TDPO5 : Approche ondulatoire de la mécanique quantique

Savoirs

• Fonction d'onde 1D cartésien. Densité linéique de probabilité. Principe de superposition. Interférences.
• Équation de Schödinger, états stationnaires, équation de Schrödinger indépendante du temps.
• Particule libre : états stationnaires, relation de dispersion, paquet d'ondes, relation d'Heisenberg spatiale, courant de probabilité.
• Puits infini : quantification de l'énergie, énergie de confinement, analogie et différence avec corde vibrante.
• Puits fini : quantification de l'énergie, énergie de confinement, élargissement effectif du puits par ondes évanescentes.
• Effet tunnel et barrière de potentiel : coefficient de transmission.

Savoir-faire

• Normaliser une fonction d'onde. Relier qualitativement la fonction d'onde à la notion d'orbitale en chimie. Relier la superposition de fonctions d'ondes à la description d'une expérience d'interférences entre particules.

• Particule libre : Utiliser l'équation de Schrödinger fournie. Identifier les états stationnaires aux états d'énergie fixée. Établir et utiliser la relation : $\psi(x,t) = \varphi(x).\exp(-iEt/\hbar)$. Utiliser l'équation de Schrödinger pour la partie spatiale $\varphi(x)$. En exploitant l'expression classique de l'énergie de la particule libre, associer la relation de dispersion obtenue et la relation de de Broglie. Identifier vitesse de groupe et vitesse de la particule. Utiliser l'expression admise $\overrightarrow{j} = |\psi|^2\hbar\overrightarrow{k}/m$ et l'interpréter comme produit (densité)×(vitesse).

• Puits infini : Établir les expressions des énergies des états stationnaires. Faire l'analogie avec la recherche des pulsations propres d'une corde vibrante fixée en ses deux extrémités. Retrouver qualitativement l'énergie minimale à partir de l'inégalité de Heisenberg spatiale. Associer le confinement d'une particule quantique à une augmentation de l'énergie cinétique.
→ *Cours pour démos des expressions, exo 2 pour expressions déduites par analogie avec corde vibrante.*

• Puits fini : Mettre en place les éléments du modèle : forme des fonctions d'onde dans les différents domaines. Utiliser les conditions aux limites admises : continuité de φ et $d\varphi/dx$. Associer la quantification de l'énergie au caractère lié de la particule. Mener une discussion graphique. Interpréter qualitativement, à partir de l'inégalité de Heisenberg spatiale, l'abaissement des niveaux d'énergie par rapport au puits de profondeur infinie.
→ *Exo de cours et exo 3 pour varier légèrement.*

• Effet tunnel : Associer l'existence d'une probabilité de traverser une barrière de potentiel et l'existence de deux ondes évanescentes dans la zone classiquement interdite. Exprimer le coefficient de transmission comme un rapport de courants de probabilités.
→ *Exo 4, 5 et 6 pour varier légèrement et faire le lien avec d'autres chapitres.*

Interro de cours

1. Soit une fonction d'onde $\psi(x,t)$ définie sur l'intervalle $x \in [0, L]$. Donner la condition de normalisation de ψ.
2. Voici l'équation de Schrödinger pour une particule massique non relativiste. Donner l'interprétation de chacun des termes.
$$\underbrace{i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}}_{\text{(a)}} = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}}_{\text{(b)}} + \underbrace{V.\psi}_{\text{(c)}}$$
3. Considérons l'énergie cinétique $\mathcal{E}_c = mv^2$ d'une particule massique non relativiste. Donner l'expression de $\mathcal{E}_c$ en fonction de la quantité de mouvement p, puis en fonction de k.
4. Soit l'équation différentielle $\dfrac{d\varphi}{dx} + k^2\varphi = 0$ avec k réel. Donner les deux formes possibles pour la solution générale.
5. Même question pour l'équation différentielle $\dfrac{d\varphi}{dx} - k^2\varphi = 0$ avec k réel.
6. Donner une forme de la relation d'indétermination de Heisenberg.

