

Corrigé - TD 20

Mécanique quantique ondulatoire

I - Particule libre

1 - Première intertelle

1. L'équation de Schrödinger s'écrit $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}$.

D'où : $i\hbar f'(t) \Psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} f(t) \Psi''(x)$

Soit : $i\hbar \frac{f'(t)}{f(t)} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Psi''(x)}{\Psi(x)} = \text{cte} = E$

ne dépend que de t

ne dépend que de x

Alors : $f(t) = f(0) e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$ et $\Psi''(x) + \frac{2mE}{\hbar^2} \Psi(x) = 0$

Ainsi : $\Psi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$ où $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$

2. k doit être réel, sinon $|\Psi(x)|$ diverge en $\pm \infty$. On en déduit que l'énergie est forcément positive.

3. Cette fonction d'onde satisfait l'équation de Schrödinger comme nous venons de le voir mais elle n'est pas localisée (alors que la particule l'est) et n'est pas non plus normalisable.

4. a. Oui car la fonction d'onde est désormais localisée, ainsi $\int_{\mathbb{R}} |\Psi(x,t)|^2 dx$ converge.

b. La particule étant un paquet d'onde elle se déplace à la vitesse de groupe, or : $e^{-\frac{iEt}{\hbar}} = e^{-i\omega t}$ d'où $\omega = \frac{E}{\hbar}$
 et $v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{dE}{dE} \cdot \frac{dE}{dk} = \frac{1}{\hbar} \cdot \frac{dE}{dk} = \frac{1}{\hbar} \cdot \frac{2\hbar^2 k}{2m} = \frac{\hbar k}{m}$
 Mais $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ donc $v_g = \sqrt{\frac{2E}{m}}$

La vitesse de phase est $v_{\varphi} = \frac{\omega}{k} = \frac{\omega}{\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}} = \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2m}}$ dépend de ω

Et on remarque $v_{\varphi} = \frac{v_g}{2}$. La propagation est donc dispersive.

5. a. Oui, la propagation étant dispersive le paquet d'ondes se déforme.

b. Notons τ le temps caractéristique de déformation et l la taille de la particule qui correspond à la taille du paquet d'onde.

En ordre de grandeurs dans l'équation de Schrödinger :

$$\frac{\hbar}{l} \frac{|\psi|}{\tau} \sim \frac{\hbar^2}{2m} \frac{|\psi|}{l^2} \text{ soit : } \tau \sim \frac{2ml^2}{\hbar}$$

c. Ici $\tau \sim \frac{2 \cdot 10^{-15} \cdot 10^{-12}}{10^{-34}} \sim 2 \cdot 10^7 \text{ s} \sim 8 \text{ mois}$

Le temps de vie de la particule avant dispersion du paquet d'onde est donc de l'ordre de quelques mois/années. (Mais nous n'avons pas pris en compte d'éventuelles forces de cohésion qui en réalité peuvent affecter ce temps).

2 - Puits inconnu

1. Il s'agit d'un état de diffusion, en effet $|\psi(x,t)|^2$ ne s'annule ni pour $x \rightarrow -\infty$ ni pour $x \rightarrow +\infty$ donc la particule est libre de se déplacer dans tout l'espace.
2. Ces oscillations indiquent la présence d'une onde stationnaire, qui correspond à des interférences entre une onde incidente et une onde réfléchie. Il n'existe pas d'ondes de matière (qu'elles soient stationnaires ou progressives) en mécanique classique.
3. Supposons V_0 constant, l'équation de Schrödinger indépendante de temps donne :
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) + (V_0 - E) \psi(x) = 0$$

Ainsi $\Psi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$ avec $k = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$

On a donc des oscillations spatiales susceptibles de former une onde stationnaire:

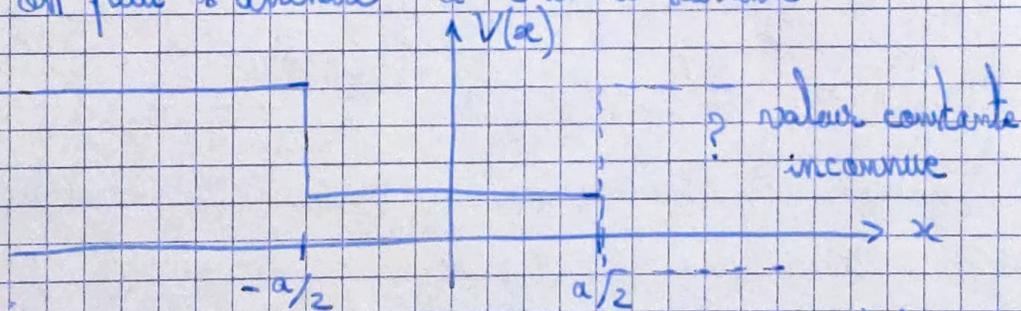
$$|\Psi|^2 = |\Psi|^2 = |A|^2 + |B|^2 + A^* B e^{-2ikx} + AB^* e^{2ikx}$$

$$= |A|^2 + |B|^2 + 2\text{Re}(AB^* e^{2ikx})$$

$|\Psi|^2$ est donc périodique de période $\frac{2\pi}{2k} = \frac{\pi}{k} = \frac{\pi\hbar}{\sqrt{2m(E-V_0)}}$

Ainsi plus V_0 est élevé et plus la période est longue. Donc $V(x)$ est plus faible pour $|x| \leq \frac{a}{2}$ que pour $x < -\frac{a}{2}$

Donc on peut s'attendre à l'allure suivante:



4. Dans la région $x < -\frac{a}{2}$ on a une onde stationnaire donc la superposition de deux ondes: $\Psi_1 = e^{-\frac{iEt}{\hbar}} (A_1 e^{ik_1x} + B_1 e^{-ik_1x})$

• Dans la région $|x| < \frac{a}{2}$ il en est de même, on peut écrire $\Psi_2 = e^{-\frac{iEt}{\hbar}} (A_2 e^{ik_2x} + B_2 e^{-ik_2x})$

• Dans la région $x > \frac{a}{2}$ l'onde est plane progressive:

$$\Psi_3 = A_3 e^{-\frac{iEt}{\hbar}} e^{ik_3x}$$

L'onde doit satisfaire des conditions de continuité de Ψ et de $\frac{\partial \Psi}{\partial x}$ en $x = \pm \frac{a}{2}$ car les discontinuités de potentiel y sont finies.

