Fonction d'onde et équation de Schrödinger

Des réponses et indications sont données en fin d'énoncé pour vous aider si nécessaire.

On donne : $\hbar = 1{,}05\ 10^{-34}$ J.s.rad^{-1} - $e = 1{,}60\ 10^{-19}$ C - $m_e = 9{,}11\ 10^{-31}$ kg - $\varepsilon_0 = 8{,}85\ 10^{-12}$ F.m^{-1}

Exercice 1 : Etude d'un état quantique.

On considère un quanton de masse m se déplaçant sur l'axe Ox, de fonction d'onde :

$$\Psi(x,t) = \Psi_0 \exp\left(-\frac{m\omega_0 x^2}{2\hbar}\right)\exp\left(-i\frac{\omega_0}{2}t\right)$$

où Ψ_0 et ω_0 sont des constantes et $\omega_0 \in \mathbb{R}^+$

1- Quelles sont les unités de Ψ_0 et ω_0 ?

2- Quelles sont les valeurs possibles pour Ψ_0 ?

3- Que peut-on dire de l'état de ce quanton ? Quelle est son énergie ?

4- Déterminer le potentiel V(x) auquel la particule est soumise. A quelle situation physique cela peut-il correspondre ?

5- Pour une assemblée de quanton de ce type, on mesure $\langle x \rangle$ et $\langle x^2 \rangle$. Quelles valeurs obtient-on ?

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

Exercice 2 : Puits de potentiel harmonique bidimensionnel puis tridimensionnel.

(*Inspiré de Physique 1 Centrale MP 2016*)

On considère une particule quantique piégée dans un puits de potentiel harmonique unidimensionnel le long d'un axe (O*x*), c'est-à-dire soumise à un potentiel de la forme : $V(x)=\frac{1}{2}m\omega^2 x^2$. On admet que l'énergie de la particule est alors quantifiée et prend un ensemble de valeurs de la forme : $\left\{E_n = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega\right\}$ avec $n \in \mathbb{N}$. On note $f_n(x)$ la fonction d'onde spatiale associée à l'état stationnaire d'énergie E_n, les niveaux d'énergie étant non dégénérés.

1- Comment s'écrit la fonction d'onde $\Psi_{1D,n}(x,t)$ associée à l'état stationnaire d'énergie E_n ?

On suppose maintenant la particule quantique piégée autour du point O dans un puits de potentiel harmonique bidimensionnel du plan (O*xy*), c'est-à-dire soumise à un potentiel de la forme : $V(x,y)=\frac{1}{2}m\omega^2(x^2+y^2)$. On s'intéresse alors aux fonctions d'ondes bidimensionnelles $\Psi_{2D}(x,y,t)$

associées aux états stationnaires dans ce puits, que l'on cherche sous la forme :

$\Psi_{2D}(x,y,t) = \varphi(x)\chi(y)g(t)$

2- Déterminer la forme de $g(t)$ pour un état stationnaire d'énergie E puis montrer qu'il existe deux entiers n et m tels que les fonctions φ et χ s'identifient respectivement à f_n et à f_m. En déduire les valeurs possibles de l'énergie E. Les niveaux d'énergie sont-ils toujours non dégénérés ?

3- Comment les résultats précédents seraient-ils modifiés si le confinement était anisotrope dans le plan (Oxy) et que le potentiel ressenti par la particule s'écrivait :

$V(x,y) = \frac{1}{2}m\omega_1^2x^2 + \frac{1}{2}m\omega_2^2y^2$, avec $\omega_1 \neq \omega_2$?

On suppose enfin que la particule quantique, toujours piégée dans le puits de potentiel harmonique bidimensionnel du plan (Oxy) (sans anisotropie), est confinée autour de O dans la direction de l'axe (Oz) grâce à un puits de potentiel assimilable à un puits infini de taille a.

4- En utilisant les résultats vus en cours sur le puits de potentiel infini unidimensionnel, proposer une expression générale de la fonction d'onde $\Psi_{3D}(x,y,z,t)$ associée à un état stationnaire d'énergie E dans ce puits, et discuter les valeurs possibles de E.

5- Reprendre la question précédente dans le cas où la particule est libre dans la direction (Oz).

6- A quelle condition peut-on étudier les propriétés de la particule à partir de sa fonction d'onde $\Psi_{2D}(x,y,t)$ en ignorant totalement ses propriétés selon l'axe (Oz) ?

Exercice 3 : L'oscillateur harmonique en physique quantique.

