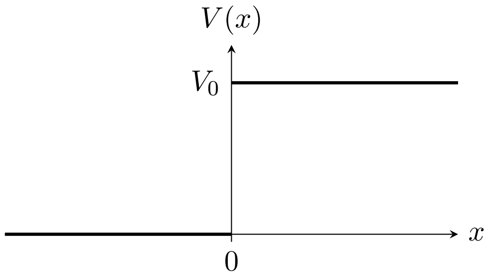
1 Marche de potentiel

On étudie dans le formalisme de la théorie quantique une particule de masse m et d'énergie E qui se dirige vers une marche de potentiel de hauteur $V_0 > 0$, modélisée selon la figure ci-dessous :



1) Préliminaire : quelles sont les prévisions de la mécanique classique dans le cas où $E > V_0$? Dans le cas où $E < V_0$?

Soit $\Psi_{\text{stat}}(x,t) = \varphi(x)\, e^{-i\frac{Et}{\hbar}}$ un état stationnaire quantique associé à cette énergie E.

2) On suppose dans un premier temps que $E > V_0$.

a) Montrer que :
Si $x < 0$: $\varphi(x) = A_1\, e^{ik_1x} + B_1\, e^{-ik_1x}$
Si $x > 0$: $\varphi(x) = A_2\, e^{ik_2x} + B_2\, e^{-ik_2x}$
et déterminer les expressions de k_1 et k_2 (constantes positives) en fonction de E, V_0, $\hbar$ et m. Compte-tenu de la situation physique étudiée, que peut-on dire de B_2 ?

On pose $\Psi_i(x,t) = A_1\, e^{ik_1x}\, e^{-\frac{Et}{\hbar}}$, $\Psi_r(x,t) = B_1\, e^{-ik_1x}\, e^{-\frac{Et}{\hbar}}$ et $\Psi_t(x,t) = A_2\, e^{ik_2x}\, e^{-\frac{Et}{\hbar}}$.

b) Écrire les deux équations reliant les constantes complexes A_1, B_1 et A_2. En déduire les coefficients de réflexion et de transmission en amplitude de probabilité définis par :

$$r = \frac{\Psi_r(0,t)}{\Psi_i(0,t)} \quad \text{et} \quad t = \frac{\Psi_t(0,t)}{\Psi_i(0,t)}$$

en fonction de k_1 et k_2.

c) En déduire la densité de probabilité de présence de la particule $\rho(x) = |\Psi_{\text{stat}}(x,t)|^2$ pour $x < 0$ et $x > 0$, en fonction de $|A_1|^2$, k_1 et k_2. Représenter $\rho(x)$ en fonction de x et commenter.

d) Calculer les vecteurs densité de courant de probabilité $\overrightarrow{j_i}$, $\overrightarrow{j_r}$ et $\overrightarrow{j_t}$ associés aux fonctions d'onde $\Psi_i(x,t)$, $\Psi_r(x,t)$ et $\Psi_t(x,t)$.

On définit les coefficients de réflexion et de transmission en probabilité de la marche de potentiel par :

$$R = \frac{\left\|\vec{j_r}\right\|}{\left\|\vec{j_i}\right\|} \quad \text{et} \quad T = \frac{\left\|\vec{j_t}\right\|}{\left\|\vec{j_i}\right\|}$$

Déterminer R et T en fonction de k_1 et k_2.

e) Que peut-on dire de $R+T$? Après avoir exprimé R et T en fonction de E et de V_0, représenter R et T en fonction de E pour $E \in]V_0, +\infty[$.

3) On suppose maintenant que $E < V_0$.

a) Montrer que si $x > 0$ alors $\varphi(x) = A_3\, e^{-qx} + B_3\, e^{qx}$ et donner l'expression de q en fonction de E, V_0, $\hbar$ et m. Que peut-on dire de B_3 ?

Les définitions de $\Psi_i(x,t)$ et $\Psi_r(x,t)$ étant inchangées par rapport à la question **1)**, on pose maintenant $\Psi_t(x,t) = A_3\, e^{-qx}$.

b) Déterminer les nouvelles expressions de r et t en fonction de k_1 et q.

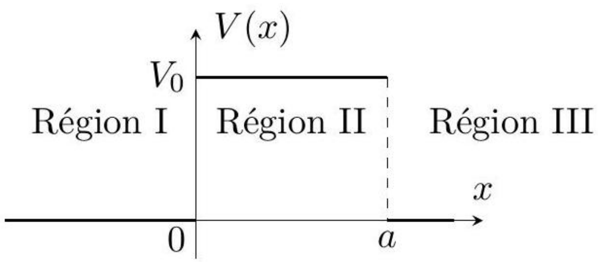
c) En déduire la densité de probabilité de présence de la particule $\rho(x) = |\Psi_{\text{stat}}(x,t)|^2$ pour $x < 0$ et $x > 0$, en fonction de $|A_1|^2$, k_1 et q. On pourra poser pour simplifier $r = |r|\, e^{-i\theta}$.

d) Déterminer $\overrightarrow{j_t}$. En déduire les nouvelles expressions de R et T. Compléter la représentation précédente en donnant l'allure de R et T pour $E \in]0, V_0[$.

4) On s'intéresse au cas particulier où $V_0 \longrightarrow +\infty$. Que deviennent q, r et t dans ce cas ? Déterminer les expressions de $\Psi_{\text{stat}}(x,t)$ pour $x < 0$ et pour $x > 0$.