II - Marche de potentiel

3 - Réflexion sur une marche de potentiel

À t_1 : on a une onde modulée par une enveloppe $A(x - v_g t)$ formant un paquet d'ondes:

$$\Psi(x, t) = A(x - v_g t) \times e^{i(kx - \omega t)}$$

Ainsi $|\Psi|^2 = |A(x - v_g t)|^2$ est de la forme d'une enveloppe.

À t_2 : Même situation, l'onde avance à la vitesse de groupe

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \sqrt{\frac{2E}{m}}$$

À t_3 : L'onde rencontre la marche de potentiel. L'essentiel de l'onde est réfléchi, on négligeant la transmission:

$$\Psi(x, t) = A(x - v_g t) e^{i(kx - \omega t)} - A(v_g t + x) e^{-i(kx + \omega t)}$$

La fonction A étant paire en prenant pour convention $b_3 = 0$,

$$\text{on a } \Psi(x, t) \approx A(x) e^{-i\omega t} \times 2i \sin(kx)$$

$$\text{Et } |\Psi(x, t)|^2 \approx \underbrace{|A(x)|^2}_{\text{enveloppe}} \times \underbrace{4 \sin^2(kx)}_{\text{oscillations}}$$

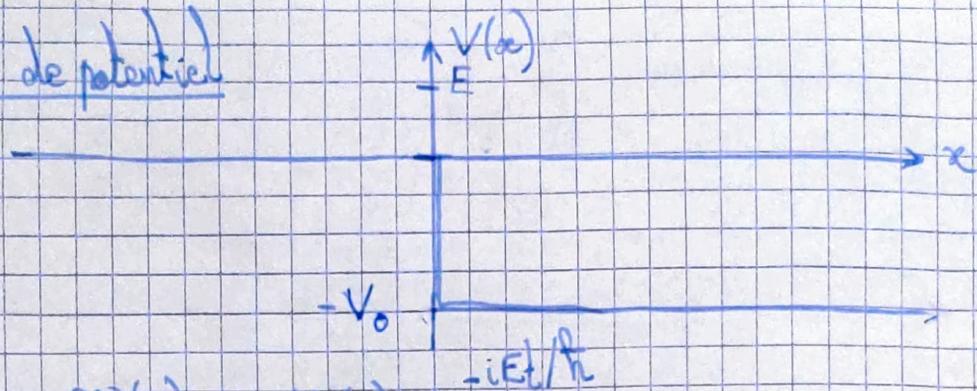
Une onde stationnaire se forme qui résulte de la superposition des ondes incidente et réfléchi.

À t_4 : Le paquet d'ondes est entièrement réfléchi dans la région $x < 0$ on a $\Psi(x, t) = -A(v_g t + x) e^{-i(kx + \omega t)}$

On voit aussi qu'une petite partie de l'énergie a été transmise.

Celle-ci est caractérisée par une vitesse de groupe beaucoup plus faible: $v_g = \sqrt{\frac{2(E - V_0)}{m}}$ où V_0 est la hauteur de la barrière de potentiel.

4 - Falaise de potentiel



1. On note $\Psi(x) = \psi(x) e^{-iEt/\hbar}$

Alors : $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{iE}{\hbar} \times i\hbar \psi(x) e^{-iEt/\hbar} = E \psi(x) e^{-iEt/\hbar}$

L'équation de Schrödinger devient : $-\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) + (V(x) - E)\psi(x) = 0$

2. Dans le milieu 1 : $\psi''(x) + k^2 \psi(x) = 0$ où $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$

On a alors $\psi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$

Dans le milieu 2 : $\psi''(x) + q^2 \psi(x) = 0$ où $q = \frac{\sqrt{2m(V_0 + E)}}{\hbar}$

On a $\psi(x) = C e^{iqx}$ Il n'y a pas d'onde se propageant

dans le sens des x décroissant car pas de source de matière en $x \rightarrow +\infty$.

3. On écrit la continuité de ψ en $x = 0$: $A + B = C$

Et la continuité de $\frac{\partial \psi}{\partial x}$: $ik(A - B) = iqC$

D'où : $\begin{cases} A + B = C \\ A - B = \frac{q}{k} C \end{cases}$ et donc $2A = \left(1 + \frac{q}{k}\right) C$

Ainsi $C = \frac{2Ak}{k+q}$ et $B = C - A = \frac{k-q}{k+q} A$.

Par ailleurs les densités de courant de probabilité valent :

* Pour l'onde incidente : $J_A = \frac{\hbar k}{m} \text{Im}(A^* A \times ik) = \frac{\hbar k}{m} |A|^2$

+ Pour l'onde réfléchie : $J_B = -\frac{\hbar k}{m} |B|^2$

* Pour l'onde transmise : $J_C = \frac{\hbar q}{m} |C|^2$

D'où le coefficient de réflexion:

$$R = \frac{|J_R|}{|J_A|} = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left(\frac{k - q}{k + q} \right)^2 = \left(\frac{\sqrt{E} - \sqrt{V_0 + E}}{\sqrt{E} + \sqrt{V_0 + E}} \right)^2$$

$$R = \frac{2E + V_0 - 2\sqrt{V_0 + E}E}{2E + V_0 + 2\sqrt{V_0 + E}E}$$

$$\text{Et } T = \frac{|J_C|}{|J_A|} = \frac{q}{k} \cdot \frac{|C|^2}{|A|^2} = \frac{4kq}{k(k+q)^2} = \frac{4\sqrt{E(V_0 + E)}}{(\sqrt{E} + \sqrt{V_0 + E})^2}$$

$$T = \frac{4\sqrt{E(V_0 + E)}}{2E + V_0 + 2\sqrt{E(V_0 + E)}}$$

Si $V_0 = 8E$ alors $\sqrt{E(V_0 + E)} = \sqrt{E \times 9E} = 3E$

$$\text{Ainsi } R = \frac{2 + 8 - 6}{2 + 8 + 6} = \frac{4}{16} = \frac{1}{4} \quad \text{et} \quad T = \frac{3}{4}$$

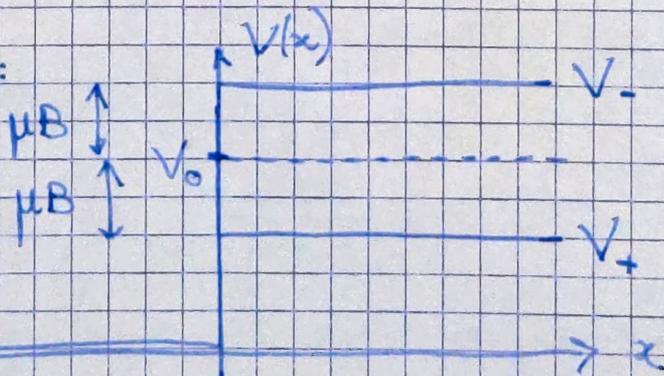
Ceci diffère du cas classique dans lequel $R = 0$ (la particule ne peut pas rebondir sur la falaise).

