

Mécanique quantique ondulatoire

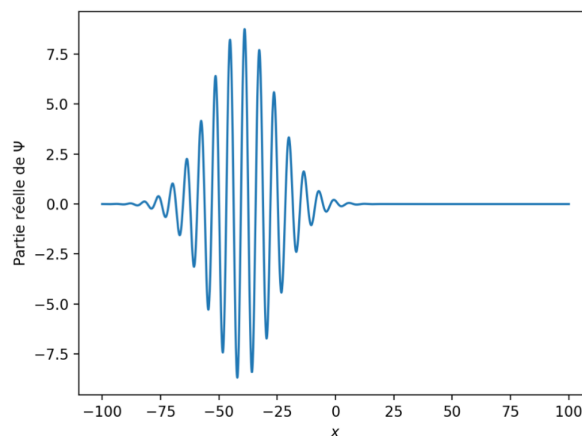
Chapitre 20

I - Particule libre

1 Poussière interstellaire

On considère une poussière interstellaire, modélisée comme une particule libre quantique de masse $m = 10^{-15}$ kg et de taille caractéristique $\ell = 1$ μm supposée correspondre à la largeur caractéristique d'un paquet d'ondes de matière.

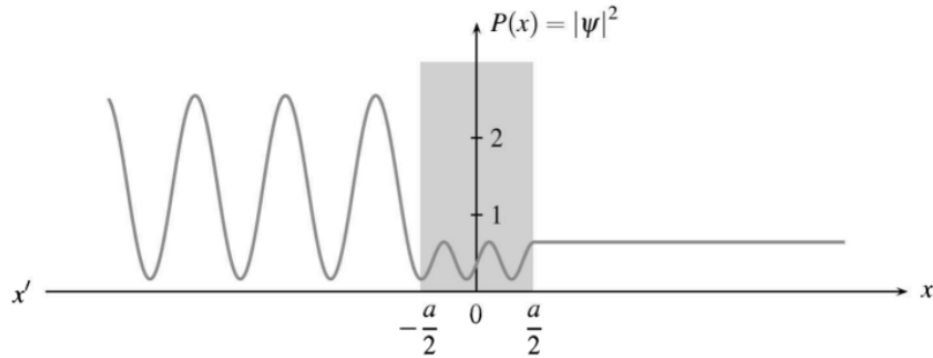
1. Déterminer les fonctions d'onde $\psi(x, t) = \phi(x)f(t)$ représentant des états dynamiques pour lesquels l'énergie a la valeur E .
2. Quelles sont les valeurs possibles de l'énergie ?
3. Pourquoi la fonction d'onde $\psi(x, t) = Ae^{i(k_0x - \omega_0t)}$ ne peut pas décrire la particule ?
4. La figure ci-dessous représente la partie réelle de la fonction d'onde d'un paquet d'onde gaussien à $t = 0$ en fonction de l'abscisse x (en unités arbitraires). On admet que la partie imaginaire a une forme similaire. Ce paquet d'ondes est la superposition d'une infinité d'ondes planes de pulsations voisines de ω_0 et de vecteurs d'onde voisins de k_0 .
 - (a) Est-ce que la condition de normalisation peut être résolue ?
 - (b) Déterminer la vitesse de la particule en fonction de E et m . Le milieu est-il dispersif ?



5.
 - (a) Le paquet d'onde se propage dans le sens des $x > 0$. Est-ce qu'il se déforme en cours du temps ?
 - (b) Montrer que l'équation de Schrödinger donne, en ordre de grandeur le temps caractéristique d'étalement du paquet d'onde de matière $\tau = \frac{2m\ell^2}{\hbar}$.
 - (c) Calculer numériquement ce temps et conclure.

2 Puits inconnu

Un faisceau de particules quantiques incidentes, de masse m et d'énergie E , provient de $x = -\infty$. Chaque particule est astreinte à se déplacer le long de l'axe (Ox) . Elle est soumise à un champ de force qui dérive de l'énergie potentielle $V(x)$. On admet que cette énergie s'annule quand x tend vers $\pm\infty$.



