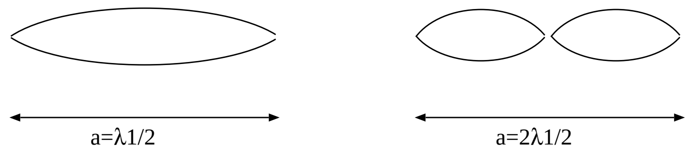
TD2 Mécanique quantique

I. Laser

1. Dans le puits les fonctions d'onde sont des ondes stationnaires analogues à la corde de Melde avec des noeuds de probabilité de présence aux extrémités du puits. On déduit des schémas la relation de récurrence $a = \frac{n\lambda_n}{2}$ soit $\lambda_n = \frac{2a}{n} = \frac{h}{mv_n}$ est la longueur d'onde de De Broglie de l'électron.



On en déduit l'expression de l'énergie qui est égale à l'énergie cinétique car dans le puits infini l'énergie potentielle est nulle soit $E_n = \frac{mv_n^2}{2} = \frac{n^2h^2}{8ma^2}$ (pour $n \geq 1$): dans le puits l'énergie de l'électron est quantifiée, elle ne peut prendre que certaines valeurs.

2. Il est important de distinguer dans cet exercice la longueur d'onde de De Broglie que l'on associe à la particule $\lambda = \frac{h}{mv}$ et la longueur d'onde du photon qui est émis lorsque l'électron passe du niveau d'énergie excité E_2 au niveau d'énergie E_1, l'énergie du photon s'écrit $E = E_2 - E_1 = \frac{hc}{\lambda_{2-1}}$ avec $E_1 = \frac{h^2}{8ma^2}$ et $E_2 = \frac{4h^2}{8ma^2}$ soit $E_2 - E_1 = \frac{hc}{\lambda_{2-1}} = \frac{3h^2}{8ma^2}$ d'où $a = \sqrt{\frac{3h\lambda_{2-1}}{8mc}} = 7,98.10^{-10}\ m$.

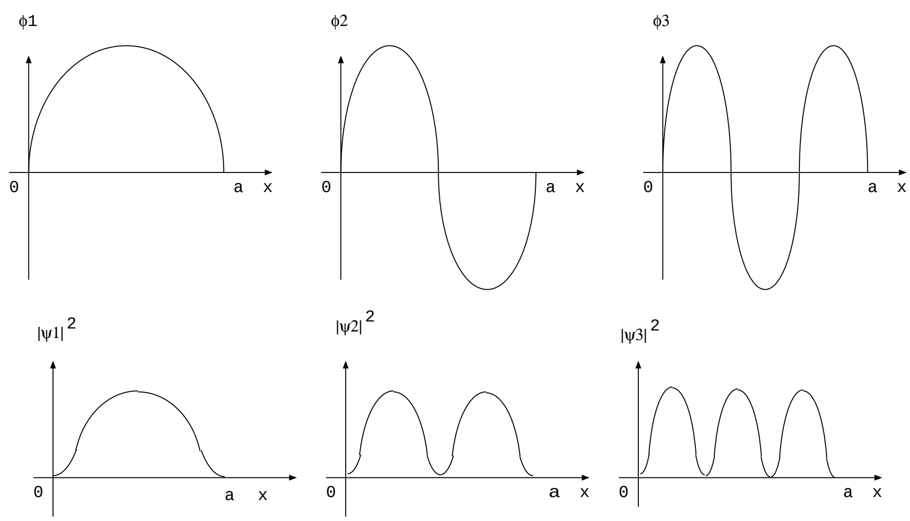
II. Particule dans un puits infini

1. La particule ne peut pas se trouver dans une zone où le potentiel est infini donc la fonction d'onde est nulle pour $x < 0$ et $x > a$.

2. Dans l'équation de Schrödinger on fait $V = 0$ et on remplace ψ par son expression, on trouve $\ddot{\phi}_n + \frac{2mE}{\hbar^2}\phi_n = 0$: équation d'un OH de pulsation spatiale $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$.

