LYCÉE D'EXCELLENCE
MOHAMMED VI
LEM6 - CASABLANCA

Classes préparatoires aux grandes écoles
**MP — Physique-chimie**
Année 2026-2027

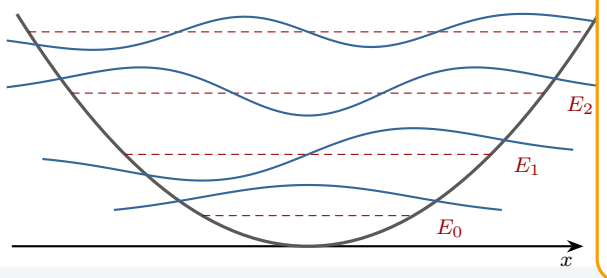
# Q1

## PHYSIQUE QUANTIQUE

# Équation de Schrödinger

Fonction d'onde et probabilité de présence — Équation de Schrödinger — Principe de superposition — États stationnaires — Régions classiquement interdites

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\Psi$$




*« Les lois physiques fondamentales nécessaires à la théorie mathématique d'une grande partie de la physique et de la chimie tout entière sont ainsi complètement connues ; la difficulté est seulement que leur application exacte conduit à des équations beaucoup trop compliquées pour être résolues.*

— Paul Dirac, « Quantum Mechanics of Many-Electron Systems », *Proc. R. Soc. A* (1929)

physionova
physionova.academy

**Pr. CHARIFI**
professeurcharifi@gmail.com

Simulation associée sur **PhysioNova**
« Puits de potentiel »

# Q1 — Équation de Schrödinger

## Ce qu'il faut savoir faire à la fin du chapitre

- Associer à une particule une fonction d'onde $\Psi(x,t)$ et interpréter $|\Psi|^2$ comme une densité de probabilité de présence ; normaliser une fonction d'onde.
- Calculer une probabilité, une position moyenne et un écart-type à partir de $|\Psi|^2$.
- Écrire l'équation de Schrödinger à une dimension dans un potentiel $V(x)$, identifier le terme d'énergie cinétique et exploiter sa linéarité (principe de superposition).
- Établir, par séparation des variables, la forme des états stationnaires et l'équation de Schrödinger indépendante du temps.
- Relier l'énergie d'un état stationnaire à la pulsation de sa fonction d'onde (relation de Planck-Einstein).
- Distinguer un état stationnaire de la mécanique quantique d'une onde stationnaire de la physique des ondes.
- Prévoir l'allure d'une fonction d'onde stationnaire selon le signe de $E - V$ (régions classiquement permises ou interdites).

### Comment lire ce cours

Les résultats sont repérés par des étiquettes : R à connaître par cœur ; D démonstration à savoir refaire ; M méthode à maîtriser. Ce chapitre pose le cadre des trois suivants (particule libre Q2, potentiels constants par morceaux Q3, états non stationnaires Q4). La simulation PhysioNova « Puits de potentiel » montre les états stationnaires d'une particule confinée : on y voit la fonction d'onde osciller là où $E > V$ et s'amortir là où $E < V$.
Des **exercices d'application corrigés** sont placés juste après les notions qu'ils illustrent ; les exercices d'approfondissement et les classiques des concours, également corrigés, terminent le chapitre.

## Table des matières

I Rappels : la dualité onde-corpuscule . . . 3
I.1 Lumière et matière . . . 3
I.2 Quand faut-il un traitement quantique ? . . . 3
II Fonction d'onde et interprétation probabiliste . . . 4
II.1 Fonction d'onde . . . 4
II.2 Valeur moyenne et indétermination . . . 5
III L'équation de Schrödinger . . . 7
III.1 Une construction heuristique . . . 7
III.2 Énoncé et propriétés . . . 7
IV États stationnaires . . . 8
IV.1 Séparation des variables . . . 8
IV.2 Propriétés et interprétation . . . 9
IV.3 Allure de la fonction d'onde propre . . . 10
V Synthèse . . . 12
VI Exercices d'approfondissement . . . 12
VII Classiques des concours . . . 14

# I Rappels : la dualité onde-corpuscule

## I.1 Lumière et matière

La première année a montré que la distinction classique entre ondes (lumière) et corpuscules (matière) ne résiste pas aux expériences fines :

- la lumière échange l'énergie avec la matière par **photons** (effet photoélectrique, effet Compton) ;
- la matière se diffracte et interfère comme une onde (Davisson et Germer en 1927, interférences d'électrons, d'atomes et de molécules) ;
- dans une expérience d'interférences **particule par particule**, chaque impact est localisé et imprévisible, mais leur accumulation reproduit la figure d'interférences : seule la *probabilité* d'impact est déterminée.

**Relations de Planck-Einstein et de de Broglie** R

À une particule (photon ou particule matérielle) d'énergie $E$ et de quantité de mouvement $\vec{p}$ est associée une onde de pulsation $\omega$ et de vecteur d'onde $\vec{k}$ tels que

$$E = \hbar\omega = h\nu, \qquad \vec{p} = \hbar\vec{k}, \qquad \lambda_{\text{dB}} = \frac{h}{p}, \qquad \hbar = \frac{h}{2\pi} \simeq 1{,}055 \times 10^{-34}\,\text{J}\cdot\text{s}.$$

Pour une particule non relativiste de masse $m$ : $p = mv = \sqrt{2mE_c}$.

## I.2 Quand faut-il un traitement quantique ?

☞ **Méthode — Deux critères en ordre de grandeur** M

- **Critère de l'action.** On forme avec les grandeurs du problème une grandeur $S$ ayant la dimension de $h$ :

  $S \sim$ énergie $\times$ durée $\sim$ quantité de mouvement $\times$ longueur, $\qquad S^2 \sim$ énergie $\times$ masse $\times$ longueur$^2$.

  Si $S \sim \hbar$, l'étude quantique est nécessaire ; si $S \gg \hbar$, l'étude classique suffit.
- **Critère de de Broglie.** Soit $D$ une longueur caractéristique du système (taille d'un obstacle, d'une ouverture, d'une région de confinement). Si $\lambda_{\text{dB}} \gtrsim D$, les effets ondulatoires sont importants ; si $\lambda_{\text{dB}} \ll D$, la description classique (trajectoire) est valable.

**Ordres de grandeur**

- Électron accéléré sous $100\,\text{V}$ : $\lambda_{\text{dB}} \simeq 0{,}12\,\text{nm}$, comparable aux distances interatomiques ; formule pratique $\lambda_{\text{dB}}(\text{nm}) \simeq 1{,}23/\sqrt{U(\text{V})}$.
- Neutron thermique ($300\,\text{K}$) : $\lambda_{\text{dB}} \simeq 0{,}15\,\text{nm}$ ; bille de $1\,\text{g}$ à $1\,\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ : $\lambda_{\text{dB}} \simeq 7 \times 10^{-31}\,\text{m}$.
- Constantes utiles : $m_e = 9{,}11 \times 10^{-31}\,\text{kg}$, $e = 1{,}60 \times 10^{-19}\,\text{C}$, $hc \simeq 1240\,\text{eV}\cdot\text{nm}$, $\dfrac{\hbar^2}{2m_e} \simeq 0{,}0381\,\text{eV}\cdot\text{nm}^2$.

