

TD MQ.2 ET 3 : Puits, marches et barrières de potentiel

CONSEILS A SUIVRE ; ERREURS A NE PAS COMMETTRE

Rappel : En notant $\rho_p(x)$ la densité linéique de probabilité de présence en x :

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x \rho_p(x) dx \quad \langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \rho_p(x) dx$$



Désigne un exercice classique, qu'il est nécessaire de savoir refaire de façon rapide et rigoureuse



Difficulté des techniques et outils mathématiques nécessaires



Difficulté d'analyse, de compréhension, prise d'initiatives

APPLICATIONS DE COURS

Exercice 1. Solutions stationnaires dans un puit de potentiel infini



2 | 2 ou 3

On considère une particule quantique de masse m enfermée dans un puits de potentiel infini caractérisé par un potentiel de la forme : $V(x) = \begin{cases} +\infty & \text{pour } x < 0 \text{ et } x > a \\ 0 & \text{pour } 0 \leq x \leq a \end{cases}$, vérifiant l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(M, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(M, t) + V(M, t) \Psi(M, t)$$

- 1- Discuter brièvement du comportement de la particule dans le cadre d'une description de mécanique classique.
- 2- On recherche des solutions stationnaires à l'équation de Schrödinger, établir les équations vérifiées ainsi que la forme générale de la solution associée à la partie temporelle.
- 3- Etudier le cas où $V(x)$ est infinie.

On étudie à présent les solutions stationnaires pour la plage de positions telle que $V(x) = 0$.

- 4- Donner l'expression simplifiée de l'équation de Schrödinger associée ainsi que les conditions aux limites vérifiées par la fonction d'onde stationnaire.
- 5- Résoudre complètement l'équation de Schrödinger pour $E < 0$, puis pour $E = 0$.
- 6- Déterminer la solution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps pour $E > 0$, et montrer que les différentes grandeurs caractéristiques de la particule sont quantifiées.
- 7- Etablir en particulier l'expression de l'énergie de la particule et de son état fondamental (état de plus basse énergie).

On cherche les solutions stationnaires sous leur forme $\Psi(x, t) = \varphi(x) \cdot f(t)$

Exercice 2. Energie minimale de confinement – critère semi-quantitatif



Le niveau fondamental dans le puits infini est d'énergie E_1 non nulle, telle que

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} > 0$$

On rappelle que dans le cas du puits infini, les solutions stationnaires à l'équation de Schrödinger sont la superposition de deux OPPH se propageant, avec la même amplitude, selon les x croissants et x décroissants. Pour un niveau d'énergie n , on a alors :

$$\underline{\psi}_n(x, t) = -i \sqrt{\frac{1}{2a}} \left[\exp \left(i \left(\frac{n\pi}{a} x - \frac{E_n}{\hbar} t \right) \right) - \exp \left(-i \left(\frac{n\pi}{a} x + \frac{E_n}{\hbar} t \right) \right) \right]$$

Nous nous proposons de retrouver à un facteur près cette expression en exploitant le critère d'indétermination d'Heisenberg.

- 1- Rappeler la définition quantitative de l'indétermination Δp_x sur la quantité de mouvement p_x .
- 2- Déterminer à l'aide d'un critère physique la valeur $\langle p_x \rangle$ de la moyenne de la quantité de mouvement p_x .
- 3- Quelle est l'indétermination spatiale Δx sur la position x de la particule ? Exploiter l'inégalité d'Heisenberg pour exprimer la moyenne du carré de la quantité de mouvement $\langle p_x^2 \rangle_{min}$ et en déduire l'énergie minimale de la particule qui par définition correspond à l'énergie minimale de confinement.

Exercice 3. Etats non stationnaires dans un puits infini



- 1 - Considérons une particule quantique piégée dans un puits infini de largeur a . Les états stationnaires associés correspondent à des fonctions d'onde $\underline{\psi}_n(x, t) = \varphi_n(x) \exp(-iE_n t/\hbar)$ avec,

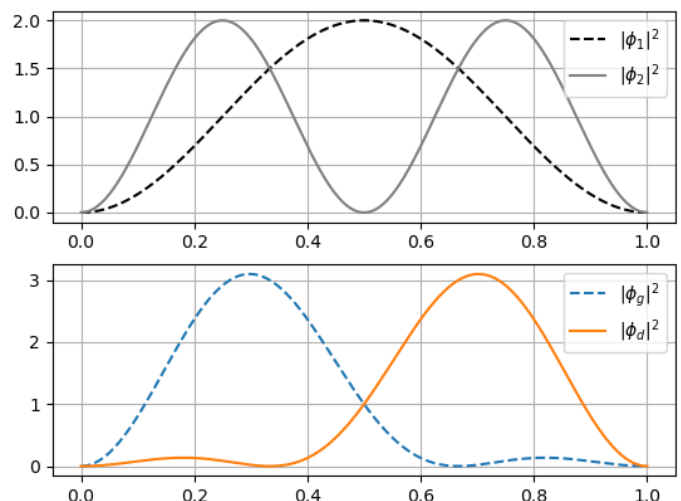
$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \quad \text{et} \quad E_n = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \quad \text{où } n \text{ est un entier}$$

