Exercices : 28 - Les outils de la Mécanique quantique

— Solutions —

A. Dualité

1. Classique ou quantique

Réponses : l'énergie est de l'ordre de $mg\ell$ et la durée comme la période d'oscillation $\sqrt{\ell/g}$, on a donc $S \simeq mg^{1/2}\ell^{3/2}$, on trouve $S \simeq 10^{31}\hbar \gg \hbar$, on peut utiliser la mécanique classique ; on prend une énergie cinétique de rotation $\frac{1}{2}m\left(\frac{d}{\tau}\right)^2$ et une durée τ, l'aiguille de l'ordre de $1\,\text{cm}$, sa masse $m = 1\,\text{g}$ et la durée $\tau \simeq 1\,\text{s}$, on a $S = m\frac{d^2}{\tau} \simeq 10^{22}\hbar$ pas besoin de la Mécanique quantique ; les niveaux d'énergie sont $E_n = -\frac{13,6}{n^2}\,\text{eV}$, les longueurs de l'ordre de $400\,\text{nm}$, la plus courte correspond à $13,6\,\text{eV} = \frac{hc}{\lambda}$, on trouve $\lambda \simeq 100\,\text{nm}$, on trouve $S = E/\nu = \frac{E\lambda}{c} \simeq 7\hbar$, la Mécanique quantique s'impose ; $\lambda_{DB} = \frac{h}{p}$ automatiquement $p\lambda_{DB} \simeq \hbar$ la Mécanique quantique va s'imposer à partir du moment où la taille de l'objet qui possède la longueur d'onde λ_{DB} n'est pas grande devant la taille de l'objet.

2. Gaz quantique ou gaz classique

Réponses : $\frac{1}{2}mv^2 = \frac{3}{2}k_BT$, on trouve $v = \sqrt{3k_BT/m}$, $v \simeq 10^3\,\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$; $\lambda_{DB} = \frac{h}{mv} \simeq 7 \times 10^{-11}\,\text{m}$. La distance moyenne est $d \simeq n^{-1/3}$ si n est la densité volumique de particules donnée par $n = P/(k_BT)$, on trouve $d = 3\,\text{nm}$, on constate que $\lambda_{DB} \ll d$, on peut rester dans le domaine classique ; $\lambda_{DB} = h/\sqrt{2m_eE}$ soit $\lambda = 1\,\text{nm}$, $n = \frac{\mu_{\text{Cu}}\mathcal{N}_A}{M_{\text{Cu}}}$, $d \simeq n^{-1/3} = 2 \times 10^{-10}\,\text{m}$ $d < \lambda_{DB}$ donc la Mécanique quantique est nécessaire pour étudier la conductivité.

3. Quantique ou classique

Réponses : c'est l'action S qui est le critère à évaluer et à comparer à $\hbar \simeq 10^{-34}\,\text{J}\cdot\text{s}$, on a $S = E \times \Delta t$ avec $E = \frac{q^2}{2C}$ et $\Delta t \simeq \frac{1}{\omega_0} = \sqrt{LC}$ d'où $S \simeq q^2\sqrt{\frac{L}{C}}$, on trouve $S = 10^{-10}\,\text{J}\cdot\text{s} \gg \hbar$ c'est classique ; la personne c'est $S \simeq mv\Delta z$ on a $v = gt$ et $\Delta z = \frac{g}{2}t^2$ d'où $S \simeq m\sqrt{g\Delta z^3}$ avec $\Delta z \simeq 1\,\text{m}$ d'où $S \simeq 200\,\text{J}\cdot\text{s}$, $S \gg \hbar$ c'est classique, pour le neutron c'est quantique car les distances sont de l'ordre de $10^{-10}\,\text{m}$ d'où $S \simeq 10^{-36}\,\text{J}\cdot\text{s} < \hbar$; $E = P\Delta t$ et ici $\Delta t \simeq \frac{1}{f}$ d'où $S \simeq \frac{P}{f^2}$ on trouve $S \simeq 10^{-20}\,\text{J}\cdot\text{s} \gg \hbar$, c'est classique ; la masse des atomes est de l'ordre de $10^{-26}\,\text{kg}$, leur vitesse est de l'ordre de $rf = 10^{-3}\,\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$, $S \simeq mv \times r = 10^{-33}\,\text{J}\cdot\text{s}$, on est assez près de $\hbar$, il faut utiliser la Mécanique quantique.

4. Diffraction de neutrons

Réponses : on considère des neutrons qui relèvent de la Mécanique classique, c'est-à-dire des électrons non relativistes. Leur énergie cinétique est $E_c = \frac{1}{2}mV^2$, leur quantité de mouvement $p = mV$. D'après la formule de De Broglie, la longueur d'onde de l'onde qui les représente est $\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mV}$. La diffraction provoque une divergence du faisceau de neutrons d'angle $\theta \simeq \frac{\lambda}{d} = \frac{h}{mVd}$. À une distance L de l'ouverture qui diffracte, , on aura une tache de diamètre $D = L\theta = \frac{hL}{mVd}$. Si l'on double toutes les données, on obtient $D' = \frac{h2L}{m2V2d} = \frac{D}{2}$. La bonne réponse est la réponse c).

