TD : Mécanique quantique

Valeur numérique de la constante de Planck :

$$h = 6{,}62\times10^{-34}\ \text{J.s} \quad \text{et} \quad \hbar = 1{,}05\times10^{-34}\ \text{J.s}$$

1 Atome d'hydrogène

Dans son état fondamental d'énergie E_0, l'électron (de masse m) d'un atome d'hydrogène H dont le proton est supposé fixe en O (origine des coordonnées) est décrit par une fonction d'onde à symétrie sphérique :

$$\Psi_{\text{stat}}(r,t) = A\exp\left(-\frac{r}{a}\right)\exp\left(-i\frac{E_0 t}{\hbar}\right)$$

où r est la distance à O, A une constante réelle positive et $a = \dfrac{\hbar^2 4\pi\varepsilon_0}{me^2}$. On donne pour $\alpha > 0$:

$$\int_0^{+\infty} x^n \exp(-\alpha x)\,\mathrm{d}x = \frac{n!}{\alpha^{n+1}}$$

Données numériques :

$$e = 1{,}6.10^{-19}\ \text{C}\,;\ \varepsilon_0 = 8{,}85.10^{-12}\ \text{F.m}^{-1}\,;\ \ m = 9{,}1.10^{-31}\ \text{kg}$$

1) Déterminer la valeur de A.

2) En utilisant le volume d'une coquille sphérique comprise entre les sphères de rayon r et $r + \mathrm{d}r$, déterminer la probabilité pour que l'électron soit situé dans cette coquille en la mettant sous la forme : $\mathrm{d}\mathscr{P} = f(r)\,\mathrm{d}r$ et en donnant l'expression de $f(r)$.

3) Pour quelle valeur r_0 de r la densité linéique de probabilité $f(r)$ est-elle maximale ? Quelle est la valeur moyenne $\langle r\rangle$? A.N. : calculer $\langle r\rangle$.

4) Donner l'expression de l'énergie potentielle $V(r)$ de l'électron.

5) En utilisant l'équation de Schrödinger indépendante du temps, en déduire l'expression littérale de l'énergie E_0 de cet état fondamental, en fonction de e, ε_0 et r_0. A.N. Calculer E_0 en Joules puis en eV.

Dans les deux exercices suivants, on utilisera les intégrales gaussiennes suivantes, avec $\alpha \in \mathbb{R}_+^*$ et $\beta \in \mathbb{C}$:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-\alpha u^2 + \beta u)\,\mathrm{d}u = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}\exp\left(\frac{\beta^2}{4\alpha}\right)$$

et

$$\int_{-\infty}^{+\infty} u^2\exp(-\alpha u^2)\,\mathrm{d}u = \sqrt{\frac{\pi}{4\alpha^3}}$$

2 Oscillateur harmonique quantique

On étudie un modèle unidimensionnel dans lequel un quanton de masse m est soumis à une énergie potentielle de la forme $V(x) = \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2$ (oscillateur harmonique de pulsation propre ω_0). La théorie quantique prévoit que son énergie est quantifiée, les différentes valeurs possibles formant une suite :

$$E_n = \hbar\omega_0\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

où $n \in \mathbb{N}$ est un entier naturel appelé nombre quantique. L'état fondamental correspond à $n = 0$ et, pour cette énergie particulière, l'état stationnaire du quanton s'écrit :

$$\Psi_{stat}(x,t) = C\exp\left(-\frac{m\omega_0 x^2}{2\hbar}\right)\exp\left(-i\,\frac{E_0 t}{\hbar}\right)$$

1) Déterminer C. Quelle est sa dimension ?

2) En utilisant l'équation de Schrödinger indépendante du temps, déterminer l'expression de E_0 et vérifier la cohérence avec l'expression générale de E_n donnée au début de l'exercice.

3) Représenter l'allure générale de la densité de probabilité de présence du quanton en fonction de x. En déduire sans calcul que, dans cet état quantique, $\langle X \rangle = 0$.

4) Calculer l'indétermination quantique ΔX sur la position.

5) Malheureusement, ΔX est difficile à mesurer car, à température T non nulle, il existe aussi une incertitude sur la position ΔX_T liée à l'agitation thermique et qui est donnée par :

$$\Delta X_T = \sqrt{\frac{k_B T}{m\omega_0^2}}$$

où $k_B = 1{,}38.10^{-23}$ J.K^{-1} est la constante de Boltzmann.

a) Quelle est la température T_0 en dessous de laquelle l'indétermination quantique devient plus importante que l'incertitude sur la position liée à l'agitation thermique ?

b) A.N. : calculer T_0 pour une masse $m = 50$ g accrochée à un ressort de raideur $k = 300$ N.m^{-1}.

c) Même question pour un atome de masse $m = 9.10^{-26}$ kg qui oscille autour de sa position d'équilibre stable dans un cristal, avec la pulsation propre $\omega_0 = 0{,}52.10^{13}$ rad.s^{-1}.

