T.D. de Mécanique Quantique - SMP4
Correction Série N°1

Solution 1: *Rayonnement du corps noir*

1) L'expression de la loi du rayonnement de Planck en fonction de la longueur d'onde λ :

$$u(\lambda,T)=\frac{8\,\pi\,h\,c}{\lambda^5}\times\frac{1}{e^{\frac{h\,c}{\lambda\,k\,T}}-1}\quad\Longleftrightarrow\quad u(\nu,T)=\frac{8\,\pi\,h\,\nu^3}{c^3}\times\frac{1}{e^{\frac{h\,\nu}{k\,T}}-1}\qquad(*)$$

Remarque :

L'équivalence ci-dessus vient de fait que

$$\underbrace{u(\lambda,T)\,d\lambda}_{\text{densité d'énergie par unité de longueur d'onde}}\quad\equiv\quad\underbrace{u(\nu,T)\,d\nu}_{\text{densité d'énergie par unité de fréquence}}$$

$\oplus$ *bien sur le fait que*

$$c=\lambda\,\nu\quad\Longrightarrow\quad\nu=\frac{c}{\lambda}\quad\Longrightarrow\quad\frac{d\nu}{d\lambda}=-\frac{c}{\lambda^2}$$

Physiquement parlant, le signe $(-)$ signifie que toute variation qui tend à accroître λ $\Longrightarrow$ une diminution de ν, et inversement.

2) On a

$$\frac{d\,u(\lambda,T)}{d\lambda}=0\quad\Longrightarrow\quad-\frac{5}{\lambda^6}.\frac{8\,\pi\,h\,c}{e^{\frac{h\,c}{\lambda\,k\,T}}-1}+\frac{\frac{h\,c}{k\,T.\lambda^2}.e^{\frac{h\,c}{\lambda\,k\,T}}}{\left(e^{\frac{h\,c}{\lambda\,k\,T}}-1\right)^2}.\frac{8\,\pi\,h\,c}{\lambda^5}=0$$

$$\Longrightarrow\quad\frac{8\,\pi\,h\,c}{\lambda^6\left(e^{\frac{h\,c}{\lambda\,k\,T}}-1\right)^2}\times\left[-5\left(e^{\frac{h\,c}{\lambda\,k\,T}}-1\right)+\frac{h\,c}{\lambda\,k\,T}.e^{\frac{h\,c}{\lambda\,k\,T}}\right]=0\quad(*)$$

Posons $x=\frac{h\,c}{\lambda\,k\,T}$, l'équation $(*)$ s'écrit :

$$-5\left(e^x-1\right)+xe^x=0\;\Longrightarrow\;\boxed{5-x=5e^{-x}}\qquad(**)$$

3) Comme s'écrit dans la question (1), la loi de Planck qui donne la variation de la densité d'énergie d'un corps noir se traduit par :

$$u(\lambda,T)=\frac{8\,\pi\,h\,c}{\lambda^5}\times\frac{1}{e^{\frac{h\,c}{\lambda\,k\,T}}-1}$$

D'autre part, d'après l'allure expérimentale de cette variation, $u(\lambda,T)$ est maximale pour une valeur spécifique de λ que l'on note λ_m, pour chaque valeur de la température, T.
Alors, d'après la question $(**)$, si $u(\lambda,T)$ est maximale $\Longrightarrow$ $d\,u(\lambda,T)/d\lambda=0$, ce qui a donné lieu à $5-x=5e^{-x}$, dont la solution est $x\approx 4.965$ d'après l'énoncé.
Cela vaut dire que $x=\frac{h\,c}{\lambda\,k\,T}=4.965\;\Longrightarrow$

$$\lambda_m.T=\frac{h\,c}{k\times 4.965}=\frac{6.626\times10^{-34}.3\times10^{8}}{1.38\times10^{-23}.4.965}$$

$$\Longrightarrow\;\boxed{\lambda_m.T=2.9\times10^{-3}\ \text{SI}}\equiv\text{Loi de Wien}$$

4) Calculons l'intégrale $I = \int_0^\infty u(\lambda, T) d\lambda$.
En fait, cette intégrale I traduit l'énergie totale, $U(T)$, rayonnée par le corps noir à la température T. Pour le calcul, effectuons le changement suivant :

$$x = \frac{h\,c}{\lambda\,k\,T} \Longrightarrow d\lambda = -\frac{h\,c}{k\,T}\frac{dx}{x^2}$$

