

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

1 Énergie minimale d'un oscillateur harmonique

A savoir...

Exercice fondamental. Beaucoup de notions intéressantes, et il permet de faire le lien avec une situation concrète appuyée par des A.N. parlantes.

$$\langle x \rangle = 0 \quad V(x) = \frac{1}{2} m \omega_0^2 x^2$$

$$\langle p_x \rangle = 0$$

① L'énergie de l'oscillateur est donnée par

$$E = E_c + E_p \quad \text{avec} \quad E_p = V(x) = \frac{1}{2} m \omega_0^2 x^2$$

$$\text{et} \quad E_c = \frac{1}{2} m v_x^2$$

La valeur moyenne de x et de v_x sont nulles par symétrie du puits harmonique (parabole centrée en 0)

On peut estimer que $\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle}$ (valeur RMS, quadratique moyenne)

De même $\Delta v_x = \sqrt{\langle v_x^2 \rangle}$

Et conséquent

$$\langle E \rangle = \frac{1}{2} m \langle v_x^2 \rangle + \frac{1}{2} m \omega_0^2 \langle x^2 \rangle$$

$$\langle E \rangle = \frac{1}{2} m (\Delta v_x)^2 + \frac{1}{2} m \omega_0^2 (\Delta x)^2$$

D'après l'inégalité d'Heisenberg spatiale $\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$

$$\text{soit} \quad \Delta v_x \geq \frac{\hbar}{2m\Delta x}$$

$$(\Delta v_x)^2 \geq \frac{\hbar^2}{4m^2(\Delta x)^2}$$

En reportant dans la valeur moyenne de l'énergie :

$$\langle E \rangle \geq \frac{1}{2} m \cdot \frac{\hbar^2}{4m^2(\Delta x)^2} + \frac{1}{2} m \omega_0^2 (\Delta x)^2$$

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

② On cherche la valeur de Δx qui minimise $\langle E \rangle_{\min}$:

$$\frac{d\langle E \rangle_{\min}}{d(\Delta x)} = \frac{\hbar^2}{8m} \cdot \left(\frac{-2}{(\Delta x)^3} \right) + \frac{1}{2} m \omega_0^2 \cdot 2 \Delta x$$

$$0 = - \frac{\hbar^2}{4m(\Delta x)^2} + m \omega_0^2 \Delta x$$

$$\Delta x = \sqrt[4]{\frac{\hbar^2}{4m^2\omega_0^2}}$$

$$\Delta x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}}$$

L'énergie minimale moyenne correspondante vaut donc : $\langle E_{\min} \rangle = \frac{\hbar\omega_0}{2}$.

On notera qu'on obtient ici un résultat cohérent avec la répartition des niveaux d'énergie pour un oscillateur harmonique quantique déjà rencontrée en exercice :

$$E_n = \hbar\omega_0 \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

En effet, l'énergie minimale est obtenue pour $n = 0$, soit $E_0 = \frac{\hbar\omega_0}{2}$

3.a) D'après le théorème d'équipartition de l'énergie, les oscillateurs étant indépendants les uns des autres, les fluctuations thermiques sur la position sont données par :

$$\langle V(x) \rangle = \left\langle \frac{1}{2} m\omega_0^2 x^2 \right\rangle = \frac{1}{2} m\omega_0^2 \Delta x_T^2 = \frac{1}{2} k_B T$$

On en déduit directement :
$$\Delta x = \sqrt{\frac{k_B T}{m\omega_0^2}}$$

③ b)
$$\Delta x_T = \sqrt{\frac{k_B T}{m\omega_0^2}}$$

$\Delta x = \Delta x_{T_C}$ pour la température limite

$$\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}} = \sqrt{\frac{k_B T_C}{m\omega_0^2}} \quad \text{soit} \quad T_C = \frac{\hbar\omega_0}{2k_B}$$

Avec $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ et $\frac{\omega_0}{2\pi} = f_0$ on peut aussi écrire $T_C = \frac{hf_0}{2k_B}$

c) Pour un oscillateur mécanique usuel, ^(ressort TP) on a des fréquences de l'ordre de quelques hertz. Prenons $f_0 = 10$ Hz
La température T_C correspondante est alors

$$T_C = \frac{6,63 \cdot 10^{-34} \times 10}{2 \times 1,39 \cdot 10^{-23}} = 2,3 \cdot 10^{-10} \text{ K}$$

Bien qu'il fasse parfois frisquet dans les salles de TP, on n'atteint jamais cette température, et les effets quantiques d'indétermination sont négligeables devant les erreurs de mesure.

Pour une fréquence plus élevée, T_C augmente et on peut espérer refroidir le système mécanique à des températures inférieures à T_C .

Pour $f_0 = 6 \cdot 10^9$ Hz, il vient $T_C = \frac{6,63 \cdot 10^{-34} \times 6 \cdot 10^9}{2 \times 1,39 \cdot 10^{-23}} = 0,14 \text{ K}$

La température choisie pour l'expérience vérifie (largement) la condition $T < T_C$ ($T = 0,025 \text{ K}$)

2 Descente d'une marche de potentiel

A savoir...

Exercice parfait pour démarrer et voir si le cours est assimilé. L'essentiel y est déjà. A savoir parfaitement faire et rapidement.

1. Classiquement, la particule passe la falaise et sa vitesse augmente.
Quantiquement, on peut s'attendre à une probabilité non nulle de détection d'une particule réfléchie, cette probabilité devenant très faible pour $E \gg V_0$.

