

## TD n°26 - Particule quantique dans un potentiel

### 1 Énergie minimale d'un oscillateur harmonique

Un oscillateur harmonique unidimensionnel a une masse  $m$  et une pulsation propre  $\omega_0$ . Comme dans le cas classique, il est soumis à une énergie potentielle  $V(x) = \frac{1}{2}m\omega_0^2x^2$ .

- Utiliser la relation d'incertitude de Heisenberg spatiale pour montrer que la valeur moyenne de l'énergie de cet oscillateur est bornée inférieurement :

$$\langle E \rangle \geq \frac{\hbar^2}{8m(\Delta x)^2} + \frac{1}{2}m\omega_0^2(\Delta x)^2,$$

où  $\Delta x$  représente l'indétermination quantique sur la position  $x$  de l'oscillateur.

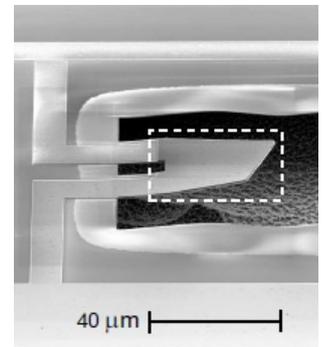
- Déterminer la valeur minimale que peut prendre la valeur moyenne de l'énergie de l'oscillateur en fonction de  $\hbar$  et  $\omega_0$ . Exprimer l'amplitude de l'indétermination quantique  $\Delta x$  correspondante en fonction de  $m$ ,  $\hbar$  et  $\omega_0$ .
- À température non nulle, en raison de l'agitation thermique, il existe aussi des fluctuations  $\Delta x_T$  de la position de l'oscillateur autour de sa valeur moyenne.

- Montrer que ces fluctuations sont liées à la température  $T$  par  $\Delta x_T = \sqrt{\frac{k_B T}{m\omega_0^2}}$ , où  $k_B = 1,39 \cdot 10^{-23} \text{ J.K}^{-1}$  est la constante de Boltzmann.

- Donner l'expression de la température  $T_c$  en dessous de laquelle les fluctuations quantiques sont plus importantes que les fluctuations thermiques.

- Donner la valeur numérique de  $T_c$  dans le cas d'un oscillateur mécanique constitué d'une masse suspendue à un ressort. Choisir une fréquence d'oscillation correspondant à une expérience réalisable en TP. Commenter la valeur obtenue.

En 2010, une équipe de l'Université de Californie à Santa Barbara a atteint le régime quantique en amenant un microrésonateur piézo-électrique de fréquence très élevée ( $6,0 \text{ GHz}$ ) à une température de  $25 \text{ mK}$  (cf figure ci-contre). Commenter le choix d'un oscillateur de fréquence élevée et d'une température aussi faible.



### 2 Descente d'une marche de potentiel

Une particule de masse  $m$  et d'énergie  $E > 0$  s'apprête à descendre une marche de potentiel.

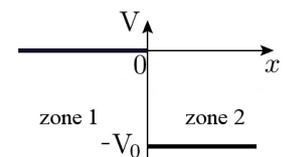
- Quel serait le mouvement classique ?

- Résoudre l'équation de Schrödinger dans les deux zones.

- Quelles relations de continuité utiliser ?

En déduire la probabilité qu'une particule d'énergie  $E = \frac{V_0}{2}$  fasse demi-tour.

- Commenter quelques situations particulières.



