

**Filière SMP-S4**  
**TD de Mécanique Quantique 1**  
**Série N° 2**

**Exercice 1 : Longueur d'onde associée aux électrons**

On envoie un faisceau d'électrons monocinétiques d'énergie cinétique  $E$  sur un métal. Ces électrons pénètrent profondément dans ce métal et sont alors soumis à un potentiel  $-V_0$  (avec  $V_0 > 0$ ). On peut modéliser ce potentiel par :

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{pour } x \leq 0 \text{ (électrons dans le vide)} \\ -V_0 & \text{pour } 0 \leq x \text{ (électrons dans le métal)} \end{cases}$$

Les électrons traversant le métal sont alors diffractés et l'on peut observer, expérimentalement, leur longueur d'onde associée. Calculer celle-ci en fonction de  $E$  et  $V_0$ , en supposant que les énergies mises en jeu sont suffisamment faibles pour que l'approximation non relativiste soit valable.

**Exercice 2 : Paquet d'onde et vitesse de groupe**

A- On associe à une particule se déplaçant suivant  $x$ , un paquet d'ondes planes d'amplitude  $A_n(k)$ .

Chacune de ces ondes s'écrit :

$$\psi_n(x, t) = A_n(k) e^{i(k_n x - \omega_n t)}$$

On s'intéresse à trois ondes particulières du paquet, de vecteurs d'onde  $\mathbf{k}_0$ ,  $\mathbf{k}_0 - \frac{\Delta \mathbf{k}}{2}$  et  $\mathbf{k}_0 + \frac{\Delta \mathbf{k}}{2}$  (avec  $\Delta k \ll k_0$ ) et de pulsations respectives  $\omega_0$ ,  $\omega_0 - \Delta\omega/2$  et  $\omega_0 + \Delta\omega/2$  (avec  $\Delta\omega \ll \omega_0$ ). L'onde  $\mathbf{k}_0$  est d'amplitude  $A(k_0)$  les deux autres d'amplitude  $\frac{1}{2} A(k_0)$ .

- 1-Déterminer la fonction d'onde  $\Psi(\mathbf{x}, \mathbf{t})$ , somme des trois ondes précédentes.
- 2-Calculer la position du maximum de  $\Psi(\mathbf{x}, \mathbf{t})$ . En déduire la vitesse de propagation de ce maximum (vitesse de groupe) lorsque  $\Delta \mathbf{k}$  est très petit.
- 3-Exprimer la vitesse de groupe en fonction de la vitesse de phase et de la longueur d'onde.
- 4-Calculer la largeur de ce paquet d'ondes à l'instant initial ( $t=0$ ). En déduire une forme approchée du principe d'incertitude.

**Exercice 3 : Relation d'incertitude de Heisenberg**

On considère une particule quantique dont la fonction d'onde s'écrit  $\varphi(x) = N e^{-\frac{|x|}{a}}$  avec  $a > 0$ .

- 1) Calculer la valeur de la constante N pour que  $\varphi(x)$  soit normée.
- 2) Tracer la densité de probabilité de présence  $|\varphi(x)|^2$  en fonction de x.
- 3) Calculer la probabilité de trouver la particule dans l'intervalle  $[0, \infty[$
- 4) En choisissant par convention la largeur  $\Delta x$  de la fonction  $\varphi(x)$  par la largeur de l'intervalle  $[-x_0, x_0]$  où  $x_0$  correspond à la valeur maximale de  $\varphi$  divisée par le nombre e, donner la valeur de  $\Delta x$ . La TF de  $\varphi(x)$  est définie par  $\tilde{\varphi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipx/\hbar} \varphi(x) dx$ .

Calculer la TF  $\tilde{\varphi}(p)$  et évaluer sa largeur  $\Delta p$  en adoptant la même convention que pour  $\varphi(x)$ , calculer dans l'état  $\varphi(x)$ . Vérifier que la relation d'incertitude de Heisenberg est bien satisfaite.

#### **Exercice 4 (facultatif) : Domaines d'application de la relation d'incertitude de Heisenberg**

- a. Si l'on suppose que le rayon de l'orbite de Bohr  $a_0 = 0,529 \text{ \AA}$  est connu à 1% près, calculer  $\Delta v$  incertitude sur la vitesse de l'électron de masse  $9,1 \cdot 10^{-31} \text{ Kg}$ . Conclusion ?
- b. Si l'on suppose que la position d'une bille de masse 1 g est connue au  $\mu\text{m}$  près, quelle est l'incertitude sur sa vitesse ? Conclusion ?
- c. Un automobiliste féru de mécanique quantique à été pris par un radar à 120 Km/h au volant de sa voiture de 1500 Kg. Il invoque le principe d'incertitude d'Heisenberg pour contester le P.V. A-t-il raison ? (on suppose  $\Delta x = 30\text{m}$ )

#### **Réponses**

- a.  $\Delta x = 0,529 \cdot 10^{-10} \cdot 0,01 = 0,529 \cdot 10^{-12} \text{ m}$  ;  $\Delta v > 1,05 \cdot 10^8 \text{ m.s}^{-1}$ . A l'échelle des objets quantiques, le principe de Heisenberg est incontournable.
- b.  $\Delta x = 10^{-6} \text{ m}$  ;  $\Delta v > 0,5 \cdot 10^{-25} \text{ m.s}^{-1}$ . Cette incertitude sur la vitesse est infime, la vitesse est connue avec toute la précision voulue. A l'échelle macroscopique le principe d'Heisenberg ne joue aucun rôle.
- c.  $\Delta x = 30 \text{ m}$  ;  $\Delta v > 8,4 \cdot 10^{-39} \text{ Km.h}^{-1}$  incertitude négligeable et notre automobiliste n'aura donc aucune chance d'échapper à son P.V !

#### Détails de l'exo 4

$$\Delta x \Delta p > \hbar/2$$

a.  $\Delta x / x = 0,1 \% = 0,01$

$$\Delta x = 0,529 \cdot 10^{-10} \cdot 0,01 = 0,529 \cdot 10^{-12} \text{ m}$$

$$\Delta v > \hbar / (4 \pi m \Delta x)$$

$$\Delta v > 6,62 \cdot 10^{-34} / (4 \cdot \pi \cdot 9,31 \cdot 10^{-31} \cdot 0,529 \cdot 10^{-12}) = 1,05 \cdot 10^8 \text{ m.s}^{-1}$$

Cette incertitude sur la vitesse est énorme puisqu'elle est de l'ordre de grandeur de la plus grande vitesse existante, celle de la lumière dans le vide  $c = 3 \cdot 10^8 \text{ m.s}^{-1}$ .

Si on connaît avec précision la position de l'électron on ne sait rien sur sa vitesse ou son énergie. A l'échelle des objets quantiques, le principe de Heisenberg est incontournable.

b.  $\Delta x = 10^{-6} \text{ m}$

$$\Delta v > \hbar / (4 \pi m \Delta x)$$

$$\Delta v > 6,62 \cdot 10^{-34} / (4 \cdot \pi \cdot 10^{-31} \cdot 10^{-6}) = 0,5 \cdot 10^{-25} \text{ m.s}^{-1}$$

Cette incertitude sur la vitesse est infime, la vitesse est connue avec toute la précision voulue.

A l'échelle macroscopique le principe d'Heisenberg ne joue aucun rôle.

c. En une seconde le véhicule parcourt 33,33 m.

Supposons donc que la position du véhicule soit connue à 30 m près.

$$\Delta x = 30 \text{ m}$$

$$\Delta v > \hbar / (4 \pi m \Delta x)$$

$$\Delta v > 6,62 \cdot 10^{-34} / (2 \cdot \pi \cdot 1500 \cdot 30) = 2,34 \cdot 10^{-39} \text{ m.s}^{-1} = 8,4 \cdot 10^{-39} \text{ Km.h}^{-1}$$

Cette incertitude sur la vitesse est infime, la vitesse est donc connue avec toute la précision voulue.

