

TD MQ2 – Exemples de résolution de l'équation de Schrödinger

Exercice 1* : Etats non stationnaires dans un puits infini

On étudie une particule quantique de masse m dans un puits rectangulaire infini entre $x=0$ et $x=L$.

- 1) On considère les états stationnaires d'énergie E_n associés aux fonctions d'onde spatiales : $\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$
 - a. Etablir les valeurs des énergies E_n associées.
 - b. Représenter les densités de probabilités de présence des deux niveaux de plus basse énergie.
- 2) On suppose qu'à $t=0$, la particule est dans l'état initial : $\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_1(x) + \varphi_2(x)]$
 - a. Exprimer la fonction d'onde $\Psi(x, t)$ à un instant ultérieur et la densité de probabilité de présence associée.
 - b. Exprimer la période d'évolution de la densité de probabilité de présence au cours du temps en fonction de m , L et \hbar .

Exercice 2*** : Puits rectangulaire fini

Une particule de masse m est placée dans un puits de potentiel infini : $V(x)=0$ pour $-a < x < a$, la zone extérieure étant inaccessible ($V(x)=+\infty$).

- 1) Retrouver le plus simplement possible les niveaux d'énergie des états stationnaires.

Le puits de potentiel est maintenant modélisé de manière moins sommaire : l'énergie potentielle est toujours nulle sur $[-a, a]$ mais vaut $V(x) = V_0 > 0$ en dehors.

- 2) On s'intéresse aux états liés. Quelles sont les valeurs limites possibles de l'énergie ?

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

- 3) Ecrire l'équation de Schrödinger indépendante du temps dans les différentes zones.

- 4) Combien de constantes interviennent dans les amplitudes ? Lesquelles peut-on déjà éliminer ?

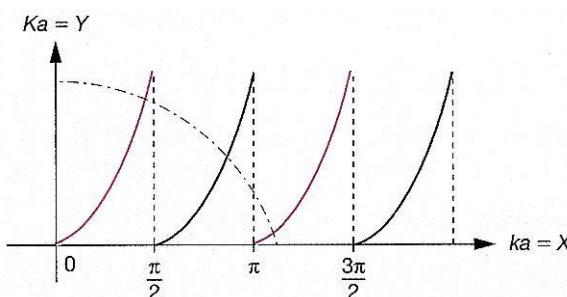
- 5) Quelles sont les différentes conditions aux limites utilisables ?

- 6) La parité du potentiel $V(x)$ permet d'affirmer que les fonctions d'onde des états stationnaires sont soit paires soit impaires. Déduire des conditions aux limites les relations :

$$k.a \tan(k.a) = K.a \quad \text{ou} \quad k.a \cotan(k.a) = -K.a$$

- 7) Etablir à partir des expressions de k et K la relation : $(k.a)^2 + (K.a)^2 = \frac{2ma^2V_0}{\hbar^2}$

- 8) Interpréter graphiquement les solutions dans le plan de coordonnées (ka, Ka) à l'aide de la figure ci-dessous :



- 9) Existe-t-il toujours des états liés ? A quelle condition existe-t-il un seul état lié ?

- 10) Dans le cas où le puits devient très profond, retrouver les énergies du 1).

Exercice 3** : Enrichissement isotopique

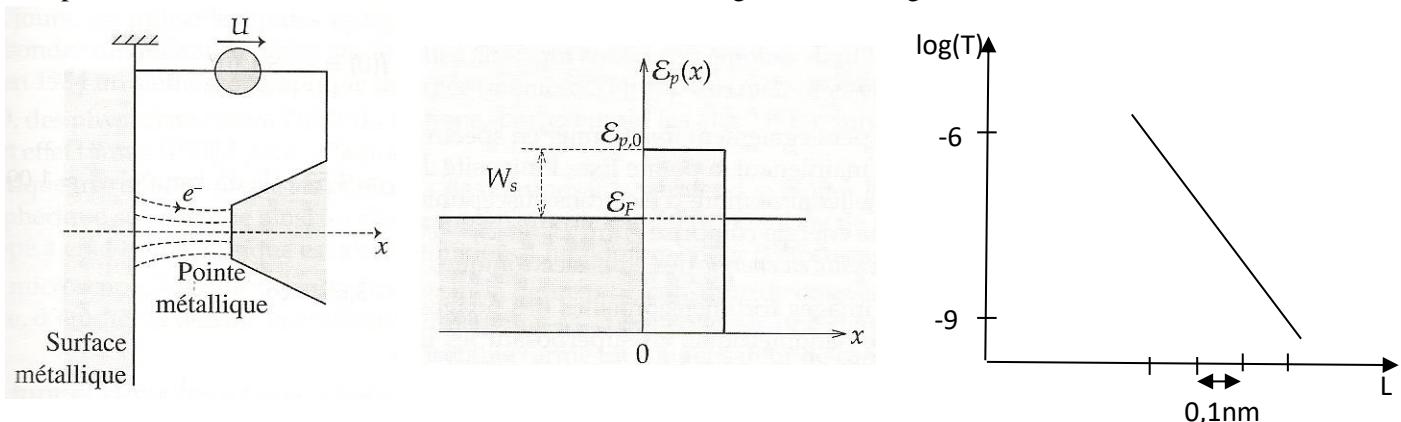
Une source envoie (depuis $x=-\infty$) un faisceau de particules quantiques constitué d'un mélange d'isotopes sur une marche de potentiel : $V(x)=0$ si $x<0$ (région I) et $V(x)=V_0$ si $x>0$ (région II). On souhaite utiliser le phénomène de réflexion sur la marche de potentiel pour modifier la composition isotopique du mélange.