donc

$$\begin{aligned} T = U(T) &= \int_0^\infty u(\lambda, T) d\lambda \\ &= \int_\infty^0 8\pi\,h\,c\left(\frac{x\,k\,T}{h\,c}\right)^5 \cdot \frac{1}{e^x - 1} \cdot \left(-\frac{h\,c}{k\,T}\right) \cdot \frac{dx}{x^2} \\ &= \int_0^\infty 8\pi\,h\,c\left(\frac{k\,T}{h\,c}\right)^5 \cdot \frac{h\,c}{k\,T} \cdot \frac{x^3}{e^x - 1} dx \\ &= 8\pi . \frac{(kT)^4}{h^3\,c^3} \int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} dx \end{aligned}$$

or, d'après l'énoncé : $\int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \frac{\pi^4}{15}$, donc

$$I = a\,T^4 \text{ (traduit la loi de Stephan)} \quad \text{avec} \quad a = \frac{8\,\pi^5\,k^4}{15\,h^3\,c^3}$$

Solution 2: *Effet Photo-Électrique*

Une cellule au Potassium, est éclairée par deux radiations monochromatiques : i) une ultraviolette (raie du Hg) de longueur d'onde $\lambda_{Hg} = 2537\,\text{Å}$, et ii) l'autre visible (raie jaune du Na) dont $\lambda_{Na} = 5890\,\text{Å}$.

1) l'énergie maximale des photo-électrons éjectés. On a

$$(E_c)_{\max} = \frac{1}{2}\,m\,v_{\max}^2 = e\,|V_0|$$

pour l'U.V : $(E_c)_{\max}^{UV} = 3.14$ eV
pour le visible : $(E_c)_{\max}^{visible} = 0.36$ eV.

2) Calcul de la constante de Planck :
On a $(E_c)_{\max} = h\,(\nu - \nu_s) = h\,c\,(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda_s})$ avec $\nu = \frac{c}{\lambda}$ et ν_s la fréquence seuil qui permet d'extraire l'électron et le remettre sur la surface sans énergie cinétique.
$\Longrightarrow$

$$\begin{cases} (E_c)_{\max}^{UV} = h\,c\,(\frac{1}{\lambda_{Hg}} - \frac{1}{\lambda_s}) \\ (E_c)_{\max}^{visible} = h\,c\,(\frac{1}{\lambda_{Na}} - \frac{1}{\lambda_s}), \end{cases}$$

d'où

$$(E_c)_{\max}^{UV} - (E_c)_{\max}^{visible} = h\,c\,(\frac{1}{\lambda_{Hg}} - \frac{1}{\lambda_{Na}})$$

et donc

$$h = \frac{(E_c)_{\max}^{UV} - (E_c)_{\max}^{visible}}{c\,(\frac{1}{\lambda_{Hg}} - \frac{1}{\lambda_{Na}})}$$

A.N

$$h = \frac{(3.14 - 0.36) \times 1.6.10^{-19}}{3 \times 10^8\,(\frac{1}{2537} - \frac{1}{5890}) \times 10^{10}} \simeq 6.6 \times 10^{-34}\,J.s$$

3) L'énergie d'extraction minimale des électrons du potassium : c'est l'énergie que le photon incident doit avoir pour extraire un e^- et le remettre sur la surface, donc

$$W_{extraction} = W_e = h\nu_s$$

De plus, si on suppose que le photon incident possède une énergie assez grande, il va extraire l'électron (et dans ce cas forcément l'énergie du photon $h\nu$ doit $> W_e$), et le communique le reste d'énergie sous forme d'E_c.

$$E_c = h\nu - W_e = \frac{hc}{\lambda} - W_e$$

En utilisant la radiation ultraviolette, on écrit :

$$W_e = \frac{hc}{\lambda_{Hg}} - E_c(UV)$$

A.N : $W_e = (6.62 \times 10^{-34} \times 3 \times 10^8)/(2537 \times 10^{-10} \times 1.6 \times 10^{-19}) - 3.14 = 1.74$ eV.
Remarque : on trouve le même résultat si on travail avec la radiation visible.

4) la longueur d'onde maximale produisant l'effet photo-électrique :
On

$$W_e = h\nu_s = \frac{hc}{\lambda_s} \Longrightarrow \lambda_s = \frac{hc}{W_e}$$

A.N : $\lambda_s = (6.62 \times 10^{-34}\, 3 \times 10^8) \Big/ (1.74 \times 1.6 \times 10^{-19}) \simeq 7.12 \times 10^{-7}\, m = 0.712\, \mu$m.

5) Le nombre n d'électrons reçus par l'anode en une seconde est calculé en utilisant la relation $I = Q/\Delta t$ avec $Q = N e$. Donc :

$$N = I\,\Delta t \,/\, e$$

A.N : $N = 4 \times 10^{-6} \,/\, 1.6 \times 10^{-19} = 2.5 \times 10^{13}$.