Sur le graphe ci-dessus est représentée la densité de probabilité de présence $P(x)$ d'une particule quantique. Les oscillations qui apparaissent sont sinusoïdales.

1. L'état de chaque particule quantique est-il un état lié ou un état de diffusion ?
2. Quelle interprétation peut-on donner aux oscillations de la densité de probabilité de présence pour $x \leq 0$? Le même comportement est-il observable en mécanique classique ? La fonction d'onde associée à cet état stationnaire est notée :

$$\psi(x, t) = \Phi(x) \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) \quad (1)$$

3. L'énergie potentielle $V(x)$ de la particule est constante par morceaux. Déterminer son allure possible en fonction de x .
4. Dans la mesure du possible, proposer une expression de $\Phi(x)$ pour chacune des trois régions :
 - $x \leq -a/2$
 - $|x| \leq a/2$
 - $x \geq a/2$

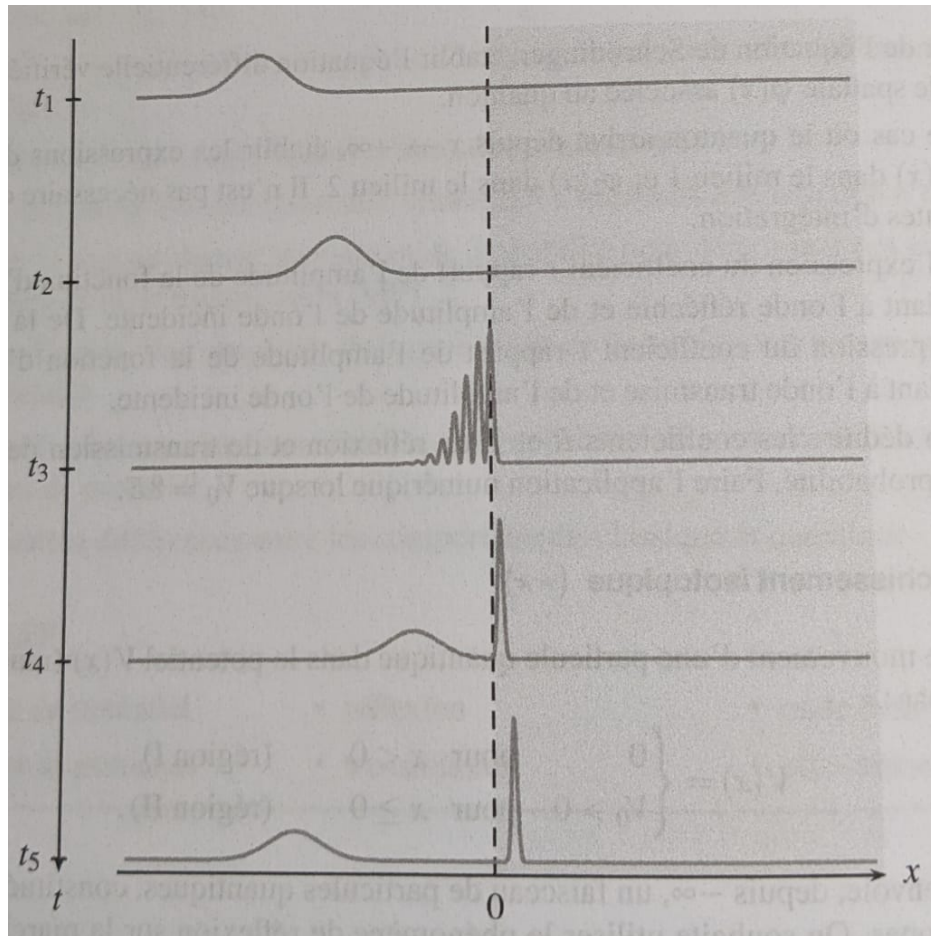
Donner les conditions de raccordement qui doivent être vérifiées en $x = \pm a/2$.

