

## TDMQ2 – Mécanique ondulatoire de Schrödinger

### 0 Exercices classiques vus en cours :

**A.3** : Etats stationnaires – Equation de Schrödinger indépendante du temps

**B.1** : Particule libre – Ondes de De Broglie – Relation de dispersion

**C.1.b-c** : Marche de potentiel : cas  $E > V_0$  (réflexion / transmission) et cas  $0 < E < V_0$  (onde évanescente)

**C.2** : Barrière de potentiel – Effet tunnel (cas  $0 < E < V_0$ ) : nature des ondes – cas barrière épaisse

**C.3.c-d-e** : Puits de potentiel infini : fonctions d'onde propres - quantification de l'énergie - analogies - énergie de confinement

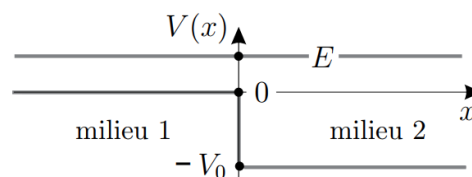
**D** : Etat non stationnaire : densité de probabilité de présence de la superposition de 2 états stationnaires

### Donnée pour l'ensemble des exercices :

Constante de Planck  $h = 6,63 \cdot 10^{-34} \text{J} \cdot \text{s}$

### 1 Falaise d'énergie potentielle (D'après CCMP MP 2017)

On étudie l'évolution d'un quanton de masse  $m$  qui aborde, avec une énergie  $E > 0$ , une falaise de potentiel de hauteur  $V_0$  constante située en  $x = 0$ , voir le schéma ci-contre. L'étude est unidimensionnelle conduite sur un axe  $Ox$ .



□ **25** — À partir de l'équation de SCHRÖDINGER, établir l'équation différentielle vérifiée par la fonction d'onde spatiale  $\varphi(x)$  associée au quanton.

□ **26** — Dans le cas où le quanton 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.

□ **27** — Établir l'expression du coefficient  $r$  rapport de l'amplitude de la fonction d'onde spatiale correspondant à l'onde réfléchiée et de l'amplitude de l'onde incidente. De la même façon, établir l'expression du coefficient  $t$  rapport de l'amplitude de la fonction d'onde spatiale correspondant à l'onde transmise et de l'amplitude de l'onde incidente.

□ **28** — En déduire les coefficients  $R$  et  $T$  de réflexion et de transmission de la densité de courant de probabilité. Faire l'application numérique lorsque  $8E = V_0$ .

### 2 Oscillateur harmonique quantique (cf CCMP MP 2017)

On considère une particule quantique, de masse  $m$ , soumise à une énergie potentielle de la forme  $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$ . Dans un état stationnaire d'énergie  $E$ , on écrit la fonction d'onde

sous la forme :  $\psi(x,t) = \varphi(x) \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right)$ .

1. Écrire l'équation de Schrödinger indépendante du temps dans le cas considéré.

2. Pour l'état fondamental, on a  $\varphi(x) = \mathcal{N} \exp\left(-\frac{x^2}{a^2}\right)$ .

a. Déterminer la constante de normalisation  $\mathcal{N}$ .

b. Représenter l'allure de la densité de probabilité de présence de la particule. En déduire, sans calcul, la valeur de la position moyenne  $\langle x \rangle$  de la particule.

c. Déterminer l'expression de l'énergie  $E$  et de  $a$  en fonction de  $\hbar$ ,  $m$  et de  $\omega$ .

On donne :  $\int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-\alpha u^2) du = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$ .

### 3 Puits de potentiel infini GaAlAs – GaAs – GaAlAs (cf CCINP MP 2021)

On sait réaliser des puits quantiques constitués de couches de semi-conducteurs, on parle d'hétérostructure : par exemple une couche de GaAs (arséniure de gallium) en « sandwich » entre deux couches de GaAlAs (arséniure de gallium-aluminium). Le puits de potentiel correspond à la couche centrale de quelques nanomètres de largeur et on l'assimile à un puits de potentiel infini de largeur  $L = 3 \text{ nm}$ .

On admet que les électrons à l'intérieur du puits ont une masse effective  $m_e^* = 0,067 \cdot m_e$ , à la place de leur vraie masse  $m_e$ , pour tenir compte du fait qu'ils sont à l'intérieur du semi-conducteur GaAs.

1. Montrer que l'énergie d'un électron à l'intérieur du puits est quantifiée sous la forme :  $E_n = n^2 \cdot \frac{h^2}{8m_e^*L^2}$ .
2. Calculer la fréquence minimale  $\nu_0$  qui peut être émise lors de la transition d'un électron entre deux niveaux d'énergie pour une telle structure. Commenter.

### 4 Puits rectangulaire de hauteur finie

Un quanton est placé dans un puits de potentiel compris entre  $x = -a$  et  $x = a$  de potentiel nul alors qu'en dehors de cet intervalle le potentiel est  $V_0 > 0$ . On s'intéresse aux états liés tels que  $E < V_0$  où  $E$  est l'énergie

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

1. Dans le cas où  $V_0 \rightarrow \infty$ , retrouver le plus simplement possible les niveaux d'énergie des états stationnaires. Idem ex 3 !
2. Quelles équations différentielles sont vérifiées par la fonction d'onde indépendante du temps  $\varphi(x)$  ?
3. Quelles sont les solutions de ces équations différentielles ?
4. Quelles sont les différentes conditions aux limites ?
5. Au vu de la forme du potentiel, on admet que les fonctions d'onde des états stationnaires sont soit paires, soit impaires. En déduire les relations  $\tan(ka) = \frac{\mu}{k}$  et  $\cotan(ka) = -\frac{\mu}{k}$ .
6. En utilisant les expressions de  $k$  et  $\mu$ , montrer que les équations précédentes sont équivalentes aux systèmes d'équations suivants :

Pour les fonctions d'onde paires :

$$\begin{cases} |\cos(x)| = \beta x \\ \tan(x) \geq 0 \end{cases}$$

Pour les fonctions d'onde impaires :

$$\begin{cases} |\sin(x)| = \beta x \\ \tan(x) \leq 0 \end{cases}$$

$$\text{avec } x = ka \text{ et } \beta = \frac{\mu}{a\sqrt{2mV_0}}$$

7. En utilisant une méthode graphique :
  - montrer que le nombre d'onde angulaire  $k$  est quantifié et donc que l'énergie du quanton est quantifiée.
  - montrer qu'il y a d'autant plus de niveaux d'énergie différents que le puits est profond.
  - montrer que même pour des valeurs très faibles de  $V_0$ , il existe toujours au moins un état lié correspondant à une fonction d'onde dont on précisera la parité. Plus précisément, montrer que si  $V_0$  est inférieur ou égal à un potentiel limite  $V_{lim}$ , il n'existe qu'un état lié. Déterminer l'expression de  $V_{lim}$ .
8. Dans le cas où le puits devient très profond, retrouver les solutions du puits infini.

## 5 Atome d'Hydrogène

Dans l'état fondamental, un électron en orbite autour d'un proton fixe en  $O$  est décrit par la fonction d'onde à symétrie sphérique  $\psi(r) = A \exp -\frac{r}{a}$ , où  $a$  et  $A$  sont des constantes positives.

1. Quel est au premier ordre en  $dr$ , le volume  $d\tau$  compris entre les rayons  $r$  et  $r + dr$  ?
2. En déduire la probabilité  $dP = f(r)dr$  que la position de l'électron soit mesurée entre  $r$  et  $r + dr$ .
3. Proposer une valeur de  $A$ .
4. Pour quelle valeur  $r_0$  de  $r$  la probabilité de trouver l'électron est-elle maximale (à  $dr$  près fixé) ?
5. Quelle est la valeur moyenne  $\langle r \rangle$  dans cet état ?
6. Quelle quantité physique représente  $a$  ?

On donne :  $\int_0^{\infty} x^n \exp(-\alpha x) dx = \frac{n!}{\alpha^{n+1}}$  pour  $\alpha > 0$ .

## 6 Courant tunnel

Un faisceau d'électrons, correspondant à une intensité  $I = 0,1 \text{ mA}$ , est envoyé sur une barrière de potentiel de largeur  $d = 1,0 \text{ nm}$  et de hauteur  $V_0 = 2 \text{ eV}$ . L'énergie cinétique d'un électron incident est  $E = 1,0 \text{ eV}$ .

1. Peut-on se placer dans l'approximation d'une barrière épaisse ?
2. Estimer l'intensité du courant tunnel qui émerge de l'autre côté de la barrière.
3. Toutes choses égales par ailleurs, on remplace les électrons par des protons. Déterminer la nouvelle valeur de l'intensité du courant tunnel qui émerge de l'autre côté de la barrière.