A l'échelle macroscopique le principe d'Heisenberg ne joue aucun rôle et notre automobiliste n'aura donc aucune chance d'échapper (sur ce seul motif quantique) à son P.V.

**Exercice 2 : Forme du paquet d'ondes à un instant donné**

La forme du paquet d'ondes est donnée par la dépendance en  $x$

de  $\psi(x, 0)$  définie par l'égalité (a) ( $\psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int g(k) e^{ikx} dk$ ).

Supposons que  $|g(k)|$  ait l'allure représentée sur la figure 3, c'est-à-dire présente un pic prononcé dont le maximum est situé en  $k = k_0$  et dont la largeur (définie par exemple à mi-hauteur) a pour valeur  $\Delta k$ .

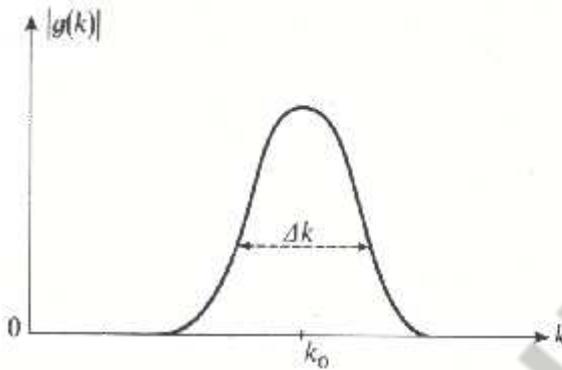


FIGURE 3  
Allure de la fonction  $|g(k)|$  [module de la transformée de Fourier de  $\psi(x, 0)$ ] : on suppose que cette fonction présente un pic, de largeur  $\Delta k$ , centré en  $k = k_0$ .

Commençons par chercher à comprendre qualitativement le comportement de  $\psi(x, 0)$  en étudiant un cas particulier très simple :  $\psi(x, 0)$ , au lieu d'être la superposition d'une infinité d'ondes planes  $e^{ikx}$  comme dans la formule (a), est la somme de trois ondes planes seulement; ces ondes planes ont pour vecteurs d'onde  $k_0 - \frac{\Delta k}{2}$ ,  $k_0$ , et  $k_0 + \frac{\Delta k}{2}$ , et leurs amplitudes respectives sont proportionnelles à  $1, 1/2$  et  $1/2$ . On a alors :

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \frac{g(k_0)}{\sqrt{2\pi}} \left[ e^{ik_0 x} + \frac{1}{2} e^{i(k_0 - \frac{\Delta k}{2})x} + \frac{1}{2} e^{i(k_0 + \frac{\Delta k}{2})x} \right] \\ &= \frac{g(k_0)}{\sqrt{2\pi}} e^{ik_0 x} \left[ 1 + \cos\left(\frac{\Delta k}{2} x\right) \right] \end{aligned} \quad (b)$$

On voit que  $|\psi(x)|$  est maximal lorsque  $x = 0$ ; ce résultat est dû au fait

que, lorsque  $x$  prend cette valeur, les trois ondes sont en phase et interfèrent constructivement, comme le montre la figure 4. Au fur et à mesure que l'on s'écarte de la valeur  $x = 0$ , les ondes se déphasent l'une

par rapport à l'autre, et  $|\psi(x)|$  décroît. L'interférence devient complètement destructive lorsque le déphasage entre  $e^{ik_0x}$  et  $e^{i(k_0 \mp \Delta k/2)x}$  est égal à  $\pm\pi$  :  $|\psi(x)|$  s'annule lorsque  $x = \pm \frac{\Delta x}{2}$ ,  $\Delta x$  étant donné par :

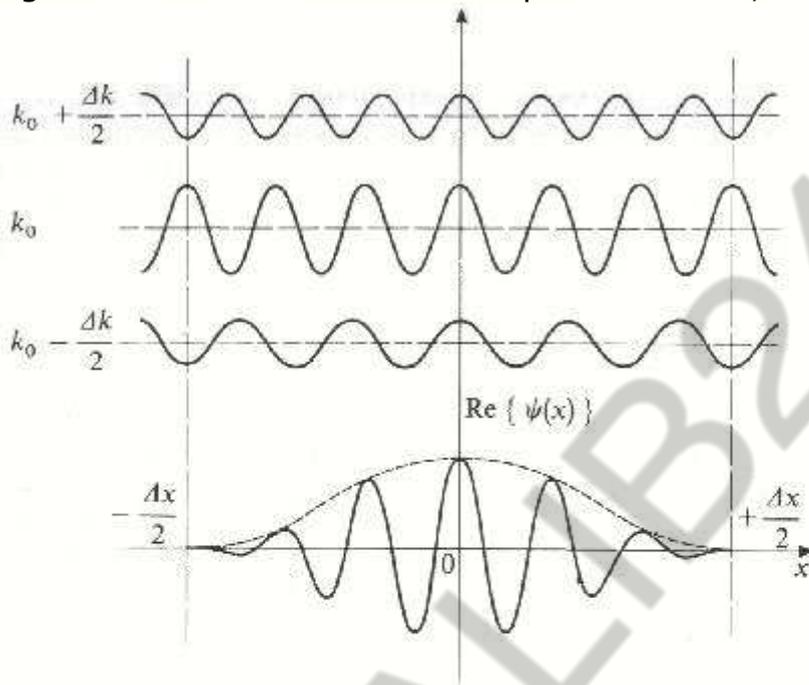


FIGURE 4

Parties réelles des trois ondes dont la somme donne la fonction  $\psi(x)$  écrite en (C-10). En  $x = 0$ , les trois ondes sont en phase et interfèrent constructivement; lorsqu'on s'écarte de  $x = 0$ , elles se déphasent les unes par rapport aux autres et interfèrent destructivement pour  $x = \pm \Delta x/2$ .

Sur la partie inférieure de la figure, on a représenté  $\text{Re} \{ \psi(x) \}$ . La courbe en traits tirés correspond à la fonction  $\left[ 1 + \cos \left( \frac{\Delta k}{2} x \right) \right]$  qui, d'après (C-10), donne  $|\psi(x)|$  (c'est-à-dire la forme du paquet d'ondes).

$$\Delta x \cdot \Delta k = 4\pi \quad (c)$$

Cette formule indique que la largeur  $\Delta x$  de la fonction  $|\psi(x)|$  (distance entre deux zéros de  $|\psi(x)|$ ) est d'autant plus grande que la largeur  $\Delta k$  de la fonction  $|g(k)|$  est plus petite.

REMARQUE :

- La formule (b) montre que  $|\psi(x)|$  est périodique en  $x$ , et présente donc une série de maximums et minimums. Ceci provient du fait que  $\psi(x)$  est la superposition d'un nombre fini d'ondes (ici trois); pour une superposition continue d'une infinité d'ondes, comme dans la formule (a), un tel phénomène ne se produit pas, et peut n'avoir qu'un seul maximum.

Revenons maintenant au paquet d'ondes général de la formule (a); sa forme résulte aussi d'un phénomène d'interférences :  $|\psi(x, 0)|$  est maximal lorsque les différentes ondes planes interfèrent de manière constructive.

