

Tutorats de Mécanique Quantique
Fascicule d'exercices n° 1

Exercice I : Effet photoélectrique.

L'énergie maximale des électrons éjectés d'une photocathode par une radiation de longueur d'onde $\lambda = 253.7$ nm (respectivement 589.0 nm) est 3.14 eV (respectivement 0.36 eV).

En déduire :

- 1) La valeur de la constante de Planck.
- 2) L'énergie minimale d'extraction des électrons.
- 3) La longueur d'onde maximale produisant un effet photoélectrique sur cette photocathode.

Exercice II : Energie et longueur d'onde de de Broglie.

L'énergie cinétique moyenne d'une particule d'un gaz sans interaction est :

$$E = \frac{3}{2}k_bT$$

Calculer la longueur d'onde de *de Broglie* λ pour une particule (non relativiste, de masse m) d'un tel gaz à température T .

Pour estimer la distance moyenne entre deux particules voisines, on supposera qu'elles sont disposées sur un réseau cubique. Exprimer cette distance en fonction de volume V et du nombre de particules N . On considère que les effets quantiques sont significatifs si $\lambda \gg d$. Déterminer la gamme de température correspondante pour les gaz suivants :

- 1) Hélium IV liquide (masse volumique $0.125 \cdot 10^3$ kg/m³).
- 2) Gaz d'électrons libres dans un métal ($N/V \approx 10^{30}$ m⁻³)
- 3) Gaz d'électrons libres dans un semi-conducteur ($N/V \approx 10^{21}$ m⁻³)

Exercice III : Quantification de Sommerfeld.

Calculer les niveaux d'énergie de l'hydrogène en supposant que l'électron se déplace sur une orbite circulaire dont la longueur est un multiple de la longueur d'onde de *de Broglie*. Exprimer le résultat en fonction de la constante de structure fine et de l'équivalent en énergie de la masse de l'électron.

Exercice IV : Accélérateur de particule.

Un accélérateur de particules produit un faisceau d'électron d'énergie égale à 1 GeV. Quelle est la longueur d'onde de *de Broglie* associée à ces électrons. En déduire la branche de physique pour laquelle est destiné cet accélérateur.

Exercice V : Déplacement d'un paquet d'ondes.

Question préliminaire : expliquer pourquoi une onde plane du type $e^{i(kx-\omega t)}$ (dont on pourra vérifier qu'elle est solution de l'équation de Schrödinger) ne peut pas représenter une particule libre. Justifier alors la nécessité d'introduire des paquets d'onde. Le but de cet exercice va être d'étudier un paquet d'onde à une dimension bien particulier : le paquet d'onde gaussien.

Ce paquet d'onde $\Psi(x, t)$ est formé par la superposition d'ondes monochromatiques :

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

où $\omega(k)$ est la pulsation d'une composante du paquet et $g(k)$ la pondération gaussienne centrée autour de k_0 , donnée par :

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

On se propose d'étudier l'évolution de ce paquet d'ondes au cours du temps.

- 1) On va tout d'abord s'intéresser au paquet d'ondes associé à un photon. Donner l'expression de la pulsation ω en fonction de k (relation de dispersion) pour un photon. Déterminer la vitesse de phase et la vitesse de groupe et montrer que le paquet d'ondes associé à un photon se déplace comme un objet rigide.
- 2) On s'intéresse maintenant au paquet d'ondes associé à une particule matérielle libre. Montrer que pour une particule libre non-relativiste de masse m , on a la loi de dispersion : $\omega(k) = \hbar k^2/2m$.

Calculer la vitesse de phase et montrer que le paquet d'onde gaussien se déforme au cours du temps. Calculer la vitesse de groupe et montrer que cette vitesse est celle qu'aurait la particule en mécanique classique. On va essayer de donner des ordres de grandeur de cet étalement.

- 3) Montrer que :

$$\Psi(x, 0) = \left(\frac{2}{\pi a^2} \right)^{1/4} e^{ik_0 x} e^{-x^2/a^2}$$

Tracer la courbe $|\Psi(x, 0)|^2$.

- 4) Pour une gaussienne $\exp(-x^2/b^2)$, on définit la largeur comme l'écart entre la position du maximum et le point où l'amplitude est divisée par $\sqrt{e}$.

Calculer cette largeur. Calculer les largeurs Δx et Δk de $|\Psi(x, 0)|^2$ et de $|g(k)|^2$. En déduire que $\Delta x \Delta k = 1/2$.

- 5) Après un calcul assez long, on trouve :

$$|\Psi(x, t)|^2 = \sqrt{\frac{2}{\pi a^2(1 + 4\hbar^2 t^2/m^2 a^4)}} \exp \left[\frac{-2a^2(x - \hbar k_0 t/m)^2}{a^4 + 4\hbar^2 t^2/m^2} \right]$$

- 5.1) Quelle est la vitesse de déplacement du maximum ?