### Donnée :

Pour une barrière de potentiel « épaisse », le coefficient de transmission s'écrit :

$$T \approx \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-2\frac{d}{\delta}}$$

avec  $\delta$  la profondeur de pénétration dans la barrière

## 7 Microscope à effet tunnel (*Approche documentaire*)

Les microscopies à sonde locale, de développement récent, ont ouvert une nouvelle ère dans le domaine de la microscopie en raison de leur capacité à sonder diverses propriétés de la matière à l'échelle atomique. La microscopie à effet tunnel est la première de ces nouvelles techniques de microscopie à avoir été développée.

Le **microscope à effet tunnel** a été mis au point en 1984, dans les laboratoires IBM à Zürich, par G. Binnig et H. Rohrer, qui ont reçu le Prix Nobel de Physique en 1986. Dans ce microscope, pour explorer la surface d'un substrat conducteur, on approche une pointe métallique très fine à proximité de cette surface.

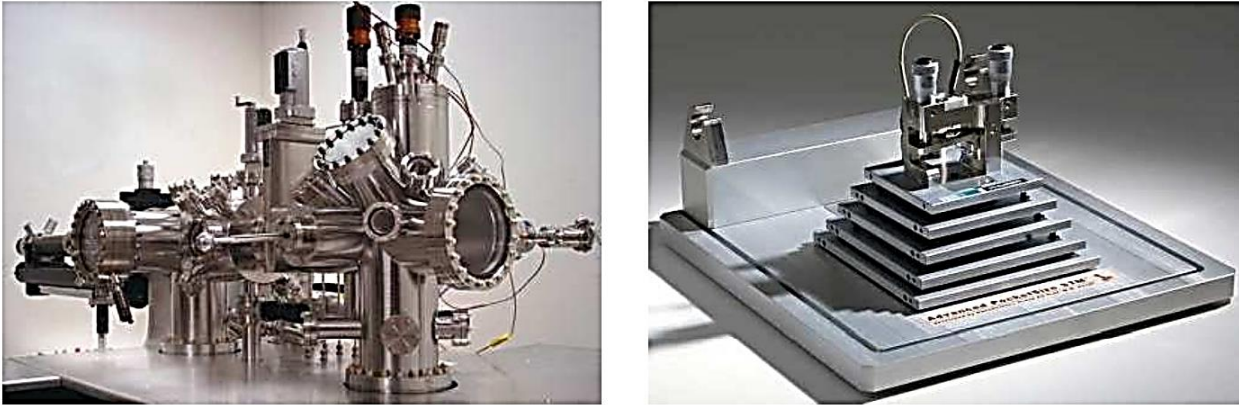


FIGURE 1 – Microscope à effet tunnel : grande taille à gauche - petite taille à droite

Principe :

Il consiste à approcher une pointe conductrice d'une surface également conductrice, voir la figure 2. Un électron de la surface ne peut sortir de celle-ci que s'il reçoit une énergie correspondant à ce que l'on appelle le travail d'extraction noté  $\Phi$ . Pour l'électron de la surface conductrice, tout se passe comme s'il se trouvait face à une marche de potentiel  $\Phi$ . En approchant une pointe métallique à une distance suffisamment faible de la surface et si on applique une différence de potentiel  $V_t$  entre cette pointe qui constitue l'anode et la surface qui est la cathode, alors la situation est modifiée : la marche de potentiel est transformée en une barrière de potentiel à travers laquelle les électrons peuvent transiter. L'intensité du courant tunnel est donnée par la formule :

$$I_t = A V_t \frac{k}{z} \exp -2kz \quad \text{avec} \quad k = \frac{\sqrt{2m_e\Phi}}{\hbar}$$

Dans cette formule,  $A$  est une constante de proportionnalité,  $z$  est la distance qui sépare la pointe métallique de la surface étudiée et  $m_e$  la masse de l'électron. Dans la formule précédente, on peut voir que le courant évolue rapidement avec  $z$  en raison de la forme exponentielle décroissante de la distance. Au contraire si l'on approche la pointe suffisamment près le courant tunnel sera élevé. Le potentiel d'extraction est couramment  $\Phi \simeq 4 \text{ eV}$ .

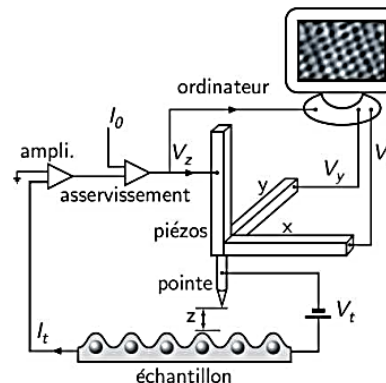
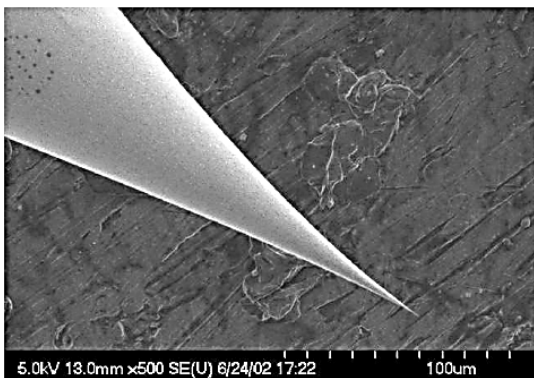


FIGURE 2 – Pointe du microscope à effet tunnel et schéma de fonctionnement

## Fonctionnement :

Le microscope à effet tunnel est utilisé dans deux modes de fonctionnement. Le plus courant est le mode à courant constant. La position verticale est asservie au maintien de la valeur de l'intensité tunnel  $I_t$  de l'ordre de 1 nA. On ajuste donc  $z$  en permanence pour tous les points de la surface étudiée. En enregistrant  $z(x, y)$ , on obtient une cartographie des densités électroniques de la surface. On peut aussi travailler à hauteur constante et mesurer l'évolution de l'intensité du courant qui sera, une fois encore, à l'image des densités électroniques. On utilise des céramiques piézoélectriques, on peut donc avoir une précision nettement inférieure au nanomètre.

Le microscope à effet tunnel est utilisé au niveau industriel à l'heure actuelle dans la réalisation des réseaux de diffraction, pour la fabrication des têtes de lecture magnétiques et même en biologie pour étudier des macromolécules et des virus. On utilise aussi le microscope à effet tunnel pour déplacer des atomes et construire des structures particulières comme celles que l'on peut voir à la figure 3.

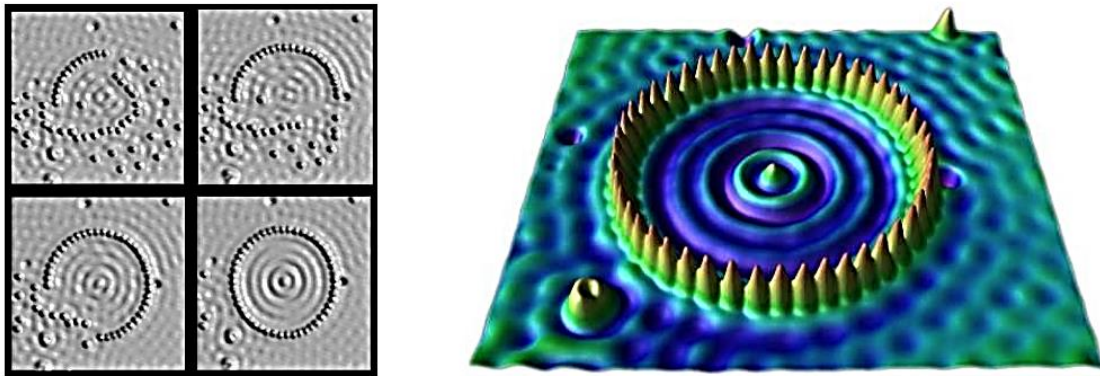
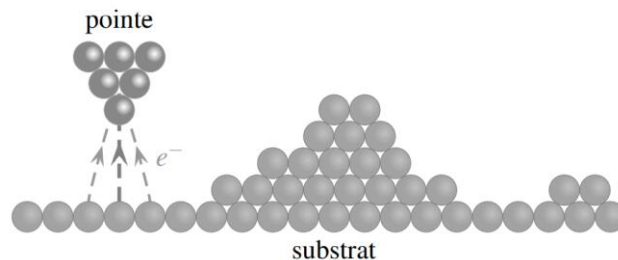


FIGURE 3 – Structures réalisées avec un microscope à effet tunnel

- 1) Expliquer pourquoi le microscope à effet tunnel fait partie des microscopes à sonde locale. Citer un autre exemple de microscope à sonde locale.
- 2) L'affinité électronique d'un semi-conducteur représente l'énergie à fournir à un électron de conduction pour l'extraire du semi-conducteur et le placer dans le vide. Par exemple, le carbure de silicium a une affinité électronique de 4,2 eV. Peut-on utiliser un microscope à effet tunnel sur un tel substrat ?
- 3) À quelle variation relative de l'intensité du courant tunnel correspond un déplacement de la pointe de l'ordre de  $10^{-11}$  m ? Commenter le résultat et expliquer pourquoi il est nécessaire de contrôler précisément la position verticale de la pointe.
- 4) Le mouvement de la pointe est contrôlé à l'aide de cristaux piézoélectriques. Qu'est-ce qu'un cristal piézoélectrique ?
- 5) Il existe deux modes de fonctionnement du microscope : balayage de la surface à courant constant ou à hauteur constante. Reproduire le schéma ci-dessous. Dans le mode à courant tunnel constant, représenter le déplacement vertical de la pointe lorsque la surface est balayée de gauche à droite. Quel inconvénient présente un balayage de la surface dans le mode à hauteur constante ?



