Mécanique quantique

1. Étude d'un cellule photoélectrique au potassium

La cathode d'une cellule photoélectrique au potassium est éclairée par deux radiations lumineuses monochromatiques différentes de longueurs d'ondes respectives $\lambda = 490$ nm et $\lambda = 660$ nm. La puissance $P = 9,00.10^{-7}$ W de ces deux sources de rayonnement est la même. Le travail d'extraction d'un électron du potassium est $W_0 = 2,25$ eV.

1. Les deux radiations permettent-elles l'émission d'électrons ?
2. Déterminer l'expression de la vitesse des électrons émis par la cathode et calculer sa valeur numérique.
3. On observe que l'intensité du courant de saturation est $I_s = 4,00.10^{-8}$ A. Déterminer le rendement quantique de la cellule, c'est-à-dire le rapport du nombre d'électrons émis au nombre de photons reçu. On supposera que tous les électrons émis participent au courant de saturation.

On donne : $h = 6,63 \cdot 10^{-34}$ J.s, $e = 1,6 \cdot 10^{-19}$ C et $m_e = 9,1 \cdot 10^{-31}$ kg.

2. Énergie minimale d'un oscillateur harmonique

Un oscillateur harmonique unidimensionnel a une masse m et une pulsation propre ω_0. Il est soumis à une énergie potentielle $V(x) = \frac{1}{2}m\omega_0^2x^2$. La position moyenne $< x >$ et la quantité de mouvement moyenne $< p_x >$ de l'oscillateur sont nulles.

1. Utiliser la relation d'incertitude de Heisenberg spatiale pour montrer que la valeur moyenne de l'énergie de cet oscillateur est bornée inférieurement :
$$< E > \geqslant \frac{\hbar^2}{8m(\Delta x)^2} + \frac{1}{2}m\omega_0^2(\Delta x)^2,$$
où Δx représente l'indétermination quantique sur la position x de l'oscillateur.
2. Déterminer la valeur minimale que peut prendre la valeur moyenne de l'énergie de l'oscillateur en fonction de $\hbar$ et ω_0. Exprimer l'amplitude de l'indétermination quantique Δx en fonction de m, $\hbar$ et ω_0.
3. À température non nulle, en raison de l'agitation thermique, il existe aussi des fluctuations Δx_T de la position de l'oscillateur autour de sa valeur moyenne. On donne $\Delta x_T = \sqrt{\frac{k_BT}{m\omega_0^2}}$, où $k_B = 1,39.10^{-23}$ J $\cdot$ K^{-1} est la constante de Boltzmann.
   (a) Donner l'expression de la température T_c en dessous de laquelle les fluctuations quantiques sont plus importantes que les fluctuations thermiques.
   (b) 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 ($6,0$ GHz) à une température de 25 mK. Commenter le choix d'un oscillateur de fréquence élevée et d'une température aussi faible.

3. Oscillateur harmonique quantique

On considère une particule quantique, de masse m, soumise à une énergie potentielle de la forme $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$.

1. Sous quelle forme s'écrit la fonction d'onde d'un état stationnaire d'énergie E pour cet oscillateur ?
2. Écrire l'équation de Schrödinger indépendante du temps dans le cas considéré.

3. Pour l'état fondamental, on a $\varphi(x) = \mathcal{N} \exp\left(-\dfrac{x^2}{a^2}\right)$.
   (a) Déterminer la constante de normalisation $\mathcal{N}$. On donne
   $$\int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-\alpha u^2) du = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}.$$
   (b) Représenter l'allure de la densité de probabilité de présence de la particule. En déduire, sans calcul, la valeur de la position moyenne $< x >$ de la particule.
   (c) Déterminer l'expression de l'énergie E et de a en fonction de $\hbar$, m et de ω.

4. Atome d'hydrogène

On considère un atome d'hydrogène sphérique, de taille caractéristique a. Cet espace est supposé imposer un confinement à l'électron de cet atome. On admet l'approximation suivante pour l'énergie de l'électron dans l'atome :

$$E = E_c - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a}$$

1. (a) En employant l'inégalité d'Heisenberg, donner une estimation de l'énergie cinétique minimale de l'électron en fonction de a. Le second terme est l'énergie potentielle d'interaction électrique entre l'électron et le noyau, formé ici d'un proton.
   (b) Déterminer la valeur a_0 du paramètre a qui minimise l'expression de l'énergie E. Calculer sa valeur numérique, qui donne l'ordre de grandeur de la taille de l'atome d'hydrogène.
   (c) Quelle est la valeur minimale de l'expression approchée de E ? Dans l'état fondamental, on mesure expérimentalement $E_0 = -13,6$ eV. Comparer.
2. (a) En mécanique classique, pour un électron en orbite circulaire de rayon a autour du noyau, montrer que l'énergie mécanique est de la forme
   $$E = \frac{K}{a}$$
   où l'on explicitera la constante K.
   (b) L'électromagnétisme permet de montrer que l'électron en mouvement produit alors un champ électromagnétique dont le rayonnement se traduit par une très rapide perte d'énergie du système. Interpréter la phrase suivante : ≪C'est l'inégalité d'Heisenberg qui est à la base de la stabilité des atomes≫.