Soit en effet  $\alpha(k)$  l'argument de la fonction  $g(k)$  :

$$g(k) = |g(k)|e^{i\alpha(k)} \quad (d)$$

Supposons que  $\alpha(k)$  varie de façon suffisamment régulière dans l'intervalle  $\left[ k_0 - \frac{\Delta k}{2}, k_0 + \frac{\Delta k}{2} \right]$  où  $|g(k)|$  est appréciable; on peut alors, lorsque  $\frac{\Delta k}{k = k_0}$  est suffisamment petit, développer  $\alpha(k)$  au voisinage de  $k = k_0$  :

$$\alpha(k) = \alpha(k_0) + (k - k_0) \left[ \frac{d\alpha}{dk} \right]_{k=k_0} \quad (e)$$

ce qui permet de réécrire (a) sous la forme :

$$\psi(x, 0) \simeq \frac{e^{i[k_0 x + \alpha(k_0)]}}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} |g(k)| e^{i(k-k_0)(x-x_0)} dk \quad (f)$$

avec :

$$x_0 = - \left[ \frac{d\alpha}{dk} \right]_{k=k_0} \quad (g)$$

La forme (f) est commode pour étudier les variations de  $|\psi(x, 0)|$  en fonction de  $x$  : lorsque  $|x - x_0|$  est grand, la fonction de  $k$  à intégrer oscille un très grand nombre de fois dans l'intervalle  $\Delta k$  ; on voit alors que les contributions des oscillations successives s'annulent entre elles et que l'intégrale sur  $k$  prend une valeur négligeable. En d'autres termes, lorsque  $x$  est fixé à une valeur éloignée de  $x_0$ , les phases des diverses ondes qui composent  $\psi(x, 0)$  varient très rapidement dans le domaine  $\Delta k$ , et ces ondes se détruisent par interférence. Par contre, si  $x \simeq x_0$ , la fonction à intégrer sur  $k$  n'oscille pratiquement plus, et  $|\psi(x, 0)|$  est maximal.

La position  $x_M(0)$  du centre du centre du paquet d'ondes est donc :

$$x_M(0) = x_0 = - \left[ \frac{d\alpha}{dk} \right]_{k=k_0} \quad (h)$$

En pratique, le résultat (h) peut être retrouvé par un raisonnement très simple. Une intégrale comme celle qui apparaît dans (a) sera maximale (en module) lorsque les ondes d'amplitude la plus grande, c'est-à-dire celles qui correspondent à  $k$  voisin de  $k_0$ , interfèrent de manière constructive. Ceci se produit lorsque la phase de ces ondes, qui dépend de  $k$ , ne varie pratiquement pas autour de  $k = k_0$ . Pour obtenir le centre du paquet d'ondes, on écrit donc (**condition de phase stationnaire**) que la dérivée par rapport à  $k$  de la phase s'annule en  $k = k_0$ . Dans le cas particulier qui nous occupe, la phase de l'onde

correspondant à  $\underline{k}$  est  $\frac{kx + \alpha(k)}{x + d\alpha/dk}$ , et  $x_M(0)$  est la valeur de  $\underline{x}$  qui annule la dérivée prise pour  $k = k_0$ .

Lorsque  $\underline{x}$  s'écarte de la valeur  $x_0$ ,  $|\psi(x, 0)|$  décroît; cette décroissance devient appréciable si  $e^{i(k-k_0)(x-k_0)}$  oscille à peu près une fois lorsque  $\underline{k}$  parcourt le domaine  $\underline{\Delta k}$ , c'est-à-dire lorsque :

$$\Delta k \cdot (x - x_0) \simeq 1$$

Si  $\Delta x$  est la largeur approximative du paquet d'ondes, on a donc :

$$\Delta k \cdot \Delta x \gtrsim 1$$

Nous retrouvons ainsi une relation classique entre les largeurs de deux fonctions transformées de Fourier l'une de l'autre. Le fait important est que le produit  $\underline{\Delta x} \cdot \underline{\Delta k}$  est borné inférieurement; la valeur exacte de cette borne dépend bien sûr de la définition précise des largeurs  $\Delta x$  et  $\Delta k$ .

REMARQUE :

- Le raisonnement précédent pourrait faire croire que le produit  $\underline{\Delta x} \cdot \underline{\Delta k}$  est toujours de l'ordre de 1. Insistons sur le fait qu'il s'agit là d'une limite inférieure : s'il est impossible de construire des paquets d'ondes où le produit  $\underline{\Delta x} \cdot \underline{\Delta k}$  soit négligeable devant  $\underline{1}$ , il est parfaitement possible d'en construire pour lesquels ce produit est aussi grand qu'on le désire.

### Exercice 1 : Particule traversant une falaise de potentiel

Une particule quantique de masse  $m$  et énergie  $E > 0$  approche une falaise de potentiel définie par :

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{pour } x < 0 \\ -V_0 & \text{pour } x > 0 \end{cases}$$

(avec  $V_0 > 0$ )

1. Quel est le mouvement classique ?
2. Résoudre l'équation de Schrödinger dans les deux régions.
3. Etudier le coefficient de réflexion de la particule. Quelle est la probabilité pour qu'une particule d'énergie  $E = V_0/2$  fasse demi-tour ? Commenter le résultat.

### Exercice 2 : Puits de Dirac « Delta » - Etats liés

On considère une particule de masse  $m$  et d'énergie  $E < 0$ , placée dans potentiel à une dimension de type « delta » centré au point  $a$ , tel que  $V(x) = -\alpha V_0 \delta(x) - \alpha V_0 \delta(x-a)$  ( $\delta$ :distribution de Dirac et  $\alpha$  : constante réelle positive,  $V_0 > 0$ ).

- 1) Préciser la dimension de  $\alpha$  et montrera que la solution de l'équation de Schrödinger peut s'écrire

$$\varphi(x) = \begin{cases} Ae^{q(x-a)} & \text{pour } x \leq a \\ Be^{-q(x-a)} & \text{pour } x \geq a \end{cases} \text{ avec } q = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} \text{ et } A, B, \text{ des constantes d'intégration.}$$

- 2) Monter que la dérivée première de  $\varphi$  est discontinue aux points  $x_0=0$  et  $x_0=a$  et que

$$\varphi'(x_0^+) - \varphi'(x_0^-) = -\frac{2m\alpha V_0}{\hbar^2} \varphi(x_0)$$

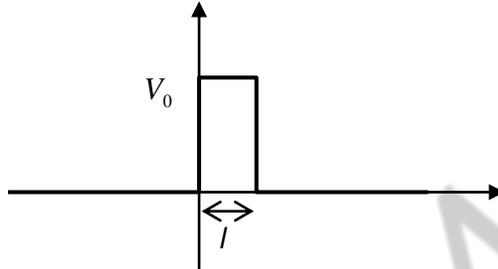
- 3) Ecrire les conditions de raccordement de  $\varphi$  et  $\varphi'$  au point  $a$ .
- 4) Montrer qu'il y a un seul état lié dont on déterminera la fonction d'onde normalisée  $\varphi_0$  et l'énergie  $E_0$ . Calculer la probabilité de trouver la particule dans la région  $x \geq a$ .

### Exercice 3 : Diffusion à travers une barrière « Delta »

On considère maintenant la diffusion d'une particule de masse  $m$  et d'énergie  $E > 0$  par un potentiel de Dirac centré au point  $a$ , tel que  $V(x) = \alpha V_0 \delta(x-a)$  ( $\delta$ :distribution de Dirac et  $\alpha$  : constante réelle positive,  $V_0 > 0$ ).

- 5) Ecrire l'équation de Schrödinger de la fonction d'onde  $\varphi$  associée à cette particule et montrer que la solution peut s'écrire
- $$\varphi(x) = \begin{cases} A e^{ik(x-a)} + B e^{-ik(x-a)} & \text{pour } x \leq a \\ C e^{ik(x-a)} & \text{pour } x \geq a \end{cases} \quad \text{avec } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \text{ et } A, B, C \text{ des constantes d'intégration.}$$
- 6) Ecrire les conditions de raccordement de  $\varphi$  et  $\varphi'$  au point  $x_0 = a$ .
- 7) Calculer le coefficient de transmission de la particule et son allure. Préciser ses limites pour les faibles et pour les fortes valeurs de l'énergie.