5. Le mystère des fentes d'Young

Réponses : $p_{1x} = -p_0\sin\alpha$ avec $\sin\alpha \simeq \tan\alpha \simeq \alpha = \frac{a-d}{D}$ d'où $p_{1x} = -p_0\frac{a-d}{D}$; pour la fente F_2, on a $p_{2x} = p_0\frac{a+d}{D}$, la variation de quantité de mouvement la plus petite de l'écran est la différence entre les deux : $p_{2x} - p_{1x} = \frac{2p_0a}{D}$, il faut donc $\Delta p_x \ll \frac{2p_0a}{D}$, d'après la relation d'indétermination d'Heisenberg $\Delta p_x \times \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}$ d'où $\Delta x \gg \frac{\hbar D}{4p_0a}$, l'interfrange est $i = \frac{\lambda D}{2a}$ et $\lambda = \frac{h}{p_0}$ d'où $i = \frac{\hbar\pi D}{ap_0}$, on constate donc que $\Delta x \gg \frac{i}{4\pi}$, on a donc bien une impossibilité de voir les franges car l'indétermination sur la position est nettement supérieure à l'interfrange.

6. Expérience de Davisson et Germer

Réponses : en notant $\vec{k}_i$ (resp. $\vec{k}$) le vecteur d'onde incident (resp. émergent) et A et B deux atomes quelconques d'un plan réticulaire donné, le déphasage entre les ondes émergentes à l'infini est $\Delta\varphi = (\vec{k}_i - \vec{k}).\overrightarrow{AB}$. Dans le cas de la réflexion spéculaire, ce déphasage est nul et on a des interférences constructives entre les divers rayons réfléchis pour un plan réticulaire donné : le rayonnement obtenu est particulièrement intense (pour toute disposition des atomes dans le plan, même non régulière). On se place, compte tenu de la question précédente, dans le cadre de la réflexion spéculaire sur chaque atome et on considère plusieurs plans réticulaires. On conserve des interférences constructives pour les rayons issus d'un même plan réticulaire. Pour avoir des interférences constructives pour l'ensemble des plans réticulaires, on doit avoir le déphasage associé à deux atomes A et B de deux plans réticulaires consécutifs multiple entier de 2π. Autrement dit, $(\vec{k}_i - \vec{k}).\overrightarrow{AB} = 2\,\pi\,n$ où $n \in \mathbb{N}$. En exploitant le caractère spéculaire de la réflexion, il vient $2\,k_i\,d\,\sin\phi = 2\,\pi\,n$ et on déduit bien la formule de

BRAGG compte tenu de $k_i = 2\pi/\lambda$. Force est de constater que pour $\theta = 50°$, $\phi = \frac{\pi}{2} - \frac{\theta}{2}$ donc la formule de BRAGG donne $\lambda_{\text{eq},n} = \frac{2\,d}{n}\cos\frac{\theta}{2} = \frac{0{,}16(5)}{n}$ nm. Le dernier chiffre a été mis entre parenthèses car on manque de précisions sur les mesures pour en être certain (néanmoins, il est intéressant, pour des raisons historiques, de le spécifier ; idem pour λ_{DB} ensuite). Le faisceau électronique est accéléré sous $V = 54\,\text{V}$ donc $\lambda_{DB} \simeq \frac{1{,}23}{\sqrt{V}} = 0,16(7)\,\text{nm}$. Il est manifeste que $\lambda_{\text{eq},1}$ et λ_{DB} sont très proches et ce résultat associé à d'autres permet de valider le concept des ondes de matière de DE BROGLIE (typiquement en relevant d'autres maxima d'intensité pour plusieurs ordres pour diverses valeurs de V).

7. Diffraction de molécules par une onde lumineuse

Réponses : $\lambda_{DB} = \frac{h}{mv}$ avec $m = \frac{60M_C}{\mathcal{N}_A} = 1,2\times10^{-24}\,\text{kg}$ et donc $\lambda_{DB} = 4,6\times10^{-12}\,\text{m}$; par différentiation $\text{d}\lambda_{DB} = -\frac{h\text{d}v}{mv^2}$ d'où $\Delta\lambda_{DB} = \frac{h\Delta v}{mv^2} = 7,8\times10^{-13}\,\text{m}$; ℓ_c représente l'analogue de la longueur de cohérence du faisceau de particules par rapport à une source lumineuse, en effet on sait que $\ell_c = c\Delta t$ où Δt est la durée du train d'ondes, avec $\Delta t\times\Delta f \simeq 1$ et $\lambda = \frac{c}{f}$, on arrive à $\Delta f = \frac{c\Delta\lambda}{\lambda^2}$ et ensuite la longueur du train d'onde est $\ell_c = \frac{c}{\Delta f} = \frac{\lambda^2}{\Delta\lambda}$, on trouve $\ell_c = 2,7\times10^{-11}\,\text{m}$; les deux fentes de collimation permettent d'éviter une trop grande dispersion angulaire du faisceau de particules, la dispersion angulaire due à la diffraction par les fentes est de l'ordre de $\Delta\theta \simeq \frac{\lambda_{DB}}{a} \simeq 10^{-6}\,\text{rad}$; interférences constructives pour $d\sin\theta = p\lambda_{DB}$ avec $p\in\mathbb{Z}$; on voit l'ordre 0 et les ordres 1 et -1, on a $\sin\theta_1 = \frac{\lambda_{DB}}{d} \simeq \theta_1$ puisque les angles sont très petits, sur la figure on obtient $\tan\theta_1 \simeq 1 = \frac{x}{D}$ où x est l'abscisse de la frange d'ordre 1, on en déduit que $\frac{2\lambda_{DB}D}{d} = 44\,\mu\text{m}$, on trouve $\lambda_{DB} = 4,7\times10^{-12}\,\text{m}$ ce qui correspond à une vitesse $v \simeq 125\,\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ qui est tout à fait conforme à celle annoncée ; on sait que le défaut de cohérence temporelle joue sur la fonction de contraste des interférences, ici on ne voit que la zone où la fonction de contraste est maximale, c'est-à-dire dans une zone relativement restreinte autour de l'image du faisceau selon l'optique géométrique - si l'on peut s'exprimer ainsi pour des ondes de matière.

