

TD N° 18: MÉCANIQUE QUANTIQUE 1

Equation de Schrödinger - Particule dans un potentiel constant par morceaux

Généralités sur les objets quantiques

EXERCICE N°1: Etat fondamental de l'atome d'hydrogène

Dans l'état fondamental, un électron en orbite autour d'un proton fixe en O est décrit par la fonction d'onde à symétrie sphérique:

$$\psi(r, t) = A \cdot e^{-\frac{r}{a}} \quad \text{où } a \text{ et } A \text{ sont des constantes positives}$$

- ❶ Exprimer au premier ordre en dr le volume élémentaire $d\tau$ compris entre les rayons r et $r + dr$.
- ❷ En déduire la densité de probabilité radiale $\rho(r) = \frac{dP}{dr}$ que la position de l'électron soit mesurée entre les abscisses r et $r + dr$.
- ❸ Proposer une valeur pour A .
- ❹ Pour quelle valeur r_0 de r la probabilité de trouver l'électron est-elle maximale (à dr près fixé)?
- ❺ Quelle est la valeur moyenne $\langle r \rangle$ de r dans cet état?
- ❻ Que représente a ?

On donne pour cet exercice: $\int_0^{+\infty} x^n \cdot e^{-\alpha x} \cdot dx = \frac{n!}{\alpha^{n+1}}$ pour $\alpha > 0$

EXERCICE N°2: Relation d'incertitude et paramètre atomique

Considérons un électron évoluant dans le champ coulombien d'un proton, que nous supposons immobile à l'origine du système de coordonnées. On suppose les deux particules séparées d'une distance r . On posera pour la suite la charge

$$\text{réduite } e'^2 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$$

Si l'on suppose que l'extension spatiale de la fonction d'onde est de l'ordre de r_0 , montrer que l'énergie cinétique de l'électron est minorée par:

$$E_{c_{min}} = \frac{\hbar^2}{2mr_0^2}$$

Montrer que l'on peut alors facilement estimer le rayon de Bohr, ainsi que l'énergie fondamentale de l'atome d'hydrogène.

Exercices à caractère technique

EXERCICE N°3: Détermination d'un champ de force appliqué sur une particule

On considère une particule quantique astreinte à se déplacer sur un axe et soumise à un champ de force dont on cherche à déterminer l'expression. On donne la fonction d'onde de cette particule:

$$\psi(x, t) = A \cdot e^{-\frac{m\omega_0 x^2}{2\hbar} - i\frac{\omega_0}{2}t}$$

avec A et ω_0 constantes.

- ❶ Déterminer la dimension des constantes A et ω_0 .
- ❷ Déterminer une valeur de A compatible avec le problème.
- ❸ Déterminer l'expression du champ de force $\vec{F} = F(x) \cdot \vec{e}_x$ auquel est soumise cette particule. Commenter ce résultat.
- ❹ Quelle est la valeur moyenne de la position de la particule $\langle x \rangle$. Ce résultat corrobore-t-il celui obtenu pour un système classique soumis à un champ de force de même type?
- ❺ Calculer de même la valeur moyenne quadratique de la position $\langle x^2 \rangle$. En déduire l'incertitude maximale sur la quantité de mouvement Δp_x .

On donne les résultats d'intégrales suivantes pour $\alpha > 0$:

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

EXERCICE N°4: Résolution numérique de l'équation de Schrödinger pour un potentiel harmonique

Les premiers niveaux énergétiques de vibration des molécules diatomiques peuvent être déterminés avec une assez bonne précision en posant une forme harmonique pour l'énergie potentielle de vibration:

$$V(x) = \frac{1}{2} \mu \omega^2 x^2$$

avec μ masse réduite du système des deux atomes de la molécule et $\omega = \sqrt{\frac{k}{\mu}}$ pulsation propre d'oscillation de la masse réduite.

- Donner l'équation de Schrödinger indépendante du temps pour ce système et la mettre sous la forme réduite suivante:

$$\frac{d^2 \varphi(u)}{du^2} = F(u) \quad (e)$$

en posant $u = \frac{x}{\sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega}}}$

On exprimera la fonction $F(u)$ en fonction de u , $\varphi(u)$, et $\epsilon = \frac{E}{\frac{\hbar\omega}{2}}$.

Préciser la dimension du paramètre ϵ .