- 1) Rappeler les différences de comportement d'une particule classique et d'une particule quantique dans les cas $E > V_0$ et $E < V_0$. Expliquer pourquoi il est nécessaire que l'énergie E des particules quantiques soit supérieure à la hauteur de la marche de potentiel V_0 si on veut modifier la composition isotopique du mélange.
- 2) Déterminer la probabilité de réflexion R d'une particule quantique de masse m et d'énergie E par la marche de potentiel pour $E > V_0$.
- 3) On se place dans le cas limite où $E \gg V_0$
 - a) Montrer que l'expression approchée de R pour $E \gg V_0$ peut se mettre sous la forme $R \approx k \frac{V_0^2}{E^2}$ où k est une constante que l'on déterminera.
 - b) On note m_1 et m_2 les masses des deux isotopes qui forment le faisceau incident. Toutes les particules sont envoyées avec la même vitesse. Expliquer pourquoi le coefficient de réflexion diffère pour les deux isotopes et exprimer le rapport R_2/R_1 en fonction du rapport des masses m_2/m_1 .
 - c) Le faisceau réfléchi est-il enrichi en isotope le plus lourd ou le plus léger ?

Exercice 4** : Coefficient d'atténuation du courant dans un microscope à effet tunnel

Le microscope à effet tunnel est constitué d'une pointe métallique en tungstène qu'on approche d'une surface métallique dont on veut étudier la structure. Entre les deux métaux, on maintient, dans un vide poussé, une différence de potentiel U . La distance entre les deux électrodes, de l'ordre du nanomètre, est contrôlée par un système d'asservissement piézoélectrique. Un microampèremètre, placé dans le circuit extérieur, révèle l'existence d'un courant électrique I que l'on attribue au passage d'électrons d'une électrode à l'autre dans le vide par effet tunnel.

Les électrons de conduction dans un métal ont une énergie cinétique maximale égale à l'énergie de Fermi \mathcal{E}_F et pour extraire un électron du métal il faut fournir une énergie minimale égale au travail de sortie W_s .



- 1) L'intensité du courant, exprimée en fonction de la distance L entre la pointe et la surface du métal, peut se mettre sous la forme : $I(L) = I(0)\exp(-\mu L)$.

Donner la signification du coefficient μ et son expression en fonction de la masse de l'électron m_e , W_s et h .

- 2) La figure de droite donne les résultats expérimentaux obtenus par Binnig et Rohrer avec $T = I(L)/I(0)$. En déduire les valeurs de μ et du travail de sortie W_s en eV.

Données : masse de l'électron $m_e = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$

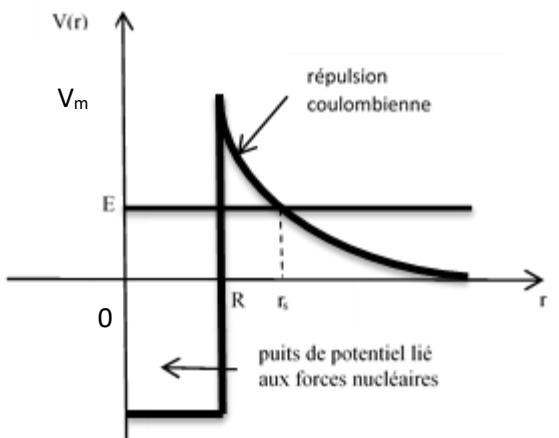
Exercice 5*** : Effet tunnel et radioactivité alpha

L'isotope radioactif $^{212}_{83}Bi$ du bismuth se désintègre en l'isotope $^{208}_{81}Tl$ du thallium en émettant une particule α (noyau de $^{4}_{2}He$) d'énergie $E = 13,0 \text{ MeV}$. On donne la masse du proton $m_p = 1,7 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$.