8. Expérience de Franck et Hertz

Réponses : on a de façon approchée un diviseur de tension, d'où $V_G = \frac{x}{R}\,V_0$. Les résistances réglables servent à faire varier V_G entre 0 et V_0. On peut réaliser ce dispositif à résistances variables avec un rhéostat ou un potentiomètre. Le théorème de l'énergie cinétique appliqué à un électron dans le référentiel galiléen d'étude, entre le filament et la grille, donne accès à $v = \sqrt{\frac{2\,e\,V_G}{m_e}}$. Avec le même type de démarche, on obtient au niveau de l'électrode sous les hypothèses données $v' = \sqrt{\frac{2\,e\,(V_G-\epsilon)}{m_e}}$. Tant que V_G reste faible, le courant I augmente régulièrement. Cette portion de courbe est analogue à la courbe caractéristique d'une diode et s'explique de la même manière à partir de la charge d'espace formée par les électrons émis par le filament chauffé et accumulés dans son voisinage : l'augmentation du courant I traduit la diminution progressive de cette charge d'espace au fur et à mesure que les électrons sont attirés plus notablement par la grille. Lorsque la tension V_G dépasse un certain seuil V_r, on observe une diminution brutale du courant I qui indique l'apparition d'un nouveau phénomène : la majeure partie des électrons qui atteignaient précédemment l'électrode collectrice se trouve maintenant arrêtée en cours de route. On explique ceci par des collisions inélastiques au cours desquelles les électrons cèdent aux atomes la totalité de leur énergie cinétique $\frac{1}{2}m_ev^2 = e\,V_r$. Pour expliquer le changement d'allure brutal de la courbe, il faut aussi supposer qu'en-dessous de la tension-seuil V_r se produisent seulement des collisions élastiques. Lorsque la tension dépasse sensiblement la valeur V_r, le courant I recommence à croître. Ceci s'explique parfaitement si l'on admet que les électrons continuent à céder aux atomes, dans les collisions inélastiques, la même énergie $e\,V_r$. Ils gardent alors une partie de leur énergie cinétique et restent capable d'atteindre l'électrode collectrice avec une vitesse réduite. On observe ensuite à nouveau une diminution brutale du courant I lorsque la tension V_G atteint $2\,V_r$, c'est-à-dire lorsque les électrons se trouvent en majeure partie arrêtés. En effet, ceux-ci peuvent perdre la totalité de leur énergie cinétique $\frac{1}{2}m_ev^2 = 2\,e\,V_r$ s'ils effectuent successivement deux collisions inélastiques sur deux atomes différents. La répétition du phénomène pour $3\,V_r$, $4\,V_r$... s'explique de même en augmentant le nombre de chocs inélastiques unité par unité. À la lumière de ce qui précède, $W_r = e\,V_r$. L'énergie W_r communiquée à l'atome dans l'expérience est bien inférieure à l'énergie d'ionisation $W_i = 10,5\,\text{eV}$. On en déduit que l'on observe un phénomène autre que l'ionisation dans lequel l'atome conserve son intégrité : il passe d'un état normal (fondamental d'énergie E_1) à un état excité d'énergie $E_2 = E_1 + W_r$. La longueur d'onde λ_r est dans le domaine ultraviolet. L'émission de cette lumière est cohérente avec le modèle de BOHR dans le sens où un atome de mercure excité peut ensuite se désexciter en produisant une lumière de longueur d'onde λ telle que $\frac{h\,c}{\lambda} = W_r = e\,V_r$. On trouve ainsi bien $\lambda = 2,5.10^2\,\text{nm} \simeq \lambda_r$. Les transferts énergétiques se font par multiples entiers de W_r, ce qui confirme l'existence d'une quantification des niveaux d'énergie occupés par les électrons dans l'atome. L'expérience de FRANCK et HERTZ confirme donc directement l'existence de niveaux discrets d'énergie dans la matière !