- Compte tenu du caractère non linéaire de l'équation (e), on propose de résoudre celle-ci numériquement à l'aide de Python. On exploitera pour cela la commande `odeint` du module `scipy` dont la syntaxe détaillée est rappelée en annexe à la fin de cet énoncé de TD.

- Compléter le code suivant pour qu'il réalise la résolution de l'équation (e) pour la valeur $\epsilon = 1$ avec les conditions initiales $\varphi(0) = 1, \varphi'(0) = 0$:

Listing 1: Résolution de l'équation de Schrödinger pour un potentiel harmonique

```
1 import scipy.integrate as integ
2 import numpy as np
3 u = np.linspace(-5, 5, num=200)
4 epsilon ...
5 def equa(phi, u):
6     return [... , ...]
7 sol=integ.odeint(... , ... , u)
8 solnorm=sol[:,0]/max(sol[:,0])
```

- Ajouter les lignes de code nécessaires pour tracer la fonction $\varphi(x)$ pour le paramètre ϵ entré. On choisira dans un premier temps les paramètres suivants: $\epsilon = 1, u_0 = 0, \varphi(0) = 1$, et $\frac{d\varphi}{du}(0) = 0$.
- Faire tracer la fonction $\varphi(x)$ pour diverses valeurs entières de ϵ choisies. Commenter.
- Reprendre ces tracés mais cette fois pour des valeurs de ϵ très proches de valeurs entières à moins de 1% près. Que constate-t-on. Commenter.

ANNEXE:

Quelques rappels sur l'utilisation et la syntaxe de la commande `odeint` du module `scipy`

La commande `odeint` permet d'intégrer les équations différentielles du premier ordre scalaires ou vectorielles. Sa syntaxe générale pour la résolution d'une équation du type $x'(t) = f(x(t), t)$ est la suivante:

`odeint(f(x(t), t), x(0), t)` avec $x(0)$ valeur de condition initiale

Considérons par exemple l'équation différentielle suivante: $x'(t) = (x+t) \cdot \sin(t*x)$; le code python pour sa résolution et son tracé avec la CI $x(0) = \pi$ sera:

Listing 2: Résolution d'une équation différentielle du premier ordre

```
1 import numpy as np
2 import matplotlib.pyplot as plt
3 import scipy.integrate as integr
4 def f(x, t):
```

```

5     return (t+x)*np.sin(t*x)
6 t = np.linspace(0,10,num=200)
7 sol = integr.odeint(f, np.pi, t)
8 plt.grid()
9 plt.plot(t, sol)
10 plt.show()

```

dans laquelle t est donc un vecteur contenant les valeurs successives de la variable " t ".

On peut également résoudre les équations différentielles d'ordre plus élevé. Par exemple, pour une équation différentielle d'ordre 2 de la forme suivante:

$$x''(t) = f(x(t), x'(t), t)$$

on pose le système différentiel suivant correspondant à deux équations différentielles de premier ordre:

$$\begin{cases} y = x'(t) \\ y'(t) = f(x(t), y(t), t) \end{cases}$$

Pour la fonction `odeint`, la fonction $x(t)$ et sa dérivée $x'(t)$ seront respectivement les première et seconde colonnes du vecteur x . Dans ces conditions, la formulation du schéma devient:

$$\begin{cases} y = x[1] \\ y' = \frac{dx[1]}{dt} = f(x[0], y = x[1], t) \end{cases}$$

La fonction `odeint` nécessite alors comme premier argument le schéma différentiel sous forme de tableau, soit:

$$[x[1], f(x[0], x[1], t)]$$

comme second argument un tableau contenant les valeurs de deux conditions initiales:

$$[x0, x[1](0)]$$

et toujours comme troisième argument la variable du problème, ici t .

Considérons par exemple l'équation différentielle régissant l'évolution de l'élongation d'un système masse-ressort soumis à une force de frottement fluide:

$$x''(t) = -0.3x(t) - 0.5x'(t)$$

Le code python pour sa résolution et le tracé de l'élongation $x(t)$ ainsi que de la vitesse $x'(t)$ avec les CI $x(0) = 1, x'(0) = 0$ est donc:

Listing 3: Résolution d'une équation différentielle du second ordre

```

1 import numpy as np
2 import scipy.integrate as integr
3 import matplotlib.pyplot as plt
4 def f(x, t):
5     return [x[1], -0.3*x[0] - 0.5*x[1]]
6 t = np.linspace(0,30,num=200)
7 sol = integr.odeint(f, [1,0], t)
8 plt.grid()
9 plt.plot(t, sol[:,0])
10 plt.plot(t, sol[:,1])
11 plt.show()

