TD MQ2/MQ3

Mécanique quantique

Particule quantique dans des potentiels

Pour l'intégralité des exercices, il y a besoin de l'équation de Schrödinger. Je vous la fournis donc en préambule :

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + V(x)\psi(x,t)$$

Ex. 1 Oscillateur harmonique quantique

On considère une particule quantique, de masse m, soumise à une énergie potentielle de la forme $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$.

Dans un état stationnaire d'énergie E, on écrit la fonction d'onde sous la forme $\psi(x,t) = \Phi(x)\ \mathrm{e}^{-\frac{iEt}{\hbar}}$. On rappelle l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + V(x)\psi(x,t)$$

1. Donner un exemple en physique classique, de système soumis à des potentiels de ce type.
2. Écrire l'équation de Schrödinger indépendante du temps dans le cas considéré.
3. Pour l'état fondamental, la fonction d'onde indépendante du temps vaut $\Phi(x) = A\ \mathrm{e}^{-\frac{x^2}{a^2}}$.
   (a) Déterminer la constante A.
   (b) Représenter l'allure de la densité de probabilité de présence de la particule. En déduire, sans calcul, la valeur de la position moyenne $\langle x\rangle$ de la particule.
   (c) Déterminer l'expression de l'énergie E et de a en fonction de m, ω et $\hbar$.
4. Déterminer la moyenne quadratique $\langle x^2\rangle$.
5. Que dire de l'étalement des mesures en quantité de mouvement dans cet état ?

Formulaire : On donne pour $\alpha > 0$:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\alpha u^2}\mathrm{d}u = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \qquad \text{et} \qquad \int_{-\infty}^{+\infty} u^2\ \mathrm{e}^{-\alpha u^2}\mathrm{d}u = \sqrt{\frac{\pi}{4\alpha^3}}$$

Ex. 2 Energie de Fermi pour un métal (*Ecrit Centrale PC 2022*)

Q 32. Pour une solution stationnaire $\psi(x,t) = \varphi(x)\chi(t)$, établir l'équation vérifiée par la fonction d'amplitude $\varphi(x)$ en faisant apparaitre l'énergie E de la particule.

IV.B – Gaz d'électrons sur un segment

Les électrons contenus dans un milieu conducteur sont assimilés à des particules évoluant dans une boite à une dimension de longueur L : $V(x) = 0$ pour $0 < x < L$, $V(x) = +\infty$ en dehors.

La densité d'électrons libres est $N_0 \approx 1 \times 10^{29}\ \mathrm{m^{-3}}$ dans un métal. On considérera donc qu'il y en a environ $N_0^{1/3}$ électrons libres par unité de longueur dans cette boite de longueur L.

Q 33. Avec ce choix d'origine de l'énergie potentielle, l'énergie E de la particule peut-elle être négative ?

Q 34. Justifier que les valeurs prises par la grandeur $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$ sont de la forme $k_n = n\,k_1$, où n est un entier strictement positif. Exprimer complètement, à un facteur de phase près, les fonctions d'ondes $\psi_n(x,t)$ associées à ces états stationnaires dont les énergies sont notées E_n.

Q 35. Représenter graphiquement la relation $E = f(k)$ en faisant figurer avec une échelle adaptée les trois états stationnaires de plus faible énergie.

NB. Pour les applications numériques qui suivent, les énergies devront être exprimées en eV.

Q 36. Calculer la valeur numérique de E_1, pour $L = 1\ \mu\mathrm{m}$. Comparer cette valeur à l'ordre de grandeur de l'énergie d'agitation thermique à $T = 300\ \mathrm{K}$. Pourquoi parle-t-on de quasi-continuum d'énergie au sein du matériau ?

Q 37. À $T = 0\ \mathrm{K}$, les électrons peuplent les états obtenus par énergie croissante, avec au plus deux électrons dans le même état d'énergie d'après le principe d'exclusion de Wolfgang Pauli. En déduire le nombre de Fermi n_F, défini par la valeur maximale atteinte par l'entier n à $T = 0\ \mathrm{K}$. Exprimer l'énergie de Fermi E_F associée en fonction de N_0, L et E_1.