9. Effet Compton

Réponses : En physique classique, les rayons X incidents sont décrits par une onde électromagnétique de haute fréquence. Celle-ci met en oscillation les électrons de la matière qui, accélérés, rayonnent une onde qui est l'onde diffusée. Or, comme déjà vu lors de l'étude du rayonnement dipolaire électrique, la longueur d'onde est conservée dans ce processus donc ce n'est pas cohérent avec les résultats expérimentaux qui présentent deux pics dont l'un évolue suivant l'angle d'observation θ. Notons que même en tenant compte de l'effet DOPPLER, en raison des déplacements électroniques, cela ne permet pas de comprendre l'existence de ces deux pics. Le photon diffusé doit avoir une énergie inférieure à celle du photon incident s'il met en mouvement l'électron (qui acquiert, de ce fait, une énergie cinétique). Ainsi, on prévoit que $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda \geq 0$. On relève $\lambda = 70,9\,\text{pm}$ et $\lambda' = 74,9\,\text{pm}$. Par conséquent, la perte d'énergie du photon à la diffusion est $h\,c\left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'}\right) = 1,5 \times 10^{-16}\,\text{J} = 0,934\,\text{keV}$. Ceci doit correspondre à l'énergie cinétique de l'électron, d'expression $\mathcal{E}_c = (\gamma - 1)\,m_e\,c^2$ fournie par l'énoncé, d'où $\frac{v}{c} \simeq 6$ %. L'électron n'est pas très loin d'être relativiste. L'énoncé conserve l'approche relativiste pour garder des résultats corrects lorsqu'on travaille avec des rayons X plus énergétiques et/ou des angles θ plus élevés. Traduisons la conservation de l'énergie du système constitué du photon et de l'électron pendant la diffusion : $\frac{h\,c}{\lambda} + m_e\,c^2 = \frac{h\,c}{\lambda'} + \sqrt{p^2\,c^2 + m_e{}^2\,c^4}$ (1). La quantité de mouvement totale du même système est conservée, d'où, en posant des vecteurs unitaires directeurs des trajectoires des particules, $\frac{h}{\lambda}\,\vec{e_x} = \frac{h}{\lambda'}\vec{u} + \vec{p}$. On projette ces relations suivant $\vec{e_x}$ et la direction orthogonale, d'où $\frac{h}{\lambda} = \frac{h}{\lambda'}\,\cos\theta + p\cos\varphi$ (2) et $0 = \frac{h}{\lambda'}\,\sin\theta - p\sin\varphi$ (3). On dispose de trois équations entre les cinq grandeurs λ, λ', p, φ et θ. On peut donc obtenir une équation entre trois de ces grandeurs : on choisit d'éliminer p et φ. Pour ce faire, on élimine φ en explicitant $p\cos\varphi$ et $p\sin\varphi$ avec (2) et (3) et on en somme les carrés en songeant à $\cos^2\varphi + \sin^2\varphi = 1$. Cela fournit une équation sans φ permettant d'éliminer p dans (1). On peut comprendre avec cette approche l'existence et la position du second pic observé sur les graphiques expérimentaux : la longueur d'onde λ' augmente bien lorsque θ augmente de 0° à 180° ; le décalage COMPTON $\Delta\lambda$ est bien indépendant de λ, ainsi que du matériau considéré (seul le fait d'avoir des électrons libres joue) ; l'accord numérique du décalage COMPTON est assez satisfaisant car, en calculant la longueur d'onde COMPTON $\Lambda = \frac{h}{m_e\,c} = 2,43\,\text{pm}$, on obtient une estimation assez convenable de l'écart entre les pics de diffusion pour $\theta = 90^\circ$ par exemple (de $2,2\,\text{pm}$). Des mesures beaucoup précises de GINGRICH, en 1930, donnent un meilleur accord encore. Le pic à la longueur d'onde λ (appelé pic THOMSON alors que l'autre pic est nommé pic COMPTON) peut aussi être compris en termes d'une collision entre le photon et les électrons liés en un édifice ionique dans le bloc de diffusion. Cela revient à remplacer la masse m_e par la masse M beaucoup plus élevée de cet édifice : pour le graphite, le noyau de carbone présente 6 protons et 6 neutrons donc $M \simeq 12 \times 1\,840\,m_e \simeq 22\,000\,m_e$ et le décalage $\Delta\lambda$ correspondant devient trop faible pour être mesuré (pour $\theta = 180\,\text{pm}$, on a $\Delta\lambda = 2 \times 10^{-4}\,\text{pm}$).

B. Fonction d'onde

10. Interférences

Réponses : la probabilité de détection d'une particule quantique au voisinage de M est donnée par $P = |\sum_i \psi_i(M)|^2$ où la somme porte sur les fentes i ouvertes (en supposant par défaut que l'on ne cherche pas à discerner par quelle fente passe un quanton quand plusieurs sont ouvertes !). Lorsque seule la fente n°1 est ouverte, il vient $P_1(M) = |\psi_1(M)|^2 = 4/9 \simeq 44$ %. Lorsque les fentes n°2 et n°3 sont les seules ouvertes, il vient $P_{23}(M) = |\psi_2(M) + \psi_3(M)|^2 = \frac{25}{144} \simeq 17$ %. Lorsque toutes les fentes sont ouvertes, $P_{123}(M) = |\psi_1(M) + \psi_2(M) + \psi_3(M)|^2 = \frac{89}{144} - \frac{7\sqrt{2}}{18} \simeq 6{,}8$ %. On constate que $P_{123}(M) \neq P_1(M) + P_{23}(M)$, ce qui n'est pas surprenant car il y a des interférences ! Il est possible de visualiser ces résultats dans le plan de CAUCHY en représentant les vecteurs de FRESNEL associés à ψ_1, $\psi_2 + \psi_3$ et $\psi_1 + \psi_2 + \psi_3$.