2. Pour $x < 0$ (zone 1), l'équation de Schrödinger stationnaire s'écrit $-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi''(x) = E\varphi$

$$\text{soit } \varphi'' + \frac{2mE}{\hbar^2}\varphi = 0 \text{ d'où } \boxed{\varphi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}} \text{ avec } \boxed{k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}}.$$

Pour $x < 0$ (zone 2), l'équation de Schrödinger stationnaire s'écrit $-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi''(x) - V_0\varphi = E\varphi$

$$\text{soit } \varphi'' + \frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}\varphi = 0 \text{ d'où } \boxed{\varphi = Ce^{ik'x}} + De^{-ik'x} \text{ avec } \boxed{k' = \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar}}$$

et $D = 0$ (aucune particule ne vient de $x \rightarrow +\infty$ ici).

3. On utilise la continuité de $\varphi(x)$ (toujours vraie) et de $\varphi'(x)$ en $x = 0$ (on rappelle que la continuité de la dérivée n'est assurée que lorsque le potentiel reste fini).

Ainsi, $A + B = C$ et $ik(A - B) = ik'C$ d'où $A\left(1 - \frac{k}{k'}\right) + B\left(1 + \frac{k}{k'}\right) = 0$.

$$\text{La probabilité de retour s'écrit } \boxed{R = \frac{|J_r|}{|J_i|} = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left(\frac{k - k'}{k + k'}\right)^2 = \left(\frac{\sqrt{E} - \sqrt{E + V_0}}{\sqrt{E} + \sqrt{E + V_0}}\right)^2} \simeq 0,07 = 7\%$$

ie pour $E = \frac{V_0}{2}$, la particule est détectée comme réfléchie dans 7% des cas.

4. Si $V_0 = 0$ ou si $V_0 \ll E$ (pas de marche), on retrouve bien $R = 0$.

Si $E = 0$, $R = 1$, ce qui est très surprenant : le quanton a "peur de tomber" et fait demi-tour...

3 Atome d'hydrogène

1) La fonction d'onde est normalisée $\Rightarrow \iiint_{\text{tout l'espace}} |\psi|^2 d\mathcal{E} = 1$

Or le problème est à symétrie sphérique, donc on peut intégrer sur θ et φ de sorte que :

$$\int_{r=0}^{+\infty} |\psi|^2 4\pi r^2 dr = 1$$

soit $4\pi A^2 \int_{r=0}^{+\infty} e^{-\frac{2r}{a}} r^2 dr = 1$

$\frac{2!}{(\frac{2}{a})^3}$ d'après la formule $\int_0^{\infty} x^n \exp(-\alpha x) dx = \frac{n!}{\alpha^{n+1}}$
avec $n=2$ et $\alpha = \frac{2}{a}$

Donc $4\pi A^2 \times \frac{2}{8} a^3 = 1 \Rightarrow A = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}$

2) La probabilité élémentaire de trouver l'e⁻ entre r et $r+dr$ vaut :

$$dP = |\psi|^2 4\pi r^2 dr \text{ donc}$$

$$f(r) = |\psi|^2 4\pi r^2 = \frac{4}{a^3} r^2 e^{-\frac{2r}{a}}$$

3) On cherche le maximum de densité de probabilité :

$$\frac{df}{dr} = \frac{4}{a^3} e^{-\frac{2r}{a}} \left[r^2 \times \left(-\frac{2}{a}\right) + 2r \right] = 0 \Rightarrow -\frac{r^2}{a} + r = 0$$

$$\Rightarrow r_0 = a$$

$$\begin{aligned} \langle r \rangle &= \int_0^{\infty} r dP = \int_0^{\infty} r \times \frac{4}{a^3} r^2 e^{-\frac{2r}{a}} dr \\ &= \frac{4}{a^3} \int_0^{\infty} r^3 e^{-\frac{2r}{a}} dr = \frac{4}{a^3} \times \frac{3!}{\left(\frac{2}{a}\right)^4} = \frac{3}{2} a \end{aligned}$$

$\left. \begin{array}{l} a \\ r_0 \end{array} \right\} \begin{array}{l} \text{cohérent} \\ \text{avec} \\ \text{la figure.} \end{array}$

\uparrow
 formule avec $n=3$ et $\alpha = \frac{r}{a}$

A.N: $a = 52,9 \text{ pm}$
 donc $\langle r \rangle = 79 \text{ pm}$

4) L'énergie pot. est ici d'origine électrostatique et correspond à l'interaction avec le noyau: $V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$ (proton chargé $+e$)

5) D'après l'équation de Schrödinger:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + V(r) \Psi \\ \Rightarrow i\hbar \times -i \frac{E_0}{\hbar} \Psi &= \frac{-\hbar^2}{2m} \times \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \Psi}{\partial r} \right) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \Psi \\ &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \times -\frac{1}{a} \Psi \right) \\ &= \frac{1}{r^2} \left[-\frac{2r}{a} \Psi + \frac{r^2}{a^2} \Psi \right] \\ &= \Psi \left[\frac{1}{a^2} - \frac{2}{ar} \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow E_0 &= \frac{-\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{a^2} - \frac{2}{ar} \right] - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \\ &= \frac{-\hbar^2}{2ma^2} + \frac{\hbar^2}{m \times \hbar^2 \times 4\pi\epsilon_0 r} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \end{aligned}$$

Donc $E_0 = \frac{-\hbar^2}{2ma^2}$

$$E_0 = \frac{-\hbar^2}{2m \left(\frac{\hbar^2 4\pi\epsilon_0}{me^2} \right)^2} = -\frac{me^4}{2\hbar^2 (4\pi\epsilon_0)^2}$$

on obtient bien une constante indépendante de a , et on trouve $E_0 < 0$, ce qui permet de comprendre la stabilité de l'atome d'hydrogène : l'électron est plus stable que s'il était libre ($E=0$).