```

NB: ce schéma de résolution est généralisable à l'ordre $n > 2$, le vecteur x comportant alors n colonnes $x[0], x[1] \dots x[n]$ correspondant aux valeurs respectives de $x(t), \frac{dx(t)}{dt}, \dots, \frac{d^n x(t)}{dt^n}$, soit pour une équation différentielle:

$$x^{(n)}(t) = f(x(t), x'(t), x''(t), \dots, x^{(n-1)}(t), t)$$

soit le système différentiel:

$$\begin{cases} y_1 = x'(t) \\ y_2 = x''(t) \\ \dots \\ y_{n-1} = x^{(n-1)}(t) \\ y'_{n-1} = f(x(t), y_1(t), y_2(t), \dots, y_{n-1}(t), t) \end{cases}$$

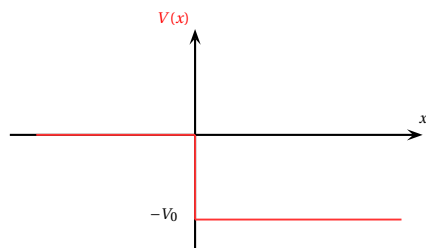
Particule dans un potentiel constant pas morceaux

EXERCICE N°5: Questions "en vrac"

- ❶ Pourquoi les ODDB ne constituent pas une onde réaliste pour une particule?
- ❷ Sous quelle(s) condition(s) une particule envoyée sur une marche de potentiel engendre-t-elle une réflexion et une transmission partielles. Comment interpréter cette situation? Y-a-t-il division de la particule? Expliquer
- ❸ Supposons une onde quantique **réaliste** associée à une particule incidente sur une marche de potentiel.
 - Justifier qu'une ODDB ne puisse représenter une telle onde. Comment alors former une onde "convenable"?
 - Décrire qualitativement (sans aucun calcul) l'évolution de la fonction d'onde dans les zones avant et après la marche lorsque la particule frappe celle-ci dans deux cas de figure:
 - La particule possède une énergie supérieure à celle de la marche.
 - La particule possède une énergie inférieure à celle de la marche.

EXERCICE N°6: Marche de potentiel descendante

On considère une particule de masse m , d'énergie E arrivant d'un domaine de potentiel nul et plongeant dans un potentiel négatif:

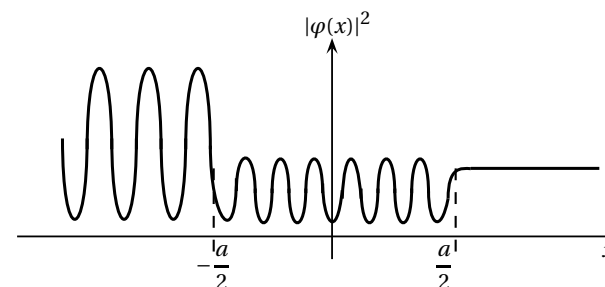


- ❶ Décrire le mouvement qu'aurait la particule dans une approche classique de ce problème? Qu'en est-il dans une vision quantique du problème?

- ❷ Déterminer les expressions des densités de probabilité de présence dans les deux domaines $x > 0$ et $x < 0$?
- ❸ Déterminer la probabilité qu'à une particule incidente de réaliser un retour en arrière.
- ❹ En lien avec la question précédente, que se passe-t-il lorsque $V_0 = 0$? Et lorsque $E \gg V_0$?

EXERCICE N°7: Evolution d'une particule dans un potentiel inconnu

On considère un faisceau de particules incidentes, de masse m et d'énergie E , se déplaçant selon un axe $[Ox]$ et provenant de $x \rightarrow -\infty$. Chaque particule est soumise à un champ de force qui dérive d'une énergie potentielle $V(x)$. On admet que cette énergie s'annule pour $x \rightarrow \pm\infty$. On donne ci-dessous l'allure de la densité de probabilité de présence de chacune des particules. On précise que les oscillations qui apparaissent sont sinusoïdales:



- ❶ L'état de chaque particule quantique est-il un état lié ou un état de diffusion? Justifier clairement.
- ❷ Quelle interprétation peut-on donner aux oscillations de la densité de probabilité de présence pour $x \leq -\frac{a}{2}$, et $x \in [-\frac{a}{2}; \frac{a}{2}]$? Commenter également la forme de la densité de probabilité de présence pour $x > \frac{a}{2}$. Comparer avec le comportement qu'aurait une particule classique.
- ❸ En supposant que l'énergie potentielle $V(x)$ est constante par morceaux, déterminer son allure possible en fonction de x .