11. Interférométrie neutronique et gravité

Réponses : la détection du quanton associé au neutron détecté en D_1 résulte de la superposition des amplitudes de probabilité des chemins $SADBD_1$ et $SACBD_1$ (indiscernabilité). Pour le chemin $SADBD_1$, il y a une transmission de facteur t en A, une réflexion de facteur r en D, puis en B. On peut donc poser pour ce trajet la forme d'amplitude de probabilité de détection $\psi_{SADBD_1} = t\,r^2\,\psi_0$. Pour le chemin $SACBD_1$, il y a d'abord réflexion de facteur r en A, puis réflexion en C et enfin transmission en C. De plus, le chemin de phase est plus long de $\Delta\varphi$, donc l'amplitude de probabilité de détection est $\psi_{SACBD_1} = r^2\,t\exp i\,\Delta\varphi\,\psi_0$. Par principe de superposition (en situation d'indiscernabilité des chemins), il vient l'amplitude de probabilité de détection d'un neutron par D_1 $\psi_1 = \psi_{SADBD_1} + \psi_{SACBD_1}$ ce qui fournit effectivement $\psi_1 = \psi_0\,r^2\,t\,(1 + \exp i\Delta\varphi)$. La probabilité de détection associée en est le module au carré, soit $P_1 = 2\,|\psi_0|^2\,R^2\,(1 - R)\,(1 + \cos\Delta\varphi)$. Un raisonnement analogue conduit, après superposition, à l'amplitude de probabilité de détection d'un neutron par D_2 $\psi_2 = \psi_0\,r\left(t^2 + r^2\,\exp i\,\Delta\varphi\right)$. La probabilité de détection correspondante est, par calcul du module au carré de cette amplitude, $P_2 = |\psi_0|^2\,R\,[(1 - R)^2 + R^2 - 2\,R\,(1 - R)\,\cos\Delta\varphi]$. On suppose qu'aucun neutron n'est perdu et qu'il y a forcément détection en D_1 ou en D_2. Alors, $P_1 + P_2 = 1$. On remplace les expressions précédentes de P_1 et P_2 et, après simplifications, l'égalité de normalisation devient $R\,|\psi_0|^2 = 1$. Finalement,

$P_1 = 2\,R\,(1-R)\,(1+\cos\Delta\varphi)$ et $P_2 = 1 - 2\,R\,(1-R)\,(1+\cos\Delta\varphi)$. L'énergie cinétique d'un neutron non relativiste est $\mathcal{E}_c = p^2/(2\,m_n)$ en notant que son impulsion s'écrit, par relation de DE BROGLIE, $p = \hbar\,k$. Du coup, $\mathcal{E}_c = \frac{\hbar^2\,k^2}{2\,m_n}$. On traduit la conservation de l'énergie mécanique d'un neutron (en supposant là qu'aucune action non conservative sur lui ne travaille) entre l'altitude z et l'altitude $z=0$, avec prise en compte de la pesanteur : $\mathcal{E}_c(z=0)+\mathcal{E}_p(z=0) = \mathcal{E}_c(z)+\mathcal{E}_p(z)$ soit $\frac{\hbar^2\,{k_0}^2}{2\,m_n}+0 = \frac{\hbar^2\,k(z)^2}{2\,m_n}+m_n\,g\,z$. Ainsi, $k(z) = \sqrt{{k_0}^2 - \frac{2\,{m_n}^2\,g}{\hbar^2}\,z}$. Avec les données numériques proposées, on a $k_0 = 4,5.10^{10}\,\mathrm{rad\,m^{-1}}$ et $\sqrt{\frac{2\,{m_n}^2\,g}{\hbar^2}\,z} = 7,0.10^{6}\,\mathrm{rad\,m^{-1}}$. Il est donc légitime d'effectuer une simplification à l'ordre 1 en z de la loi $k(z)$ et on déduit $k(z) \simeq k_0\left(1-\frac{{m_n}^2\,g}{{k_0}^2\,\hbar^2}\,z\right)$. La rotation fait que les deux bras (AD) et (CB) ne sont plus équivalents : pour le premier, le vecteur d'onde est k_0 et pour le second, il s'agit de $k(z)$. Par conséquent, on peut expliciter le déphasage entre les bras $\Delta\varphi = k_0\,L - k(z)\,L = \frac{{m_n}^2\,g}{k_0\,\hbar^2}\,\ell\,\sin\theta\,L$ soit $\Delta\varphi = \frac{2\pi\,{m_n}^2\,g\,S\,\lambda_{DB_0}}{h^2}\,\sin\theta$. La figure révèle des franges d'interférences atomiques. Il existe des angles d'inclinaison pour lesquels le nombre de neutrons détectés est maximal : les ondes d'amplitude de probabilité associées à chaque bras sont alors en condition d'interférences constructives. D'un maximum au suivant, $\Delta\varphi$ varie de 2π donc, comme il y a 6 franges de $\theta_1 = -32^\circ$ à $\theta_2 = 12^\circ$, il vient l'égalité $6\times 2\pi = \frac{2\pi\,{m_n}^2\,g\,S\,\lambda_{DB_0}}{h^2}\,(\sin\theta_2 - \sin\theta_1)$. Cela permet d'isoler $g = \frac{6\,h^2}{{m_n}^2\,S\,\lambda_{DB_0}\,(\sin\theta_2-\sin\theta_1)}$. Concernant les incertitudes, on peut adopter $\Delta\theta_1 = \Delta\theta_2 \simeq 2^\circ \simeq 3.10^{-2}\,\mathrm{rad}$ et il s'agit là de la source d'erreur largement majoritaire ! Par conséquent, par différentielle logarithmique, $\frac{\Delta g}{g} = \frac{\Delta[\sin\theta_2-\sin\theta_1]}{\sin\theta_2-\sin\theta_2}$ soit $\frac{\Delta g}{g} = \frac{\sqrt{\cos^2\theta_1\,(\Delta\theta_1)^2+\cos^2\theta_2\,(\Delta\theta_2)^2}}{\sin\theta_2-\sin\theta_1}$. Les applications numériques permettent de déduire $g = 9,8\pm 0,6\,\mathrm{m\cdot s^{-2}}$. Le résultat n'est pas très bon et il peut être largement amélioré en gagnant en précision sur les mesures angulaires.