- 2 - On pose $E_1 = \hbar \omega_0$ pour le niveau fondamental. Exprimer ω_0 en fonction de a, m et $\hbar$ puis les expressions E_n des niveaux d'énergie n en fonction de $n, \hbar$ et ω_0 .
- 3 - On considère l'état décrit par la fonction d'onde $\underline{\psi}_n(x, t)$ telle que $\underline{\psi}_n(x, t = 0) = \varphi_n(x)$. Donner l'expression de $\underline{\psi}_n(x, t)$ pour $t > 0$.
- 4 - On considère à présent l'état décrit par la fonction d'onde $\underline{\psi}(x, t)$ telle que :

$$\underline{\psi}(x, t = 0) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_1(x) + \varphi_2(x))$$

Correspondant à un état dit « superposé ». En utilisant le résultat de la question précédente, donner l'expression de $\underline{\psi}(x, t)$ pour $t > 0$.

- 5 - Calculer la densité de probabilité de présence du quanton. Montrer qu'il s'agit d'un état non stationnaire oscillant sinusoïdalement (en une position x donnée) au cours du temps à la pulsation $\omega_{osc} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar}$ entre deux états décrits par $\frac{1}{2}(\varphi_1(x) - \varphi_2(x))^2$ et $\frac{1}{2}(\varphi_1(x) + \varphi_2(x))^2$.
- 6 - On a représenté ci-contre les modules au carré des fonctions $\varphi_1(x), \varphi_2(x)$ ainsi que ceux des fonctions $\varphi_g(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_1(x) + \varphi_2(x))$ et $\varphi_d(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_1(x) - \varphi_2(x))$.



Que peut-on dire plus précisément de l'évolution du quanton dans le puits au cours du temps ?

Exercice 4. Solutions stationnaires à une marche de potentiel



Soit une particule quantique arrivant depuis $x < 0$ sur une marche

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{pour } x < 0 \\ V_0 & \text{pour } x \geq 0 \end{cases}.$$

- 1- Prévoir le comportement d'une particule classique (arrivant de $-\infty$) selon la valeur de E .

Dans la suite, nous allons chercher des solutions stationnaires associées à $E > 0$ solutions de

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} + V(x) \varphi(x) = E \varphi(x)$$

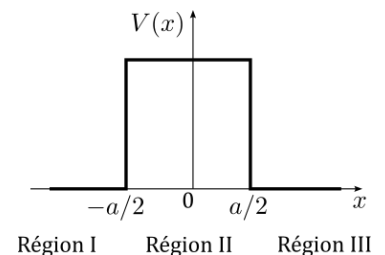
- 2 – Donner l'expression simplifiée de l'équation de Schrödinger dans la région I correspondant à $x < 0$ puis déterminer la forme $\varphi_I(x)$ des solutions.
- 3 – Donner l'expression simplifiée de l'équation de Schrödinger dans la région II correspondant à $x \geq 0$
- 4 – Dans le cas où $E \geq V_0$, établir l'expression générale $\varphi_{II}(x)$ des solutions dans la région II
- 5- Exploiter les conditions de continuité de la fonction d'onde et commenter les résultats obtenus.
- 6 – Dans le cas où $E < V_0$, établir l'expression générale $\varphi_{II}(x)$ des solutions dans la région II
- 7- Exploiter les conditions de continuité de la fonction d'onde et commenter les résultats obtenus.
- 8 - Montrer que la fonction d'onde dans la région II possède une structure d'onde évanescente
- 9- Déterminer la valeur de δ pour un électron de conduction au voisinage de la surface d'un métal dont le travail d'extraction (cf. effet photoélectrique) vaut 4,3 eV.

Exercice 5. Barrière de potentiel et effet tunnel



On modélise ici, toujours en géométrie unidimensionnelle, une barrière d'énergie potentielle de largeur a et de hauteur finie V_0 , par une fonction $V(x)$ paire :

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{pour } x < -\frac{a}{2} \text{ et } x > \frac{a}{2} \\ V_0 & \text{pour } -\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2} \end{cases}$$



On considère dans la suite un faisceau de particules quantiques incidentes, d'énergie E provenant de $-\infty$ (arrivant depuis les $x < 0$) et se dirigeant vers la barrière de potentiel.

- 1- Rappeler brièvement ce que serait le comportement de ce quanton s'il était régi par la mécanique classique.