5 - Pénétration de neutrons dans un milieu magnétique

1. Dans le milieu magnétique:

$$V_{\pm} = V_0 - \vec{\mu} \cdot \vec{B} = V_0 \mp \mu B$$

D'où l'allure suivante:



Les neutrons rencontrent une marche de potentiel qui dépend de l'orientation de leur moment magnétique.

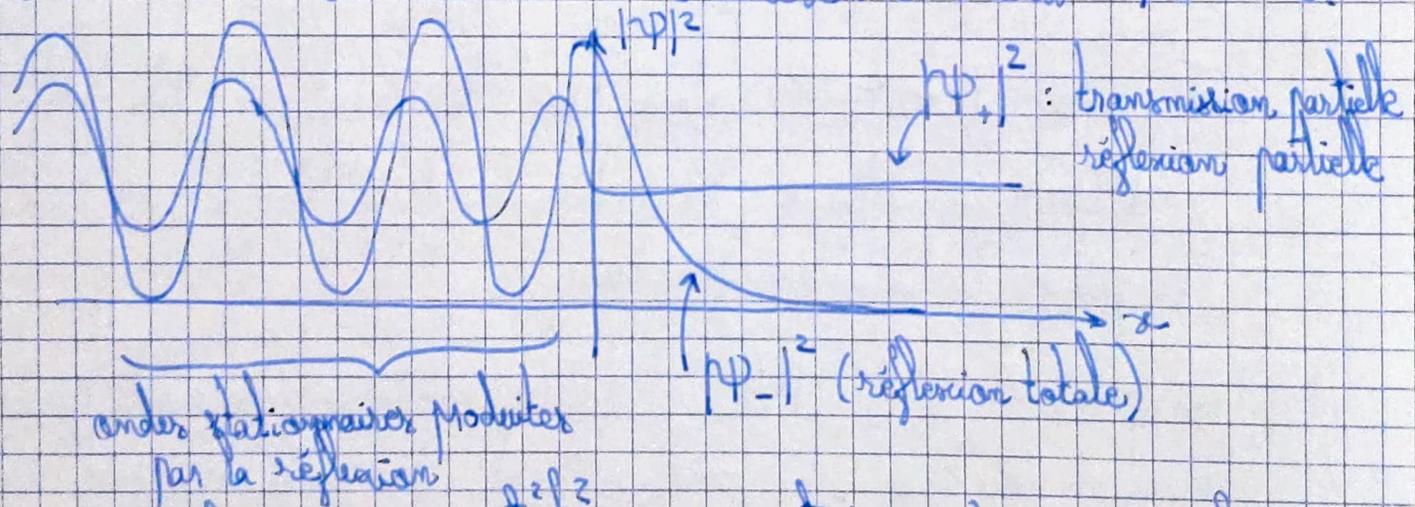
2.3. Nous pouvons noter $k_+ = \frac{\sqrt{2m(E - V_0 + \mu B)}}{\hbar}$ et $k_- = \frac{\sqrt{2m(V_0 + \mu B - E)}}{\hbar}$

On a bien $k_+ > 0$ et $k_- > 0$ au vu des inégalités de l'énoncé.

- Dans le cas des neutrons selon $+\vec{e}_y$, ils peuvent franchir la marche et d'après le cours:
$$T_+ = \frac{4k_+k_-}{(k_+ + k_-)^2} = \frac{4\sqrt{E}\sqrt{E-V_0+\mu B}}{(\sqrt{E} + \sqrt{E-V_0+\mu B})^2} \quad (*)$$

ou encore:
$$T_+ = \frac{4\sqrt{E(E-V_0+\mu B)}}{2E-V_0+\mu B + 2\sqrt{E(E-V_0+\mu B)}}$$

- Dans le cas des neutrons selon $-\vec{e}_y$, leur énergie sera insuffisante et ils auront une réflexion totale sur la marche de potentiel avec une onde évanescente à l'arrière. On a ainsi $T_- = 0$.



3. a. On a alors $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ $V_0 = \frac{\hbar \omega_0}{2}$ et $\mu B = \frac{\hbar \omega_L}{2}$

Ainsi $E = \frac{\hbar^2 (k^2 - k_0^2)}{2m} + V_0 = \frac{\hbar \Delta \omega}{2} + \frac{\hbar \omega_0}{2} = \frac{\hbar}{2} (\omega_0 + \Delta \omega)$

D'où: $T_+ = \frac{4\sqrt{(\omega_0 + \Delta \omega)(\omega_0 + \omega_L)}}{(\sqrt{\omega_0 + \Delta \omega} + \sqrt{\omega_0 + \omega_L})^2}$ en réinjectant dans (*).

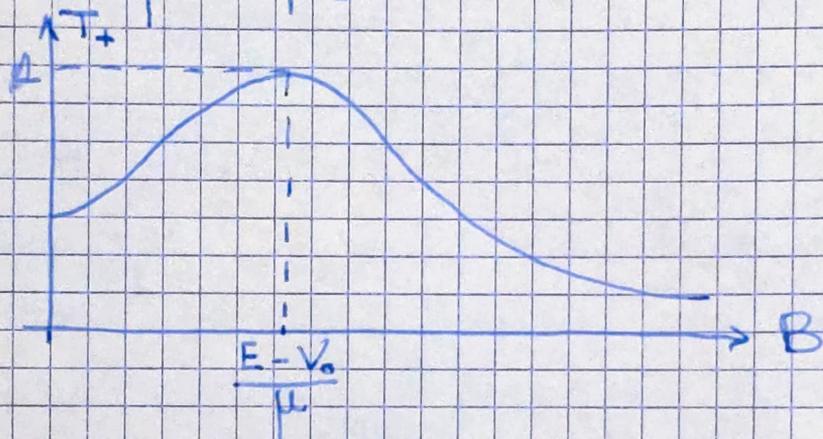
b. On remarque que dans ce cas $\Delta \omega > 0$. On a alors:

$$T_+ = \frac{4\sqrt{\frac{\omega_0 + \omega_L}{\omega_0 + \Delta \omega}}}{\left(1 + \sqrt{\frac{\omega_0 + \omega_L}{\omega_0 + \Delta \omega}}\right)^2} = \frac{4u}{(1+u)^2} \quad \text{ou } u = \sqrt{\frac{\omega_0 + \omega_L}{\omega_0 + \Delta \omega}}$$

u est une fonction croissante du champ magnétique, on a

$$T_+ \sim 4u \quad \text{si } u \ll 1 \quad \text{et} \quad T_+ \sim \frac{1}{u} \quad \text{si } u \gg 1$$