7. Soit une particule de masse m dans un puits infini de largeur L. Donner les valeurs de k_n et E_n en utilisant l'entier $n \in \mathbb{N}^*$.
8. Pour le puits infini, dessiner l'allure spatiale de $\varphi(x)$ et $|\varphi(x)|^2$ des trois premiers modes.
9. Donner la fréquence d'oscillation pour une superposition des deux états propres n et $m \neq n$.
10. Pour un puits fini de hauteur V_0 (et de fond d'énergie nulle), dessiner l'allure spatiale des premiers états liés (s'ils existent) en précisant sur le schéma une longueur caractéristique δ à interpréter. Existe-t-il toujours un état lié ? Les niveaux d'énergie sont-ils plus bas ou plus haut qu'un puits infini ?
11. Expliquer qualitativement l'effet tunnel. Donner des exemples.
12. Donner l'expression du vecteur courant de probabilité.

1 Évolution d'une particule libre

On considère que l'état d'une particule quantique libre est représenté par un paquet d'ondes gaussien formé d'ondes planes progressives, dont les vecteurs d'ondes sont distribués autour d'une valeur moyenne k_0 avec une dispersion Δk, qui détermine l'extension spatiale initiale Δx_0 du paquet d'ondes à l'instant initial $t = 0$. La pulsation moyenne correspondant à k_0 est notée ω_0. On rappelle que pour un paquet d'onde gaussien, la relation d'incertitude d'Heisenberg s'écrit $\Delta x \Delta k \geq 1/2$. On suppose que l'état étudié ici vérifie à l'instant initial $t = 0$: $\Delta x_0 \Delta k_0 = 1/2$.

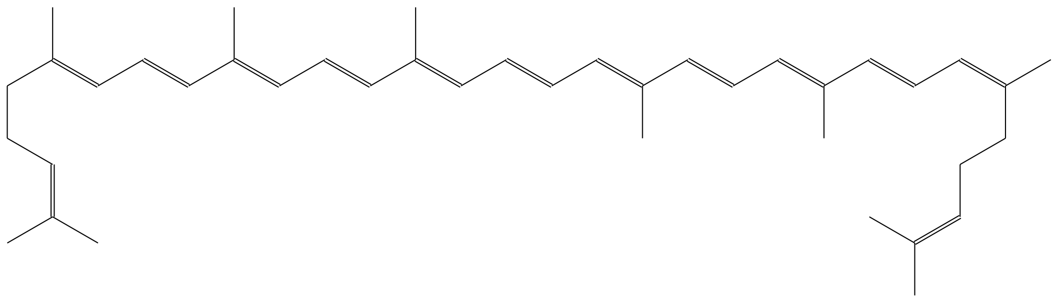
1. On peut montrer à partir de la relation de dispersion que la vitesse de groupe moyenne est $v_{g0} = \hbar k_0/m$. En déduire qu'à la largeur Δk, correspond une dispersion de la vitesse de groupe Δv_g autour de la valeur moyenne v_{g0}. Exprimer Δv_g en fonction de $\hbar$, m et Δx_0.
2. En déduire la largeur du paquet d'ondes $\Delta x(t)$ après une évolution d'une durée t depuis l'origine. Déterminer l'instant t_0 pour lequel la largeur du paquet d'ondes a doublé.
3. Application numérique, avec $\hbar = 1,05.10^{-34}$ J.s. Calculer t_0 pour :
   — un électron, de masse $m = 10^{-30}$ kg, initialement confiné dans un atome $\Delta x_0 = 10^{-10}$ m.
   — une gouttelette d'eau, de rayon égal à 10 μm et de masse $m = 4.10^{-12}$ kg.

2 Couleur rouge de la tomate

Considérons une particule de masse m confinée dans un segment de longueur L et de hauteur infinie.

1. Donner les longueurs d'ondes λ_n associées aux états stationnaires dus au confinement.
2. En déduire une expression des impulsions p_n associées.
3. En déduire finalement que l'énergie cinétique est quantifiée selon l'expression $E_n = n^2 E_1$ avec E_1 à exprimer en fonction de h, m et L.
4. Soit une boule de billard de masse $m = 0,2$ kg sur une table de taille typique $L = 2$ m. Montrer que la quantification n'est pas observable.

Le lycopène de formule brute $C_{40}H_{56}$ est un antioxydant qu'on trouve dans la tomate, la pastèque ou encore le pamplemousse. On l'utilise aussi comme colorant alimentaire sous le code E160D. La structure de cette molécule est donnée ci-dessous, elle comporte onze doubles liaisons C=C conjuguées sur une longueur totale $L = 1,85$ nm.



