

MQ1 – Equation de Schrödinger pour une particule libre

A – Travaux dirigés

MQ11 – Particule libre et paquet d'ondes

On considère une particule libre placée dans un potentiel nul. On rappelle que l'équation de Schrödinger s'écrit :

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = E\psi \text{ et en régime stationnaire : } -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + V\phi = E\phi$$

1°) Déterminer les fonctions d'onde $\psi(x, t) = \phi(x)f(t)$ représentant des états dynamiques pour lesquels l'énergie a la valeur E .

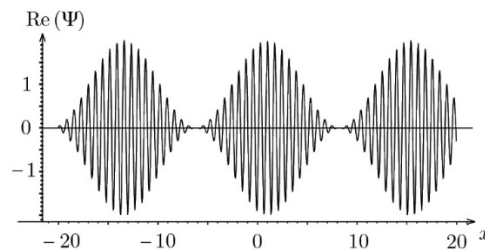
2°) Quelles sont les valeurs possibles de l'énergie ?

On étudie par la suite la fonction d'onde $\psi(x, t) = Ae^{i(k_0x - \omega_0t)}$. Pourquoi cette onde ne peut pas décrire la particule ?

3°) Pour résoudre la difficulté, on envisage un paquet d'ondes qui est la superposition d'ondes planes sinusoïdales de pulsations voisines de ω_0 et de vecteurs d'onde voisins de k_0 . On suppose que $\Delta\omega \ll \omega_0$ et $\Delta k \ll k_0$. Pour simplifier l'étude, on considère la superposition de trois ondes planes :

$$\psi(x, t) = B \left[e^{i(k_0x - \omega_0t)} + \frac{1}{2} e^{i\left((k_0 + \frac{\Delta k}{2})x - (\omega_0 + \frac{\Delta\omega}{2})t\right)} + \frac{1}{2} e^{i\left((k_0 - \frac{\Delta k}{2})x - (\omega_0 - \frac{\Delta\omega}{2})t\right)} \right]$$

On représente le graphe représentant la partie réelle de la fonction d'onde en fonction de x à $t = 0$. Déterminer la largeur Δx des « bouffées d'onde ».



Montrer que $\Delta k_x \Delta x \geq 2\pi$. Déterminer la vitesse de la particule.

4°) La figure ci-contre représente la partie réelle de la fonction d'onde d'un paquet d'ondes gaussien à $t = 0$ en fonction de l'abscisse. Ce paquet d'ondes est la superposition d'une infinité d'ondes planes de pulsations voisines de ω_0 et de vecteurs d'onde voisins de k_0 .

Est-ce que la condition de normalisation peut être résolue ? Définir la vitesse de phase et la vitesse de groupe. Comment est définie la vitesse de la particule ?

5°) Le milieu est-il dispersif ? Le paquet d'ondes se propage dans le sens des $x >$

0. Est-ce qu'il se déforme au cours du temps en supposant qu'à l'avant du front d'onde à $t=0$ se trouvent les longueurs d'onde les plus grandes.

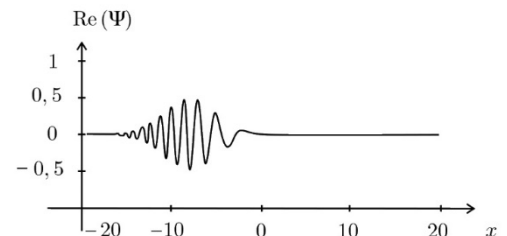
Rép : 1°) $\psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)} + Be^{-i(kx + \omega t)}$

2°) $E > 0$ et la condition de normalisation n'est pas respectée

3°) $\Delta p = \hbar \Delta k \dots$

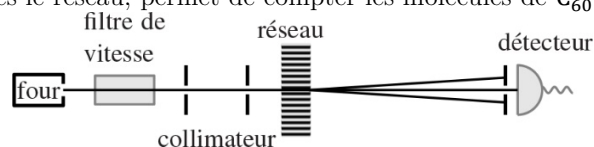
4°) $v_\phi = \frac{\hbar k_0}{2m} = \frac{v_0}{2}$ et $v_g = \frac{\hbar k_0}{m} = v_0$

5°) Il se comprime puis s'étale.



