

Table de matières

Avant-propos.

iv

Partie 1- Exercices et problèmes d'approfondissement de Mécanique Quantique.

EN 1 – Puits de potentiel «rectangulaire» infini	3
EN 2 – Puits de potentiel unidimensionnel fini	7
EN 3 – Effet tunnel électronique	15
EN 4 – Puits de potentiel parallélépipédique infini	18
EN 5 – Equation d'évolution et principe de superposition	19
EN 6 – Résolution matricielle de l'équation de Schrödinger	20
EN 7 – Résolution matricielle de l'équation de Schrödinger. Application : chaîne linéaire atomique dans l'approche des liaisons fortes	24
EN 8 – Application des postulats	28
EN 9 – Oscillateur harmonique unidimensionnel	29
EN 10 – Oscillateur harmonique : application à l'absorption et à l'émission stimulée	30
EN 11 – Etats quasi-classiques de l'oscillateur harmonique	33
EN 12 – Moment cinétique : rotateur plan	36
EN 13 – Moment cinétique : étude de l'exciton chargé X^- dans les boîtes quantiques $CdTe : Mn^{2+} / ZnTe$ comportant un ion Mn^{2+} unique	37
EN 14 – Particule dans un potentiel central. Application : états liés dans un atome à un électron	40
EN 15 – Atome d'hydrogène : résolution directe de l'équation de Schrödinger	52
EN 16 – Atome d'hydrogène à l'état fondamental	51
EN 17 – Particule dans un potentiel périodique : modèle de Krönig et Penney	56
EN 18 – Théorème de Bloch-Floquet, structure de bande et symétries	60
EN 19 – Forces de Van der Waals	68

Partie 2- Annales de Physique Quantique

EN 20 – Oscillateur harmonique perturbé	73
EN 21 – Spin d'un atome : application des postulats	74
EN 22 – Interprétation de la radioactivité α	75
EN 23 – Etude de la rotation de la molécule d'eau	80
EN 24 – Effet Stark sur l'atome d'hydrogène : polarisabilité et levée de dégénérescence	83
EN 25 – Mesure de la polarisation de photons	85
EN 26 – Transition métal \rightarrow isolant dans un semi-conducteur	88
EN 27 – Estimation de l'énergie de l'état fondamental de l'atome d'Helium	95

EN 28 – Etude d’un dispositif semi-conducteur intrinsèque : système à double puits quantique en champ électrique (1988-1989)	97
EN 29 – Maser à ammoniac	102
EN 30 – Inversion du spin d’un neutron	106
EN 31 – Microscope à effet tunnel	108
EN 32 – Puits quantiques semiconducteurs pour la détection de signaux infrarouges	117
EN 33 – Interféromètre à l’échelle nanométrique	127
EN 34 – Une aiguille quantique dans une botte de foin	132
EN 35 – Structure fine de l’atome d’hydrogène	136
EN 36 – Extinction de luminescence dans les puits quantiques semiconducteurs	141
EN 37 – Téléportation de l’état d’une particule	152
EN 38 – Transfert d’électrons dans un dimère de ruthénium	157
EN 39 – Excitons-Polaritons de microcavité semiconductrice	164
EN 40 – La porte logique quantique « ou-exclusif »	168
EN 41 – Réalisation d’une porte logique quantique « ou-exclusif » à partir des états de spin d’une paire d’électrons couplés par effet tunnel	172
EN 42 – Champ de fluctuation du vide	178
EN 43 – Emission spontanée et durée de vie d’un état excité atomique	183
EN 44 – Réinterprétation de la loi de Coulomb en termes d’échanges de photons	188
EN 45 – Interaction d’un atome neutre avec une surface conductrice : force de Casimir-Polder	201
EN 46 – Etude de colorants	213
EN 47 – La masse du neutrino	216
EN 48 – Etats emmêlés électroniques des premiers états excités de l’atome d’Hélium	222
EN 49 – Interférométrie Atomique	227
EN 50 – Structure de bande électronique du graphène par la méthode des liaisons fortes	233