On donne : $h = 6,63 \cdot 10^{-34}$ J.s, $\epsilon_0 = \dfrac{1}{36\pi 10^9}$ m.F^{-1}, $e = 1,6 \cdot 10^{-19}$ C et $m_e = 9,1 \cdot 10^{-31}$ kg.

5. Conservation locale de la densité de probabilité

En électromagnétisme, on a vu que l'équation locale de conservation de la charge totale contenue dans un volume donné d'un conducteur s'écrit $\dfrac{\partial \rho(M,t)}{\partial t} + \mathrm{div}\vec{j} = 0$ où $\rho(M,t)$ est la densité volumique de charge au point M à l'instant t et $\vec{j}$ le vecteur densité volumique de courant. Ce qui donne, pour un problème à une dimension suivant l'axe (Ox), avec $\vec{j} = j\vec{e}_x$: $\dfrac{\partial \rho(x,t)}{\partial t} + \dfrac{\partial j}{\partial x} = 0$.

En mécanique quantique, la probabilité totale de trouver la particule dans un volume donné doit aussi être conservée.

1. En combinant l'équation de Schrödinger à une dimension et son expression complexe conjuguée, établir l'équation locale de conservation de la probabilité, reliant la densité de probabilité ρ à la densité de courant de probabilité $\vec{J}$ dont on donnera l'expression.
2. En utilisant la relation de dispersion de l'onde plane $\hbar\omega = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m}$, exprimer le vecteur densité de courant de probabilité $\vec{J}(x,t)$ en fonction de $\vec{k}$ (retrouver le résultat du cours) puis en fonction de la vitesse de groupe $\vec{v}_g$ associée au paquet d'onde décrivant la particule.
3. Proposer une analogie entre mécanique quantique et électromagnétisme dans ce contexte.

6. Combinaison linéaire d'états stationnaires pour le puits infini

On étudie l'évolution d'une particule quantique, de masse m piégée dans un puits de potentiel infini de largeur a. On considère un état stationnaire d'énergie E_n, associé à une fonction d'onde propre de la forme :

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(n\pi\frac{x}{a}\right),$$

avec n entier positif.

1. Donner l'expression de l'énergie E_n. On pose $E_1 = \hbar\omega_0$. Exprimier ω_0 en fonction de a, m et $\hbar$. En déduire l'expression de E_n en fonction de n, ω_0 et $\hbar$.
2. On considère l'état décrit par le fonction d'onde $\Psi_n(x,t)$ telle que $\Psi_n(x,t=0) = \varphi_n(x)$. Donner l'expression de $\Psi_n(x,t)$ pour $t > 0$.
3. On considère maintenant l'état décrit par la fonction d'onde $\psi(M,t)$ résultant de la combinaison linéaire des deux états stationnaires de fonctions d'ondes spatiales respectives $\varphi_1(M)$ et $\varphi_2(M)$, et d'énergies respectives E_1 et $E_2 > E_1$:
$$\Psi(x,t=0) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_1(x) + \varphi_2(x)).$$
En utilisant le résultat de la question précédente, donner l'expression de $\Psi(x,t)$ pour $t > 0$.
4. Montrer que la densité de probabilité de présence dépend du temps et préciser son temps caractéristique d'évolution τ.
5. Décrire qualitativement l'évolution temporelle.

7. Paquet d'ondes à spectre rectangulaire

On s'intéresse à une particule libre qui se déplace suivant l'axe Ox. On va supposer que plusieurs quantités de mouvement existent autour de p_0, à $\Delta p \ll p_0$ près, et on construit le paquet d'ondes suivant :

$$\psi(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} A(p)\exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(px - E(p)t\right)\right]dp$$

On suppose pour calculer la précédente formule que

$$A(p) = \left|\begin{array}{l} A_0 \;\; \text{si} \;\; p \in \left[p_0 - \dfrac{\Delta p}{2}, p_0 + \dfrac{\Delta p}{2}\right] \\ 0 \;\; \text{sinon} \end{array}\right.$$

