TD n°20 : Particule quantique dans un puits

Exercice 1 : Équation de Klein-Gordon

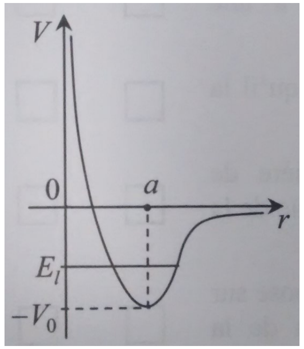
On rappelle les expressions de la quantité de mouvement $\overrightarrow{p} = \gamma m \overrightarrow{v}$ et de l'énergie $E = \gamma mc^2$ d'une particule relativiste, avec $\gamma = \frac{1}{\sqrt{1-v^2/c^2}}$.

1) Montrer que $E^2 = p^2c^2 + m^2c^4$. Quelle serait la relation de dispersion associée ? Exprimer la vitesse de groupe et commenter.

2) En déduire l'équation d'ondes qui pourrait remplacer l'équation de SCHRÖDINGER pour une particule relativiste.

Exercice 2 : Le deutéron

Le deutéron est un noyau d'hydrogène constitué d'un neutron de masse m_n et d'un proton de masse m_p. On traite ce problème à deux corps en considérant une particule fictive de masse réduite $m = \dfrac{m_n m_p}{m_n + m_p}$ soumise au potentiel de YUKAWA, qui modélise l'interaction nucléaire et dont l'allure est donnée ci-contre. On observe expérimentalement que le deutéron est le seul état lié stable du système proton-neutron, et que son énergie de liaison vaut $E_l = -2{,}2$ MeV. L'ordre de grandeur de la portée de l'interaction nucléaire est $a \approx 1$ fm, qui est donc le rayon du noyau.



1) Commenter physiquement la forme de ce potentiel et proposer une modélisation simplifiée utilisant un potentiel constant par morceaux dans trois régions distinctes que l'on précisera.

2) On pose $V_0 + E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ et $E = -\frac{\alpha^2 \hbar^2}{2m}$. Montrer qu'on doit chercher la partie spatiale d'un état stationnaire sous la forme :

$$\varphi(x<0) = 0 \quad ; \quad \varphi(0<x<a) = A\exp(ikx) + B\exp(-ikx)$$

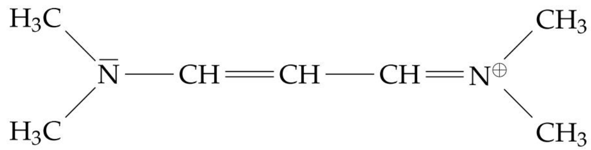
et

$$\varphi(x>a) = C\exp(-\alpha x)$$

3) 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 puis avec celle d'un puits de même largeur fini des deux côtés.

Exercice 3 : Colorants organiques

En 1949, Hans KUHN proposa, pour calculer les propriétés électroniques d'une molécule présentant des liaisons conjuguées, comme celle représentée ci-dessous, d'oublier le squelette d'atomes de carbone, d'azote et d'hydrogène, et d'attribuer les propriétés optiques dans le domaine visible au seul nuage d'électrons π. Dans le modèle simple, KUHN propose que les N électrons π sont prisonniers d'un puits de potentiel infiniment profond, de longueur L.



1) La molécule représentée ci-dessus appartient à la famille des cyanines symétriques. En incluant les atomes d'azote qui font partie du chromophore, quel est, en fonction de p, le nombre N d'électrons délocalisés ?

2) On note ℓ la longueur moyenne d'une liaison carbone-carbone ou carbone-azote. Dans son modèle, KUHN propose $L = N\ell$.

   En exploitant une analogie avec la corde vibrante, retrouver les valeurs des différents niveaux d'énergie en fonction de $\hbar$, de la masse de l'électron m_e et de L. On introduira un nombre quantique entier n.

3) On admet que les électrons se répartissent dans les différents niveaux d'énergie en respectant les règles de HUND et de PAULI. Justifier que l'existence d'une bande d'absorption est due à une transition électronique entre le niveau d'énergie occupé le plus haut vers le niveau libre le plus bas. Identifier ces deux niveaux.

4) En déduire l'expression de la longueur d'onde du rayonnement électromagnétique absorbé en fonction de m, c, h, L et N.

5) Pour la famille des cyanines symétriques, les raies d'absorption ont été mesurées :

p	1	2	3	4	5
λ (nm)	313	416	519	625	735

a) Justifier l'intérêt d'avoir de la mésomérie (délocalisation d'électrons) pour qu'une molécule soit colorée.

b) On donne $\ell = 0{,}139$ nm. Comparer ces valeurs expérimentales aux valeurs fournies par le modèle de KUHN.

c) Quelles peuvent être les origines des écarts constatés ?