## ☞ Exercices d'application

### EXERCICE 1 Quantique ou classique ?

★☆☆☆☆

**Q-1)** Dans l'atome d'hydrogène, l'électron a une quantité de mouvement de l'ordre de $m_e v$ avec $v \simeq 2{,}2 \times 10^6\,\mathrm{m\cdot s^{-1}}$ et se trouve à une distance $a_0 \simeq 53\,\mathrm{pm}$ du proton. Former une action caractéristique et conclure.

**Q-2)** Un pendule simple de masse $100\,\mathrm{g}$ et de longueur $1{,}0\,\mathrm{m}$ oscille avec une amplitude de $10\,\mathrm{cm}$. Former une action caractéristique (énergie × période) et conclure.

**Correction**

**Q-1)** $S \sim m_e v a_0 = 9{,}11\times10^{-31}\times2{,}2\times10^{6}\times5{,}3\times10^{-11} \simeq 1{,}1\times10^{-34}\,\mathrm{J\cdot s} \simeq \hbar$ : l'atome est un objet intrinsèquement quantique.

**Q-2)** $\omega = \sqrt{g/\ell} = 3{,}13\,\mathrm{rad\cdot s^{-1}}$, $E = \frac{1}{2}m\omega^2A^2 = \frac{1}{2}mgA^2/\ell = 4{,}9\times10^{-3}\,\mathrm{J}$, $T = 2\pi/\omega = 2{,}0\,\mathrm{s}$, d'où $S \simeq 9{,}8\times10^{-3}\,\mathrm{J\cdot s} \simeq 10^{32}\hbar$ : la mécanique classique suffit largement.

### EXERCICE 2 Trois ondes de matière

★★☆☆☆

Calculer la longueur d'onde de de Broglie :

**Q-1)** d'un électron accéléré depuis le repos sous $150\,\mathrm{V}$ ;

**Q-2)** d'un neutron ($m_n = 1{,}675\times10^{-27}\,\mathrm{kg}$) en équilibre thermique à $300\,\mathrm{K}$, d'énergie cinétique $\frac{3}{2}k_BT$ ;

**Q-3)** d'un atome de rubidium 87 refroidi par laser à $1\,\mu\mathrm{K}$ ($1\,\mathrm{u} = 1{,}66\times10^{-27}\,\mathrm{kg}$). Commenter dans chaque cas.

**Correction**

**Q-1)** $p = \sqrt{2m_eeU}$ : $\lambda = 0{,}100\,\mathrm{nm}$, de l'ordre d'une distance interatomique : diffraction par les cristaux.

**Q-2)** $p = \sqrt{3m_nk_BT}$ : $\lambda = 0{,}145\,\mathrm{nm}$ ; les neutrons thermiques sont eux aussi diffractés par les cristaux (diffraction neutronique).

**Q-3)** $m = 87\times1{,}66\times10^{-27}\,\mathrm{kg} = 1{,}44\times10^{-25}\,\mathrm{kg}$, $p = \sqrt{3mk_BT} = 2{,}4\times10^{-27}\,\mathrm{kg\cdot m\cdot s^{-1}}$, $\lambda = 0{,}27\,\mu\mathrm{m}$ : à très basse température, l'onde de matière d'un atome devient presque visible au microscope ; c'est la porte d'entrée des condensats de Bose-Einstein.

# II Fonction d'onde et interprétation probabiliste

## II.1 Fonction d'onde

**Définition — Fonction d'onde d'une particule sans spin** R

Dans un référentiel $\mathcal{R}$, l'état d'une particule de masse $m$ à l'instant $t$ est entièrement décrit par une fonction à valeurs complexes $\Psi(M,t)$, appelée **fonction d'onde** ou **amplitude de probabilité**. La probabilité de détecter la particule, à l'instant $t$, dans un volume élémentaire $\mathrm{d}\tau$ centré en $M$ est (postulat de Born)

$$\mathrm{d}\mathcal{P}(M,t) = \Psi(M,t)\,\Psi^*(M,t)\,\mathrm{d}\tau = |\Psi(M,t)|^2\,\mathrm{d}\tau.$$

Dans le cadre du programme, on se limite au mouvement selon un axe : $\Psi(x,t)$, $\mathrm{d}\mathcal{P} = |\Psi(x,t)|^2\,\mathrm{d}x$,

et $|\Psi(x,t)|^2 = \dfrac{\mathrm{d}\mathcal{P}}{\mathrm{d}x}$ est la **densité (linéique) de probabilité de présence**.

### Condition de normalisation R

La particule étant certainement quelque part, la probabilité de la trouver dans tout le domaine accessible $\mathcal{D}$ vaut 1 :

$$\int_{\mathcal{D}} |\Psi(x,t)|^2 \,\mathrm{d}x = 1.$$

Une fonction d'onde physique est donc de **carré sommable** ; à une dimension, $\Psi$ s'exprime en $\mathrm{m}^{-1/2}$.

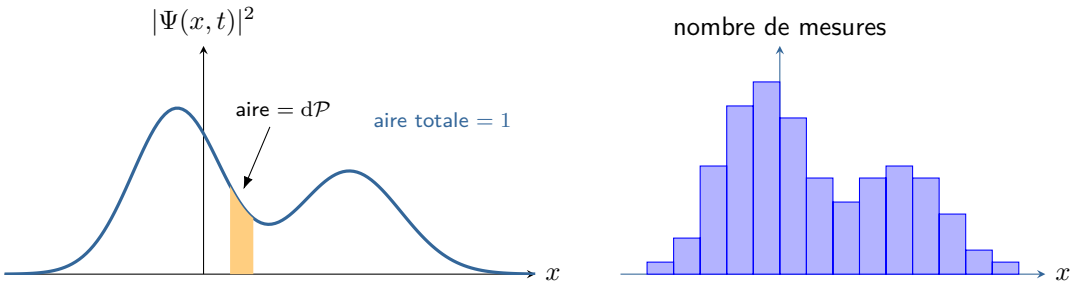



**Fig. 1 :** À gauche : densité de probabilité de présence ; l'aire sous la courbe entre $x$ et $x + \mathrm{d}x$ est la probabilité $\mathrm{d}\mathcal{P}$. À droite : histogramme des positions mesurées sur $N$ particules préparées dans le même état ; quand $N \to \infty$, il épouse la courbe $N|\Psi|^2$.

**Remarque**

- $\Psi$ est complexe *par nature* : ce n'est pas une notation complexe commode d'une grandeur réelle, comme en électricité. Seul $|\Psi|^2$ est directement mesurable ; la **phase** de $\Psi$ intervient dans les interférences.
- Une mesure de position sur *une* particule donne un résultat aléatoire. Pour accéder à $|\Psi|^2$, il faut répéter la mesure sur un grand nombre $N$ de particules identiques, indépendantes, toutes préparées dans le même état, et tracer l'histogramme des résultats.
- Deux fonctions d'onde qui ne diffèrent que d'un facteur de phase global $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}$ ($\alpha$ réel constant) décrivent le même état physique.