II - Marche de potentiel

3 Réflexion sur une marche de potentiel

On étudie le mouvement d'une particule quantique rencontrant une marche de potentiel de hauteur V_0 en $x = 0$. La particule est décrite par un paquet d'ondes d'énergies voisines de E avec $E > V_0$. La figure ci-dessous représente l'évolution dans l'espace et dans le temps de ce paquet d'ondes. Le temps s'écoule du haut vers le bas de la figure.

Commenter aussi précisément que possible ces graphes.



4 Falaise de potentiel

On étudie l'évolution d'une particule de masse m , avec une énergie $E > 0$, qui aborde une falaise de potentiel de hauteur V_0 constante située en $x = 0$, ainsi :

$$V(x) = 0 \quad \text{pour} \quad x < 0 \quad (2)$$

$$V(x) = -V_0 \quad \text{pour} \quad x > 0 \quad (3)$$

1. A partir de l'équation de Schrödinger, établir l'équation différentielle vérifiée par la fonction d'onde spatiale $\varphi(x)$.
2. Dans le cas où la particule arrive depuis $x \rightarrow -\infty$, établir les expressions de la fonction d'onde $\varphi_1(x)$ dans le milieu 1 et $\varphi_2(x)$ dans le milieu 2. Il n'est pas nécessaire de déterminer les constantes d'intégration.
3. Établir l'expression des coefficients de réflexion R et de transmission T de la densité de courant de probabilité. Faire l'application numérique lorsque $V_0 = 8E$ et commenter par rapport au cas classique.

5 Pénétration de neutrons dans un milieu magnétique

Le neutron, de masse M , possède un moment magnétique $\vec{\mu}$ de norme $\mu = 0.97 \cdot 10^{-26} \text{ J} \cdot \text{T}^{-1}$.

Un faisceau monochromatique de neutrons d'énergie $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2M}$ ($k > 0$), émis par une source située en $x = -\infty$, est incident sur un milieu magnétique situé dans la région $x > 0$. Dans ce milieu existe un champ $\vec{B} = B\vec{e}_z$ constant et uniforme. En plus de l'interaction magnétique $V_{\text{mag}} = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$, chaque neutron y possède une énergie potentielle positive constante V_0 . V_0 correspond ainsi à l'énergie nécessaire aux neutrons pour pénétrer dans le milieu en l'absence de champ magnétique.

On suppose que l'énergie du faisceau incident est ajustée de sorte à ce que les inégalités suivantes soient satisfaites :

$$-\frac{2M\mu B}{\hbar} < k^2 - k_0^2 < \frac{2M\mu B}{\hbar} \quad (4)$$

avec $k_0 = \frac{\sqrt{2MV_0}}{\hbar}$.

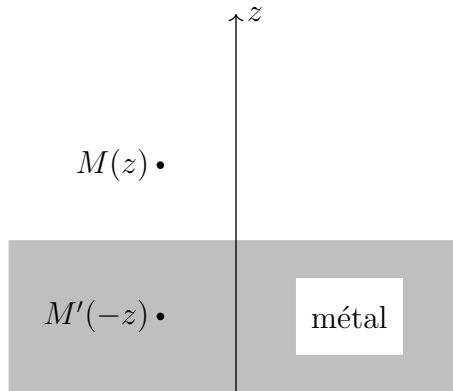
La mécanique quantique impose que le moment magnétique des neutrons ne peut être orienté que selon deux directions : selon $+\vec{e}_z$ pour la moitié d'entre eux, et selon $-\vec{e}_z$ pour l'autre moitié.

1. On note $V_+(x)$ le potentiel des neutrons dont le moment magnétique est orienté selon $+\vec{e}_z$ et $V_-(x)$ celui des neutrons dont le moment magnétique est orienté selon $-\vec{e}_z$ (le même type de notation est utilisé pour toutes les autres quantités). Tracer l'allure de $V_{\pm}(x)$ en fonction de x .
2. Tracer qualitativement l'allure de $|\psi_{\pm}(x, t)|^2$ pour les neutrons dont le moment magnétique est orienté dans chaque sens.
3. En utilisant les résultats du cours, donner les coefficients de transmission $T_{\pm}$ pour les neutrons dont le moment magnétique est orienté dans chaque sens.