### 3 Atome d'hydrogène

Dans son état fondamental d'énergie  $E_0$ , l'électron (de masse  $m$ ) d'un atome d'hydrogène H dont le proton est supposé fixe en  $O$  (origine des coordonnées) est décrit par une fonction d'onde à symétrie sphérique :

$$\Psi_{\text{stat}}(r, t) = A \exp\left(-\frac{r}{a}\right) \exp\left(-i\frac{E_0 t}{\hbar}\right)$$

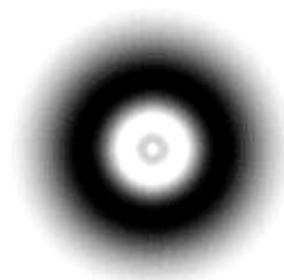
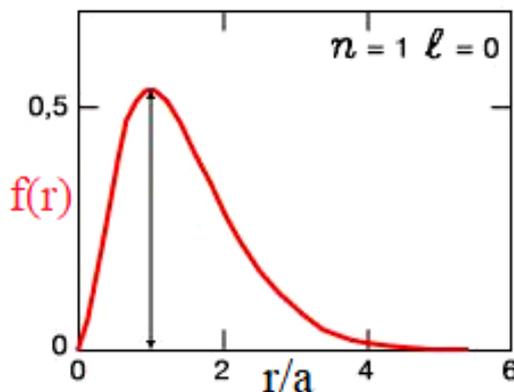
où  $r$  est la distance à  $O$ ,  $A$  une constante réelle positive et  $a = \frac{\hbar^2 4\pi\epsilon_0}{me^2}$ . On donne pour  $\alpha > 0$  :

$$\int_0^{+\infty} x^n \exp(-\alpha x) dx = \frac{n!}{\alpha^{n+1}}$$

Données numériques :

$$e = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{C}; \epsilon_0 = 8,85 \cdot 10^{-12} \text{ F.m.m}^{-1}; \quad m = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$$

1. Déterminer la valeur de  $A$ .
2. En utilisant le volume d'une coquille sphérique comprise entre les sphères de rayon  $r$  et  $r+dr$ , déterminer la probabilité pour que l'électron soit situé dans cette coquille en la mettant sous la forme :  $d\mathcal{P} = f(r)dr$  et en donnant l'expression de  $f(r)$ .
3. Pour quelle valeur  $r_0$  de  $r$  la densité linéique de probabilité  $f(r)$  est-elle maximale ? Quelle est la valeur moyenne  $\langle r \rangle$ ? A.N. : calculer  $\langle r \rangle$ .
4. Donner l'expression de l'énergie potentielle  $V(r)$  de l'électron.
5. En utilisant l'équation de Schrödinger indépendante du temps, en déduire l'expression littérale de l'énergie  $E_0$  de cet état fondamental, en fonction de  $e$ ,  $\epsilon_0$  et  $r_0$ . A.N. Calculer  $E_0$  en Joules puis en eV.