## II.2 Valeur moyenne et indétermination

### Définition — Moyenne et écart-type de la position R

Le résultat d'une mesure de position étant aléatoire, on le caractérise par sa **valeur moyenne** et son **écart-type**, appelé **indétermination** quantique :

$$\langle x \rangle = \int_{\mathcal{D}} x\,|\Psi(x,t)|^2 \,\mathrm{d}x, \qquad \langle x^2 \rangle = \int_{\mathcal{D}} x^2\,|\Psi(x,t)|^2 \,\mathrm{d}x, \qquad \Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}.$$

De même, $\Delta p_x = \sqrt{\langle p_x^2 \rangle - \langle p_x \rangle^2}$ caractérise la dispersion des résultats d'une mesure de quantité de mouvement.

### Inégalité de Heisenberg spatiale (rappel) R

$$\Delta x\,\Delta p_x \geqslant \frac{\hbar}{2}$$

Ce n'est pas une limite des appareils : une particule ne peut pas avoir simultanément une position et une quantité de mouvement parfaitement déterminées. Elle sera reliée à la notion de paquet d'ondes au chapitre Q2.

### ✗ Attention, erreurs fréquentes

- L'écart-type s'écrit $\sqrt{\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2}$ et non $\sqrt{\langle x\rangle - \langle x^2\rangle}$ (expression qui n'est même pas homogène).
- $\langle x\rangle$ n'est pas la position la plus probable : c'est le maximum de $|\Psi|^2$ qui donne celle-ci. Les deux coïncident seulement pour une densité symétrique à un seul maximum.
- $\mathrm{d}\mathcal{P} = |\Psi|^2\mathrm{d}x$, pas $\Psi\,\mathrm{d}x$ ni $|\Psi|\,\mathrm{d}x$.

## ☞ Exercices d'application

### EXERCICE 3 Normaliser et exploiter une fonction d'onde ✦✦✧✧✧

Une particule est décrite à un instant donné par $\varphi(x) = A\,\mathrm{e}^{-|x|/a}$ pour $x \in \mathbb{R}$, avec $a > 0$ et $A$ réel positif.

**Q-1)** Tracer $|\varphi|^2$ et déterminer $A$. Quelle est l'unité de $A$ ?

**Q-2)** Calculer la probabilité de trouver la particule dans l'intervalle $[-a/2, a/2]$.

**Q-3)** Calculer $\langle x\rangle$, $\langle x^2\rangle$ et l'indétermination $\Delta x$.

**Correction**

**Q-1)** $|\varphi|^2 = A^2\mathrm{e}^{-2|x|/a}$, pic pointu en $x = 0$. $\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} A^2\mathrm{e}^{-2|x|/a}\mathrm{d}x = 2A^2\frac{a}{2} = A^2 a = 1$, donc $A = 1/\sqrt{a}$, en $\mathrm{m}^{-1/2}$.

**Q-2)** $\mathcal{P} = 2\displaystyle\int_0^{a/2} \frac{1}{a}\mathrm{e}^{-2x/a}\mathrm{d}x = 1 - \mathrm{e}^{-1} \simeq 0{,}63.$

**Q-3)** $|\varphi|^2$ est paire, donc $\langle x\rangle = 0$. $\langle x^2\rangle = \dfrac{2}{a}\displaystyle\int_0^{\infty} x^2\mathrm{e}^{-2x/a}\mathrm{d}x = \frac{2}{a}\cdot 2\left(\frac{a}{2}\right)^3 = \frac{a^2}{2}$ (avec $\int_0^\infty x^n\mathrm{e}^{-x/b}\mathrm{d}x = n!\,b^{n+1}$). D'où $\Delta x = a/\sqrt{2}$.

### EXERCICE 4 Où est la particule ? ✦✦✧✧✧

Une particule confinée sur le segment $[0, L]$ est décrite par $\varphi(x) = \sqrt{2/L}\,\sin(2\pi x/L)$ (et $\varphi = 0$ hors du segment).

**Q-1)** Vérifier que $\varphi$ est normalisée. Tracer $|\varphi|^2$ ; où la particule est-elle le plus probablement détectée ? Où ne l'est-elle jamais ?

**Q-2)** Calculer la probabilité de la trouver dans $[0, L/4]$, puis dans $[0, L/2]$.

**Q-3)** Que vaut $\langle x\rangle$ ? Commenter : la particule peut-elle être détectée en $\langle x\rangle$ ?

**Correction**

**Q-1)** $\displaystyle\int_0^L \frac{2}{L}\sin^2\frac{2\pi x}{L}\mathrm{d}x = \frac{2}{L}\cdot\frac{L}{2} = 1$ (la moyenne de $\sin^2$ sur un nombre entier de demi-périodes vaut $1/2$). $|\varphi|^2$ présente deux bosses, maximales en $x = L/4$ et $3L/4$, et s'annule en $0$, $L/2$ et $L$.

**Q-2)** Sur $[0, L/4]$, l'argument $2\pi x/L$ parcourt $[0, \pi/2]$ où la moyenne de $\sin^2$ vaut encore $1/2$ : $\mathcal{P} = \frac{2}{L}\cdot\frac{L}{4}\cdot\frac{1}{2} = \frac{1}{4}$. Par symétrie, $\mathcal{P}([0, L/2]) = \frac{1}{2}$.

**Q-3)** $|\varphi|^2$ est symétrique par rapport à $L/2$, donc $\langle x\rangle = L/2$, point où la densité de probabilité est *nulle* : la valeur moyenne n'est pas forcément une valeur possible. (Le poly de référence annonce $\langle x\rangle = 0$ pour une situation analogue : c'est impossible pour une particule confinée dans une région de $x$ positifs.)

# III L'équation de Schrödinger

## III.1 Une construction heuristique

L'équation d'évolution de $\Psi$ ne se démontre pas : c'est un **postulat**, validé par ses prédictions. On peut toutefois en deviner la forme. Pour une particule libre d'impulsion $p$ bien définie, l'onde associée est une onde plane $\Psi = A\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kx-\omega t)}$, avec $E = \hbar\omega$ et $p = \hbar k$. L'énergie mécanique d'une particule non relativiste soumise au potentiel $V$ supposé constant s'écrit

$$E = \frac{p^2}{2m} + V \qquad \Longrightarrow \qquad \hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V.$$

Or, pour l'onde plane, $\mathrm{i}\hbar\,\partial_t\Psi = \hbar\omega\Psi$ et $-\partial_x^2\Psi = k^2\Psi$ : la relation précédente s'écrit donc $\mathrm{i}\hbar\,\partial_t\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\Psi + V\Psi$. Schrödinger (1926) postule que cette équation reste valable pour un potentiel $V(x,t)$ quelconque.

## III.2 Énoncé et propriétés

**Équation de Schrödinger à une dimension** R

Une particule de masse $m$, non relativiste, soumise à l'énergie potentielle $V(x,t)$ (appelée « potentiel » par abus de langage), est décrite par une fonction d'onde qui vérifie

$$\mathrm{i}\hbar\,\frac{\partial\Psi}{\partial t}(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}(x,t) + V(x,t)\,\Psi(x,t).$$

- Le terme $-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}$ est associé à l'**énergie cinétique** ($p^2/2m$ avec $p = \hbar k$) ; le terme $V\Psi$ à l'**énergie potentielle**.
- À trois dimensions : $\mathrm{i}\hbar\,\partial_t\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + V\Psi$.