MQ12 – Diffraction de molécules par une onde lumineuse

On considère une expérience de diffraction de molécules de fullerène C_{60} par une onde stationnaire lumineuse. Un four contenant de la poudre de fullerène est chauffé à une température proche de 900 K. Un dispositif permet de sélectionner dans le faisceau de fullerène sortant du four des molécules de vitesse moyenne égale à $v = 120 \text{ m.s}^{-1}$ et dont la dispersion relative de vitesse est $\frac{\Delta v}{v} = 0,17$. Le faisceau est collimaté par deux fentes verticales successives de largeurs respectivement égales à $a = 7 \mu\text{m}$ et $b = 5 \mu\text{m}$, et séparées de $D' = 1,13 \text{ m}$. Le faisceau de molécules est ensuite diffracté par une onde stationnaire lumineuse. On admettra que, du point de vue des molécules de fullerène, l'onde lumineuse stationnaire, agit comme un réseau plan de diffraction, constitué de N fentes, infiniment fines et équidistantes de $d = 257 \text{ nm}$. Un détecteur, situé à une distance $D = 1,2 \text{ m}$ après le réseau, permet de compter les molécules de C_{60} .

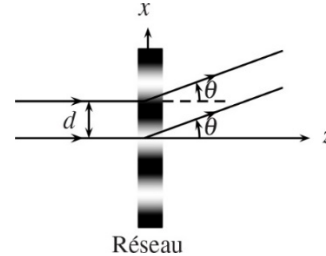
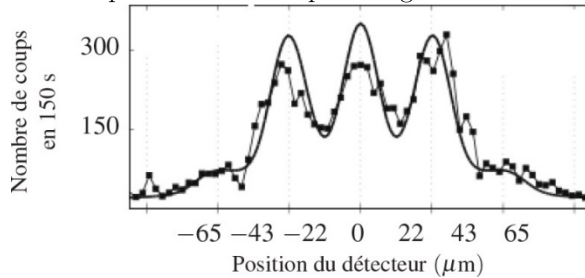


1°)

- Déterminer la longueur d'onde de Broglie des molécules de fullerène qui sont sélectionnées par le filtre de vitesse.
- Déterminer la dispersion $\Delta\lambda_{DB}$ de la longueur de de Broglie.
- Que représente la longueur $l_c = \frac{\lambda_{DB}^2}{\Delta\lambda_{DB}}$? Calculer sa valeur numérique.

2°) Expliquer quel est l'intérêt des fentes de collimation. Préciser quelle est l'influence de la diffraction du faisceau moléculaire par chacune des deux fentes.

3°) La figure suivante représente un exemple de figures d'interférences obtenue expérimentalement.



- On suppose que le détecteur permet d'observer les interférences à l'infini du faisceau moléculaire diffracté. Pour interpréter les résultats expérimentaux, on se ramène au schéma ci-dessus. On suppose que la longueur d'onde de de Broglie n'est pas modifiée par le passage à travers le réseau. Déterminer les directions θ pour lesquelles il y a interférence constructive des faisceaux diffractés.
- Interpréter l'allure de la courbe expérimentale. En déduire la valeur numérique de la vitesse moyenne des molécules de C_{60} et la comparer à la valeur donnée par les auteurs de l'expérience.
- Montrer, en utilisant des arguments similaires à ceux développés dans le chapitre d'optique, que le défaut de cohérence temporelle du faisceau permet d'expliquer le nombre limité de franges visibles.