Exercice 4 : 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 : $E_c \simeq \dfrac{\hbar^2 N^{5/3}}{mR^2}$

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 $\mathcal{G}$, 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. Calculer ce rayon d'équilibre et en déduire la masse volumique de l'étoile.

5) Comparer cette masse volumique à celle du 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.

Exercice 5 : Particule face à une marche de potentiel

1) Une particule arrive de $x = -\infty$ avec une énergie $E > V_0$ sur une marche de potentiel :

$$V(x<0) = V_1(x) = 0 \qquad \text{et} \qquad V(x>0) = V_2(x) = V_0 > 0$$

Décrire l'évolution de la particule dans le cadre de la mécanique classique.

2) On se place désormais dans le cadre de la mécanique quantique et on cherche des états stationnaires solutions des équations de Schrödinger réduites :

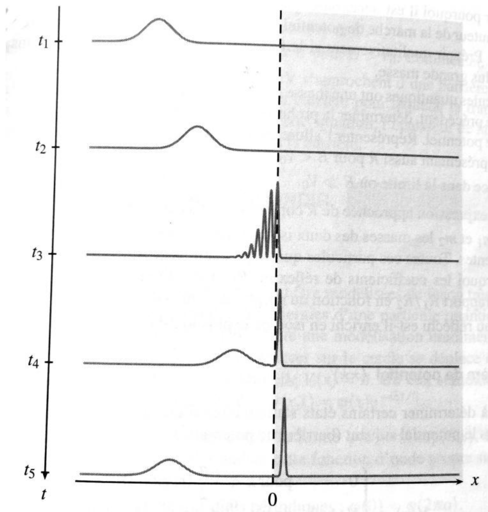
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi_1}{dx^2} = E\,\varphi_1 \qquad \text{et} \qquad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi_2}{dx^2} + V_0\,\varphi_2 = E\,\varphi_2$$

a) On pose $k_1 = \sqrt{2m\,E}/\hbar$ et $k_2 = \sqrt{2m\,(E - V_0)}/\hbar$. Expliciter les solutions générales $\varphi_1(x)$ et $\varphi_2(x)$ en introduisant des constantes complexes A_1 et A_2 pour les ondes progressives, B_1 et B_2 pour les ondes régressives. Justifier qu'on doit prendre $B_2 = 0$. Que représentent respectivement les ondes d'amplitudes A_1, B_1 et A_2 ?

b) Écrire les conditions aux limites en $x = 0$ et exprimer les rapports A_2/A_1 et B_1/A_1 en fonction de k_1 et k_2. Commenter le cas limite $E/V_0 \to \infty$.

c) En déduire les coefficients de transmission T et de réflexion R de la barrière de potentiel définis comme des rapports de courants de probabilité. Calculer $R + T$ et commenter.

d) En superposant des états stationnaires d'énergies voisines de E, on forme un paquet d'onde représentant une particule quantique incidente. La zone colorée du graphe ci-dessous représente la zone 2. Commenter aussi précisément que possible l'évolution du paquet d'onde au cours du temps.



3) On suppose désormais que la particule arrive sur la marche de potentiel avec une énergie $E < V_0$ et on pose $\alpha_2 = \sqrt{2m\,(V_0 - E)}/\hbar$.

a) Expliciter les solutions générales $\varphi_1(x)$ et $\varphi_2(x)$ en introduisant des constantes complexes A_1, B_1, A_2 et B_2. Quelle est la nature des ondes dans le domaine $x > 0$? Justifier que l'une d'entre-elles doit être éliminée.

b) Écrire les conditions aux limites en $x = 0$ et exprimer le rapport B_1/A_1. En déduire le coefficient de réflexion R de la barrière défini comme un rapport de courants de probabilité. Confronter le résultat aux prévisions de la mécanique classique.

c) Dans le domaine $x > 0$ où la fonction d'onde ne décrit pas une particule libre, on *admet* que le courant de probabilité se généralise sous la forme :

$$j = \frac{i\hbar}{2m}\left(\psi\,\frac{\partial\psi^*}{\partial x} - \psi^*\,\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)$$

Calculer le coefficient de transmission T de la marche et vérifier que cette expression est compatible avec la conservation de la probabilité à l'interface.

Exercice 6 : Atome d'hydrogène (X-ESPCI)

L'équation de SCHRÖDINGER pour la partie spatiale $\varphi(r)$ d'une orbitale "s" de l'atome d'hydrogène s'écrit :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\,\Delta\,\varphi + V(r)\,\varphi = E\,\varphi \quad \text{avec} \quad V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\,r}$$

où $\Delta\varphi = \frac{1}{r}\,\frac{d^2(r\,\varphi)}{dr^2}$ est le laplacien.

