LYCÉE D'EXCELLENCE
MOHAMMED VI
LEM6 - CASABLANCA

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

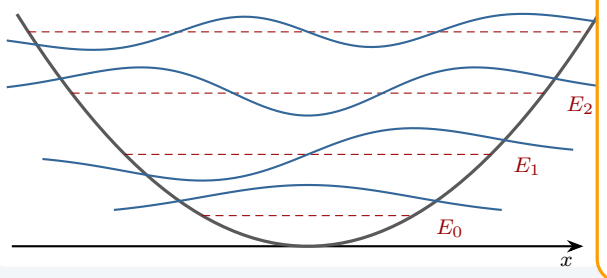
Q1

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 . . . 6
III.1 Une construction heuristique . . . 6
III.2 Énoncé et propriétés . . . 6
IV États stationnaires . . . 7
IV.1 Séparation des variables . . . 7
IV.2 Propriétés et interprétation . . . 8
IV.3 Allure de la fonction d'onde propre . . . 9
V Synthèse . . . 10
VI Exercices d'approfondissement . . . 10
VII Classiques des concours . . . 11

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 ω 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.

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 ($m_n = 1{,}675 \times 10^{-27}\,\mathrm{kg}$) en équilibre thermique à $300\,\mathrm{K}$, d'énergie cinétique $\frac{3}{2}k_B T$;

Q-3) d'un atome de rubidium 87 refroidi par laser à $1\,\mu\mathrm{K}$ ($1\,\mathrm{u} = 1{,}66 \times 10^{-27}\,\mathrm{kg}$). Commenter dans chaque cas.

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)

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

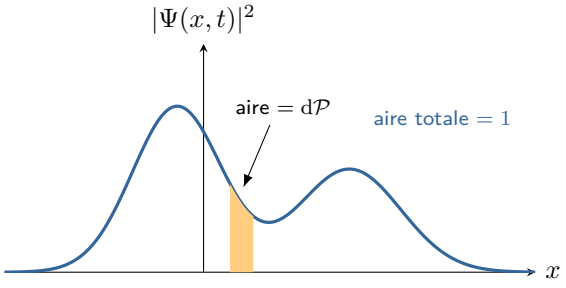
Dans le cadre du programme, on se limite au mouvement selon un axe : $\Psi(x,t)$, $\mathrm{d}\mathcal{P} = |\Psi(x,t)|^2\,\mathrm{d}x$, et $|\Psi(x,t)|^2 = \dfrac{\mathrm{d}\mathcal{P}}{\mathrm{d}x}$ est la **densité (linéique) de probabilité de présence**.

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, Ψ s'exprime en $\mathrm{m^{-1/2}}$.



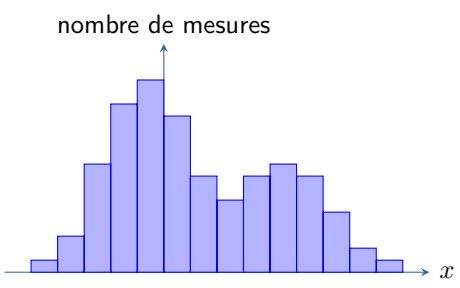


Fig. 1 : À gauche : densité de probabilité de présence ; l'aire sous la courbe entre x et $x + \mathrm{d}x$ est la probabilité $\mathrm{d}\mathcal{P}$. À droite : histogramme des positions mesurées sur N particules préparées dans le même état ; quand $N \to \infty$, il épouse la courbe $N|\Psi|^2$.

Remarque

- Ψ 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 Ψ 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 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}$ (α 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 Δx.

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 φ 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 $\langle x\rangle$?

III L'équation de Schrödinger

III.1 Une construction heuristique

L'équation d'évolution de Ψ 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 Ψ_1 et Ψ_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, $\displaystyle\int|\Psi|^2\mathrm{d}x$ 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 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}V_0t/\hbar}$, 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 $\Psi(x,t)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}V_0t/\hbar}$ est solution pour $V(x)+V_0$. Les prévisions physiques sont-elles modifiées ?

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 φf (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 φ :

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

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

Régions classiquement permises et interdites R

- Si $E > V$ (région **classiquement permise**) : φ'' est de signe opposé à φ, la courbe est concave vers l'axe et **oscille**. Pour V constant, $\varphi'' = -k^2\varphi$ avec $k = \dfrac{\sqrt{2m(E-V)}}{\hbar}$: φ 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) : φ'' est du signe de φ, la courbe s'écarte de l'axe. Pour V constant, $\varphi'' = q^2\varphi$ avec $q = \dfrac{\sqrt{2m(V-E)}}{\hbar}$: φ 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 : φ y change de courbure.

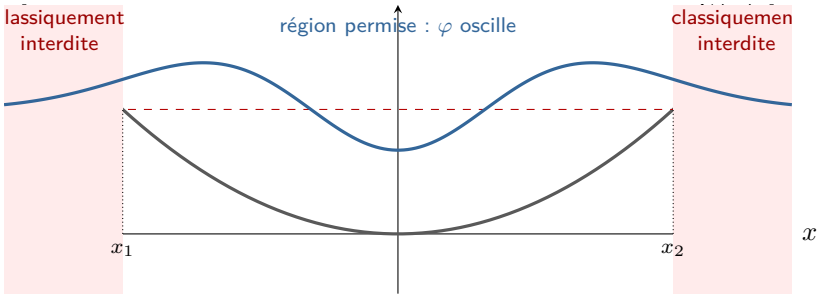


Fig. 2 : Fonction d'onde propre (tracée à la hauteur de son énergie E) dans un potentiel quelconque : oscillante entre les points de rebroussement x_1 et x_2, elle décroît exponentiellement dans les régions interdites, où elle n'est pas nulle.

☞ 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 φ et de φ' aux discontinuités finies de V, et imposer $\varphi = 0$ aux murs infinis.
4. Contrôler : plus $E-V$ est grand, plus φ 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 φ_1 et φ_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 φ_1, φ_2, α et β réels.

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 $\int_{-\infty}^{+\infty} \dfrac{\mathrm{d}u}{\cosh^2 u} = 2$).

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 $\int |\Psi|^2\mathrm{d}x = 1$; Ψ 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 ; $-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi'' + V\varphi = E\varphi$.
- φ continue ; φ' continue si V reste fini ; $\varphi = 0$ aux murs infinis.
- $E > V$: φ oscille ($k = \sqrt{2m(E-V)}/\hbar$) ; $E < V$: φ 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 Ψ^*. 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.

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 φ_0''. Montrer que φ_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 φ_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 σ. Comparer à la longueur de la liaison, $127\,\mathrm{pm}$.

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 Δx, Δp_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 Δx et $\Delta x\,\Delta p_x$ quand $n \to \infty$? Comparer à une particule classique parcourant le segment à vitesse constante.

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

Un faisceau d'électrons d'énergie cinétique $E = 100\,\mathrm{eV}$ 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 $20\,\mathrm{eV}$. 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).

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 φ 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 φ (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.

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.