Rép : 1a) $\lambda_{DB} = \frac{h}{mv} = 4,6 pm$ 1b) $\Delta\lambda_{DB} = \frac{\Delta v}{v} \lambda_{DB} = 0,78 pm$ 1c) $l_c = 27 pm$ 2°) La diffraction n'empêche pas le faisceau d'être collimaté. 3a) $\theta_p = p \frac{\lambda_{DB}}{d}$ 3b) $v = \frac{h}{m\lambda_{DB}} \sim 120 ms^{-1}$ 3c) $|p| \leq 2,9$

B – Exercices supplémentaires

MQ13 – Longueurs d'onde de De Broglie

1°) Calculer la longueur d'onde de De Broglie d'un homme de 75 kg marchant à $5,0 km \cdot h^{-1}$. Comparer à la largeur de la porte de votre chambre et conclure.

2°) Quelle énergie, en électronvolts, doit-on communiquer à des électrons, de masse $m_e = 9,11 \cdot 10^{-31} kg$, pour que leur longueur d'onde de de Broglie soit égale à 0,1 nm?

3°) Calculer les longueurs d'onde de Broglie pour un électron et un proton, de masse $m_p = 1,67 \cdot 10^{-27} kg$, dont les énergies cinétiques valent toutes 100 eV.

Rép : 1°) $\lambda = 6,4 \cdot 10^{-36} m$, ouf on évite la diffraction ☺

2°) $E_e = 150 eV$

3°) $\lambda_{\text{électron}} = 0,124 nm$ et $\lambda_{\text{proton}} = 2,89 pm$

MQ14 - L'atome d'hydrogène

On considère un atome d'hydrogène sphérique de taille caractéristique a . On admet l'approximation suivante pour l'énergie de l'électron dans l'atome :

$$E = \frac{\hbar^2}{2ma^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a} \text{ où } m = m_e = 9,11 \cdot 10^{-31} kg$$

1°) Que représente le premier terme dans cette expression ? D'où provient-il? Que représente le deuxième terme ?

2°) Déterminer la valeur de a_{min} de a qui minimise cette expression. Faire l'application numérique. Ce calcul donne l'ordre de grandeur de la taille de l'atome d'hydrogène.

3°) Déterminer la valeur minimale de l'expression approchée de E . La calculer numériquement.

4°) En mécanique classique, pour un électron en orbite circulaire de rayon a autour du noyau, on trouve une énergie mécanique : $E = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 a}$. De plus l'électron en mouvement perd de l'énergie par rayonnement électromagnétique.

Expliquer la phrase suivante : « C'est l'inégalité de Heisenberg qui est à la base de la stabilité des atomes. »

Rép : 1°) Le second est l'énergie potentielle d'interaction, le premier est l'énergie cinétique minimale d'une particule quantique confinée

2°) $a_{min} = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2} = 53 pm$ 3°) $E_{min} = -14 eV$ 4°) Avec l'expression classique de l'énergie, il n'y a pas de minimum. L'électron perdant son énergie par rayonnement devrait s'écraser sur le noyau.

MQ15 - Fonction d'onde d'une particule dans un puits infini

Une particule quantique est confinée dans la zone comprise entre les plans $x = 0$ et $x = \ell$ dans un puits infini. On admet que sa fonction d'onde est de la forme :

$$\psi(x, t) = A \sin(kx) e^{-i\omega t}$$

où A , k et ω sont des constantes réelles positives.

1°) Déterminer les valeurs possibles de k en fonction de ℓ et d'un entier n positif quelconque.

2°) La probabilité de trouver la particule dans l'intervalle $[x, x + dx]$ est $|\psi(x, t)|^2$. Justifier la condition de normalisation :

$$\int_0^\ell |\psi(x, t)|^2 dx = 1.$$

Utiliser cette condition pour trouver l'expression de A en fonction de ℓ .

3°) Tracer $|\psi(x, t)|^2$ en fonction de x dans les cas $n = 1$ et $n = 2$. Commenter. Comparer aussi au cas d'une particule classique.