**Propriétés fondamentales** R

1. **Linéarité, principe de superposition.** Si $\Psi_1$ et $\Psi_2$ sont solutions, toute combinaison $\lambda_1\Psi_1 + \lambda_2\Psi_2$ ($\lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C}$) est solution ; une fois normalisée, elle décrit un état physique possible. C'est l'origine des interférences quantiques.
2. **Déterminisme de l'évolution.** L'équation est du premier ordre en temps : la donnée de $\Psi(x, t_0)$

détermine $\Psi(x,t)$ à tout instant ultérieur. Le hasard n'intervient qu'au moment de la *mesure*.

3. **Conservation de la probabilité.** Si $V$ est réel, $\int |\Psi|^2 \mathrm{d}x$ ne dépend pas du temps : une fonction d'onde normalisée à un instant le reste (approfondissement °1).
4. **Cadre de validité.** L'équation ignore le spin et les effets relativistes ; elle joue en mécanique quantique le rôle de la loi de la quantité de mouvement en mécanique classique.

**Remarque**

- On note parfois $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V$ l'**hamiltonien** ; l'équation s'écrit alors $\mathrm{i}\hbar\,\partial_t\Psi = \hat{H}\Psi$. Ce formalisme des opérateurs n'est pas au programme.
- Le potentiel n'est défini qu'à une constante près : remplacer $V$ par $V + V_0$ multiplie la solution par le facteur de phase $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}V_0 t/\hbar}$, sans effet sur $|\Psi|^2$ (exercice ci-dessous).
- Contrairement à l'équation de la chaleur, l'équation de Schrödinger décrit une évolution *réversible* : si $\Psi(x,t)$ est solution, $\Psi^*(x,-t)$ l'est aussi (concours °2).

## ☞ Exercices d'application

### EXERCICE 5 — Onde plane dans un potentiel constant

★★☆☆☆

Une particule de masse $m$ se trouve dans une région où le potentiel vaut $V_0$, constant.

**Q-1)** À quelle condition $\Psi(x,t) = A\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kx-\omega t)}$ est-elle solution de l'équation de Schrödinger ? Interpréter la relation obtenue en termes d'énergies.

**Q-2)** Montrer que si $\Psi(x,t)$ est solution pour le potentiel $V(x)$, alors $\Psi(x,t)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}V_0 t/\hbar}$ est solution pour $V(x)+V_0$. Les prévisions physiques sont-elles modifiées ?

**Correction**

**Q-1)** En reportant : $\hbar\omega\Psi = \dfrac{\hbar^2k^2}{2m}\Psi + V_0\Psi$, soit $\hbar\omega = \dfrac{\hbar^2k^2}{2m} + V_0$ : l'énergie $E = \hbar\omega$ est la somme de l'énergie cinétique $p^2/(2m)$, avec $p = \hbar k$, et de l'énergie potentielle. C'est la relation de dispersion des ondes de matière.

**Q-2)** Avec $\Psi' = \Psi\mathrm{e}^{-\mathrm{i}V_0 t/\hbar}$ : $\mathrm{i}\hbar\partial_t\Psi' = (\mathrm{i}\hbar\partial_t\Psi + V_0\Psi)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}V_0 t/\hbar} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\Psi + (V+V_0)\Psi\right)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}V_0 t/\hbar} = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\Psi' + (V+V_0)\Psi'$. Comme $|\Psi'|^2 = |\Psi|^2$, aucune prévision de position n'est modifiée : seule l'origine des énergies change.

# IV États stationnaires

## IV.1 Séparation des variables

On suppose désormais le potentiel **indépendant du temps**, $V = V(x)$ : le système est conservatif. On cherche des solutions particulières à variables séparées, $\Psi(x,t) = \varphi(x)\,f(t)$.

**Forme des états stationnaires** D

En reportant $\Psi = \varphi(x)f(t)$ dans l'équation de Schrödinger et en divisant par $\varphi f$ (là où ce produit n'est pas nul) :

$$\mathrm{i}\hbar\,\frac{f'(t)}{f(t)} = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\varphi''(x)}{\varphi(x)} + V(x).$$

Le membre de gauche ne dépend que de $t$, celui de droite que de $x$ : ils sont égaux à une même constante, homogène à une énergie, notée $E$. Il vient $f' = -\frac{\mathrm{i}E}{\hbar}f$, soit $f(t) = f(0)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Et/\hbar}$. En incorporant $f(0)$ dans $\varphi$ :

$$\Psi(x,t) = \varphi(x)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Et/\hbar} = \varphi(x)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} \qquad \text{avec} \qquad E = \hbar\omega,$$

où $\varphi$, appelée **fonction d'onde propre** (ou partie spatiale), vérifie l'**équation de Schrödinger indépendante du temps** :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\,\varphi''(x) + V(x)\,\varphi(x) = E\,\varphi(x) \qquad \Longleftrightarrow \qquad \varphi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2}\big(E - V(x)\big)\varphi(x) = 0.$$

**Remarque**

La normalisation impose $|f(t)|^2 \int |\varphi|^2 \mathrm{d}x = 1$ à tout instant : $|f|$ est constant. C'est cohérent avec le résultat : $f$ est un pur facteur de phase. Si $E$ avait une partie imaginaire, $|f|$ varierait exponentiellement et la normalisation ne serait pas conservée : $E$ est **réelle**.

## IV.2 Propriétés et interprétation

**Propriétés d'un état stationnaire** R

- **Énergie et pulsation.** La dépendance temporelle $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Et/\hbar}$ est celle d'une onde de pulsation $\omega = E/\hbar$ : c'est la relation de **Planck-Einstein** $E = \hbar\omega$. La constante $E$ est l'**énergie** de la particule, parfaitement déterminée ($\Delta E = 0$).
- **Densité indépendante du temps.** $|\Psi(x,t)|^2 = |\varphi(x)|^2$ : la probabilité de présence, et plus généralement tout résultat de mesure, a une loi indépendante du temps. D'où le nom d'état **stationnaire**.
- **Normalisation.** $\displaystyle\int_{\mathcal{D}} |\varphi(x)|^2\,\mathrm{d}x = 1.$

**✗ Attention, erreurs fréquentes**

**État stationnaire ≠ onde stationnaire.**

- Une *onde stationnaire* de la physique des ondes est une onde réelle de la forme $F(x)G(t)$, avec nœuds et ventres fixes : $y(x,t) = Y_0 \sin(kx)\cos(\omega t)$. Elle s'annule à certains instants partout.
- Un *état stationnaire* est une fonction complexe $\varphi(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}$ dont le module ne varie pas. La partie spatiale $\varphi$ peut être une onde *progressive* : pour la particule libre, $\Psi = A\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kx-\omega t)}$ est un état stationnaire (Q2). À l'inverse, le puits infini (Q3) donne des états stationnaires dont la partie réelle est une onde stationnaire au sens usuel.