A.N: $E_0 = -\frac{(1,05 \cdot 10^{-34})^2}{2 \times 9,1 \cdot 10^{-31} \times (52,9 \cdot 10^{-12})^2} \times \frac{1}{1,6 \cdot 10^{-19}} = -13,6 \text{ eV}$

On retrouve bien le niveau fondamental de l'atome d'hydrogène obtenu à l'aide du modèle de Bohr.

4 Paquets d'onde et marche de potentiel

A savoir...

Exercice d'application directe du cours, qui permet de lister les effets purement quantiques de ce type de phénomène.

- La trajectoire classique est visuellement cohérente avec la position moyenne (en terme de probabilité de présence !) du quanton incident puis transmis (en dehors des instants où le paquet d'ondes est déformé par le franchissement de la marche).
 - Il y a un ralentissement du déplacement entre avant et après la marche (ce qui est cohérent avec la théorie car l'énergie cinétique est réduite par l'augmentation de l'énergie potentielle à énergie totale fixée).
 - Après transmission, on observe un léger étalement du paquet d'ondes (possible car il y a dispersion...). Le même phénomène existe aussi pour le paquet d'ondes réfléchi mais est ici peu visible.
 - Un quanton peut être réfléchi par la marche et, dans ce cas, il se déplace avec une position moyenne respectant la trajectoire classique après rebond (ce rebond n'étant pas prévisible par la mécanique classique!).
 - Le paquet d'ondes, « dans la zone de la marche de potentiel » présente de fortes oscillations qui correspondent à des interférences quantiques (entre ondes incidentes et réfléchies).
- De même,
 - La trajectoire classique est visuellement cohérente avec la position moyenne (en terme de probabilité de présence !) du quanton incident puis réfléchi à un décalage près qui se produit lors de la réflexion en raison de l'évanescence dans la marche qui introduit un retard (le trait continu représentant la position classique de la particule est discontinu au niveau de la marche : il y a un retard pendant lequel la particule n'est ni incidente, ni réfléchie... C'est le moment pendant lequel l'onde dépasse dans la marche sous la forme d'une onde évanescence).
 - Le paquet d'ondes, « dans la zone de la marche de potentiel » présente de fortes oscillations qui correspondent à des interférences quantiques (entre ondes incidentes et réfléchies).

5 Marche de potentiel infinie

A savoir...

Exercice d'application directe du cours, intéressant à faire au début.

1. Puisque $V_0 \rightarrow +\infty$, on doit effectuer le passage à la limite sur les résultats obtenus dans le cas de la réflexion totale ($0 < E < V_0$) qui étaient

$$\varphi_{V_0}(x \leq 0) = A_1 e^{i k_1 x} + r A_1 e^{-i k_1 x} \quad \text{et} \quad \varphi_{V_0}(x \geq 0) = \tau A_1 e^{-\mu_2 x}$$

avec

$$r = \frac{k_1 - i \mu_2}{k_1 + i \mu_2} \quad \text{et} \quad \tau = \frac{2 k_1}{k_1 + i \mu_2}$$

ainsi que

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E} \quad \text{et} \quad \mu_2 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)}$$

Le passage à la limite $V_0 \rightarrow +\infty$ entraîne $\mu_2 \rightarrow \infty$, $\tau \rightarrow 0$ et $r \rightarrow -1$. Par conséquent,

$$\varphi_\infty(x \leq 0) = 2i A_1 \sin(k_1 x) \quad \text{et} \quad \varphi_\infty(x \geq 0) = 0$$

2. Dans le cas classique, une particule incidente rebondit en conservant la valeur de sa vitesse sur le mur de potentiel en $x = 0$.

Dans le cas quantique, comme $R = 1$, un quanton incident a une probabilité certaine d'être réfléchi par le mur. Toutefois, on conserve le phénomène quantique d'interférences déjà constaté dans le cas de la marche de potentiel même si l'on a perdu l'évanescence ! La perte de l'évanescence annule seulement le délai de réflexion.

Ajoutons que l'on voit que l'onde incidente $A_1 e^{i(k_1 x - \omega t)}$ avec $\omega = E/\hbar$, représentant l'amplitude de probabilité associée à un flux incident de quantons identiques indépendants d'impulsion parfaitement déterminée, conduit à une onde réfléchie de la même façon que lors de l'étude de la réflexion d'une onde électromagnétique plane progressive en incidence normale sur un plan conducteur parfait (coefficient de réflexion $r = -1$).

Attention !

Il est vraiment important de ne pas chercher à traduire la continuité de $d\varphi/dx$ en des lieux où l'énergie potentielle $V(x)$ n'est pas bornée.

Remarque

On notera que le résultat obtenu à la première question ne peut correspondre à un seul quanton car la fonction d'onde n'est pas normalisable. La fonction d'onde correspond davantage à un flux continu de particules.

6 Quanton dans un potentiel harmonique

A savoir...

Exercice d'application du cours, intéressant pour prendre en main la notion de fonction d'onde dans un cas autre que celui de la particule libre du cours. Exercice à traiter avant l'exercice 1 de préférence.

1. La condition de normalisation $\int_{-\infty}^{+\infty} |\underline{\psi}|^2 dx = 1$ donne $\int_{-\infty}^{+\infty} |\underline{A}|^2 \exp\left(-\frac{m\omega_0 x^2}{\hbar}\right) dx = |\underline{A}|^2 \sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega_0}} = 1$.

