

TD $\varphi 20$: Fonction d'onde et équation de Schrödinger

Exercice 1 : Longueur 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.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 $m_e = 9.11.10^{-31} \text{ kg}$ pour que leur longueur d'onde de de Broglie soit égale à 0.1 nm ?
3. Calculer les longueurs d'onde de de Broglie pour un électron et un proton, de masse $m_p = 1.67.10^{-27} \text{ kg}$, dont les énergies cinétiques valent toutes 100 eV .

Exercice 2 : Classique ou quantique ?

1. (a) Une personne marche dans la rue. Evaluer sa vitesse v , ainsi que sa quantité de mouvement p .
(b) Cette personne marche avec une variation de vitesse de l'ordre de 10%. Quelle est l'indétermination quantique sur sa position ? Ce problème nécessite-t-il un traitement quantique ?
2. On considère un électron en mouvement autour d'un proton. On considère que l'indétermination quantique sur la position de l'électron est $\Delta X = 10^{-10} \text{ m}$.
(a) Déterminer l'indétermination quantique sur la vitesse Δv . *On considèrera que l'on peut utiliser la relation valable pour un mouvement unidimensionnel.*
(b) Comparer à la vitesse de l'électron. Ce problème nécessite-t-il un traitement quantique ?
3. On considère une particule libre de masse $m = 10^{-15} \text{ kg}$ de taille caractéristique $l = 1 \text{ } \mu\text{m}$ supposée correspondre à la largeur caractéristique d'un paquet d'onde de matière.
(a) Montrer que l'équation de Schrödinger donne, en ordre de grandeur, le temps caractéristique d'étalement du paquet d'onde $\tau = \frac{2ml^2}{\hbar}$.
(b) Calculer numériquement τ . La mécanique quantique remet-elle en cause la localisation d'une particule macroscopique ?

Données : masse électron : $m_e = 9,1 \times 10^{-31} \text{ kg}$; rayon de l'atome d'hydrogène : $r_0 = 0,53 \times 10^{-10} \text{ m}$.

Exercice 3 : Potentiel harmonique (*Oral CCINP MP*)

Soit $\Psi(x, t)$ la fonction d'onde d'une particule de masse m pouvant se déplacer sur l'axe Ox :

$$\Psi(x, t) = A \exp\left(-\frac{m\omega_0 x^2}{2\hbar} - i\frac{\omega_0}{2}t\right) \text{ où } A \text{ et } \omega_0 \text{ sont des constantes}$$

1. Quelles sont les dimensions de A et ω_0 ?
2. Déterminer les valeurs possibles de A .
3. Quel type d'état est représenté par cette fonction d'onde ? Quelle est l'énergie de la particule ?
4. A quelle énergie potentielle $V(x)$ est soumise cette particule ?
5. Dans quel(s) type(s) de situation rencontre-t-on cette énergie potentielle ?
6. On prépare $N \gg 1$ systèmes dans cet état et l'on mesure pour chacun d'entre eux la position x de la particule, quelle est la moyenne des mesures réalisées ?
7. Qu'en est-il de la moyenne quadratique $\langle x^2 \rangle$?
8. Que dire de l'étalement des mesures en quantité de mouvement dans cet état ?

Donnée : pour $\alpha > 0$: $\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\alpha u^2) du = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$ et $\int_{-\infty}^{\infty} u^2 \exp(-\alpha u^2) du = \sqrt{\frac{\pi}{4\alpha^3}}$.

Exercice 4 : Courant de probabilité (*Oral CCINP*)

L'état quantique d'une particule de masse m est caractérisé par sa fonction d'onde $\psi(x, t)$ obéissant à l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x, t) \text{ où } V(x) \text{ représente l'énergie potentielle de la particule.}$$

1. Quelle signification physique est donnée à $\rho(x, t) = |\psi(x, t)|^2$?
2. Par analogie avec la conservation de la charge en électromagnétisme, écrire une équation locale de conservation de la probabilité de présence en introduisant un vecteur $\vec{J}(x, t) = J(x, t)\vec{u}_x$ appelé vecteur densité de courant de probabilité.