- 5.2) Montrer qu'il y a étalement du paquet d'ondes. Calculer le temps au bout duquel l'étalement est double de sa valeur à $t = 0$ pour :

- une particule de masse 1 g s'étalant au départ sur 2 mm,
- un électron s'étalant au départ sur 1 Å. Conclusion ?

Exercice VI : Effet tunnel.

On considère une barrière de potentiel à une dimension, de largeur a et de hauteur U_0 .

On envoie sur cette barrière, dans la direction des x croissants, un flux monocinétique de particules identiques d'énergie E comprise entre 0 et U_0 .

- 1) Ecrire les solutions de l'équation de Schrödinger pour les différents domaines définis par ce potentiel.
- 2) Montrer que le coefficient τ de transmission complexe de la barrière (le rapport de l'amplitude de l'onde transmise (après la barrière) à l'amplitude de l'onde incidente) a pour expression :

$$\tau = \frac{4e^{-ika}}{\left(1 + \frac{\alpha}{ik}\right) \left(1 + \frac{ik}{\alpha}\right) e^{-\alpha a} + \left(1 - \frac{\alpha}{ik}\right) \left(1 - \frac{ik}{\alpha}\right) e^{\alpha a}}$$

avec $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ et $\alpha = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}$

- 3) Calculer à partir de l'expression de τ le coefficient de transmission T du flux de particules dans l'approximation d'une barrière épaisse ($a \simeq 50/\alpha$). On exprimera T en fonction du rapport E/U_0 et du produit αa .
- 4) Quel est le résultat classique pour la valeur de T ? Comment le retrouve-t-on à partir du résultat quantique ?

Exercice VII : Le deuteron.

Le deuteron est composé d'un proton et d'un neutron. Son énergie de liaison est $E = -2.22$ MeV et il n'existe pas d'autres états liés. Dans le cas d'une fonction d'onde à symétrie sphérique, on peut modéliser l'interaction proton-neutron par un puits de potentiel à une dimension défini par :

$$\begin{cases} V(z) = +\infty & \text{pour } z < 0 \\ V(z) = -V_0 & \text{pour } 0 \leq z \leq R \\ V(z) = 0 & \text{pour } z > R \end{cases} \quad (V_0 > 0)$$

La variable z représente la distance entre le proton et le neutron.

- 1) Ecrire l'équation aux valeurs propres de l'énergie.
- 2) On pose :

$$q = \frac{\sqrt{2\mu(E + V_0)}}{\hbar}, \quad k = \frac{\sqrt{-2\mu E}}{\hbar}$$

Montrer que les énergies des états liés sont solutions de l'équation :

$$qR \cotan(qR) = -kR$$

- 3) Etudier cette équation graphiquement en prenant $x = qR$ comme variable. Quelle est la condition pour que le système ait n états liés ?
- 4) Sachant que R ne peut excéder 1.5 Fm, en déduire une fourchette pour la solution x_0 de l'équation, puis pour la quantité V_0 .

Exercice VIII : Potentiel en fonction *delta*.

- 1) On considère une particule de masse m , dont l'énergie potentielle s'écrit :

$$V(x) = -\alpha\delta(x) \quad \text{où } \alpha > 0$$

- 1.1) Intégrer l'équation aux valeurs propres du Hamiltonien entre $-\varepsilon$ et $+\varepsilon$. En faisant tendre ε vers 0, montrer que la dérivée de la fonction propre $\phi(x)$ subit, en $x = 0$, une discontinuité que l'on calculera en fonction de α , m et $\phi(0)$.
- 1.2) On suppose que l'énergie E est négative (état lié). On a alors :

$$\phi(x) = \begin{cases} A_1 e^{\rho x} + A'_1 e^{-\rho x} & (x < 0) \\ B_1 e^{\rho x} + B'_1 e^{-\rho x} & (x > 0) \end{cases}$$

où ρ est une constante à déterminer.

Donner les valeurs possibles de l'énergie.

2) On considère une particule de masse m , dont l'énergie potentielle s'écrit :

$$V(x) = -\alpha\delta(x) - \alpha\delta(x-l)$$

où $\alpha > 0$ et l est une longueur constante.

2.1) Calculer les états liés de la particule, en posant :

$$E = -\frac{\hbar^2 \rho^2}{2m}$$

2.2) Montrer que les énergies possibles sont données par la relation :

$$e^{-\rho l} = \pm \left(1 - \frac{2\rho}{\mu}\right)$$

où μ est défini par $\mu = \frac{2m\alpha}{\hbar^2}$

2.3) Donner une résolution graphique de cette équation. Montrer qu'il existe un état fondamental symétrique et un état excité antisymétrique.