Ainsi, $\underline{A} = \left(\frac{m\omega_0}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \times e^{i\alpha}$ avec $\alpha \in \mathbb{R}$. On choisit $\alpha = 0$ pour la suite.

2. La fonction d'onde est à variables spatiales et temporelles séparées en complexe. C'est donc un état stationnaire de l'équation de Schrödinger d'après la dépendance en $e^{-i\frac{\omega_0}{2}t}$ ($|\underline{\psi}|$ est alors bien indépendant de t).

L'identification à $e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$ donne $E = \frac{1}{2}\hbar\omega_0$.

Remarque

|| Ce résultat n'a rien de surprenant puisqu'il s'agit d'un oscillateur harmonique dans son état fondamental, et on retrouve la formule évoquée en cours $E_n = \frac{\hbar\omega_0}{2}(n+1)$ dans le cas $n = 0$.

3. L'équation de Schrödinger s'écrit ici $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x) \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$.

Or $\frac{\partial \psi}{\partial x} = \underline{A} \left(-\frac{m\omega_0}{2\hbar} 2x\right) \exp\left(-\frac{m\omega_0 x^2}{2\hbar} - i\frac{\omega_0}{2}t\right)$ d'où $-\frac{\hbar^2}{2m} \left(-\frac{m\omega_0}{2\hbar} 2 + \left(-\frac{m\omega_0}{2\hbar} 2x\right)^2\right) + V(x) = i\hbar \times \left(-\frac{i\omega_0}{2}\right)$

donc $\frac{\hbar\omega_0}{2} - \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2 + V(x) = i\hbar \times \left(-\frac{i\omega_0}{2}\right) \Rightarrow V(x) = \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2$: énergie potentielle harmonique, correspondant au développement limité de l'énergie potentielle au voisinage d'un équilibre stable (pour modéliser, par exemple, le comportement d'un atome dans un solide).

4. $|\underline{\psi}|^2 = |\underline{A}|^2 \exp\left(-\frac{m\omega_0 x^2}{\hbar}\right)$ est une fonction paire, donc $x |\underline{\psi}|^2$ est une fonction impaire.

$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x |\underline{\psi}|^2 dx$ donne donc $\langle x \rangle = 0$. Ce résultat n'a rien de surprenant étant donné l'allure symétrique du puits. On aurait pu le donner directement, sans calcul. De même, il est évident que $\langle p_x \rangle$.

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 |\underline{\psi}|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 |\underline{A}|^2 \exp\left(-\frac{m\omega_0 x^2}{\hbar}\right) dx = \left(\frac{m\omega_0}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \sqrt{\frac{\pi}{4} \left(\frac{\hbar}{m\omega_0}\right)^3} : \langle x^2 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega_0}$$

On vérifie $[\langle x^2 \rangle] = \left[\frac{\hbar\omega_0}{m\omega_0^2}\right] = \left[\frac{\text{énergie}}{V(x)/x^2}\right] = [x^2]$ car $[V(x)] = [\text{énergie}]$.

5. L'inégalité de Heisenberg spatiale s'écrit (principe d'indétermination) : $\Delta x \Delta p_x \gtrsim \frac{\hbar}{2}$

$$\text{avec } \Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \sqrt{\langle x^2 \rangle} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}}$$

L'étalement (minimal) des impulsions est donc $\Delta p_x \gtrsim \sqrt{\frac{1}{2}m\hbar\omega_0}$.

7 Enrichissement isotopique

A savoir...

Exercice intéressant car il faut déjà avoir un peu de recul sur le cours pour retrouver rapidement R dans la question 2 sans questions intermédiaires.

1. On se place dans le cas où $E > V_0$, sinon il n'y a pas de transmission possible... Les effets quantiques sont plus marqués pour les particules de faible masse, qui sont donc davantage réfléchies.
2. On reprend les calculs du cours pour obtenir $R = \left(\frac{\sqrt{E} - \sqrt{E - V_0}}{\sqrt{E} + \sqrt{E - V_0}} \right)^2$.
3. (a) Si $E \gg V_0$, un développement limité en V_0/E permet de montrer que $R \simeq \frac{V_0^2}{16E^2}$.
(b) Sachant que pour une particule de masse m sans interaction, $E = E_c = \frac{1}{2}mv^2$, on en déduit (même potentiel V_0) : $\frac{R_1}{R_2} = \left(\frac{E_2}{E_1} \right)^2 = \left(\frac{m_2}{m_1} \right)^2$.
(c) Finalement, le faisceau réfléchi est donc enrichi en isotope le plus léger. En effet, si $m_2 > m_1$, alors $R_1 > R_2$, et il y a plus de particules légères réfléchies.
4. Dans le cas $E \gg V_0$, il y a $T \simeq 1$ pour les deux particules. Afin de les séparer plus efficacement, il aurait été préférable de choisir V_0 telle que $E_1 < V_0$ et $E_2 > V_0$, et dans ce cas les facteurs de transmission et de réflexion auraient été davantage différents (mais le calcul est beaucoup plus direct et sans intérêt, d'où la question précédente).

8 Oscillations de la molécule d'ammoniac

A savoir...

Exercice pas très difficile, mais très important. Il permet de traiter un cas d'état non stationnaire. Cet exercice est posé tel quel de manière à coller au cadre strict du programme, mais sa compréhension complète est tout à fait à votre portée avec les notions vues pendant cette année. J'ai donc détaillé l'explication en fin de corrigé. Les applications de ce système à deux niveaux ont été fondamentales. Regardez la vidéo !