Dans le puits on peut choisir des solutions réelles soit $\phi_n = A\cos(kx) + B\sin(kx)$ et on applique les équations de continuité $\phi_n(x = 0) = \phi(x = 0^-) = 0 = A$ et $\phi_n(x = a) = \phi(x = a^+) = 0 = B\sin(ka)$ d'où $\sin(ka) = 0$ soit $k_n a = n\pi$ et $k_n = \frac{n\pi}{a}$. On a donc $\phi_n(x) = B\sin(\frac{n\pi x}{a})$.

On normalise la fonction en écrivant $\int_0^a |\underline{\psi}|^2 dx = 1$: cette relation traduit que la particule est quelque part dans le puits entre 0 et a donc la probabilité de la trouver dans le puits vaut 1. Soit $B^2 \int_0^a \sin^2(\frac{n\pi x}{a})dx = 1$ et donc $B^2\frac{a}{2} = 1$. On a $\phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin(\frac{n\pi x}{a})$.



3. On utilise les relations $k = \sqrt{\dfrac{2mE}{\hbar^2}}$ et $k = \dfrac{n\pi}{a}$. On en déduit $E_n = \dfrac{n^2\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$ avec $n \geq 1$. L'énergie de la particule est quantifiée, elle ne peut prendre que certaines valeurs. Plus la largeur du puits est faible et plus les niveaux d'énergie sont espacées et plus le niveau fondamental a une grande énergie

4. On reconnaît l'état $n = 3$ d'énergie E_3. La fonction d'onde s'écrit donc $\underline{\psi}(x,t) = A\sin(\dfrac{3\pi x}{a})e^{-iE_3 t/\hbar}$.

5. On reconnaît la superposition des états $n = 1$ d'énergie E_1 et $n = 2$ d'énergie E_2. La fonction d'onde s'écrit donc $\underline{\psi}(x,t) = C\sin(\dfrac{\pi x}{a})e^{-iE_1 t/\hbar} + D\sin(\dfrac{2\pi x}{a})e^{-iE_2 t/\hbar}$.

On exprime la densité de probabilité soit $\dfrac{dP}{dx} = \underline{\psi}\underline{\psi}^* = (C\sin(\dfrac{\pi x}{a})e^{-iE_1 t/\hbar} + D\sin(\dfrac{2\pi x}{a})e^{-iE_2 t/\hbar})(C\sin(\dfrac{\pi x}{a})e^{+iE_1 t/\hbar} + D\sin(\dfrac{2\pi x}{a})e^{+iE_2 t/\hbar}) = C^2\sin^2(\dfrac{\pi x}{a}) + D^2\sin^2(\dfrac{2\pi x}{a}) + CD\sin(\dfrac{\pi x}{a}\sin(\dfrac{2\pi x}{a}(e^{-iE_1 t/\hbar}e^{+iE_2 t/\hbar} + e^{+iE_1 t/\hbar}e^{-iE_2 t/\hbar}) = C^2\sin^2(\dfrac{\pi x}{a}) + D^2\sin^2(\dfrac{2\pi x}{a}) + 2CD\sin(\dfrac{\pi x}{a}\sin(\dfrac{2\pi x}{a}\cos(\dfrac{E_2 - E_1}{\hbar}t)$.

$C^2\sin^2(\dfrac{\pi x}{a})$ désigne la densité de probabilité que la particule se trouve dans l'état d'énergie E_1.

$D^2\sin^2(\dfrac{2\pi x}{a})$ désigne la densité de probabilité que la particule se trouve dans l'état d'énergie E_2.

Et le terme supplémentaire est un terme oscillant de pulsation $\omega = \dfrac{E_2 - E_1}{\hbar} = \dfrac{3\pi^2\hbar}{2ma^2}$.

6. $E_1 = \dfrac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$

Pour un proton dans un noyau, on a $a = 10^{-15}\ m$ (taille du noyau) soit $E_1 = \dfrac{\pi^2\hbar^2}{210^3 9.10^{-31}(10^{-15})^2} = 5,4.10^{-11}\ J$.