#### Exercice 4 : Effet tunnel et applications



1. On considère une particule de masse  $m$  d'énergie  $E$  arrivant sur barrière de potentiel, de hauteur  $V_0$  et d'épaisseur  $l$ . On se limitera au cas où  $0 < E < V_0$ , cas où la physique classique interdit à la particule de franchir la barrière.

Ecrire la fonction d'onde solution de l'équation de Schrödinger. Montrer qu'elle peut s'écrire :

$$\psi_I(x) = A_1 e^{ik_1 x} + A'_1 e^{-ik_1 x}$$

$$\psi_I(x) = B_2 e^{\rho_2 x} + B'_2 e^{-\rho_2 x}, \text{ toujours avec } k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \text{ et } \rho_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}.$$

$$\psi_I(x) = A_3 e^{ik_1 x} + A'_3 e^{-ik_1 x}$$

Ecrire les conditions de raccordement en  $x=0$  et en  $x=l$  et montrer que les coefficients de réflexion et de transmission pour la barrière s'expriment comme suit:

$$R = \left| \frac{A'_1}{A_1} \right|^2 = \frac{(k_1^2 + \rho_2^2)^2 \operatorname{sh}^2 \rho_2 l}{4k_1^2 \rho_2^2 + (k_1^2 + \rho_2^2)^2 \operatorname{sh}^2 \rho_2 l} = \frac{V_0^2 \operatorname{sh}^2 \rho_2 l}{4E(V_0 - E) + V_0^2 \operatorname{sh}^2 \rho_2 l}$$

$$T = \left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2 = \frac{4k_1^2 \rho_2^2}{4k_1^2 \rho_2^2 + (k_1^2 + \rho_2^2)^2 \operatorname{sh}^2 \rho_2 l} = \frac{4E(V_0 - E)}{4E(V_0 - E) + V_0^2 \operatorname{sh}^2 \rho_2 l}$$

Discuter le cas d'une barrière épaisse pour laquelle  $\rho_2 l \gg 1$ .

Donner l'ordre de grandeur de  $T$  dans les cas suivants:

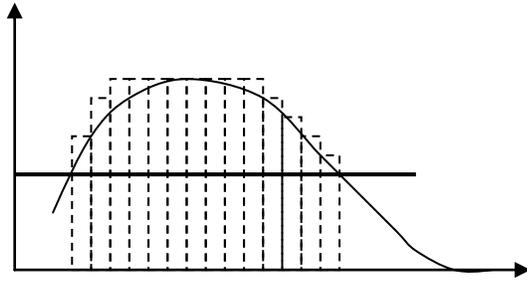
- un électron d'énergie 1eV et une barrière d'énergie 2eV et de largeur 1 Å.
- un proton, de masse 1840 fois plus grande avec la même barrière
- un cycliste de 70kg arrivant à 36km/h sur une colline abrupte de 20m de haut et 50m de large.

On a alors  $V_0 = mgz = 14kJ$  et  $E = 3,5kJ$ .

2. **Barrière de forme quelconque:**

A l'issue des résultats précédents, on a :  $\ln T \approx -2\rho_1 l + \ln \frac{16E(E-V_0)}{V_0^2}$  et on peut même utiliser la

formule approchée  $\ln T = -2\rho_2 l$  (toujours dans le cas  $\rho_2 l \gg 1$ ) .



L'objectif de cette partie est d'utiliser cette remarque pour permettre de déterminer le coefficient de transmission d'une barrière épaisse de forme quelconque.

Pour cela, considérer une barrière de forme quelconque et découper-la en tranches rectangulaires d'épaisseur  $dx$ , suffisamment épaisses pour que l'approximation précédente soit valable. La probabilité de trouver la particule dans  $x+dx$  est la probabilité pour qu'elle soit en  $x$  multipliée par la probabilité de transmission à travers une bande c-à-d :  $P(x+dx) = T(x)P(x) = P(x)e^{-2\rho_2 dx}$ . Ecrire l'équation différentielle satisfaite par  $P(x)$ . Montrer que le coefficient de transmission pour l'ensemble (entre  $x_1$  et  $x_2$ ) s'écrit alors:

$$T = \frac{P(x_2)}{P(x_1)} = \exp\left(-2\int_{x_1}^{x_2} \rho_2(x) dx\right) = \exp\left(-2\int_{x_1}^{x_2} \frac{\sqrt{2m(V(x)-E)}}{\hbar} dx\right).$$

### 3. Applications: Radioactivité $\alpha$

Le phénomène de la radioactivité  $\alpha$  est l'émission de particules  $\alpha$  par un noyau à  $Z_2$  proton, en interaction avec une particule de  $Z_1$  protons avec des énergies inférieures à la barrière du potentiel qui les retient en principe dans ce noyau.

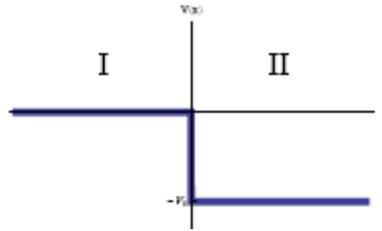
On modélise le potentiel à franchir par la fonction  $V(r) = \begin{cases} \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = \frac{K}{r} & \text{pour } r > r_0 \\ 0 & \text{pour } r < r_0 \end{cases}$

En appliquant alors la loi établie précédemment pour un potentiel de ce type, que  $\ln T = a + \frac{b}{\sqrt{E}}$ , qui est la loi **Gamow-Condon-Gurney** liant la durée de vie d'un noyau radioactif  $\alpha$  à l'énergie  $E$  des particules  $\alpha$  qu'il émet. (**Aide** : on intégrera entre  $r_0$  et  $r_1$  tels que  $K/r_1 = E$ ).

A.N : on considérera le cas concret de l'Uranium 238 où  $r_0 = 3,5 \text{ fermi} = 3,5 \cdot 10^{-15} \text{ m}$  et  $E = 4.3 \text{ MeV}$ .

**Exercice 1: Falaise de potentiel**

1. En mécanique classique la particule franchit la falaise avec une vitesse plus grande pour  $x > 0$ . L'équation de Schrödinger s'écrit  $\varphi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\varphi(x) = 0$ .



2.

Dans la région ( $x < 0$ ),  $V(x) = 0$ , ce qui donne  $\varphi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2}E\varphi(x) = 0$ , soit  $\varphi''(x) + k^2\varphi(x) = 0$ , en posant  $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ , et la solution de cette dernière équation s'écrit  $\varphi(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$  où A et B sont des constantes d'intégration complexes.

Dans la région ( $x > 0$ ), on a  $V(x) = -V_0$ , ce qui donne  $\varphi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E + V_0)\varphi(x) = 0$ , soit  $\varphi''(x) + k'^2\varphi(x) = 0$ , en posant  $k'^2 = \frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2}$ , et la solution de cette dernière équation s'écrit  $\varphi(x) = Ce^{ik'_1x} + De^{-ik'_1x}$  où C et D' sont des constantes complexes. Mais comme dans cette région, on n'a pas d'autre obstacle, donc pas de réflexion, d'où  $D = 0$ .

$$\varphi(x) = \begin{cases} Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} & \text{pour } x \leq 0 \\ Ce^{ik'_1x} & \text{pour } x \geq 0 \end{cases}$$

Conditions de continuité au point  $x = 0$

$$A + B = C \quad (1)$$

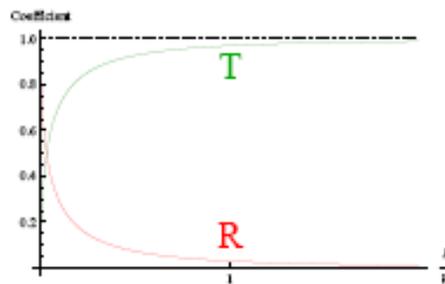
$$ik_1A - ik_1B = ik'_1C \quad (2)$$

En multipliant l'équation (1) par  $ik'_1$  et en faisant la différence  $ik'_1(1)-(2)$ , on trouve

$$(k'_1 - k_1)A + (k'_1 + k_1)B = 0, \text{ d'où } \frac{B}{A} = \frac{k_1 - k'_1}{k_1 + k'_1} = r$$

