Mécanique quantique

I Rapports

CCINP 2023

L'aspect mathématique de la résolution de l'équation de Schrödinger est généralement bien maîtrisé, mais une part assez importante de candidats a du mal à dégager des interprétations physiques de résultats obtenus (Idem 2019, 2021 et 2022).

La notion de courant de probabilité, et en particulier son lien avec le coefficient de transmission d'une barrière de potentiel, n'est pas toujours connue (Idem 2019, 2021 et 2022).

Mines-Ponts 2023

En mécanique quantique, peu de candidats ont conscience qu'en plus d'apporter de l'énergie à sa cible, un photon absorbé lui communique également une quantité de mouvement.

Mines-ponts 2022

Quelques candidats comprennent mal le principe d'incertitude d'Heisenberg et son application à des situations concrètes. La détermination de l'énergie minimale de l'oscillateur harmonique quantique via la relation d'Heisenberg est parfois mal maîtrisée par les candidats (Idem 2021).

Une part assez importante des candidats a du mal à dégager des interprétations physiques de résultats obtenus en physique quantique (interférences de probabilités, effet tunnel, lien entre diagramme énergétique et absorption) (Idem 2021).

La notion de courant de probabilité, et en particulier son lien avec le cœfficient de transmission d'une barrière de potentiel, n'est pas toujours bien comprise (Idem 2021).

Le jury rappelle enfin que les particules quantiques interagissent mécaniquement via leur quantité de mouvement, y compris celles qui n'ont pas de masse (Idem 2021).

Centrale-Supélec 2022

Les sujets s'articulent souvent autour de l'équation de Schrödinger rappelée dans les énoncés. Ils passent évidemment par une phase de calculs qui doit être maitrisée et ne pas occuper toute la séance d'interrogation mais laisser place à une analyse du phénomène étudié. La notion de densité de probabilité de présence est à revoir pour certains. L'inégalité de Heisenberg est trop souvent malmenée. Il importe de sortir de la réalisation de calculs rituels sans vrai recul. Un minimum d'analyse et de compréhension serait souhaitable.

Centrale-Supélec 2021

Les problèmes proposés débutent très souvent par une discussion classique, une analyse en terme d'ordres de grandeur ou une simulation sur un logiciel. Pourtant, encore beaucoup de candidats tentent d'esquiver ces aspects et se précipitent sur le « refuge » que constitue l'équation de Schrödinger fournie, en voulant alors transformer l'exercice en une résolution d'équation différentielle : les interprétations physiques sont pourtant absolument incontournables (Idem 2019).

Ce domaine est souvent l'objet de calculs rituels sans vrai recul quand il est abordé. Un minimum d'analyse et de compréhension serait souhaitable.

II Questions de cours

- Énergie minimale d'un oscillateur harmonique quantique.
- Représentation d'une particule localisée par un paquet d'ondes ; vitesse de groupe et vitesse de phase.
- Définir un état stationnaire en Mécanique Quantique ; la notion est-elle identique à la notion d'onde stationnaire en Physique des ondes ? Quelle est la propriété de la densité de probabilité de présence d'un état stationnaire ?
- Équation de Schrödinger à une dimension ; cas d'un état stationnaire.
- Énergie dans l'état fondamental d'une particule confinée dans un puits infini à une dimension.
- Densité de courant de probabilité.

III Exercices

1. Falaise de potentiel

Un quanton de masse m, d'énergie E approche - en provenance de $-\infty$ - une falaise de potentiel de hauteur V_0 placée en $x = 0$. En effet, le potentiel (énergie potentielle) est donnée par :

$$V(x) = 0 \text{ pour x} < 0 \text{ (région 1) et} V(x) = -V_0 < 0 \text{pour x} > 0 \text{ (région 2).}$$

1. Quel est le mouvement d'une particule classique dans de telles conditions ? Comparer à la situation d'une particule quantique.
2. Résoudre l'équation de Schrödinger dans les deux domaines.
3. Déterminer les coefficients de réflexion et de transmission de la fonction d'onde.
4. Étudier le cas particulier où $E = V_0/2$ et déterminer le coefficient de réflexion R de la probabilité de présence.