- 6) La résolution latérale du microscope à effet tunnel est de l'ordre de la taille d'un atome. Est-il possible de distinguer des atomes individualisés grâce à un microscope optique ? Pourquoi ?

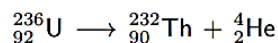
*Cf E3A MP 2016 : microscope à effet tunnel*

*Cf CCINP Ph-Ch MPI 2023 / CCS 2 MP 2019 : effet tunnel*

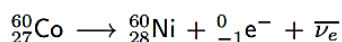
## 8 Radioactivité alpha (*Approche documentaire*) (cf CCS2 MP 2019 / CCMP PC 2016)

### Les différents types de radioactivité

Les noyaux des atomes sont constitués de  $Z$  protons et de  $N$  neutrons. Le nombre de masse est  $A = Z + N$ . Certains d'entre eux peuvent être l'objet d'un processus radioactif. Il existe trois types de radioactivité. La radioactivité  $\alpha$  au cours de laquelle un noyau d'atome se désintègre en émettant un noyau d'hélium  ${}^4_2\text{He} = \alpha$ . L'équation traduisant la désintégration radioactive est par exemple :



La désintégration  $\beta$  correspond soit à l'émission d'un électron et d'un antineutrino (radioactivité  $\beta^-$ ), soit à l'émission d'un positron - antiparticule correspondant à l'électron - et d'un neutrino. Le cobalt 60 présente une désintégration  $\beta^-$  au cours de laquelle correspond une conversion d'un neutron en proton dans le noyau. L'équation du processus est :



La désintégration  $\gamma$  correspond à la perte d'énergie du noyau qui passe d'un état d'énergie élevée (noyau excité) vers un niveau d'énergie plus faible. Cette perte d'énergie s'effectue par émission d'un photon de très courte longueur d'onde. Il s'agit d'un photon  $\gamma$ .

### Effet tunnel pour la radioactivité $\alpha$

L'étude porte plus particulièrement sur la radioactivité  $\alpha$ . Sur le plan expérimental, on constate que quasiment toutes les particules ont une énergie comprise entre 4 MeV et 10 MeV et que sur le plan de leur demi-vie<sup>1</sup> (ou période radioactive) il y a des écarts considérables puisque certaines demi-vies sont des fractions de secondes alors que d'autres sont de l'ordre de milliards d'années. Le tableau qui suit illustre cette situation, on peut constater qu'il y a des écarts considérables entre des isotopes qui paraissent pourtant très proches sur le plan de la constitution.

Noyau	Demi-vie $\tau_{1/2}$ (s)	$E$ (MeV)	Noyau	Demi-vie $\tau_{1/2}$ (s)	$E$ (MeV)
${}^{212}_{83}\text{Bi}$	$4,0 \times 10^4$	6,2	${}^{226}_{88}\text{Ra}$	$5,4 \times 10^{10}$	4,9
${}^{212}_{84}\text{Po}$	$3,0 \times 10^{-7}$	9,0	${}^{232}_{90}\text{Th}$	$4,4 \times 10^{17}$	4,0
${}^{215}_{85}\text{At}$	$1,0 \times 10^{-4}$	8,1	${}^{236}_{92}\text{U}$	$7,2 \times 10^{14}$	4,4
${}^{222}_{86}\text{Ra}$	$3,3 \times 10^5$	5,6	${}^{242}_{96}\text{Cm}$	$1,4 \times 10^7$	6,2

**Tableau 26.1** – Demi-vies  $\tau_{1/2}$  et énergie cinétique  $E$  de la particule  $\alpha$  émise pour différents noyaux radioactifs.

<sup>1</sup> La demi-vie est la durée au bout de laquelle la moitié des noyaux présents à une date donnée se sont désintégrés.

On constate que la période radioactive est liée à l'énergie des particules  $\alpha$ , plus l'énergie est faible, plus la période de désintégration est grande. Le physicien G. GAMOW a développé en 1929 une théorie basée sur l'effet tunnel. Il a proposé une modélisation du potentiel (énergie potentielle) vu par la particule  $\alpha$  en fonction de la distance  $r$  la séparant du noyau. La modélisation est représentée sur le schéma de la figure 4. On a typiquement  $V_0 = 40$  MeV et  $V_m = 30$  MeV.

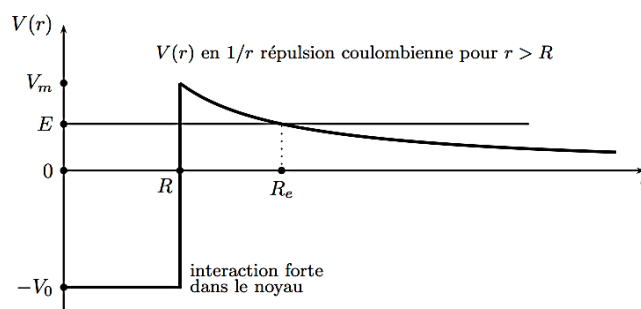


FIGURE 4 – Modèle du potentiel  $V(r)$  de la particule  $\alpha$

Comme les particules  $\alpha$  ont une énergie  $E < 10 \text{ MeV}$ , leur sortie du noyau ne peut être expliquée dans un cadre classique. Seul le cadre de la Mécanique quantique permet grâce à l'effet tunnel de comprendre qu'elles franchissent une barrière de potentiel de largeur  $R_e - R$ . Dans un noyau, la taille est relativement bien donnée par la loi  $R = R_0 A^{1/3}$  avec  $R_0 = 1,2 \text{ fm}$ . Pour les noyaux lourds qui sont les principaux noyaux concernés par la radioactivité  $\alpha$ , on a  $R \simeq 10 \text{ fm}$ . Sur le schéma de la barrière de potentiel de la figure 4, il n'était pas possible - pour des raisons pratiques - de traduire le fait que  $R_e \geq 10R$ .

### Probabilité de transmission tunnel

La probabilité de transmission  $T(E)$  de la particule  $\alpha$  est assez difficile à évaluer. C'est cette probabilité qui va fixer la valeur de la demi-vie radioactive. On peut commencer par modéliser la barrière de potentiel par une barrière de hauteur  $V_m - E$  rectangulaire de largeur  $R_e - R$ . La probabilité  $T(E)$  est donnée par :

$$T(E) \simeq \exp -2K(R_e - R) \quad \text{avec} \quad K = \frac{\sqrt{2m_\alpha(V_m - E)}}{\hbar}$$

Lorsqu'on utilise cette expression, l'accord avec les mesures de demi-vie n'est pas très satisfaisant. Il faut en quelque sorte ne pas traiter en un bloc la largeur  $R_e - R$  de la barrière mais plutôt envisager une intégrale comme cela apparaît dans l'expression suivante :

$$T(E) = \exp \left[ -2 \int_R^{R_e} \frac{\sqrt{2m_\alpha(V(r) - E)}}{\hbar} dr \right]$$

À partir de cette expression, on arrive à une probabilité de transmission donnée par :

$$T(E) = \exp \left[ -4\pi Z \sqrt{\frac{E_\ell}{E}} + 8\sqrt{\frac{8R}{r_\ell}} \right]$$

où  $r_\ell = \frac{\varepsilon_0 \hbar^2}{\pi m_\alpha e^2}$  et  $E_\ell = \frac{e^2}{8\pi \varepsilon_0 r_\ell}$ .