Données :

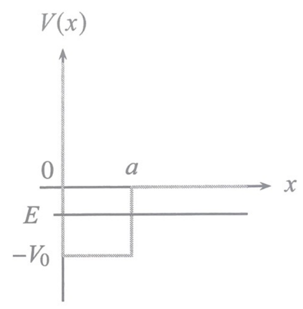
- Masse d'un électron $m = 9.11 \times 10^{-31}\ \mathrm{kg}$
- Constante de Boltzmann $k_B = 1.38 \times 10^{-23}\ \mathrm{J\,K^{-1}}$
- Constante de Planck $h = 6.63 \times 10^{-34}\ \mathrm{J\,s}$

Ex. 3 Puits mixte infini/fini

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

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

avec $V_0 > 0$.



La fonction d'onde représentant un état stationnaire d'énergie E s'écrit $\psi(x,t) = \varphi(x)\ \mathrm{e}^{-\frac{iEt}{\hbar}}$.

1. Quelles inégalités vérifie l'énergie E de la particule dans un état lié ?

On pose alors $k = \dfrac{\sqrt{2m(V_0 + E)}}{\hbar} > 0$ et $q = \dfrac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} > 0$.

2. Expliciter les conditions limites portant sur la partie spatiale $\varphi(x)$ de la fonction d'onde.

3. Déterminer la forme de la partie spatiale de la fonction d'onde dans les différentes régions de l'espace. Commenter la forme de la fonction d'onde dans la région $x > a$ et donner l'expression de la profondeur de pénétration δ de la particule dans cette région.
4. En utilisant les conditions limites, montrer que les états liés vérifient

$$q = -k\text{cotan}(ka)$$

De par leur définition, on a aussi $k^2 + q^2 = \dfrac{2mV_0}{\hbar^2}$.

5. En utilisant le graphe du cours (partie : résolution graphique du puits de potentiel fini), déterminer que pour qu'il existe un unique état lié dans le puits mixte, il est nécessaire que V_0 soit compris entre deux valeurs V_{min} et V_{max} dont on donnera les expressions en fonction de m, a et de constantes fondamentales.

On utilise ce modèle du puits mixte pour décrire l'interaction nucléaire forte entre un proton et un neutron dans un noyau d'hydrogène.

6. (a) Expliquer en quoi ce potentiel peut modéliser (simplement) l'interaction nucléaire forte.
   (b) L'expérience montre qu'il existe un unique état lié, appelé "deutéron". On donne $a = 2.8 \times 10^{-15}\,\text{m}$ et m la masse réduite du proton et du neutron $m = \dfrac{m_n}{2}$ avec $m_n = 1.7 \times 10^{-27}\,\text{kg}$ la masse d'un nucléon. Déterminer les valeurs numériques de V_{min} et V_{max} en eV.
   (c) L'énergie de liaison du deutéron est $E = -2.2\,\text{MeV}$. En déduire la valeur de q et donc de δ. Estimer également avec la question précédente les valeurs minimale et maximale possibles pour k.
   (d) En utilisant une résolution numérique à la calculatrice, déterminer la valeur numérique de V_0.

Donnée : Constante de Planck $h = 6.63 \times 10^{-34}\,\text{J s}$

Ex. 4 Double puits de potentiel

On étudie l'évolution d'une particule quantique de masse m dans un double puits de potentiel, représenté ci-contre.

On considère un état stationnaire, de fonction d'onde $\psi(x,t) = \varphi(x)\,\text{e}^{-\frac{iEt}{\hbar}}$, où l'énergie E de la particule est faible devant la hauteur V_0 de la barrière de potentiel : $E \ll V_0$.

1. Pourquoi peut-on se limiter à chercher des états symétriques et antisymétriques par rapport à $x = 0$?

Dans un premier temps, on se limite à étudier un état symétrique par rapport à $x = 0$, c'est-à-dire que la partie spatiale de la fonction d'onde est paire.

On pose $k = \dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ et $q = \dfrac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar}$.