4. On pose $\omega_0 = 2V_0/\hbar$, $\Delta\omega = \frac{\hbar}{m}(k^2 - k_0^2)$ et $\omega_L = 2\mu B/\hbar$.
- Exprimer T_+ en fonction de ces trois quantités.
 - Tracer la variation de T_+ en fonction de B lorsque $E \geq V_0$. Combien vaut T_+ pour $\mu B > V_0$?
 - Montrer alors qu'un choix adapté de B permet de séparer parfaitement les deux faisceaux de neutrons.
 - Décrire brièvement la situation lorsque $E < V_0 - \mu B$.

6 Interaction entre un électron et un métal

On étudie l'interaction entre un électron de charge $-e$ placé en M de cote z et un métal conducteur parfait occupant le demi-espace $z < 0$.



- Quel est le champ électrique dans le conducteur ?
 - (difficile) Par un argument de symétrie, montrer que la force exercée par les charges à la surface du métal sur l'électron est équivalente à celle qu'exercerait une charge $+e$ placée en M' de cote $-z$.
 - Déterminer l'énergie potentielle E_p de l'électron. Est-elle attractive ou répulsive ? Expliquer pourquoi.
- On rappelle l'équation de Schrödinger vérifiée par la fonction d'onde $\psi(z, t)$.

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + V\psi \quad (5)$$

- On cherche la fonction d'onde sous la forme $\psi(z, t) = \phi(z)g(t)$. Préciser la forme de g .
- Quelle est l'équation vérifiée par la partie spatiale de la fonction d'onde ?

- (c) Vérifier qu'on peut trouver une solution de la forme $\phi(z) = c_1 z \exp(-k_1 z)$. Préciser les expressions de l'énergie E , de k_1 et de c_1 . Calculer numériquement E en électron-volt.
- (d) Quelle est la hauteur moyenne de la particule dans cet état ? Faire l'application numérique.

On donne $\int_0^\infty u^n \exp(-u) du = n!$ pour tout entier naturel n .

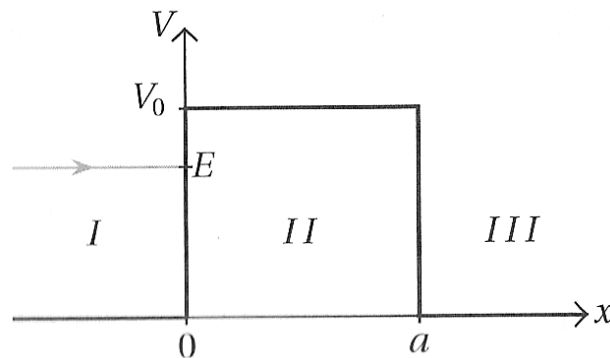
Données :

- $e = 1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$;
- $\hbar = 1.05 \times 10^{-32} \text{ J s}$;
- $\epsilon_0 = 8.85 \times 10^{-12} \text{ F m}^{-1}$;
- $m = 9.1 \times 10^{-31} \text{ kg}$.

III - Effet tunnel

7 Microscope à effet tunnel

Une particule quantique est envoyée avec une énergie $E < V_0$ sur la barrière de potentiel représentée sur la figure suivante.



1. Que se passe-t-il en mécanique classique? Citer deux phénomènes quantiques pouvant être modélisés par ce type de potentiel.
2. On donne l'équation de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V(x)\Psi \quad (6)$$

et on cherche la fonction d'onde Ψ sous la forme $\Psi(x, t) = \varphi(x)e^{-iEt/\hbar}$. Donner l'équation vérifiée par φ .

- Donner la forme de φ dans chacun des 3 domaines I, II et III . Montrer que, parmi les 6 constantes d'intégration qui apparaissent, l'une est nulle. Quelles sont les conditions aux limites en $x = 0$ et $x = a$?
- On rappelle l'expression du vecteur densité de probabilité $\vec{J} = |\Psi|^2 \frac{\hbar}{2m} \vec{k}$. Définir le coefficient de transmission de la barrière. Donner la démarche permettant de montrer que

$$T = \frac{4E(V_0 - E)}{4E(V_0 - E) + V_0^2 (\sinh(Ka))^2} \quad \text{avec} \quad K = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \quad (7)$$

- On considère la pointe du microscope à effet tunnel positionnée à une distance $a = 0,1 \text{ nm}$ de la surface à observer. Le travail d'extraction du métal de l'échantillon est $V_0 = 6 \text{ eV}$. Une différence de potentiel de 1 V est appliquée entre le métal et la pointe de telle sorte que les électrons du métal possèdent une énergie $E = 1 \text{ eV}$. La masse des électrons est $m = 9 \times 10^{-31} \text{ kg}$.