5. Calculer l'énergie E_1 du niveau fondamental.
6. On rappelle qu'on peut placer au maximum deux électrons par niveau électronique. Quel est l'indice n du plus haut niveau rempli à l'état fondamental ? Et l'indice m du plus bas niveau vide ? Exprimer la différence d'énergie entre ces niveaux et en déduire la longueur d'onde λ d'un photon permettant cette transition. Expliquer alors la couleur rouge des fruits contenant du lycopène.

3 Puits semi-infini

Une particule de masse m est placée dans un champ énergétique de potentiel

$$V(x) = \begin{cases} +\infty \text{ pour } x < 0 \\ 0 \text{ pour } 0 \leq x \leq a \\ V_0 > 0 \text{ pour } x > a \end{cases}$$

On cherche une solution stationnaire d'énergie E de l'équation de Schrödinger et on suppose que $0 < E < V_0$. On pose

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \quad k_0 = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} \text{ et } \delta = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m(V_0 - E)}}$$

a) Justifier qu'on peut chercher le terme spatial de la fonction d'onde sous la forme

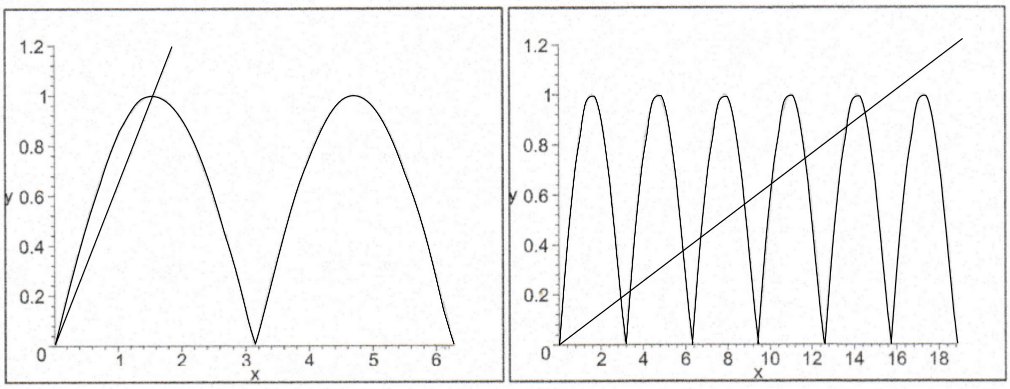
$$\varphi(x) = \begin{cases} 0 \text{ pour } x < 0 \\ A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx} \text{ pour } 0 \leq x \leq a \\ A_2 e^{-\frac{x}{\delta}} + B_2 e^{\frac{x}{\delta}} \text{ pour } x > a \end{cases}$$

b) Justifier que $B_2 = 0$.

c) Par application des conditions de continuité, écrire le système de trois équations vérifiées par A_1, A_2 et B_1.

d) En éliminant ces trois constantes entre les équations, établir la relation entre k, a et δ. Montrer qu'on peut l'écrire sous la forme $|\sin(ka)| = \frac{k}{k_0}$ avec $\tan(ka) < 0$.

e) Cette équation se résout graphiquement. Voilà l'allure des fonctions $|\sin(x)|$ et $\frac{x}{\beta}$ pour $\beta = \frac{\pi}{2}$ et pour $\beta = 5\pi$:



En déduire que :

- si $k_0 < \frac{\pi}{2a}$, le problème n'a pas de solution stationnaire ;
- si $k_0 > \frac{\pi}{2a}$, il n'y a qu'un nombre fini de valeurs possibles pour l'énergie et le problème est quantifié ;
- si $k_0 \gg \frac{\pi}{2a}$, on retrouve la quantification du puits infini.

4 Transmission d'une barrière de potentiel

On étudie le mouvement d'une particule quantique dans le potentiel $V(x)$ (marche de potentiel) représenté sur la figure suivante et défini 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 $k_1 = \dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ 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 : $\varphi(x) = A\exp(ik_1x) + rA\exp(-ik_1x)$ pour $x < 0$ (région I) et $\varphi(x) = t\exp(ik_2x)$ pour $x \geq 0$ (région II), où A est 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'ondes représentant une particule quantique incidente. La figure 34.27 représente l'évolution dans l'espace et dans le temps de ce paquet d'ondes. La zone colorée correspond à la région II ($x \geq 0$) où $V(x) = V_0$. Le temps s'écoule du haut vers le bas de la figure.