Solution 3: *Effet Compton*

I-) Formule relativiste reliant l'énergie relativiste, E, la masse au repos, m_0 et la quantité de mouvement, p d'une particule.

1) On a

$$\begin{aligned} E^2 - p^2c^2 &= m^2c^4 - (m\,v)^2c^2 \\ &= \frac{m_0^2c^4}{1-\frac{v^2}{c^2}} - \frac{m_0^2}{1-\frac{v^2}{c^2}}.v^2.c^2 \\ &= \frac{m_0^2c^6}{c^2-v^2} - \frac{m_0^2v^2c^4}{c^2-v^2} \\ &= \frac{m_0^2c^4}{c^2-v^2}\left(c^2-v^2\right) \\ &= m_0^2c^4 \end{aligned}$$

II-) <u>La variation $\Delta\lambda$</u>.

1) La conservation de la quantité de mouvement

$$\vec{p}_\gamma + \vec{0} = \vec{p}'_\gamma + \vec{p}_{e^-} \tag{1}$$

la conservation de l'énergie (expressions relativistes)

$$\underbrace{p_\gamma c}_{\gamma_{avant}} + \underbrace{m_0c^2}_{e^-_{avant}} = \underbrace{p'_\gamma\, c}_{\gamma_{apres}} + \underbrace{\sqrt{m_0^2c^4 + p_{e^-}^2c^2}}_{e^-_{apres}} \tag{2}$$

2) La variation de la longueur d'onde en fonction de l'angle θ que fait le photon diffusé avec le photon incident.
de (1) on a $\vec{p}_\gamma - \vec{p}'_\gamma = \vec{p}_{e^-} \Rightarrow p^2_{e^-} = p^2_\gamma + p'^2_\gamma - 2\vec{p}_\gamma.\vec{p}'_\gamma$

$$\Rightarrow p^2_{e^-} = p^2_\gamma + p'^2_\gamma - 2p_\gamma.p'_\gamma \cos\theta \quad (\star)$$

de (2) on tire $\sqrt{p^2_{e^-} + m_0^2c^2} = p_\gamma - p'_\gamma + m_0c$

$$\Rightarrow p^2_{e^-} = (p_\gamma - p'_\gamma)^2 + 2m_0c(p_\gamma - p'_\gamma) \quad (\star\star)$$

En identifiant les deux relations $(\star)$ et $(\star\star) \Rightarrow p_\gamma p'_\gamma(1-cos\theta) = m_0c(p_\gamma - p'_\gamma)$ or $p_\gamma = \frac{h}{\lambda_\gamma}$

$$\Rightarrow \boxed{\Delta\lambda = \lambda'_\gamma - \lambda_\gamma = \lambda_C(1-\cos\theta), \quad \left(\text{aussi } \Delta\lambda = \lambda'_\gamma - \lambda_\gamma = 2\lambda_C \sin^2\frac{\theta}{2}\right) \quad \text{avec } \lambda_C = \frac{h}{m_0c} = 0.024\text{Å}}$$

3) L'énergie cinétique transférée à l'électron après diffusion :
L'énergie cinétique de l'électron s'écrit $E^e_c = h\nu_\gamma - h\nu'_\gamma$.
D'autre part, de la relation précédente pour $\Delta\lambda$, on peut exprimer $\lambda'_\gamma = \lambda_\gamma + \lambda_C(1-\cos\theta)$. Donc

$$\frac{c}{\nu'_\gamma} = \frac{c}{\nu_\gamma} + \lambda_C(1-\cos\theta) \implies \frac{1}{h\nu'_\gamma} = \frac{1}{h\nu_\gamma} + \frac{\lambda_C}{hc}(1-\cos\theta) \implies h\nu'_\gamma = \frac{h\nu_\gamma}{1+\frac{\nu_\gamma}{c}\lambda_C(1-\cos\theta)}$$

Par suite

$$E^e_c = h\nu_\gamma - \frac{h\nu_\gamma}{1+\frac{\nu_\gamma}{c}\lambda_C(1-\cos\theta)} = \frac{h\nu_\gamma}{1+\frac{c}{\nu_\gamma\lambda_C(1-\cos\theta)}}$$

E^e_c est maximale si $\frac{c}{\nu_\gamma\lambda_C(1-\cos\theta)}$ est minimale, c-à-d $(1-\cos\theta)$ est maximale et donc $\cos\theta = -1 \implies \theta = \pi$. Par conséquent :

$$E^{max}_c = \frac{h\nu_\gamma}{1+\frac{c}{2\nu_\gamma\lambda_C}} = \frac{h\nu_\gamma}{1+\frac{m_0c^2}{2h\nu_\gamma}}$$

III-) Un électron frappé par un Rayon X de 0.5 MeV acquiert une énergie de 0.1 MeV.