2. Puits infini de potentiel

On étudie l'évolution d'une particule quantique, de masse m, piégée dans un puits de potentiel infini de largeur a. Le potentiel dans le puits est nul. On considère un état stationnaire de la particule quantique, d'énergie E_n, associé à une fonction d'onde de la forme

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$

1. Donner l'expression 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 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 $t > 0$.
3. On considère maintenant l'état décrit par la fonction d'onde $\Psi(x,t)$ telle que :

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

   En utilisant le résultat de la question précédente, donner l'expression de $\Psi(x,t)$ pour $t > 0$.
4. On définit les deux états suivants :

$$\varphi_g(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_1(x) + \varphi_2(x)) \quad \text{et} \quad \varphi_d(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_1(x) - \varphi_2(x))$$

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

3. Potentiel inconnu

Soit une particule de masse m telle que :

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

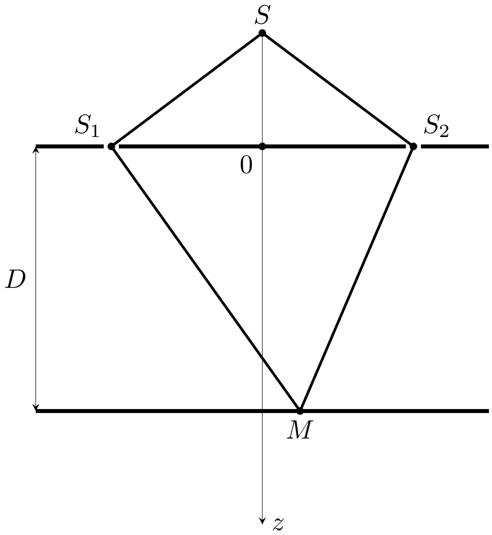
1. Calculer K.
2. Peut-on parler d'état stationnaire ?
3. Donner l'expression de l'énergie E de la particule, et de son énergie potentielle $V(x)$. Donner un exemple pour $V(x)$.
4. Calculer $\langle x \rangle$.
5. Calculer $\langle x^2 \rangle$ et Δx. Que peut-on dire de Δp_x ?

On donne pour $\alpha > 0$,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-\alpha u^2)du = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \quad \text{et} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} u^2 \exp(-\alpha u^2)du = \sqrt{\frac{\pi}{4\alpha^3}}$$

4. Interférences avec des atomes de néon - Longueur d'onde de de Broglie effective

On considère le dispositif de la figure ci-dessous analogue à l'expérience des trous d'Young en optique. Quelques millions d'atomes de néon sont piégés au voisinage d'un point S situé au dessus de deux trous S_1 et S_2 distants de $a = 6$ μm.



Lorsqu'on relaxe le piège, ces atomes sont émis et peuvent traverser l'un ou l'autre des trous pour parvenir sur un écran situé à une distance $D \approx 1$ m. Comme les atomes tombent en chute libre, leur vitesse varie donc leur longueur d'onde de de Broglie aussi : un raisonnement infinitésimal est donc nécessaire pour exprimer la différence de phase des deux ondes au point M où elles interfèrent et accéder ainsi à l'interfrange. On oriente l'axe des z de telle sorte que le champ de pesanteur soit de la forme $\overrightarrow{g} = g\,\overrightarrow{u_z}$ et on prend l'origine O dans le plan des trous d'Young. Au voisinage d'un point M où $\overrightarrow{u_i}$ est le vecteur unitaire dans la direction de propagation, la variation de phase d'une fonction d'onde lorsqu'on passe de M à $M + \overrightarrow{dM}$ s'écrit :

$$d\phi_i = \overrightarrow{k_i} \cdot \overrightarrow{dM} - \omega t \qquad \text{avec} \qquad \overrightarrow{k_i} = \frac{2\pi}{\lambda}\,\overrightarrow{u_i}$$

1. En négligeant la vitesse v_0 des atomes dans le plan $z = 0$ et en se plaçant dans le cadre de la mécanique classique, exprimer la vitesse v et la longueur d'onde de de Broglie $\lambda(z)$ des atomes en fonction de g et z.