Avant-propos

Ce recueil d'exercices et de problèmes de Mécanique Quantique s'adresse à un public très large d'élèves d'écoles d'ingénieurs ou d'étudiants de licence et de mastère universitaires. Dans un même ouvrage, nous avons regroupé des exercices traditionnels permettant d'apprécier le formalisme de la physique quantique, exercices dont l'origine est à trouver dans les premières publications des fondateurs de la Mécanique Quantique, ainsi que des problèmes d'approfondissement mettant en jeu ce formalisme de façon plus poussée dans divers domaines de la physique. Ce recueil est divisé en deux parties. La première partie contient des exercices et problèmes destinés à illustrer et compléter le cours magistral. Puis notre recueil quitte progressivement ces exercices classiques pour aborder dans la deuxième partie, consacrée aux annales d'examen de Mécanique Quantique de Sup'Aéro, des problèmes plus actuels de la physique quantique moderne, élaborés à partir des développements récents dans des domaines très variés tels que sciences des surfaces, théorie de l'information quantique, physique des particules élémentaires, physique mésoscopique ou interférométrie atomique. Donnés comme examen terminal du module de Mécanique Quantique – du moins en partie pour les plus copieux – les énoncés de la plupart de ces problèmes sont accompagnés d'un préambule les resituant dans leur contexte présent. Il s'agit d'un effort original visant à restituer l'actualité de l'approche quantique dans la physique contemporaine.

Les exercices et problèmes d'approfondissement de la première partie de ce recueil peuvent être abordés dès le niveau licence de nos universités et grandes écoles d'ingénieurs. Les problèmes de la deuxième partie intéresseront plus particulièrement, pour les plus récents d'entre-eux, les élèves d'un niveau Master. Construits à partir de publications originales marquantes de ces dernières années, par exemple en ingénierie quantique, ils ont été décomposés pas à pas pour permettre de retrouver par des calculs analytiques simples les grandes avancées de la physique quantique moderne. Ces problèmes ne nécessitent pas de connaissances approfondies dans les domaines particuliers dont ils sont issus. Cependant, une bibliographie de référence est proposée à la fin de chacun d'entre eux, alliant à la fois des textes introductifs et des articles plus spécialisés, afin de permettre aux étudiants qui le souhaitent de compléter leurs connaissances sur le sujet abordé ou l'application développée.

Notre recueil d'exercices et de problèmes doit beaucoup à notre enseignement de Mécanique Quantique à l'Institut Supérieur de l'Aéronautique et de l'Espace (Sup'Aéro). Il doit tout d'abord aux élèves, qui par leurs questions et remarques sont des catalyseurs d'un enrichissement pédagogique, et qui nous ont poussés à construire des problèmes en prise avec des applications récentes de la mécanique quantique. C'est la raison pour laquelle certains des énoncés proposés sont relativement développés, allant jusqu'à une explication détaillée du principe de fonctionnement d'une application donnée. Le cours magistral est complété par un enseignement par petits groupes d'élèves (Petites Classes) où celui-ci est approfondi et discuté. Le suivi des petites classes est assuré par des enseignants-chercheurs et des chercheurs pratiquant activement cette approche quantique dans les divers champs d'application de la mécanique quantique moderne : physique moléculaire, nanosciences, atomes froids, physique mésoscopique ou spectroscopies ultimes. Au cours du module de Mécanique Quantique, une rotation de ces enseignants assure donc une diffusion large et moderne du savoir quantique. Nous tenons à remercier pour leur contribution tous ceux qui sont intervenus dans cet enseignement et que nous ne pouvons tous citer ; parmi les premiers, F. Spiegelmann (CNRS-IRSAMC) qui a longtemps enseigné dans notre équipe ; parmi les plus récents, M. Rapacioli (UPS-IRSAMC), S. Massenot (ISAE-Sup'Aero) et plus particulièrement E. Fromager (UPS-IRSAMC), N. Theret (CNES) et R. Mathevet (UPS-IRSAMC) pour leur participation à l'effort de rédaction. Nous remercions également la Direction des Etudes de l'ISAE et notamment le Pr. M. Samuelides pour leur soutien tout au long des années de construction du cours de Mécanique Quantique à Sup'Aéro. Nous remercions également nos collègues de laboratoire pour les discussions enrichissantes tenues quotidiennement et qui ont pu susciter l'élaboration de certains des problèmes de physique quantique présentés ici. Enfin nous remercions Florent Teichteil pour son aide efficace dans la saisie latex de cet ouvrage.