On rappelle l'équation de Schrödinger indépendante du temps :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} + V(x) \varphi(x) = E \varphi(x)$$

- 2- Discuter brièvement le cas $E \geq V_0$. On se place dans toute la suite dans le cas $E < V_0$.
- 3- Déterminer la forme générale de l'équation de Schrödinger indépendante du temps dans les régions I et III correspondant à $x \notin \left[-\frac{a}{2}; \frac{a}{2}\right]$. On ne cherchera pas à déterminer les différentes constantes d'intégration qui apparaissent dans ces deux solutions.

- 4- Déterminer la forme générale de l'équation de Schrödinger indépendante du temps dans la région II telle que $x \in \left[-\frac{a}{2}; \frac{a}{2}\right]$. On posera $\alpha = \frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}$. On ne cherchera pas à déterminer les constantes d'intégration qui apparaissent.
- 5- Enoncer les propriétés générales de la fonction d'onde en $x = -\frac{a}{2}$ et $x = +\frac{a}{2}$ permettant d'écrire un système de 4 équations dont les 5 inconnues sont les constantes d'intégration des questions précédentes. *On ne cherchera pas à résoudre ce système.* Quelle dernière hypothèse permet de définir complètement la fonction d'onde en tout point x ?
- 6- Le coefficient de transmission T correspond à la probabilité pour la particule de traverser la barrière de potentiel. On peut établir son expression en fonction des caractéristiques de la barrière et de la particule :

$$T = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \operatorname{sh}^2(\alpha a)}$$

Par définition, une barrière épaisse est telle que sa largeur a est grande devant la distance caractéristique δ (en pratique, un facteur supérieur à 3 suffit). Donner l'expression approchée de ce facteur de transmission dans le cas d'une barrière épaisse et commenter le résultat obtenu

■ EXERCICES INCONTOURNABLES

Exercice 6. Puits infini et probabilité de présence



Une particule est dans son état fondamental dans un puits de potentiel infini entre $x = 0$ et $x = L$. Quelle est la probabilité pour la particule de se trouver dans l'intervalle $[L/4; 3L/4]$?

Exercice 7. Modèle de diode laser (D'après CCP 2017)



On modélise, en première approximation, une diode laser par un puits quantique rectangulaire infini de largeur L . Une particule quantique de masse m et d'énergie E , décrite par la fonction d'onde spatiale $\varphi(x)$ et soumise à l'énergie potentielle $V(x)$, satisfait l'équation de Schrödinger des états stationnaires :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + (V(x) - E) \varphi(x) = 0$$

La modélisation avec un puits quantique de hauteur infinie nous conduit à décrire l'énergie potentielle de la particule par :

$$V(x) = \begin{cases} +\infty & \text{pour } x < 0 \text{ et } x > L \\ 0 & \text{pour } 0 \leq x \leq L \end{cases}$$

1 - Écrire l'équation de Schrödinger des états stationnaires dans la zone où le potentiel est nul. En déduire la forme générale de la fonction d'onde spatiale.

2 - Justifier que $\varphi(x=0) = \varphi(x=L) = 0$ et que $\int_0^L |\varphi(x)|^2 dx$.

3 - Montrer que la fonction d'onde spatiale est quantifiée. Quelle analogie peut-on faire ?

4 - En déduire, pour $0 \leq x \leq L$, que la fonction d'onde spatiale s'écrit :

$$\varphi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} x\right)$$

5 - Établir la quantification de l'énergie de la particule.

6 - D'après le cliché ci-contre, déterminer l'énergie du niveau le plus bas, en supposant que la particule quantique placée dans le puits de potentiel est un électron. En déduire la longueur d'onde pour l'émission correspondant aux niveaux $n = 1$ et $n = 2$.

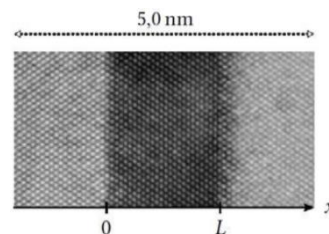


Figure 1 - image au microscope électronique d'une diode laser

Données : $m_e = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$; $\hbar = 1,0 \cdot 10^{-34} \text{ J.s}$

Exercice 8. États stationnaires du puits rectangulaire infini



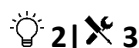
- 1) On considère un puits de potentiel infini, avec $V(x) = 0$ pour $0 < x < L$. Rappeler les fonctions d'onde $\Psi_n(x)$ d'une particule de masse m dans ce puits.
- 2) Donner en s'appuyant sur un argument physique la valeur moyenne $\langle x \rangle$ de la position x dans l'état n .
- 3) Calculer la valeur moyenne $\langle x^2 \rangle$ de x^2 dans l'état n .
- 4) En déduire l'indétermination sur la position, donnée par son écart-type : $\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$. Quelle est la limite de Δx lorsque le nombre quantique n dévient très grand ?
- 5) Pour un niveau d'énergie donné, quelles valeurs peut prendre la quantité de mouvement p_x ? Quel est l'écart type Δp_x sur celle-ci ? Montrer que l'inégalité de Heisenberg est vérifiée pour tout n . Pour quelle valeur le produit $\Delta p_x \cdot \Delta x$ est-il le plus petit ?

