TD de mécanique quantique n°1

- Constante de Boltzmann: $k_B = 1{,}38\ 10^{-23}$ JK^{-1}.
- Constante de Planck: $h = 6{,}62\ 10^{-34}$ Js (ou bien $\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1{,}05\ 10^{-34}$ Js).
- Nombre d'Avogadro: $\mathcal{N}_A = 6{,}02\ 10^{23}$.
- Masse et charge de l'électron: $m_e = 9{,}10\ 10^{-31}$ kg, $q = -1{,}60\ 10^{-19}$ C.

Exercice 1: Analogie hydrodynamique

On considère un paquet d'onde $\psi(x,t)$, associé à un quanton de masse m dans un potentiel $U(x)$ (pour simplifier on ne prend en compte qu'une seule dimension d'espace mais les conclusions sont générales).

1. En considérant les parties réelles et imaginaires de l'équation de Schrödinger, trouver les deux équations vérifiées par l'amplitude ($\sqrt{\rho}$) et la phase (S) de la fonction d'onde, définies par l'expression:

$$\Psi(x,t) = \sqrt{\rho(x,t)} \exp\left(i \frac{S(x,t)}{\hbar} \right)$$

2. On note $\partial_x f$, la dérivée partielle d'une fonction f par rapport à la variable x [1]. Calculer la quantité $j(x,t) = \frac{\hbar}{2mi}(\Psi^* \partial_x \Psi - c.c.)$ en terme de ρ et S. Expliquer la dénomination "densité de courant de probabilité" pour cette quantité.

3. On définit un champ de "vitesse" à l'aide de la relation $v = \frac{\partial_x S}{m}$. Ecrire le système d'équations vérifiées par les champs ρ et v.

4. Par analogie avec un fluide classique, définir la notion de pression quantique [2] et montrer que son expression peut-être écrite sous la forme:

$$P = P_0 + \frac{\hbar^2}{2m^2} \left((\partial_x \alpha)^2 - \alpha \partial_x^2 \alpha \right) \quad \text{avec,} \quad \alpha = \sqrt{\rho} \quad .$$

   Calculer $P(x)$ dans le cas d'un paquet d'ondes gaussien défini par:

$$\Psi(x) = \mathcal{N} \exp\left(-\frac{x^2}{4a^2} \right) \quad .$$

5. Exprimer $S(x,t)$ en fonction de l'énergie et de la quantité de mouvement, lorsque le paquet donde est une onde de de Broglie s'étendant sur une distance $a(t)$. Quelle inégalité doit vérifier la longueur d'onde λ pour que l'on puisse négliger la pression quantique ?

[1] On adoptera souvent la notation $\partial_x = \frac{\partial}{\partial x}$ et aussi $\partial_t = \frac{\partial}{\partial t}$.

[2] On rappelle l'équation d'Euler pour un fluide parfait de densité ρ décrit par le champ de vitesse $\vec{v}$, le champ de pression P et avec une force volumique $\rho \vec{g}$:

$$\partial_t \vec{v} + (\vec{v}.\vec{\nabla})\vec{v} = -\frac{1}{\rho} \overrightarrow{\mathcal{G}\text{rad}}\ P + \vec{g} \quad .$$

Exercice 2: Ordres de grandeur

En mécanique classique, on définit pour un point matériel allant du point A à l'instant t_0 au point B à l'instant t, l'action $\mathcal{S}_{cl}$:

$$\mathcal{S}_{cl}(x,t) = -E(t-t_0) + m\int_A^B \vec{v}d\vec{r} \quad , \tag{1}$$

1. Montrer que $\mathcal{S}_{cl}$ a la même dimension que $\hbar$
2. On admettra que lorsque l'ordre de grandeur de l'action pour un système est du même ordre ou plus petites que $\hbar$, alors le système doit-être décrit par une théorie quantique. Dans la suite, on considère un système de masse m, caractérisé par une énergie E, un temps T (période par exemple), une vitesse v, un moment cinétique $\mathcal{L}$, une échelle de longueur L. Quelles inégalités approchées doivent vérifier ces grandeurs pour que le système puisse être considéré comme "classique".
3. Définir ce qu'on appelle "vitesse d'agitation thermique" pour un système de masse M à la température T. Pour quels systèmes peut-on appliquer cette notion ?
4. Quelle est l'ordre de grandeur de la longueur d'onde de de Broglie associée (longueur d'onde thermique) ?
5. En déduire un critère permettant de savoir si un fluide composé de particules séparées d'une distance moyenne a peut-être traité classiquement.
6. Dans les systèmes ou phénomènes suivants classez ceux qui relèvent du monde quantique et ceux qui relèvent du monde classique:
   (a) Téléphone portable émettant $0,1$ W aux environs de $0,9$ GHz.
   (b) Faisceau homocinétique d'électron ayant une énergie de 100 ev rencontrant un cristal caractérisé par une distance inter-atomique de l'ordre de 10^{-10} m.
   (c) Même chose que la question précédente avec un faisceau de neutrons thermiques.
   (d) Grain de poussière (dimension $0,1$ mm, masse de 10^{-6}g) dans l'espace intersidéral.
   (e) Gaz d'Hélium ($A = 4$) à la température et pression ambiante puis à une température de 4°K.
   (f) Gaz d'atomes de Rubidium ($A = 87$) ayant une densité de $5\ 10^{14}$ atomes par cm^3, à une température d'environ 0.1 μK.
   (g) Tourbillons dans l'hélium liquide constitués de boucles de 0.1 mm avec un temps de rotation du liquide de l'ordre de $0,1$ s.