1) En appliquant la loi de conservation de l'énergie totale, $E_{initiale} = E_{finale}$, on déduit que $0.5\,\text{MeV} = E'_\gamma + 0.1\,\text{MeV} \implies E'_\gamma = 0.4\,\text{MeV}$.
Comme

$$E'_\gamma = \frac{hc}{\lambda'_\gamma} \implies \lambda'_\gamma = \frac{hc}{E'_\gamma} = \frac{12412.5\,(\text{eV.Å})}{0.4\times10^6(\text{eV})} \simeq 31\times10^{-3}\,\text{Å}$$

2) Calculer l'angle que fait le photon diffusé avec le photon incident. Pour ce faire, on doit calculer la longueur d'onde du photon incident, λ_γ. Comme précédemment,

$$\lambda_\gamma = \frac{hc}{E_\gamma} = \frac{12412.5\,(\text{eV.Å})}{0.5\times10^6(\text{eV})} \simeq 24.8\times10^{-3}\,\text{Å}$$

et d'après la formule Compton pour $\Delta\lambda$: $\lambda'_\gamma - \lambda_\gamma = \lambda_C(1-\cos\theta)$
$\implies 31\times10^{-3} - 24.8\times10^{-3} = 0.024\,(1-\cos\theta)$, d'où $\theta = 42^o$

Solution 4: *Traitement classique ou quantique*

L'action est une grandeur homogène à (quantité de mouvement)$\times$(longueur) ou encore (énergie) $\times$(temps). Si :

i) action $\approx h$: déscription du système se fait par la théorie quantique

ii) action $\gg h$: déscription du système se fait par la théorie classique

Exemples

1) Atome d'hydrogène dont l'énergie d'ionisation est 13 eV émettant une radiation de longueur d'onde $\lambda = 100\,\text{nm}$
Dans ce cas on a $E = 13\,\text{eV} \simeq 2 \times 10^{-18}\,\text{J}$, et $\lambda = 100\,\text{nm}$ soit $\omega = 2\pi c/\lambda \simeq 2 \times 10^{16}\,\text{s}^{-1}$.
Donc l'action $= E/\omega = 1.15 \times 10^{-34}\,Kg\,m^2/s \approx h \implies$ traitement quantique.

2) Une montre à ressort possédant des parties mobiles de taille et de masse typiques : $d = 0.1\,mm$ et $m = 0.1\,mg$ et un temps typique $t = 1\,s$.
Dans ce cas on a,

$$d = 10^{-4}\,m, \qquad m = 10^{-7}\,kg \qquad \text{et } t = 1\,s$$

donc

$$\text{action} = A = m\,v \times d = m\,\frac{d}{t}.d = \frac{md^2}{t}$$

A.N

$$A = \frac{10^{-7}.10^{-8}}{1} = 10^{-15} \gg h$$

$\implies$ le traitement est classique.

3) Pour un noyau dont l'énergie de liaison est de l'ordre de 8 MeV on a :

$$E = 8\,MeV, \qquad m = 1.6 \times 10^{-27}\,Kg \implies p = \sqrt{2mE} \approx 6 \times 10^{-20}\,kg.m/s$$

Or

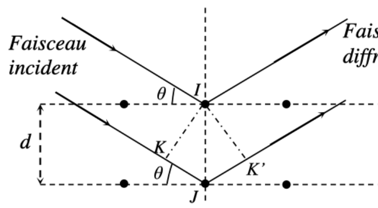
$$\text{action} = A = p\,r \simeq 6 \times 10^{-35}\,Kg.m^2/s \approx h$$

$\implies$ le traitement est quantique.

Solution 5: *Diffraction sur un cristal*

On a réalisé des expériences de diffraction sur un cristal en utilisant divers types de particules :

1) Quel est l'ordre de grandeur de la longueur d'onde des rayons X à utiliser pour avoir la diffraction ?. Pour ce faire, il faut savoir qu'un cristal est un arrangement régulier d'atomes (ou ions) disposés sur des plans réticulaires. La distance entre les plans réticulaires est d'environs 1 Å.



- Pour deux plans réticulaires successifs, les faisceaux diffractés présentent une différence de marche δ telle que : $\delta = 2KJ = 2d\cos(90-\theta) = 2d\sin\theta$. En plus, les ondes diffractées par les deux plans s'écrivent : $\psi_1 = A\,e^{-i(\omega t - kx)}$; $\psi_2 = A\,e^{-i(\omega t - kx - 2kd\sin\theta)}$.
Il y aura maximum de diffraction dans les directions θ_n telles que les ondes issues des différents plans réticulaires soient toutes en phase, c'est-à-dire qu'on a :

$$2kd\sin\theta_n = 2n\pi \qquad \implies \qquad 2d\sin\theta_n = n\frac{2\pi}{k} = n\,\lambda\,; \quad n \in \mathbb{N}^*$$

C'est la relation de Bragg.
Donc, pour que le phénomène de diffraction soit observable, il faut que la longueur d'ondes des rayons X utilisés soit du même ordre de grandeur que la distance inter réticulaire d, soit de l'ordre de 1 Å. Donc, $\lambda \approx 1$ Å.