Exercice 9. Boîte quantique tridimensionnelle



- 1) On considère une boîte quantique tridimensionnelle telle que l'énergie potentielle est nulle pour $x \in [0; a]$; $y \in [0; b]$; $z \in [0; c]$, et infinie ailleurs. En admettant que l'on peut chercher les solutions stationnaires sous la forme $\varphi(x, y, z) = \varphi_x(x)\varphi_y(y)\varphi_z(z)$, trouver ces solutions, et les énergies associées.
- 2) Si $a = b = c$, quelle est la dégénérescence des trois premiers niveaux d'énergie ? (des niveaux d'énergie sont dits dégénérés lorsque ils ont la même énergie totale pour des caractéristiques différentes ; ainsi, une dégénérescence de 2 signifie qu'il existe deux états différents conduisant à la même énergie).

Exercice 10. Modèle unidirectionnel de l'atome d'hydrogène



Les états stationnaires à symétrie sphérique de l'atome d'hydrogène peuvent être modélisés à l'aide du modèle unidirectionnel suivant : l'électron est dans le puits d'énergie potentielle $V(x) = +\infty$ si $x < 0$, et $V(x) = -A/x$ si $x > 0$, avec $A = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$. On posera $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \approx \frac{1}{137}$ (constante de structure fine).

- 1) Montrer que $\varphi_1(x) = x \exp\left(-\frac{x}{a}\right)$ pour $x > 0$ et $\varphi_1 = 0$ pour $x < 0$ est solution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps pour une valeur de a que l'on déterminera en fonction de $\hbar, c, m$ et A . Faire l'A.N. pour $m_e c^2 = 511 \text{ keV}$ et $\hbar c = 197 \text{ eV.nm}$.
- 2) Etablir l'expression de la valeur de l'énergie E_1 et faire l'application numérique.
- 3) Normaliser la fonction d'onde en posant $\varphi(x) = B\varphi_1(x)$. Calculer B .
- 4) Représenter la densité de probabilité de présence en fonction de la variable r/a . À quelle distance la probabilité de trouver l'électron est-elle la plus grande ?

Exercice 11. Falaise de potentiel

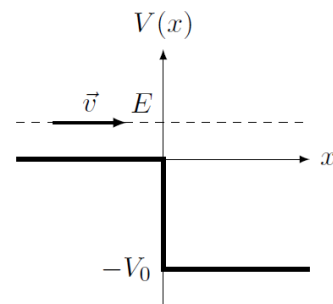
2 | ✖2 ou 3

1) Une particule de masse m et d'énergie E se dirige dans le sens des x croissants vers la falaise de potentiel représentée ci-contre. Quel est le mouvement de la particule en mécanique classique?

2) Résoudre l'équation de Schrödinger pour tout x , en distinguant les cas $x < 0$ puis $x > 0$, sans chercher à déterminer l'expression des constantes d'intégration qui apparaissent. Dans la région I correspondant à $x < 0$, on notera ψ_0 la constante associée à l'onde incidente et $r\psi_0$ celle associée à l'onde réfléchie. Dans la région II correspondant à $x > 0$, on notera $\tau\psi_0$ la constante associée à l'onde transmise.

3) Exploiter les conditions aux limites pour déterminer les coefficients r et τ . En déduire le coefficient de réflexion R défini comme $R = |r|^2$ en fonction de $\alpha = \sqrt{1 + \frac{V_0}{E}}$. Ce coefficient R correspond à la probabilité de réflexion d'une particule ; il donne le nombre de particules réfléchies par unité de temps divisé par le nombre de particules incidentes par unité de temps. Commenter les cas particuliers $V_0 = 0$, $E \ll V_0$ et $E \gg V_0$.

4) Quelle est la probabilité pour qu'une particule d'énergie $E = V_0/2$ fasse demi-tour ? Et si $E = V_0$?

**Exercice 12. Enrichissement isotopique**

2 | ✖2

On étudie le mouvement de particules dans un potentiel tel que $V(x) = 0$ pour $x < 0$ et $V(x) = V_0 > 0$ pour $x > 0$. On envoie sur cette marche de potentiel des particules venant de $x = -\infty$, formant un mélange de deux isotopes (ayant donc des masses différentes).

1) Pourquoi l'énergie E des particules doit-elle être supérieure à V_0 si l'on veut modifier la composition du mélange ? En quel isotope le faisceau réfléchi est-il appauvri ?