2. Montrer que la partie spatiale de la fonction d'onde dans la région I ($-a - \dfrac{D}{2} \leqslant x \leqslant -\dfrac{D}{2}$) s'écrit

$$\varphi(x) = A\,\sin\left(k\left(x + a + \frac{D}{2}\right)\right)$$

avec A une constante. Déterminer l'expression de la partie spatiale de la fonction d'onde dans les autres régions de l'espace.
3. Ecrire les conditions de raccordement et en déduire la relation de quantification, dans la limite où $qD \gg 1$:

$$\tan(ka) = -\frac{k}{q}\left(1 + \text{e}^{-qD}\right)$$

4. En supposant $qD \gg 1$ et $qa \gg 1$, tracer les graphes de $ka \mapsto \tan(ka)$ et $ka \mapsto -\dfrac{ka}{qa}\left(1 + \text{e}^{-qD}\right)$ et en déduire grossièrement l'expression de k pour l'état fondamental symétrique.

Une résolution approchée donne l'expression de l'énergie de l'état fondamental symétrique (on ne cherchera pas à déterminer cette expression)

$$E_s = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\left(1 - 2\frac{1 + \text{e}^{-qD}}{qa}\right)$$

L'énergie E_a de l'état stationnaire antisymétrique de plus faible énergie peut être évalué en suivant une démarche similaire. On peut alors calculer la différence d'énergies

$$\Delta E = E_a - E_s = \frac{h^2}{mqa^3}\,\mathrm{e}^{-qD}$$

5. On considère un état de la particule quantique défini par la superposition des deux états symétrique et antisymétrique d'énergies respectives E_s et E_a. Montrer que la densité de probabilité de présence oscille à une fréquence f dont on donnera l'expression.
6. **Application :** Ce modèle de puits de potentiel permet de décrire l'inversion de Walden de la molécule d'ammoniac (passage de l'atome d'azote de part et d'autre du plan défini par les atomes d'hydrogène). Quelle est l'influence de la hauteur et de la largeur de la barrière de potentiel sur la fréquence d'oscillation ?

Ex. 5 Courant tunnel

On considère une barrière de potentiel de hauteur $V_0 = 2.0\,\mathrm{eV}$ et de largeur $a = 1.0\,\mathrm{nm}$ sur laquelle on envoie un électron de masse $m = 9.1 \times 10^{-31}\,\mathrm{kg}$. Le potentiel $V(x)$ est donc défini par :

$$\begin{cases} V(x) = 0 & \text{si } x < -a/2 \\ V(x) = V_0 & \text{si } -a/2 < x < a/2 \\ V(x) = 0 & \text{si } x > a/2 \end{cases}$$

On s'intéresse à un état stationnaire d'énergie $E = 1.0\,\mathrm{eV}$ de fonction d'onde $\psi(x,t) = \Phi(x)\,\mathrm{e}^{-\frac{iEt}{\hbar}}$.

1. Exprimer la forme de la partie spatiale de la fonction d'onde dans la région $-a/2 < x < a/2$. Commenter et donner l'expression de la profondeur de pénétration δ en fonction de m, E, V_0 et $\hbar$.
2. Justifier que l'on peut se placer dans l'approximation d'une barrière épaisse.

Dans l'approximation d'une barrière épaisse, on peut montrer que le coefficient de transmission de la barrière de potentiel par effet tunnel s'écrit :

$$T = \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2}\,\mathrm{e}^{-\frac{2a}{\delta}}$$

3. On envoie un faisceau d'électrons d'intensité $I = 0.1\,\mathrm{mA}$ sur cette barrière de potentiel. Calculer l'intensité du courant tunnel qui émerge de l'autre côté de la barrière.
4. Toutes choses égales par ailleurs, on remplace les électrons par des protons de masse $m = 1.7 \times 10^{-27}\,\mathrm{kg}$. Déterminer la nouvelle valeur de l'intensité du courant tunnel émergeant de l'autre côté de la barrière.

Ex. 6 Marche de potentiel

On étudie le mouvement d'une particule quantique de masse m dans le potentiel d'énergie $V(x)$ suivant, appelé marche de potentiel :

$$\begin{cases} V(x < 0) = 0 \\ V(x \geqslant 0) = V_0 > 0 \end{cases}$$

On envisage, dans un premier temps, le cas d'une particule incidente envoyée depuis $x = -\infty$ et d'énergie $E > V_0$.