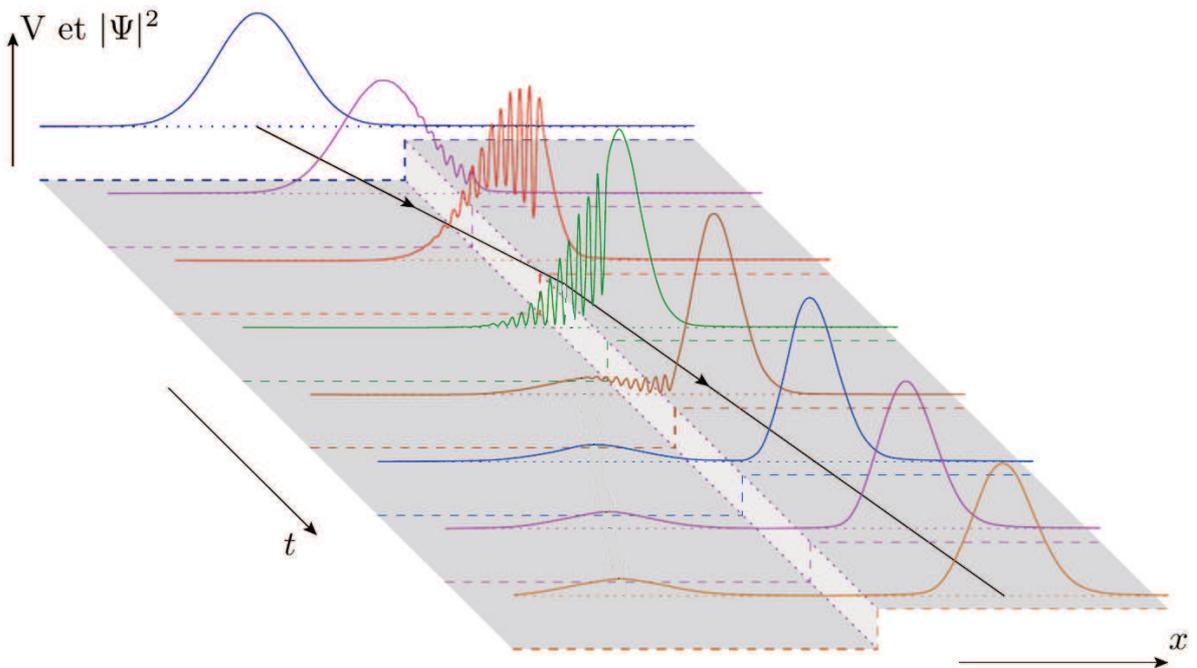


### 4 Paquets d'onde et marche de potentiel

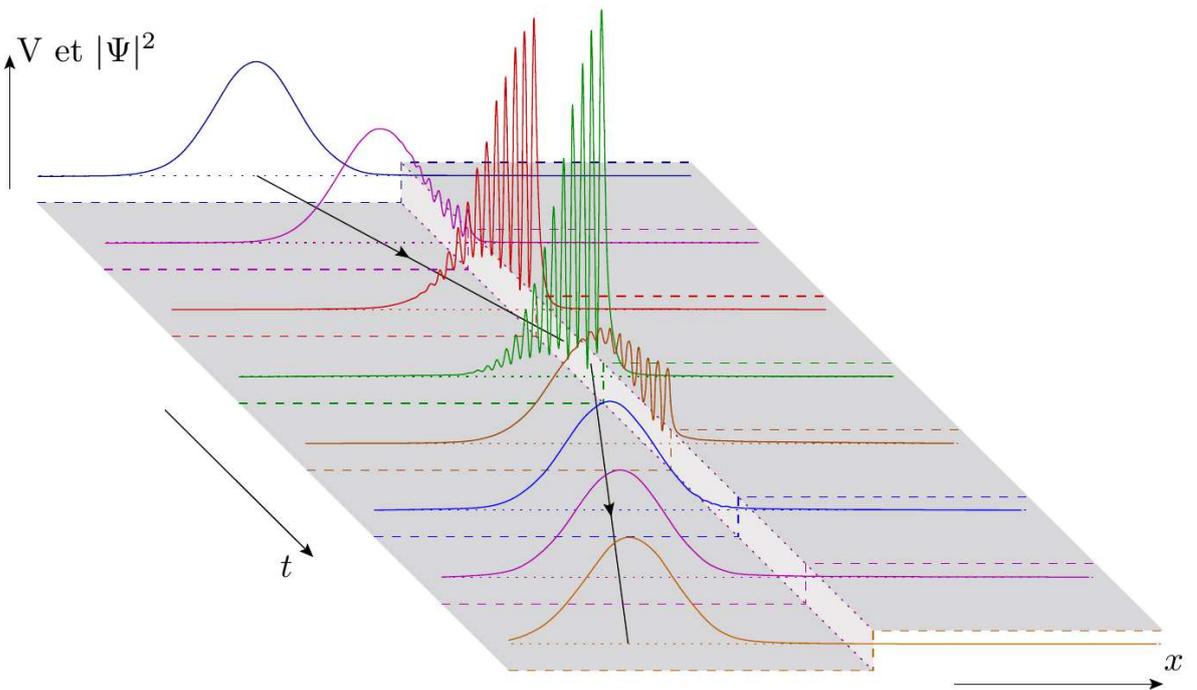
On peut représenter un quanton localisé par un paquet d'ondes. On représente sur les figures suivantes la densité de probabilité de présence d'un quanton incident  $|\Psi(x,t)|^2$ , en fonction du temps et de la position  $x$ , ainsi que le potentiel  $V(x)$  auquel il est soumis. Les lignes noires orientées représentent la position classique du quanton.