3 Paquet d'onde gaussien

On étudie un quanton libre ($V = 0$) dans un modèle unidimensionnel où sa fonction d'onde est de la forme $\Psi = \Psi(x,t)$. La position de ce quanton peut prendre toute valeur sur l'axe (Ox) entre $-\infty$ et $+\infty$.

1) On cherche un état stationnaire $\Psi_{\text{stat}}(x,t) = \varphi(x)\exp\left(-i\,\frac{Et}{\hbar}\right)$ associé à une énergie $E > 0$ donnée. En utilisant l'équation de Schrödinger indépendante du temps, déterminer l'expression générale de $\varphi(x)$. On introduira : $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ et deux constantes complexes A et B.

Dans la suite, on ne s'intéressera qu'à l'état stationnaire qui se propage dans la direction $+\overrightarrow{u_x}$ et on notera A la constante associée.

2) Pourquoi un tel état ne peut décrire convenablement l'état quantique de la particule ? Pour remédier à ce problème on considère une superposition continue de ces états stationnaires que l'on écrit sous la forme :

$$\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} A(k)\,\exp(ikx)\exp\left(-i\,\frac{Et}{\hbar}\right)\mathrm{d}k$$

où le coefficient $A(k)$ dépend de k selon l'expression :

$$A(k) = A_0 \exp(-a^2\,k^2)$$

où A_0 et a sont deux constantes réelles positives. On parle de *paquet d'onde gaussien*. Quelle est la dimension de a ?

Pour simplifier, on étudie ce paquet d'onde à l'instant $t = 0$.

3) Déterminer l'expression de $\Psi(x,0)$.

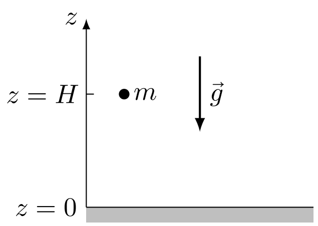
4) Représenter l'allure de la densité de probabilité de présence $\rho_X(x,t=0)$ en fonction de x. Indiquer ses caractéristiques remarquables : maximum, largeur à mi-hauteur.

5) Déterminer la constante A_0.

6) Montrer sans calcul que $\langle X \rangle(t=0) = 0$. Calculer l'indétermination quantique $\Delta X(t=0)$ sur la position du quanton à l'instant $t = 0$.

4 Niveaux d'énergie d'un neutron dans le champ de pesanteur

On commence par se placer dans le cadre de la mécanique classique. Une particule de masse m est lâchée depuis une hauteur H dans le champ de pesanteur terrestre, avec une vitesse initiale nulle. Elle est soumise à la seule force de pesanteur. Le sol en $z = 0$ est impénétrable et correspond à une barrière de potentiel d'amplitude infinie. On suppose que le rebond sur le sol se fait sans perte d'énergie mécanique, la vitesse verticale voyant son sens changer mais pas sa norme. L'axe (Oz) est vertical ascendant.



1) Donner l'expression de l'énergie potentielle de pesanteur $V(z)$ de la particule. On suppose $V(0) = 0$. Que peut-on dire de l'énergie mécanique de la particule au cours de son mouvement ? Représenter $V(z)$ en fonction de z sur un graphe et y faire figurer l'énergie mécanique E. Quelles sont les altitudes accessibles à la particule ?

2) Déterminer l'expression de l'énergie cinétique de la particule à une altitude z quelconque comprise entre 0 et H. L'exprimer en fonction de m, g, H et z.

3) La probabilité classique $\mathrm{d}\mathscr{P}_{cl}$ de présence de la particule entre les altitudes z et $z + \mathrm{d}z$ est proportionnelle au temps passé entre ces deux altitudes. Mettre $\mathrm{d}\mathscr{P}_{cl}$ sous la forme $\mathrm{d}\mathscr{P}_{cl} = f(z)\,\mathrm{d}z$ et représenter $f(z)$ en fonction de z. On veillera à normaliser correctement la probabilité.