D'autre part, le coefficient de réflexion qui indique la probabilité pour que la particule fasse demi-tour à son arrivée sur la falaise, est donné par  $R = |r|^2$ .

$$R = \frac{(\sqrt{E} - \sqrt{E + V_0})^2}{(\sqrt{E} + \sqrt{E + V_0})^2}$$



Coefficients de réflexion R et de transmission  $T = 1 - R$  pour une « falaise » quantique

Pour  $E=V_0/2$ , on a  $R = \frac{(\sqrt{E} - \sqrt{E+V_0})^2}{(\sqrt{E} + \sqrt{E+V_0})^2} = \frac{(\sqrt{\frac{V_0}{2}} - \sqrt{\frac{3V_0}{2}})^2}{(\sqrt{\frac{V_0}{2}} + \sqrt{\frac{3V_0}{2}})^2} = \frac{(1-\sqrt{3})^2}{(1+\sqrt{3})^2} = \frac{2-\sqrt{3}}{2+\sqrt{3}} \approx 7\% !$

Il s'agit d'un phénomène purement quantique.

**Exercice 2 : Puits « Delta »- Etats liés**

A partir de la propriété fondamentale de la distribution de Dirac

$$\int_{ex}^b \varphi(x)\delta(x-x_0)dx = \varphi(x_0) \text{ pour } x_0 \in [e, b], \text{ on peut remarquer que } \delta \text{ est homogène à l'inverse du longueur, donc}$$

$\alpha V_0$  aura la dimension d'une « longueur X énergie », c'est à dire que  $\alpha$  est homogène à une longueur.

L'équation de Schrödinger s'écrit  $\varphi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\varphi(x) = 0$ .

Dans la région ( $x < a$ ),  $V(x)=0$ , ce qui donne  $\varphi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2}E\varphi(x) = 0$ , soit  $\varphi''(x) - q^2\varphi(x) = 0$ , en posant

$q^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2}$ , et la solution de cette dernière équation s'écrit  $\varphi(x) = Ae^{q_1(x-a)} + A'e^{-q_1(x-a)}$  où  $A'$  et  $A$  sont des

constantes d'intégration. Et pour garantir la convergence de  $\varphi$  dans cette région, notamment lorsque  $x \rightarrow -\infty$ , on doit prendre  $A' = 0$ .

Dans la région  $x > a$ ; on a aussi  $V(x)=0$ , soit  $\varphi''(x) - q^2\varphi(x) = 0$  avec  $q^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2}$ . La solution est de la

forme  $\varphi(x) = Be^{-qx} + B'e^{q_1x}$  et pour que  $\varphi$  reste bornée lorsque  $x \rightarrow +\infty$ , on doit imposer  $B' = 0$ . D'autre part, on peut multiplier la solution par le facteur  $e^{qa}$  ce qui donne, dans cette région :  $\varphi(x) = Be^{-q(x-a)}$ .

Au point  $a$ , le potentiel présente un saut brusque sous forme de pic de Dirac. La dérivée première  $\varphi'$  est donc discontinue en  $x_0 = a$ . Tenant compte de la propriété fondamentale de la distribution de

Dirac  $\int_e^b \varphi(x)\delta(x-x_0)dx = \varphi(x_0)$  pour  $x_0 \in [e, b]$ , l'intégration de l'équation de Schrödinger autour de  $x_0 = a$

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} [\varphi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E + \alpha V_0 \delta(x))\varphi(x-x_0)]dx = 0 \text{ ce qui donne } \varphi'(x_0+) - \varphi'(x_0-) = -\frac{2m\alpha V_0}{\hbar^2}\varphi(x_0)$$

Exprimons maintenant les conditions de raccordement au point  $x_0 = 0$ .

$\varphi(a-) = \varphi(a+) \Leftrightarrow A = B$  (Fonction d'onde paire par rapport au point  $a$ ).

$\varphi'(a+) - \varphi'(a-) = -\frac{2m\alpha V_0}{\hbar^2}\varphi(a) \Leftrightarrow -qB - qA = \frac{-2m\alpha V_0}{\hbar^2}A$

Les conditions de raccordement de la fonction d'onde  $\varphi$  et sa dérivée  $\varphi'$  au point  $a$  se résument donc comme suit :

$$\begin{cases} A = B \\ 2q = \frac{2m\alpha V_0}{\hbar^2} \end{cases}$$

Donc

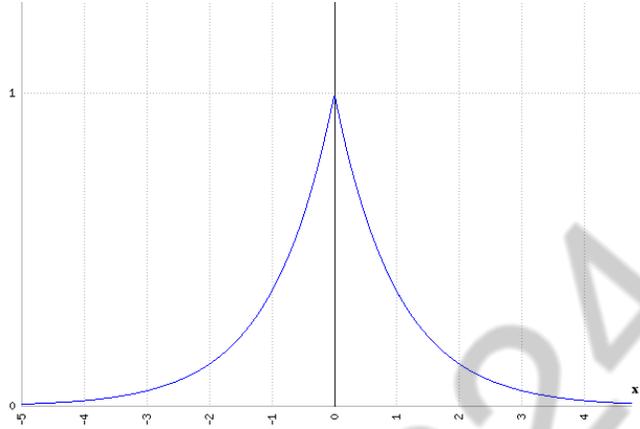
$$\begin{cases} \varphi(x) = Ae^{-q|x-a|} \\ -q^2 = \frac{-2mE}{\hbar^2} = -\left(\frac{m\alpha V_0}{\hbar^2}\right)^2 \text{ ou encore } \end{cases} \begin{cases} \varphi(x) = Ae^{-q|x-a|} \\ q^2 = \left(\frac{m\alpha V_0}{\hbar^2}\right)^2 = \frac{-2mE_0}{\hbar^2} \Leftrightarrow E_0 = -\frac{m\alpha^2 V_0^2}{2\hbar^2} < 0 \end{cases}$$

ce qui montre qu'il y a une seule solution correspondant à un état lié ( $E < 0$ ) d'énergie

$$E_0 = -\frac{m\alpha^2 V_0^2}{2\hbar^2} < 0 \text{ et de fonction d'onde } \varphi_0(x) = Ae^{-q|x-a|}$$

La normalisation de  $\varphi_0$  s'écrit :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi_0(x)|^2 dx = 1 \Leftrightarrow A = \sqrt{q} = \left[\frac{m\alpha V_0}{\hbar^2}\right]^{1/2} \text{ donc } \varphi_0(x) = \left[\frac{m\alpha V_0}{\hbar^2}\right]^{1/2} e^{-q|x-a|}$$



Probabilité de présence dans la région  $x > a$

$$P_+ = \int_0^{+\infty} |\varphi_0(x)|^2 dx = |A|^2 \int_0^{+\infty} e^{-2q(x-a)} dx = |A|^2 \frac{1}{2q} = \frac{q}{2q} = \frac{1}{2}$$

**Remarque :** On trouve la même probabilité de présence dans la région  $x < a$ .

### Exercice 3 : Diffusion à travers un Puits « Delta »

Dans la région ( $x < a$ ),  $V(x)=0$ , ce qui donne  $\varphi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2} E \varphi(x) = 0$ , soit  $\varphi''(x) + k^2 \varphi(x) = 0$ , en posant

$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ , et la solution de cette dernière équation s'écrit  $\varphi(x) = Ae^{ik_1(x-a)} + Be^{-ik_1(x-a)}$  où  $A'$  et  $A$  sont des constantes d'intégration.