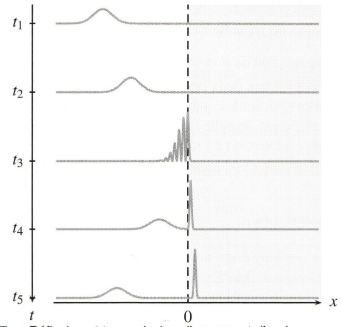


Figure 34.27 – Réflexion et transmission d'un paquet d'ondes sur une marche de potentiel.

Commenter aussi précisément que possible ces graphes.

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.

5 Effet tunnel

On cherche à déterminer certains états stationnaires d'une particule quantique de masse m évoluant dans le potentiel suivant (barrière de potentiel) :

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{pour } x < -\dfrac{a}{2} \text{ (région I)}, \\ V_0 > 0 & \text{pour } -\dfrac{a}{2} \leq x \leq \dfrac{a}{2} \text{ (région II)}, \\ 0 & \text{pour } x > \dfrac{a}{2} \text{ (région III)}. \end{cases}$$

On se limite au cas où $E > V_0$. On pose $k = \dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ et $K = \dfrac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$.

1. Décrire qualitativement le mouvement de la particule dans le cas où il peut être décrit dans le cadre de la mécanique classique.

2. Dans le cadre d'une description quantique, l'état de la particule est décrit par la fonction d'onde $\psi(x,t) = \varphi(x)\exp(-iEt/\hbar)$. Établir l'équation différentielle vérifiée par $\varphi(x)$ dans chacune des trois régions.

3. En l'absence de source de particules quantiques du côté $x > a/2$, proposer une forme adéquate de $\varphi(x)$ dans chacune des trois régions.

Préciser les conditions aux limites et les conditions de raccordement qui doivent être vérifiées par $\varphi(x)$.

4. Les conditions de raccordement permettent d'en déduire les expressions des probabilités de transmission au-delà de la barrière, T, et de réflexion par la barrière, R. On donne :

$$T = \frac{1}{1 + \dfrac{V_0^2}{4E(E-V_0)}\sin^2\left(\dfrac{a\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}\right)}.$$

a. Déterminer l'expression de R à partir de l'expression de T.

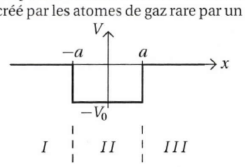
b. Représenter l'allure de T et de R en fonction de E pour $E > V_0$. Commenter.

5. Des électrons d'énergie cinétique égale à 10 eV s'approchent d'une barrière de potentiel de 4 eV de haut. Déterminer les épaisseurs de la barrière pour laquelle la transmission du faisceau électronique est totale. Comparer, dans cette situation, l'épaisseur de la barrière à la longueur d'onde de de Broglie des électrons dans la barrière.

6 Effet Ramsauer

Carl Ramsauer observe en 1921 que pour certaines énergies particulières d'un faisceau électronique incident sur des gaz rares, le milieu devient transparent et le faisceau est entièrement transmis. Pour expliquer ce phénomène, on modélise le potentiel créé par les atomes de gaz rare par un puits de potentiel V défini par :

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < -a \\ -V_0 & \text{si } -a \leq x \leq a \\ 0 & \text{si } x > a \end{cases}.$$



On cherche une solution stationnaire de l'équation de Schrödinger pour un électron de masse m et d'énergie $E > 0$ qui est envoyé sur le puits de potentiel dans la direction de l'axe (Ox).

1. Donner la forme de la fonction d'onde spatiale φ dans les différents domaines I, II et III. On notera $q = \sqrt{2m(V_0+E)}/\hbar$ et $k = \sqrt{2mE}/\hbar$.
2. Écrire les conditions aux limites en $x = -a$ et $x = a$.
3. Montrer que le coefficient de transmission en probabilité T est donné par la relation :

$$T = \frac{1}{1 + \dfrac{(k^2-q^2)^2}{4k^2q^2}\sin^2(2qa)}.$$

En déduire l'expression du coefficient de réflexion R.

4. Montrer que $T = 1$ pour certaines valeurs de l'énergie E. Interpréter l'effet Ramsauer en faisant une analogie avec la cavité Fabry-Pérot rencontrée en optique (voir exercice C du chapitre 2).
5. Pour le xénon, l'énergie la plus basse pour laquelle est observé l'effet Ramsauer est $E = 1{,}0$ eV. Donner un ordre de grandeur de a et en déduire un ordre de grandeur de la profondeur du puits atomique V_0.