1. Décrire le mouvement de la particule si celle-ci était décrite par la physique classique. On précisera la vitesse que la particule aurait dans les différentes régions de l'espace.

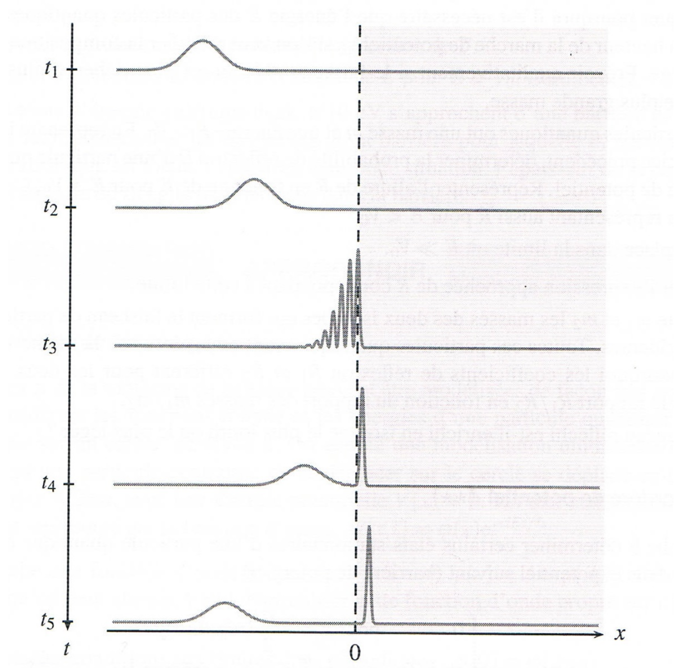
On pose $k_1 = \dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ et $k_2 = \dfrac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}$.

2. Montrer qu'un état stationnaire de la particule peut être décrit par la fonction d'onde propre :

$$\begin{cases} \Phi(x) = A\,\mathrm{e}^{ik_1x} + rA\,\mathrm{e}^{-ik_1x} & \text{si } x < 0 \\ \Phi(x) = tA\,\mathrm{e}^{ik_2x} & \text{si } x \geqslant 0 \end{cases}$$

   où A est une constante non nulle et r et t sont des coefficients complexes, que l'on ne cherchera pour le moment pas à déterminer. Interpréter physiquement ce que représente la fonction d'onde dans les différentes régions de l'espace.

3. Donner les expressions des courants de probabilité modélisant la particule incidente, la particule réfléchie et la particule transmise.
4. Ecrire les conditions de raccordement de la fonction d'onde propre en $x = 0$. En déduire les expressions de r et de t.
5. Définir puis déterminer les expressions des coefficients de réflexion R et de transmission T en probabilité. Discuter les spécificités du comportement quantique vis-à-vis du comportement classique.
6. Examiner le cas où $E \gg V_0$ et commenter.
7. En superposant des états stationnaires d'énergies voisines de E, on forme un paquet d'ondes représentant une particule quantique incidente. La figure ci-dessous représente l'évolution dans l'espace et dans le temps de la densité de probabilité de ce paquet d'ondes. Le temps s'écoule du haut vers le bas de la figure. Commenter ces graphes.



On envisage désormais le cas d'une particule quantique incidente envoyée depuis $x = -\infty$ et d'énergie $E < V_0$.

8. Déterminer la forme des fonctions d'onde propres dans les différentes régions de l'espace. En déduire le coefficient de réflexion R en probabilité. Commenter.
9. En guise de synthèse, tracer l'allure de R en fonction de E à la fois pour $E < V_0$ et pour $E > V_0$.

Application : enrichissement isotopique
Une source envoie, depuis $x = -\infty$, un faisceau de particules quantiques, constitué d'un mélange de deux isotopes de masses m_1 et $m_2 > m_1$. Tous ces isotopes sont envoyés à la même vitesse. On souhaite utiliser le phénomène de réflexion sur la marche de potentiel pour modifier la composition isotopique du mélange.

10. 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 si le faisceau réfléchi est plus riche ou plus pauvre en isotope de plus grande masse.