(Extrait de physique 2 Mines MP 2017)

On envisage dans cette partie un traitement quantique de l'oscillateur harmonique étudié dans les parties précédentes. L'objectif est d'obtenir l'expression quantifiée des valeurs possibles de l'énergie de cet oscillateur harmonique dans cette théorie.

On note $\underline{\Psi}(x,t)$ la fonction d'onde du système décrivant l'oscillateur harmonique associé à la molécule diatomique considérée. Ce système est un point matériel M dont la masse est le paramètre μ introduit à la question 8. Ce point évolue évolue le long d'un axe $(O,\widehat{u}_x)$, la distance $x = OM$ représente l'élongation du ressort de raideur k modélisant la liaison chimique entre les deux atomes à travers le potentiel $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$. Il s'agit donc d'un problème unidimensionnel. Le système est de plus stationnaire, on peut donc séparer la fonction d'onde en deux parties sous la forme $\underline{\Psi}(x,t) = f(x)e^{-\frac{iE}{\hbar}t}$ où E représente les valeurs de l'énergie accessibles à ce système. Pour l'oscillateur harmonique, on montre que ces valeurs de E doivent être positives. La fonction $\underline{\Psi}(x,t)$ est une solution de norme unité de l'équation de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2\underline{\Psi}(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\underline{\Psi}(x,t) = i\hbar\frac{\partial\underline{\Psi}(x,t)}{\partial t}$$

❑ **14** — Ecrire l'équation différentielle vérifiée par la fonction $f(x)$ en fonction des paramètres k, μ, $\hbar$ et E.

On effectue le changement de variable $\alpha = x\left(\frac{\mu\, k}{\hbar^2}\right)^{1/4}$ et l'on pose $\gamma = \left(\frac{4\mu\, E^2}{\hbar^2 k}\right)^{1/2}$.

❑ **15** — Quelles sont les dimensions de α et de γ ?

❑ **16** — Ecrire l'équation différentielle vérifiée par la fonction $f(\alpha)$ en fonction du seul paramètre γ.

❑ **17** — Vérifier que dans le régime $\alpha \to \pm\infty$, on peut écrire $f(\alpha) \sim e^{\pm\frac{1}{2}\alpha^2}$

❑ **18** — Justifier succinctement que seule la solution $\alpha \mapsto e^{-\frac{1}{2}\alpha^2}$ est physiquement acceptable.

Dès lors que nous connaissons le comportement asymptotique de la solution recherchée, nous pouvons l'extraire de celle-ci en effectuant le changement de fonction $f(\alpha) = g(\alpha)e^{-\frac{1}{2}\alpha^2}$

❑ **19** — Déterminer l'équation différentielle vérifiée par la fonction $\alpha \mapsto g(\alpha)$?

Pour résoudre cette équation, on effectue un développement en série entière de la fonction g :

$$g(\alpha) = \sum_{p=0}^{+\infty} b_p\, \alpha^p$$

❑ **20** — Exprimer le coefficient b_{p+2} en fonction du coefficient b_p, de l'entier p et de γ.

Si l'on conserve tous les termes de la série, on montre que le comportement asymptotique de la fonction $\alpha \mapsto g(\alpha)$ l'emporte sur $\exp(-\alpha^2/2)$ en $\pm\infty$ ce qui ne permet pas de construire de solution physiquement acceptable. La seule possibilité est de tronquer la série en imposant l'existence d'un entier n tel que si $p \geq n$ alors $b_{p+2} = 0$.

❑ **21** — En déduire que les énergies accessibles à un oscillateur harmonique en régime quantique sont de la forme

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega \quad \text{avec } n \in \mathbb{N}$$

où ω est une grandeur que l'on exprimera en fonction de μ et k.

Exercice 4 : Autour de l'atome d'Hydrogène.

Dans cet exercice, on s'intéresse à l'atome d'hydrogène dans son état fondamental, dont l'énergie est notée E_0, et on effectue l'étude dans le référentiel où le noyau est au repos. On admet que, dans un système de coordonnées sphériques centrées sur le proton, la fonction d'onde spatiale de l'électron de l'atome d'hydrogène dans son état fondamental s'écrit : $\varphi(r) = A.\exp\left(-\frac{r}{a}\right)$ où A et a sont des constantes positives.

1- Commenter cette expression. S'agit-il d'une fonction d'onde tridimensionnel ou unidimensionnelle ?

2- Déterminer, en fonction de *a* :
- La constante *A*.
- La densité de probabilité de présence radiale de l'électron.
- La distance la plus probable entre l'électron et le noyau.
- La moyenne et l'écart type d'une mesure de distance électron-noyau.
- La moyenne de l'énergie potentielle d'interaction électron-noyau.