Christian Teichteil, Thierry Amand, Christian Joachim

Exercices et problèmes d'approfondissement de Mécanique Quantique

EN 1 - Puits de potentiel «rectangulaire» infini

Préambule.

L'objectif de ce problème est de faire apparaître aussi simplement que possible la notion de *quantification de l'énergie* d'une particule dans un *état lié*. Un état lié¹ est un état dont l'énergie totale est inférieure à l'énergie potentielle², lorsque les coordonnées de position de la particule sont suffisamment grandes³, et c'est par exemple le cas de l'atome d'hydrogène dans l'état fondamental schématiquement représenté ci-dessous :

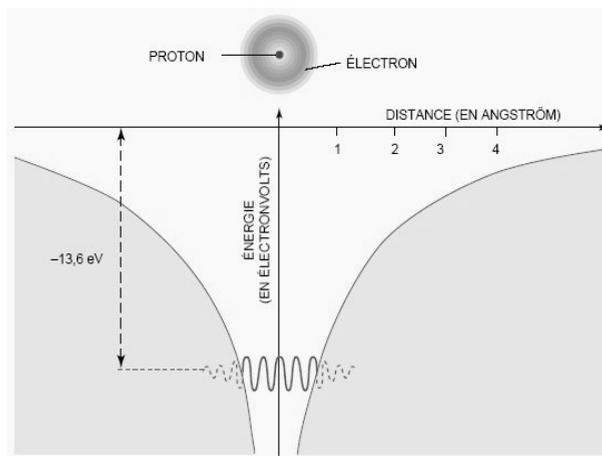


Figure 1.1: Atome d'hydrogène. L'électron est piégé dans le puits de potentiel coulombien (en $1/r$) du noyau (proton). Le modèle, à symétrie axiale, est ici représenté en coupe dans un plan (d'après *Pour la Science*). On peut remarquer que l'électron occupe dans l'espace une couronne sphérique de diamètre extérieur de l'ordre de l'Angström (voir EN 16).

¹La notion d'état lié n'est pas propre à la mécanique quantique, et peut être également définie en physique classique.

²L'énergie potentielle peut être de nature quelconque, gravitationnelle, électrique, ou autre. Cependant pour les systèmes quantiques généralement considérés (atomes, molécules, solides, etc ...) l'interaction gravitationnelle est considérablement plus faible que l'interaction électromagnétique (elle-même plus faible que l'interaction nucléaire), et elle est négligée.

³Plus précisément, $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^3$ étant le domaine de définition du potentiel $V(\mathbf{r})$ (par exemple pour l'atome d'hydrogène $\mathcal{D} = (\mathbb{R}^3)^*$), $\exists R > 0 \in \mathcal{D} : \forall \mathbf{r}, |\mathbf{r}| > R \Rightarrow E < V(\mathbf{r})$. Ceci peut être généralisé à un espace de dimension quelconque. Le caractère lié peut être total (cas des puits de potentiel tridimensionnels, voir EN 4), ou partiel, ne se produisant que pour certaines directions de l'espace (cas des puits de potentiel unidimensionnels, voir EN 1, EN 2), ou pour certaines variables seulement (cas de la distance relative entre électron et noyau dans l'atome d'hydrogène, voir EN 14).

La définition d'un *état libre* s'obtient par la négation de la propriété précédente.