**Conditions imposées à la fonction d'onde propre** R

1. $\varphi$ ne prend qu'une seule valeur en chaque point ;
2. $\varphi$ est normalisable : elle ne diverge pas en $\pm\infty$ et $\int |\varphi|^2 \mathrm{d}x$ est fini ;
3. $\varphi$ est **continue** partout ;
4. $\varphi'$ est **continue** là où $V$ est continu ou présente une discontinuité *finie* (admis). Là où $V$ devient infini, $\varphi$ s'annule et $\varphi'$ peut être discontinue.

**Remarque**

Dans de nombreux cas, ces conditions ne peuvent être satisfaites que pour certaines valeurs discrètes de $E$ : c'est la **quantification de l'énergie**, conséquence des conditions aux limites comme pour les modes propres d'une corde vibrante (Q3). Rechercher un état stationnaire revient à rechercher un état d'énergie bien définie.

## IV.3 Allure de la fonction d'onde propre

L'équation indépendante du temps $\varphi'' = \dfrac{2m}{\hbar^2}(V-E)\,\varphi$ relie la **courbure** de $\varphi$ au signe de $E-V$ :

**Régions classiquement permises et interdites** R

- Si $E > V$ (région **classiquement permise**) : $\varphi''$ est de signe opposé à $\varphi$, la courbe est concave vers l'axe et **oscille**. Pour $V$ constant, $\varphi'' = -k^2\varphi$ avec $k = \dfrac{\sqrt{2m(E-V)}}{\hbar}$ : $\varphi$ est une combinaison de $\mathrm{e}^{\pm \mathrm{i}kx}$, de longueur d'onde locale $\lambda = 2\pi/k = h/\sqrt{2m(E-V)}$, d'autant plus courte que l'énergie cinétique est grande.
- Si $E < V$ (région **classiquement interdite**, où l'énergie cinétique serait négative) : $\varphi''$ est du signe de $\varphi$, la courbe s'écarte de l'axe. Pour $V$ constant, $\varphi'' = q^2\varphi$ avec $q = \dfrac{\sqrt{2m(V-E)}}{\hbar}$ : $\varphi$ est une combinaison de $\mathrm{e}^{\pm qx}$. Seule la solution qui **décroît** est acceptable dans une région infinie : la particule y pénètre sur une distance de l'ordre de $1/q$.
- Les points où $E = V(x)$ sont les **points de rebroussement** classiques : $\varphi$ y change de courbure.

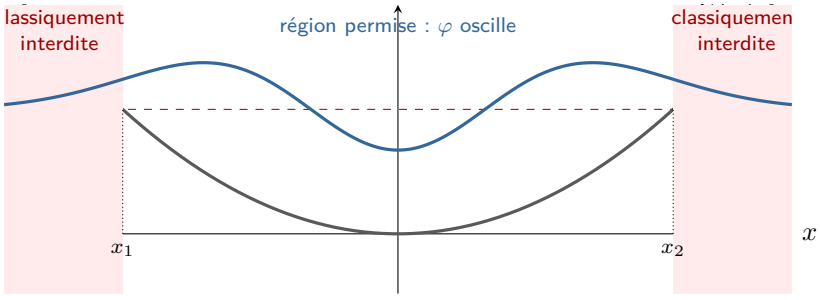



**Fig. 2 :** Fonction d'onde propre (tracée à la hauteur de son énergie $E$) dans un potentiel quelconque : oscillante entre les points de rebroussement $x_1$ et $x_2$, elle décroît exponentiellement dans les régions interdites, où elle n'est pas nulle.

**☞ Méthode — Prévoir l'allure d'un état stationnaire** M

1. Tracer $V(x)$ et la droite d'énergie $E$ ; repérer les régions $E > V$ et $E < V$.
2. Dans chaque région où $V$ est constant, écrire la solution générale ($\mathrm{e}^{\pm \mathrm{i}kx}$ ou $\mathrm{e}^{\pm qx}$) ; éliminer les termes divergents à l'infini et, selon le problème, les ondes venant de l'infini qui n'existent pas

physiquement.

3. Raccorder par continuité de $\varphi$ et de $\varphi'$ aux discontinuités finies de $V$, et imposer $\varphi = 0$ aux murs infinis.
4. Contrôler : plus $E-V$ est grand, plus $\varphi$ oscille vite ; l'énergie $E$ d'un état lié est toujours strictement supérieure au minimum de $V$.

## ☞ Exercices d'application

### EXERCICE 6 Combinaisons d'états stationnaires

✦✦✧✧✧

**Q-1)** Soient $\varphi_1$ et $\varphi_2$ deux solutions de l'équation indépendante du temps *de même énergie* $E$. Montrer que $\Psi = (\alpha\varphi_1 + \beta\varphi_2)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Et/\hbar}$ est un état stationnaire.

**Q-2)** Que dire de $\Psi = \alpha\varphi_1\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_1t/\hbar} + \beta\varphi_2\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_2t/\hbar}$ si $E_1 \neq E_2$ ? Calculer $|\Psi|^2$ pour $\varphi_1$, $\varphi_2$, $\alpha$ et $\beta$ réels.

**Correction**

**Q-1)** L'équation indépendante du temps est linéaire à $E$ fixé : $\alpha\varphi_1 + \beta\varphi_2$ la vérifie avec la même valeur $E$, donc $\Psi$ est de la forme $\varphi(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Et/\hbar}$.

**Q-2)** Chaque terme est solution de l'équation de Schrödinger, donc $\Psi$ aussi (linéarité). Mais $|\Psi|^2 = \alpha^2\varphi_1^2 + \beta^2\varphi_2^2 + 2\alpha\beta\varphi_1\varphi_2\cos\big((E_2-E_1)t/\hbar\big)$ dépend du temps : l'état n'est pas stationnaire. Son étude fait l'objet du chapitre Q4.

### EXERCICE 7 Retrouver le potentiel à partir d'un état

✦✦✦✧✧

Une particule de masse $m$ est dans l'état stationnaire de partie spatiale $\varphi(x) = \dfrac{A}{\cosh(x/a)}$, avec $a > 0$.

**Q-1)** Calculer $\varphi''(x)$ et montrer qu'il s'écrit $\dfrac{\varphi}{a^2}\left(1 - \dfrac{2}{\cosh^2(x/a)}\right)$.

**Q-2)** On impose $V \to 0$ quand $|x| \to \infty$. En déduire l'énergie $E$ de l'état et le potentiel $V(x)$. Tracer $V$ et $|\varphi|^2$ ; l'état est-il lié ?

**Q-3)** Déterminer $A$ (on donne $\int_{-\infty}^{+\infty} \dfrac{\mathrm{d}u}{\cosh^2 u} = 2$).

**Correction**

**Q-1)** Avec $u = x/a$ : $\varphi' = -\frac{A}{a}\frac{\tanh u}{\cosh u}$ et $\varphi'' = \frac{A}{a^2}\frac{\tanh^2 u - 1/\cosh^2 u}{\cosh u} = \frac{\varphi}{a^2}\left(1 - \frac{2}{\cosh^2 u}\right)$ en utilisant $\tanh^2 u = 1 - 1/\cosh^2 u$.