T_+ est maximal lorsque $u = 1$ c'est-à-dire $\Delta\omega = \omega_L$
ou encore lorsque $\mu B = E - V_0$



c. Lorsque $B = \frac{E - V_0}{\mu}$ alors tous les neutrons tels que $\vec{\mu} = +\mu \vec{e}_y$ sont transmis et tous les autres sont réfléchis : on peut séparer parfaitement les deux faisceaux.

d. Lorsque $E < V_0 - \mu B$, aucun neutron ne peut passer la barrière et tous les coefficients de transmission sont nuls : la situation n'est pas intéressante.

6 - Interaction entre un électron et un métal

1. a. Le conducteur étant parfait, le champ électrique y est nul.

b. On a continuité de la composante tangentielle de \vec{E} (mais pas normale) à la surface du conducteur parfait. Le plan situé en $z = 0^+$ est donc un plan auquel \vec{E} est normal ce qui peut correspondre à un plan d'antisymétrie des charges. Il est donc naturel de s'intéresser au cas d'une charge $-e$

localisée en e , qui impose un champ électrique normal en $z=0^+$.
 De plus, dans les deux situations (charge fictive en M' ou conducteur parfait pour $z < 0$), le champ électrique satisfait l'équation de Poisson $\Delta V + \frac{\rho}{\epsilon_0} = 0$ et la distribution de charges est identique pour $z=0^+$, avec les mêmes conditions aux limites ($\|\vec{E}\| \rightarrow 0$ à l'infini et \vec{E} est normal en $z=0^+$).
 Par unicité de la solution de l'équation de Poisson, le champ électrique est identique dans les deux configurations.

c. On a alors $\vec{E}(M) = \frac{e}{4\pi\epsilon_0(2z)^2} \vec{e}_z = \frac{e}{16\pi\epsilon_0 z^2} \vec{e}_z$

D'où $\vec{F} = -e\vec{E} = -\frac{e^2}{16\pi\epsilon_0 z^2} \vec{e}_z$

Et $\vec{F} = -\text{grad}(E_p(z))$ où $E_p(z) = -\frac{e^2}{16\pi\epsilon_0 z}$

Cette force est attractive : l'électron repousse les autres électrons du conducteur et ainsi crée une densité surfacique de charge $\sigma > 0$ à la surface du conducteur, qui va attirer l'électron.

2. a. On a : $i\hbar \frac{d}{dt} g(t) \phi(z) = -\frac{\hbar^2}{2m} g(t) \phi''(z) + V(z) g(t) \phi(z)$

D'où : $\frac{i\hbar \frac{d}{dt} g(t)}{g(t)} = -\frac{\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\phi''(z)}{\phi(z)} + V(z)}{g(t)} = \text{cte} = E$
indépendant de z indépendant de t séparation des variables

Ainsi on peut écrire : $g(t) = g(0) \cdot e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$

b. On a alors : $-\frac{\hbar^2}{2m} \phi''(z) + (V(z) - E) \phi(z) = 0$

On encore : $\phi''(z) + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{16\pi\epsilon_0 z} \right) \phi(z) = 0$

c. Supposons $\phi = C_1 z e^{-k_1 z}$

Alors: $\phi'(z) = C_1 (1 - k_1 z) e^{-k_1 z}$

$\phi''(z) = C_1 [-k_1 - k_1(1 - k_1 z)] e^{-k_1 z} = -C_1 k_1 (2 - k_1 z) e^{-k_1 z}$

On réinjecte dans l'équation pour trouver après simplification par $e^{-k_1 z}$:

$$-k_1 (2 - k_1 z) + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{16\pi\epsilon_0 z} \right) z = 0$$

On envoie:

$$2k_1 - k_1^2 z = -\frac{me^2}{8\pi\epsilon_0 \hbar^2} + \frac{2mEz}{\hbar^2}$$

On conclut par identification que:

$$\begin{cases} k_1 = \frac{me^2}{16\pi\epsilon_0 \hbar^2} \\ E = -\frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} \end{cases}$$

Alors $E = -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{m^2 e^4}{256 \pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^4} = \frac{-me^4}{128 \epsilon_0^2 \hbar^2} = \boxed{-0,85 \text{ eV}}$

Et C_1 est obtenu par condition de normalisation:

$$1 = \int_0^{\infty} |\psi|^2 dz = C_1^2 \int_0^{\infty} z^2 e^{-2k_1 z} dz = \frac{C_1^2}{(2k_1)^3} \int_0^{\infty} u^2 e^{-u} du = \frac{C_1^2}{(2k_1)^3} \cdot 2! = 2$$

D'où $C_1 = \sqrt{\frac{4k_1^3}{2}} = 2\sqrt{k_1^3}$

d. On a alors: $\langle z \rangle = \int_0^{\infty} z |\psi|^2 dz = \int_0^{\infty} C_1^2 z^3 e^{-2k_1 z} dz$

$$\begin{aligned} \langle z \rangle &= \frac{2k_1^3}{8k_1^3} \int_0^{\infty} z^3 e^{-2k_1 z} dz = \frac{1}{8k_1} \times \int_0^{\infty} (2k_1 z)^3 e^{-2k_1 z} \cdot 2k_1 dz \\ &= \frac{1}{8k_1} \int_0^{\infty} u^3 e^{-u} du = \frac{3!}{8k_1} = \frac{6}{8k_1} = \frac{3}{4k_1} \end{aligned}$$

Soit: $\langle z \rangle = \frac{12\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2} = \frac{3\epsilon_0 \hbar^2}{2me^2} = \boxed{2,5 \text{ \AA}}$

II - Effet tunnel

7 - Microscope à effet tunnel

1. En mécanique classique, la particule rebondit sur la barrière et repart en sens inverse avec la même énergie cinétique.