4) On propose maintenant de déterminer les états stationnaires d'un neutron d'énergie E et de masse m dans le champ de pesanteur au-dessus de la surface $z = 0$ par résolution de l'équation de Schrödinger.

La fonction d'onde qui décrit le mouvement du neutron est :

$$\Psi(z,t) = \varphi(z)\exp\left(-i\,\frac{Et}{\hbar}\right)$$

Le neutron ne peut pas pénétrer dans le sol dont la surface constitue une barrière de potentiel infinie : on considère donc toujours que $V(z < 0) \to +\infty$.

a) On définit la grandeur suivante : $\ell_g = \left(\dfrac{\hbar^2}{2gm^2}\right)^{1/3}$. Quelle est sa dimension ?

b) Écrire l'équation de Schrödinger indépendante du temps sous forme adimensionnée en utilisant l'altitude adimensionnée $\xi = z/\ell_g$ et l'énergie adimensionnée $\varepsilon = \frac{E}{mg\ell_g}$.

c) Quelles sont les conditions aux limites qui s'imposent à $\varphi(\xi)$?

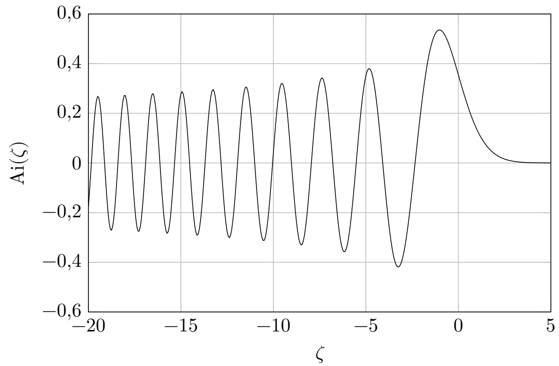
La solution acceptable de l'équation de Schrödinger indépendante du temps adimensionnée s'écrit :

$$\varphi(\xi) = C\,Ai(\xi - \varepsilon)$$

où C est un facteur de normalisation (qui n'est pas à calculer). Toutes les informations utiles sur la fonction d'Airy Ai sont données ci-dessous.

d) Donner les valeurs numériques des niveaux d'énergie ε_n pour les deux premiers niveaux d'énergie $n = 1$ et $n = 2$.

e) Représenter l'allure de la densité de probabilité de présence d'un neutron en fonction de z pour ces deux premiers niveaux d'énergie. On explicitera la démarche suivie.



Comportement asymptotique en $+\infty$

$$\mathrm{Ai}(x) \underset{x\to+\infty}{\sim} \frac{\exp\left(-\frac{2}{3}x^{3/2}\right)}{2\sqrt{\pi}x^{1/4}}$$

Trois premiers zéros de $\mathrm{Ai}(\zeta)$

n	1	2	3
ζ_n	$-2{,}34$	$-4{,}09$	$-5{,}52$

5 Le retour du théorème d'équipartition - cas du puits quantique infini

Le but de cet exercice est de démontrer le théorème d'équipartition de l'énergie dans un cas particulier : celui du puits de potentiel infini de largeur L à "haute" température.

1) Montrer que les niveaux d'énergie accessibles pour une particule quantique de masse m piégée dans un puits de potentiel infini de largeur L peuvent s'écrire :

$$E_n = n^2 E_f \qquad \text{avec} \qquad n \in \mathbb{N}^*$$

où E_f est une constante à déterminer en fonction de m, $\hbar$ et L.

Ce modèle représente une particule libre enfermée dans une boîte unidimensionnelle de longueur L. La valeur infinie du potentiel sur les parois de la boîte, c'est à dire en $x = 0$ et en $x = L$ empêche la particule de sortir de la boîte.

On considère maintenant un ensemble de $N \gg 1$ particules identiques enfermées dans la même boîte unidimensionnelle de longueur L, sans interaction les unes avec les autres et en équilibre thermique avec un thermostat à la température T.

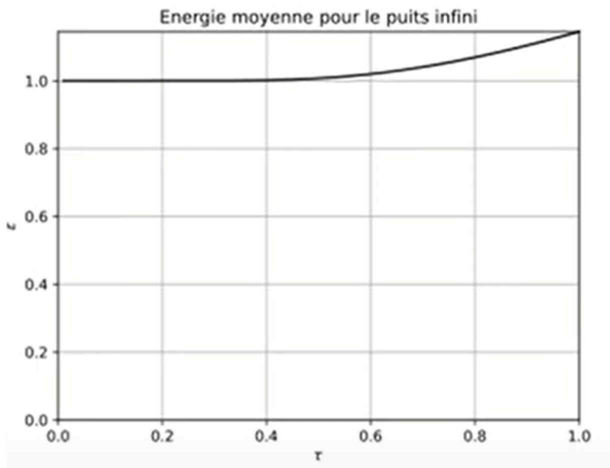
2) Quel est le seul niveau d'énergie occupé à "très basse" température ? On précisera ce que signifie le terme de "très basse" température.