2. Exprimer la différence de phase élémentaire $d\phi_2 - d\phi_1$ entre les deux ondes dues aux portions de trajets évalués sur les "rayons" S_1M et S_2M et situées entre les cotes z et $z + dz$, en fonction de dz, S_1M, S_2M, D et $\lambda(z)$.

3. En déduire l'expression de la différence de phase totale $\phi_2 - \phi_1$ et vérifier que tout se passe comme si on avait une longueur d'onde de de Broglie effective λ_{eff} qu'on exprimera en fonction de la longueur d'onde de de Broglie sur l'écran λ_D. Commenter.

5. Équation de Shrödinger – Centrale

On rappelle l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\Psi$$

1. Montrer que si on pose $\Psi = \varphi(x)\chi(t)$, φ est solution de :

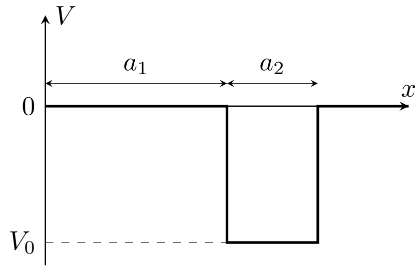
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi}{dx^2} + V(x)\varphi(x) = K\varphi(x)$$

pour peu que $\chi(t)$ ait une expression appropriée.

2. On admet que K est égal à l'énergie E. Donner un argument pour le justifier.

6. Effet Bragg dans un potentiel périodique

Un électron se déplace dans un potentiel $V(x)$ donné par le graphe de la figure ci-dessous :



$V(x)$ est périodique de période $a = a_1 + a_2$ et vaut alternativement 0 sur une largeur a_1 et $-V_0$ sur une largeur a_2 avec $V_0 > 0$. On envisage un état stationnaire d'une particule d'énergie $E > 0$ (état de diffusion) décrit par la fonction d'onde $\psi(x,t) = \varphi(x)\,\exp(-iEt/\hbar)$. On pose $k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar$ et $k_2 = \sqrt{2m\,(E+V_0)}/\hbar$ et on suppose pour simplifier les calculs que $k_1\,a_1 = \pi/2$ et $k_2\,a_2 = \pi/2$.

1. Exprimer $\varphi(x)$ dans le domaine $0 < x < a_1$ et en déduire que :

$$\varphi(a_1) = \frac{\varphi'(0)}{k_1} \qquad \text{et} \qquad \varphi'(a_1) = -\,k_1\,\varphi(0)$$

2. Exprimer de même $\varphi(a_1 + a_2)$ et $\varphi_1'(a_1 + a_2)$ en fonction de k_2, $\varphi(a_1)$ et $\varphi'(a_1)$.

3. En déduire les expressions de $\varphi(a_1 + a_2)$ et $\varphi'(a_1 + a_2)$ en fonction de k_1, k_2, $\varphi(0)$ et $\varphi'(0)$.

4. Le potentiel périodique existe entre $x = 0$ et $x = L = N\,(a_1 + a_2)$. Exprimer $\varphi(L)$ et $\varphi'(L)$ en fonction de k_1, k_2, N, $\varphi(0)$ et $\varphi'(0)$.

5. Dans le domaine $x < 0$ la particule est libre ($V(x < 0) = 0$). Pour simplifier les calculs, on suppose que $V(x > L) = -V_0$. On envisage une particule incidente arrivant de $x = -\infty$ sur le milieu et on écrit la solution de l'équation de Schrödinger en dehors du milieu sous la forme :

$$\varphi(x < 0) = A\exp(ik_1x) + r\,A\exp(-ik_1x)$$
$$\varphi(x > L) = t\,A\exp(ik_2x)$$

Déterminer le facteur de réflexion r en amplitude et R en courant de probabilité. Que se passe-t-il lorsque $N \gg 1$? Comparer avec les prédictions de la mécanique classique.

7. Détermination d'un potentiel – Mines

On donne la fonction d'onde suivante :

$$\Psi(x,t) = A\left(\frac{x}{x_0}\right)^n \exp\left(\frac{x}{x_0}\right)\exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right)$$

avec A, x_0 et n des constantes.

Déterminer le potentiel $V(x)$ et l'énergie E pour lesquels Ψ est solution de l'équation de Schrödinger.