En mécanique quantique, ce type de potentiel peut servir à modéliser la radioactivité α ou bien le microscope à effet tunnel.

2. On a, en réinjectant: $E\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + V(x)\psi(x)$

3. On peut réécrire: $\psi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\psi(x) = 0$.

On note $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ et $q = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$

Dans le domaine I on a $\psi''(x) + k^2\psi(x) = 0$
 $\Rightarrow \psi_I(x) = A_I e^{ikx} + B_I e^{-ikx}$

Dans le domaine II on a $\psi''(x) - q^2\psi(x) = 0$
 $\Rightarrow \psi_{II}(x) = A_{II} e^{qx} + B_{II} e^{-qx}$

Dans le domaine III on a $\psi''(x) + k^2\psi(x) = 0$. Aucune onde de matière n'arrive depuis la région $x \rightarrow \infty$ donc on peut écrire que: $\psi_{III}(x) = A_{III} e^{ikx}$ (propagation dans le sens des x croissants)

4. On définit ce coefficient comme le rapport des courants de probabilité des ondes incidente et transmise:

$$J_{I, \text{incident}} = \frac{\hbar}{2m} |A_I e^{ikx}|^2 \cdot k = \frac{\hbar k}{2m} |A_I|^2$$

$$J_{III, \text{transmis}} = \frac{\hbar k}{2m} |A_{III}|^2 \quad \text{d'où} \quad T = \frac{|A_{III}|^2}{|A_I|^2} \quad \text{Il se calcule}$$

en écrivant la continuité de ψ et de $\frac{\partial \psi}{\partial x}$ en $x=0$ et $x=a$,

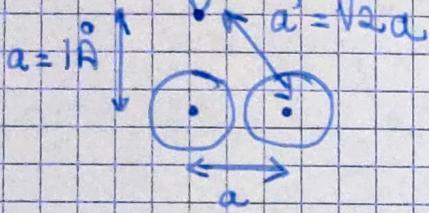
5. a. Dans ce cas: $\sinh(ka) \sim \frac{1}{2} e^{ka} \gg 1$ et on a

donc :
$$T \approx \frac{4E(V_0 - E)}{V_0^2 \cdot (e^{Ka})^2} = \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-2Ka}$$

b. À une distance $a = 0,1 \text{ nm}$, un calcul numérique nous donne $K = 1,1 \cdot 10^{10} \text{ m}^{-1}$ et $T = 0,23$

Pour un atome voisin, distant de $a' = a\sqrt{2}$ on aura :

$$T' = \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-2\sqrt{2}Ka} = 0,09$$



On a T' nettement plus faible que T donc le courant mesuré est dominé par l'atome le plus proche, ainsi la résolution du microscope est bien atomique.

8 - Radioactivité α

1. On a $R = R_0 \sqrt[3]{226} = 7,3 \text{ fm}$

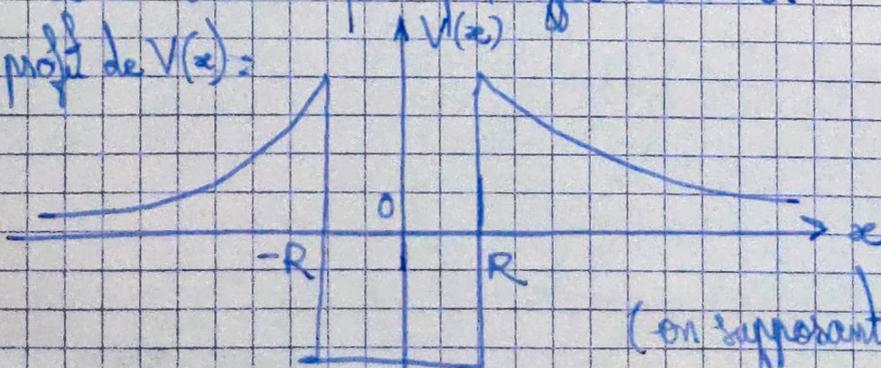
Et R_c est tel que :
$$\frac{2(Z-2)e^2}{4\pi\epsilon_0 R_c} = E$$

D'où :
$$R_c = \frac{2(Z-2)e^2}{4\pi\epsilon_0 E} = \frac{43e^2}{\pi\epsilon_0 E} = 52 \text{ fm}$$

2. En $r = R_c$ on a $V(r) = \frac{2(Z-2)e^2}{4\pi\epsilon_0 R_c} = E \cdot \frac{R_c}{R} = 7,2 \cdot E$

Donc $V(r)$ est largement supérieur à E et la particule ne peut traverser cette barrière que par effet tunnel.

3. On a le profil de $V(x)$:



(on suppose que la particule α passe sur un diamètre)

Ainsi le temps mis pour traverser le noyau est $t_0 = \frac{2R}{v}$

4. Soit $P(t)$ la probabilité que la particule soit encore dans le puits alors $P(t+t_0) = P(t) \times (1-T)$

particule dans le noyau à $t+t_0$
dans le noyau à t
probabilité de rester lors de la collision

D'où : $P(t) + \frac{dP}{dt} t_0 = P(t)(1-T) \Rightarrow \frac{dP}{dt} = -T \cdot \frac{P}{t_0}$
 (on utilise $T \ll 1$ donc $P(t+t_0) \approx P(t)$)

Ainsi : $P(t) = P(t=0) \times e^{-\frac{Tt}{t_0}} = e^{-\frac{Tt}{t_0}} = e^{-\frac{t \cdot T}{2R}}$

Le temps de demi vie est tel que $P(\tau) = \frac{1}{2}$, autrement dit on aura : $\frac{t \cdot T}{2R} = \ln(2)$ soit : $\tau = \frac{2 \ln(2) R}{T v}$

5. On a alors : $t_0 = \frac{2 \cdot R}{v} = \frac{2 r_0 \sqrt{A}}{\sqrt{\frac{2E}{m_\alpha}}}$ avec $E = \frac{1}{2} m v^2$

D'où : $t_0 = r_0 \sqrt{A} \sqrt{\frac{2m_\alpha}{E}} \propto \frac{1}{\sqrt{E}}$ donc t_0 varie peu en fonction de E par rapport à T qui varie en $\exp\left(\frac{c}{\sqrt{E}}\right)$.

