Université Paris Diderot - Paris 7
L3 Physique 2018-2019

# Mécanique quantique
# Travaux dirigés n°6

## Equation de Schrödinger et particules dans un potentiel (I)

## 1 Particule Libre

L'équation de Schrödinger s'écrit

$$i\hbar \frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle \tag{1}$$

avec, pour une particule *libre* évoluant dans un espace à une dimension ($V(x) = 0$) :

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} \tag{2}$$

Dans tout cet exercice on se placera en représentation "position", c'est à dire qu'on travaillera avec la fonction d'onde $\psi(x,t)$, composante du ket $|\psi(t)\rangle$ sur la base des kets $|x\rangle$. On rappelle que, dans cette représentation, l'opérateur impulsion $\hat{p}_x$ agit comme $-i\hbar\frac{d}{dx}$ sur une fonction d'onde $\psi(x)$.

**a)** A l'aide des informations qui précédent, retrouver l'équation de Schrödinger à une dimension pour la fonction d'onde $\psi(x,t)$ associée à l'état $|\psi(t)\rangle$.

**b)** Schrödinger a établi son équation en cherchant à ce que les ondes planes de vecteur d'onde $k$ et de pulsation $\omega$ soit solutions de son équation, pour des particules libres d'énergie $E$ et d'impulsion $p$, avec la correspondance $E = \hbar\omega$ et $p = \hbar k$. Quelle relation (dite de dispersion) entre $\omega$ et $k$ devra être satisfaite pour qu'il y ait un lien entre la mécanique classique et la mécanique quantique ?

**c)** Montrer que l'onde plane $|k\rangle$, de fonction d'onde donnée par

$$\langle x|k\rangle \equiv \psi_k(x) = Ae^{ikx}, \tag{3}$$

est un état propre de l'opérateur impulsion $\hat{p}_x$, avec pour valeur propre $p = \hbar k$, et du Hamiltonien $\hat{p}^2/2m$, avec une valeur propre $E$ qu'on calculera. Comment appelle-t-on les états propres de l'opérateur Hamiltonien, et comment ces états évoluent-ils temporellement d'après l'équation (1) ?

**d)** Vérifier qu'en effet les ondes planes $\psi_k(x,t) = Ae^{i(kx-\omega t)}$ sont solutions de l'équation de Schrödinger, exprimée en représentation de position, si et seulement si $\omega$ et $k$ sont reliés par la relation de dispersion décrite plus haut.

**e)** On considère maintenant une particule dans un potentiel $V(x) = V_0$ uniforme. Vérifiez que les ondes planes sont toujours solutions de l'équation de Schrödinger et commentez la nouvelle forme de la relation de dispersion $\omega = \omega(k)$.

## 2 Correspondance avec la mécanique classique et théorème de Ehrenfest

Soit un ket $|\psi(t)\rangle$ évoluant selon l'équation de Schrödinger dans un espace de Hilbert $\mathcal{H}$, sous le hamiltonien $\hat{H}$, dont on suppose qu'il ne dépend pas explicitement du temps : $\partial\hat{H}/\partial t = 0$ .

**a)** A partir de l'équation de Schrödinger pour le ket $|\psi(t)\rangle$, écrire l'équation différentielle conjuguée que satisfait le bra $\langle\psi(t)|$.

**b)** Soit une observable quelconque $\hat{A}$. Rappellez la définition de sa valeur moyenne dans l'état $|\psi\rangle$, notée $\langle A\rangle$, et calculer sa dérivée temporelle $d\langle A\rangle/dt$ : montrer que :

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{A}\rangle = \frac{i}{\hbar}\left\langle\left[\hat{H},\hat{A}\right]\right\rangle . \tag{4}$$