2 Barrière de potentiel. Effet tunnel

On étudie une barrière d'énergie potentielle modélisée comme ci-dessous :



$$V(x) = \begin{cases} V_0 > 0 & \text{si } x \in [0, a] \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

On suppose que la particule de masse m vient de la Région I et se dirige vers la barrière d'énergie potentielle. On étudie un état stationnaire quantique d'énergie E tel que $E < V_0$ et on écrit :

$$\Psi_{\text{stat}}(x,t) = \varphi(x)\, e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$$

1) Montrer que :

dans la Région I : $\varphi(x) = A_1\, e^{ikx} + B_1\, e^{-ikx}$
dans la Région II : $\varphi(x) = A_2 \operatorname{ch}(qx) + B_2 \operatorname{sh}(qx)$
dans la Région III : $\varphi(x) = A_3\, e^{ikx} + B_3\, e^{-ikx}$

et donner les expressions de k et q en fonction de E, V_0, $\hbar$ et m.

2) Quelle valeur doit-on donner à B_3 ?

Dans la suite on pose $\Psi_i(x,t) = A_1\, e^{ikx}\, e^{-\frac{Et}{\hbar}}$ $\Psi_r(x,t) = B_1\, e^{-ikx}\, e^{-\frac{Et}{\hbar}}$ et $\Psi_t(x,t) = A_3\, e^{ikx}\, e^{-\frac{Et}{\hbar}}$ et on note $\overrightarrow{j_i}$, $\overrightarrow{j_r}$ et $\overrightarrow{j_t}$ les vecteurs densité de courant de probabilité associés.

a) Que représentent Ψ_i, Ψ_r et Ψ_t ?

b) Déterminer les expressions de $\overrightarrow{j_i}$, $\overrightarrow{j_r}$ et $\overrightarrow{j_t}$ en fonction de $\hbar$, k, m et des constantes complexes A_1, B_1 et A_3.

3) Les coefficients de réflexion et de transmission en probabilité de la barrière sont définis par :

$$R_b = \frac{\left\|\vec{j}_r\right\|}{\left\|\vec{j}_i\right\|} \quad \text{et} \quad T_b = \frac{\left\|\vec{j}_t\right\|}{\left\|\vec{j}_i\right\|}$$

Un calcul non demandé, qui utilise la continuité de φ et de sa dérivée φ' en $x = 0$ et en $x = a$, conduit aux expressions suivantes :

$$R_b = \frac{\frac{V_0^2}{4E(V_0-E)}\operatorname{sh}^2(qa)}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0-E)}\operatorname{sh}^2(qa)} \quad \text{et} \quad T_b = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0-E)}\operatorname{sh}^2(qa)}$$

a) Que peut-on dire de $R_b + T_b$? Commenter

b) L'approximation de la barrière épaisse est le cas particulier où $q \gg a$. Montrer qu'on peut écrire dans ce cas :

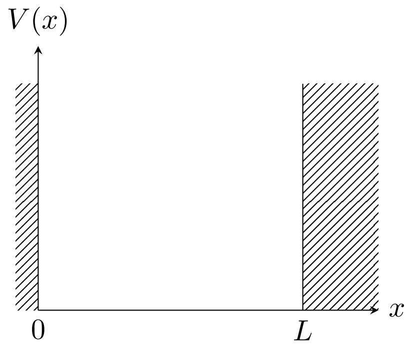
$$T_b \approx \frac{16E\,(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-2qa}$$

c) Application numérique : $E = 5{,}0$ eV ; $V_0 = 10$ eV et $a = 0{,}50$ nm. Calculer T_b pour un électron de masse $m = 9{,}1\times10^{-31}$ kg. Évaluer T_b dans le cas d'un proton de masse $m = 1{,}67\times10^{-27}$ kg.

d) On envoie un faisceau d'électrons correspondant à un courant incident $I = 10$ mA à travers une surface $S = 1{,}0$ cm^2 . Estimer la proportion d'électrons qui franchissent la barrière d'énergie potentielle par unité de temps ainsi que l'intensité I_t associée.

3 Puit de potentiel infini. Quantification de l'énergie

On considère une particule de masse m qui est confinée dans une boîte à une dimension de largeur L. Pour modéliser le fait que la particule ne peut pas sortir de la boîte, on la décrit par un puit d'énergie potentielle infini, selon la situation présentée ci-dessous :



$V(x) = 0$ si $x \in]0, L[$
$V(x) \to +\infty$ si $x \notin]0, L[$

Pour $x \in]0, L[$ on étudie un état stationnaire quantique de la particule d'énergie E, de la forme : $\Psi_{\text{stat}}(x,t) = \varphi(x)\, e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$.

1) Montrer que $\varphi(x) = A\, e^{ikx} + B\, e^{-ikx}$ et donner l'expression de k en fonction de E, $\hbar$ et m. Quelles sont les conditions aux limites que doit vérifier φ en $x = 0$ et en $x = L$?

2) Montrer qu'il en résulte que l'énergie E est quantifiée. On montrera qu'elle s'écrit nécessairement sous la forme :

$$E = E_n = n^2\, E_0,\ \ n \in \mathbb{N}^*$$

Donner l'expression de E_0 en fonction de $\hbar$, L et m.

3) À l'énergie E_n est associée la partie spatiale $\varphi_n(x)$. Expliciter l'expression de $\varphi_n(x)$ et montrer que l'interpréation probabiliste de la fonction d'onde permet de déterminer la constante complexe qui intervient dans l'expression de φ_n. Déterminer cette constante en fonction de L.

4) Représenter la densité de probabilité de présence de la particule $\rho(x) = |\Psi_{\text{stat}}(x,t)|^2$ en fonction de $x \in [0, L]$ pour $n = 1$ et $n = 2$.

5) On s'intéresse au cas où $n = 1$. Déterminer $\langle X\rangle$, $\langle X^2\rangle$ et l'indétermination quantique sur la position ΔX. On donne :

$$\sin^2(u) = \frac{1-\cos(2u)}{2}$$