Pour un électron dans un atome, on a $a = 10^{-10}\ m$ (taille de l'atome) soit $E_1 = \dfrac{\pi^2\hbar^2}{29.10^{-31}(10^{-10})^2} = 5,5.10^{-18}\ J$.

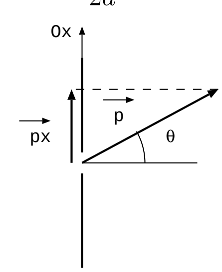
III. **Diffraction**

1. Pour un photon on a $\lambda = \dfrac{h}{p}$.

2. et **3.** L'inégalité d'Heisenberg s'écrit $\Delta x \Delta p_x \leq \dfrac{\hbar}{2}$ où Δx désigne l'incertitude sur la position x et Δp_x désigne l'incertitude sur la quantité de mouvement p_x. Cette inégalité veut dire qu'il est impossible de connaître avec précision la position et la quantité de mouvement (soit sa vitesse car $p = mv$) de la particule.

Ici dans le trou, l'incertitude sur la position selon Ox est $\Delta x = a$ d'où $\Delta p_x \leq \dfrac{\hbar}{2a}$.

Or p_x désigne la projection de la quantité de mouvement selon Ox, elle est égale à $p_x = p\sin\theta = \dfrac{h}{\lambda}\sin\theta$. La longueur d'onde du photon est fixée donc l'incertitude sur p_x est proportionnelle à l'incertitude sur $\sin\theta$. On a $\Delta(\sin\theta) \leq \dfrac{\lambda}{4\pi a}$. Cette relation traduit que l'incertitude sur θ est d'autant plus grande que l'ouverture du trou est petite: c'est la diffraction (le faisceau diffracte d'autant plus que la largeur du trou est petite).



IV. **Champ de force appliqué à une particule**

1. On ne peut prendre que l'exponentielle d'une grandeur sans unité donc $\omega_0 t$ est sans unité et ω_0 est en s^{-1}.

La probabilité de présence de la particule entre x et $x + dx$ s'écrit $dP = |\underline{\psi}|^2 dx$. dP est une probabilité donc n'a pas d'unité et dx est en m donc $\underline{\psi}$ est en $m^{-1/2}$ et A a la même unité que $\underline{\psi}$ car des exponentielles sont des nombres sans unité.

2. On a la relation $\int_0^{\infty} |\underline{\psi}|^2 dx = 1$ qui traduit que la probabilité de trouver la particule sur l'axe Ox est 1. Soit en remplaçant $\underline{\psi}$ par son expression: $A^2 \int_0^{\infty} e^{-m\omega_0 x^2/\hbar} dx = 1$ et d'après l'énoncé $\int_0^{\infty} e^{-m\omega_0 x^2/\hbar} dx = \sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega_0}}$ soit $A = (\frac{m\omega_0}{\pi\hbar})^{1/4}$.

3. L'exercice est un particulier, on donne la fonction d'onde et il faut en déduire U en remplaçant la fonction d'onde dans l'équation de Schrödinger. D'habitude on connaît U et on en déduit la fonction d'onde!!

On a donc $\underline{\psi}(x,t) = Ae^{-\frac{m\omega_0 x^2}{2\hbar}} e^{-i\frac{\omega_0 t}{2}}$ soit $\frac{\partial \underline{\psi}(x,t)}{\partial t} = -i\frac{\omega_0}{2}\underline{\psi}$, $\frac{\partial \underline{\psi}(x,t)}{\partial x} = -\frac{m\omega_0 x}{\hbar}\underline{\psi}$ et $\frac{\partial^2 \underline{\psi}(x,t)}{\partial x^2} = -\frac{m\omega_0}{\hbar}\underline{\psi} - \frac{m\omega_0 x}{2\hbar}\frac{\partial \underline{\psi}}{\partial x} = -\frac{m\omega_0}{\hbar}\underline{\psi} + (-\frac{m\omega_0 x}{\hbar})^2\underline{\psi}$.