Commenter le plus complètement possible l'évolution du paquet d'ondes dans les cas :

1. Marche de potentiel, cas  $E > V_0$



2. Marche de potentiel, cas  $E < V_0$



## 5 Marche de potentiel infinie

1. Que deviennent les états stationnaires d'énergie  $E > 0$  pour la marche de potentiel définie par une énergie potentielle  $V(x < 0) = 0$  et  $V(x > 0) = V_0$ , lorsque  $V_0 \rightarrow \infty$  ?
2. Comparer les comportements classique et quantique pour un quanton incident d'énergie  $E > 0$  sur cette marche de potentiel infinie.

## 6 Quanton dans un potentiel harmonique

On considère un quanton dont la fonction d'onde s'écrit  $\underline{\psi}(x, t) = \underline{A} \exp\left(-\frac{m\omega_0 x^2}{2\hbar} - i\frac{\omega_0}{2}t\right)$  où  $\omega_0$  est une constante.

1. Quelles sont les valeurs possibles de  $\underline{A}$  ? On retiendra seulement la valeur réelle pour la suite.
2. Quel type d'état correspond à cette fonction d'onde ? Quelle est l'énergie du quanton ?
3. A quelle énergie potentielle  $V(x)$  est soumis ce quanton ? Commentaire ?
4. Quelles sont la valeur moyenne  $\langle x \rangle$  et la valeur quadratique moyenne  $\langle x^2 \rangle$  de  $x$  ?  
Bien vérifier l'homogénéité.
5. Caractériser l'étalement des impulsions  $p_x$  selon l'axe des  $x$ .

Données :  $\int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-\alpha u^2) du = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$  ;  $\int_{-\infty}^{+\infty} u^2 \exp(-\alpha u^2) du = \sqrt{\frac{\pi}{4\alpha^3}}$  ;  $\langle f(x) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) |\underline{\psi}|^2 dx$

## 7 Enrichissement isotopique

On étudie le mouvement d'une particule quantique dans le potentiel  $V(x)$  suivant