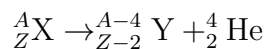
(a) Montrer que dans le cas où $Ka \gg 1$, le coefficient de transmission peut s'écrire:

$$T \approx 16E \frac{(V_0 - E)}{V_0^2} \exp(-2Ka) \quad (8)$$

- (b) À la distance $a = 0.1 \text{ nm}$ de l'échantillon, le courant tunnel est de l'ordre de 1 nA . Proposer une modélisation permettant d'estimer le courant tunnel depuis un atome voisin, puis justifier qu'un microscope à effet tunnel a une résolution permettant d'observer les atomes du métal.

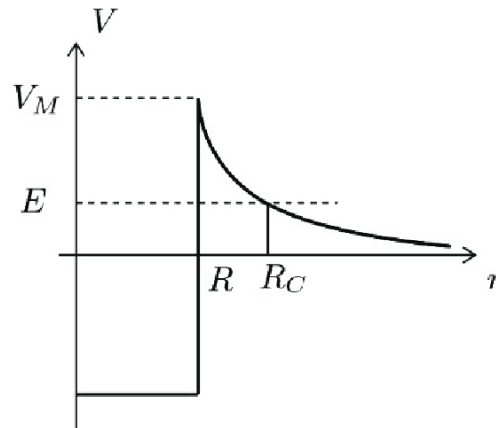
8 Radioactivité α

La radioactivité α est l'émission par un noyau ${}^A_Z X$ d'un noyau d'hélium ${}^4_2 \text{He}$ ou particule α :



Dans une théorie élémentaire de la radioactivité α proposée par Gamow en 1928, on considère que la particule α préexiste dans le noyau X , considéré comme résultant de la réunion du noyau Y et de la particule α . La loi d'interaction entre ces deux particules est définie par leur énergie potentielle $V(r)$ représentée en fonction de leur distance r . Si r est supérieur à une limite $R = r_0 A^{1/3}$ (pratiquement égal au rayon du noyau Y , car la particule α est quasi ponctuelle), l'énergie potentielle V est due à la seule répulsion électrostatique entre les $Z - 2$ protons de Y et les 2 protons de He .

$$V(r) = 2 \frac{(Z - 2)e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (9)$$



Pour $r < R$, les interactions nucléaires attractives interviennent; on peut les schématiser par un puits de potentiel très profond:

On donne: $r_0 = 1.2 \times 10^{-15} \text{ m}$; L'énergie de la particule α est $E = 4.78 \text{ MeV}$. Le coefficient de transmission peut se mettre sous la forme approchée:

$$\ln T \approx -2 \int_{R_A}^{R_C} \sqrt{\frac{2m_\alpha(V(r) - E)}{\hbar^2}} dr \approx -\frac{341}{\sqrt{E(\text{en MeV})}} + 74,8 \quad (10)$$

1. On considère un atome X de radium $^{226}_{88}\text{Ra}$. Calculer R et R_C .
2. Expliquer pourquoi l'émission α ne peut se faire que par effet tunnel.
3. On considère que la particule α de vitesse v rebondit un certain nombre de fois sur la paroi. À chaque collision avec la paroi située en $r = R$, la probabilité pour que la particule franchisse la barrière est T . On appelle t_0 le temps mis entre deux collisions. Calculer t_0 .
4. Établir l'expression de la probabilité $\mathbb{P}(t)$ que la particule ne soit pas sortie du noyau à l'instant t , en supposant que $T \ll 1$. En déduire le temps de demi vie τ du noyau avant désintégration.
5. L'énergie E des particules α peut varier entre 4 et 9 MeV pour les différents émetteurs α . Montrer avec le modèle précédent que t_0 est presque le même pour tous les émetteurs α . En déduire une formule approchée numérique de $\ln(\tau/t_0)$ en fonction de E exprimé en MeV.

