Révisions des écrits (suite)

9 Mécanique quantique

Exercice 11 : Puits infini 3D (Mines MP2 2023)

On rappelle ici l'équation de Schrödinger pour une particule de masse m lorsque l'interaction avec l'extérieur est décrite par le potentiel d'interaction $U(\vec{r})$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(\vec{r},t) + U(\vec{r})\Psi(\vec{r},t) = \mathrm{j}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t) \tag{2}$$

où $\mathrm{j}^2 = -1$, $\Psi(\vec{r},t)$ est la fonction d'onde et $\hbar = h/2\pi$. Dans ce qui suit, on étudie une particule dans un *puits de potentiel infini* défini à trois dimensions par $U = \text{cte} = U_0$ pour $0 < x < a_1$, $0 < y < a_2$ et $0 < z < a_3$ tandis que $U \to +\infty$ en dehors de cette région bornée de l'espace.

❑ – **15**. Quelles sont l'interprétation physique et la dimension de la fonction d'onde $\Psi(\vec{r},t)$?

❑ – **16**. On cherche des solutions de l'équation de Schrödinger de la forme $\Psi(\vec{r},t) = \Phi(x,y,z)W(t)$. Quelle est la forme de $W(t)$? Comment s'appelle ce type de solution ?

❑ – **17**. On suppose encore $\Phi(x,y,z) = F_1(x)F_2(y)F_3(z)$. Déterminer les fonctions F_i $(i = 1,2,3)$ en fonction de a_i et de trois nombres entiers $n_i \in \mathbb{N}^*$, à une constante multiplicative arbitraire près.

❑ – **18**. Montrer que l'énergie $\mathcal{E}_f$ de l'état fondamental de la particule s'écrit :

$$\mathcal{E}_f = U_0 + \frac{h^2}{8m}\left[\frac{1}{a_1^2} + \frac{1}{a_2^2} + \frac{1}{a_3^2}\right] \tag{3}$$

La particule de masse m, qui reste dans son état fondamental, évolue lentement d'un état isotrope où le volume $V = a^3$ du puits est celui d'un cube de côté a à une *situation comprimée* où une des dimensions $a_1 = a - \delta a < a$ tandis que les deux autres dimensions augmentent simultanément et symétriquement ($a_2 = a_3$ à tout instant) de manière à maintenir constant le volume $V = a_1a_2a_3$ du puits.

❑ – **19**. Exprimer la variation $\Delta\mathcal{E}_1$ de l'énergie de l'état fondamental qui accompagne cette transformation.

❑ – **20**. On suppose $\delta a \ll a$. Montrer qu'au premier ordre non nul en $\delta a/a$ la variation d'énergie se met sous la forme $\Delta\mathcal{E}_1 = \frac{1}{2}K\delta a^2$, on exprimera K en fonction de h, m et a.
On rappelle que $(1-\epsilon)^{-2} = 1 + 2\epsilon + 3\epsilon^2 + o(\epsilon^2)$.

Exercice 12 : Potentiels radiaux du deuton (Mines MP2 2018)

Le deuton est le noyau du deutérium (ou hydrogène lourd) ^{2}H, qui possède un proton et un neutron. L'abondance naturelle du deutérium dans les océans de la Terre sous forme d'eau semi-lourde (HDO) ou lourde (D_2O) est d'environ un atome pour 6 420 atomes d'hydrogène.

L'étude d'un système de deux particules ponctuelles de masses m_1 et m_2, si tuées en A_1 et A_2 et telles que $\overrightarrow{A_1A_2} = \vec{r}$ est réalisée en utilisant les coordonnées sphériques (r, θ, φ) pour le vecteur $\vec{r}$. Les particules sont en interaction, décrite par l'énergie potentielle $E_p(r)$; la probabilité d'observer une particule dans l'élément de volume $\mathrm{d}\tau$ entourant le point $\vec{r}$ est donnée par $\mathrm{d}p = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 \mathrm{d}\tau$, où la fonction d'onde $\Psi(\vec{r},t)$ est solution de l'équation de SCHRÖDINGER, $-\dfrac{\hbar^2}{2\mu}\Delta\Psi + E_p(r)\Psi(\vec{r}, t) = \jmath\hbar\dfrac{\partial\Psi}{\partial t}$ où Δ est l'opérateur de LAPLACE ou laplacien ; le coefficient μ qui remplace, dans cette équation, la masse d'une particule unique, est donné par $\dfrac{1}{\mu} = \dfrac{1}{m_1} + \dfrac{1}{m_2}$. On rappelle aussi l'expression de l'opérateur laplacien en coordonnées sphériques :

$$\Delta f = \frac{1}{r^2}\left[\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial f}{\partial r}\right) + \Delta_{\text{ang}} f\right] \quad \text{avec} \quad \Delta_{\text{ang}} f = \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial f}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 f}{\partial\varphi^2}$$

On cherche une solution de l'équation de SCHRÖDINGER sous la forme $\Psi(\vec{r},t) = \dfrac{R(r)}{r}Y(\theta, \varphi)\mathrm{e}^{-\jmath\omega t}$.