- À $t = 0$, $\Psi(x, 0) = \Psi_D(x, 0)$, or cette fonction d'onde n'est pas un état stationnaire, donc on doit décomposer sur les états propres stationnaires Ψ_S et Ψ_A : $\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_S(x)e^{-iE_S t/\hbar} + \varphi_A(x)e^{-iE_A t/\hbar})$.
- $\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-iE_S t/\hbar} (\varphi_S(x) + \varphi_A(x)e^{-i\omega t})$. La fonction d'onde correspond à avoir une particule dans le puits de gauche lorsque $e^{-i\omega t} = -1$, soit pour la première fois lorsque $t = T = \frac{\pi}{\omega}$. Dans ce cas, $|\Psi(x, t = T)|^2 = |\varphi_G|^2$.
- Sachant que φ_S et φ_A sont réelles (on choisit la phase commune nulle, ce qui ne modifie en rien l'état de la particule ; seul le déphasage entre les deux est important), on peut écrire la densité de probabilité sous la forme :

$$|\Psi(x, t)|^2 = \Psi\Psi^* = \frac{1}{2} (\varphi_S(x) + \varphi_A(x)e^{-i\omega t}) (\varphi_S(x) + \varphi_A(x)e^{i\omega t})$$

$$\text{soit } |\Psi(x, t)|^2 = \frac{1}{2} |\varphi_S(x)|^2 + \frac{1}{2} |\varphi_A(x)|^2 + \varphi_S(x)\varphi_A(x) \cos(\omega t)$$

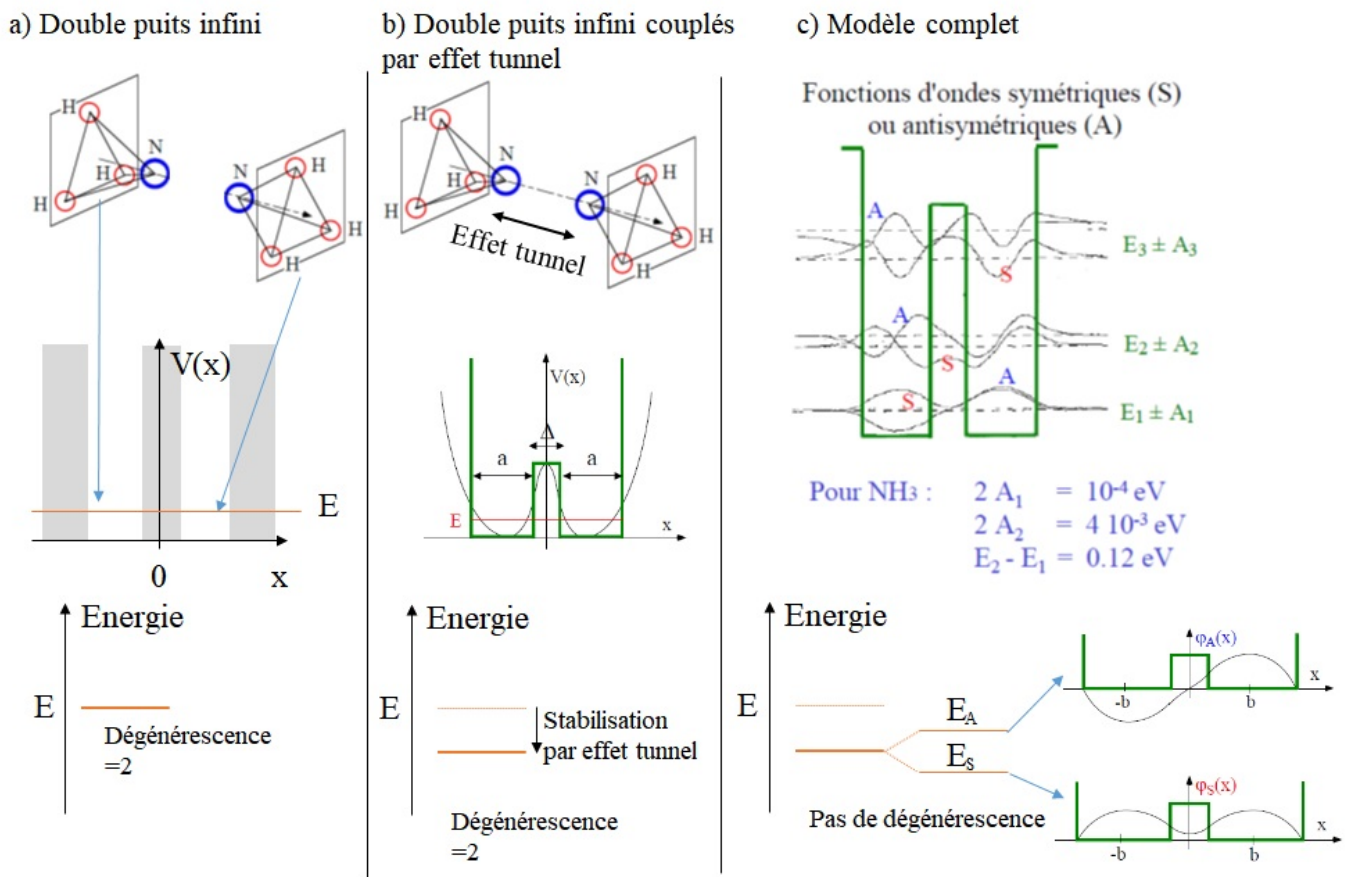
On peut donc dire que la molécule oscille entre l'état gauche et l'état droite - c'est à dire qu'elle se retourne périodiquement - à une période $2T$, et donc à une fréquence $\nu = \frac{1}{2T} = \frac{\omega}{2\pi} = \frac{E_A - E_S}{2\hbar\pi} \simeq 24 \text{ GHz}$.