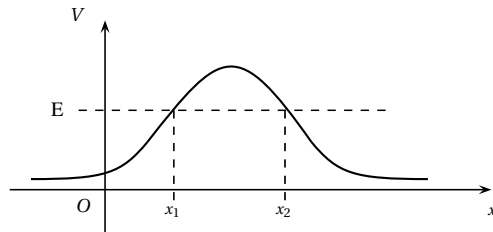
- ④ Proposer une expression pour la partie spatiale $\varphi(x)$ de la fonction d'onde de l'état stationnaire de la particule pour chacun des domaines d'espace. Indiquer les conditions de raccordement à vérifier.

EXERCICE N°8: Barrière épaisse dans l'approximation "BKW" pour Brillouin, Kramers, et Wentzel

L'approximation BKW est une méthode de résolution approchée de l'équation de Schrödinger indépendante du temps à une dimension suivant (Ox):

$$\frac{d^2}{dx^2}\varphi(x) + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x)] \varphi(x) = 0$$

Elle permet notamment d'évaluer le coefficient de transmission en probabilité T d'une particule à travers une barrière de potentiel $V(x)$ classiquement infranchissable et de forme quelconque:



On recherchera des solutions la forme $\varphi(x) = e^{\frac{i}{\hbar}S(x)}$ avec $S(x)$ grandeur mécanique appelée action. L'approximation BKW consiste développer l'action $S(x)$ en puissance de \hbar avec:

$$S(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \sigma_n(x) \cdot \left(\frac{\hbar}{i}\right)^n = \sigma_0(x) + \frac{\hbar}{i}\sigma_1(x) + \mathcal{O}\left[\left(\frac{\hbar}{i}\right)^2\right]$$

et en ne gardant au maximum que les deux premiers termes du développement. La validité de cette approximation est assurée lorsque le potentiel varie lentement sur des échelles comparables à la longueur d'onde de la particule (**condition (E)**).

- ① On s'intéresse dans un premier temps à la particule dans le domaine avant la barrière $x \in [-\infty, x_1[$ pour lequel la particule possède une énergie $E > V(x)$.

- a. Rappeler la relation liant l'énergie E , l'impulsion $p(x)$ et le potentiel $V(x)$. Montrer alors que l'équation de Schrödinger indépendante du temps conduit aux deux conditions suivantes si on limite le développement de l'action $S(x)$ au premier ordre en \hbar :

$$2\sigma'_0(x)\sigma'_1(x) + \sigma''_0(x) = 0 \quad \text{et} \quad \sigma'_0(x) = \pm p(x)$$

- b. En déduire que dans l'approximation BKW, $\varphi(x)$ s'écrit:

$$\varphi_{BKW}(x) = C_1 (E - V(x))^{-\frac{1}{4}} \cdot e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^x p(u) du} + C_2 (E - V(x))^{-\frac{1}{4}} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^x p(u) du}$$

- c. Montrer que dans le cas où $V(x) = V_0 = \text{cste}$ (toujours dans l'hypothèse $E > V(x)$), on retrouve une onde de De Broglie associée à la particule.
d. Le résultat du b.) montre une divergence de la fonction d'onde au point d'abscisse x_1 de franchissement de la barrière. Que devient l'impulsion $p(x_1)$ de la particule sur ce point? En déduire que la condition de validité (E) de l'approximation BKW évoquée en énoncé est alors violée.

- ② Dans le cas où la particule franchit l'abscisse x_1 et se trouve sous la barrière de potentiel, on a $E < V(x)$. On recherche là-encore une solution de la forme $\varphi(x) = e^{\frac{i}{\hbar}S(x)}$, mais en limitant cette fois le développement de $S(x)$ à l'ordre 0 en $\frac{\hbar}{i}$.

Montrer que la résolution de l'équation de Schrödinger conduit, pour le seul cas physique, à:

$$\sigma_0(x) = i \int_{x_1}^x [2m(V(u) - E)]^{1/2} \cdot du$$

Montrer finalement que l'expression du coefficient de transmission de la barrière $T = \left| \frac{\varphi(x_2)}{\varphi(x_1)} \right|^2$, s'écrit dans l'approximation BKW:

$$T_{BKW} \simeq e^{-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(V(x) - E)} \cdot dx}$$