Exercice IX : États quantiques d'une particule soumise au champ de pesanteur terrestre.

On se propose d'étudier les niveaux d'énergie d'une particule de masse m dans le champ de pesanteur terrestre : on suppose la particule se déplaçant verticalement suivant un axe Oz vers le haut et soumise au potentiel suivant :

$$\begin{cases} V(z) = +\infty & \text{pour } z < 0 & (\text{surface de la terre impénétrable}) \\ V(z) = mgz & \text{pour } z \geq 0 & (\text{potentiel classique de pesanteur}) \end{cases}$$

1) Ecrire l'équation de Schrödinger indépendante du temps qui détermine la fonction d'onde de cette particule.

2) À quelles conditions aux limites doivent satisfaire les fonctions d'onde ?

3) En posant $\xi = z/z_0$ et $\varepsilon = E/E_0$, transformer l'équation de Schrödinger en une équation aux variables sans dimension de la forme suivante :

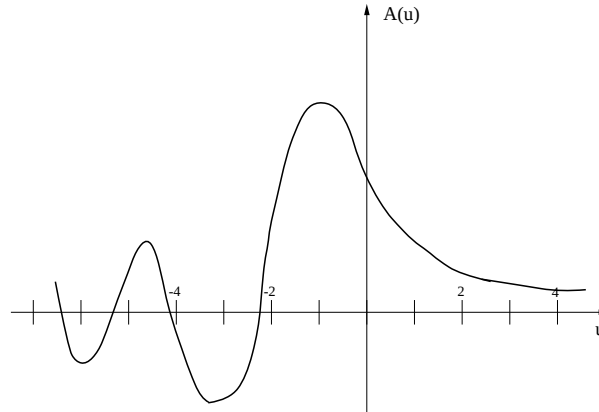
$$-\frac{d^2\phi}{d\xi^2} + \xi\phi(\xi) = \varepsilon\phi(\xi)$$

Déterminer z_0 et E_0 en fonction des constantes du problème.

4) Par un changement de variable, montrer que cette équation se ramène à l'équation suivante :

$$\frac{d^2A}{du^2} - uA(u) = 0$$

- 5) Les solutions de cette équation sont des fonctions spéciales appelées fonctions d’Airy. Parmi celles-ci, la solution $A(u)$ qui s’annule pour $u \rightarrow +\infty$ est représentée sur la figure ci-dessous :



Ses premiers zéros sont : $u_1 = -2,338$, $u_2 = -4,088$, $u_3 = -5,521$.

Quels sont les trois premiers niveaux d’énergie de la particule ? Comment se calculent les fonctions d’ondes correspondantes ?

- 6) Application numérique : on considère le cas d’un noyau d’hélium. Déterminer l’altitude où sa probabilité de présence est maximale quand il est dans l’état fondamental. Que peut-on prévoir pour une particule macroscopique ? (On donne : masse du proton $M = 1.610^{-27}$ kg)

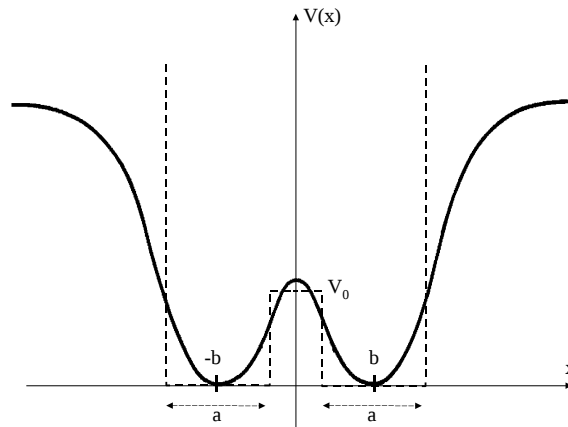
Exercice X : L’horloge à ammoniac.

- 1) Les niveaux d’énergie de la molécule d’ammoniac.

On étudie la molécule d’ammoniac au moyen d’un modèle simple. Dans cette molécule, les trois atomes d’hydrogène forment la base d’une pyramide dont l’atome d’azote occupe le sommet. Les caractéristiques du modèle choisi sont les suivantes :

- i) L’atome d’azote, plus lourd que ses partenaires, est immobile.
- ii) Les atomes d’hydrogène forment un triangle équilatéral de côté invariable dont l’axe passe toujours par l’atome d’azote.
- iii) On néglige les effets dus à la rotation de la molécule.