Maintenant que l'on connaît la loi de probabilité  $T(E)$ , on peut en déduire le taux de désintégration  $\lambda(E)$  - ou encore la probabilité d'émission d'une particule  $\alpha$  par unité de temps  $\frac{dN_\alpha}{dt} = -\lambda(E)N_\alpha$  - en multipliant  $T(E)$  par le nombre de collisions par unité de temps de la particule  $\alpha$  avec la barrière nucléaire du noyau de départ. Dans la plupart des cas, on estime que ce nombre de collisions est de l'ordre de  $10^{21} \text{ s}^{-1}$ . On arrive donc ensuite au temps de demi-vie :

$$t_{1/2}(E) = \frac{\ln 2}{\lambda(E)}$$

Cette expression est conforme à la loi observée dès 1911 par GEIGER et NUTTAL qui avaient proposé une loi empirique donnant les temps de vie :

$$t_{1/2}(E) = C_1 \exp \frac{C_2}{\sqrt{E}}$$

où les constantes  $C_1$  et  $C_2$  positives ne dépendent pas de  $E$  mais du numéro atomique  $Z$  du noyau formé par la désintégration que l'on appelle le noyau fils.

- 1) Ecrire l'équation-bilan de production d'une particule  $\alpha$  et d'un noyau fils  $Y$  à partir d'un noyau père  $X$  de nombre de masse  $A$  et de noyau fils de numéro atomique  $Z$ .
- 2) Quelle est l'expression de l'énergie potentielle coulombienne  $V(r)$  à adopter pour la barrière en fonction de  $Z$ ,  $e$ ,  $\varepsilon_0$  et  $r$  ?
- 3) Préciser les relations permettant de déterminer le rayon nucléaire  $R$ , l'énergie maximale de barrière  $V_m$  et le rayon de sortie de barrière  $R_e$ . Effectuer les applications numériques pour  ${}^{226}_{88}\text{Ra}$ .
- 4) Quelle relation littérale, fonction de  $E$ ,  $V_0$ ,  $m_\alpha$  et  $R$  peut-on proposer pour estimer la fréquence de collision de la particule  $\alpha$  pas encore libérée du noyau ? Effectuer l'application numérique pour  ${}^{226}_{88}\text{Ra}$ .
- 5) Justifier que  $t_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda(E)}$ .
- 6) Vérifier la compatibilité entre l'expression du temps de demi-vie obtenue avec le modèle de Gamow et la loi de Geiger et Nuttal.

**Données :**  $\varepsilon_0 \approx 8,84 \cdot 10^{-12} \text{ F} \cdot \text{m}^{-1}$  ; masse nucléon  $\approx 1,7 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$

## 9 Atomes de Rydberg circulaires (D'après CCS1 MP 2019)

### Données et formulaire

Masse de l'électron	$m_e = 9,11 \times 10^{-31} \text{ kg}$
Charge élémentaire	$e = 1,60 \times 10^{-19} \text{ C}$
Permittivité diélectrique du vide	$\epsilon_0 = 8,85 \times 10^{-12} \text{ F}\cdot\text{m}^{-1}$
Constante de Planck	$h = 6,63 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}, \hbar = 1,05 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}\cdot\text{rad}^{-1}$
Célérité de la lumière dans le vide	$c = 3,00 \times 10^8 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$

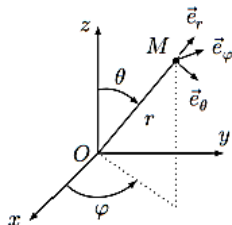


Figure 9 Base sphérique

Volume infinitésimal en coordonnées sphériques

$$dV = r^2 \sin \theta \, dr \, d\theta \, d\varphi$$

Opérateur gradient en coordonnées sphériques

$$\overrightarrow{\text{grad}} f = \frac{\partial f}{\partial r} \vec{e}_r + \frac{1}{r} \frac{\partial f}{\partial \theta} \vec{e}_\theta - \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial f}{\partial \varphi} \vec{e}_\varphi$$

Opérateur laplacien d'un scalaire en coordonnées sphériques

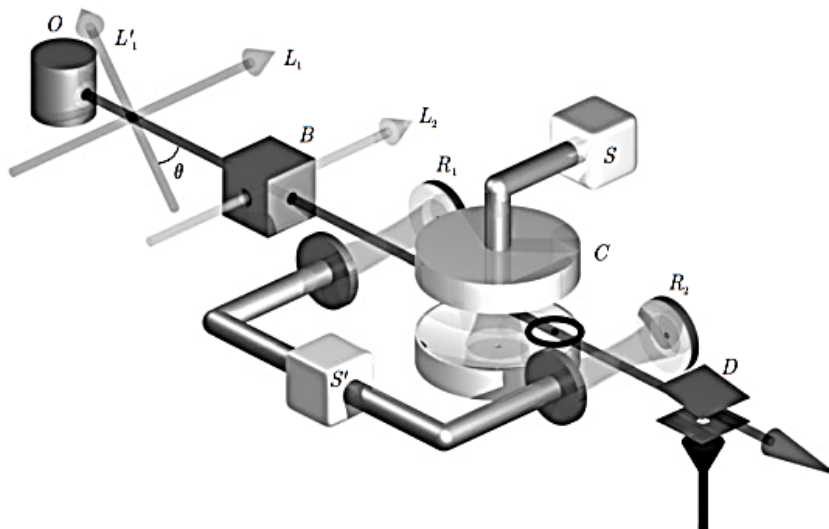
$$\Delta f = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial f}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial f}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2}$$

**NB** : demander des indications pour les questions  $\diamond$  Q... qui font appel à des notions de l'ancien programme de chimie.



Dans la plupart des expériences, la mesure de la présence d'un photon se fait par absorption, c'est-à-dire par destruction du photon : un œil ou une caméra CCD détruisent les photons incidents en les absorbant. De nombreux travaux ont toutefois permis de réaliser des mesures quantiques non destructives (QND, *quantum non-demolition measurement*). Ainsi, à la fin du XX<sup>e</sup> siècle, la présence d'un photon a pu être détectée sans que celui-ci ne soit détruit, ouvrant la porte à des mesures successives de l'état du même photon.

L'équipe de Serge Haroche de l'École Normale Supérieure de Paris a en particulier utilisé ses connaissances en électrodynamique quantique en cavité (CQED, *cavity quantum electrodynamics*) pour mesurer sans le détruire l'état d'un seul photon piégé. Pour la première fois, l'apparition et la disparition du même photon ont pu être observées en direct.



**Figure 1** Principe de l'expérience d'électrodynamique quantique en cavité (Exploring the Quantum - Atoms, cavities and photons - Serge Haroche et Jean-Michel Raimond - Oxford University Press (2006))

Dans cette expérience, le photon est piégé dans une cavité  $C$  constituée de deux miroirs en vis-à-vis (figure 1). Le photon effectue des allers-retours entre les deux miroirs jusqu'à sa disparition (absorption par l'un des miroirs ou fuite hors de la cavité).

Pour sonder la présence du photon, on utilise un atome de Rubidium sortant du four  $O$  dont la vitesse est sélectionnée grâce aux lasers  $L_1$  et  $L'_1$ . L'atome est ensuite excité dans un état dit de *Rydberg circulaire* au niveau de  $B$ . L'atome subit ensuite une impulsion micro-onde au niveau de  $R_1$  ce qui le place dans une superposition de deux états. En traversant la cavité  $C$ , les deux états acquièrent un déphasage relatif  $\Phi_{at}$  dépendant de la présence ou non d'un photon. L'atome subit une deuxième impulsion micro-onde au niveau de  $R_2$  et son état final est mesuré par le détecteur  $D$ . Cet état final dépend du déphasage relatif  $\Phi_{at}$  et donc de la présence ou non du photon. Celui-ci n'a pas été absorbé par l'atome, mais a seulement induit un déphasage dans la structure électronique de l'atome.

L'équipe de Serge Haroche a par la suite généralisé la mesure non destructive à un nombre de photons supérieur à un et a utilisé cette technique pour réaliser une expérience de chat de Schrödinger, ce qui a entre autres valu à Serge Haroche l'obtention du prix Nobel de physique en 2012. Dans le cadre de ce sujet, nous ne nous intéresserons toutefois qu'à certains aspects de l'expérience décrite sur la figure 1.

La partie I étudie quelques propriétés des atomes de Rubidium excités dans l'état de *Rydberg* (on parle alors d'*atomes de Rydberg*) ainsi que leur détection. La partie II s'intéresse aux propriétés de la cavité permettant de piéger un photon pendant une durée suffisante. La partie III étudie le couplage entre un atome de Rydberg et un photon de la cavité. Les trois parties sont indépendantes, même si le contexte reste celui de l'expérience de la figure 1.