Quel est la grandeur classique associée à *a* ?

3- En utilisant l'équation de Schrödinger, déterminer les expressions de *a* et l'énergie totale E_0 de l'atome en fonction des constantes fondamentales. Effectuer les applications numériques.

Formulaire : $\int_0^{\infty} x^n e^{-\alpha x} dx = \frac{n!}{\alpha^{n+1}}$;

Laplacien d'une fonction $f(r)$ en coordonnées sphériques : $\Delta f = \frac{1}{r}\frac{d^2(rf)}{dr^2}$.

Exercice 5 : Etude d'un état non stationnaire dans un puits infini

On étudie l'évolution d'une particule quantique, de masse m, piégée dans un puits de potentiel infini de largeur a : $\begin{cases} V(x)=0 & \text{pour } 0<x<a \\ V(x)\to\infty & \text{en dehors} \end{cases}$

On considère un état stationnaire de la particule quantique, d'énergie E_n, associé à une fonction d'onde propre de la forme : $\varphi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(n\pi\frac{x}{a}\right)$

1- Donner la valeur de l'énergie E_n. On pose $E_1=\hbar\omega_0$. Exprimer ω_0 en fonction de a, m et $\hbar$. Exprimer ensuite E_n en fonction de n, $\hbar$ et ω_0

2- On considère l'état décrit par la fonction d'onde $\psi_n(x,t)$ telle que $\psi_n(x,t=0)=\varphi_n(x)$. Donner l'expression de $\psi_n(x,t)$ pour tout t > 0.

3- On considère maintenant l'étant décrit par la fonction d'onde $\psi(x,t)$ telle que

$$\psi(x,t=0)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\varphi_1(x)+\varphi_2(x)\right)$$

3a- En utilisant le résultat de la question précédente, donner l'expression de $\psi(x,t)$ pour t > 0.

3b- On définit les deux états suivants :

$$\varphi_g(x)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\varphi_1(x)+\varphi_2(x)\right)$$
$$\varphi_d(x)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\varphi_1(x)-\varphi_2(x)\right)$$

Exprimer $\psi(x,t)$ en fonction de $\varphi_g(x)$ et $\varphi_d(x)$. En déduire l'expression de la densité de probabilité $P(x,t)=|\psi(x,t)|^2$. Montrer qu'elle oscille à une fréquence ν que l'on exprimera en fonction de $\hbar$ et ω_0 puis en fonction de $\hbar$, E_1 et E_2.

3c- Représenter l'allure de $\varphi_g(x)$ et $\varphi_d(x)$ et des densités de probabilité de présence associées. En déduire l'allure de la densité de probabilité de présence de la particule quantique en fonction du temps.

Indications et réponses :

- **Exercice 1** : $\psi_0=(m\omega_0/\pi\hbar)^{1/4}\times\exp(i\theta)$, θ quelconque ; $E_0=\hbar\omega_0/2$; $V(x)=\frac{1}{2}m\omega_0^2x^2$.
- **Exercice 2, qu.2** : Injecter la forme proposée dans l'équation de Schrödinger (ou commencer par affirmer l'expression de $g(t)$ puis injecter la partie spatiale dans l'équation de Schrödinger indépendante du temps) puis précéder à une séparation des variables comme dans le cours d'électromagnétisme en cavité afin de déduire deux équations vérifiées séparément par φ et χ. Montrer que $E=(n+\frac{1}{2})\times\hbar\omega+(m+\frac{1}{2})\times\hbar\omega$.
- **Exercice 2, qu.4** : Procéder comme à la question 2 en posant $V(x,y,z)=\frac{1}{2}m\omega^2(x^2+y^2)+V_3(z)$ où $V_3(z)$ correspond à un puits infini de taille a autour de $z=0$, et $\Psi_{3D}(x,y,t)=\Psi_{2D}(x,y,t)\times\psi(z)$ [ou en reprenant à zéro : $\Psi_{3D}(x,y,t)=\varphi(x)\,\chi(y)\,\psi(z)\,g(t)$].
- **Exercice 4** : La fonction d'onde est nécessairement tridimensionnelle ; $A^2=1/\pi a^3$ s'obtient par normalisation sur tout l'espace ; la probabilité de présence radiale $dP_{r\to r+dr}/dr$ correspond à la probabilité de se trouver à la distance r du noyau, à dr près, dans n'importe quelle direction ; $dP_{r\to r+dr}/dr=4\pi r^2|\varphi(r)|^2$; moyenne et écart type : $3a/2$ et $\sqrt{3}a/2$.