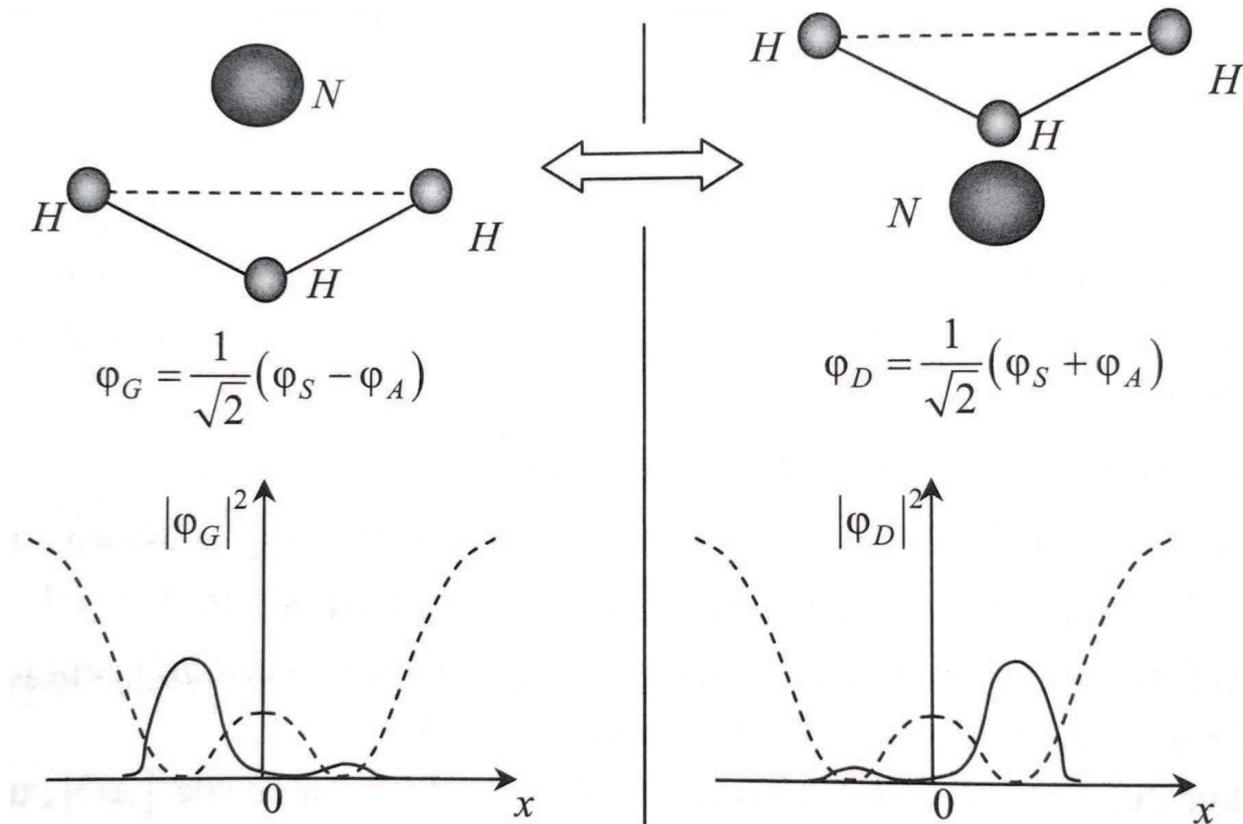
$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{pour } x < 0 \text{ (région I)} \\ V_0 > 0 & \text{pour } x \geq 0 \text{ (région II)} \end{cases}$$

Une source envoie, depuis  $-\infty$ , un faisceau de particules quantiques constitué d'un mélange de deux isotopes. On souhaite utiliser le phénomène de réflexion sur la marche de potentiel pour modifier la composition isotopique du mélange.

1. 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 l'on veut modifier la composition isotopique du mélange. Prévoir qualitativement si le faisceau réfléchi est plus riche ou plus pauvre en isotope de plus grande masse.
2. Les particules quantiques ont une masse  $m$  et une énergie  $E > V_0$ . Déterminer la probabilité de réflexion  $R$  d'une particule quantique par la marche de potentiel. Représenter l'allure de  $R$  en fonction de  $E$  pour  $E > V_0$ . Compléter ce graphe en représentant aussi  $R$  pour  $E < V_0$ .
3. On se place dans la limite où  $E \gg V_0$ .
  - (a) Donner l'expression approchée de  $R$  correspondant à cette limite.
  - (b) On note  $m_1$  et  $m_2$  les masses des deux isotopes qui forment le faisceau de particules quantiques incidentes. Toutes ces particules quantiques sont envoyées avec la même vitesse. Expliquer pourquoi les coefficients de réflexion  $R_1$  et  $R_2$  diffèrent pour les deux isotopes et exprimer le rapport  $R_1/R_2$  en fonction du rapport des masses  $m_1/m_2$ .
  - (c) Le faisceau réfléchi est-il enrichi en isotope le plus lourd ou le plus léger ?
4. Quelle autre méthode de séparation plus efficace aurait-on pu envisager ?

## 8 Oscillations quantiques de la molécule d'ammoniac

Dans la molécule d'ammoniac, le plan des trois hydrogènes peut se trouver au dessus ou au dessous de l'atome d'azote, la molécule se retournant « comme un parapluie » pour se trouver dans l'un de ces états stables.



