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 3 :

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 Δx et Δp 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 Δx après l' avoir relié à 2 valeurs moyennes. Expliquer son sens physique.
6) Calculer $\langle p_x \rangle$, Δp_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 Δx 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: $\overline{\psi^n}(p) = \left(\frac{ip}{\mathrm{n}}\right)^n \bar{\psi}(p)$ où $\psi^n(x)$ est la dérivée n^{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 ω 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 Δx. Donner l'interprétation physique de Δx.
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 Δp. 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 :

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

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 Δx et Δp 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 Δx et Δp.

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 :

   $$\psi(x,t) = \left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{1/4} e^{ik_0 x} \exp\left(\frac{-x^2}{a^2}\right)$$

   On donne :

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

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 Δy 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 Δx^2 et Δk^2 en fonction de ψ 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 λ 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 σ réel peut être étendue au cas où σ 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 :

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

1) Montrer que $\Psi(\mathrm{x},\mathrm{t})$ est solution de l'équation de Schrödinger.
2) On suppose que $\mathrm{g}\left(\mathrm{k_x}\right)$ est une gaussienne centrée sur $\mathrm{k_{x_0}}$; soit : $\mathrm{g}\left(\mathrm{k_x}\right)=\mathrm{A}\cdot\exp\left[\mathrm{a}^2\left(\mathrm{k_x}-\mathrm{k_x}\right)^2\right]/4$ 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 $\mathrm{g}\left(\mathrm{k_x}\right)$, on obtient après intégration, l'expression suivante pour $\Psi(\mathrm{x})$ (à un facteur de phase près) :

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

   avec $\alpha(\mathrm{t})=\mathrm{a}^4+\frac{4\hbar\mathrm{t}^2}{\mathrm{m}^2}$; $\varphi(\mathrm{x},\mathrm{t})=\mathrm{x}-\frac{\hbar\mathrm{k_{x_0}}\mathrm{t}}{\mathrm{m}}$ 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 $\mathrm{v_g}$.
   c) Retrouver v_g en considérant la relation de dispersion $\omega\left(k_x\right)$. Comparer v_g à la vitesse de phase v_φ et à la vitesse v de la particule. Conclure.