- Energie des photons correspondant :

$$E = h\nu = \frac{h\,c}{\lambda}$$

A.N :

$$E = \frac{6.62 \times 10^{-34}.3 \times 10^{8}}{10^{-10}} = 1.98 \times 10^{-15}\,j$$

Soit en eV

$$E = \frac{1.98 \times 10^{-15}}{1.6 \times 10^{-19}} = 12.4\,KeV$$

2) Avec des neutrons thermiques :
- Longueur d'onde associée aux neutrons :

$$E_c = \frac{3}{2}\,k_B\,T = \frac{p^2}{2m_n} \quad \Longrightarrow \; p = \sqrt{3\,m_n\,k_B\,T}$$

Donc

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{3\,m_n\,k_B\,T}}$$

A.N :

$$\lambda = \frac{6.62 \times 10^{-34}}{\sqrt{3\,1.67 \times 10^{-27}\,1.38 \times 10^{-23}\,300}} \Longrightarrow \lambda = 1.45 \times 10^{-10}\,m = 1.45\,\text{Å}$$

Pourrait-on observer une figure de diffraction ?
On constate que la longueur d'onde associée aux neutrons est de même ordre de grandeur que la distance séparant les atomes du cristal ($\lambda \approx d$), ces neutrons seront diffractés par le cristal et donnés des figures de diffraction sur un écran.

3) Avec desélectrons accélérés sous une tension U :
Calculons la tension U permettant de réaliser des figures de diffraction, c'est-à-dire pour que la longueur d'onde associée aux électrons accélérés soit de l'ordre de $\lambda \approx 1$ Å. L'énergie cinétique E_c des électrons accélérés sous la tension U est :

$$E_c = e\,U = \frac{p^2}{2m_e} \quad \text{or} \quad \lambda = \frac{h}{p} \Longrightarrow U = \frac{1}{2m_e.e}\left(\frac{h}{\lambda}\right)^2$$

A.N :

$$U = \frac{1}{29 \times 10^{-31}.1.6 \times 10^{-19}}\left(\frac{6.62 \times 10^{-34}}{10^{-10}}\right)^2 \quad \Longrightarrow U = 152\,Volt$$

Solution 6: *Atome d'hydrogène*

La fonction d'onde décrivant l'état fondamental de l'électron de l'atome d'hydrogène s'écrit, en coordonnées sphériques :

$$\psi(r) = C\,e^{-\frac{r}{a}},$$

où C est une constante réelle et positive et a est le rayon de l'orbite de Bohr : $a = 0.53 \times 10^{-10}\,m$.

1) La constante de normalisation C :
La condition de normalisation de $\psi(x,t)$ s'écrit :

$$\iiint |\psi(x,t)|^2 dv = 1$$

Or, l'élément de volume pour une sphère dont le rayon r varie est :

$$dv = 4\,\pi\,r^2\,dr$$

Donc

$$\begin{aligned}
1 &= \iiint |\psi(x,t)|^2 dv = 4\pi |C|^2 \int_0^{+\infty} r^2 e^{-\frac{2r}{a}} dr \\
&= 4\pi |C|^2 \underbrace{\left[-\frac{a}{2} r^2 e^{-\frac{2r}{a}}\right]_0^{+\infty}}_{=0} + 4\pi a |C|^2 \int_0^{+\infty} r\, e^{-\frac{2r}{a}} dr \\
&= 4\pi a |C|^2 \underbrace{\left[-\frac{a}{2} r\, e^{-\frac{2r}{a}}\right]_0^{+\infty}}_{=0} + 4\pi \frac{a^2}{2} |C|^2 \int_0^{+\infty} e^{-\frac{2r}{a}} dr = 4\pi \frac{a^2}{2} |C|^2 \underbrace{\left[-\frac{a}{2} e^{-\frac{2r}{a}}\right]_0^{+\infty}}_{=a/2} = 4\pi \frac{a^3}{4} |C|^2
\end{aligned}$$