2) Pour une particule de masse m arrivant sur une marche de potentiel, on montre l'existence d'une onde réfléchie ; en notant ψ_0 la constante associée à l'onde incidente (amplitude de probabilité de l'onde) et $r\psi_0$ celle associée à l'onde réfléchie (voir exercice Falaise de potentiel avec $V_0 < 0$), le coefficient de réflexion pour l'amplitude de probabilité de l'onde réfléchie est (si $E > V_0$) :

$$r = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \quad \text{avec} \quad k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad \text{et} \quad k_2 = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}$$

3) On définit le coefficient de réflexion R comme $R = |r|^2$; ce coefficient R correspond à la probabilité de réflexion d'une particule ; il donne le nombre de particules réfléchies par unité de temps divisé par le nombre de particules incidentes par unité de temps. Quelle est la probabilité de réflexion R d'une particule par la marche de potentiel ? Représenter R en fonction de E (pour $E > V_0$, mais aussi pour $E < V_0$).

3) Que devient R si $E \approx V_0$? Dans cette hypothèse, on note m_1 et m_2 les masses des deux isotopes, toutes les particules incidentes ayant la même vitesse. Exprimer R_1/R_2 en fonction de m_1/m_2 .

Exercice 13. Radioactivité alpha et effet tunnel (d'après Mines Pont PC 2016)

2 ou 3 | ✖2 ou 3

Le tunnel de Fréjus abrite le Laboratoire Souterrain de Modane (LSM), sous 1700 mètres de roche. Unité mixte du CNRS et du CEA, le LSM est en fonctionnement depuis 1982. Le LSM est un site scientifique exceptionnel protégé des rayons cosmiques, où ont lieu des recherches sur le neutrino, la matière noire ainsi que des mesures de faibles radioactivités et leurs applications aux études sur l'environnement et aux datations. Le LSM est entre autres spécialisé dans la spectrométrie γ . Le rayonnement γ , qui suit généralement une émission α ou β , est issu du noyau de l'atome et correspond à une désexcitation de ce dernier. En effet, après une désintégration α ou β , le nouveau noyau n'est pas toujours dans un état d'équilibre énergétique : il possède encore « un trop plein

d'énergie », on dit qu'il est excité. Pour se débarrasser de cet excédent, il va émettre un ou plusieurs rayonnements γ d'énergie déterminée et caractéristique du noyau et donc de l'atome en présence. Nous allons dans cette partie nous intéresser plus particulièrement à la radioactivité α .

A - Le quanton libre

❑ 18 — Une particule quantique (quanton) est localisée sur un axe $(O, \hat{u}_x)$. L'état quantique de cette particule est caractérisé par une fonction d'onde : $\underline{\Psi}(x, t)$. Rappeler le postulat de Born donnant la probabilité dP que la particule se trouve dans l'intervalle $[x, x + dx]$ à l'instant t . En déduire la dimension de $\underline{\Psi}(x, t)$.

❑ 19 — Interpréter la propriété $\int_{-\infty}^{+\infty} |\underline{\Psi}(x, t)|^2 dx = 1$.

❑ 20 — Quelle est la signification physique de $\rho = |\underline{\Psi}(x, t)|^2$?

Lorsque la particule possède une énergie potentielle $V(x)$, la fonction $\underline{\Psi}(x, t)$ est solution de l'équation de Schrödinger non relativiste

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \underline{\Psi}(x, t)}{\partial x^2} + V(x) \underline{\Psi}(x, t) = i\hbar \frac{\partial \underline{\Psi}(x, t)}{\partial t}$$

avec $\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,05 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$.

❑ 21 — Rappeler ce qu'on entend par particule non relativiste. On cherche des états d'énergie stationnaire $\mathcal{E}$ de la forme $\underline{\Psi}(x, t) = \underline{\varphi}(x) \times \underline{f}(t)$. Déterminer l'équation de Schrödinger indépendante du temps vérifiée par $\underline{\varphi}(x)$ et la forme générale de $\underline{\Psi}(x, t)$ en fonction notamment de $\underline{\varphi}(x)$ et $\mathcal{E}$. Que peut-on dire de la probabilité de présence dP ?

On définit une particule libre comme une particule de masse m , d'impulsion $\vec{p}$ et d'énergie $\mathcal{E} = \frac{\vec{p}^2}{2m} > 0$ évoluant dans une région d'énergie potentielle $V(x)$ nulle.

❑ 22 — Déterminer la solution générale de l'équation de Schrödinger indépendante du temps pour une particule libre. Montrer que sa fonction d'onde $\underline{\Psi}(x, t)$ est la somme de deux ondes planes se propageant en sens inverse.

❑ 23 — Définir le vecteur d'onde $\vec{k}$ que l'on peut associer à cette particule. Déterminer la relation entre $\vec{p}$ et $\vec{k}$. Comment s'appelle cette relation ?

B – Effet tunnel

Le quanton d'énergie $\mathcal{E}$ arrive d'une région **I** définie par $x < 0$ et dans laquelle son énergie potentielle est $V(x) = 0$. Il est susceptible également de se trouver soit dans une région **II** telle que $0 < x < a$ où règne une énergie potentielle $V(x) = V_0$ ou bien dans une région **III** définie par $x > a$, dans laquelle $V(x) = 0$. On supposera que $0 < \mathcal{E} < V_0$ et l'on cherche des états stationnaires d'énergie $\mathcal{E}$.