Rép : 1°) $k = \frac{n\pi}{\ell}$ 2°) $A = \frac{\sqrt{2}}{\ell}$

3°) On constate que la probabilité de trouver la particule est maximale en $x = \ell/2$ pour $n = 1$ et nulle pour $n=2$ alors que dans le cas classique, la probabilité de la trouver en un point à un instant quelconque est indépendante de ce point.

MQ16 – Energie minimale d'un oscillateur harmonique

Un oscillateur harmonique unidimensionnel a une masse m , une pulsation propre ω_0 . Il est soumis à une énergie potentielle $V(x) = \frac{1}{2} m \omega_0^2 x^2$. La position moyenne $\langle x \rangle$ et la quantité de mouvement moyenne $\langle p_x \rangle$ de l'oscillateur sont nulles.

1°) Utiliser la relation d'incertitude de Heisenberg spatiale pour montrer que la valeur moyenne de l'énergie de cet oscillateur est bornée inférieurement :

$$\langle E \rangle \geq \frac{\hbar^2}{8m(\Delta x)^2} + \frac{1}{2} m \omega_0^2 (\Delta x)^2$$

où Δx représente l'indétermination quantique sur la position x de l'oscillateur.

2°) Déterminer la valeur minimale que peut prendre la valeur moyenne de l'énergie de l'oscillateur en fonction de $\hbar$ et ω_0 . Exprimer l'amplitude de l'indétermination quantique Δx en fonction de m , $\hbar$ et ω_0 .

3°) À température non nulle, en raison de l'agitation thermique, il existe aussi des fluctuations Δx_T de la position de l'oscillateur autour de sa valeur moyenne. On donne : $\Delta x_T = \sqrt{\frac{k_B T}{m \omega_0^2}}$

a) Donner l'expression de la température T_c en dessous de laquelle les fluctuations quantiques sont plus importantes que les fluctuations thermiques.

b) Application numérique.

- Donner la valeur numérique de T_c dans le cas d'un oscillateur mécanique constitué d'une masse suspendue à un ressort. Choisir une fréquence d'oscillation correspondant à une expérience réalisable au laboratoire de physique. Commenter la valeur obtenue pour T_c .

- En 2010, une équipe de l'Université de Californie à Santa Barbara a atteint le régime quantique en amenant un micro résonateur piézo-électrique de fréquence très élevée (6,0 GHz) à une température de 25 mK.

Commenter le choix d'un oscillateur de fréquence élevée et d'une température aussi faible.

Rép : 1°) $\langle E \rangle \geq \frac{\hbar^2}{8m(\Delta x)^2}$

2°) $\Delta x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}}$

3a) $T_c = \frac{\hbar f_0}{2k_B}$

3b) 2010 : $T_c = 0,14K \Rightarrow T < T_c$

MQ17 - Superposition de fonctions d'ondes

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 s'écrire sous la forme :

$$\Psi_n(x, t) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}$$

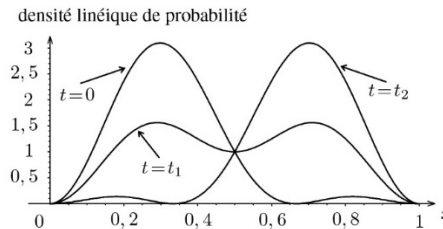
On place le système à $t = 0$ dans l'état représenté par :

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_1(x) + \phi_2(x))$$

1°) Donner l'expression de $\Psi(x, t)$. On posera dans les calculs $\omega = \frac{E_2 - E_1}{\hbar}$.

2°) Établir l'expression de la densité linéique de probabilité de présence de la particule. On donne les graphes représentant la densité linéique de probabilité de présence en fonction de x à $t = 0$, $t = t_1 = \frac{\pi}{2\omega}$ et $t = t_2 = \frac{\pi}{\omega}$.

Interpréter les graphes. Que se passe-t-il pour $t > \frac{\pi}{\omega}$?