Exercice 3: Le corps noir et la catastrophe ultraviolette

Le rayonnement du *corps noir* est un rayonnement électromagnétique en équilibre thermique (température T) avec un matériau (condition par exemple réalisée dans un four de potier). La densité spectrale et volumique d'énergie de ce rayonnement u est une loi universelle qui ne dépend pas de la nature du matériau. Dans un intervalle de pulsations $[\omega, \omega + d\omega]$, l'énergie électromagnétique dans un volume $\mathcal{V}$ s'écrit par définition de $u(\omega, T)$:

$$dE = u(\omega, T)\mathcal{V}d\omega \quad .$$

1. Par analyse dimensionnelle, trouver la forme de la loi satisfaite par $u(\omega, T)$ en ne prenant en compte que des quantités classiques (lesquelles ?). On note cette loi $u_{cl}(\omega, T)$ (loi de Rayleigh-Jeans).

2. A partir des paramètres caractérisant le rayonnement, construire une grandeur notée $\mathcal{S}_{cl}$, ayant les mêmes dimensions que la constante de Planck. Dans quel domaine de fréquences la loi de Rayleigh-Jeans n'est-elle pas physiquement acceptable ? A quelle condition cela correspond-il pour le rapport $\mathcal{S}_{cl}/\hbar$.

3. On cherche une loi de la forme

$$u(\omega, T) = u_{cl}(\omega, T) f(\frac{\hbar\omega}{k_B T})$$

Quelle sont les limites que doivent satisfaire la fonction f ?

4. Montrer que pour une température donnée, u passe par un maximum pour une certaine pulsation ω_m telle que $\omega_m(T) = CT$ (loi de Wien). Exprimer C en fonction de $\hbar$ et k_B à un coefficient numérique près, évaluer son ordre de grandeur (l'expérience montre que $C = 6,3\ 10^{11}\ \mathrm{s}^{-1}\mathrm{K}^{-1}$). En admettant que le spectre de la lumière du soleil est approximativement celui d'un corps noir et que son maximum est dans le jaune, évaluer la température de surface de notre astre.

5. Montrer que l'énergie totale du rayonnement par unité de volume est donnée par $E = \sigma T^4$ (loi de Stefan). Estimer numériquement σ (on comparera avec la valeur expérimentale $\sigma = 1,9\ 10^{-16}\ \mathrm{Jm}^{-3}\mathrm{K}^{-4}$).

Exercice 4: L'étalement inexorable du paquet d'onde libre

Dans cet exercice, on considère un quanton de masse m, décrit par un paquet d'onde $\psi(x, t)$ et évoluant dans un espace libre (absence de potentiel).

1. En utilisant l'équation de continuité (Exercice 1), montrer que

$$\partial_t \langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} j(x, t) dx \quad .$$

Interpréter cette équation en exprimant le deuxième membre en terme de la fonction d'onde dans la “représentation-p” $\widetilde{\psi}(p, t)$.

2. Rappeler l'équation d'évolution de la fonction $\widetilde{\psi}(p, t)$. En déduire, $\partial_t \langle p \rangle$ et $\partial_t \langle p^2 \rangle$.

3. Exprimer $\langle x \rangle(t)$ en fonction de l'impulsion moyenne initiale du paquet d'onde, p_0 et de $x_0 = \langle x \rangle(t = 0)$.

4. En utilisant la même méthode que précédemment (équation de continuité puis passage en représentation-p), montrer que

$$\partial_t \langle x^2 \rangle = 2 \int_{-\infty}^{+\infty} x j(x, t) dx \quad \text{et} \quad \partial_t^2 \langle x^2 \rangle = \frac{2}{m^2} \langle p^2 \rangle$$

5. Déduire des questions précédentes l'étalement du paquet d'onde aux grands temps.

Rappel de quelques relations mathématiques utiles

- Distribution de Dirac :

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) f(x) dx = f(0)$$
$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(ikx) dk \quad .$$

- Convention utilisée pour la transformée de Fourier spatiale d'une fonction d'onde $\Psi(x,t)$:

$$\widetilde{\Psi}(p,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x,t) \exp\left(\frac{-ipx}{\hbar}\right) dx \quad ,$$
$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \widetilde{\Psi}(p,t) \exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right) dp \quad .$$

- Quelques propriétés très utiles de la transformée de Fourier:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^{\star}(x,t)\Phi(x,t)dx &= \int_{-\infty}^{\infty} \widetilde{\Psi}^{\star}(p,t)\widetilde{\Phi}(p,t)dp \\ \widetilde{\partial_x \Psi} &= \frac{ip}{\hbar}\widetilde{\Psi} \\ \widetilde{x\Psi} &= i\hbar\partial_p \widetilde{\Psi} \end{aligned}$$