Le problème se ramène à l'étude d'une particule fictive (associée aux trois hydrogènes) dans un double puits de potentiel (en pointillés sur la figure), pouvant passer d'un puits à l'autre par *effet tunnel*.

Dans l'état fondamental, cela se traduit par les deux fonctions d'onde (supposées réelles), solutions de l'équation de SCHRÖDINGER stationnaire : l'une  $\varphi_S$  symétrique par rapport à l'axe de la molécule et l'autre  $\varphi_A$  antisymétrique, dont les énergies respectives sont  $E_S$  et  $E_A$ .

Pour représenter l'état de la molécule dans l'une ou l'autre de ses configurations stables, on construit les combinaisons linéaires normalisées de  $\varphi_S$  et  $\varphi_A$  :

$$\varphi_G(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_S(x) - \varphi_A(x)) \quad \text{et} \quad \varphi_D(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_S(x) + \varphi_A(x))$$

Ces fonctions d'onde, droite  $\varphi_D$  et gauche  $\varphi_G$ , décrivent à l'instant initial les états où pratiquement toute la probabilité de présence, donnée par  $|\varphi_{G,D}|^2$  de la particule fictive se trouve d'un côté ou de l'autre de l'atome d'azote, c'est-à-dire respectivement dans le puits de gauche ou celui de droite, comme l'illustre la figure ci-dessus.

1. On se place dans le cas où à l'instant initial la molécule a été préparée dans son état décrit par la fonction d'onde  $\varphi_D$ , donc la particule fictive est initialement localisée dans le puits de droite. Donner l'expression de la fonction d'onde  $\Psi(x, t)$  représentant cet état à un instant  $t$ .
2. On pose  $\omega = \frac{E_A - E_S}{\hbar}$ . Montrer en explicitant  $|\Psi(x, t)|^2$  qu'au bout d'un temps  $T$  que l'on exprimera en fonction de  $\omega$ , la particule fictive est dans le puits de gauche.
3. En exprimant judicieusement la densité de probabilité  $|\Psi(x, t)|^2$ , montrer que la molécule se retourne périodiquement. Évaluer la fréquence de retournement, compte tenu de la valeur numérique  $E_A - E_S = 1.0 \times 10^{-4}$  eV.

## 9 Radioactivité $\alpha$ du bismuth (modèle de Gamow)

L'isotope radioactif du Bismuth  ${}_{83}^{212}\text{Bi}$  se désintègre en un isotope du thallium, noté Tl, en émettant une particule  $\alpha$  ( ${}^4_2\text{He}$ ) d'énergie  $E = 6.0 \text{ MeV}$ . On donne 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  $E$  :