Ainsi,

$$C = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}$$

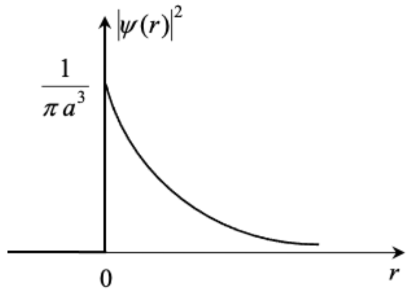
2) Densité de probabilité de présence de l'électron :
La fonction d'onde décrivant l'état fondamental de l'électron s'écrit alors :

$$\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-\frac{r}{a}}$$

La densité de probabilité associée à la particule est donnée par le carré du module la fonction d'onde $\psi(r)$:

$$|\psi(r)|^2 = \psi^*(r)\psi(r) = \frac{1}{\pi a^3} e^{-2\frac{r}{a}}$$

Allure de $|\psi(r)|^2$ en fonction de r :



La densité de probabilité est maximale pour $r = 0$, c'est-à-dire au centre de l'atome.
3) Probabilité de trouver l'électron entre les deux sphères de rayons r et $r + dr$.

$$d\mathcal{P} = |\psi(r)|^2 dv = \frac{1}{\pi a^3} e^{-2\frac{r}{a}} 4\pi r^2 dr \quad \Longrightarrow \quad d\mathcal{P} = \frac{4}{a^3} e^{-2\frac{r}{a}} r^2 dr$$

Pour quelle valeur de r, cette probabilité $d\mathcal{P}$ est-elle maximale ?
Soit r_0 le rayon le plus probable, donc :

$$\frac{d}{dr}\left(\frac{d\mathcal{P}}{dr}\right)_{r_0} = 0 \quad \Longrightarrow \quad \frac{4}{a^3}\left(2r_0 - \frac{2r_0^2}{a}\right) e^{-2\frac{r}{a}} = 0 \quad \Longrightarrow \quad r_0 = a$$

Ainsi, le rayon le plus probable coïncide avec le rayon de l'orbite fondamentale (rayon de Bohr).

Solution 7: *Paquet d'ondes gaussien (facultatif)*

Une particule libre de masse m, d'impulsion $p = \hbar k$ et d'énergie E décrite par le paquet d'ondes $\psi(x,t)$ à une dimension :

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int g(k)\, e^{i(kx-\omega t)} dk \tag{1}$$

1) **Relation entre** E **et** k :

La particule est libre, donc son énergie potentielle est une constante qu'on prendra égale à zéro. La fonction d'onde $\psi(x,t)$ vérifie alors l'équation de Schrödinger suivante :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t)$$

- $\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int g(k)\,(-i\omega)\,e^{i(kx-\omega t)}dk$
- $\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int g(k)\,(-k^2)\,e^{i(kx-\omega t)}dk$

Donc :

$$i\hbar\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int g(k)\,(-i\omega)\,e^{i(kx-\omega t)}dk = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int g(k)\,(-k^2)\,e^{i(kx-\omega t)}dk$$

D'où la **relation de dispersion** :

$$\hbar\omega = E = \frac{\hbar^2k^2}{2m} \quad \Longrightarrow \omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

2) On considère le paquet d'ondes à l'instant initial :

$$\psi(x,t=0) = \psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int g(k)\,e^{ikx}dk \tag{2}$$

a) La transformée de Fourier de $\psi(x)$ est par définition :

$$f(k) = TF[\psi(x)] = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int \psi(x)\,e^{-ikx}dx$$

La transformée de Fourier inverse est :

$$\psi(x) = TF^{-1}[f(k)] = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int f(k)\,e^{ikx}dk$$

Par identification avec l'expression (2) de $\psi(x)$, on déduit que $g(k) = f(k) = TF[\psi(x)]$, ce qui montre que $g(k)$ est la transformée de Fourier de $\psi(x)$.

b) **Égalité de Parseval Plancherel** :

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi(x)|^2dx &= \int_{-\infty}^{+\infty}\psi(x)\psi^*(x)dx \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty}\Big(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int g(k)\,e^{ikx}dk\Big)\psi^*(x)dx \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty}\Big(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int \psi^*(x)\,e^{ikx}dx\Big)g(k)dk
\end{aligned}$$

Or

$$g(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int \psi(x)\,e^{-ikx}dx \iff g^*(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int \psi^*(x)\,e^{+ikx}dx$$

Donc

$$\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi(x)|^2dx = \int_{-\infty}^{+\infty}|g(k)|^2dk$$

Remarques :

∗ $|\psi(x)|^2$ et $|g(k)|^2$ expriment la densité de probabilité de la particule respectivement dans l'espace des positions et l'espace des vecteurs d'onde (ou d'impulsions puisque $p = \hbar k$);

* $|\psi(x)|^2 dx$ est la probabilité de trouver la position de la particule dans l'intervalle $[x, x+dx]$;
* $|g(k)|^2 dk$ est la probabilité de trouver le vecteur d'onde de la particule dans l'intervalle $[k, k+dk]$;
* $\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx$ et $\int_{-\infty}^{+\infty} |g(k)|^2 dk$ représentent la probabilité totale de présence de la particule respectivement dans l'espace des positions et l'espace des impulsions.