On conclut que $\ln\left(\frac{\tau}{t_0}\right) \approx \ln\left(\frac{\ln 2}{T}\right) \approx \ln \ln 2 - \ln T$
 $\approx -75,2 + \frac{341}{\sqrt{E(\text{en MeV})}}$

Cette loi numérique peut être comparée à des résultats expérimentaux.

9 - Molécule d'ammoniac

1. Le problème est invariant par l'opération $x \leftarrow -x$ donc $|\psi|^2$ doit aussi l'être. Il faut donc que $|\psi|^2$ soit une fonction paire c'est à dire si $|\psi|$ est une fonction paire.

Ainsi, $\phi(x)$ doit être une fonction soit paire, soit impaire.

2. ϕ satisfait l'équation de Schrödinger stationnaire:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \phi''(x) + (V(x) - E) \phi(x) = 0$$

On en déduit que $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ en réinjectant dans l'équation et en utilisant $V(x) = 0$ dans les puits.

3. En $x = \pm b$ on a une discontinuité infinie de potentiel donc ψ est continue et nulle en ce point et $\phi(b) = \phi(-b) = 0$.

$$\text{Ainsi } \sin(-kb + \varphi_1) = \sin(kb + \varphi_2) = 0$$

D'où: $\varphi_1 = kb$ et $\varphi_2 = -kb$ certainement (on pourrait aussi ajouter π mais cela revient à changer le signe de α_1 et/ou α_2). Ainsi:

$$\phi_1(x) = \alpha_1 \sin(k(x+b)) \quad \text{et} \quad \phi_2(x) = \alpha_2 \sin(k(x-b))$$

• Les solutions paires vérifient $\phi_1(-x) = \phi_2(x)$

$$\text{D'où: } \alpha_1 \sin(k(b-x)) = \alpha_2 \sin(k(x-b)) \quad \text{soit} \quad \boxed{\alpha_2 = -\alpha_1}$$

• Les solutions impaires vérifient alors $\boxed{\alpha_2 = \alpha_1}$

4. Dans la barrière de potentiel, on pose $\kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$

$$\text{Alors } \phi''(x) - \kappa^2 \phi(x) = 0$$

$$\text{D'où: } \phi(x) = A \cosh(\kappa x) + B \sinh(\kappa x)$$

Dans le cas d'une solution paire $\phi(x) = A \cosh(\kappa x)$.

La continuité en $x = \pm a$ impose que:

$$\begin{aligned} A \cosh(\kappa a) &= \alpha_2 \sin(k(a-b)) \\ &= -\alpha_2 \sin(k(b-a)) \quad (*) \end{aligned}$$

La continuité de $\phi'(x)$ en $x = a$ impose:

$$\begin{aligned} A \kappa \sinh(\kappa a) &= \alpha_2 k \cos(k(a-b)) \\ &= \alpha_2 k \cos(k(b-a)) \quad (**)$$

$(*)_1 / (*)_2$ donne alors :

$$\frac{1}{K} \coth(Ka) = -\frac{1}{k} \tan(k(b-a))$$

ou encore : $k \coth(Ka) = -K \tan(k(b-a))$

5. Le raisonnement est similaire mais fait intervenir l'expression $\phi(x) = B \sinh(Kx)$, alors \sinh et \cosh sont inversés et :

$$k \ch(Ka) = -K \tan(k(b-a))$$

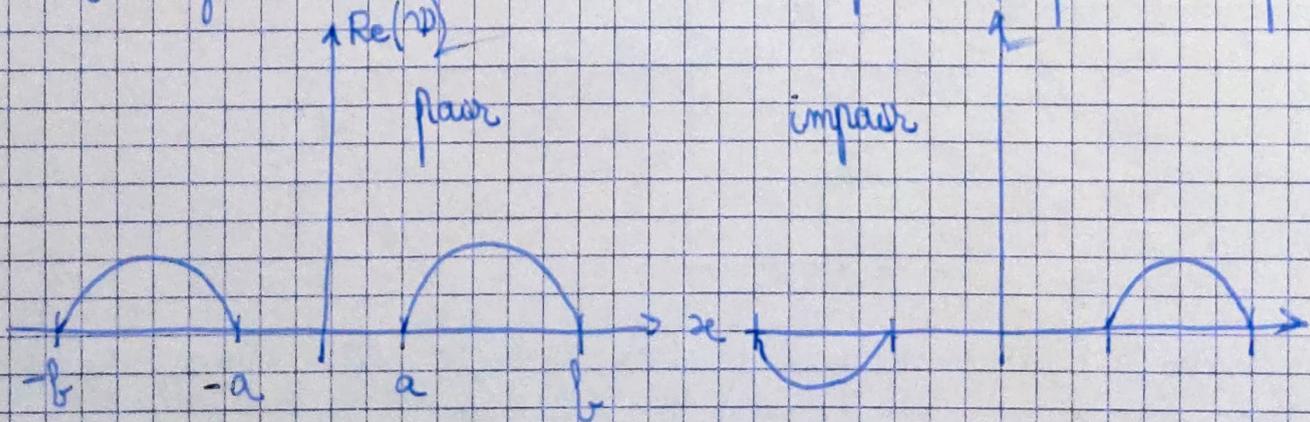
6. Dans le cas d'une barrière infinie, les niveaux d'énergie symétriques et antisymétriques sont identiques, en effet $K \rightarrow \infty$ et les équations deviennent donc :

$$\frac{2}{\pi} \cdot k = -K \tan(k(b-a))$$

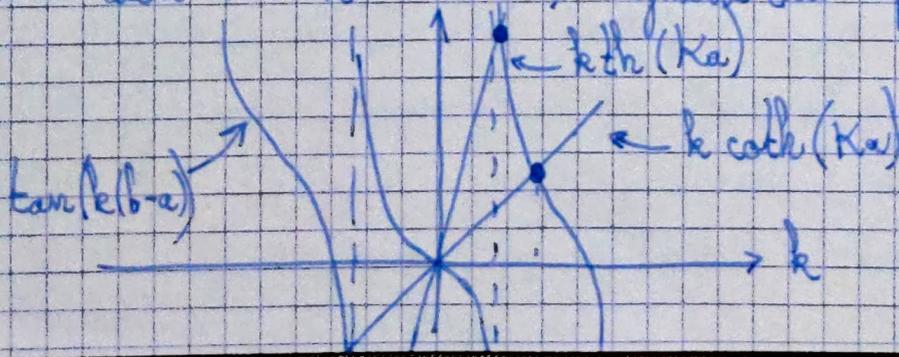
donc $\tan(k(b-a)) = 0$ soit $k(b-a) = \frac{n\pi}{2}$

ou encore : $\frac{n\pi}{b-a} = k = \frac{\sqrt{2mE_n}}{\hbar} \Rightarrow E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m(b-a)^2}$

