer l'égalité : $\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x)\varphi(x)dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\psi}^*(p)\bar{\varphi}(p)dp$ En déduire l'identité de Parseval-Plancherel : $\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |\bar{\psi}(p)|^2 dp$ et l'égalité :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} dx = \frac{t}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} p|\bar{\psi}(p)|^2 dp$$

## Exercice 4

Une fonction d'onde à une dimension est donnée, au temps $t = 0$, par l'expression : $\psi(x,0) = \varphi_0(x) = C_0 \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right)$ Où $m$ est la masse de la particule et $\omega$ la pulsation de l'oscillateur. $C_0$ est une constante réelle. L'énergie de cet état fondamental est $E_0 = \frac{h\omega}{2}$

1) Que représente $|\varphi_0(x)|^2$ ? Calculer $C_0$ pour que $\varphi_0(x)$ soit normée. Justifier physiquement cette normalisation. Tracer $|\varphi_0(x)|^2$.
2) Calculer la valeur moyenne de $\boldsymbol{x}$ notée $\langle x\rangle$ et valeur moyenne de $x^2$ notée $\langle x^2\rangle$. En déduire $\Delta x$. Donner l'interprétation physique de $\Delta x$.
3) p est la quantité de mouvement associée à cet oscillateur. Calculer la valeur moyenne de p notée $\langle p\rangle$ et valeur moyenne de $p^2$ notée $\langle p^2\rangle$. En déduire $\Delta p$. Donner l'interprétation physique du produit $\Delta x \Delta p$.
4) Si l'énergie potentielle de la particule est $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$; à partir des résultats des questions b) et c), donner les expressions des valeurs moyennes de $l'$ énergie cinétique, de l'énergie potentielle et de $l'$ énergie totale. Conclusion.
5) Écrire la fonction $d'$ onde à l'instant $t$ soit $\psi(x,t)$. Quelle est l'équation qui nous permet de passer de $\psi(x,0)$ à $\psi(x,t)$ ? Calculer à nouveau $\langle x\rangle(t)$ et $\langle x^2\rangle(t)$. Conclusion. Données : $I_0 = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\alpha x^2\right) dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$ et $I_2 = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \exp\left(-\alpha x^2\right) dx = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha^3}}$

## Exercice 5

Paquets d'ondes Libres On considère une particule libre de masse $m$, animée d'un mouvement rectiligne le long de $l'$ axe 0x et décrite à l'instant $t$ par le paquet d'ondes :

$$\Psi(t,x) = N\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{|p|}{p_0}} \cdot e^{i\frac{(px-Et)}{h}} dp$$

où $N$ est une constante de normalisation et po une valeur positive de D'impulsion de cette particule.

1) Quelle est l'énergie de cette particule ?
2) Montrer que les composantes de ce paquet (les ondes planes monochromatiques) satisfont à $l'$ équation de Schrödinger pour la particule libre. En déduire que ce paquet peut bien décrire cette particule.
3) Calculer $\Psi(0,x)$.
4) Évaluer la transformée de Fourier $\bar{\Psi}(0,p)$ de $\Psi(0,x)$.
5) Donner une détermination réelle de la constante $N$.
6) Calculer les largeurs à mi-hauteur $\Delta x$ et $\Delta p$ des courbes $|\Psi(0,x)|^2$ et $|\bar{\Psi}(0,p)|^2$ définies par :

$$\left|\Psi\left(0, \pm\frac{\Delta x}{2}\right)\right|^2 = \frac{1}{2}|\Psi(0,0)|^2 \text{ et } \left|\bar{\Psi}\left(0, \pm\frac{\Delta p}{2}\right)\right|^2 = \frac{1}{2}|\bar{\Psi}(0,0)|^2$$

7) Évaluer le. produit $\Delta x \Delta p$ et en déduire l'interprétation physique de $\Delta x$ et $\Delta p$.

