L3 - Physique-Chimie — 15 octobre 2015
Mécanique quantique

TD n$^{\text{o}}$3 :

1 Inégalité de Heisenberg et stabilité des atomes

Un problème qui ne trouvait pas d'explication dans le cadre de la physique classique (mécanique newtonienne ou einsteinienne et électromagnétisme) est l'origine de la stabilité des atomes. Prenons le cas de l'atome d'hydrogène (état lié électron-proton) : tournant autour du proton, l'électron accéléré devrait émettre du rayonnement électromagnétique et l'atome perdre de l'énergie. Une estimation du temps de vie classique de l'atome est $\tau_{\text{class}} \sim 10^{-11}$ s, ce qui est (heureusement) démenti par l'expérience. Nous allons voir que la description ondulatoire schrödingerienne rend compte de la stabilité des atomes.

Pour simplifier nous nous plaçons en une dimension.

1/ On considère un état quantique décrit par la fonction d'onde $\psi(x)$. Justifier que l'énergie cinétique moyenne est donnée par

$$\langle E_c \rangle_\psi = \int \mathrm{d}x \, \frac{\hbar^2}{2m} \left| \frac{\mathrm{d}\psi(x)}{\mathrm{d}x} \right|^2 . \tag{1}$$

Comment minimiser l'énergie cinétique ? Que vaut-elle si la particule est confinée dans une boîte de taille a ?

2/ Considérons un potentiel $E_p(x)$ avec un minimum en x_0. Donner l'expression de $\langle E_p \rangle_\psi$. Quel type de fonction d'onde permet de minimiser l'énergie potentielle ? Comparer avec la condition précédente.

3/ Oscillateur harmonique – Existence d'une énergie minimale $E_0 > 0$.– On considère le cas d'un potentiel quadratique $E_p(x) = (1/2)\kappa\, x^2$. La particule a une énergie E. Quel est le domaine $[-x_E, +x_E]$ accessible classiquement ? Que peut-on alors dire sur les fluctuations de l'impulsion Δp ? Déduire une estimation de E_c en fonction de x_E. Quelle est la valeur optimale de x_E qui permet de minimiser $E_c + E_p$? Préciser la valeur de l'énergie minimale E_0 associée (en fonction de la pulsation propre de l'oscillateur $\omega = \sqrt{\kappa/m}$).

4/ Comment la stabilité de l'atome est-elle justifiée dans le cadre du formalisme quantique ?

☺ Pour en savoir plus :

C. Texier, « Mécanique quantique », Dunod, 2nde édition, 2015. (chapitres 1 et 15).

2 Spectre discret *versus* continuum

A. Équation de Schrödinger stationnaire – Conditions de raccordement

La dynamique quantique d'une particule d'énergie E soumise à un potentiel $V(x)$ est décrite par l'équation de Schrödinger stationnaire

$$\boxed{E\,\varphi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\varphi(x)}{\mathrm{d}x^2} + V(x)\,\varphi(x)} \tag{2}$$

Nous discutons les propriétés de continuité de la solution $\varphi(x)$ de cette équation différentielle dans trois situations que nous rencontrerons.

1/ $V(x)$ **borné.–** Si $V(x)$ est borné (mais pas forcément continu), justifier que $\varphi(x)$ et $\varphi'(x)$ sont continues en tout point.

2/ $V(x)$ **infini dans un domaine.–** Quelle est la condition de raccordement au bord d'un domaine où $V(x)$ est infini ? On pourra s'appuyer sur l'exemple $V(x) = V_0\;\theta_{\mathrm{H}}(x)$ et faire $V_0 \to \infty$.

3/ $V(x)$ **infini en un point.–** On discute le raccordement autour d'un point où $V(x)$ est infini, i.e. $V(x) = \frac{\hbar^2\lambda}{2m}\,\delta(x)$. Justifier que $\varphi(x)$ est continue en $x = 0$. En intégrant l'équation de Schrödinger autour de $x = 0$, $\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}\mathrm{d}x\cdots$ puis en faisant $\epsilon \to 0^+$, déduire la condition de raccordement.

Nous étudions la dynamique d'une particule soumise à un potentiel avec une partie attractive sur $[0, a]$ et répulsive à l'origine :

$$V(x) = \begin{cases} +\infty & \text{pour } x < 0 \\ -V_0 & \text{pour } 0 < x < a \\ 0 & \text{pour } x > a \end{cases} \qquad \text{où } V_0 > 0\,. \tag{3}$$

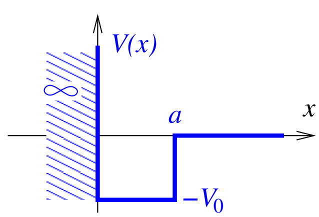

FIGURE 1 – *Puits de potentiel.*

B. Dynamique classique

Décrire la dynamique classique d'une particule soumise à ce potentiel en fonction de son énergie E.

C. État(s) lié(s)

Nous décrivons la dynamique quantique lorsque l'énergie est $E < 0$.

1/ Écrire l'équation de Schrödinger stationnaire dans les différentes régions de l'espace et la résoudre. On introduira les notations

$$E = -\frac{\hbar^2 q^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(-k_0^2 + K^2\right) \qquad \text{avec} \qquad V_0 = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} \tag{4}$$

2/ Équation de quantification.– Imposer les conditions de raccordement en $x = 0$ et $x = a$. Déduire l'équation de quantification.

Indication : Remarquons que si φ et φ' sont continues, **il est toujours plus efficace d'imposer la continuité de** $\boldsymbol{\left(\ln|\varphi(x)|\right)'}$ (pourquoi ?).

3/ Analyser *graphiquement* la résolution de l'équation de quantification (en prenant K comme inconnue). En particulier on discutera le nombre d'états liés en fonction de k_0 et a. Discuter également la limite $k_0 \to \infty$.

D. États de diffusion

Nous nous intéressons maintenant à la situation physique où la particule a une énergie $E > 0$.

1/ Dans la région $x > a$, on écrira la fonction d'onde sous la forme

$$\varphi(x) = A\left(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k(x-a)} + r\,\mathrm{e}^{+\mathrm{i}k(x-a)}\right) \tag{5}$$

Relier k et E. Interpréter les différents termes. Calculer le courant de probabilité

$$J_\varphi = \frac{\hbar}{m}\,\mathrm{Im}\left[\varphi^*(x)\frac{\mathrm{d}\varphi(x)}{\mathrm{d}x}\right] \tag{6}$$

Quel est le sens physique du coefficient r ?

2/ Résoudre l'équation de Schrödinger dans l'intervalle $[0, a]$. On écrira $\varphi(x)$ de façon à respecter la condition de bord en $x = 0$.

3/ Raccorder les deux expressions de la fonction d'onde en $x = a$. Comparer les situations à $E < 0$ (partie **C.**) et $E > 0$ (pourquoi l'énergie n'est pas quantifiée dans ce dernier cas ?). Déduire l'expression du coefficient r.

☺ Pour en savoir plus :

C. Texier, « Mécanique quantique », Dunod, 2nde édition, 2015. (chapitre 2 ; pour des détails sur les états de diffusion, cf. chapitre 10, qui est plus difficile).