Cette oscillation naturelle entre les deux configurations de la molécule d'ammoniac constitue un "dipôle oscillant", qui rayonne donc de l'énergie à la fréquence d'oscillation de 24 GHz, dans le domaine des micro-ondes.

Pour aller plus loin

Afin de comprendre plus en détail la modélisation proposée au début de cet exercice, il faut observer les diagrammes énergétiques de la molécule d'ammoniac.

En première approximation, selon une direction donnée notée x , la position du barycentre des atomes d'hydrogène ne peut se situer que d'un côté ou de l'autre de l'atome d'ammoniac. On peut donc tout d'abord modéliser cette configuration comme deux états dans **deux puits de potentiels infinis**. Le diagramme énergétique correspondant est un même niveau d'énergie pour les deux états fondamentaux de plus basse énergie (donc un seul niveau avec un degré de dégénérescence de 2 - cf Fig a) ci-dessous).



En réalité, le potentiel n'est pas infini entre les deux états, de sorte qu'il y a possibilité pour la molécule de se retourner spontanément par effet tunnel. Les niveaux d'énergie sont alors plus bas puisque la position accessible pour la particule passe d'une largeur a à une largeur $L = 2a + \Delta$ (cf Fig b) ci-dessus). En effet, nous avons vu dans le cas du puits quantique que l'énergie d'une particule était d'autant plus basse que le puits était large : $E_n = \frac{n^2 h^2}{8mL^2}$. On parle alors de **stabilisation par effet tunnel** du niveau fondamental.

De plus, le couplage entre les deux puits par effet tunnel entraîne une **levée de dégénérescence**, c'est à dire que le niveau fondamental (comme les autres niveaux excités - cf Fig c) ci-dessus) se scinde en deux et fait apparaître deux états propres du double puits appelés **état symétrique** Ψ_S (de plus basse énergie E_S et **état antisymétrique** Ψ_A d'énergie E_A plus élevée¹). Ce phénomène de modification des niveaux d'énergie par couplage a déjà été introduit sur les diagrammes énergétiques de O_2 et N_2 . Pour le fondamental ($n = 1$, la figure c) permet de retrouver la valeur séparant les deux niveaux d'énergie $E_{1,A}$ et $E_{1,S}$: $E_{1,A} - E_{1,S} = 1.0 \times 10^{-4} \text{ eV}$.

Application 1 : Lorsqu'on place de telles molécules préparées² dans l'état de plus haute énergie du fondamental ($\Psi_{1,A}$) dans une cavité micro-onde, lorsqu'un photon³ à la fréquence $\nu = 24 \text{ GHz}$ arrive dans la cavité, produit deux photons identiques grâce au phénomène d'émission stimulée. Le faisceau de micro-onde est donc très rapidement amplifié par passages successifs dans le gaz.

C'est ce qui constitue le MASER (micro-wave amplification by stimulated emission of radiation) à ammoniac, ancêtre du LASER (light amplification by stimulated emission of radiation).

Application 2 : Cette fréquence d'oscillation ultrastable (puisque'elle est basée sur les niveaux d'énergie

1. On peut se convaincre du fait que le niveau de l'état antisymétrique est plus haut que le niveau de l'état symétrique en comparant au cas du puits infini pour lequel on avait remarqué qu'un état avait une énergie qui croissait avec le nombre de passage par zéro de la partie spatiale de sa fonction d'onde.

2. Grâce à l'application d'un champ électrique.

3. Photon non visible ici, donc plutôt appelé radiation.

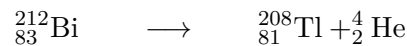
des molécules d'ammoniac) a été utilisée pour créer les premières horloges atomiques (1949). Cette vidéo d'époque (1962) mérite d'être visionnée : Horloge atomique à ammoniac; vous admirerez les commentaires du journaliste!

9 Radioactivité α du bismuth (modèle de Gamow)

A savoir...

Exercice pas évident, mais très important, car il permet de comprendre le modèle de Gamow de la radioactivité α en utilisant l'effet tunnel. Tout ceci figure dans le programme, et ce dont je vous ai parlé en cours ne suffirait pas pour vous en sortir correctement. A faire pour tout le monde donc, en vous aidant du corrigé au besoin.

1. (a) L'oxyde est composé de très minces couches d'oxydes d'épaisseur de l'ordre de grandeur du micromètre, de sorte qu'on observe des irisations à sa surface de la même façon que sur des bulles de savon ou sur une mince épaisseur d'essence sur une flaque.
- (b) Par simple conservation du nombre de masse, on obtient :



donc $A = 208$.