## Exercice 6 — Paquet d'ondes gaussien (facultatif)

Une particule libre de masse $m$, d'impulsion $p = \hbar k$ et d'énergie $E$ décrite par le paquet d'ondes $\psi(x,t)$ à une dimension:

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int g(k)e^{i(kx-\omega t)}dk$$

1) Trouver la relation entre $E$ et $k$. En déduire la relation de dispersion $\omega(k)$.
2) On considère le paquet d'ondes à l'instant initial : $\psi(x,t=0) = \psi(x)$.
   a) Montrer que $g(k)$ n'est autre que la transformée de Fourier de $\psi(x)$.
   b) Établir l'égalité de Parseval Plancherel :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |g(k)|^2 dk$$

   On suppose par la suite que la fonction $g(k)$ est une gaussienne centrée en $k_0$ :

$$g(k) = \left(\frac{a^2}{2\pi}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{a^2}{4}(k-k_0)^2\right)$$

   où $a$ est une constante ayant la dimension d'une longueur.
3) Paquet d'ondes à l'instant $t=0$ :
   a) Montrer que $\psi(x,0)$ est donnée par :

$$\psi(x,t) = \left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{1/4} e^{ik_0x} \exp\left(\frac{-x^2}{a^2}\right)$$

   On donne :

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\alpha^2y^2+\beta y\right)dy = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha^2}} \exp\left(\frac{\beta^2}{4\alpha^2}\right)$$

b) On définit le centre du paquet d'ondes par le point $x_M$ où $|\psi(x,0)|^2$ est maximale ; donner la position du centre du paquet d'ondes $\psi(x,0)$.

c) Montrer que la probabilité de trouver la particule dans tout l'espace est égale à 1 .

d) On définit la largeur $\Delta y$ d'une gaussienne $f(y) = \exp\left(-y^2/b^2\right)$ par $\Delta y = b/\sqrt{2}$. Déterminer les largeurs $\Delta x(0)$ de $|\psi(x,0)|^2$ et $\Delta k(0)$ de $|g(k)|^2$. En déduire que le paquet d'ondes $\psi(x,0)$ obéit à la relation d'incertitude d'Heisenberg.

4) Evolution du paquet d'ondes $\psi(x,t)$ dans le temps : A l'instant $t > 0$, l'expression du paquet d'ondes $\psi(x,t)$ est de la forme (à ne pas démontrer)

$$\psi(x,t) = \left(\frac{2a^2}{\pi}\right)^{1/4} \frac{e^{i\varphi} \cdot e^{ik_o x}}{\left(a^4 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2}\right)^{1/4}} \exp\left[-\frac{\left(x - \frac{\hbar k_o}{m} t\right)^2}{a^2 + \frac{2i\hbar t}{m}}\right]$$

a) Calculer la densité de probabilité $|\psi(x,t)|^2$ associée à la particule à l'instant $t$.

b) Déterminer la position $x_M(t)$ du centre du paquet d'ondes à l'instant $t$. Quelle est sa vitesse de déplacement ? La comparer à la vitesse de groupe associée au paquet.

c) Déterminer la largeur $\Delta x(t)$ et l'amplitude $A(t)$ de $|\psi(x,t)|^2$. Décrire qualitativement la variation de ces deux grandeurs en fonction du temps. Conclure quant à l'évolution de la forme de la densité de probabilité au cours du temps.

---

## Exercice 7 — TD 3.3 - Relation d'incertitude

On considère un paquet d'onde localisé, d'amplitude de probabilité $\psi(x)$ (densité $|\psi(x)|^2$ ). L'impulsion, variable conjuguée de $x$, suit la densité de probabilité $|\phi(k)|^2$. On peut supposer les densités de probabilités centrées, i.e. $<x>=0, <k>=0$.

1) Exprimer $\Delta x^2$ et $\Delta k^2$ en fonction de $\psi$ et de sa dérivée par rapport à $x$.

2) On note $I(\lambda) = \int_{-\infty}^{\infty} \left|x\psi(x) + \lambda \frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}(x)\right|^2 \mathrm{d}x$ où $\lambda$ est réel. En développant $I(\lambda)$, montrer que deux variables conjuguées obéissent à la relation d'incertitude $\Delta x \Delta k >= 1/2$. Retrouver alors la forme usuelle de la relation d'incertitude de Heisenberg $\Delta x \Delta p >= \hbar/2$.