A partir de ces hypothèses, l’étude de ce système peut se ramener à l’étude d’une particule fictive de masse réduite $m = \frac{3m_H m_N}{3m_H + m_N}$ soumise à l’action d’un potentiel à une seule dimension $V(x)$ qui a l’allure de la figure ci-dessous (courbe continue). La variable x représente la distance algébrique entre l’atome d’azote et le plan contenant les trois atomes d’hydrogène.



- 1.1) Qu'impose la symétrie du problème à la fonction $V(x)$? A quoi correspondent les deux minima de $V(x)$? Que traduit physiquement la hauteur de la barrière de potentiel en $x = 0$? Que traduit la croissance de $V(x)$ quand $|x| > b$?
- 1.2) Afin d'étudier quantitativement le système, on représente approximativement la forme du potentiel V par deux puits de largeur a centrés respectivement en $x = -b$ et $x = +b$ (ligne pointillée sur la figure). On suppose d'abord infinie la barrière de potentiel en $x = 0$.
 - 1.2.1) Calculer les fonctions propres et les valeurs propres du hamiltonien du système. Les niveaux d'énergie sont-ils dégénérés ?
 - 1.2.2) On donne $a = 0.113$ nm. Quel est le domaine spectroscopique associé aux transitions entre les premiers niveaux d'énergie de la molécule ?
- 1.3) On s'intéresse maintenant au cas d'une barrière de potentiel de hauteur finie V_0 en $x = 0$.
 - 1.3.1) En cherchant des fonctions propres du hamiltonien qui sont soit symétriques, soit antisymétriques, déterminer les relations exprimant la quantification de l'énergie.
 - 1.3.2) La dégénérescence qui apparaissait dans le cas d'une barrière infinie est-elle levée ?
 - 1.3.3) Vérifier que l'on retrouve bien les solutions précédentes dans le cas d'une barrière infinie.
 - 1.3.4) Avec $V_0 = 0.02$ eV et $b = 0.12$ nm, faire une résolution numérique ou graphique des équations précédentes et déterminer le domaine spectroscopique associé aux transitions entre les niveaux symétriques et antisymétriques dans les cas $n=1$ et $n=2$.

2) Système à deux niveaux.

De nombreux systèmes physiques peuvent être décrits (soit exactement soit approximativement) comme des “systèmes à deux niveaux”, ce qui signifie en fait que leur espace des états est à deux dimensions. C’est en particulier le cas de la molécule d’ammoniac, si l’on ne s’intéresse qu’aux niveaux symétrique et antisymétrique dans le cas $n=1$, dont nous venons de voir qu’ils sont très isolés des autres niveaux.

Nous considérerons pour modéliser le problème le cas d’une particule fictive, susceptible d’occuper deux sites que nous noterons D et G et auxquels correspondent deux kets d’état $|D\rangle$ et $|G\rangle$ constituant une base de l’espace des états.

Un ket d’état quelconque du système s’écrit :

$$|\alpha\rangle = \langle D|\alpha\rangle |D\rangle + \langle G|\alpha\rangle |G\rangle = a|D\rangle + b|G\rangle$$

2.1) On convient de mesurer la position de la particule en lui affectant la valeur $+l$ quand la particule est sur le site D et $-l$ quand elle est sur le site G . Quelle est la représentation de l’opérateur position correspondant X dans la base $[|D\rangle, |G\rangle]$?

2.2) L’hamiltonien de la particule est

$$H_o = E_o + A(|G\rangle\langle D| + |D\rangle\langle G|)$$

où E_o représente l’énergie moyenne des deux niveaux et A l’écart entre les deux niveaux.

Déterminer les états stationnaires de la particules (kets d’états et énergies correspondantes). On notera $|\phi_A\rangle$ le ket de l’état de plus basse énergie et $|\phi_S\rangle$ le ket d’état de plus haute énergie. Quelle est la représentation de l’opérateur position X dans la base $[|\phi_A\rangle, |\phi_S\rangle]$?

2.3) À l’instant $t = 0$, la particule est dans l’état $|\alpha_o\rangle = a_o|D\rangle + b_o|G\rangle$. Déterminer son ket d’état à un instant ultérieur t . En déduire que la molécule inverse sa géométrie de manière oscillatoire. Quelle est la fréquence de ces oscillations ?

Cette propriété de la molécule d’ammoniac a été utilisée pour fabriquer des horloges de grande précision.

2.4) Supposons que l’on ait par erreur défini H par :

$$H = E_o + A|G\rangle\langle D|$$

2.4.1) Indiquer pourquoi on peut (presque) immédiatement savoir que cette forme est incorrecte.

2.4.2) En étudiant dans ce cas l’évolution temporelle du ket d’état d’une particule initialement sur le site D , montrer que la conservation de la probabilité est violée pour cet hamiltonien erroné.