3°) La valeur moyenne de x à l'instant t peut s'écrire sous la forme :

$$\langle x \rangle = \int_{x=0}^a x |\psi|^2 dx = \frac{a}{2} - \frac{16a}{9\pi^2} \cos(\omega t)$$

Représenter graphiquement la valeur moyenne de x en fonction du temps t . En déduire une estimation de l'intervalle de temps Δt au bout duquel le système a évolué de façon appréciable.

Rép : 1°) $\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-\frac{iE_1 t}{\hbar}} (\phi_1(x) + \phi_2(x) e^{-i\omega t})$ 2°) La particule repart vers la gauche pour $t > t_2$ 3°) $\Delta t = \frac{\pi}{\omega}$

MQ18 – Interférences

On considère une expérience d'interférences, où un faisceau de particules quantiques est dirigé vers trois fentes contenues dans un même plan. La détection des particules est effectuée en un point M à grande distance du plan contenant les trois fentes.

- Lorsque la seule fente numéro 1 est ouverte, l'amplitude de probabilité en M vaut : $\psi_1(M) = \frac{1}{\sqrt{3}}$
- Lorsque la seule fente numéro 2 est ouverte, l'amplitude de probabilité en M vaut : $\psi_2(M) = \frac{i}{\sqrt{2}}$
- Lorsque la seule fente numéro 3 est ouverte, l'amplitude de probabilité en M vaut : $\psi_3(M) = \frac{1}{\sqrt{6}} e^{-i\pi}$

Déterminer la probabilité de détection d'une particule au voisinage du point M lorsque :

- a) Seule la fente 2 est ouverte.
- b) Les fentes 1 et 2 sont ouvertes.
- c) Les fentes 1 et 3 sont ouvertes.
- d) Toutes les fentes sont ouvertes.

Rép : On obtient successivement : a) $\frac{1}{2}$ b) $\frac{5}{6}$ c) $\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{2}}{3} \sim 0,03$ d) $1 - \frac{\sqrt{2}}{3} \sim 0,52$

MQ19 – Fonction d'onde sphérique

La fonction d'onde associée à l'électron est obtenue par résolution de l'équation de Schrödinger.

1°) Rappeler l'équation de Schrödinger vérifiée par la fonction d'onde $\psi(M, t)$.

2°) Quelle est la forme de la fonction d'onde pour les états stationnaires ? Déterminer l'équation vérifiée par la partie dépendant de l'espace : $\varphi(M)$.

Pour l'état fondamental en $M(r, \theta, \varphi)$, la fonction d'onde spatiale est donnée par :

$$\varphi(r) = A e^{-\frac{r}{r_0}}$$

3°) Quelle relation doit vérifier A afin que la fonction soit normalisée. (Ne pas la résoudre)

4°) Quelle est la probabilité de trouver l'électron dans son état fondamental entre deux sphères de rayons r et $r+dr$?

5°) On définit la densité radiale de présence $D_r(r) = \frac{dP}{dr}$ comme étant la probabilité de trouver l'électron dans son état fondamental dans le volume compris entre deux sphères de rayons r et $r+dr$. Représenter l'allure de $D_r(r)$.

Rép : 1°) ... 2°) $\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} = (V(x) - E) \varphi$ 3°) $\int_{\text{espace}} A^2 e^{-\frac{2r}{r_0}} 4\pi r^2 dr = 1$ 4°) $dP(r) = |\varphi(r)|^2 4\pi r^2 dr$ 5°) $r_{\max} = r_0$

MQ110 – Fonction d'onde stationnaire

1°) On considère la fonction d'onde stationnaire $\varphi(x) = B \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)$ d'une particule confinée dans la région de l'espace $0 < x < a$. Exprimer la constante B . Tracer l'allure de $\varphi(x)$ dans l'intervalle $[0, a]$. Cette fonction décrit-elle un état lié ou un état de diffusion ?

2°) Proposer le parallèle avec le comportement d'une corde de longueur a fixée à ses extrémités.

Rép : 1°) $B = \sqrt{\frac{2}{a}}$ 2°) L'amplitude de la « corde » et la fonction d'onde s'annule en $x=0$ et a .