Pour expliquer cette radioactivité alpha, on propose un modèle théorique basé sur l'effet tunnel :

Il suppose que préexiste au sein du noyau de l'élément radioactif (noyau père) constituant la source au moins une particule α et que celle-ci peut s'échapper par effet tunnel à travers une barrière de potentiel. Tant que la particule α est à l'intérieur du noyau père, elle est virtuellement libre mais tend à être confinée dans le puits de potentiel formé par l'interaction nucléaire. Une fois en dehors du noyau, elle subit uniquement la force de répulsion coulombienne de la part du noyau fils.

La figure ci-contre précise le diagramme d'énergie potentielle associé à la particule α en fonction de sa distance r au centre du noyau.



- 1) Déterminer la distance r_0 entre le noyau de thallium et la particule α , pour laquelle l'énergie E (de la particule α) est égale à l'énergie potentielle électrostatique. Evaluer numériquement cette distance.
- 2) Le rayon R d'un noyau de nombre de masse A est donné par la formule $R = R_0 A^{1/3}$ avec $R_0 = 1,2 \text{ fm}$. (1 fm = 10^{-15} m) Déterminer la valeur de R pour $^{208}_{81}Tl$. En déduire la valeur V_m du maximum de potentiel dans lequel évolue la particule α à l'extérieur du noyau.

On rappelle que, pour une barrière épaisse, l'expression approchée du facteur de transmission tunnel T dans le cas d'une barrière rectangulaire de hauteur V_0 et de largeur a , pour une particule de masse m et d'énergie E , est :

$$T \approx 16 \frac{E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0}\right) \exp \left[-\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)} \right]$$

- 3) En choisissant comme valeur approchée de la barrière $V_0 = \frac{V_m}{2}$, évaluer la valeur numérique du coefficient de transmission T .
- 4) Exprimer le temps d'un aller-retour dans le puits de potentiel, en déduire le nombre de collisions sur la barrière par unité de temps puis la probabilité d'émission d'une particule alpha par unité de temps.
- 5) En déduire un ordre de grandeur de la demi-vie τ de l'isotope radioactif du bismuth.

$$Ex 5 : 1) r_0 = \frac{4\pi e_0 E}{2(z-2)^2} = 18 \text{ fm} \quad 2) R = 7,1 \text{ fm} ; \quad V_m = \frac{4\pi e_0 R}{2(z-2)^2} = 33 \text{ MeV} \quad 3) a = r_0 - R \quad m = 4m_{\text{proton}} \quad T \approx 3 \cdot 10^{-23}$$

$$2) u = \ln(10) \frac{\Delta V}{\Delta \log(T)} = 2,3 \cdot 10^{10} \text{ m}^{-1} \quad W_s = 5,0 \text{ eV}$$

Ex 4 : 1) $I(T) = T(L)I(0)$ où T est le coefficient de transmission de la barrière $T(L) \propto e^{-2L/a}$ avec a la distance caractéristique d'atténuation dans la barrière. Par l'équation de Schrödinger dans la barrière $\frac{d}{dx} \left(\frac{p^2}{2m} + \frac{V_m}{2} \right) \psi = 0$ où $u = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$

$$Ex 3 : 1) Si $E < V$ toutes les particules sont réfléchies par la barrière. Plus une particule est lourde, plus son comportement est classique, moins elle est réfléchie donc plus grande est sa probabilité de traverser la barrière.$$

$$Ex 2 : 1) E_n = \frac{8\pi m a^2}{n^2 \pi^2 \hbar^2} \quad 2) E_{m,n} < E < V_0 \text{ avec } E_{m,n} = \frac{32\pi m a^2}{n^2} \quad 4) \text{ Eliminer } 2 \text{ des 6 constantes par les limites cercle - courbes} \quad 9) \text{ Un seul état si rayon cercle} < a/2 \text{ ou } V_0 < \frac{8\pi m a^2}{n^2 \hbar^2} \quad 10) \text{ Si } V_0 \rightarrow +\infty, X \approx n^{\frac{2}{3}}$$

$$Ex 1 : 1) a) E_n = \frac{2\pi m a^2}{n^2 \hbar^2} \quad 2) |\psi_n|^2 = \frac{1}{\pi} \left[|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + 2\psi_1 \psi_2 \cos \left(\frac{4\pi n}{\lambda} \right) \right] \quad b) T = \frac{3\hbar}{8\pi m a^2}$$

Réponses :