On peut montrer que $\vec{J}(x, t) = \frac{i\hbar}{2m} \left(\psi(x, t) \frac{\partial \psi^*(x, t)}{\partial x} - \psi^*(x, t) \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} \right) \vec{u}_x$

3. Montrer que l'expression de $\vec{J}(x, t)$ proposée vérifie bien l'équation de conservation.
4. La particule est maintenant libre ($V(x) = 0$) et possède une énergie E . Montrer que la fonction d'onde $\psi(x, t)$ peut s'écrire sous la forme d'une somme de deux ondes planes progressives se propageant en sens opposés.
5. Nous considérons l'onde se propageant dans le sens des x croissants. Exprimer les grandeurs $\rho(x, t)$ et $\vec{J}(x, t)$ associés. Commenter.

Exercice 5 : oscillateur harmonique quantique (*Oral CCINP*)

Le concept d'oscillateur harmonique joue un rôle majeur en physique car il permet de décrire les petites oscillations autour d'une position d'équilibre stable avec une énergie potentielle d'interaction quelconque. A une dimension, l'oscillateur harmonique de masse m et de pulsation propre ω_0 est soumis à une énergie potentielle $V(x) = \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2$. On rappelle que les indéterminations quantiques sur x et p_x s'écrivent :

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} \text{ et } \Delta p_x = \sqrt{\langle p_x^2 \rangle - \langle p_x \rangle^2}$$

Vision semi-classique

1. Etablir l'équation différentielle du mouvement vérifiée par la position $x(t)$ pour la particule plongée dans le potentiel $V(x)$.
2. En déduire la position $x(t)$ et l'impulsion $p_x(t)$ en prenant comme conditions initiales : $x(0) = x_0$ et $v(t=0) = 0$.
3. Déterminer également l'expression de l'énergie mécanique E de la particule.
4. En déduire les valeurs moyennes $\langle x \rangle$ et $\langle p_x \rangle$ puis les indéterminations quantiques Δx et Δp_x .
5. Montrer que l'inégalité spatiale de Heisenberg implique que l'énergie mécanique est bornée inférieurement et exprimer cette énergie minimale en fonction de $\hbar$ et ω_0 .

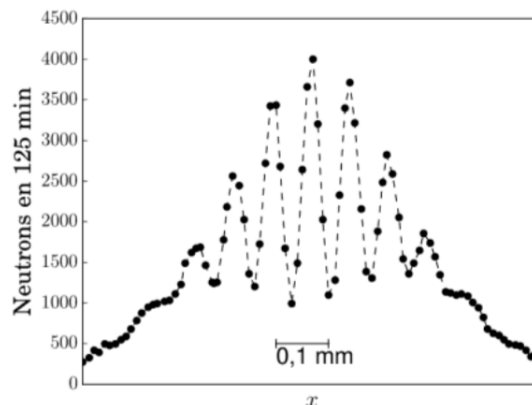
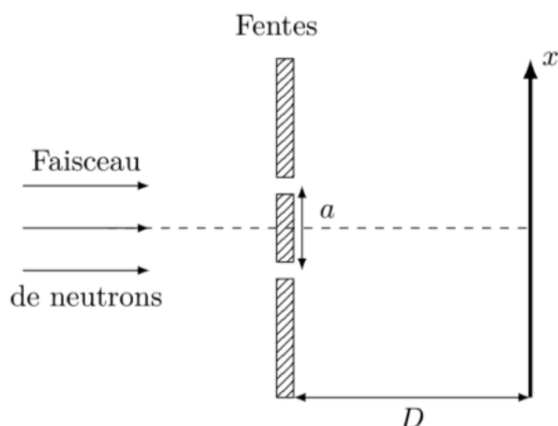
Vision quantique

En mécanique quantique, l'énergie de l'oscillateur harmonique est quantifiée. Les valeurs accessibles de l'énergie vérifient : $E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_0$ avec $n \in \mathbb{N}$.