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



1. (a) La photographie ci-contre représente du bismuth pur (cube de droite), et un cristal de bismuth oxydé. Comment interpréter simplement les irisations présentes sur le cristal oxydé? Que peut-on en déduire?
  - (b) Sachant que le numéro atomique du Thallium est  $Z = 81$ , en déduire quel isotope  ${}^A_{81}\text{Tl}$  a été formé lors de la désintégration.
2. (a) Déterminer la distance  $r_0$  entre le noyau de thallium et la particule  $\alpha$  pour laquelle l'énergie  $E$  de cette dernière est égale à l'énergie potentielle électrostatique. Évaluer numériquement cette distance.
  - (b) Grâce à des expériences de diffusion, on a réussi à montrer que le rayon  $R$  d'un noyau de nombre de masse  $A$  est donné par la formule  $R = R_0 A^{1/3}$  avec  $R_0 = 1.2 \text{ fm}$ . Expliquer avec un modèle très simple pourquoi il n'est pas surprenant d'obtenir un rayon proportionnel à  $A^{1/3}$ . Déterminer la valeur numérique de  $R$  pour l'isotope précédent  ${}^A_{81}\text{Tl}$ .
  - (c) En déduire la valeur  $V_b$  du maximum de potentiel dans lequel évolue la particule  $\alpha$  à l'extérieur du noyau. Faire un schéma du potentiel vu par la particule  $\alpha$  en fonction de sa distance au noyau de Thallium. Pour  $r < R$ , on supposera que le potentiel est constant, égal à  $V_{\min} < 0$  pour rendre compte de l'interaction forte attractive dans le noyau. On fera figurer sur le schéma  $r_0$ ,  $R$ ,  $V_b$ ,  $V_{\min}$  et  $E$ .
  - (d) En choisissant comme valeur approchée de la barrière  $V_0 = V_b/2$ , évaluer la valeur numérique du coefficient de transmission  $T$ . Reprendre le schéma précédent pour préciser le modèle utilisé.
3. On cherche maintenant à rendre compte de la radioactivité  $\alpha$  du  ${}_{83}^{212}\text{Bi}$  avec le modèle unidimensionnel de Gamow. On suppose ici que la particule  $\alpha$  est piégée dans le noyau et fait des allers-retours à l'intérieur, avec une probabilité  $T$  de s'échapper par effet tunnel de part et d'autre du noyau. Dans ce cadre, la probabilité d'émettre une particule  $\alpha$  est donc proportionnelle au temps pendant lequel on fait l'observation. En notant  $d\mathcal{P}$  la probabilité élémentaire d'émission pendant  $dt$ , on peut donc écrire :

$$d\mathcal{P} = \frac{dt}{\tau}$$

où  $\tau$  est le temps de vie caractéristique de la désintégration de l'isotope radioactif<sup>1</sup>.

- (a) Montrer que pour une assemblée de  $N_0$  atomes radioactifs de  ${}_{83}^{212}\text{Bi}$  présents à  $t = 0$ , on observe une décroissance exponentielle de la radioactivité  $\alpha$  avec un nombre d'atomes radioactifs qui évolue au cours du temps selon la loi :

$$N(t) = N_0 e^{-\frac{t}{\tau}}$$

- (b) Exprimer alors le temps de demi-vie  $\tau_{1/2}$  en fonction de  $\tau$ .
- (c) On cherche maintenant à estimer  $\tau$  à l'aide du modèle d'une particule  $\alpha$  faisant des allers-retours à la vitesse  $v$  dans le noyau avec une probabilité  $T$  de sortir. Estimer l'ordre de grandeur de  $\tau$  en fonction de  $T$ ,  $v$  et  $R$ , puis en fonction de  $T$ ,  $m$ ,  $E$  et  $R$ .
- (d) En déduire pour finir l'ordre de grandeur du temps de vie, puis de demi-vie de l'isotope  ${}_{83}^{212}\text{Bi}$ . Expliquer pourquoi on s'attend à n'avoir qu'un accord très relatif avec l'observation expérimentale.

1. Pour un temps d'intégration  $dt$  tendant vers  $\tau$ , on retrouve bien une probabilité égale à 1 pour l'atome de se désintégrer.

Réponses : 2.(a)  $r_0 = \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 E} = 39 \text{ fm}$ ; 3.(b)  $\tau_{1/2} = \tau \ln(2)$ ; 3.(c)  $\tau = \frac{2R}{Tv} = \frac{R\sqrt{2m}}{T\sqrt{E}}$ .

### 10 Le retour du théorème d'équipartition - cas du puits quantique infini

Le but de cet exercice est de démontrer le théorème d'équipartition dans un cas particulier : celui du puits de potentiel infini de largeur  $L$  à "haute" température.