On suppose par la suite que la fonction est une gaussienne centrée en k_0 :

$$g(k) = \left(\frac{a^2}{2\pi}\right)^{1/4} exp\left(-\frac{a^2}{4}(k-k_0)^2\right)$$

où a est une constante ayant la dimension d'une longueur.

3) Paquet d'ondes à l'instant $t = 0$:

a) Expression de $\psi(x, 0)$
Remplaçons $g(k)$ par son expression dans la relation (2) :

$$\psi(x, t=0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\left(\frac{a^2}{2\pi}\right)^{1/4} \int e^{ikx - \frac{a^2}{4}(k-k_0)^2} dk$$

Posons : $y = k - k_0$, donc :

$$\psi(x, t=0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\left(\frac{a^2}{2\pi}\right)^{1/4} e^{ik_0x} \int e^{iyx - \frac{a^2}{4}y^2} dy$$

Or

$$\int e^{iyx - \frac{a^2}{4}y^2} dy = \sqrt{\frac{4\pi}{a^2}} e^{\frac{(ix)^2}{a^2}} = \sqrt{\frac{4\pi}{a^2}} e^{-\frac{x^2}{a^2}}$$

Donc :

$$\psi(x, t=0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\left(\frac{a^2}{2\pi}\right)^{1/4} e^{ik_0x} \sqrt{\frac{4\pi}{a^2}} e^{-\frac{x^2}{a^2}}$$

D'où l'expression du paquet d'onde à l'instant $t = 0$:

$$\psi(x, 0) = \left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{1/4} e^{ik_0x} e^{-\frac{x^2}{a^2}}$$

b) **Position x_M du centre du paquet d'ondes :**
Par définition le centre x_M du paquet d'ondes correspond au point où la densité de probabilité $|\psi(x, 0)|^2$ est maximale.
On a :

$$|\psi(x, 0)|^2 = \sqrt{\frac{2}{\pi a^2}} \exp\left(\frac{-2x^2}{a^2}\right)$$

Donc

$$\frac{d}{dx}|\psi(x, 0)|^2 = -\frac{4}{a^2} x \sqrt{\frac{2}{\pi a^2}} \exp\left(\frac{-2x^2}{a^2}\right) = 0 \implies x_M = 0$$

Ainsi, à $t = 0$, le centre du paquet d'ondes est situé au point d'abscisse $x_M = 0$.

c) **La probabilité de trouver la particule dans tout l'espace est définie par :**

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x, 0)|^2 dx = \sqrt{\frac{2}{\pi a^2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(\frac{-2x^2}{a^2}\right) dx = \sqrt{\frac{2}{\pi a^2}} \times \sqrt{\frac{\pi a^2}{2}} = 1$$

d) **Détermination des largeurs $\Delta x(0)$ et $\Delta k(0)$:**
Définition :

La largeur Δy d'une gaussienne $f(y) = \exp(-y^2/b^2)$ est donnée par $\Delta y = b/\sqrt{2}$.
Largeur $\Delta x(0)$ de $|\psi(x,0)|^2$:

$$|\psi(x,0)|^2 = \sqrt{\frac{2}{\pi a^2}} \exp\left(\frac{-2x^2}{a^2}\right) \quad \Longrightarrow \quad \Delta x(0) = \frac{a}{2}$$

Largeur $\Delta k(0)$ de $|g(k)|^2$:

$$|g(k)|^2 = \sqrt{\frac{a^2}{2\pi}} \exp\left(\frac{-a^2}{2}(k-k_0)^2\right) \quad \Longrightarrow \quad \Delta k(0) = \frac{1}{a}$$

Relation de Heisenberg :

$$\Delta x(0).\Delta k(0) = \frac{1}{2} \quad \Longrightarrow \quad \Delta x(0).\Delta p(0) = \frac{\hbar}{2}$$

Cette relation est conforme au principe d'indétermination de Heisenberg.