❏ **16** — Indiquer et justifier brièvement l'expression liant l'énergie E d'un tel état et la pulsation ω.

❏ **17** — Montrer que $R(r)$ et $Y(\theta, \varphi)$ vérifient les deux équations

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2 R}{\mathrm{d}r^2} + \left[E_p(r) + \frac{\hbar^2 C}{2\mu r^2}\right]R(r) = ER(r) \quad \text{et} \quad \Delta_{\text{ang}} Y = -CY(\theta, \varphi)$$

où C est une certaine constante.

On rappelle les résultats de la mécanique classique pour l'étude du mouvement d'une particule de masse μ en mouvement dans un champ de forces centrales décrit par l'énergie potentielle $E_p(r)$:

- le mouvement est plan et peut, dans ce plan, être décrit en coordonnées polaires r, θ ;
- le moment cinétique est constant, directement perpendiculaire au plan du mouvement avec pour moment cinétique $\sigma = \mu r^2\dot{\theta}$;
- le mouvement est entièrement décrit par la conservation de l'énergie $E = \dfrac{1}{2}\mu\dot{r}^2 + U_{\text{eff}}(r)$, où l'énergie potentielle effective a pour expression $U_{\text{eff}}(r) = E_p(r) + \dfrac{1}{2}\dfrac{\sigma^2}{\mu r^2}$.

❏ **18** — Précisez, dans l'équation vérifiée par $R(r)$ établie ci-dessus, les expressions analogues de l'énergie cinétique radiale $\dfrac{1}{2}\mu\dot{r}^2$, de l'énergie potentielle effective et du moment cinétique σ.

❏ **19** — Quelle serait la valeur de la constante C pour une fonction d'onde purement radiale ? On *ne fera pas nécessairement* cette hypothèse dans les questions qui suivent.

❏ **20** — On procède à une nouvelle séparation des variables en posant $Y(\theta, \varphi) = \Theta(\theta)\Phi(\varphi)$. établir les équations différentielles vérifiées par $\Theta(\theta)$ et $\Phi(\varphi)$.

❏ **21** — Justifier le plus précisement possible le fait, qu'à une constante multiplicative près, que l'on peut imposer $\Phi(\varphi) = \mathrm{e}^{\jmath m\varphi}$ où $m \in \mathbb{Z}$.

❏ **22** — On peut montrer, et on admettra, que les solutions de l'équation différentielle vérifiée par $\Theta(\theta)$ sont des polynômes de degré ℓ (avec $\ell \geqslant |m|$) de la variable $x = \cos\theta$:

$$\Theta(\theta) = a_\ell x^\ell + \ldots + a_1 x + a_0$$

En ne considérant que le terme de plus haut degré, exprimer C en fonction de ℓ seulement. Quel est le moment cinétique σ pour une fonction d'onde caractérisée par ℓ ?

III.B. — Énergie de liaison du deuton

Le deuton est le noyau de l'atome de deutérium ${}^{2}_{1}\mathtt{H}$, formé d'un neutron et d'un proton. Il s'agit d'un des très rares noyaux stables comportant un nombre impair à la fois de neutrons et de protons (avec ${}^{6}\mathtt{Li}$, ${}^{10}\mathtt{B}$, ${}^{14}\mathtt{N}$ et ${}^{180}\mathtt{Ta}$) ; en effet, de tels noyaux *impairs–impairs* sont en général peu ou pas stables. L'énergie de liaison du deuton est faible (2,23 MeV seulement) et il n'a qu'un état fondamental, de moment cinétique nul (nombre quantique orbital $\ell = 0$) et pas d'état excité stable.