On retrouve les niveaux d'énergie du puits infini. Pour l'énergie minimale deux états sont possibles, pair et impair :

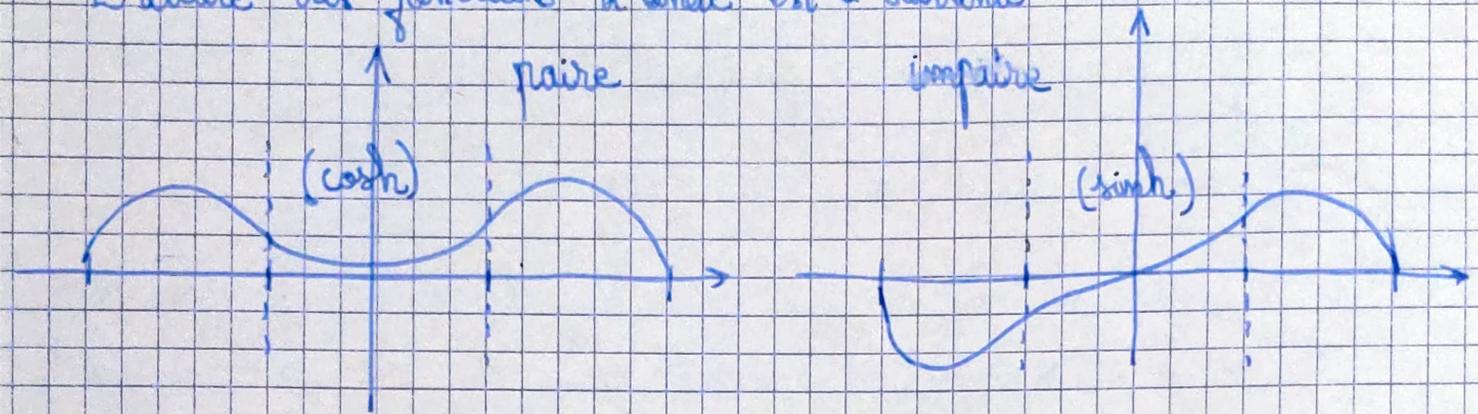


7. On a alors $K \gg k$ et $\ch(Ka)$ augmente très rapidement :



Les deux états fondamentaux pair et impair sont séparés.

L'allure des fonctions d'onde est la suivante :



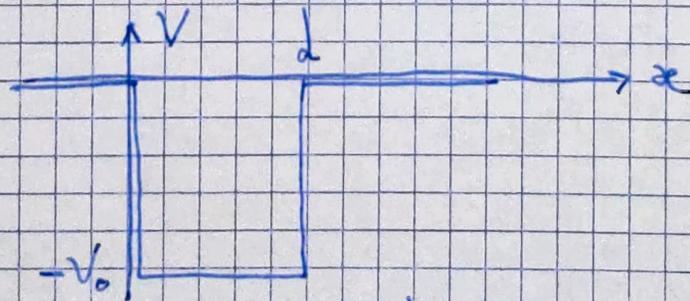
On voit que $|\psi|^2$ est différente pour les deux états pairs et impairs ce qui va modifier leurs niveaux d'énergie.

9. L'écart entre les niveaux sera tel que $\Delta E = h\nu$ où ν est la fréquence d'émission, ainsi $\Delta E = 1,6 \cdot 10^{-23} \text{ J} = 9,9 \cdot 10^{-5} \text{ eV}$
 Les photons ont une longueur d'onde $\lambda = \frac{c}{\nu} = 1,2 \text{ cm}$
 On est dans le domaine des micro-ondes.

IV - Puits quantique

10 - Puits fini

1.



Une particule classique accélère dans le puits, puis reprend sa vitesse initiale et continue son chemin.

3. On a une onde se propageant dans le sens des x croissantes et une dans le sens des x décroissantes avant le puits, dans une onde incidente et une onde réfléchie. Il y a également une onde transmise après le puits, pour $x > d$.

En réinjectant dans l'équation de Schrödinger indépendante du temps pour $x > d$ on trouve : $+\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \phi = E \phi$

D'où $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$

3. On a pour $x \in]0, d[$: $-\frac{\hbar^2}{2m} \phi''(x) = (E + V_0) \phi(x)$

D'où : $\phi''(x) + q^2 \phi(x) = 0$

Ainsi on peut écrire : $\phi(x) = A e^{iqx} + B e^{-iqx}$

4. On a des discontinuités finies de potentiel en $x=0$ et $x=d$ donc ψ et $\frac{\partial \psi}{\partial x}$ y sont continues ; ainsi $\phi(x)$ et $\phi'(x)$ y sont également continues.

5. La densité de courant de probabilité des ondes incidente, réfléchie et transmise est donnée par :

$J_i = \frac{\hbar k}{m} |e^{iqx}|^2 = \frac{\hbar k}{m} |e^{iqx}|^2$ $J_r = -\frac{\hbar k}{m} |r e^{-iqx}|^2 = -\frac{\hbar k}{m} |r|^2$

et $J_t = \frac{\hbar k}{m} |t e^{ikx}|^2 = \frac{\hbar k}{m} |t|^2$

Par conservation de la densité de probabilité $|J_i| = |J_r| + |J_t|$

D'où : $|r|^2 + |t|^2 = 1$

6. Dans le cas où $E \rightarrow 0$ on a $k = 0$, alors :

$$\begin{cases} \phi(x) = 1 + r & \text{pour } x < 0 \\ \phi(x) = A e^{+iqx} + B e^{-iqx} & \text{pour } 0 < x < d \\ \phi(x) = t & \text{pour } x > d \end{cases}$$

Par continuité de ϕ on a $\begin{cases} r + 1 = A + B & (1) \end{cases}$

$\begin{cases} t = A e^{iqd} + B e^{-iqd} & (2) \end{cases}$

Par continuité de ϕ' on a $\begin{cases} 0 = iq(A - B) & (3) \end{cases}$

$\begin{cases} 0 = iq(A e^{iqd} - B e^{-iqd}) & (4) \end{cases}$

D'après (3) on a $A = B$ ainsi :

$$\begin{cases} 1 + r = 2A \\ z = 2A \cos(qd) \\ 2A \sin(qd) = 0 \end{cases}$$

La dernière équation donne $A = 0$ (sauf si $\sin(qd) = 0$) et on a alors $r = -1$ et $z = 0$: il y a réflexion totale.