12. Potentiel harmonique

Réponses : ω_0 est en s^{-1}, la normalisation de la probabilité entraîne $\int|\psi|^2\mathrm{d}x = 1$ donc A est en $\mathrm{m}^{-1/2}$; la condition de normalisation conduit à $1 = \sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega_0}}|A|^2$ donc $A = \pm\left(\frac{m\omega_0}{\pi\hbar}\right)^{1/4}$, on choisit la valeur positive ; la forme de l'onde montre un état stationnaire avec le terme en $\exp -i\frac{E}{\hbar}t$, l'énergie est donc $E = \frac{\hbar\omega_0}{2}$; l'équation de SCHRÖDINGER est $V(x)\psi = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}$, on trouve $V(x) = \frac{1}{2}m\omega_0^2x^2$; il s'agit d'un oscillateur harmonique de type ressort ou d'un développement limité d'une énergie potentielle au voisinage d'une position d'équilibre ; $|\psi|^2$ est paire en x la position moyenne est donc $<x>=0$, c'est la position d'équilibre évoquée avant ; $<x^2>= \int_{-\infty}^{\infty}x^2|\psi|^2\mathrm{d}x = \frac{\hbar}{2m\omega_0}$; l'indétermination porte que $\sqrt{<x^2>} = \Delta x$, on en déduit que $\Delta p_x \geq \sqrt{\frac{m\hbar\omega_0}{2}}$.

13. Paquet d'ondes gaussien libre

Réponses : le terme correspondant à une particule libre non localisée est $\exp i(kx-\omega(k)t)$, on somme toutes les solutions du paquet d'ondes $\psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty}g(k)\exp i(kx-\omega(k)t)\mathrm{d}k$; pour une particule libre l'énergie est confondue avec l'énergie cinétique $E = \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2}{2m\lambda^2}$ avec $k = 2\pi/\lambda$, on trouve $E = \frac{\hbar^2k^2}{2m} = \hbar\omega$. On a donc $\psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty}A\exp\left(-\frac{(k-k_0)^2}{q^2}\right)\exp i(kx-\frac{\hbar k^2}{2m}t)\mathrm{d}k$; il s'agit d'un paquet d'onde gaussien centré sur k_0 de quantité de mouvement $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ et de vitesse pour le quanton assimilé à la vitesse de l'enveloppe $\vec{v} = \frac{\hbar k_0}{m}\vec{e}_x$; on trouve $\psi(x,t=0) = Aq\sqrt{\pi}\exp(-\frac{q^2x^2}{4})\exp ik_0x$; il s'agit bien d'une onde de vecteur d'onde moyen k_0 mais localisée en $x=0$ et de largeur $\Delta x \simeq \frac{1}{q}$; pour obtenir une localisation précise il faut que $q\to\infty$ mais dans ce cas l'étalement des vecteurs d'onde est important puisque $\Delta k \simeq q$, l'impulsion est indéterminée selon $\Delta p_x \simeq \hbar q$; on trouve $\Delta x\Delta p_x \simeq \hbar$ ce qui est le mieux que l'on puisse faire compte tenu de la relation d'indétermination d'HEISENBERG.

14. Atome d'hydrogène

Réponses : $\mathrm{d}\tau = 4\pi r^2\mathrm{d}r$; $\mathrm{d}P = 4\pi A^2r^2\exp\left(-\frac{2r}{a}\right)\mathrm{d}r$, on normalise la probabilité en écrivant qu'il est certain que l'électron soit à une position comprise entre $r=0$ et $r\to\infty$ $\int_0^{\infty}4\pi A^2r^2\exp\left(-\frac{2r}{a}\right)\mathrm{d}r = 1$; on prend $A>0$ et on obtient $A = \frac{1}{\sqrt{\pi}a^{3/2}}$; le maximum de $r^2\exp\left(-\frac{2r}{a}\right)$ est obtenu en $r_0 = a$ la valeur moyenne est $<r>=\int_0^{\infty}r\mathrm{d}P$ on trouve $<r>= 4\pi\frac{1}{\pi a^3}\int_0^{\infty}r^3\exp-\frac{2r}{a}\mathrm{d}r = \frac{3a}{2}$; a est l'ordre de grandeur du rayon atomique de l'atome d'hydrogène de BOHR.