2. (a) En posant $Z = 81$, l'énergie potentielle électrostatique de la particule α est (on rappelle que $E_p = \frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon_0 r}$, avec ici $q_1 = +2e$ et $q_2 = +Ze$) :

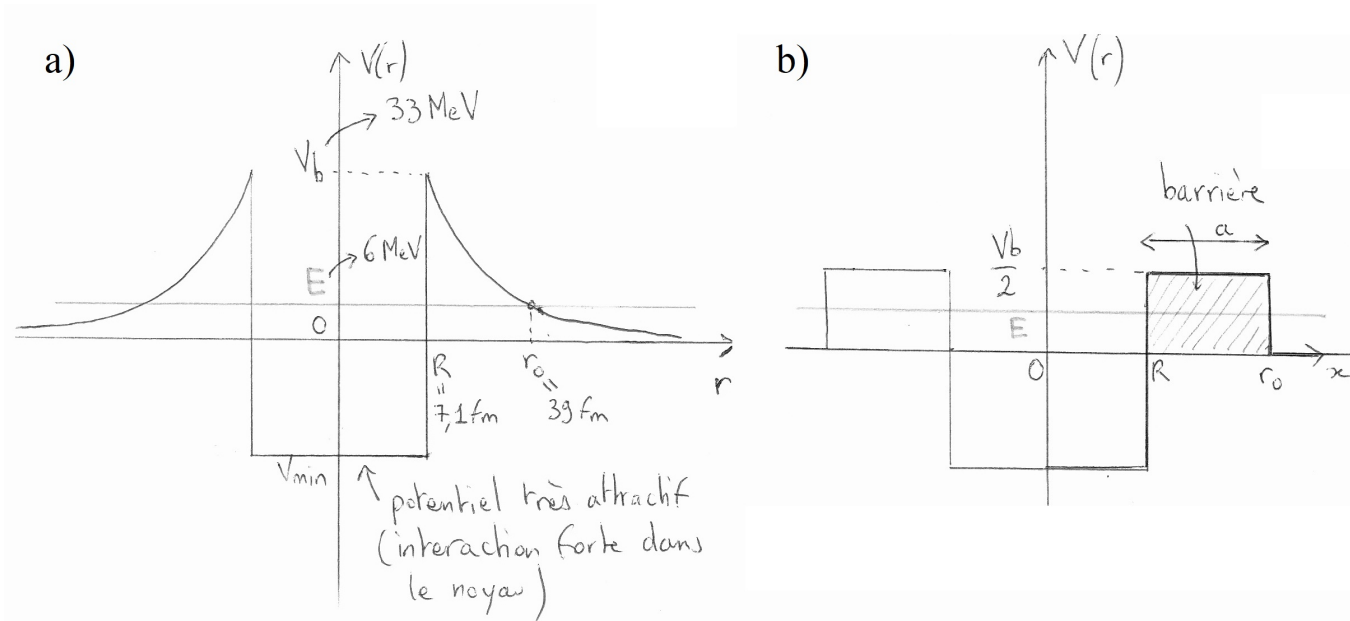
$$E_{pe} = \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

d'où $r_0 = \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 E} = 39 \text{ fm}$. On obtient bien une distance de l'ordre de grandeur d'un noyau atomique.

- (b) En faisant un modèle très simple d'un noyau sphérique homogène de masse volumique ρ , on a directement l'expression suivante pour la masse du noyau : $m_{\text{noyau}} = \frac{4}{3}\pi R^3 \rho$. Par ailleurs, $m_{\text{noyau}} \propto A$, et donc finalement : $A \propto R^3$, soit $R \propto A^{1/3}$.

Le rayon du noyau de Thallium est $R = 7.1 \text{ fm}$.

- (c) La valeur du pic de potentiel est alors $V_b = E_{pe}(r = R) = 33 \text{ MeV}$. Le schéma du potentiel vu par la particule α en fonction de sa distance r au noyau de Thallium est représentée dans la figure a) ci-dessous.



(d) On modélise la barrière coulombienne par une barrière rectangulaire de hauteur correspondant grossièrement à la moitié du maximum précédent : $V_0 = V_b/2 = 16.5 \text{ MeV}$, et de largeur $a = r_0 - R = 32 \text{ fm}$, on obtient : $T \simeq 1.6 \times 10^{-39}$. Le potentiel est maintenant représenté sur la figure b).

3. (a) Revenons tout d'abord sur l'expression $dP = \frac{dt}{\tau}$: on notera que si dt double, la particule fait deux fois plus d'allers-retours, et la probabilité de sortir par effet tunnel double bien, ce qui est conforme à la proportionnalité entre dP et dt .

En présence de N atomes dans un échantillon, pendant dt , il se désexcitera $NdP = N \frac{dt}{\tau}$ atomes, et le nombre d'atomes radioactifs de l'échantillon varie de $dN = -N \frac{dt}{\tau}$. On peut en déduire que $N(t)$ vérifie l'équation différentielle suivante :

$$\frac{dN}{dt} = -\frac{1}{\tau} N$$

qui s'intègre en

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

(b) Le temps de demi-vie $\tau_{1/2}$ est tel que $N(t = \tau_{1/2}) = \frac{N_0}{2}$, donc $N_0 e^{-\frac{\tau_{1/2}}{\tau}} = \frac{N_0}{2}$, soit

$$\tau_{1/2} = \tau \ln(2)$$

(c) La particule α a une probabilité T de sortir du noyau à chaque "rebond" sur la barrière coulombienne ; il faut donc en moyenne $1/T$ collisions pour que la particule quitte le puits de potentiel par effet tunnel (par exemple, si $T = 0.25$, la particule quittera en moyenne le noyau au bout de 4 rebonds). Avec une énergie de $E = 6.0 \text{ MeV}$, la vitesse de la particule α dans le puits de potentiel est $v = \sqrt{\frac{2E}{m}} = 1.7 \times 10^7 \text{ m s}^{-1}$ (extrêmement rapide ; tout juste non relativiste...). La particule entre en collision avec les bords du puits toutes les $\frac{2R}{v} = 8.4 \times 10^{-22} \text{ s}$. La durée de vie moyenne est alors :

$$\tau = \frac{1}{T} \times \frac{2R}{v} = \frac{R\sqrt{2m}}{T\sqrt{E}} = 5.3 \times 10^{17} \text{ s} \simeq 17 \text{ milliards d'années}$$