Ce résultat est connu sous le nom de *théorème d'Ehrenfest.*

**c)** En déduire la version quantique du théorème de conservation de l'énergie mécanique : $d\langle H\rangle/dt = 0$.

**d)** Classiquement, un point matériel de masse $m$ sujet à un potentiel $V(x)$ a énergie mécanique [1],

$$E_m = \frac{p^2}{2m} + V(x) \tag{5}$$

où l'impulsion $p = m\dot{x}$. Montrer que l'équation de Newton (cf. le PFD) peut s'écrire sous forme hamiltonienne :

$$\dot{x} = \frac{\partial E_m}{\partial p} \tag{6}$$

$$\dot{p} = -\frac{\partial E_m}{\partial x} \tag{7}$$

**e)** A l'aide du théorème d'Ehrenfest (Eq.(4)) établir les équations donnant l'évolution temporelle des valeurs moyennes $\langle\hat{x}\rangle$ et $\langle\hat{p}\rangle$, en fonction des commutateurs $[\hat{H},\hat{x}]$ et $[\hat{H},\hat{p}]$. Ce sont ces commutateurs que l'on cherche à calculer dans la suite.

**f)** Démontrer tout d'abord, pour tous opérateurs $\hat{A}$ et $\hat{B}$, que $[\hat{A}^2,\hat{B}] = [\hat{A},\hat{B}]\hat{A} + \hat{A}[\hat{A},\hat{B}]$. Comment se simplifie cette relation si $[\hat{A},[\hat{A},\hat{B}]] = 0$ ?

**g)** Démontrer la formule (dite de la dérivée sous le commutateur) :

$$[f(\hat{A}),\hat{B}] = [\hat{A},\hat{B}]f'(\hat{A}) \tag{8}$$

où $\hat{A}$ et $\hat{B}$ sont deux opérateurs tels que $[\hat{A},[\hat{A},\hat{B}]] = 0$ et $f$ une fonction qu'on suppposera analytique [2].

**h)** A l'aide de la formule (8) vérifier qu'avec le commutateur

$$[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar, \tag{9}$$

on retrouve les équations de la mécanique classique (Eqs.(6)-(7)) *en valeurs moyennes.*

---

1. On abandonne la notation $p_x$ et on note simplement $p = p_x$ l'impulsion selon $x$ : à une dimension, il n'y a pas de confusion possible.

2. On pourra le démontrer par récurrence sur $n$ pour une fonction $f(x) = x^n$, puis généraliser à toute fonction qui est développable en série entière. Voir aussi l'exercice 2 du TD5.

## 3 Puits quantique

On considère ici une particule de masse $m$ dans un puits de potentiel à une dimension de largeur $2a$ (voir figure 1). Le potentiel est donné par

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & -\infty < x < -a \quad \text{(region I)} \\ 0 & -a \leq x \leq a \quad \text{(region II)} \\ V_0 & a < x < +\infty \quad \text{(region III)} \end{cases} . \tag{10}$$

On s'intéresse aux états stationnaires d'énergie $0 \leq E < V_0$.

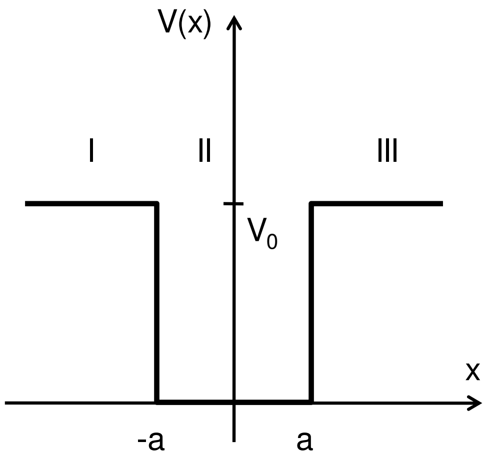



FIGURE 1 – Schéma d'un puits quantique. Ce potentiel peut être réalisé concrètement par une couche très fine d'un matériau semi-conducteur (GaAs) intercalée entre deux couches plus épaisses d'un autre semi-conducteur (Al-GaAS). Son nom provient du fait que dans cette structure, le potentiel vu par les électrons a la forme d'un puits.