1) Chercher une solution de la forme $\varphi(r) = A\,\exp(-r/a)$. Déterminer a et E.

2) Exprimer la probabilité de présence dp dans la couronne comprise entre r et $r + dr$. Exprimer A en fonction de a. Étudier les variations de la densité radiale de probabilité dp/dr en fonction de r et interpréter a.

3) Retrouver l'ordre de grandeur de a en utilisant l'inégalité de HEISENBERG.

4) Calculer $< V(r) >$ et la comparer à E. Comparer avec la situation d'une particule classique en mouvement circulaire.

Réponses

Exercice 1 : Équation de Klein-Gordon

1) $\omega^2 = k^2 c^2 + \dfrac{m^2 c^4}{\hbar^2}$; $v_g = p\,c^2/E = v$; **2)** $\dfrac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = c^2 \dfrac{\partial \psi}{\partial x^2} - \dfrac{m^2\,c^4\,\psi}{\hbar^2}$

Exercice 2 : Le deutéron

1) Puits semi-infini avec $V(x<0) = +\infty$, $V(0<x<a) = -V_0$ et $V(x>a) = 0$.

3) $|\sin(ka)| = \dfrac{\hbar k}{\sqrt{2mV_0}}$.

Exercice 3 : Colorants organiques

1) $N = 2p + 4$.

2) $L = n\dfrac{\lambda_{DB}}{2}$, $p = \dfrac{h}{\lambda_{DB}}$ et $E = \dfrac{n^2\pi^2\hbar^2}{2m_e L^2}$.

3) Niveau occupé le plus haut est $p+2$ et le libre le plus bas $p+3$.

4) $\lambda_p = \dfrac{4m_e c L^2}{(2p+5)\pi\hbar} = \dfrac{8m_e c\ell^2}{h}\dfrac{N^2}{N+1}$.

Exercice 4 : Étoile à neutrons

1) $N = \dfrac{M}{m} = 1{,}2\cdot 10^{57}$; **2.a)** $r = \dfrac{R}{N^{1/3}}$;

3) $E_g \approx -\dfrac{\mathcal{G}N^2 m^2}{R}$

4) $R_{\text{eq}} = \dfrac{2\hbar^2}{\mathcal{G}N^{1/3}m^3}$

5) $\mu \approx \dfrac{m}{r_0^3} \approx 10^{18}\,\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$

Exercice 5 : Particule face à une marche de potentiel

2.a) $\varphi_j(x) = A_j \exp(ik_j x) + B_j \exp(-ik_j x)$ pour $j \in \{1,2\}$.

2.b) $\dfrac{A_2}{A_1} = \dfrac{2k_1}{k_1+k_2}$ et $\dfrac{B_1}{A_1} = \dfrac{k_1-k_2}{k_1+k_2}$

2.c) $R = \left(\dfrac{k_1-k_2}{k_1+k_2}\right)^2$

3.a) φ_1 conserve la même forme mais $\varphi_2(x) = A_2\exp(-\alpha_2 x)$

3.b) $\dfrac{B_1}{A_1} = \dfrac{k_1 - i\alpha_2}{k_1 + i\alpha_2}$ et $R = 1$.

3.c) $T = 0$, ok avec $R + T = 1$.

Exercice 6 : Atome d'hydrogène (X-ESPCI)

1) $a = 4\pi\varepsilon_0\,\hbar^2/me^2 = 5{,}3\cdot 10^{-11}$ m et $E = -\hbar^2/2m\,a^2 = -13{,}6$ eV.

2) $dp = 4\pi\,A^2\,r^2\,\exp(-2r/a)\,dr$; $1 = \int_0^\infty dp = 4\pi\,A^2\,(a/2)^3\,\int_0^\infty u^2\exp(-u)\,du = \pi\,A^2\,a^3$ donc $A = 1/\sqrt{\pi\,a^3}$; dp/dr est maximale en $r = a$; a représente en ordre de grandeur la dimension du nuage électronique de l'atome.

3) $E \approx \Delta p_x^2/2m - e^2/4\pi\varepsilon_0\,\Delta x \geq \hbar^2/8m\,\Delta x^2 - e^2/4\pi\varepsilon_0\,\Delta x$ minimal pour $\Delta x = \pi\varepsilon_0\,\hbar^2/me^2 \approx a$

4) $< 1/r > = \int_0^\infty 4\pi\,A^2\,r\,\exp(-2r/a)\,dr = 1/a$; $< V(r) > = -2E$ comme pour une particule classique en mouvement circulaire ;