Des données numériques, un formulaire et une annexe sont présents en fin de sujet.

Les atomes utilisés dans l'expérience sont des atomes de Rubidium dont l'électron situé sur la couche électronique la plus énergétique est excité dans un état de nombre quantique principal  $n$  très élevé. Des atomes ainsi excités sont appelés *atomes de Rydberg*. Si de plus le nombre quantique secondaire  $\ell$  de l'électron excité est maximum, alors on parle d'*atomes de Rydberg circulaires*.

### I.A – Préliminaires

**Q 1.** Donner la structure électronique du Rubidium ( $Z = 37$ ) dans son état fondamental. Entourer le ou les électron(s) de valence. À quelle famille cet élément appartient-il ?

Considérons un atome polyélectronique contenant  $Z$  électrons. Le noyau sera considéré comme ponctuel et fixe en  $O$ . On s'intéresse à l'électron de la couche électronique la plus énergétique que l'on repère en coordonnées sphériques. L'énergie potentielle électrostatique de cet électron est de la forme

$$U(r) = -\frac{Z(r)q}{r}$$

où l'on a posé  $q = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$  avec  $\epsilon_0$  la permittivité diélectrique du vide. La fonction  $Z(r)$  est positive et vérifie  $Z(r \rightarrow 0) = Z$  et  $Z(r \rightarrow +\infty) = 1$ .

**Q 2.** Justifier le signe de  $U(r)$ .

**Q 3.** Interpréter physiquement les valeurs limites de la fonction  $Z(r)$  en  $r \rightarrow 0$  et  $r \rightarrow +\infty$ .

**Q 4.** On cherche un ordre de grandeur de la taille typique  $a_0$  de l'atome. On estime que  $a_0$  est de la forme  $a_0 = \hbar^\alpha q^\beta m_e^\gamma$  où  $m_e$  est la masse de l'électron. Établir soigneusement que  $\alpha = 2$ ,  $\beta = -1$  et  $\gamma = -1$ . La grandeur  $a_0$  est appelée rayon de l'atome de Bohr, calculer sa valeur numérique.

### I.B – Atomes de Rydberg

L'électron le plus énergétique de l'atome précédent est excité dans un niveau de nombre quantique  $n \gg 1$  (typiquement  $n \simeq 50$ ), le reste de l'atome étant inchangé. On étudie par la suite le comportement de cet électron dont la masse est toujours notée  $m_e$ . L'atome est isolé de son environnement extérieur.

#### I.B.1) Étude classique

**Q 5.** Justifier que l'énergie potentielle de l'électron est alors :  $U(r) = -\frac{q}{r}$ .

**Q 6.** Démontrer que le moment cinétique  $\vec{L}$  de cet électron est constant et en déduire que le mouvement de l'électron est plan. On introduit le repère sphérique  $(r, \theta, \varphi)$  tel que  $\vec{L} = \mathcal{L}\vec{e}_z$  avec  $\mathcal{L} > 0$ . Le noyau est toujours à l'origine du repère. Montrer que le mouvement de l'électron est alors situé dans le plan  $Oxy$  et donner l'expression de la constante  $\mathcal{L}$  en fonction de  $m_e$ ,  $r$  et  $\dot{\varphi}$ .

**Q 7.** Que peut-on dire de l'énergie mécanique  $\mathcal{E}_m$  de l'électron ? Montrer que l'on peut mettre cette énergie mécanique sous la forme

$$\mathcal{E}_m = \frac{1}{2}m_e\dot{r}^2 + \mathcal{E}_{p,\text{eff}}(r)$$

où l'on exprimera  $\mathcal{E}_{p,\text{eff}}(r)$  en fonction de  $q$ ,  $r$ ,  $m_e$  et  $\mathcal{L}$ .

**Q 8.** Justifier que, pour une trajectoire circulaire,  $\mathcal{E}_{p,\text{eff}}(r)$  est minimale. En déduire la valeur du rayon  $r_C$  de l'électron lorsqu'il est sur une trajectoire circulaire. On exprimera  $r_C$  en fonction de  $\mathcal{L}$ ,  $m_e$  et  $q$ , puis on vérifiera que  $r_C = \frac{\mathcal{L}^2}{\hbar^2} a_0$ .

#### I.B.2) Étude quantique

En physique quantique, l'état de l'électron excité dans le niveau  $n$  est décrit par la fonction d'onde  $\Psi(M, t)$ . Celle-ci vérifie l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta \Psi - \frac{q}{r} \Psi$$

où  $\Delta$  est l'opérateur laplacien.

On cherche  $\Psi(M, t)$  sous la forme d'un état stationnaire :  $\Psi(M, t) = \Phi(M)\chi(t)$ .

**Q 9.** Justifier que  $\chi(t)$  est de la forme  $\chi(t) = A \exp\left(-i\frac{\mathcal{E}t}{\hbar}\right)$  avec  $A$  et  $\mathcal{E}$  deux constantes.

**Q 10.** Justifier sans calcul le signe de  $\mathcal{E}$  pour l'électron étudié.

On met  $\Phi(M)$  sous la forme  $\Phi(M) = \frac{1}{r}u(r)Y(\theta, \varphi)$  et on admet que  $u(r)$  vérifie l'équation

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2m_e r^2} - \frac{q}{r}\right) u(r) = \mathcal{E}u(r) \quad (\text{I.1})$$

où  $\ell$  est le nombre quantique secondaire.

**Q 11.** Rappeler les valeurs permises pour le nombre quantique  $\ell$ .

**Q 12.** En utilisant notamment la question 7 et en procédant par identification, justifier qu'en physique quantique les valeurs possibles de  $\mathcal{L}^2$  sont  $\ell(\ell+1)\hbar^2$ . Quelle est en particulier la valeur maximale que  $\mathcal{L}^2$  peut prendre pour l'électron étudié ?

**Q 13.** Que vaut alors le rayon  $r_C$  de la trajectoire circulaire obtenue en question 8 ? On donnera le résultat en fonction de  $a_0$  et de  $n$  pour un atome de Rydberg.

**Q 14.** On cherche à adimensionner l'équation (I.1). Montrer que cette équation peut se mettre sous la forme

$$\left(\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} + \frac{2}{\rho} - \epsilon\right) u(\rho) = 0 \quad (\text{I.2})$$

en posant  $\rho = r/a_0$  et  $\epsilon = -\mathcal{E}/\mathcal{E}_0$ , avec  $\mathcal{E}_0$  une constante que l'on exprimera en fonction de  $a_0$  et de  $q$ . Quelle est la valeur numérique de  $\mathcal{E}_0$  en électron-volts ?

### I.C - Atomes de Rydberg circulaires

L'électron le plus énergétique est maintenant placé dans un état de nombre quantique principal  $n \gg 1$  et de nombre quantique secondaire  $\ell$  maximum. Sa fonction d'onde spatiale est

$$\Phi(r, \theta, \varphi) = A(n) \left(-\frac{r}{a_0} \sin \theta e^{i\varphi}\right)^{n-1} \exp\left(\frac{-r}{na_0}\right) \quad (\text{I.3})$$

avec  $A(n)$  une constante réelle positive de normalisation.

**Q 15.** Exprimer la probabilité  $dP$  de trouver l'électron entre  $r$  et  $r + dr$ , quels que soient  $\theta$  et  $\varphi$ . On ne cherchera pas à calculer les éventuelles intégrales.

**Q 16.** Montrer que la densité de probabilité  $\frac{dP}{dr}$  est maximale pour le rayon  $r_{\max} = n^2 a_0$ . Commenter ce résultat.

**Q 17.** Faire l'application numérique pour  $n = 50$ . Pourquoi qualifie-t-on les atomes de Rydberg circulaires d'atomes géants ?

L'expression de la fonction d'onde (non demandée) permettrait en outre de montrer que la probabilité de présence est maximale dans la direction  $\theta = \pi/2$ . On admet également que la dispersion relative de  $r$  et la dispersion de  $\theta$  sont de l'ordre de  $\frac{\Delta r}{r} \simeq \Delta \theta \simeq \frac{1}{\sqrt{2n}}$ .

**Q 18.** Pourquoi peut-on dire que le comportement de l'électron excité de l'atome de Rydberg circulaire est « classique » ?

**Q 19.** Donner, à partir de la forme de la fonction d'onde (I.3), l'expression de  $u(\rho)$  pour l'électron le plus énergétique dans un atome de Rydberg circulaire, à un facteur multiplicatif constant près. En déduire l'expression de  $\epsilon$  puis de  $\mathcal{E}$  pour l'électron dans un tel état. Commenter ce résultat.