7. À faible vitesse, on se trouve dans le cas précédent $E = 0$, on observe une réflexion totale comme attendu. À grande vitesse, l'écart d'énergie du puits est faible et le puits n'est donc pas ressenti par la particule : on a alors une transmission totale.

8. Pas conservation de l'énergie, les particules transmises conservent leur vitesse après le puits. En revanche, on voit bien que les particules qui ont une faible vitesse ($< 0,4 v_R$ environ) ont une probabilité très faible d'être transmises, donc les particules transmises auront une vitesse entre $0,4 v_R$ et $0,8 v_R$.

9. On voit que si on prend $V_0 = 4 E_R$, alors ce sont les particules aux faibles vitesses qui ont la plus grande probabilité de transmission donc on réalise un filtre passe-bas.

10. On a $v_R = \frac{h \gamma}{m d} = 6,9 \text{ nm} \cdot \text{s}^{-1}$. $E_R = \frac{1}{2} m v_R^2 = 3,5 \cdot 10^{-30} \text{ J}$

Et $T_R = 2,5 \cdot 10^{-7}$: l'énergie mise en jeu est très faible devant l'agitation thermique à température ambiante et il faut utiliser des atomes froids à quelques centaines de nanokelvins.

11 - Puits de Yukawa

1. a est de l'ordre de grandeur de la taille d'un noyau atomique soit $a \sim 10^{-15} \text{ m} \sim 1 \text{ fm}$.

2. La fonction d'onde spatiale $\psi(x)$ vérifie l'équation de

Schrödinger indépendante du temps :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) + (V(x) - E) \psi(x) = 0$$

On a ainsi pour $x \in [0, 2a]$: $\psi''(x) + k^2 \psi(x) = 0$

D'où : $\psi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$

Pour $x > 2a$: $\psi''(x) - q^2 \psi(x) = 0$

D'où $\psi(x) = C e^{qx} + D e^{-qx} = D e^{-qx}$

Et pour $x < 0$ le potentiel est infini donc $\psi(x) = 0$.
ce terme diverge donc et nécessairement nul

3. On doit avoir : * continuité de ψ en $x = 0$

* continuité de ψ et ψ' en $x = 2a$

Ainsi :

$$\begin{cases} A + B = 0 \\ A e^{2ika} + B e^{-2ika} = D e^{-2qa} \\ ik(A e^{2ika} - B e^{-2ika}) = -q D e^{-2qa} \end{cases}$$

En utilisant la première équation les deux suivantes deviennent :

$$\begin{cases} 2i A \sin(ka) = D e^{-2qa} \\ 2ik A \cos(ka) = -q D e^{-2qa} \end{cases}$$

Le quotient de ces équations donne : $\frac{k}{\tan(2ka)} = -q$

4. On a $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ et $q = \frac{\sqrt{2m(V_0+E)}}{\hbar}$

Alors : $k^2 + q^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} = k_0^2$ soit $k^2 + q^2 = k_0^2$

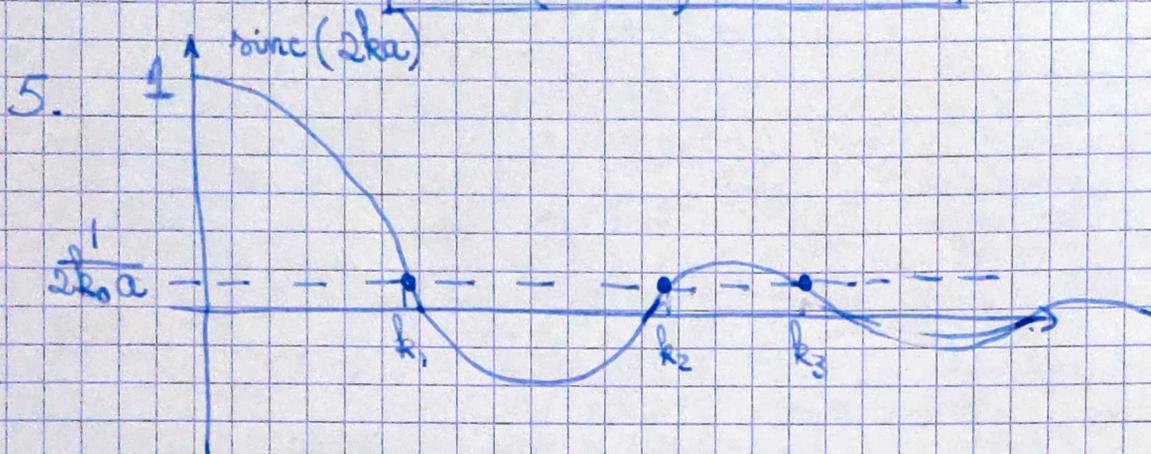
On encore : $k^2 \left(1 + \frac{1}{\tan^2(2ka)} \right) = k_0^2$

Où : $1 + \frac{1}{\tan^2 X} = 1 + \frac{\cos^2 X}{\sin^2 X} = \frac{1}{\sin^2 X}$ donc :

$$\frac{k^2}{\sin^2(2ka)} = k_0^2 \text{ ou encore } \left(\frac{\sin(2ka)}{2ka} \right)^2 = \left(\frac{k_0 a}{k} \right)^2$$

Finalement :

$$\text{sinc}(2k_0 a) = \frac{1}{2k_0 a}$$



dans cette configuration on a 3 solutions

On aura au moins une solution si $2k_0 a > 1$, c'est-à-dire si $2a \times \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar} > 1$ ou $V_0 > \frac{\hbar^2}{8ma^2}$