**a)** Écrire l'équation de Schrödinger pour la fonction d'onde $\varphi(x,t)$ de cette particule.

**b)** Rappeler, dans le cas général d'un potentiel $V(x)$, l'expression de l'équation de Schrödinger pour les états stationnaires d'énergie $E$, décrits par une fonction d'onde $\psi(x)$. Expliciter la relation entre $\psi(x)$ et les fonctions $\varphi(x,t)$ du point précédent.

**c)** On considère maintenant le potentiel (10). On cherche une solution $\psi(x)$ définie par morceaux, dans chacune des régions I, II, et III. Dans chaque région, écrire l'équation vérifiée par la fonction d'onde $\psi(x)$ et en donner la solution générale.

**d)** Expliquer pourquoi les solutions pour les états stationnaires doivent avoir la forme :

$$\begin{aligned} \text{I :} \quad & \psi(x) = Ce^{+qx} \\ \text{II :} \quad & \psi(x) = A\cos kx + B\sin kx \\ \text{III :} \quad & \psi(x) = De^{-qx} \end{aligned}$$

et donner les expressions de $q$ et $k$.

**e)** Montrer que le hamiltonien commute avec l'opérateur (hermitique) parité $\hat{\Pi}$ défini par $\langle x|\hat{\Pi}|\psi\rangle = \bar{\psi}(x) = \psi(-x)$. En déduire que les solutions peuvent être classées en deux types : les solutions paires qui vérifient $\psi(-x) = \psi(x)$ et les solutions impaires qui vérifient $\psi(-x) = -\psi(x)$.

**f)** Ecrire les conditions de raccordement de la fonction d'onde au point $x = a$ pour les solutions paires et pour les solutions impaires. En déduire les relations suivantes

$$\frac{q}{k} = \tan(ka) \quad \text{(solutions paires)}$$
$$\frac{q}{k} = -\mathrm{cotan}(ka) \quad \text{(solutions impaires)}$$

Expliquer pourquoi ces relations sont des équations de quantification de l'énergie des états stationnaires (ne pas chercher à les résoudre).

**g)** On peut résoudre graphiquement ces équations en posant $y = qa$, $x = ka$ et en remarquant que $x^2 + y^2 = 2mV_0a^2/\hbar^2 \equiv R^2$. Il s'agit de l'équation d'un cercle dans le plan $(x, y)$. Les solutions des équations de quantification sont alors données par les intersections entre ce cercle et les courbes $y = x\tan(x)$ et $y = -x\,\mathrm{cotan}(x)$ avec $x > 0$ et $y > 0$. Tracer l'allure de ces courbes dans le plan $xy$. En déduire que si $V_0 < \pi^2\hbar^2/(8ma^2)$ il n'existe qu'un seul état stationnaire.

**h)** Montrer que le nombre $N$ d'états quantifiés, pour $N \gg 1$, est donné par

$$N \simeq \frac{2a\sqrt{2mV_0}}{\pi\hbar}\,. \tag{11}$$

A.N. : $V_0 = 0.4$ eV, $m = 6 \times 10^{-31}$ Kg et $a = 5$ nm.

**i)** Montrer alors que le fondamental a pour énergie $E_0 \simeq \pi^2\hbar^2/(8ma^2)$.

**j)** En considérant le système dans son état fondamental, montrer qu'il y a une probabilité non nulle de détecter la particule hors du puits et que la distance typique sur laquelle cette probabilité est non-nulle est donnée par

$$\lambda = \frac{2a}{\pi\sqrt{N^2-1}} \approx \frac{a}{N}\,. \tag{12}$$

Comparer avec la mécanique classique : quel serait le mouvement classique d'une particule d'énergie $E_0$, dans un tel puits de potentiel ?

# 4 Puits de potentiel asymétrique infini à gauche

On se propose d'étudier les états stationnaires d'une particule de masse $m$ et d'énergie $E$ dans un potentiel $U(z)$ tel que : $U(z) = \infty$ pour $z < 0$ (région I), $U(z) = 0$ pour $0 < z \leq a$ (région II) et $U(z) = U_0$ pour $z > a$ (région III). L'énergie de la particule est telle que : $0 < E < U_0$.