**Q-2)** L'équation donne $V(x) = E + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\varphi''}{\varphi} = E + \frac{\hbar^2}{2ma^2} - \frac{\hbar^2}{ma^2}\frac{1}{\cosh^2(x/a)}$. La condition à l'infini impose $E = -\dfrac{\hbar^2}{2ma^2}$ et $V(x) = -\dfrac{\hbar^2}{ma^2\cosh^2(x/a)}$ : un puits de profondeur $\hbar^2/(ma^2)$ et de largeur $\sim a$. L'énergie est comprise entre le minimum de $V$ et sa valeur à l'infini : l'état est lié, $|\varphi|^2$ est une cloche de largeur $\sim a$ qui déborde dans les régions $E < V$.

**Q-3)** $\displaystyle\int A^2\frac{\mathrm{d}x}{\cosh^2(x/a)} = 2aA^2 = 1$, d'où $A = 1/\sqrt{2a}$.

# V Synthèse

**★ À retenir**

- État d'une particule : fonction d'onde complexe $\Psi(x,t)$ ; $\mathrm{d}\mathcal{P} = |\Psi|^2\mathrm{d}x$ ; normalisation $\int |\Psi|^2\mathrm{d}x = 1$ ; $\Psi$ en $\mathrm{m}^{-1/2}$.
- Moyenne $\langle x\rangle = \int x|\Psi|^2\mathrm{d}x$, indétermination $\Delta x = \sqrt{\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2}$ ; Heisenberg $\Delta x\,\Delta p_x \geqslant \hbar/2$.
- Équation de Schrödinger : $\mathrm{i}\hbar\,\partial_t\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\Psi + V\Psi$ ; linéaire (superposition), du premier ordre en temps (évolution déterministe), conserve la normalisation.
- État stationnaire ($V$ indépendant de $t$) : $\Psi = \varphi(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Et/\hbar}$, $E = \hbar\omega$, $|\Psi|^2$ indépendant du temps ; $-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi'' + V\varphi = E\varphi$.
- $\varphi$ continue ; $\varphi'$ continue si $V$ reste fini ; $\varphi = 0$ aux murs infinis.
- $E > V$ : $\varphi$ oscille ($k = \sqrt{2m(E-V)}/\hbar$) ; $E < V$ : $\varphi$ exponentielle ($q = \sqrt{2m(V-E)}/\hbar$), décroissante dans une région infinie.
- État stationnaire (fonction complexe de module constant) $\neq$ onde stationnaire (nœuds fixes).

# VI Exercices d'approfondissement

## EXERCICE 8 Conservation de la probabilité et courant de probabilité

★★★☆☆

On considère une solution $\Psi(x,t)$ de l'équation de Schrödinger avec un potentiel $V(x)$ réel.

**Q-1)** Écrire l'équation vérifiée par $\Psi^*$. En déduire que $\dfrac{\partial|\Psi|^2}{\partial t} = \dfrac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\left(\Psi^*\dfrac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} - \Psi\dfrac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}\right)$.

**Q-2)** Montrer que cette relation s'écrit $\dfrac{\partial|\Psi|^2}{\partial t} + \dfrac{\partial J}{\partial x} = 0$ avec $J = \dfrac{\hbar}{2m\mathrm{i}}\left(\Psi^*\dfrac{\partial\Psi}{\partial x} - \Psi\dfrac{\partial\Psi^*}{\partial x}\right)$. Quelle équation de l'électromagnétisme a la même structure ?

**Q-3)** En déduire que $\int_{-\infty}^{+\infty}|\Psi|^2\mathrm{d}x$ est constant pour une fonction d'onde qui s'annule à l'infini.

**Q-4)** Calculer $J$ pour $\Psi = A\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kx-\omega t)}$ et pour un état stationnaire à partie spatiale réelle. Interpréter.

**Correction**

**Q-1)** En conjuguant ($V$ réel) : $-\mathrm{i}\hbar\partial_t\Psi^* = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\Psi^* + V\Psi^*$. Alors $\partial_t|\Psi|^2 = \Psi^*\partial_t\Psi + \Psi\partial_t\Psi^*$ ; en multipliant la première équation par $\Psi^*/(\mathrm{i}\hbar)$ et la seconde par $-\Psi/(\mathrm{i}\hbar)$, les termes en $V$ se compensent et il reste $\partial_t|\Psi|^2 = \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}(\Psi^*\partial_x^2\Psi - \Psi\partial_x^2\Psi^*)$.

**Q-2)** $\partial_x(\Psi^*\partial_x\Psi - \Psi\partial_x\Psi^*) = \Psi^*\partial_x^2\Psi - \Psi\partial_x^2\Psi^*$ (les termes $\partial_x\Psi^*\partial_x\Psi$ se compensent). Donc $\partial_t|\Psi|^2 = -\partial_x J$ avec $J = -\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}(\Psi^*\partial_x\Psi - \Psi\partial_x\Psi^*) = \frac{\hbar}{2m\mathrm{i}}(\dots)$. C'est l'analogue de l'équation locale de conservation de la charge $\partial_t\rho + \mathrm{div}\,\vec{j} = 0$.

**Q-3)** $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int|\Psi|^2\mathrm{d}x = -[J]_{-\infty}^{+\infty} = 0$ si $\Psi \to 0$ à l'infini.

**Q-4)** Onde plane : $\Psi^*\partial_x\Psi = \mathrm{i}k|A|^2$, d'où $J = |A|^2\dfrac{\hbar k}{m}$ : la probabilité « s'écoule » à la vitesse $\hbar k/m = p/m$, vitesse classique de la particule (Q2). État stationnaire réel : $\Psi^*\partial_x\Psi = \varphi\varphi'$ est réel, donc $J = 0$ : aucun flux de probabilité.

## EXERCICE 9 L'oscillateur harmonique quantique

★★★☆☆

Une particule de masse $m$ est soumise au potentiel $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ (modèle des vibrations moléculaires). On cherche un état stationnaire de la forme $\varphi_0(x) = C_0\,\mathrm{e}^{-x^2/(2\sigma^2)}$.

**Q-1)** Calculer $\varphi_0''$. Montrer que $\varphi_0$ est solution de l'équation indépendante du temps si et seulement si $\sigma^2 = \dfrac{\hbar}{m\omega}$, et que son énergie vaut alors $E_0 = \dfrac{1}{2}\hbar\omega$.

**Q-2)** Normaliser $\varphi_0$ (on donne $\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{-u^2}\mathrm{d}u = \sqrt{\pi}$).

**Q-3)** Déterminer les points de rebroussement classiques $\pm x_c$ pour l'énergie $E_0$. Exprimer la probabilité de trouver la particule hors de $[-x_c, x_c]$ à l'aide de $\mathrm{erfc}(1) = 0{,}157$ et commenter.

**Q-4)** Vérifier que $\varphi_1(x) = C_1\,x\,\mathrm{e}^{-x^2/(2\sigma^2)}$ est aussi solution et calculer son énergie. Que penser de l'écart entre niveaux ?

**Q-5)** Pour la molécule HCl, $\omega = 5{,}65\times10^{14}\,\mathrm{rad\cdot s^{-1}}$ et la masse réduite vaut $\mu = 1{,}61\times10^{-27}\,\mathrm{kg}$. Calculer $E_0$ en eV et $\sigma$. Comparer à la longueur de la liaison, $127\,\mathrm{pm}$.

