On5 – Corrigé des exercices 1 et 2

¤ Exercice 1

a) La fonction d'onde de la particule libre obéit à l'équation de Schrödinger avec potentiel nul : $i\hbar\dfrac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}=-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2}$.

On injecte dans cette équation la forme d'une OPPH, c'est-à-dire $\psi(x,t)=A\exp[-i(\omega t-kx)]$, et on simplifie par l'exponentielle : $\hbar\omega=k^2\dfrac{\hbar^2}{2m}$ soit $\boxed{\omega=\dfrac{\hbar}{2m}k^2}$.

b) Vitesse de groupe du paquet d'ondes : $\boxed{v_{g0}=\left(\dfrac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k}\right)_{\omega_0}}$. Le calcul avec la relation de dispersion donne $\boxed{v_{g0}=\dfrac{\hbar k_0}{m}}$.

c) Pour chaque composante $v_g=\dfrac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k}=\dfrac{\hbar k}{m}$, donc $\Delta v_g=\dfrac{\hbar}{m}\Delta k$. De plus, selon la relation d'indétermination de Heisenberg, $\Delta x\cdot\Delta p_x\geq\dfrac{\hbar}{2}$, soit $\Delta x\cdot\Delta k\geq\dfrac{1}{2}$ avec $p_x=\hbar k$. Initialement on peut supposer l'extension spatiale minimale, soit $\Delta x_0\cdot\Delta k=\dfrac{1}{2}$. Alors $\boxed{\Delta v_g=\dfrac{\hbar}{2m\,\Delta x_0}}$.

d) Après une durée *t*, la différence de distance parcourue entre les ondes les plus rapides et les plus lentes est $\Delta v_g\cdot t$: le paquet d'ondes a donc une largeur $\boxed{\Delta x(t)=\Delta x_0+\Delta v_g\cdot t}$. On obtient $\Delta x(t_2)=2\,\Delta x_0$ pour $\boxed{t_2=\dfrac{2m(\Delta x_0)^2}{\hbar}}$.

e) AN $\boxed{t_2=2\cdot10^{-16}\ \text{s}}$.

Dans un cristal, un électron libre va d'un atome à son voisin (distance $d\approx2\cdot10^{-10}$ m) en une durée $t\approx\dfrac{d}{v}\approx2\cdot10^{-15}$ s. Cette durée est 10 fois plus grande que la durée d'étalement calculée précédemment, donc l'électron est très vite « étalé » sur un grand nombre d'atomes. Autrement dit, pour l'étude de la conduction électrique, la modélisation d'un électron comme une particule quasi ponctuelle (localisée) ne convient pas : les électrons doivent être considérés comme un ensemble de particules délocalisées sur l'ensemble du réseau.

¤ Exercice 2

a) La fonction d'onde est l'amplitude de probabilité de présence de l'électron : en dehors du segment de longueur *L* (molécule), la probabilité de présence de l'électron est nulle.

b) On résout l'équation différentielle $\dfrac{\mathrm{d}^2\varphi}{\mathrm{d}x^2}+\dfrac{8\pi^2mE}{h^2}\varphi(x)=0$, qui est analogue à celle d'un oscillateur harmonique. Forme des solutions : $\varphi(x)=A\cos(kx+\alpha)$ en posant $k=\sqrt{\dfrac{8\pi^2mE}{h^2}}$. Comme $\varphi(0)=0=A\cos\alpha$, on prend $\alpha=-\dfrac{\pi}{2}$, ce qui donne $\varphi(x)=A\sin(kx)$. Enfin $\varphi(L)=0=A\sin(kL)$, donc $kL=n\pi$, d'où finalement $\boxed{\varphi(x)=A\sin\left(\dfrac{n\pi x}{L}\right)}$.

c) On écrit la condition de normalisation : $\displaystyle\int_0^L|\psi(x,t)|^2\,\mathrm{d}x=\int_0^L|\varphi(x)|^2\,\mathrm{d}x=1$ (probabilité totale de présence de l'électron).

Or $\displaystyle\int_0^L|\varphi(x)|^2\,\mathrm{d}x=\int_0^L A^2\sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right)\mathrm{d}x=A^2\int_0^L\left[\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\cos\left(\frac{2n\pi x}{L}\right)\right]\mathrm{d}x=A^2\left[\frac{x}{2}-\frac{L}{4n\pi}\sin\left(\frac{2n\pi x}{L}\right)\right]_0^L=A^2\frac{L}{2}+0$ donc $\boxed{A=\sqrt{\dfrac{2}{L}}}$.

d) D'après les calculs précédents : $k_n=\sqrt{\dfrac{8\pi^2mE_n}{h^2}}=\dfrac{n\pi}{L}$ d'où $\boxed{E_n=\dfrac{n^2h^2}{8mL^2}}$.

e) AN $\boxed{E_{11}=2{,}18\cdot10^{-18}\ \text{J}=13{,}6\ \text{eV}}$ et $\boxed{E_{12}=2{,}59\cdot10^{-18}\ \text{J}=16{,}2\ \text{eV}}$.

f) Un photon absorbé a alors une énergie $E=E_{12}-E_{11}=(144-121)\dfrac{h^2}{8mL^2}$, soit $\boxed{E=\dfrac{23\,h^2}{8mL^2}}$. AN $\boxed{E=4{,}14\cdot10^{-19}\ \text{J}=2{,}6\ \text{eV}}$. Or $E=hf=\dfrac{hc}{\lambda}$ donc $\boxed{\lambda=\dfrac{hc}{E}}$. AN $\boxed{\lambda=480\ \text{nm}}$.

Cette longueur d'onde correspond à du bleu. Lorsqu'un organisme contenant une grande quantité de cette molécule reçoit de la lumière blanche, il absorbe donc beaucoup dans le bleu, mais diffuse les autres couleurs, ce qui explique la couleur résultante orangée (complémentaire du bleu).