Dans la région  $x > a$  ; on a aussi  $V(x)=0$ , soit  $\varphi''(x) + k^2 \varphi(x) = 0$  avec  $k^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2}$ . La solution est de la forme

$\varphi(x) = C'e^{-ik(x-a)} + Ce^{i(x-a)}$  et comme il n'y a pas d'autre obstacle pour  $x > a$ , il n'y aura pas d'onde « réfléchie » dans cette région, on doit donc imposer  $C'=0$  ce qui donne, dans cette région :  $\varphi(x) = Ce^{ik(x-a)}$ .

Au point  $a$ , le potentiel présente un saut brusque sous forme de pic de Dirac. La dérivée première  $\varphi'$  est donc discontinue en  $x_0 = a$ . Tenant compte de la propriété fondamentale de la distribution de

Dirac  $\int_e^b \varphi(x) \delta(x-x_0) dx = \varphi(x_0)$  pour  $x_0 \in [e, b]$ , l'intégration de l'équation de Schrödinger autour de  $x_0 = a$

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} [\varphi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2} (E + \alpha V_0 \delta(x))] \varphi(x-x_0) dx = 0 \text{ ce qui donne } \varphi'(x_0+) - \varphi'(x_0-) = -\frac{2m\alpha V_0}{\hbar^2} \varphi(x_0)$$

Exprimons maintenant les conditions de raccordement au point  $x_0 = a$ .

$\varphi(a^-) = \varphi(a^+) \Leftrightarrow A + B = C$  (Fonction d'onde paire par rapport au point a).

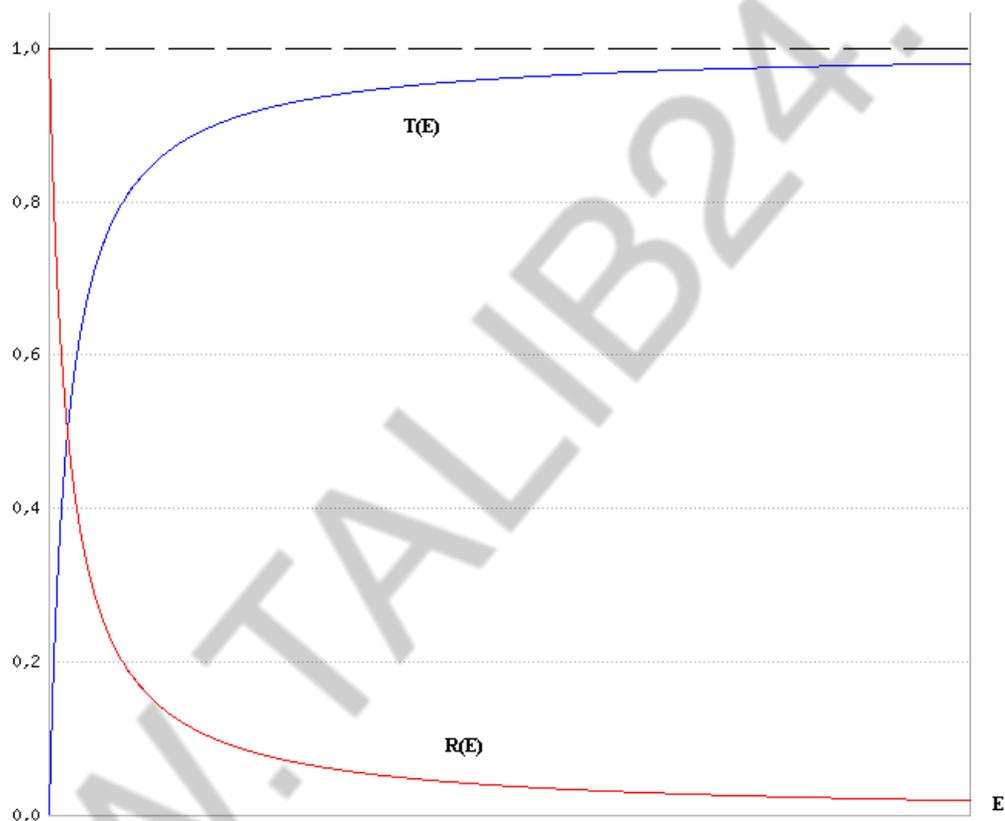
$$\varphi'(a^+) - \varphi'(a^-) = -\frac{2m\alpha V_0}{\hbar^2} \varphi(a) \Leftrightarrow ikC - ikA + ikB = \frac{-2m\alpha V_0}{\hbar^2} C$$

Les conditions de raccordement de la fonction d'onde  $\varphi$  et sa dérivée  $\varphi'$  au point a se résument donc comme suit :

$$\begin{cases} A + B = C \\ A - B = \left(\frac{2m\alpha V_0}{i\hbar^2} + 1\right)C \end{cases} \rightarrow \begin{cases} 2A = \left(\frac{2m\alpha V_0}{i\hbar^2} + 2\right)C \\ 2B = \left(\frac{2m\alpha V_0}{i\hbar^2} - 1\right)C \end{cases} \rightarrow A = \left(\frac{m\alpha V_0}{i\hbar^2} + 1\right)C$$

Le coefficient de transmission est donné par  $T = \frac{|C|^2}{|A|^2}$  soit

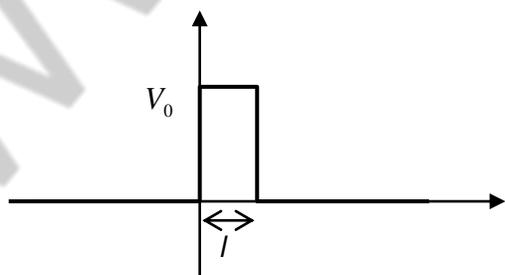
$$T = \frac{1}{\left(\frac{m\alpha V_0}{\hbar^2}\right)^2 + 1} = \frac{1}{\frac{\Delta}{E} + 1} \text{ avec } \Delta = \frac{m\alpha^2 V_0^2}{\hbar^2}$$



k petit (énergie faible)  $T \rightarrow 0$

k grand (énergie forte)  $T \rightarrow 1$

#### Exercice 4 : Effet tunnel & applications



On considère à présent une barrière de potentiel, toujours de hauteur  $V_0$  et d'épaisseur  $l$ . Nous nous limiterons toujours au cas où  $0 < E < V_0$ , cas où la physique classique interdit à la particule de franchir la barrière.

Dans ce cas, il y a une probabilité de transmission non nulle, contrairement aux prévisions classiques. En effet, au regard des résultats sur la marche de potentiel (qui est ce qu'une particule venant de  $-\infty$  voit en premier lieu), on voit qu'il suffit que la longueur  $l$  soit inférieure à  $\rho_B^{-1}$  pour que la zone où la densité de probabilité prend des valeurs notables s'étendent jusqu'à l'autre extrémité de la barrière et qu'elle s'étende alors jusqu'à l'infini. Il s'agit en fait d'un phénomène analogue au phénomène de réflexion totale frustrée dans le cas de la réflexion d'une onde électromagnétique sur une feuille métallique d'épaisseur inférieure à l'épaisseur de peau déjà rencontrée en électromagnétisme.