**Correction**

**Q-1)** $\varphi_0' = -\frac{x}{\sigma^2}\varphi_0$ et $\varphi_0'' = \left(\frac{x^2}{\sigma^4} - \frac{1}{\sigma^2}\right)\varphi_0$. L'équation devient $-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{x^2}{\sigma^4} - \frac{1}{\sigma^2}\right) + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 = E$ pour tout $x$ : les termes en $x^2$ se compensent si $\frac{\hbar^2}{2m\sigma^4} = \frac{1}{2}m\omega^2$, soit $\sigma^2 = \hbar/(m\omega)$, et il reste $E_0 = \frac{\hbar^2}{2m\sigma^2} = \frac{1}{2}\hbar\omega$.

**Q-2)** $\int C_0^2\mathrm{e}^{-x^2/\sigma^2}\mathrm{d}x = C_0^2\sigma\sqrt{\pi} = 1$, d'où $C_0 = (\pi\sigma^2)^{-1/4} = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}$.

**Q-3)** $\frac{1}{2}m\omega^2x_c^2 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ donne $x_c = \sigma$. $\mathcal{P} = \frac{2}{\sigma\sqrt{\pi}}\int_\sigma^\infty \mathrm{e}^{-x^2/\sigma^2}\mathrm{d}x = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_1^\infty \mathrm{e}^{-u^2}\mathrm{d}u = \mathrm{erfc}(1) \simeq 16\,\%$ : une particule sur six est détectée dans la région classiquement interdite.

**Q-4)** $\varphi_1'' = \left(\frac{x^3}{\sigma^4} - \frac{3x}{\sigma^2}\right)\mathrm{e}^{-x^2/(2\sigma^2)}C_1$, donc $\frac{\varphi_1''}{\varphi_1} = \frac{x^2}{\sigma^4} - \frac{3}{\sigma^2}$ : avec le même $\sigma$, $E_1 = \frac{3\hbar^2}{2m\sigma^2} = \frac{3}{2}\hbar\omega$. Les niveaux sont équidistants : $E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$ (résultat admis).

**Q-5)** $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega = 2{,}98\times10^{-20}\,\mathrm{J} = 0{,}19\,\mathrm{eV}$ et $\sigma = \sqrt{\hbar/(\mu\omega)} = 11\,\mathrm{pm}$, soit $8\,\%$ de la longueur de liaison : même au zéro absolu, la molécule vibre (énergie de point zéro).

## EXERCICE 10 Indéterminations dans un puits infini

★★★☆☆

Une particule est confinée sur $[0, L]$ dans l'état $\varphi_n(x) = \sqrt{2/L}\,\sin(n\pi x/L)$, d'énergie $E_n = \dfrac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$, purement cinétique. On admet que $\langle p_x\rangle = 0$ et $\langle p_x^2\rangle = 2mE_n$.

**Q-1)** Justifier $\langle x\rangle = L/2$ et établir $\langle x^2\rangle = L^2\left(\dfrac{1}{3} - \dfrac{1}{2n^2\pi^2}\right)$ (on pourra utiliser $\int_0^\pi u^2\cos(2nu)\mathrm{d}u = \dfrac{\pi}{2n^2}$).

**Q-2)** En déduire $\Delta x$, $\Delta p_x$ et le produit $\Delta x\,\Delta p_x$ pour $n = 1$ et $n = 2$. L'inégalité de Heisenberg est-elle vérifiée ?

**Q-3)** Que deviennent $\Delta x$ et $\Delta x\,\Delta p_x$ quand $n \to \infty$ ? Comparer à une particule classique parcourant le segment à vitesse constante.

**Correction**

**Q-1)** $|\varphi_n|^2$ est symétrique par rapport à $L/2$. Avec $u = \pi x/L$ et $\sin^2(nu) = \frac{1}{2}(1 - \cos 2nu)$ : $\langle x^2\rangle = \frac{2L^2}{\pi^3}\int_0^\pi u^2\sin^2(nu)\mathrm{d}u = \frac{L^2}{\pi^3}\left(\frac{\pi^3}{3} - \frac{\pi}{2n^2}\right) = L^2\left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2n^2\pi^2}\right)$.

**Q-2)** $\Delta x = L\sqrt{\frac{1}{12} - \frac{1}{2n^2\pi^2}}$ et $\Delta p_x = \sqrt{2mE_n} = \frac{n\pi\hbar}{L}$. Pour $n = 1$ : $\Delta x = 0{,}181L$ et $\Delta x\,\Delta p_x = 0{,}568\,\hbar$ ; pour $n = 2$ : $\Delta x = 0{,}266L$ et $\Delta x\,\Delta p_x = 1{,}67\,\hbar$. Les deux produits dépassent $\hbar/2$ : l'inégalité est vérifiée, et l'état fondamental en est proche.

**Q-3)** $\Delta x \to L/\sqrt{12}$ : c'est l'écart-type d'une position uniformément répartie sur $[0, L]$, comme pour la particule classique. Le produit croît comme $n$ : les états très excités sont loin de la limite de Heisenberg.

## EXERCICE 11 Optique électronique : réfraction d'une onde de matière

★★★★✧

Un faisceau d'électrons d'énergie cinétique $E = 100\,\text{eV}$ traverse, sous l'incidence $i_1 = 30°$, une grille plane qui sépare deux régions de potentiel uniforme ; dans la seconde, l'énergie potentielle des électrons est plus basse de $20\,\text{eV}$. On généralise à deux dimensions : $\Psi = A\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)}$ dans chaque région.

**Q-1)** Exprimer la norme du vecteur d'onde dans chaque région. Quelle grandeur se conserve lors du passage de la grille, et pourquoi ?

**Q-2)** Montrer que l'onde de matière suit une loi analogue à celle de Snell-Descartes avec un « indice » $n = \sqrt{1 - V(\vec{r})/E}$ (origine des potentiels dans la première région). Calculer l'angle de réfraction.

**Q-3)** Retrouver ce résultat par la mécanique classique (conservation de la composante tangentielle de la quantité de mouvement).

### Correction

**Q-1)** $k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar$ et $k_2 = \sqrt{2m(E - V_2)}/\hbar$ avec $V_2 = -20\,\text{eV}$. L'énergie, donc la pulsation $\omega$, est la même des deux côtés (état stationnaire). La continuité de $\Psi$ en tout point de la grille, à tout instant, impose l'égalité des composantes tangentielles des vecteurs d'onde : $k_1 \sin i_1 = k_2 \sin i_2$.

**Q-2)** D'où $\sin i_1 = n \sin i_2$ avec $n = k_2/k_1 = \sqrt{1 - V_2/E} = \sqrt{1{,}2} = 1{,}095$ et $\sin i_2 = 0{,}456$ : $i_2 = 27{,}2°$. Le faisceau se rapproche de la normale en entrant dans la région accélératrice, comme la lumière dans un milieu plus réfringent : c'est le principe des lentilles électrostatiques des microscopes électroniques.

**Q-3)** La force électrique est normale à la grille : $p_t = p \sin i$ se conserve, et $p = \sqrt{2m(E - V)}$, d'où la même loi. La loi de réfraction des ondes de matière contient la mécanique classique ; les deux descriptions ne divergent que lorsque le potentiel varie sur des distances de l'ordre de $\lambda_{\text{dB}}$ (réflexion partielle, Q3).