**Q 20.** Calculer la fréquence  $\nu_{at}$  du photon correspondant à la transition entre les états  $\mathcal{E}_{n=50}$  et  $\mathcal{E}_{n=51}$ . Dans quel domaine des ondes électromagnétiques se situe-t-il ?

## 10 Expérience de Stern et Gerlach (*Approche documentaire en lien avec ChEM3*)

A partir des documents 1 à 5, répondre aux questions suivantes

### 1. Moment cinétique et moment magnétique orbitaux

- En adoptant le modèle de l'atome d'hydrogène purement classique de RUTHERFORD, exprimer le moment cinétique orbital  $\vec{L}$  de l'électron en fonction de sa masse  $m_e$ , de sa vitesse  $v$  et du rayon  $r$  de l'orbite.
- Exprimer le moment magnétique  $\vec{\mu}$  associé à la boucle de courant créée par le mouvement circulaire de l'électron, en fonction de  $v$ ,  $r$  et de la charge élémentaire  $e$ .
- En déduire la relation

$$\vec{\mu} = \gamma \vec{L}$$

où on exprimera  $\gamma$ .

### 2. Dispositif de déviation

- Pourquoi les atomes d'argent ne subissent-ils pas de force de Lorentz ?
- Expliquer la nécessité d'un champ magnétique non uniforme dans l'expérience de STERN et GERLACH.
- Reproduire la figure 3 et orienter les lignes de champ magnétique. Représenter  $\text{grad}B_z$  en un point de la ligne de champ parallèle à  $Oz$ .

### 3. De l'analyse classique à la description quantique

- À l'aide du théorème du moment cinétique, montrer que dans le plan  $x = 0$ ,  $\mu_z = \vec{\mu} \cdot \vec{e}_z$  est constant.
- Dans une approche classique, on suppose que les atomes d'argent portent un moment magnétique de norme  $\mu_0$  et que ces moments ont une direction aléatoire quand les atomes entrent dans la zone de champ magnétique.

La figure 4 donne trois simulations du résultat de l'expérience de STERN et GERLACH. Laquelle correspond au cas dans un champ magnétique uniforme ? Laquelle correspond à l'approche classique avec un champ magnétique inhomogène ?

- La dernière simulation correspond à la véritable observation pour laquelle  $\mu_0 = 9,27 \times 10^{-24} \text{ J} \cdot \text{T}^{-1}$ .

Montrer que cette mesure est compatible avec une quantification du moment cinétique de l'atome :  $L_z = \pm \hbar$ .

- Comme le montre la carte postale envoyée par GERLACH à BOHR, le faisceau d'atomes d'argent pénétrant dans l'électroaimant présentait une extension spatiale selon  $Ox$ . La carte postale montre deux résultats obtenus sans ou avec champ magnétique.

Pourquoi STERN et GERLACH n'ont-ils pas observé deux segments parallèles lorsque le dispositif de déviation est actif ?

- Un atome d'argent n'a qu'un seul électron de valence. Dans sa configuration fondamentale, cet électron a pour nombre quantique principal  $n = 5$ . D'après le document 1, donner ses nombres quantiques secondaire et magnétique.
  - En admettant que seuls les électrons de valence contribuent au moment cinétique orbital, quelle(s) valeur(s) peut prendre la projection du moment cinétique orbital  $L_z$  pour l'atome d'argent ? Est-ce en accord avec le résultat de l'expérience de STERN et GERLACH ?

- Visionner l'animation <http://toutestquantique.fr/spin/> et conclure.

En 1922, OTTO STERN et WALTHER GERLACH proposent de réaliser une expérience pour vérifier si le moment cinétique électronique est quantifié comme l'affirme NIELS BOHR. La Plaque commémorative de l'expérience apposée sur le bâtiment où a été réalisée la fameuse expérience est visible sur la photographie de la figure 1.

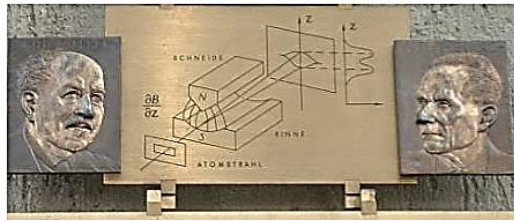


FIGURE 1 – Plaque commémorative

Sur cette plaque, on peut lire :

*En février 1922, dans ce bâtiment de l'association de physique, à Francfort-sur-le-Main, OTTO STERN et WALTHER GERLACH firent la découverte fondamentale de la quantification spatiale des moments magnétiques des atomes. Sur l'expérience de STERN-GERLACH reposent des développements physiques et techniques importants du XX<sup>e</sup> siècle, tels la résonance magnétique nucléaire, l'horloge atomique ou le laser. Pour cette découverte, OTTO STERN reçut le prix Nobel en 1943.*

## Doc. 1 Modèle de l'atome avant 1920

### 1. Modèle de RUTHERFORD (1911)

Il s'agit d'un modèle planétaire : les électrons, chargés négativement, tournent autour du noyau, chargé positivement, de rayon très faible devant sa distance aux électrons. L'atome d'hydrogène est modélisé par

- un électron de masse  $m_e$  et de charge  $-e < 0$  ayant une trajectoire circulaire autour d'un proton de charge  $+e$  et nettement plus lourd que l'électron.
- Le proton exerce une force électrostatique attractive sur l'électron.

### 2. Modèle de BOHR de l'atome d'hydrogène (1913)

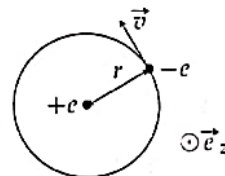
Dans le cadre de la physique classique, une charge électrique accélérée rayonne de l'énergie. Le modèle de RUTHERFORD conduit donc à des atomes instables, l'électron finissant par s'écraser sur le noyau. Niels BOHR améliore le modèle planétaire de RUTHERFORD en ajoutant les contraintes suivantes :

- les trajectoires possibles de l'électron sont celle qui satisfont à

$$m_e v r = n \hbar = n \frac{h}{2\pi}$$

où  $r$  est le rayon de la trajectoire circulaire,  $v$  sa vitesse et  $n$  un entier naturel.

- l'électron n'émet ou n'absorbe de l'énergie que lors d'un changement d'orbite.



### 3. Nombres quantiques

**Nombre quantique principal  $n$**  Nombre quantique entier naturel non nul. Dans la description non relativiste de l'atome d'hydrogène, les niveaux d'énergie ne dépendent que de  $n$ .

**Nombre quantique secondaire (ou orbital)  $\ell$**  Nombre quantique entier naturel ( $0 \leq \ell \leq n - 1$ ) relié à la quantification du moment cinétique orbital  $\vec{L}$  :

$$L^2 = \ell(\ell + 1)\hbar^2$$

**Nombre quantique magnétique  $m_\ell$**  Nombre quantique entier vérifiant  $-\ell \leq m_\ell \leq +\ell$  intervenant dans la quantification du moment cinétique : la projection suivant n'importe quel axe ( $Oz$  par exemple) d'un moment cinétique  $\vec{L}$ , caractérisé par un nombre quantique secondaire  $\ell$ , vérifie  $L_z = m_\ell \hbar$ .

## Doc. 2 Expérience de Stern et Gerlach (1922)

Des atomes d'argent sont envoyés à travers l'entrefer d'un électroaimant, zone où règne un champ magnétique inhomogène. Les pièces polaires de l'aimant et la structure des lignes de champ sont visibles sur les schémas des figures 2 et 3.

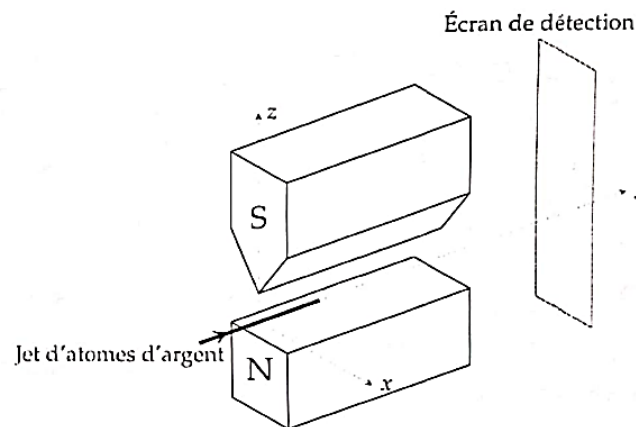


FIGURE 2 – Configuration de l'expérience de STERN et GERLACH

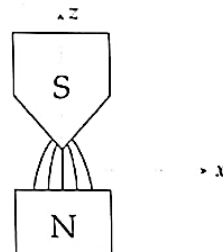


FIGURE 3 – Lignes de champ magnétique

Un entrefer particulier est utilisé pour créer un champ inhomogène, on a représenté l'allure des lignes de champ dans cet entrefer où la composante  $B_y$  du champ magnétique selon  $\vec{e}_y$  est partout nulle et où les composantes  $B_x$  et  $B_z$  du champ ne dépendent que de  $x$  et  $z$  (on néglige les effets de bords selon  $Oy$ ). On constate sur la figure que la forme de l'entrefer est telle que la fonction  $B_x(x, z)$  est impaire en  $x$  alors que  $B_z(x, z)$  est paire en  $x$ . De plus, on considère que le jet d'atomes d'argent reste dans le plan incident  $x = 0$  qui traverse l'entrefer de l'aimant.