Ecrivons alors les solutions de l'équation de Schrödinger aux états stationnaires. On trouve immédiatement:

$$\begin{aligned}\psi_I(x) &= A_1 e^{ik_1 x} + A'_1 e^{-ik_1 x} \\ \psi_I(x) &= B_2 e^{\rho_2 x} + B'_2 e^{-\rho_2 x}, \text{ toujours avec } k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \text{ et } \rho_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}. \\ \psi_I(x) &= A_3 e^{ik_1 x} + A'_3 e^{-ik_1 x}\end{aligned}$$

Ici on ne peut pas annuler à priori  $B_2$ , puisque une réflexion en  $x=l$  est possible, mais par contre, en considérant qu'il n'y a pas de dispositif réflecteur à l'infini, on peut écrire  $A'_3 = 0$ . Les conditions de raccordement en  $x=0$  et en  $x=l$  donnent les coefficients en fonction par exemple de  $A_3$ , et on en tire les coefficients de réflexion et de transmission pour la barrière:

$$\begin{aligned}R &= \left| \frac{A'_1}{A_1} \right|^2 = \frac{(k_1^2 + \rho_2^2)^2 sh^2 \rho_2 l}{4k_1^2 \rho_2^2 + (k_1^2 + \rho_2^2)^2 sh^2 \rho_2 l} = \frac{V_0^2 sh^2 \rho_2 l}{4E(V_0 - E) + V_0^2 sh^2 \rho_2 l} \\ T &= \left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2 = \frac{4k_1^2 \rho_2^2}{4k_1^2 \rho_2^2 + (k_1^2 + \rho_2^2)^2 sh^2 \rho_2 l} = \frac{4E(V_0 - E)}{4E(V_0 - E) + V_0^2 sh^2 \rho_2 l}\end{aligned}$$

Dans le cas d'une barrière épaisse, on a  $\rho_2 l \gg 1$ .

On a à ce moment là  $sh^2 \rho_2 l = \frac{e^{2\rho_2 l}}{4}$  et  $4E(V_0 - E) \ll V_0^2 sh^2 \rho_2 l$ .

Le coefficient de transmission s'écrit alors:

$$T = \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-2\rho_2 l}$$

On voit alors que la probabilité décroît de manière exponentielle lorsque  $l$  augmente ou que  $(\rho_2)^{-1}$  diminue.

On peut alors donner quelques ordres de grandeur :

- Electron d'énergie** 1eV et une barrière d'énergie 2eV et de largeur  $1 \text{ \AA}$ . La longueur caractéristique de pénétration vaut alors  $1,96 \text{ \AA}$ . La formule donne alors  $T = 0,78$ , ce qui indique que l'électron a 80% de chances de franchir la barrière par effet tunnel.
- Proton**, de masse 1840 fois plus grande, la longueur de pénétration vaut  $4,5610^{-2} \text{ \AA}$ , ce qui signifie qu'avec la même barrière le proton a beaucoup moins de chance de passer. En effet ici  $T = 4.10^{-19}$

6. Enfin, au niveau macroscopique on peut se demander quelle est la probabilité pour qu'un cycliste de  $70\text{kg}$  arrivant à  $36\text{km/h}$  sur une colline abrupte de  $20\text{m}$  de haut et  $50\text{m}$  de large. On a alors  $V_0 = mgz = 14\text{kJ}$  et  $E = 3,5\text{kJ}$ . La longueur de pénétration du paquet d'onde associé au cycliste vaut alors  $8,210^{-38}\text{m}$  et donc le coefficient de transmission vaut alors:  $e^{-\rho_2 l} = e^{-6.10^{38}} \lllll 1$ . La petitesse de la constante de Planck rend cet effet inexistant au niveau microscopique. On ne doit donc pas essayer de traverser un mur par effet tunnel!

### Barrière de forme quelconque:

A l'issue de ces résultats, on peut écrire que  $\ln T = -2\rho_2 l + \ln \frac{16E(E-V_0)}{V_0^2}$ . On peut utiliser, toujours

dans le cas  $\rho_2 l \gg 1$ , la formule approchée  $\ln T = -2\rho_2 l$ .

Cette remarque va nous permettre de déterminer le coefficient de transmission d'une barrière épaisse de forme quelconque.

Prenons donc une barrière de forme quelconque et découpons la en tranche rectangulaire d'épaisseur  $dx$ , suffisamment épaisses pour que l'approximation

précédente soit valable. La probabilité pour que la particule soit en  $x+dx$  est la probabilité pour qu'elle soit en  $x$  multipliée par la probabilité de transmission à travers une bande soit:

$P(x+dx) = T(x)P(x) = P(x)e^{-2\rho_2 l}$ . On aboutit alors à l'équation différentielle  $\frac{dP(x)}{dx} = -2\rho_2(x)P(x)$ . Le

coefficient de transmission pour l'ensemble s'écrit alors:

$T = \frac{P(x_2)}{P(x_1)} = \exp\left(-2\int_{x_1}^{x_2} \rho_2(x)dx\right) = \exp\left(-2\int_{x_1}^{x_2} \frac{\sqrt{2m(V(x)-E)}}{\hbar} dx\right)$ . Cette formule a de nombreuses applications

dans l'étude de cas théoriques, comme nous le verrons plus tard. Cependant, avant de regarder les

applications de l'effet tunnel, regardons le résultat obtenu. Celui-ci se met sous la forme  $T = e^{-\frac{A}{\hbar}}$ , où il est clair que  $A$  désigne une grandeur d'action caractéristique. On constate ici un résultat qui délimite les bornes où l'on peut appliquer les résultats de la mécanique classique: celle-ci donnera de bons résultats (dans le cas qui nous intéresse  $T \lllll 1$ ) si  $A \gg \hbar$ , c'est-à-dire si l'action caractéristique du problème étudié est bien supérieure à  $\hbar$ . On constate également le rôle fondamental que joue la constante de Planck, et en particulier sa petitesse.

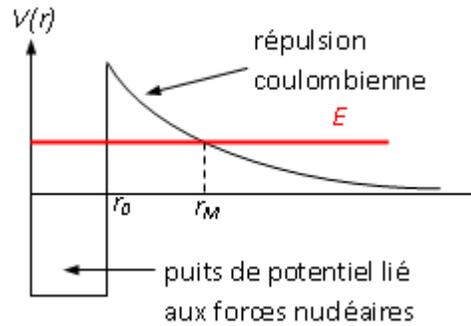
### Applications: Radioactivité $\alpha$

L'explication de la radioactivité  $\alpha$  constitua un succès historique majeur pour la mécanique quantique dont il constitua la première application au noyau atomique. Le phénomène de la radioactivité  $\alpha$  est l'émission de particules  $\alpha$  par un noyau, avec des énergies inférieures à la barrière du potentiel qui les retient en principe dans ce noyau.

On modélise le potentiel à franchir par la fonction  $v(r) = \begin{cases} \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} = \frac{K}{r} & r > r_0 \\ 0 & r < 0 \end{cases}$ , inspiré de l'interaction

coulombienne d'un noyau à  $Z_2$  protons et d'une particule à  $Z_1$  protons (par exemple  $92-2=90$  pour l'uranium et 2 pour une particule  $\alpha$ ).

En appliquant alors la loi établie précédemment pour un potentiel de ce type, on obtient que  $\ln T = 2 \int_{r_0}^{r_1} \rho_2(r) dr = -2 \int_{r_0}^{r_1} \frac{\sqrt{2m(V(r)-E)}}{\hbar} dr$ , (puisque pour l'effet tunnel on doit avoir  $E \leq V(r)$ ),  $r_1$  est tel que  $E = \frac{K}{r_1}$



$\ln T = 2 \int_{r_0}^{r_1} \rho_2(r) dr = -2 \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \int_{r_0}^{r_1} \sqrt{\left(\frac{r_1}{r} - 1\right)} dr$ . L'intégrale se calcule facilement en posant

$\cos^2 \theta = \frac{r}{r_1} \rightarrow dr = -2r_1 \sin \theta \cos \theta d\theta$ , ce qui donne  $\ln T = 2 \int_{r_0}^{r_1} \rho_2(r) dr = -2 \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} r_1 \left[ \frac{\sin 2\theta_0}{2} - \theta_0 \right]$  avec

$\cos \theta_0 = \frac{r_0}{r_1} \ll 1 \Rightarrow \theta_0 \approx \frac{\pi}{2} - \varepsilon \approx \frac{\pi}{2} - \sqrt{\frac{r_0}{r_1}}$  et  $E = \frac{K}{r_1} \Rightarrow \sqrt{\frac{r_0}{r_1}} = \sqrt{\frac{r_0 E}{K}}$ , ce qui donne

$\ln T = \frac{4\sqrt{K}}{\hbar} (2mr_0) - \frac{K\pi\sqrt{2m}}{\hbar} \frac{1}{\sqrt{E}} = a + \frac{b}{\sqrt{E}}$  qui est la loi Gamow-Condon-Gurney, qui établit le lien entre

la durée de vie d'un noyau radioactif  $\alpha$ , liée à l'inverse de  $T$  avec l'énergie  $E$  des particules  $\alpha$  qu'il émet. Cette formule est bien confirmée expérimentalement.