15. États isotropes de l'atome d'hydrogène

Réponses : puisque $V(x>0)$ s'identifie à l'énergie potentielle d'interaction électrostatique entre un proton et un électron, il vient $A = \frac{e^2}{4\pi\,\epsilon_0} = \hbar\,c\,\alpha$. L'équation de SCHRÖDINGER indépendante du temps doit être vérifiée par l'état stationnaire à valider, pour une énergie E correspondante : $-\frac{\hbar^2}{2\,m}\,\frac{\mathrm{d}^2\varphi(x)}{\mathrm{d}x^2} - \frac{A}{x}\,\varphi(x) = E\,\varphi(x)$. On y injecte la forme proposée pour $\varphi(x)$. Tout d'abord $\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}x} = \varphi(x)(\frac{1}{x}-\frac{1}{a})$ puis $\frac{\mathrm{d}^2\varphi}{\mathrm{d}x^2} = \varphi(x)(\frac{1}{a^2}-\frac{2}{xa})$. On injecte dans l'équation de SCHRÖDINGER spatiale et on arrive à $E = \frac{1}{x}(\frac{\hbar^2}{ma}-A)-\frac{\hbar^2}{2ma^2}$ qui doit être vrai $\forall x$ d'où $a = \frac{\hbar^2}{m\,A}$

et $E = -\frac{\hbar^2}{2\,m\,a^2}$. Il ne reste qu'à expliciter les grandeurs voulues comme demandé et on trouve $a = \frac{\hbar}{m\,c\,\alpha}$ et $E = -\frac{m\,c^2\,\alpha^2}{2}$. Il s'agit de traduire la condition de normalisation $\int_0^\infty |\varphi(x)|^2\,\mathrm{d}x = 1$ soit $C^2\,\int_0^\infty x^2\,\exp^{-2\,x/a}\,\mathrm{d}x = 1$. Pour calculer l'intégrale, on peut procéder par double intégration par parties, ou encore comme suit. On pose la fonction $F(\gamma) = \int_0^\infty \exp^{-\gamma\,x}\,\mathrm{d}x = \frac{1}{\gamma}$. Sa dérivée première est, par permutation dérivée-intégrale validée par les mathématiciens, $F'(\gamma) = -\int_0^\infty x\,\exp^{-\gamma\,x}\,\mathrm{d}x = -\frac{1}{\gamma^2}$ et on passe dans le même esprit à la dérivée seconde $F''(\gamma) = \int_0^\infty x^2\,\exp^{-\gamma\,x}\,\mathrm{d}x = \frac{2}{\gamma^3}$. Cette dernière égalité permet de connaître l'intégrale voulue et la condition de normalisation devient $C^2\,\frac{2}{(2/a)^3} = 1$ d'où $C = \frac{2}{a^{3/2}}$. Il s'agit de représenter la fonction $|\varphi(x)|^2$ (et non $\varphi(x)$ qui n'est que l'amplitude de probabilité !). Pour le tracé, on part de l'origine avec une tangente horizontale, la fonction croît jusqu'à un maximum en $x = a$, de valeur $4\,\exp^{-2}/a$, puis elle décroît jusqu'à zéro à l'infini. On peut vérifier par le calcul que la valeur a correspond à la valeur la plus probable de x, c'est-à-dire celle de maximum de densité de probabilité de présence $|\varphi(x)|^2$: $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[|\varphi(x)|^2\right] = |C|^2\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[x^2\,\exp^{-2\,x/a}\right] = |C|^2\,\left[2\,x - \frac{2}{a}\,x^2\right]\exp^{-2\,x/a}$ et on note bien que $x = a$ est la seule valeur d'annulation (hors $x = 0$) et correspond forcément à un maximum de densité de probabilité de présence (celle-ci étant continue, positive et s'annulant en $x = 0$ et tendant vers 0 à l'infini). Numériquement, il vient $a = 52,8\,\mathrm{pm}$ et $E = -13,6\,\mathrm{eV}$. Il s'agit manifestement du niveau fondamental de l'électron de l'atome d'hydrogène vu l'énergie obtenue et a s'identifie au rayon de Bohr. La valeur moyenne de l'énergie potentielle dans l'état considéré est $\langle V\rangle = \int_0^\infty V(x)|\varphi(x)|^2\,\mathrm{d}x = -A\,C^2\,\int_0^\infty x\,\exp^{-2\,x/a}\,\mathrm{d}x$. En utilisant une intégration par parties ou en exploitant la fonction $F'(\gamma)$ vue précédemment, on déduit $\langle V\rangle = -A\,C^2\,\frac{a^2}{4}$ soit $\langle V\rangle = -\frac{A}{a} = V(a)$. Dans le modèle de Bohr, l'orbite basse admet un rayon a (rayon de Bohr) fixé et son énergie potentielle est $V(a)$. Dans l'approche quantique proposée, on voit que le rayon orbital a est en fait un rayon de plus grand probabilité de présence et l'énergie potentielle sur l'orbite semi-classique est une énergie potentielle moyenne de l'état quantique.