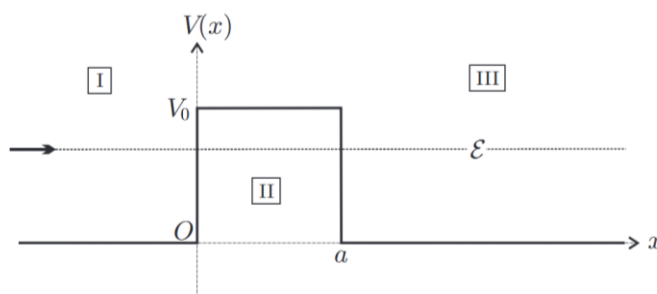


FIGURE 4 – Marche d'énergie potentielle

❑ 24 — Rappeler brièvement ce que serait le comportement de ce quanton s'il était régi par la mécanique classique.

❑ 25 — Déterminer la forme générale de la solution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps dans la région **I** et **III**. On ne cherchera pas à déterminer les 2 constantes d'intégration qui apparaissent dans la région **I** ni celle qui apparaît dans la région **III**.

□ 26 — Déterminer la forme générale de la solution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps dans la région [II]. On posera $q = \sqrt{\frac{2m(V_0 - \mathcal{E})}{\hbar^2}}$. Cette solution fait apparaître 2 constantes d'intégration que l'on ne cherchera pas à déterminer.

□ 27 — Énoncer les propriétés générales de la fonction d'onde en $x = 0$ et $x = a$ permettant d'écrire un système de 4 équations dont les 5 inconnues sont les constantes d'intégration des questions 25 et 26. *On ne cherchera pas à résoudre ce système.* Quelle dernière hypothèse permet de définir complètement la fonction d'onde en tout point x ?

Le coefficient de transmission T correspond à la probabilité de transmission d'une particule ; il donne le nombre de particules transmises par unité de temps (particules traversant la barrière de potentiel) divisé par le nombre de particules incidentes par unité de temps.

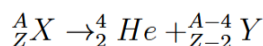
Un calcul non demandé permet d'obtenir

$$T = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4\mathcal{E}(V_0 - \mathcal{E})} \text{sh}^2(qa)}$$

□ 29 — On considère que le quanton est un électron de masse $m_e = 9,11 \times 10^{-31}$ kg et d'énergie $\mathcal{E} = 1,00$ eV évoluant dans le potentiel décrit sur la figure 4 avec $V_0 = 2,00$ eV. Dresser un tableau des valeurs de qa et T pour $a = 0,50$ nm ; $1,00$ nm et $2,00$ nm. Définir ce que l'on appelle une barrière d'énergie potentielle épaisse et montrer que dans ce cas $T \simeq T_0(\mathcal{E}, V_0) e^{-2qa}$ où l'on précisera l'expression de $T_0(\mathcal{E}, V_0)$. En étudiant les variations de $T_0(\mathcal{E}, V_0)$ pour $0 < \mathcal{E} < V_0$, déduire que pour une barrière épaisse, l'on peut écrire $\ln(T) \approx -2qa$.

II.C. — Radioactivité α

La radioactivité α est l'émission de noyaux d'hélium 4, appelés particules α , par des noyaux atomiques lourds (généralement tels que $Z > 82$), selon la réaction



dans laquelle A représente le nombre de nucléons (protons et neutrons) et Z le nombre de protons du noyau X . George Gamow fut le premier en 1928 à interpréter la radioactivité α grâce à l'effet tunnel. Il considéra que le noyau X était constitué au préalable de la particule α et du noyau Y . L'énergie potentielle $V(x)$ d'interaction entre ces deux particules est une fonction de la distance x qui les sépare dont l'allure est représentée sur la figure 5.

- pour des grandes valeurs de x , cette énergie potentielle correspond à la répulsion électrostatique, et présente donc un profil coulombien de la forme $\frac{K}{4\pi\epsilon_0 x}$
- pour $x < x_0$, les interactions nucléaires attractives interviennent et l'énergie potentielle est un puits très profond.
- pour l'uranium 238 : $Z = 92$ et $x_0 = 3,50 \times 10^{-15}$ m. La mesure de l'énergie $\mathcal{E}$ des particules α émises par ce noyau donne une valeur proche de 4,00 MeV.