### A.N

Réaction de désintégration  $\alpha$  :



$$V(r) = \frac{K}{r}$$

$$K = \frac{2e^2(Z-2)}{4\pi\epsilon_0}$$

**Données numériques :**

- constante de Planck réduite :  $\hbar = 1,05 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$
- masse d'une particule  $\alpha$  :  $m = 3727 \text{ Mev}/c^2 = 6,645 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$
- rayon approximatif d'un noyau de numéro atomique  $A$   
 $r_0 = r_H A^{1/3}$  où  $r_H = 1,2 \text{ fm}$
- constante diélectrique du vide :  $\epsilon_0 = 8,82 \cdot 10^{-12} \text{ F} \cdot \text{m}^{-1}$
- charge de l'électron :  $|e| = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$

On trouve  $T = 4 \cdot 10^{-26}$  !

« TD de Mécanique Quantique »  
Série N° 4

---

**Oscillateur harmonique à une dimension**

**I. Etude Classique**

L'oscillateur harmonique en une dimension est décrit par une coordonnée  $x$  où  $m$  est la masse et  $k$  la constante de raideur  $\omega$  la pulsation. L'impulsion correspondante est  $p = m\dot{x}$ . L'Hamiltonien s'écrit

$$H_{classique} = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \text{ où } \omega \text{ est la pulsation du mouvement : } \omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

1. A partir de la relation fondamentale de la dynamique, établir l'équation différentielle satisfaite par la variable  $x$ . En intégrant cette équation et en tenant compte des conditions initiales  $x(0) = x_0$  et  $p(0) = p_0$ , montrer que  $x(t) = x_0 \cos \omega t + \frac{p_0}{m\omega} \sin \omega t$
2. Une autre façon de décrire l'oscillateur harmonique consiste à introduire la variable complexe  $a$  telle que :  $a(t) = \sqrt{\frac{m\omega}{2}} [x + i \frac{p}{m\omega}]$ . Calculer la variable « conjuguée »  $a^*$  de  $a$  et montrer que  $H_{classique} = \omega a^* a$ .
3. Montrer que l'évolution temporelle de  $a(t)$  est telle que  $a(t) = a(0)e^{i\omega t}$ . En déduire par simple « conjugaison » l'évolution temporelle de  $a^*(t)$ . Montrer alors que  $H = \text{Constante}$  et donner une explication physique à ce résultat.

**II. Etude Quantique**

En mécanique quantique, un oscillateur harmonique à une dimension est aussi une particule de masse  $m$ , en mouvement sinusoïdal sur l'axe  $x'Ox$  avec une pulsation  $\omega$ , soumise à un potentiel quadratique (en  $x^2$ ) et dont le mouvement peut être modélisé par l'Hamiltonien

$$H_Q = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 X^2$$

où on a simplement remplacé les variables  $x$  et  $p$  par les « opérateurs » *position*  $X$  et *impulsion*  $P$  définis par leurs actions sur une fonction d'onde  $\varphi$ , tels que  $X\varphi(x) = x\varphi(x)$  et  $P\varphi(x) =$

$\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \varphi(x)$ . L'Hamiltonien quantique s'écrit donc

$$H_Q = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$$

- 1) Ecrire l'équation de Schrödinger indépendante du temps de ce système pour une fonction propre  $\varphi(x)$  et une énergie propre  $E$ . Que peut-on dire de la parité des fonctions propres  $\varphi(x)$ ?
- 2) On se propose maintenant de résoudre l'équation de Schrödinger. Pour cela, montrer que l'on peut réécrire l'Hamiltonien sous la forme suivante :  $H_Q = \frac{1}{2}\hbar\omega[\hat{P}^2 + \hat{X}^2]$  avec  $\hat{P} = \alpha P$  et  $\hat{X} = \beta X$ .  
Donner l'expression de  $\alpha$  et  $\beta$  en fonction de  $m$ ,  $\omega$  et  $\hbar$ .
- 3) On définit le « commutateur » de deux opérateurs  $A$  et  $B$  par :  $[A, B] = AB - BA$ . Montrer que :  $[X, P] = i\hbar$  et  $[\hat{X}, \hat{P}] = i$  (Pour cela, appliquer simplement  $[A, B]$  sur une fonction d'onde  $\varphi(x)$ ).
- 4) En introduisant les « opérateurs complexes »  $a$  et  $a^+$  définis par  $a = \frac{1}{\sqrt{2}}[\hat{X} + i\hat{P}]$ ,  $a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}[\hat{X} - i\hat{P}]$ ,  
montrer que l'Hamiltonien de l'oscillateur harmonique devient  $H_Q = \frac{1}{2}\hbar\omega[aa^+ + a^+a]$
- 5) Montrer que :  $[a, a^+] = 1$ . En déduire que  $H_Q = \frac{1}{2}\hbar\omega[1 + 2a^+a] = \hbar\omega[a^+a + \frac{1}{2}]$ .
- 6) En tenant compte de ce qui précède, l'équation aux valeurs propres  $H\varphi(x) = E\varphi(x)$  devient,  
 $\hbar\omega[a^+a + \frac{1}{2}]\varphi(x) = E\varphi(x)$  ou encore  $\hbar\omega[N + \frac{1}{2}]\varphi(x) = E\varphi(x)$  avec  $N = a^+a$ . D'autre part, on peut montrer (théorème) que les valeurs propres et les fonctions propres de l'opérateur  $N$  sont données par  $N\varphi_n(x) = n\varphi_n(x)$  et vérifier que  $a\varphi_n(x) = \sqrt{n}\varphi_{n-1}(x)$  pour  $n \geq 1$  et  $a^+\varphi_n(x) = \sqrt{n+1}\varphi_{n+1}(x)$  où  $n$  est un nombre entier naturel positif ou nul ( $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ ).  
Montrer alors que les énergies de l'oscillateur harmonique quantique sont quantifiées :  $E_n = \hbar\omega[n + \frac{1}{2}]$ . Comparer avec le cas classique.
- 7) Montrer qu'à l'état fondamental, la fonction solution de l'équation de Schrödinger s'écrit  $\varphi_0(x) = C e^{-\alpha^2 x^2}$  (avec  $\alpha^2 = \frac{m\omega}{2\hbar}$ ) et l'énergie correspondante  $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$ . Calculer la constante de normalisation  $C$ .
- 8) La valeur moyenne d'une grandeur physique  $A$  dans un état  $\varphi$  est définie par  $\langle A \rangle = \int \varphi^*(x) A \varphi(x) dx$ .  
On reste toujours dans l'état fondamental de fonction propre  $\varphi_0(x)$ . Calculer dans cet état, les valeurs moyennes  $\langle x \rangle$  et  $\langle x^2 \rangle$ . En déduire l'écart quadratique sur la position  $\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$
- 9) Calculer dans ce même état, les valeurs moyennes  $\langle p \rangle$  et  $\langle p^2 \rangle$ . En déduire l'écart quadratique sur l'impulsion  $\Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2}$
- 10) Vérifier alors que la relation d'incertitude de Heisenberg  $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$  est satisfaite.

**N.B :** On utilisera la relation :  $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2\alpha^2 x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha^2}}$  ; (avec  $\alpha =$  constante réelle positive).