16. Particule libre sur un cercle

Réponses : $V(\theta)\psi(\theta) = \frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\theta) + E\psi(\theta)$, la particule est libre donc $V = 0$ en utilisant le laplacien en coordonnée polaire ou en transposant x à $R\theta$, on obtient $\frac{\hbar^2}{2mR^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial\theta^2} + E\psi(\theta) = 0$; la fonction doit nécessairement être 2π périodique, on doit donc avoir $\frac{\partial^2\psi}{\partial\theta^2} + \frac{2mR^2E}{\hbar^2}\psi = 0$ avec $\frac{2mR^2E}{\hbar^2} > 0$; on a donc nécessairement des solutions harmoniques de la forme $\psi(\theta) = A\exp i\frac{\sqrt{2mE}R}{\hbar}\theta + B\exp -i\frac{\sqrt{2mE}R}{\hbar}\theta$; pour respecter la périodicité il est indispensable que $\exp\pm i\frac{\sqrt{2mE}R}{\hbar}2\pi = 1$ il faut donc que $\frac{\sqrt{2mE}R}{\hbar} = n$, en proposant un entier relatif n, on peut écrire que $\psi(\theta) = A\exp in\theta$; il faut normaliser la probabilité pour obtenir A, on a $\int_0^{2\pi}|\psi|_n^2 R\mathrm{d}\theta = 2\pi RA^2$, on a donc $\psi_n(\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi R}}\exp in\theta$; on trouve que $E_n = \frac{n^2\hbar^2}{2mR^2}$, la solution dépendant du temps prend l'expression $\psi_n(\theta,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi R}}\exp i(n\theta - \frac{E_n}{\hbar}t)$; le changement de signe n en $-n$ correspond à la situation de particule qui parcourent les angles θ en sens contraire.

17. Potentiel quadrique

Réponses : on a nécessairement $\Delta p_x\,\Delta x \geq \frac{\hbar}{2}$ on ne peut avoir avec certitude $x = 0$ et $p_x = 0$; l'énergie de la particule est $E = \frac{p_x^2}{2m} + gx^4$, comme on ne peut pas avoir simultanément $p_x = 0$ et $x = 0$, on note qu'il va se produire nécessairement des oscillations autour de la position d'équilibre $x = 0$, on peut dire que $< p_x^2 >= (\Delta p_x)^2$ et que $< x^4 >= \alpha(\Delta x)^4$, l'énergie mécanique moyenne est $E_m = \frac{<p_x>^2}{2m} + g < x^4 >= \frac{(\Delta p_x)^2}{2m} + g\alpha(\Delta x)^4$, on remplace par la relation d'indétermination de Heisenberg et on obtient $E_m = \frac{(\Delta p_x)^2}{2m} + g\alpha(\frac{\hbar}{2(\Delta p_x)})^4$, le mode fondamental correspond à un minimum d'énergie $\frac{\mathrm{d}E_m}{\mathrm{d}\Delta p_x} = \frac{\Delta p_x}{m} - \frac{g\alpha\hbar^4}{4\Delta p_x^5} = 0$, on trouve $\Delta p_x = \left(\frac{mg\alpha\hbar^4}{4}\right)^{1/6}$, on arrive alors à $E_m \simeq \left(\frac{g\alpha\hbar^4}{m^2}\right)^{1/3}$.

18. Boîte unidimensionnelle

Réponses : $v = \sqrt{\frac{2E}{m}}$ est indépendant de x, $\mathrm{d}t = \mathrm{d}x/v$ donc $\mathrm{d}P_{cl} = \alpha\frac{\mathrm{d}x}{v}$, la normalisation est $1 = \int_0^L \alpha\frac{\mathrm{d}x}{v} = \frac{\alpha L}{v}$ d'où $\alpha = \frac{v}{L}$ ce qui revient à écrire que $\mathrm{d}P_{cl} = \frac{\mathrm{d}x}{L}$, entre 0 et $L/4$, on a $P_{cl} = \frac{1}{4}$; $\mathrm{d}P = |\psi_n(x,t)|^2\mathrm{d}x = A_n^2\sin^2\frac{n\pi x}{L}\mathrm{d}x$, or $1 = \int_0^L A_n^2\sin^2\frac{n\pi x}{L}\mathrm{d}x = A_n^2\frac{L}{2}$ d'où $A_n = \sqrt{\frac{2}{L}}$, on a donc $\mathrm{d}P = \frac{2}{L}\sin^2\frac{n\pi x}{L}\mathrm{d}x$, la probabilité de présence est $P_{qu} = \int_0^{L/4}\mathrm{d}P = \frac{1}{4}\left(1 - \mathrm{sinc}\,\frac{n\pi}{2}\right)$, dans la limite $n \to \infty$, on retrouve la probabilité classique de $1/4$ ce qui est cohérent avec le principe de correspondance de Bohr.

19. Énergie minimale de confinement

Réponses : la limite supérieure est $\Delta x = L_x$, d'après l'indétermination d'Heisenberg $\Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2L_x}$, la quanton peut aller aussi bien dans le sens x croissant que dans le sens x décroissant on a donc $\langle p_x \rangle = 0$ et donc $\langle {p_x}^2 \rangle = \Delta p_x^2 \geq \frac{\hbar^2}{4L_x^2}$, on peut reproduire le même raisonnement indépendamment sur les trois axes et comme $E_c = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{p_z^2}{2m}$, on trouve que $\langle \mathcal{E}_c \rangle \geq \frac{\hbar^2}{8m}\left(\frac{1}{{L_x}^2} + \frac{1}{{L_y}^2} + \frac{1}{{L_z}^2}\right)$.