9 Molécule d'ammoniac (difficile)

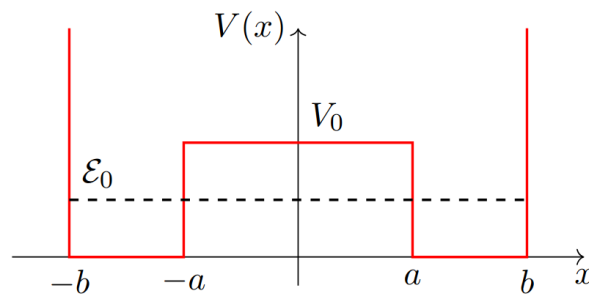
On étudie l'un des nombreux degrés de liberté de la molécule d'ammoniac. L'atome d'azote a la possibilité de se déplacer par rapport au plan des atomes d'hydrogène, sur l'axe du triangle équilatéral et en particulier d'osciller d'un côté à l'autre. Au cours d'un mouvement

de ce type, le centre de masse reste fixe et le triangle des atomes d'hydrogène se déforme en se déplaçant en même temps que l'atome d'azote.

On modélise ce problème par le mouvement d'une particule dans un ensemble de deux puits de potentiel à une dimension, correspondant aux deux états d'équilibre possibles de la molécule, et séparés par une barrière de potentiel:

$$\begin{cases} V = \infty & \text{si } |x| > b \\ V = V_0 & \text{si } |x| < a \\ V = 0 & \text{si } a < |x| < b \end{cases} \quad (11)$$

On considère une particule d'énergie E_0 telle que $0 < E_0 < V_0$.



On rappelle que pour un état stationnaire d'énergie E_0 : $\Psi(x, t) = \Phi(x)e^{-\frac{iE_0 t}{\hbar}}$.

1. Justifier, à partir des symétries du potentiel, que les solutions de l'équation de Schrödinger sont soit paires (symétriques), soit impaires (anti-symétriques).

Dans les puits gauche (resp. droit), on note la fonction d'onde sous la forme $\Phi_g(x) = \alpha_g \sin(kx + \varphi_g)$ (resp. $\Phi_d(x) = \alpha_d \sin(kx + \varphi_d)$).

2. Donner l'expression de k .
3. Quelle est la valeur de φ pour respecter les conditions aux limites en $x = \pm b$? Quelle sont les relations entre α_g et α_d dans les cas des solutions paires et impaires ?
4. On se restreint à l'étude d'une solution paire, montrer que les contraintes conduisent à

$$k \coth(Ka) = -k \tan(K(b-a)) \quad (12)$$

où K est à déterminer.

5. On se restreint à l'étude d'une solution impaire, montrer que les contraintes conduisent à

$$k \tanh(Ka) = -k \tan(K(b-a)) \quad (13)$$

6. Dans le cas d'une barrière infinie $V_0 = +\infty$, que peut-on dire de l'énergie des niveaux symétriques et anti-symétriques ? Quelles sont les valeurs du nombre d'onde k ? Représenter les états possibles pour l'énergie minimale.
7. Prenons maintenant $V_0 \gg E_0$ mais non infini. Montrer graphiquement que les états de même énergie de la barrière infinie se séparent en états d'énergie distincte E_+ et E_- . Tracer l'allure des fonctions d'onde de ces deux états.
8. Dans le maser à ammoniac (ancêtre du laser), on utilise une transition entre deux niveaux résultant du dédoublement de son état fondamental avec émission de photons de fréquence $\nu = 23\,870$ MHz. Calculer ΔE et la longueur d'onde des photons. Dans quel domaine spectral ce maser émet-il ?