1. Montrer que les niveaux d'énergie accessibles pour une particule quantique de masse  $m$  piégée dans un puits de potentiel infini de largeur  $L$  peuvent s'écrire :

$$E_n = n^2 E_0 \quad \text{avec} \quad n \in \mathbb{N}$$

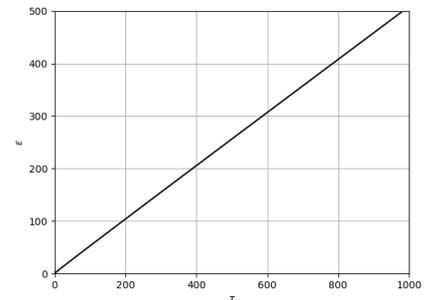
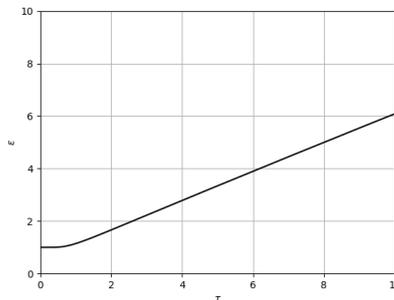
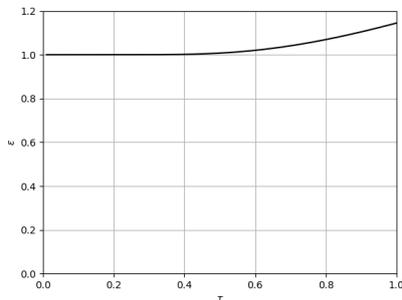
avec  $E_0$  une constante à déterminer.

2. Quel niveau d'énergie peut-on prévoir à "très basse" température ? On précisera ce que signifie le terme de "très basse" température.
3. On considère maintenant que la température  $T$  est suffisante pour que de nombreux niveaux soient peuplés. En déduire une expression de la valeur moyenne  $\langle E \rangle$  de l'énergie de la particule. En déduire qu'on peut écrire :

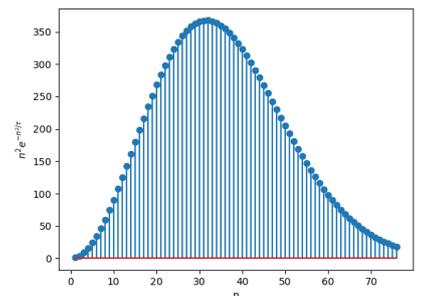
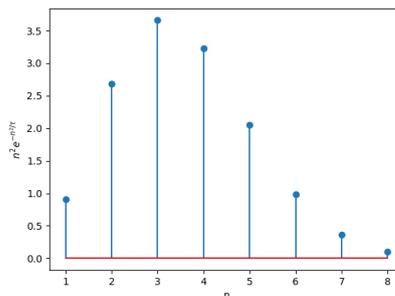
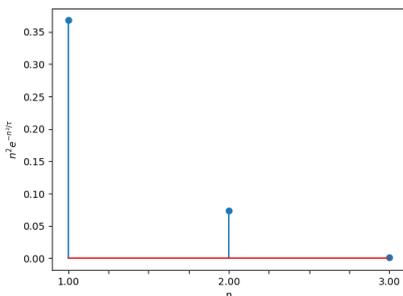
$$\epsilon = \frac{\sum_{n=1}^{\infty} n^2 \exp\left(-\frac{n^2}{\tau}\right)}{\sum_{n=1}^{\infty} \exp\left(-\frac{n^2}{\tau}\right)}$$

où  $\epsilon$  et  $\tau$  sont des grandeurs adimensionnées dont on précisera l'expression.

4. Commenter les figures ci-dessous, qui représentent  $\epsilon$  en fonction de  $\tau$  à différentes échelles. En particulier, quelle conjecture peut-on raisonnablement faire ?



5. Justifier pourquoi on peut approximer la somme infinie du numérateur par une intégrale en utilisant les figures ci-dessous représentant  $n^2 \exp\left(-\frac{n^2}{\tau}\right)$  en fonction de  $n$  respectivement pour  $\tau = 1$ ,  $\tau = 10$  et  $\tau = 1000$ . En déduire une nouvelle expression de  $\epsilon$  faisant intervenir des intégrales.



6. Calculer l'expression à l'aide d'une intégration par partie et en déduire le théorème d'équipartition dans ce cas particulier.