Le temps de demi-vie est du même ordre de grandeur. Cette valeur très importante ne correspond pas bien avec la valeur observée car le modèle utilisé est trop simple (modèle de barrière trop grossier, pas de particule α préexistante dans le noyau...), mais il permet cependant d'expliquer la très grande disparité des valeurs de temps de demi-vie (de $3,0 \times 10^{-7}$ s pour ${}_{84}^{212}\text{Po}$ à $4,4 \times 10^{17}$ s pour ${}_{90}^{232}\text{Th}$ par exemple) pour les différents radio-isotopes par le facteur exponentiel dans l'expression de T qui explique notamment la grande dépendance par rapport à l'énergie E des particules α émises.

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

A savoir...

Exercice explicitement au programme, pas très compliqué, et qui permet de faire un lien entre mécanique quantique et physique statistique. Il permet de démontrer le théorème d'équipartition dans un cas particulier : celui du puits quantique infini.

1. L'analogie avec la corde de Melde permet de montrer rapidement que :

$$E_n = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \quad \text{avec} \quad n \in \mathbb{N}, \quad \text{donc} \quad E_0 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}$$

2. On s'attend à ce que la particule dans le puits soit dans son état fondamental à très basse température, soit :

$$E = E_0 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}$$

Ceci est vérifié lorsque la température est très faible devant l'écart entre les deux premiers niveaux d'énergie, c'est à dire lorsque l'agitation thermique est insuffisante pour peupler le niveau $n = 2$, soit lorsque :

$$k_B T \ll E_2 - E_1 = 3E_0 = 3 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \quad \text{soit pour une température telle que} \quad T \ll \frac{3\hbar^2 \pi^2}{2mL^2 k_B}$$

3. La particule est seule dans le puits, avec $V = 0$ au fond du puits, sans interaction avec l'extérieur, à une température T suffisante pour que l'approximation continue soit valable, et on peut donc appliquer la statistique de Boltzmann :

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_{n=1}^{\infty} n^2 E_0 \exp\left(-\frac{n^2 E_0}{k_B T}\right)}{\sum_{n=1}^{\infty} \exp\left(-\frac{n^2 E_0}{k_B T}\right)}$$

On se ramène alors à l'expression proposée en introduisant les grandeurs adimensionnées suivantes :

$$\epsilon = \frac{\langle E \rangle}{E_0} \quad \text{et} \quad \tau = \frac{T}{E_0/k_B}$$

4. On voit qu'à haute température, on peut raisonnablement penser que :

$$\epsilon \propto \tau$$

On va maintenant chercher à déterminer la constante de proportionnalité par le calcul, dans le cas des hautes températures.

5. Les trois courbes montrent (comme on ne trace que le numérateur, cela donne la contribution de chaque niveau à l'énergie totale, sans normalisation) :
- qu'à basse température ($\tau = 1$), seuls les premiers niveaux sont peuplés, et seuls ceux-ci contribuent à l'énergie comme on s'y attendait.

- qu'à température intermédiaire ($\tau = 10$), davantage de niveaux sont peuplés, et c'est ici le niveau $n = 3$ qui contribue le plus à l'énergie. Ce niveau est moins peuplé que le fondamental, comme toujours avec la statistique de Boltzmann, mais ceci est contrebalancé par le fait que son énergie est $n^2 = 9$ fois plus importante.
- qu'à haute température ($\tau = 1000$), l'écart entre les contributions de deux n successifs est de plus en plus faible.

On va donc approximer chaque terme à une intégrale entre $n - 1$ et n , d'où (pour $\tau \gg 1$ seulement) :

$$\epsilon = \frac{\int_0^\infty x^2 \exp\left(-\frac{x^2}{\tau}\right) dx}{\int_0^\infty \exp\left(-\frac{x^2}{\tau}\right) dx}$$

comme il en est de même pour le dénominateur.

6. On peut utiliser une intégration par parties avec $v' = -2x/\tau \exp(-x^2/\tau)$ (et donc $v = \exp(-x^2/\tau)$) et $u = -x\tau/2$ (et donc $u' = -\tau/2$) :

$$\int_0^\infty x^2 \exp\left(-\frac{x^2}{\tau}\right) dx = \left[-\frac{x\tau}{2} \exp(-x^2/\tau) \right]_{x=0}^\infty - \int_0^\infty \frac{-\tau}{2} \exp(-x^2/\tau) dx = 0 + \frac{\tau}{2} \int_0^\infty \exp\left(-\frac{x^2}{\tau}\right) dx$$

Donc finalement le numérateur et le dénominateur se simplifie et :

$$\epsilon = \frac{\tau}{2}$$

En revenant aux notations initiales, on obtient :

$$\langle E \rangle = E_0 \epsilon = \frac{E_0 \tau}{2} = \frac{E_0 T}{2E_0/k_B} = \frac{k_B T}{2}$$

On obtient bien l'expression du théorème d'équipartition dans un cas particulier. En effet, dans le cas d'une particule quantique dans un puits infini à une dimension, d'énergie potentielle nulle au fond du puits, on a :

$$E = E_c + E_p = E_c = \frac{p_x^2}{2m}$$

L'énergie s'écrit donc comme un seul terme quadratique, d'où l'adéquation avec le théorème d'équipartition.