On présente à la figure 4 les résultats de 3 simulations numériques de l'expérience de STERN et GERLACH :

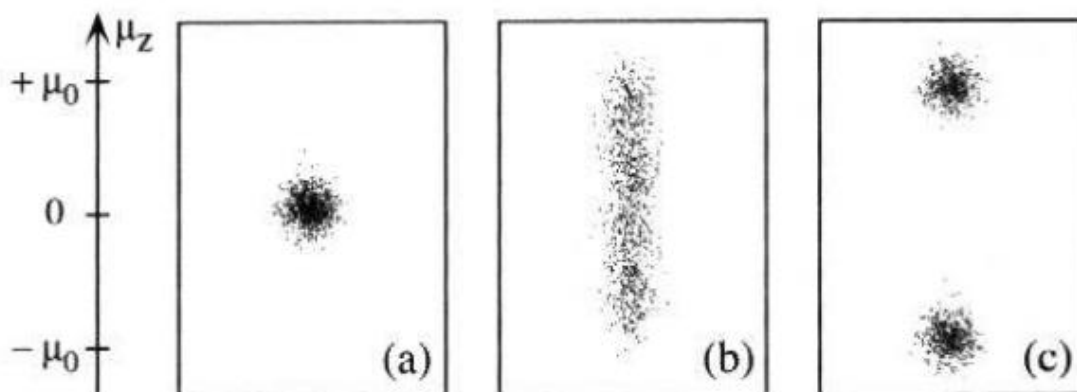


FIGURE 4 – Quelques simulations de l'expérience de Stern et Gerlach (d'après Basdevant et Dalibard, *Cours de l'École polytechnique 2002*)

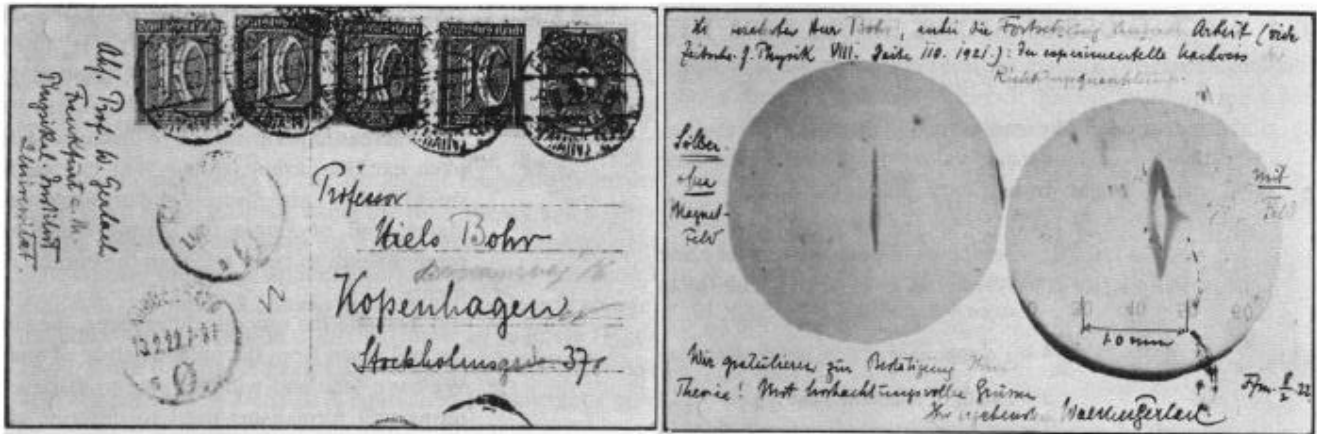


FIGURE 5 – Carte postale de Walther GERLACH envoyé à Niels BOHR le 8 février 1922 au sujet de l'expérience avec des atomes d'argent (Source : Niels Bohr Archive).

Sur les deux figures circulaires du verso de cette carte la direction Oz est horizontale.

Traduction du texte écrit en allemand sur le verso de la carte postale :

*Cher Monsieur Bohr,*

*Ci-joint la suite de notre travail (voir magazine pour physique VIII, page 110, 1921) concernant la preuve expérimentale de la quantification directionnelle.*

*(À gauche) : argent (silber), sans champ magnétique (ohne magnet feld)*

*(À droite) : avec champ (mit feld)*

*Nous vous félicitons pour la confirmation de votre théorie !*

*Avec mes salutations respectueuses*

*Bien à vous*

*Walther Gerlach*

### Doc. 3 L'argent

- Numéro atomique :  $Z = 47$
- Configuration électronique dans l'état fondamental :  $[\text{Kr}]4d^{10}5s^1$

### Doc. 4 Actions subies par un dipôle magnétique

Un dipôle magnétique de moment dipolaire magnétique  $\vec{\mu}$  situé en un point  $M$  dans un champ magnétostatique extérieur  $\vec{B}(M)$  subit des actions donc la résultante  $\vec{F}$  et le moment  $\vec{\Gamma}$  en  $M$  sont

$$\vec{F} = (\vec{\mu} \cdot \overrightarrow{\text{grad}}) \vec{B}(M)$$

$$\vec{\Gamma} = \vec{\mu} \wedge \vec{B}(M)$$

Pour un champ magnétique selon Oz et ne dépendant que de  $z$ ,

$$\vec{F} = \mu_z \frac{dB_z}{dz} \vec{e}_z$$

### Doc. 5 Constantes physiques

Référence : J. Beringer et al. (Particle Data Group), Phys. Rev. D86, 010001 (2012) and 2013 partial update for the 2014 edition

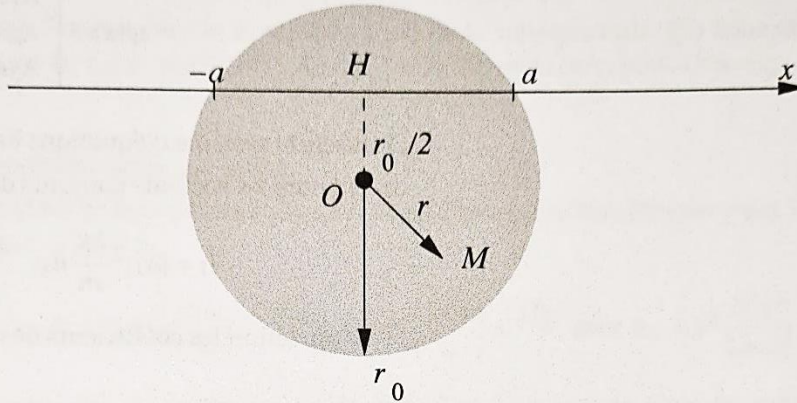
Quantity	Symbol	Value
speed of light in vacuum	$c$	$299\,792\,458 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$
Planck constant	$h$	$6,626\,069\,57(29) \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$
electron charge magnitude	$e$	$1,602\,176\,565(35) \times 10^{-19} \text{ C}$
electron mass	$m_e$	$9,109\,382\,91(40) \times 10^{-31} \text{ kg}$

### 11 Effet Ramsauer

La vapeur d'hélium peut être, dans certaines conditions, parfaitement transparente à un faisceau d'électrons : c'est l'effet Ramsauer dont on veut donner un modèle quantique simplifié.

**Première partie : étude du profil énergétique.**

On assimile l'atome d'hélium à un noyau ponctuel immobile en O de charge  $2e$  au centre d'un nuage électronique sphérique de rayon  $r_0$  et de densité volumique de charge uniforme  $\rho_0 = \frac{-2e}{\frac{4}{3}\pi r_0^3}$ .