6. Ce résultat est-il compatible avec celui obtenu à la question 5 ?
7. Les vibrations de la molécule HCl peuvent être décrites en première approche par le modèle de l'oscillateur harmonique avec $\omega_0 = 5,4 \times 10^{14} \text{ rad.s}^{-1}$.
 - (a) Dans quel domaine de spectre électromagnétique se trouve la pulsation ω_0 ?
 - (b) Calculer l'énergie minimale de la molécule en eV.
 - (c) Comparer à l'énergie d'agitation thermique $E = k_B T$ de la molécule où $k_B = 1,38 \times 10^{-23} \text{ J.K}^{-1}$.

Exercice 6 : diffraction de neutrons froids (*Oral CCINP*)

Nous considérons l'expérience de diffraction de neutrons froids par une double fente réalisée dans les années 1980 par A. Zeilinger et ses collaborateurs et sommairement schématisée ci-dessous. Les neutrons possèdent une longueur d'onde de de Broglie moyenne λ avec une indétermination relative $\frac{\Delta\lambda}{\lambda} = 15\%$. La distance entre les fentes est $a = 125 \mu\text{m}$.



Un détecteur est déplacé le long de l'axe (Ox) situé à la distance $D = 5,0 \text{ m}$ des fentes et permet d'enregistrer le nombre de neutrons arrivant au voisinage d'un point d'abscisse x de l'écran pendant des intervalles de temps identiques. L'allure de la répartition des neutrons sur le plan de détection est donné sur la figure à droite.

1. Interpréter la répartition des impacts de neutrons sur le plan de détection. Définir et calculer l'interfrange i obtenue expérimentalement.
2. En déduire la longueur d'onde moyenne λ des neutrons, puis leur vitesse moyenne.
3. En admettant que, en ordre de grandeur, l'énergie cinétique d'un neutron vaille $k_B T$, en déduire leur température T . Justifier l'appellation de "neutron froid".
4. En s'inspirant du cours d'optique ondulatoire, estimer la longueur L_C du paquet d'ondes caractérisant un neutron en fonction de $\Delta\lambda$ et λ .
5. Expliquer pourquoi la longueur finie L_C des paquets d'ondes limite le nombre de franges observables sur le plan de détection. Comment nomme-t-on ce phénomène?
6. En adoptant un critère semi-quantitatif à préciser, estimer le nombre de franges qu'il est possible d'observer et comparer aux résultats expérimentaux.

Données : constante de Planck : $h = 6,63 \times 10^{-34} \text{ Js}$, masse du neutron : $m = 1,67 \times 10^{-27} \text{ kg}$ et constante de Boltzmann : $k_B = 1,38 \times 10^{-23} \text{ J.K}^{-1}$.

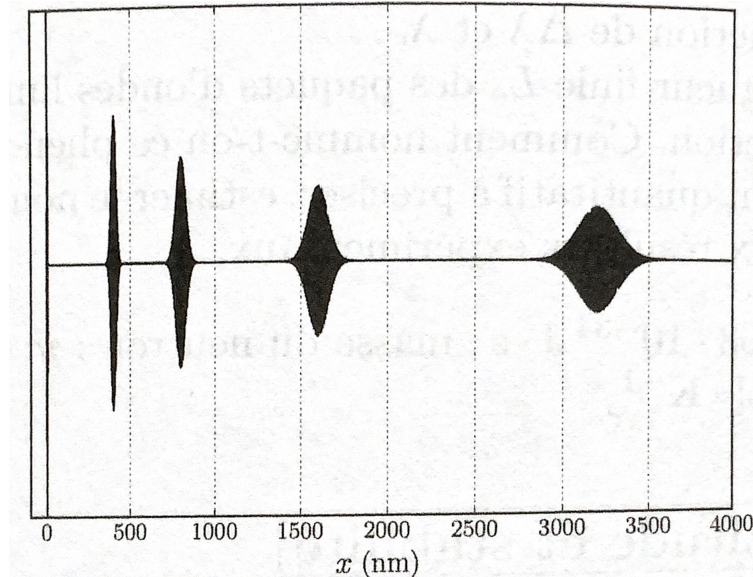
Exercice 7 : Oscillations quantiques entre deux états (*Oral Mines-Ponts*)