1. Tracer l'allure du spectre $A(p)$.
2. Le calcul de la fonction d'onde montre que :
$$\psi(x,t) = C\exp\left(\frac{i}{\hbar}\left(p_0 x - \frac{p_0^2 t}{2m}\right)\right)\text{sinc}\left(\frac{\Delta p}{2\hbar}\left(x - \frac{p_0}{m}t\right)\right)$$
où C est une constante.
   (a) Où se trouve le maximum de la densité de probabilité à la date t ? Interpréter sa dépendance en t.
   (b) Évaluer la largeur Δx de la densité de probabilité. Est-ce cohérent avec l'inégalité de Heisenberg spatiale ?
   (c) Tracer l'allure de $|\psi(x,t)|^2$ en fonction de x à deux dates différentes.
   (d) Montrer qu'on peut normaliser cette fonction d'onde. On donnera C, sachant que $\int_{-\infty}^{+\infty} \text{sinc}^2 x dx = \pi$.

8. Puits semi-infini

On étudie les états stationnaires d'une particule liée d'énergie E telle que $-V_0 < E < 0$ (avec $V_0 > 0$) dans un puits de potentiel de la forme :

$$V(x<0) = +\infty \;\; ; \;\; V(0<x<L) = -V_0 \;\; ; \;\; V(x>L) = 0$$

1. On pose $V_0 + E = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m}$ et $E = -\dfrac{\alpha^2\hbar^2}{2m}$. Montrer que l'on doit chercher la partie spatiale de la fonction d'onde sous la forme :

$$\varphi(x<0) = 0 \quad ; \quad \varphi(0<x<L) = A\exp(ikx) + B\exp(-ikx) \quad ; \quad \varphi(x>L) = C\exp(-\alpha x)$$

2. En déduire l'équation dont est solution k et montrer qu'il existe un nombre fini d'états liés. Comparer l'énergie de liaison dans l'état fondamental avec celle d'un puits de même largeur infini des deux côtés.

9. Marche de potentiel

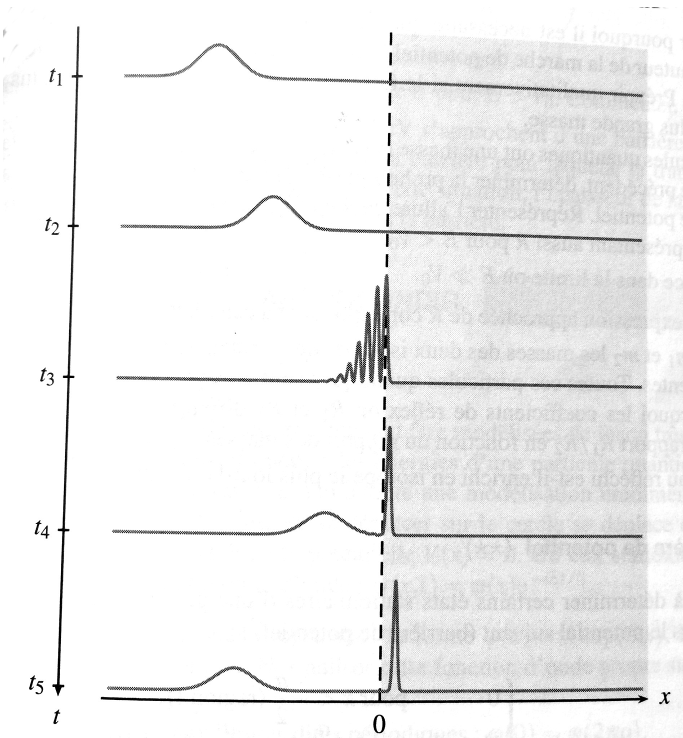
On étudie le mouvement d'une particule quantique dans le potentiel $V(x)$ donné par

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

On envisage le cas d'une particule quantique incidente d'énergie $E > V_0$. On pose $k_1 = \dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ et $k_2 = \dfrac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$.

1. Montrer qu'un état stationnaire de la particule peut être représenté par la fonction d'onde propre $\varphi(x) = A\exp(ik_1x) + rA\exp(-ik_1x)$ dans la région I et $\varphi(x) = tA\exp(ik_2x)$ dans la région II, avec A une constante non nulle.
2. Écrire les relations de raccordement en $x=0$ et en déduire les expressions de r et de t. Examiner le cas où $E \gg V_0$ et commenter.
3. En superposant des états stationnaires d'énergies voisines de E, on forme un paquet d'onde représentant une particule quantique incidente. La figure donnée en fin d'énoncé représente l'évolution dans l'espace et dans le temps de ce paquet d'ondes. La zone grisée correspond à la région II, le temps s'écoule du haut vers le bas de la figure.