4) Évolution du paquet d'ondes $\psi(x,t)$ dans le temps :
A l'instant $t > 0$, l'expression du paquet d'ondes $\psi(x,t)$ est de la forme (à ne pas démontrer) :

$$\psi(x,t) = \left(\frac{2a^2}{\pi}\right)^{1/4} \frac{e^{i\phi}.\,e^{ik_0x}}{\left(a^4 + \frac{4\hbar^2t^2}{m^2}\right)^{1/4}} \exp\left[-\frac{\left(x - \frac{\hbar k_0}{m}t\right)^2}{a^2 + \frac{2i\hbar t}{m}}\right]$$

a) **La densité de probabilité $|\psi(x,t)|^2$ associée à la particule à l'instant t :**

$$|\psi(x,t)|^2 = \left(\frac{2a^2}{\pi}\right)^{1/2} \frac{1}{\left(a^4 + \frac{4\hbar^2t^2}{m^2}\right)^{1/2}} \exp\left[-\frac{\left(x - \frac{\hbar k_0}{m}t\right)^2}{a^2 + \frac{2i\hbar t}{m}} - \frac{\left(x - \frac{\hbar k_0}{m}t\right)^2}{a^2 - \frac{2i\hbar t}{m}}\right]$$

Donc

$$|\psi(x,t)|^2 = \frac{\left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{1/2}}{\left(1 + \frac{4\hbar^2t^2}{m^2a^4}\right)^{1/2}} \exp\left[-\frac{2a^2\left(x - \frac{\hbar k_0}{m}t\right)^2}{a^4 + \frac{4\hbar^2t^2}{m^2}}\right]$$

b) **Position $x_M(t)$ du centre du paquet d'ondes à l'instant t :**

$$\frac{\partial}{\partial x}|\psi(x,t)|^2 = \alpha\left(x - \frac{\hbar k_0}{m}t\right) \exp\left[-\frac{2a^2\left(x - \frac{\hbar k_0}{m}t\right)^2}{a^4 + \frac{4\hbar^2t^2}{m^2}}\right] = 0 \Longrightarrow x_M(t) = \frac{\hbar k_0}{m}t$$

Ainsi, à l'instant t, le centre du paquet d'ondes est situé au point d'abscisse $x_M(t) = \frac{\hbar k_0}{m}t$.
La vitesse de déplacement du centre du paquet est :

$$v = \frac{\hbar k_0}{m}$$

Le mouvement du centre du paquet d'ondes est uniforme.
Comparaison avec la vitesse de groupe associée au paquet :
Par définition, la vitesse de groupe associée au paquet est :

$$v_g = \left.\frac{d\,\omega(k)}{dk}\right)_{k=k_0}$$

Or :

$$\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

Donc

$$v_g = \frac{\hbar k_0}{m}$$

On constate que la vitesse de groupe associée au paquet d'ondes coïncide avec la vitesse du centre du paquet.

c) **Détermination de la largeur $\Delta x(t)$ et de l'amplitude $A(t)$ de $|\psi(x,t)|^2$:**
La densité de probabilité $|\psi(x,t)|^2$ associée à la particule à l'instant t est une gaussienne de la forme :

$$|\psi(x,t)|^2 = A(t)\, e^{-X^2/b^2}$$

où $A(t)$ est l'amplitude du paquet :

$$A(t) = \frac{\left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{1/2}}{\left(1 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2 a^4}\right)^{1/2}}$$

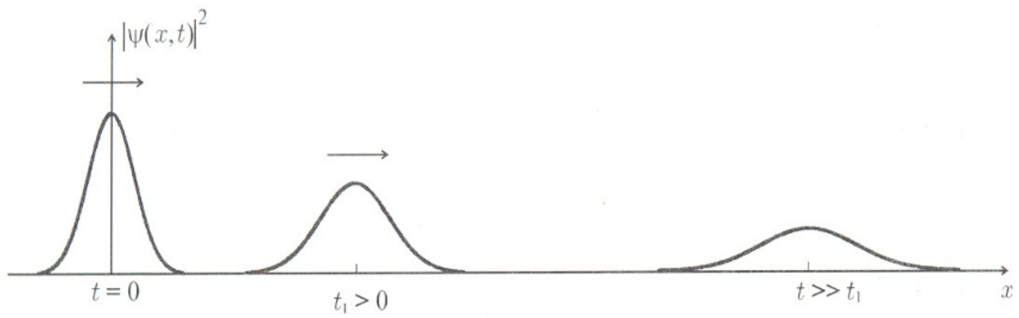
et le paramètre b est :

$$b = \frac{a}{\sqrt{2}}\sqrt{1 + \frac{4\hbar^2\, t^2}{m^2\, a^4}}$$

La largeur du paquet est alors :

$$\Delta x(t) = \frac{b}{\sqrt{2}} = \frac{a}{2}\sqrt{1 + \frac{4\hbar^2\, t^2}{m^2\, a^4}}$$

Evolution de la forme de la densité de probabilité au cours du temps :
Quand le temps t augmente, l'amplitude $A(t)$ diminue alors que la largeur $\Delta x(t)$ augmente, c'est l'étalement du paquet d'ondes.



Étalement du paquet d'ondes au cours du temps