IV - Puits quantique

10 Puits fini

Soit une particule de masse m provenant de $-\infty$ avec une énergie $E > 0$. Elle est soumise au potentiel $V(x)$ suivant avec $V_0 > 0$:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{pour } x < 0 \\ -V_0 & \text{pour } x \in]0, d[\\ 0 & \text{pour } x > d \end{cases} \quad (14)$$

1. Décrire le comportement d'une particule dite "classique" à travers ce puits de potentiel sachant qu'elle part vers les x croissants.

Dans la suite, on s'intéresse au cas d'une particule quantique.

On pose $\hbar q = \sqrt{2m(E + V_0)}$. On donne alors la fonction d'onde en dehors du puits :

$$\Psi(x < 0, t) = (e^{ikx} + r e^{-ikx}) e^{-iEt/\hbar} \quad (15)$$

$$\Psi(x > d, t) = \tau e^{ikx} e^{-iEt/\hbar} \quad (16)$$

On admet que r et τ sont des réels.

On rappelle l'équation de Schrödinger indépendante du temps :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \phi(x) + V(x) \phi(x) = E \phi(x) \quad (17)$$

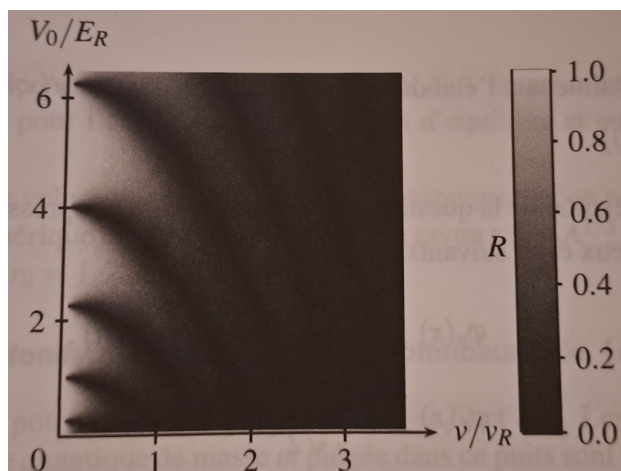
2. Commenter les expressions de $\Psi(x, t)$ données ci-dessus, et donner l'expression de k .
3. Déterminer la forme générale de $\Psi(x \in]0, d[, t)$.

4. Donner les relations de raccordement pour $\Psi(x, t)$.
5. Quelle relation lie $|r|^2$ et $|\tau|^2$?
6. Dans le cas où $E \rightarrow 0$, donner les expressions de r et τ .

La figure suivante représente la probabilité de réflexion R en fonction de la vitesse ν de la particule et de la profondeur V_0 du puits de potentiel. L'échelle spatiale caractéristique d permet de construire deux grandeurs $\nu_R = h/md$, homogène à une vitesse, et $E_R = m\nu_R^2/2$, homogène à une énergie, qui permettent d'utiliser des variables sans dimensions ν/ν_R et V_0/E_R .

La couleur blanche correspond à une réflexion totale ($R = 1$) et la couleur noire correspond à une transmission totale ($T = 1$).

7. Commenter le comportement à faible vitesse et à grande vitesse.
8. On considère un faisceau incident de particules, dont les vitesses se distribuent entre $0,2\nu_R$ et $0,8\nu_R$, avec une vitesse moyenne $\nu = \nu_R/2$. La profondeur du puits est ajustée à $V_0 = 2E_R$. Décrire la distribution des vitesses des particules transmises.
9. Comment peut-on choisir la profondeur du puits de potentiel pour réaliser un filtre passe-bas avec la même distribution initiale des vitesses ?
10. Ces filtres sélectifs de vitesse ont été développés par l'équipe D. Guéry-Odelin, à l'université Paul Sabatier de Toulouse. Ce sont des atomes de rubidium qui sont utilisés, de masse $m = 1.45 \times 10^{-25}$ kg, sur un réseau de puits de potentiel de largeur $d = 660$ nm. Donner la valeur numérique de ν_R , de E_R et de $T_R = E_R/k_B$, avec $k_B = 1.38 \times 10^{-23}$ J K⁻¹ la constante de Boltzmann.