- a) Par application du théorème de Gauss, montrer que le champ électrique en un point M à la distance  $r$  de O vaut

$$\vec{E} = E(r)\vec{u}_r \text{ avec } E(r) = \begin{cases} 0 & \text{si } r \geq r_0 \\ \frac{e}{2\pi\epsilon_0 r_0^2} \left[ \frac{r_0^2}{r^2} - \frac{r}{r_0} \right] & \text{si } r \leq r_0 \end{cases}$$

- b) En déduire le potentiel électrique  $U(r)$  en prenant un potentiel nul à l'infini et en assurant sa continuité en  $r = r_0$ . On donne en coordonnées sphériques  $\vec{\text{grad}} U(r) = \frac{\partial U}{\partial r} \vec{u}_r$ .
- c) Un électron provient de  $x = -\infty$  sur un axe (H, x) où H est situé à l'intérieur du nuage électronique, à la distance  $OH = \frac{r_0}{2}$  du noyau. Donner l'expression de son énergie potentielle  $V(x) = -eU(x)$  en distinguant  $x < -a$ ,  $x \in [-a, a]$  et  $x > a$ , où on précisera l'expression de  $a$  en fonction de  $r_0$ .

On montrera en particulier que, pour  $x \in [-a, a]$ , l'énergie potentielle peut se mettre sous la forme :

$$V(x) = C \cdot \left( \frac{X^2}{8} + \frac{2}{\sqrt{1+X^2}} - \frac{11}{8} \right)$$

Avec  $X = \frac{2x}{r_0}$  et  $C$  une constante homogène à une énergie à exprimer en fonction de  $e, \epsilon_0$  et  $r_0$ .

- d) Tracer l'allure de  $V(x)$  (l'étude de la fonction n'est pas demandée, on pourra se contenter de reproduire la courbe obtenue à la machine).

**Deuxième partie : calcul du coefficient de réflexion.**

On modélise le potentiel énergétique  $V(x)$  de la question précédente par un potentiel constant par morceaux :

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

On braque dans la direction et le sens de  $\vec{u}_x$  un faisceau d'électrons de masse  $m$ , de vitesse  $v$  d'énergie  $E = \frac{1}{2}mv^2 > 0 > -V_0$ . On pose

$$k_0 = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}}, \quad k = \sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}} \text{ et } K = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$



Dans la zone  $[-a, a]$  (où le potentiel est constant égal à  $-V_0$ ), on cherche une solution stationnaire de l'équation de Schrödinger sous la forme

$$\psi(x, t) = u(t) \cdot \varphi(x)$$

Établir l'expression de  $u(t)$  (on précisera la relation entre  $\omega$  et  $E$ ) et l'équation différentielle du second ordre vérifiée par  $\varphi(x)$ .

b) Justifier en quelques mots qu'on peut prendre

$$\varphi(x) = \begin{cases} A_1 e^{iKx} + B_1 e^{-iKx} & \text{si } x < -a \\ A_2 e^{ikx} + B_2 e^{-ikx} & \text{si } -a \leq x \leq a \\ A_3 e^{iKx} & \text{si } x > a \end{cases}$$

c) Écrire le système d'équations liant les différents coefficients complexes.

d) On note les vecteurs courants de densité de probabilité

$$\vec{J}_i = |A_1|^2 \frac{\hbar K}{m} \vec{u}_x, \quad \vec{J}_r = -|B_1|^2 \frac{\hbar K}{m} \vec{u}_x, \quad \text{et } \vec{J}_t = |A_3|^2 \frac{\hbar K}{m} \vec{u}_x$$

Et on définit les coefficients de réflexion et de transmission

$$R = \frac{\|\vec{J}_r\|}{\|\vec{J}_i\|} \quad \text{et} \quad T = \frac{\|\vec{J}_t\|}{\|\vec{J}_i\|}$$

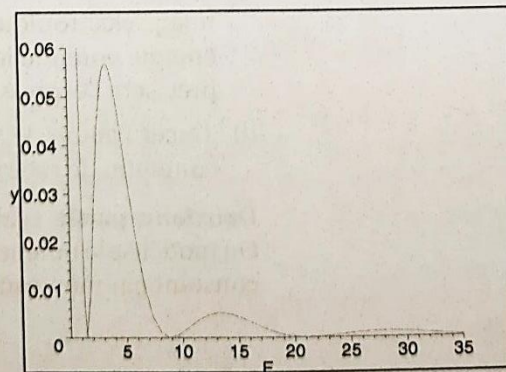
Quel est le sens physique de  $T$  et de  $R$  et quelle est la relation qui les lie ?

### Troisième partie : effet Ramsauer.

Pour la suite, on **admet** les expressions suivantes (le lecteur intéressé pourra les établir)

$$R = \frac{\beta^2 \sin^2(2ka)}{1 + \beta^2 \sin^2(2ka)} \quad \text{et} \quad T = \frac{1}{1 + \beta^2 \sin^2(2ka)} \quad \text{avec } \beta = \frac{k_0^2}{2kK}$$

Voici l'allure des variations de  $R$  (noté  $y$  sur le graphe) avec  $E$  (on a pris  $V_0 = 1$ ,  $a = 1$  et  $\frac{2m}{\hbar^2} = 1$ ) :



- Pour quelles valeurs de  $E$ ,  $R$  s'annule-t-il ? Est-ce cohérent avec la courbe donnée ?
- En quoi les résultats obtenus prouvent-ils l'effet Ramsauer ?
- Donner l'expression de la vitesse minimale  $v$  qu'il faut donner aux électrons pour observer cet effet.

Capacités exigibles	Ch MQ2	Ex 1,5,9,10	Ex 2	Ex 3	Ex 4	Ex 6-8	Ex 11
<p><b>Fonction d'onde <math>\psi</math> d'une particule sans spin et densité de probabilité de présence.</b> Interpréter en termes de probabilité l'amplitude d'une onde associée à une particule.</p> <p><b>Équation de Schrödinger à une dimension dans un potentiel <math>V(x)</math>.</b> Utiliser le caractère linéaire de l'équation (principe de superposition).</p> <p><b>États stationnaires de l'équation de Schrödinger.</b> Procéder à la séparation des variables temps et espace. Distinguer l'onde associée à un état stationnaire en mécanique quantique d'une onde stationnaire au sens usuel de la physique des ondes. Relier l'énergie de la particule à l'évolution temporelle de sa fonction d'onde et faire le lien avec la relation de Planck-Einstein. Identifier le terme associé à l'énergie cinétique.</p>	•	•	•	•	•		•
<p><b>Fonction d'onde d'une particule libre non localisée.</b> Établir les solutions. Interpréter la difficulté de normalisation de cette fonction d'onde.</p> <p><b>Relation de de Broglie.</b> Relier l'énergie de la particule et le vecteur d'onde de l'onde plane associée.</p> <p><b>Inégalité d'Heisenberg spatiale et paquet d'ondes.</b> Expliquer, en s'appuyant sur l'inégalité d'Heisenberg spatiale, que la localisation de la particule peut s'obtenir par superposition d'ondes planes.</p> <p><b>Densité de courant de probabilité associée à une particule libre.</b> Utiliser l'expression admise du courant de probabilité associé à une particule libre ; l'interpréter comme un produit densité*vitesse.</p>	•		•	•			
<p><b>États stationnaires d'une particule dans le cas d'une marche de potentiel.</b> Citer des exemples physiques illustrant cette problématique. Exploiter les conditions de continuité (admisses) relatives à la fonction d'onde. Établir la solution dans le cas d'une particule incidente sur une marche de potentiel. Expliquer les différences de comportement par rapport à une particule classique.</p> <p><b>Cas <math>E &gt; V</math> : probabilité de transmission et de réflexion.</b> Déterminer les coefficients T et R en utilisant les courants de probabilités.</p> <p><b>Cas <math>E &lt; V</math> : évanescence.</b> Reconnaître l'existence d'une onde évanescence et la caractériser.</p>	•		•		•		•
<p><b>Barrière de potentiel et effet tunnel.</b> Décrire qualitativement l'influence de la hauteur ou de largeur de la barrière de potentiel sur le coefficient de transmission. Exploiter un coefficient de transmission fourni. Citer des applications.</p>	•					•	
<p><b>États stationnaires d'une particule dans un puits de potentiel infini.</b> Établir les solutions et les niveaux d'énergie de la particule confinée. Identifier des analogies avec d'autres domaines de la physique.</p> <p><b>Énergie de confinement.</b> Estimer l'énergie fondamentale d'une particule confinée pour un puits non rectangulaire. Associer l'analyse à l'inégalité d'Heisenberg.</p>	•			•	•		
<p><b>États non stationnaires d'une particule dans un puits de potentiel infini.</b> <b>Combinaison linéaire d'états stationnaires.</b> Expliquer qu'une superposition de deux états stationnaires engendre une évolution au cours du temps de l'état de la particule. Établir l'expression de la densité de probabilité de présence de la particule dans le cas d'une superposition de deux états stationnaires ; interpréter le résultat.</p>	•						