On remplace dans l'équation de Schrödinger: $i\hbar(-i\frac{\omega_0}{2}\underline{\psi}) = -\frac{\hbar^2}{2m}(-\frac{m\omega_0}{\hbar}\underline{\psi} - \frac{m\omega_0 x}{\hbar})^2\underline{\psi} + U(x)\underline{\psi}$ soit $\frac{\hbar\omega_0}{2} = \frac{\hbar\omega_0}{2} - \frac{m\omega_0^2 x^2}{2} + U(x)$ et donc $U(x) = \frac{m\omega_0^2 x^2}{2}$: on trouve l'énergie potentielle d'un oscillateur harmonique de la forme $E_p = \frac{kx^2}{2}$.

V. **Effet tunnel**

1. Du point de vue de la mécanique classique, on a $E_m = E_c + E_p$ avec E_c positive donc le mouvement n'est possible que dans une zone où l'énergie mécanique est supérieure à l'énergie potentielle soit ici dans les régions 1 et 3, la région 2 est interdite.

2. En remplaçant $\underline{\psi}$ par son expression dans l'équation de Schrödinger on trouve $\ddot{\phi} + \frac{2m(E-V)}{\hbar^2}\phi = 0$.

Dans la zone 2, on a $V = V_0 > E$, on met donc l'équation différentielle sous la forme $\ddot{\phi} - \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}\phi = 0$ avec $\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2} > 0$: ce n'est pas un OH, on pose $k' = \sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}}$. Dans les régions 1 et 3 les solutions sont en exponentielles réelles de la forme $e^{k'x}$ et $e^{-k'x}$.

Dans les zones 1 et 3, on a $V = 0 < E$, on met donc l'équation différentielle sous la forme $\ddot{\phi} + \frac{2mE}{\hbar^2}\phi = 0$ avec $\frac{2mE}{\hbar^2} > 0$: c'est un OH de pulsation spatiale $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$. Les solutions sont en exponentielles complexes de la forme e^{iKx} et e^{-iKx}.

3. La particule vient de $-\infty$. Les discontinuités de potentiel se comportent comme des dioptres donc on trouve une $OPPH^+$ (onde incidente) et une $OPPH^-$ (onde réfléchie) dans la zone 1 et uniquement une $OPPH^+$ (onde transmise) dans la zone 3.

Or $\underline{\psi}_3 = \underline{C}_1 e^{i(kx - Et/\hbar)} + \underline{C}_2 e^{-i(kx+Et/\hbar)}$. Le terme d'amplitude $\underline{C}_2$ caractérise une $OPPH^-$ dans la zone 3, cette onde n'existe pas donc $\underline{C}_2 = 0$.

4. Ces coefficients sont les coefficients de réflexion et de transmission en amplitude pour les fonctions d'onde car on a $\underline{\psi}_1 = \underline{A}_1 e^{i(kx-Et/\hbar)} + \underline{A}_2 e^{-i(kx+Et/\hbar)}$: le terme d'amplitude $\underline{A}_1$ caractérise une $OPPH^+$ dans la zone 1: c'est l'onde incidente et le terme d'amplitude $\underline{A}_2$ caractérise une $OPPH^-$ dans la zone 1: c'est l'onde réfléchie.

5. On écrit la continuité de ϕ et de ϕ' en $x = 0$ et en $x = a$ soit:

$\phi_1(x=0) = \phi_2(x=0)$ et $\phi_1'(x=0) = \phi_2'(x=0)$

De même $\phi_2(x=a) = \phi_3(x=a)$ et $\phi_2'(x=a) = \phi_3'(x=a)$.

6. L'onde incidente s'écrit $\underline{\psi}_i = \underline{A}_1 e^{i(kx-Et/\hbar)}$ de vecteur d'onde $\vec{k} = k\vec{e_x}$ soit $\vec{J_i} = |\underline{A}_1|^2 \frac{\hbar k}{m}\vec{e_x}$.

