# TD3 - Particule libre en mécanique quantique

On considère une particule de masse $m$ non nulle (par exemple un électron). Cette particule ne subit aucune force $\left(\vec{f}=\vec{0}\right)$ et est donc libre de se déplacer dans tout l'espace. L'objectif de ce TD est d'étudier ce problème en mécanique classique puis en mécanique quantique.

**Approche classique**

1) Quelle est l'énergie potentielle $W$ de la particule sachant que $\vec{f}=-\vec{\nabla}(W)$ ? Choisir $W$ pour simplifier au maximum le problème.
Rappel de notations : $\vec{\nabla}\equiv\overrightarrow{\mathrm{grad}}=\left(\frac{d}{dx},\frac{d}{dy},\frac{d}{dz}\right)$.

2) Déduire de la relation fondamentale de la dynamique (Newton) que la vitesse $\vec{v}$ est une constante du mouvement.

3) Quelle est l'énergie totale $E$ d'une particule de vitesse $\vec{v}$ ? Réécrire cette énergie en fonction de la quantité de mouvement ou impulsion $\vec{p}=m\vec{v}$. On notera comme d'habitude $p=|\vec{p}|=\sqrt{\vec{p}\cdot\vec{p}}$.

**Approche quantique**

4) En mécanique quantique, on associe des opérateurs aux grandeurs physiques mesurables. L'Hamiltonien *H* est l'opérateur associé à l'énergie totale d'un système. Compte tenu de la réponse à la question 3, quel est l'Hamiltonien du système ? On rappelle que lors du passage de la mécanique classique à la mécanique quantique, on utilise la règle de transformation $\vec{p}\rightarrow-i\hbar\vec{\nabla}$ et que $\vec{\nabla}\cdot\vec{\nabla}=\Delta=\frac{d^2}{dx^2}+\frac{d^2}{dy^2}+\frac{d^2}{dz^2}$ (Laplacien).

**Electron libre à une dimension (1D)**

On considère un électron libre de se déplacer le long d'un axe $x'Ox$. L'électron étant 'libre', comme dans le cas classique (cf. question 1), son énergie potentielle *W* est constante lors de son déplacement. Ce problème peut sembler purement académique mais il décrit très bien le cas d'un électron se déplaçant dans un fil de très petit diamètre, par exemple un nanofil de silicium tel que l'industrie microélectronique en fabrique actuellement pour intégration dans des transistors ultimes de future génération.

5) Ecrire l'équation de Schrödinger dépendante du temps. On notera $\psi(x,t)$ la fonction d'onde de l'électron. Etant solution de l'équation de Schrödinger, $\psi(x,t)$ est appelé 'état propre' de l'Hamiltonien *H*.

6) Comme dans tout problème pour lequel $W$ ne dépend pas du temps, on cherche une solution de la forme $\psi(x,t)=\psi(x)\exp(-i\omega t)$ où $\omega=E/\hbar$. En déduire l'équation de Schrödinger indépendante du temps dont $\psi(x)$ est solution. Cette fois $\psi(x)$ est un 'état propre' de *H* pour la 'valeur propre' *E* de l'énergie.

7) On cherche pour $\psi(x)$ des solutions de la forme $\exp(\alpha x)$. Donner l'équation vérifiée par $\alpha$. En déduire que, pour obtenir des solutions physiquement acceptables (signe de $E$ ?), $\alpha$ ne peut être qu'un nombre imaginaire pur. On notera $\alpha=ik$ où $k\in\mathbb{R}$. Donner la relation entre $k$ et $E$. Conclure que les solutions de l'équation dépendante du temps sont de la forme :

$$\psi(x,t)=A\exp[i(kx-\omega t)]$$

8) La fonction d'onde peut aussi s'écrire comme $A\exp[i\varphi]$ où $\varphi=kx-\omega t$ est sa phase. En déduire que la vitesse de phase de l'onde est $v_\varphi=\omega/k$.

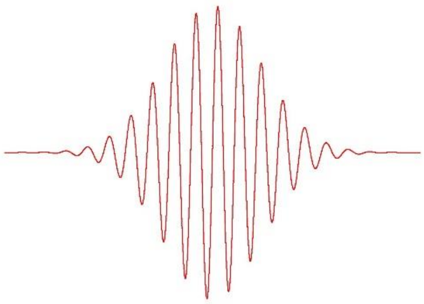
**Voir applet 'Fourier : Making Waves'**. Dans l'onglet principal 'Discrete', choisir une seule fréquence puis dans l'onglet 'graph control', sélectionner soit 'time' ou 'space' ou 'space & time'.

9) $\psi(x, t)$ est une onde plane. On note $\lambda$ sa longueur d'onde. Donner $\lambda$ en fonction de $k$.

10) Montrer que l'onde se propage dans la direction des $x$ croissants ou décroissants suivant le signe de $k$. On considère les deux solutions correspondant à $k$ et $-k$. Quelle est l'énergie associée à ces deux fonctions d'onde ?

11) Montrez que l'impulsion de la particule décrite par $\psi(x, t)$ a une valeur bien définie. $\psi(x, t)$ est donc aussi un état propre de $\vec{p}$ pour cette valeur de l'impulsion (valeur propre).

12) Quelle est la probabilité de trouver l'électron dans un intervalle $dx$ autour de $x$ à l'instant $t$ ?



13) La dualité onde-corpuscule nous pousse à considérer la fonction d'onde non plus comme une onde plane mais sous la forme d'un paquet d'ondes (figure ci-contre). On peut démontrer qu'un paquet d'ondes peut toujours s'écrire comme une superposition d'ondes planes (transformation de Fourier) :

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} u(k') \exp[i(k'x - \omega' t)] dk'$$

où $u(k')$ est une fonction du vecteur d'onde $k'$.[1] Si, au sein du paquet d'ondes, la longueur d'onde est bien définie autour de la valeur $\lambda$, et si la largeur du paquet est grande devant $\lambda$, alors on démontre que $u(k')$ est une fonction qui présente un pic bien marqué pour $k' \approx k$.

**Voir applet 'Fourier : Making Waves'**. Se placer dans l'onglet principal 'Discrete to Continuous'.

Le paquet d'ondes correspondant à un électron, expliquer à partir de l'applet, le sens physique de cette intégrale et à partir de la relation qui lie l'impulsion au vecteur d'onde k, en quoi la localisation spatiale de la fonction d'onde induit nécessairement une incertitude sur la quantité de mouvement de l'électron (conséquence du principe d'incertitude d'Heisenberg qui est vu en cours).

14) La vitesse de déplacement du paquet d'ondes est appelée vitesse de groupe $v_g$ et est définie par $v_g = {}^{\partial\omega}/_{\partial k}$ . A partir des relations de De Broglie et de la relation $E(k)$ trouvée à la question 7), calculer la vitesse de phase de l'onde de vecteur d'onde $k_0$ et la vitesse de groupe du paquet d'ondes centré en $k = k_0$. Montrer que c'est la vitesse de groupe qui est reliée à la vitesse classique de la particule.

---

[1] $\omega'$ est une fonction implicite de $k'$.