Cependant la résolution analytique de l'équation de Schrödinger⁴ est dans le cas de l'illustration précédente relativement complexe⁵. La quantification de l'énergie – discrétisation de la suite des énergies possibles – est essentiellement due dans le cas des états liés à des conditions aux limites imposées à la fonction d'onde du système⁶, et il s'agit ici de se focaliser sur cet aspect en faisant un certain nombre d'idéalisations physiques.

Considérons à cet effet une particule supposée *ponctuelle*, de masse m , astreinte à se mouvoir *sans position privilégiée* sur un segment de longueur ℓ (pour simplifier on ne considère qu'une seule dimension⁷). Physiquement cela correspond à une particule piégée dans une région de l'espace limitée par deux *parois parfaitement réfléchissantes* qui peuvent être modélisées par un puits à parois rectilignes (on parle usuellement de puits «rectangulaire»), l'une située en $x = 0$, l'autre en $x = \ell$, et de hauteur infinie. Puisque l'origine d'un potentiel est arbitraire on prendra cette origine dans la zone de résidence de la particule ($\mathcal{D} =]0, \ell[$) et puisque la particule s'y meut sans position privilégiée le potentiel y est constant et indépendant du temps⁸, soit : $V(x) = 0$ pour $x \in]0, \ell[$ (Figure 1.2).

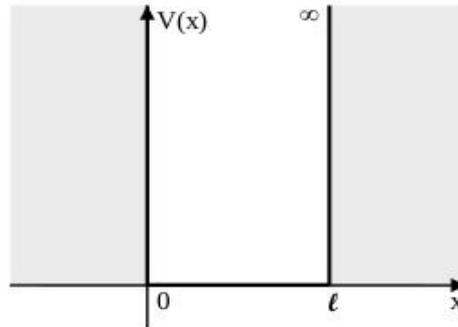


Figure 1.2: Puits de potentiel rectangulaire infini unidimensionnel.

Dans ce modèle trois idéalisations physiques interviennent : la notion de particule ponctuelle⁹, un puits infiniment profond signifiant que quelle que soit l'énergie apportée de

⁴La résolution analytique de l'équation de Schrödinger pour les systèmes réels (atomes multi-électroniques, etc ...) est généralement impossible, et seuls quelques exemples – parmi lesquels ceux de cet ouvrage – sont analytiquement résolubles. Dans la pratique, les systèmes réels sont théoriquement étudiés *via* des logiciels spécialisés (physique atomique, moléculaire, du solide, etc ...) résolvant par des méthodes numériques soit l'équation d'état non relativiste de Schrödinger, soit sa correspondante relativiste de Dirac.

⁵Voir EN 14, EN 15.

⁶Ceci est général en physique : lorsque des conditions aux limites sont imposées à un phénomène ondulatoire des *modes propres* de vibration apparaissent.

⁷Voir EN 4 pour le même problème à 3 dimensions.

⁸Ce que l'on nomme *potentiel* en Mécanique Quantique est très souvent en fait *l'énergie potentielle* intervenant dans l'opérateur hamiltonien.

⁹Ceci est constamment utilisé en mécanique quantique, mais est pris en compte avec l'utilisation des inégalités spatiales de Heisenberg. Pour un approfondissement de ce sujet et une interprétation actualisée des inégalités de Heisenberg on peut consulter les références [1] et [2] (page 115).

l'extérieur du système on ne peut en extraire la particule, et un potentiel discontinu ¹⁰. Ces deux dernières idéalizations physiques ont pour effet de considérablement simplifier la résolution de l'équation différentielle du second ordre de Schrödinger indépendante du temps, dans laquelle la fonction $V(x)$ est une constante dans la région d'évolution de la particule.

1 – Résolution simplifiée de l'équation de Schrödinger.

Nous ne considérons dans cette partie que l'équation de Schrödinger indépendante du temps pour les états stationnaires $\psi(x)$ d'énergie constante E que nous recherchons.

1.1– Ecrire l'équation de Schrödinger indépendante du temps dans le puits ($x \in]0, \ell[$) ainsi qu'à l'extérieur. On posera pour simplifier l'écriture : $\frac{2mE}{\hbar^2} = k^2$.