   Commenter ces graphes aussi précisément que possible.
4. Dans la situation où $E < V_0$, l'expression de la fonction d'onde propre dans la région I peut être conservée. Expliquer cependant comment est modifié k_2 et par suite, le coefficient r. En déduire alors l'expression de la probabilité de réflexion R de la particule. Commenter.



10. Enrichissement isotopique

On pourra utiliser les résultats de l'exercice précédent.

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

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

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 $E > V_0$. En reprenant les résultats de l'exercice précédent, 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 ?

11. Molécule de benzène

Les orbitales π de la molécule de benzène peuvent être modélisées de façon très approximative en considérant les fonctions d'onde et les énergies d'une particule quantique astreinte à se déplacer sur un cercle, de rayon a. On adopte une modélisation unidimensionnelle en supposant qu'une particule contrainte de se déplacer sur le cercle se déplace en fait sur le segment $0 \leq x \leq 2\pi a$, avec une énergie potentielle $V(x) = 0$. Un état stationnaire de cette particule est représenté par la fonction d'onde : $\psi(x,t) = \varphi(x)e^{-iEt/\hbar}$.

1. On cherche une fonction d'onde propre sous la forme $\varphi(x) = A\exp(ikx)$. Déterminer k et justifier qu'on peut choisir A réel. Normaliser cette fonction d'onde propre sur l'intervalle $[0; 2\pi a]$.
2. On adopte des conditions aux limites dites périodiques $\varphi(0) = \varphi(2\pi a)$.
   (a) Interpréter ce choix.
   (b) Montrer qu'on aboutit à une quantification des niveaux d'énergie. On utilisera un nombre quantique, noté n. Interpréter pourquoi certains niveaux d'énergie sont doublement dégénérés (c'est-à-dire que deux valeurs distinctes de n conduisent à une même valeur de l'énergie).
   (c) Représenter sur un diagramme énergétique les premiers niveaux d'énergie.
3. On traite les 6 électrons π du benzène comme des particules quantiques astreintes à se déplacer sur un cercle de rayon a.
   (a) Ces électrons occupent les niveaux d'énergie en respectant les règles de Hund et de Pauli. Représenter l'état fondamental du système sur un diagramme énergétique.
   (b) Sachant que le benzène présente une bande d'absorption à 255 nm, en déduire une valeur numérique de a.
   (c) Sachant que la longueur de la liaison C$-$C vaut 142 pm, commenter le résultat obtenu.

12. Étoile à neutrons

Une **étoile à neutrons** se forme à la suite de l'explosion d'une supernova (forme ultime de l'évolution d'une étoile très massive). Elle est caractérisée par un faible diamètre (de l'ordre de la dizaine de kilomètres) et une masse comparable à celle du Soleil. Il en résulte qu'elle forme un astre très dense.

On considère une étoile à neutrons de masse $M = 2,0.10^{30}$ kg, exclusivement constituée de neutrons de masse $m = 1,7.10^{-27}$ kg. On suppose que la densité de neutrons est uniforme à l'intérieur de l'étoile, qui est assimilée à une boule de rayon R. Les neutrons forment un gaz de particules quantiques sans interaction.

1. Calculer le nombre N de neutrons dans l'étoile.
2. On admet que l'énergie cinétique de chaque neutron peut être évaluée en supposant qu'il est confiné dans un volume V/N où V est le volume de l'étoile.
   (a) Exprimer l'échelle de longueur caractéristique du confinement d'un neutron en fonction de V et N.
   (b) En déduire que l'énergie cinétique totale des neutrons s'écrit, à une constante multiplicative près, sous la forme suivante :
   $$E_c \simeq \frac{\hbar^2 N^{5/3}}{mR^2}.$$
3. Du fait de l'attraction gravitationnelle que les neutrons exercent entre eux, l'étoile possède une énergie de cohésion gravitationnelle E_g qui s'exprime simplement en fonction de la constante de gravitation universelle $\mathcal{G}$, de sa masse M et de son rayon R.

   Déterminer, par analyse dimensionnelle, une expression de E_g (à une constante multiplicative près). On précisera le signe à donner à E_g.
4. Représenter l'allure de l'énergie totale de l'étoile $E = E_c + E_g$ et montrer qu'il existe un rayon d'équilibre stable pour l'étoile. Calculer ce rayon d'équilibre et en déduire la masse volumique de l'étoile.
5. Comparer cette masse volumique à celle d'un noyau atomique, qu'on peut assimiler à une distribution de masse sphérique de densité uniforme et de rayon $r = r_0 A^{1/3}$, où A est le nombre de nucléons du noyau et $r_0 = 1,2.10^{-15}$ m.