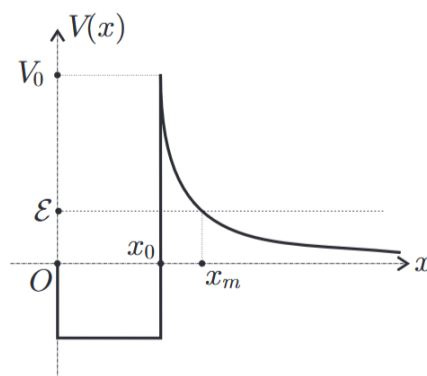


FIGURE 5 – Allure de l'énergie de potentielle

□ 30 — Déterminer l'expression de la constante K en fonction de Z et de la charge élémentaire $e = 1,61 \times 10^{-19}$ C. En déduire la hauteur V_0 de la barrière d'énergie potentielle à franchir. Calculer la distance x_m à laquelle l'énergie potentielle coulombienne est égale à $\mathcal{E}$. Donner un ordre de grandeur de la largeur de la barrière d'énergie potentielle à franchir. Peut-on considérer que la barrière est épaisse ? On donne la masse de la particule α , $m_\alpha = 6,64 \times 10^{-27}$ kg et on rappelle que $\frac{1}{4\pi\epsilon_0} = 8,98 \times 10^9$ SI.

Etant donné que la barrière d'énergie potentielle n'a pas la forme simple de celle étudiée dans la section II.B, on ne peut donc plus utiliser directement l'approximation de T obtenue à la question 29. Pour $x > x_0$, on peut cependant approcher la fonction $V(x)$ par une succession de barrières rectangulaires de hauteur $V(x)$ et de largeur dx (Voir figure 6) suffisamment épaisse pour pouvoir utiliser l'approximation.

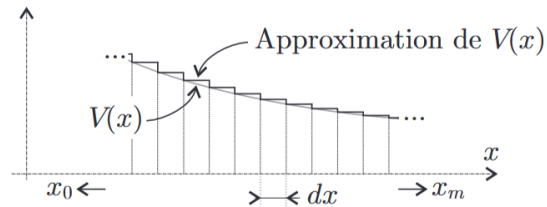


FIGURE 6 – Approximation de la barrière.

□ 31 — En généralisant le résultat obtenu pour T en fonction de T_0 , déterminer $T(x + dx)$ en fonction de $T(x)$, q et dx . En considérant, pour simplifier la suite du calcul, que $qdx \ll 1$, établir la relation

$$\ln(T) \approx -\frac{2}{\hbar} \int_{x_0}^{x_m} \sqrt{2m_\alpha \left(\frac{K}{4\pi\epsilon_0 x} - \mathcal{E} \right)} dx$$

□ 32 — On admettra que

$$\int_{x_0}^{x_m} \sqrt{\frac{x_m}{x} - 1} dx \approx x_m \left(\frac{\pi}{2} - 2\sqrt{\frac{x_0}{x_m}} \right)$$

En déduire la loi de Gamow-Condon-Gurney, valable pour $\frac{x_0}{x_m} \ll 1$:

$$\ln(T) = a - \frac{b}{\sqrt{\mathcal{E}}}$$

Dans laquelle on exprimera a et b en fonction des données du problème.

□ 33 — En considérant que la particule fait des aller-retour dans une région d'extension $2x_0$ et que l'on peut obtenir un ordre de grandeur de la vitesse de la particule α en utilisant la relation $\mathcal{E} = \frac{1}{2}m_\alpha v^2$, estimer l'expression du temps moyen t_m entre deux rebonds de la particule sur la barrière d'énergie potentielle. En déduire celles du nombre moyen de rebonds par seconde, de la probabilité dp d'émission α pendant dt et du temps de demi-vie $\tau_{1/2}$ de l'émetteur α . En admettant que t_m varie peu d'un émetteur α à un autre déterminer une relation entre $\ln(\tau_{1/2})$ et $\mathcal{E}$. Cette loi fut établie empiriquement par Geiger et Nuttall en 1911.

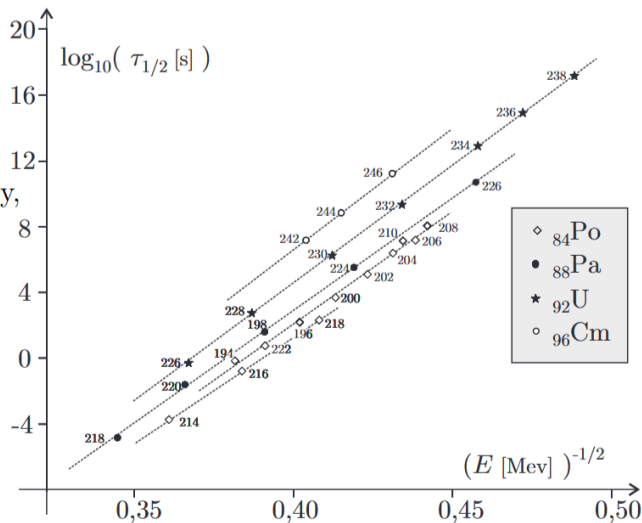


FIGURE 7 – Loi de Geiger-Nuttall

□ 34 — Comparer les résultats précédents à ceux que l'on peut déduire des mesures rassemblées sur la figure 7.