— Ecrire l'équation de *Schrödinger* à laquelle satisfait la particule. Pour une fonction d'onde de la forme $\psi(z,t) = \varphi(z)exp(-iEt/\hbar)$, écrire l'équation que doit vérifier $\varphi(z)$. Montrer que sa résolution conduit à $\varphi_{II}(z) = Asin(kz+b)$ et $\varphi_{III}(z) = Bexp(Kz)+Cexp(-Kz)$. Donner $k$ et $K$ en fonction de l'énergie de la particule.

— Ecrire les conditions que doit satisfaire la fonction d'onde en tous points du domaine. En déduire son expression en fonction de $k$, $K$, $a$ et de $A$. Déterminer $A$.
— Trouver la relation entre $k$ et $K$ pour qu'il existe des états stationnaires liés. Montrer à partir de cette relation que la condition de quantification s'écrit $\tan ka = -k/K$.
— En remarquant que $k^2 + K^2 = R^2$ où $R$ est une constante, proposer une résolution graphique qui permet de trouver les solutions. Donner la condition sur $U_0$ pour qu'il existe au moins un état lié.
— Ce modèle de potentiel peut être utilisé pour décrire l'interaction entre un atome d'hydrogène et un atome de chlore qui forme alors une molécule $HCl$. Dans ce cas, $U_0 = 4,43\ eV$, représente l'énergie potentielle de liaison de cette molécule à la distance interatomique typique $a = 0.13\ nm$. Sachant que le numéro atomique du chlore est $Z_{Cl} = 17$, justifier le fait que l'on peut considérer que l'atome de chlore est fixe. Justifier physiquement la forme du potentiel modélisant la molécule $HCl$. Montrer que l'application numérique conduit à une valeur de $Ra >> 1$. Donner une approximation pour obtenir les premières valeurs de $ka$ et donc de l'énergie.

# 5 Radioactivité $\alpha$

Certains noyaux ${}^A_Z X$ de masse élevée présentent la particularité de se désintégrer en un noyau $Y$ en émettant un noyau d'hélium ${}^4_2 He$ (appelé dans ce cas *particule* $\alpha$) selon la réaction : ${}^A_Z X \rightarrow {}^{A-4}_{Z-2} Y + \alpha$. Ce processus peut être interprété à l'aide de l'effet tunnel. Pour le modéliser, on admet que la particule $\alpha$ de masse $m_\alpha$ préexiste à l'intérieur du noyau où elle subit des forces nucléaires intenses mais de très courte portée, $r_0$ (cf. Figure 1) avant de sortir du noyau.
Lorsque la particule $\alpha$ est émise ($r > r0$) l'influence des forces nucléaires s'atténue très rapidement et seule subsiste la force coulombienne répulsive entre le noyau de ${}^{A-4}_{Z-2} Y$ et la particule $\alpha$.
On considère un noyau de thorium caractérisé par un "rayon" $x_0 = 8,5\ Fm$ qui émet des particules $\alpha$ dont l'énergie cinétique (mesurée loin du noyau) est $E_c = 7,3\ MeV$.
On ne s'intéresse qu'aux états stationnaires et on schématise l'énergie potentielle dans le noyau par une barrière de potentiel à une dimension de hauteur $U_0 = 30\ MeV$ avec $x_0 = r_0$ et une largeur $a = 11,9\ Fm$ (cf. Figure 2) :

$$U(x) = \infty \quad \textit{pour } x \leq 0 \quad U(x) = 0 \quad \textit{pour } x \in [0, x_0]$$

$$U(x) = U_0 \quad \textit{pour } x \in [x_0, x_0 + a] \quad U(x) = 0 \quad \textit{pour } x \geq x_0 + a$$

— Ecrire l'équation de *Schrödinger* dans chacune des trois régions.
— Donner les solutions générales des équations précédentes dans les trois régions. On posera :

$$k^2 = \frac{2m_\alpha E}{\hbar^2} \qquad K^2 = \frac{2m_\alpha}{\hbar^2}(U_0 - E)$$

— Donner l'interprétation physique des solutions dans la région III.