1.2– Montrer qu'à l'extérieur du puits la fonction d'onde est nulle. En déduire que la particule a une probabilité nulle d'être à l'extérieur du puits.

1.3– **Fonctions d'onde périodiques.** Donner la solution générale de l'équation de Schrödinger pour $x \in]0, \ell[$ en fonction des lignes trigonométriques.

1.4– **Conditions aux limites.** Les fonctions d'onde étant nulles à l'extérieur du puits, exprimer qu'elles s'annulent aux limites ($x = 0$ et $x = \ell$) du domaine de résidence de la particule.

1.5– Déduire de la question 1.4 les fonctions d'onde du système et en déduire que la constante k ne peut être nulle.

1.6– **Quantification de l'énergie.** Déduire de la question 1.4 les énergies possibles du système.

1.7– **Condition de normalisation.** Rappeler la raison pour laquelle les fonctions d'onde doivent être normées à l'unité. Normer les fonctions d'onde du système (on supposera pour simplifier que la constante arbitraire d'intégration est réelle et positive). Représenter graphiquement les quatre premières solutions.

¹⁰La discontinuité du potentiel intervient dans les modèles utilisés dans les textes EN 1 à EN 4 de ce recueil, ainsi que par exemple EN 28 de la seconde partie. On peut noter qu'un potentiel est fondamentalement une fonction continue des variables d'espace. Cependant il est commode dans certains cas de l'approximer par une fonction potentielle continue par morceaux.

2 – Compléments.

On rappelle que la solution générale pour les états stationnaires, issue de l'équation d'évolution temporelle (encore appelée équation de Schrödinger dépendant du temps), s'écrit :

$$\Psi(x, t) = \psi(x) \cdot e^{-i \frac{E}{\hbar} t}$$

Les solutions quantifiées indépendantes du temps $\psi_n(x)$ et E_n ont été trouvées dans la partie 1.

2.1– Interprétation physique des solutions particulières de l'équation de Schrödinger. Ecrire la solution générale $\psi(x)$ de l'équation de Schrödinger indépendante du temps en fonction d'exponentielles de k et x . Exprimer $\Psi(x, t)$ et interpréter physiquement les deux solutions particulières ¹¹.

2.2– Exprimer les conditions aux limites, et montrer que l'on est ramené aux solutions trouvées en 1.5 et 1.6 .

2.3– Inégalités spatiales de Heisenberg. Un calcul correct –qui n'est pas ici demandé– des écarts quadratiques moyens sur la position de la particule (supposée être ponctuelle) Δx et sur la quantité de mouvement Δp doit vérifier l'inégalité spatiale de Heisenberg $\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$. Estimer grossièrement Δx et Δp pour les trois premiers états. L'inégalité spatiale de Heisenberg $\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$ est-elle vérifiée ? Pourquoi ne trouve-t-on pas pour l'état fondamental $\Delta x \cdot \Delta p = \frac{\hbar}{2}$?

2.4– Application numérique. Considérons un électron dans un atome ($m_e = 9,1 \cdot 10^{-31}$ kg, $\ell_{at} \approx 3 \text{ \AA}$) et un proton dans un noyau ($m_p \approx 1850 m_e$, $\ell_n \approx 10^{-15}$ m) que l'on suppose pouvoir être décrits par le modèle frustré du puits de potentiel rectangulaire infini à une dimension. Calculer pour l'électron et le proton leur énergie E_e et E_p à l'état fondamental, ainsi que l'énergie δE_e et δE_p qu'il faut leur apporter pour les amener à leur premier état excité. Quelle conclusion peut-on en tirer ?

Références.

[1] J.M. Levy-Leblond, «Les inégalités de Heisenberg » , *Bulletin de l'Union des Physiciens*, page 558, volume 1 (1973).

[2] J.M. Levy-Leblond et F. Balibar, «Quantique - Rudiments » , InterEditions CNRS, Paris (1984).

¹¹Ceci est en particulier utile pour l'interprétation physique des solutions de la barrière de potentiel EN 3.