EXERCICES COMPLEMENTAIRES

Exercice 14. Energie minimale de confinement dans une boîte quantique

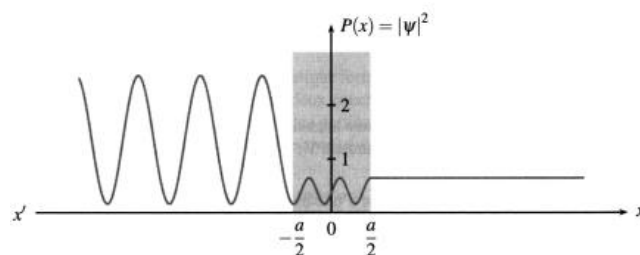
On considère une particule quantique (non relativiste), de masse m , pouvant se déplacer librement suivant Ox dans un domaine de largeur L_x .

1. Quelle est la limite supérieure de l'indétermination sur sa position Δx ?
2. En déduire une limite inférieure pour l'indétermination sur son impulsion (ou quantité de mouvement) Δp_x .
3. Que vaut $\langle p_x \rangle$ pour cette particule ? En déduire une limite inférieure pour $\langle p_x^2 \rangle$.
4. En étendant ce raisonnement à une particule confinée dans une boîte parallélépipédique de longueurs L_x, L_y et L_z , montrer que l'énergie cinétique moyenne de la particule vérifie :

$$\langle E_c \rangle \geq \frac{\hbar^2}{8m} \left(\frac{1}{L_x^2} + \frac{1}{L_y^2} + \frac{1}{L_z^2} \right)$$

Exercice 15. Potentiel inconnu

Un faisceau de quantons non relativistes, de masse m et d'énergie E , se déplace le long d'un axe $x'x$ et provient de $-\infty$. Chaque particule quantique est soumise à un champ de force conservatif, d'énergie potentielle $V(x)$. On admet que cette énergie s'annule quand x tend vers $\pm\infty$. Sur le graphe fourni est représentée la densité de probabilité de présence $|\psi(x, t)|^2$ d'un quanton. Les oscillations visibles sont sinusoïdales.



1. L'état de chaque quanton est-il un état lié ou un état de diffusion ?
2. Quelle interprétation peut-on donner aux oscillations de la densité de probabilité de présence pour $x < 0$? Le même comportement est-il observable en mécanique classique ?
3. L'énergie potentielle $V(x)$ est constante par morceaux. Déterminer son allure possible en fonction de x .
4. La fonction d'onde associée à cet état stationnaire est notée $\psi(x, t) = \varphi(x) \exp(i \frac{E}{\hbar} t)$. Dans la mesure du possible, proposer une expression $\varphi(x)$ pour chacune des trois régions du graphique, c'est-à-dire. Donner les conditions de raccordement qui doivent être vérifiées en $\pm a/2$.

Exercice 16. Orbitales π du benzène – particule quantique se déplaçant sur un cercle (Dunod, J'intègre, MP/MPI)

Les orbitales π de la molécule de benzène peuvent être modélisées (en première approche) avec les états stationnaires d'une particule de masse m astreinte à se déplacer sur un cercle de rayon R . La particule n'a pas d'énergie potentielle, et sa position est repérée en coordonnées cylindriques par l'angle θ .

- 1) Quelle est l'équation de Schrödinger indépendante du temps ? 2) Quelle condition doit vérifier $\varphi(\theta)$ pour être une solution stationnaire acceptable ?
- 3) Quelles sont les valeurs de l'énergie donnant un état stationnaire ? Les niveaux d'énergie sont-ils dégénérés (ils sont dits dégénérés s'ils ont la même énergie en correspondant à 2 solutions différentes, soit à 2 états quantiques différents) ? Quelles sont les longueurs d'onde de de Broglie associées à ces énergies ? Commenter.
- 4) Donner l'ensemble des solutions stationnaires, en les normalisant. Quelles sont les fonctions d'onde $\Psi(\theta, t)$ associées ?
- 5) Il est possible de placer 2 électrons de spin opposé dans chacune des orbitales correspondant aux états stationnaires calculés plus haut. Pour la molécule de benzène dans son état fondamental, placer les 6 électrons π sur un diagramme énergétique.
- 6) Sachant que le passage des électrons π du benzène dans des états excités donne des bandes d'absorption pour lesquelles la plus grande longueur d'onde est 255 nm, en déduire une valeur numérique de R . Commenter ce résultat, sachant que la longueur de la liaison C-C vaut 142 pm dans la molécule de benzène (dans laquelle les 6 atomes de carbone forment un hexagone régulier).

Laplacien en coordonnées cylindriques : $\Delta f(M) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial f}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial \theta^2} \right) + \left(\frac{\partial^2 f}{\partial z^2} \right)$