On considère les états liés stationnaires d'une particule de masse μ dans le puits de potentiel défini par :

$$E_p = -V_0 \ \text{ pour } \ 0 \leqslant r \leqslant a \ \text{ et } \ E_p = 0 \ \text{ pour } \ r > a$$

avec $V_0 > 0$. On écrit la fonction d'onde indépendante du temps d'un état lié ($-V_0 < E < 0$), à symétrie de révolution (radiale), $\psi(r) = \dfrac{R(r)}{r}$ où $R(r)$ est solution de l'équation radiale

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2 R}{\mathrm{d}r^2} + E_p(r)\,R(r) = E\,R(r)$$

Dont les solutions sont de la forme $R(r) = A\sin(kr)$ pour $r \leqslant a$, et $R(r) = B\mathrm{e}^{-Kr}$ pour $r > a$.

❏ **23** — Justifier ces formes et exprimer k et K en fonction de E et V_0.

❏ **24** — Expliciter les conditions de raccordement en $r = a$.

❏ **25** — On pose $X = ka$ et $Y = Ka$. Écrire deux relations distinctes liant X et Y en fonction de $\rho^2 = \dfrac{2\mu V_0 a^2}{\hbar^2}$, indépendamment des valeurs des constantes A et B (qu'on ne cherchera pas à expliciter).

❏ **26** — Représenter graphiquement, sur un système d'axes (X, Y), les deux relations établies à la question précédente.

❏ **27** — Montrer qu'il n'existe d'état lié que si V_0 est supérieur à une certaine valeur $V_{\min}$ que l'on déterminera en fonction de $\hbar$, μ et a.

❏ **28** — Quelle est la valeur maximale $V_{\max}$ de V_0 pour qu'il n'existe qu'un seul état lié ?

On utilise ce modèle pour décrire l'interaction nucléaire entre un neutron et un proton, formant le deuton (noyau de l'atome de deutérium). Le rayon du deuton est $a = 2{,}0 \cdot 10^{-15}$ m ; la masse μ est la masse réduite du deuton, $\mu = \dfrac{m_n m_p}{m_n + m_p}$. L'expérience montre qu'il n'existe qu'un seul état lié, d'énergie $E_d < 0$.

❏ **29** — En déduire que, dans ce modèle, $V_{\min} < V_0 < V_{\max}$ et calculer $V_{\min}$ et $V_{\max}$ en MeV.

❏ **30** — Que vaut l'énergie de liaison si $V_0 = V_{\min}$?

❏ **31** — L'énergie de liaison du deuton est $E_d = -2{,}23\,\mathrm{MeV}$. Comparer à $V_{\min}$; en déduire que V_0 est proche de $V_{\min}$.

❏ **32** — En explicitant les relations établies ci-dessus entre X et Y pour V_0 proche de $V_{\min}$, montrer que $V_0 = \dfrac{\hbar^2}{2\mu a^2}\left[\dfrac{\pi}{2} + \dfrac{2a}{\hbar\pi}\sqrt{-2\mu E_d}\right]^2$.

❏ **33** — Calculer V_0 (en MeV) et comparer à E_d.

FIN DE L'ÉPREUVE

Le tableau ci-après récapitule les valeurs de certaines grandeurs physiques ou constantes fondamentales.

Célérité de la lumière dans le vide	$c = 3{,}0 \cdot 10^8\,\mathrm{m \cdot s^{-1}}$
Charge élémentaire	$e = 1{,}6 \cdot 10^{-19}\,\mathrm{C}$
Constante de Boltzmann	$k_\mathrm{B} = 1{,}4 \cdot 10^{-23}\,\mathrm{J \cdot K^{-1}}$
Constante de Planck	$h = 6{,}6 \cdot 10^{-34}\,\mathrm{J \cdot Hz^{-1}}$
Constante de Dirac	$\hbar = h/2\pi = 1{,}0 \cdot 10^{-34}\,\mathrm{J \cdot s}$
Masse de l'électron	$m_e = 9{,}1 \cdot 10^{-31}\,\mathrm{kg}$
Masse du proton	$m_p = 1{,}673 \cdot 10^{-27}\,\mathrm{kg} \gg m_e$
Masse du neutron	$m_n = 1{,}675 \cdot 10^{-27}\,\mathrm{kg} \simeq m_p$
Permittivité diélectrique du vide	$\epsilon_0 = 8{,}9 \cdot 10^{-12}\,\mathrm{F \cdot m^{-1}}$
Température d'ébullition de l'azote (sous 1 bar)	$T_\mathrm{eb}^{\mathrm{N_2}} = 77{,}4\,\mathrm{K}$
Température d'ébullition de l'hydrogène (sous 1 bar)	$T_\mathrm{eb}^{\mathrm{H_2}} = 20{,}3\,\mathrm{K}$