Une particule possède deux états stationnaires d'énergies respectives E_1 et E_2 .

1. Donner les pulsations correspondantes ω_1 et ω_2 .
2. Exprimer les fonctions d'onde correspondantes en notant $\varphi_1(x)$ et $\varphi_2(x)$ les termes spatiaux associés.
3. Exprimer les densités de probabilité $\rho_1(x)$ et $\rho_2(x)$ correspondantes.
4. On pose $\Phi(x) = \varphi_1(x)\varphi_2^*(x) = r(x)e^{i\theta(x)}$. Donner l'expression de la densité $\rho(x)$ de la superposition des deux ondes en fonction de $\rho_1(x)$, $\rho_2(x)$, $\theta(x)$, E_1 et E_2 . Montrer qu'il y a des oscillations quantiques à une pulsation ω_{12} que l'on déterminera en fonction de E_1 , E_2 et $\hbar$.

Exercice 8 : Étalement du paquet d'onde (*Mines-Telecom*)

Un électron libre de masse m se déplace à la vitesse v dans la direction et le sens de $\vec{u}_x$. On lui associe un paquet d'onde de vecteur d'onde moyen $\vec{k} = k\vec{u}_x$ et de pulsation moyenne ω . L'indétermination sur la position initiale $x = 0$ de l'électron est notée Δx_0 et celle sur la vitesse $\Delta v = \frac{v}{20}$. La figure ci-dessous représente le paquet d'onde à cinq instants successifs : $t_1 = 0$, $t_2 = 2,0 \times 10^{-13}$ s, $t_3 = 2t_2$, $t_4 = 2t_3$ et $t_5 = 2t_4$.



Il apparaît que le paquet d'onde s'étale, c'est-à-dire que l'indétermination quantique sur la position de l'électron augmente au cours du temps. En revanche, l'indétermination Δp sur l'impulsion de l'électron n'évolue pas puisque celui-ci est libre.

1. Rappeler la relation de dispersion de la particule libre ($V=0$) et expliquer l'étalement du paquet d'onde.
2. Exprimer la vitesse de groupe v_g du paquet d'onde. Que représente-t-elle ? Déduire de la figure les valeurs de v , k et ω .
3. Estimer la largeur Δx du paquet d'onde aux quatre instants non nuls considérés. Vérifier que ces valeurs sont compatibles avec l'inégalité spatiale de Heisenberg.
4. A l'instant $t = 0$, l'indétermination sur la position de l'électron est supposée minimale compte-tenu de l'indétermination sur la vitesse. Calculer Δx_0 .

Données : constante de Planck : $h = 6,63 \times 10^{-34}$ J.s et masse de l'électron : $m_e = 9,1 \times 10^{-31}$ kg.

Problème : effet photoélectrique (*CCINP*)

On envoie sur une photocathode en potassium une radiation ultraviolette $\lambda = 254$ nm et on constate que l'énergie maximale des photoélectrons éjectés est de 2.57eV . Avec une raie du visible $\lambda = 502$ nm, l'énergie maximale est alors de 0.165eV .

Déterminer à l'aide de ces données, la constante de Planck, la valeur du travail d'extraction W des électrons de potassium et la longueur d'onde maximale des radiations pouvant produire un effet photoélectrique sur le potassium.