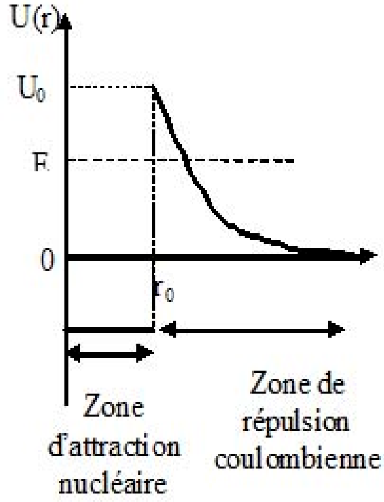



Figure 1 Energie potentiel U(r) à laquelle est soumise la particule $\alpha$ en fonction de sa distance r au noyau.

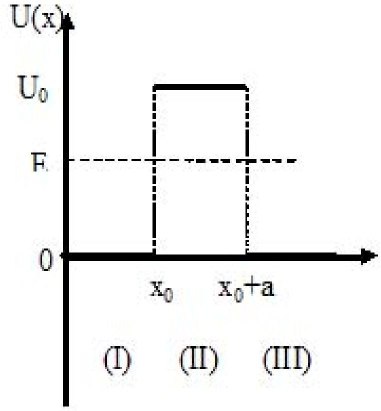



Figure 2 Energie potentiel simplifiée U(x) par laquelle on modélise le potentiel de la figure 1.

— Contraindre les fonctions d'onde solutions afin que ces dernières soient physiquement acceptables.
— Ecrire les conditions de continuité des fonctions d'onde.
— Le calcul du coefficient de transmission nécessite de transformer le modèle car celui ci conduit à une situation paradoxale : bien que les états soient stationnaires, les courants (de probabilités) ne sont pas conservés (pour le plaisir, vérifier cela). Après avoir calculé les différentes amplitudes avec ce nouveau modèle, on trouve pour le coefficient de transmission $T$ :

$$T = (1 + (\frac{k^2 + K^2}{2kK})^2) \sinh^2 Ka)^{-1}$$

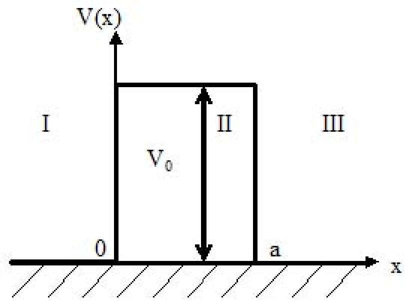
Estimer numériquement $Ka$. En déduire une formule approchée de la probabilité de détecter une particule $\alpha$ dans la région III en fonction de $e^{-Ka}$.
— Le nombre $N(t)$ de noyaux ${}^A_Z X$ qui restent à l'instant $t$ est $N(t) = N(0)e^{-\lambda t}$ où $N(0)$ est le nombre initial de ces noyaux. La période radioactive $\tau$ est par définition le temps au bout duquel le nombre initial de noyaux instables est divisé par deux. Représenter $N(t)$.
— Donner la signification physique de $\lambda$ en précisant son unité.
— Trouver la relation entre $\lambda$ et $\tau$.
— On revient au problème d'une particule $\alpha$ confinée dans un noyau. On suppose que la particule $\alpha$ préexistante dans le noyau parcourt le "diamètre" du noyau $2x_0$ à vitesse constante, en effectuant des "aller-retours". Montrer que dans l'approximation $m_\alpha \sim 4m_p$ le nombre $n$ d'aller-retours par seconde à pour expression :

$$n = \frac{1}{2x_0}\sqrt{\frac{E}{2m_p}}$$

— Calculer le nombre de noyaux qui se désintègrent par seconde.

## 6 Effet Tunnel

Soit une particule de masse $m$ dans un potentiel tel que $V(x) = V_0 > 0$ pour $0 < x < a$ et $V(x) = 0$ ailleurs. On se propose d'étudier la réflexion et la transmission de cette particule dans la situation où son énergie est telle que $0 < E < V_0$.