11 Puits de Yukawa

La cohésion d'un noyau atomique est assurée par l'interaction nucléaire forte. En 1930, Hideki Yukawa proposa de modéliser cette interaction entre un proton et un neutron par un potentiel $V_Y(x)$ dont l'allure est fournie figure suivante.

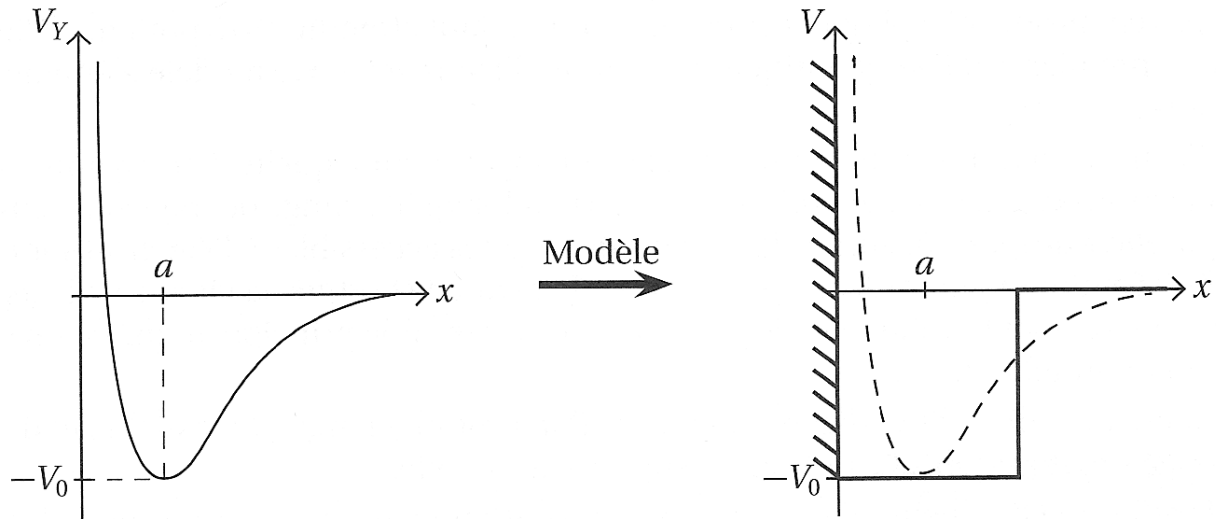


Figure 1: Potentiel de Yukawa $V_Y(x)$ ainsi que la modélisation proposée sous forme de puits de potentiel semi-infini $V(x)$.

On s'intéresse aux états d'un proton de masse m_p dans un noyau de deutérium contenant un neutron et un proton. Le proton situé à une distance x du neutron ressent un potentiel de Yukawa $V_Y(x)$ créé par le neutron. Le potentiel de Yukawa est modélisé par un potentiel constant par morceaux $V(x)$ correspondant à un puits semi-infini défini par:

$$V(x) = \begin{cases} +\infty & \text{si } x < 0 \\ -V_0 & \text{si } 0 \leq x \leq 2a \\ 0 & \text{si } x > 2a \end{cases} \quad (18)$$

1. Quel est l'ordre de grandeur de a ?

On cherche des états liés stationnaires dans le puits semi-infini, c'est-à-dire possédant une énergie $-V_0 < E < 0$. On note $q = \sqrt{-2m_p E}/\hbar$ et $k = \sqrt{2m_p(V_0 + E)}/\hbar$.

2. Donner la forme générale des fonctions d'ondes spatiales dans les trois régions de l'espace.
3. En exploitant les conditions aux limites, montrer que l'équation de quantification sur k s'écrit:

$$\frac{k}{\tan(2ka)} = -q \quad (19)$$

4. À partir des expressions de q et k , trouver une seconde relation liant ces deux quantités. On note $k_0 = \sqrt{2m_p V_0}/\hbar$. En déduire une relation entre k et k_0 .
5. Déterminer graphiquement les valeurs de k correspondant aux états stationnaires dans le puits de potentiel semi-infini. Donner une condition sur V_0 pour qu'un moins un état lié puisse exister dans le puits de potentiel.