

Potentiel uniforme par morceaux

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

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

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.

2. Marche de potentiel

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

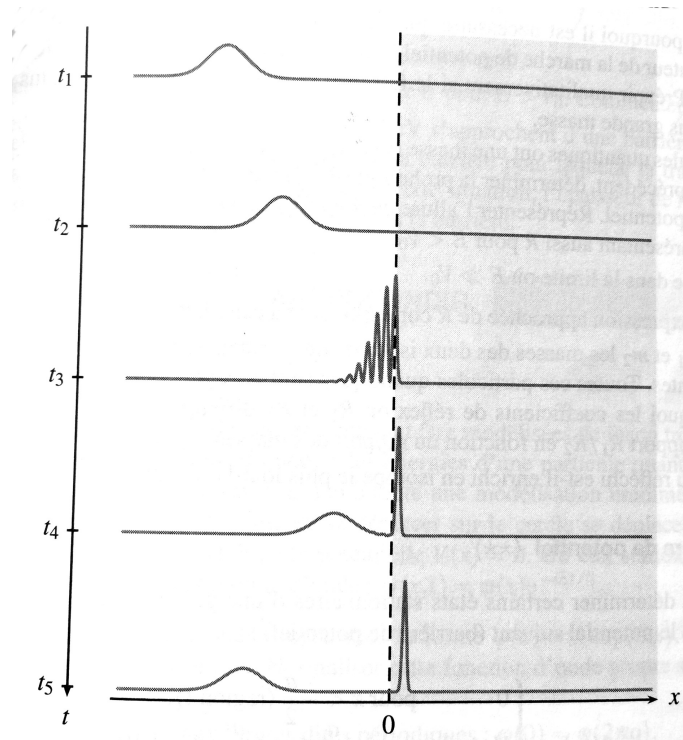
$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{pour } x < 0 \text{ (région I)} \\ V_0 > 0 & \text{pour } x \geq 0 \text{ (région II)} \end{cases}$$

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

1. Montrer qu'un état stationnaire de la particule peut être représenté par la fonction d'onde propre $\varphi(x) = A \exp(ik_1 x) + rA \exp(-ik_1 x)$ dans la région I et $\varphi(x) = tA \exp(ik_2 x)$ 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.



3. 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

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

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 $E > V_0$. 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 ?

4. 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.

5. 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 $M = 2,0 \cdot 10^{30}$ kg, exclusivement constituée de neutrons de masse $m = 1,7 \cdot 10^{-27}$ 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 :

$$E_c \simeq \frac{\hbar^2 N^{5/3}}{mR^2}.$$

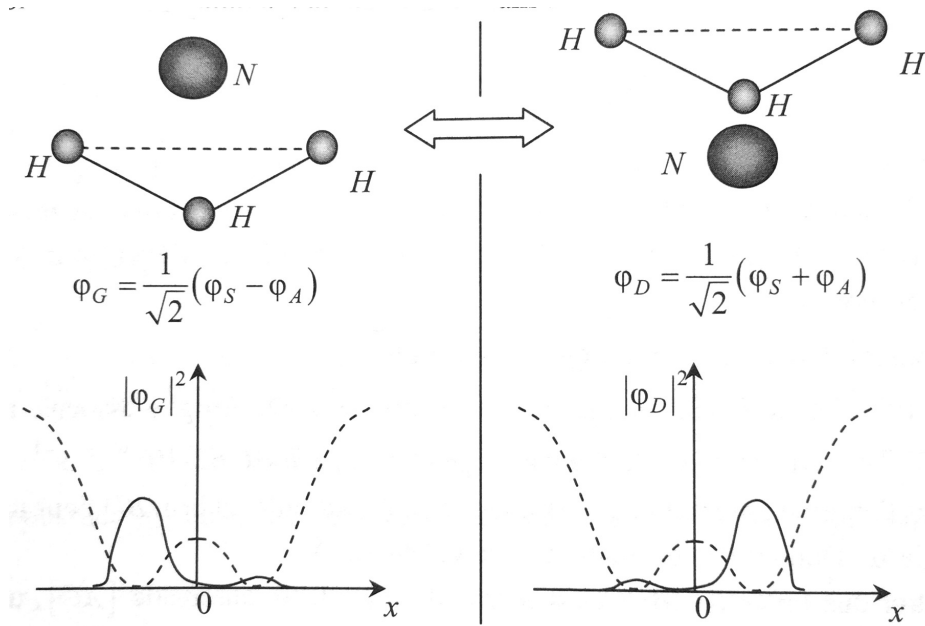
3. Du fait de l'attraction gravitationnelle que les neutrons exercent entre eux, l'étoile possède une énergie de cohésion gravitationnelle E_g qui s'exprime simplement en fonction de la constante de gravitation universelle $\mathcal{G}$, de sa masse M et de son rayon R .

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 $r_0 = 1,2 \cdot 10^{-15}$ m.

6. 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), solution de l'équation de Schrödinger stationnaire : l'une φ_S symétrique par rapport à l'axe de la molécule et l'autre φ_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 φ_S et φ_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 φ_D et gauche φ_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 φ_D , donc la particule fictive est 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 $\omega = \frac{E_A - E_S}{\hbar}$. Exprimer $\psi(x, t)$ en fonction de ω . Montrer en explicitant $|\psi(x, t)|^2$ qu'au bout d'un temps T que l'on exprimera en fonction de ω , 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 $E_A - E_S = 1,0 \cdot 10^{-4}$ eV. On rappelle que $1 \text{ eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$.