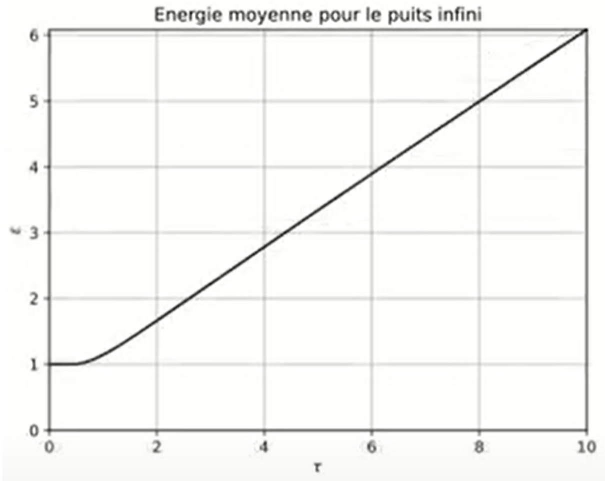
3) On considère maintenant que la température T est quelconque. Montrer que la valeur moyenne $\langle E \rangle$ de l'énergie d'une particule donnée peut s'écrire sous la forme :

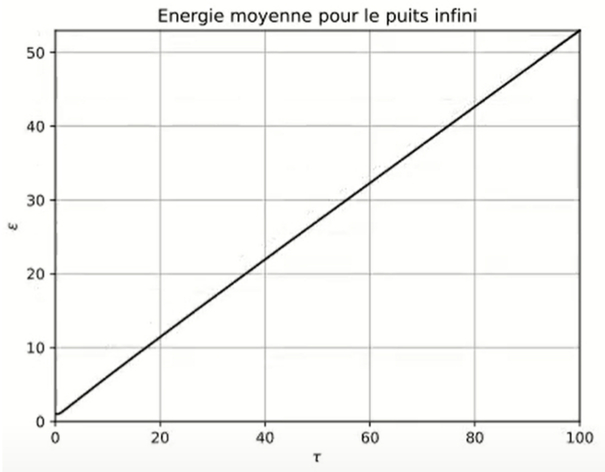
$$\langle E \rangle = E_f \frac{\displaystyle\sum_{n=1}^{\infty} n^2 \exp\left(-\frac{n^2}{\tau}\right)}{\displaystyle\sum_{n=1}^{\infty} \exp\left(-\frac{n^2}{\tau}\right)}$$

où τ est une grandeur adimensionnée dont on précisera l'expression.

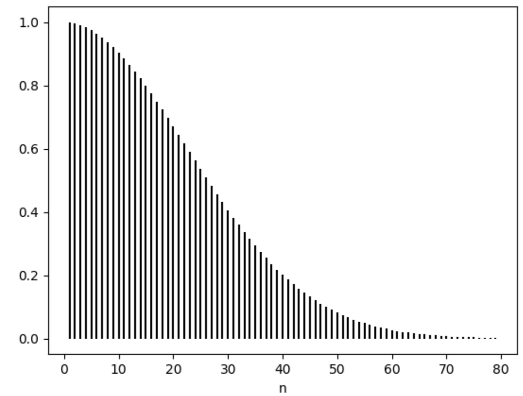
4) Commenter les figures ci-dessous, qui représentent $\varepsilon = \langle E \rangle / E_f$ en fonction de τ à différentes échelles. Quelle conjecture peut-on raisonnablement faire à "haute" température ?







5) Justifier pourquoi à "haute" température on peut approximer les sommes infinies intervenant dans l'expression $\langle E\rangle$ par des intégrales en utilisant les figures ci-dessous représentant respectivement $n^2 \exp\left(-\dfrac{n^2}{\tau}\right)$ et $\exp\left(-\dfrac{n^2}{\tau}\right)$ en fonction de n pour $\tau = 1000$. En déduire une nouvelle expression de $\langle E\rangle$ faisant intervenir des intégrales.



6) Calculer $\langle E\rangle$ à l'aide d'une intégration par partie et retrouver le théorème d'équipartition de l'énergie dans ce cas particulier.