---

## Exercice 8 — TD 4.1 - Paquet d'ondes libre

On considère un paquet d'onde localisé décrit par la fonction d'onde $\psi(x,t)$. On suppose que le paquet d'onde est libre, de sorte que la fonction d'onde obéit à l'équation de Schrödinger simple en l'absence de potentiel ($V(x) = 0$) ), soit

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}$$

1) En utilisant l'équation de Schrödinger, montrer la relation cinématique : $m\frac{\mathrm{d}\langle x\rangle}{\mathrm{d}t} = \langle p\rangle$. Démontrer également la relation fondamentale de la dynamique: $\frac{\mathrm{d}\langle p\rangle}{\mathrm{d}t} = 0$.

2) On considère un paquet d'onde gaussien minimal, tel que $\psi(x,t=0) \propto \exp\left[-\frac{x^2}{4\sigma^2}\right], \phi(k,t=0) \propto \exp\left[-k^2\sigma^2\right]$. Déterminer $\phi(k,t)$ puis $\psi(x,t)$. On admettra que l'expression de la transformée de Fourier d'une gaussienne établie dans le cas d'un paramètre $\sigma$ réel peut être étendue au cas où $\sigma$ est complexe.

3) En déduire l'étalement du paquet d'onde au cours du temps. Comment cela peut-il s'interpréter ? On peut montrer qu'une telle relation est générale (et pas spécifique à un paquet d'onde gaussien).

---

**Exercice 9** **Évolution d'un paquet d'ondes gaussien**

On considère une particule libre de masse m que l'on décrit par un paquet d'ondes (à une dimension) défini par :

$$\Psi(\mathrm{x}, \mathrm{t})=\frac{1}{\sqrt{2 \pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{g}\left(\mathrm{k}_{\mathrm{x}}\right) \mathrm{e}^{\mathrm{i}\left[\mathrm{k}_{\mathrm{x}} \cdot \mathrm{x}-\omega\left(\mathrm{k}_{\mathrm{x}}\right) \cdot \mathrm{t}\right]} \mathrm{dk}_{\mathrm{x}}$$

1) Montrer que $\Psi(\mathrm{x}, \mathrm{t})$ est solution de l'équation de Schrödinger.
2) On suppose que $\mathrm{g}\left(\mathrm{k}_{\mathrm{x}}\right)$ est une gaussienne centrée sur $\mathrm{k}_{\mathrm{x}_0}$; soit : $\mathrm{g}\left(\mathrm{k}_{\mathrm{x}}\right)=\mathrm{A} \cdot \exp \left[\mathrm{a}^2\left(\mathrm{k}_{\mathrm{x}}-\mathrm{k}_{\mathrm{x}}\right)^2\right] / 4$ avec $\mathrm{A}=\frac{\sqrt{\mathrm{a}}}{(2\ \mathrm{m})^{3/2}}$ et a est homogène à une distance.
   a) Montrer que la probabilité de présence de la particule est indépendant du temps.
   b) En utilisant la forme ci-dessus de $\mathrm{g}\left(\mathrm{k}_{\mathrm{x}}\right)$, on obtient après intégration, l'expression suivante pour $\Psi(\mathrm{x})$ (à un facteur de phase près) :

$$\Psi(x, t)=\left[\frac{2 a^2}{\pi \alpha(t)}\right]^{\frac{1}{4}} \exp \left(\frac{\varphi^2(x, t)}{Z(t)}\right)$$

   avec $\alpha(\mathrm{t})=\mathrm{a}^4+\frac{4 \hbar \mathrm{t}^2}{\mathrm{m}^2}$; $\varphi(\mathrm{x}, \mathrm{t})=\mathrm{x}-\frac{\hbar \mathrm{k}_{\mathrm{x}_0} \mathrm{t}}{\mathrm{m}}$ et $\mathrm{Z}(\mathrm{t})=\mathrm{a}^2+\mathrm{i} \frac{2 \hbar \mathrm{t}}{\mathrm{m}}$
   i) Calculer la densité de probabilité. ii) En déduire la vitesse du groupe $\mathrm{v}_{\mathrm{g}}$.
   c) Retrouver $v_g$ en considérant la relation de dispersion $\omega\left(k_x\right)$. Comparer $v_g$ à la vitesse de phase $v_{\varphi}$ et à la vitesse $v$ de la particule. Conclure.