— Résoudre l'équation de *Schrödinger* indépendante du temps dans les trois régions de l'espace (notées I, II et III).
— Ecrire les conditions aux limites en $x = 0$ et $x = a$.
— Montrer que le coefficient de transmission $T$ est donné par :

$$T = (1 + \frac{V_0^2 \sinh^2(\sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}}a)}{4E(V_0 - E)})^{-1}$$

— En déduire l'expression du coefficient de réflexion.

## 7 Modèle d'une molécule $H_2^+$.

On considère la fonction $\delta_\epsilon(x)$ telle que :

$$\delta_\epsilon(x) = \{1/\epsilon \text{ si } -\epsilon/2 \leq x \leq \epsilon/20 \text{ ailleurs} \tag{13}$$

1. Soit $f(x)$ une fonction définie pour $x = 0$. Montrer que

$$\lim_{\epsilon \longrightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{dx}\, \delta_\epsilon(\mathrm{x})\, \mathrm{f(x)} = \mathrm{f(0)} \tag{14}$$

   On définit alors la "*fonction*" $\delta(x)$ par $\delta(x) = \lim_{\epsilon \longrightarrow 0} \delta_\epsilon(\mathrm{x})$ ou encore par $\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\, \delta(x)\, dx = f(0)$
2. Une particule de masse $m$ et d'énergie $E < 0$ est soumise au potentiel $V(x) = -\alpha\delta(x)$. Calculer la discontinuité de la dérivée de la fonction d'onde en intégrant l'équation de Schrödinger de part et d'autre de la discontinuité du potentiel.
3. Montrer qu'il n'existe qu'un seul état lié pour cette particule dont calculera l'énergie.

On se propose d'étudier la molécule $\mathrm{H}_2^+$ formée de deux protons de charge $-q_e$ et d'un unique électron de masse $m_e$ et de charge $q_e$. On suppose pour l'instant que les protons sont fixes aux point d'abscisses $x = -\ell$ et $x = +\ell$ et on schématise le potentiel attractif coulombien des deux protons par deux puits de potentiels en fonction $\delta$. Le potentiel auquel est soumis l'électron est donc

$$V(x) = -\alpha\delta(x+\ell) - \alpha\delta(x-\ell) \tag{15}$$

où $\alpha$ est une constante positive.
On ne s'intéresse qu'aux états liés d'énergie négative et on pose $q^2 = -2m_eE/\hbar^2$, où $q$ est réel positif.

1. En utilisant le fait que le potentiel est une fonction paire de $x$, donner la forme de la fonction d'onde paire et de la fonction d'onde impaire dans les trois régions $x < -\ell$, $-\ell < x < \ell$ et $x > \ell$.
2. En calculant la discontinuité de la dérivée de la fonction d'onde en $x = \ell$, montrer que l'on a les relations suivantes
$$\coth q\ell = \frac{1}{\frac{2m\alpha}{\hbar^2 q} - 1} \tag{16}$$
pour les solutions paires, et
$$\mathrm{th}\, q\ell = \frac{1}{\frac{2m\alpha}{\hbar^2 q} - 1} \tag{17}$$
pour les solutions impaires.
3. En posant $q_0 = 2m\alpha/\hbar^2$ et en mettant le second membre des équations précédentes sous la forme $q\ell/(q_0\ell - q\ell)$, discuter graphiquement les solutions $(q\ell)$ de ces deux équations. Examiner les deux cas limites $\ell \to 0$ et $\ell \to \infty$ et déterminer à partir de quelle valeur de $q_0$, et donc de $\alpha$, il existe deux solutions.
4. Tracer l'allure des courbes $E(\ell)$ pour les solutions paire et impaire.
5. En ajoutant à ces courbes l'énergie de répulsion électrostatique entre les deux protons, $q_e^2/4\pi\varepsilon_0 2\ell$, montrer que la solution paire conduit à une courbe présentant un minimum alors que la solution impaire varie de façon monotone.