# VII Classiques des concours

## EXERCICE 12 L'état fondamental de l'atome d'hydrogène

★★★★✧

L'électron (masse $m_e$, charge $-e$) est soumis au potentiel $V(r) = -\dfrac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$ créé par le proton fixe. On cherche un état stationnaire à symétrie sphérique $\varphi(r) = A\,\mathrm{e}^{-r/a}$, avec $a > 0$. Pour une fonction de $r$ seulement, $\Delta\varphi = \dfrac{1}{r}\dfrac{\mathrm{d}^2(r\varphi)}{\mathrm{d}r^2}$.

**Q-1)** Écrire l'équation de Schrödinger indépendante du temps à trois dimensions et montrer que $\varphi$ en est solution pour une valeur de $a$ à déterminer ; calculer $a$ et l'énergie $E$ en eV. Comparer au modèle de Bohr.

**Q-2)** Normaliser $\varphi$ (élément de volume $4\pi r^2\mathrm{d}r$, $\int_0^\infty r^n \mathrm{e}^{-r/b}\mathrm{d}r = n!\,b^{n+1}$).

**Q-3)** On définit la densité radiale $P(r) = \dfrac{\mathrm{d}\mathcal{P}}{\mathrm{d}r}$. L'exprimer, déterminer la distance la plus probable et la distance moyenne $\langle r\rangle$.

**Q-4)** Calculer la probabilité que l'électron soit à moins de $a$ du proton, et celle qu'il soit au-delà de la distance $2a$ où, classiquement, son énergie cinétique s'annulerait.

**Correction**

**Q-1)** $-\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta\varphi + V\varphi = E\varphi$. Avec $r\varphi = Ar\mathrm{e}^{-r/a}$ : $\frac{\mathrm{d}^2(r\varphi)}{\mathrm{d}r^2} = A\mathrm{e}^{-r/a}\left(\frac{r}{a^2} - \frac{2}{a}\right)$, d'où $\Delta\varphi = \left(\frac{1}{a^2} - \frac{2}{ar}\right)\varphi$. L'équation devient $-\frac{\hbar^2}{2m_e a^2} + \frac{\hbar^2}{m_e a r} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} = E$ pour tout $r$ : les termes en $1/r$ s'éliminent si $a = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} = a_0 = 52{,}9\,\mathrm{pm}$, et $E = -\frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2} = -13{,}6\,\mathrm{eV}$. On retrouve le rayon et l'énergie du fondamental de Bohr, mais sans orbite : l'électron est délocalisé.

**Q-2)** $\int_0^\infty A^2\mathrm{e}^{-2r/a_0}4\pi r^2\mathrm{d}r = 4\pi A^2\cdot 2\left(\frac{a_0}{2}\right)^3 = \pi a_0^3 A^2 = 1$, d'où $A = 1/\sqrt{\pi a_0^3}$.

**Q-3)** $P(r) = 4\pi r^2|\varphi|^2 = \frac{4r^2}{a_0^3}\mathrm{e}^{-2r/a_0}$, maximale pour $r = a_0$ : le rayon de Bohr est la distance la plus probable. $\langle r\rangle = \int_0^\infty rP\mathrm{d}r = \frac{4}{a_0^3}\cdot 6\left(\frac{a_0}{2}\right)^4 = \frac{3}{2}a_0$.

**Q-4)** Avec $u = 2r/a_0$ : $\mathcal{P}(r < a_0) = \frac{1}{2}\int_0^2 u^2\mathrm{e}^{-u}\mathrm{d}u = 1 - 5\mathrm{e}^{-2} = 0{,}32$. La limite classique est $V(r) = E$, soit $r = 2a_0$ ; $\mathcal{P}(r > 2a_0) = \frac{1}{2}\int_4^\infty u^2\mathrm{e}^{-u}\mathrm{d}u = 13\mathrm{e}^{-4} = 0{,}24$ : l'électron passe près d'un quart de son temps dans la région classiquement interdite.

## EXERCICE 13 Schrödinger, d'Alembert et Fourier

✦✦✦✧✧

On compare trois équations aux dérivées partielles à une dimension : l'équation de d'Alembert $\partial_t^2 y = c^2\partial_x^2 y$, l'équation de la chaleur $\partial_t T = D\,\partial_x^2 T$ et l'équation de Schrödinger libre $\mathrm{i}\hbar\,\partial_t\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\Psi$.

**Q-1)** Montrer que l'équation de Schrödinger libre est formellement une équation de diffusion de coefficient imaginaire $D_q$ ; exprimer $D_q$ et vérifier sa dimension. Calculer $\hbar/(2m_e)$ et le comparer à la diffusivité thermique du cuivre ($1{,}1\times10^{-4}\,\mathrm{m^2\cdot s^{-1}}$).

**Q-2)** Chercher pour chacune des solutions en $\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kx-\omega t)}$ avec $k$ réel et établir les relations de dispersion. Commenter : propagation, atténuation, dispersion.

**Q-3)** On change $t$ en $-t$. Montrer que si $T(x,t)$ est solution de l'équation de la chaleur, $T(x,-t)$ ne l'est pas en général, mais que si $\Psi(x,t)$ est solution de l'équation de Schrödinger (avec $V$ réel), $\Psi^*(x,-t)$ l'est. Conclure sur la réversibilité des évolutions décrites.

**Correction**

**Q-1)** $\partial_t\Psi = \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\partial_x^2\Psi$ : $D_q = \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}$, en $\mathrm{m^2\cdot s^{-1}}$ comme un coefficient de diffusion ($\hbar$ est en $\mathrm{kg\cdot m^2\cdot s^{-1}}$). Pour l'électron, $\hbar/(2m_e) = 5{,}8\times10^{-5}\,\mathrm{m^2\cdot s^{-1}}$, du même ordre que la diffusivité du cuivre : un paquet d'ondes électronique « s'étale » comme une tache de chaleur, mais avec une phase (Q2).

**Q-2)** d'Alembert : $\omega^2 = c^2k^2$, propagation sans atténuation ni dispersion. Chaleur : $-\mathrm{i}\omega = -Dk^2$, $\omega = -\mathrm{i}Dk^2$ : $\mathrm{e}^{-Dk^2t}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$, pas de propagation, amortissement d'autant plus rapide que $k$ est grand. Schrödinger : $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$ réel : propagation sans atténuation mais avec **dispersion** ($v_\varphi = \hbar k/2m$ dépend de $k$).

**Q-3)** $T'(x,t) = T(x,-t)$ vérifie $\partial_t T' = -D\partial_x^2 T'$ : ce n'est pas la même équation, la diffusion est irréversible. Pour $\Psi'(x,t) = \Psi^*(x,-t)$ : en conjuguant l'équation de Schrödinger, $-\mathrm{i}\hbar\,\partial_t \Psi^*(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\Psi^* + V\Psi^*$, puis en changeant $t$ en $-t$, $\mathrm{i}\hbar\,\partial_t\Psi' = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\Psi' + V\Psi'$. L'évolution quantique est réversible ; le facteur $\mathrm{i}$, qui distingue Schrödinger de Fourier, est essentiel. (Le poly de référence affirme le contraire, en oubliant la conjugaison.)