L'onde réfléchie s'écrit $\underline{\psi}_r = \underline{A}_2 e^{-i(kx+Et/\hbar)}$ de vecteur d'onde $\vec{k} = -k\vec{e_x}$ soit $\vec{J_r} = -|\underline{A}_2|^2 \frac{\hbar k}{m}\vec{e_x}$.

L'onde transmise s'écrit $\underline{\psi}_t = \underline{C}_1 e^{i(kx-Et/\hbar)}$ de vecteur d'onde $\vec{k} = k\vec{e_x}$ soit $\vec{J_t} = |\underline{C}_1|^2 \frac{\hbar k}{m}\vec{e_x}$.

Le coefficient de transmission est donc $T = \frac{|\underline{C}_1|^2}{|\underline{A}_1|^2}$.

7. On a $T = 4.10^{-4}$: le coefficient de transmission est très petit mais il n'est pas nulle en mécanique quantique contrairement à la mécanique classique: cet effet s'appelle l'effet tunnel. On a la relation $T = \dfrac{q_s}{q_e}$. En effet le vecteur densité de courant de probabilité $\overrightarrow{J}$ représente la probabilité que la particule traverse par unité de temps et de surface. On a donc $q_s = 40\ s^{-1}$.

Il y a donc 10^5 particules par seconde avant la barrière et 40 particules par seconde qui traversent la barrière de potentiel.

VI. **Puits de potentiel fini**

1. Dans le puits on observe des fonctions d'onde stationnaires avec n fuseaux pour $n \geq 1$ mais contrairement à un puits de potentiel infini, les noeuds de probabilité ne sont pas aux extrémités du puits, ils sont à l'extérieur du puits.

L'énergie est quantifié comme dans un puits de potentiel infini.

2. En remplaçant $\underline{\psi}$ par son expression dans l'équation de Schrödinger on trouve $\ddot{\phi} + \dfrac{2m(E-V)}{\hbar^2}\phi = 0$.

Pour $x < -L/2$ et $x > L/2$, on a $V = V_0 > E$, on met donc l'équation différentielle sous la forme $\ddot{\phi} - \dfrac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}\phi = 0$ avec $\dfrac{2m(V_0-E)}{\hbar^2} > 0$: ce n'est pas un OH, on pose $k = \sqrt{\dfrac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}}$. Dans les régions 1 et 3 les solutions sont en exponentielles réelles de la forme e^{kx} et e^{-kx}.

Pour $-L/2 < x < +L/2$, on a $V = 0 < E$, on met donc l'équation différentielle sous la forme $\ddot{\phi} + \dfrac{2mE}{\hbar^2}\phi = 0$ avec $\dfrac{2mE}{\hbar^2} > 0$: c'est un OH de pulsation spatiale $K = \sqrt{\dfrac{2mE}{\hbar^2}}$. Dans la région 2 les solutions sont en exponentielles complexes de la forme e^{iKx} et e^{-iKx} ou sous forme de cos et de sin comme c'est donné dans la question suivante.

3. On reconnaît l'OH soit $\phi_a = \phi_2$.

La fonction ϕ_b diverge quand x tend vers $+\infty$ donc cette solution ne peut pas exister dans la région 3.

La fonction ϕ_c diverge quand x tend vers $-\infty$ donc cette solution ne peut pas exister dans la région 1.

On a donc $\phi_b = \phi_1$ et $\phi_c = \phi_3$.

4. On écrit la continuité de ϕ et de ϕ' en $x = \pm L/2$ soit:

$\phi_1(x = -L/2) = \phi_2(x = -L/2)$ et $\phi_1'(x = -L/2) = \phi_2'(x = -L/2)$

De même $\phi_2(x = +L/2) = \phi_3(x = +L/2)$ et $\phi_2'(x = +L/2) = \phi_3'(x = +L/2)$.

5. Dans un puits les énergies sont quantifiées et plus le puits est profond plus le nombre de niveaux d'énergie est grand.

Pour $E > V_0$, dans les 3 régions les fonctions d'onde sont des OPPH, les équations de continuité servent à trouver les coefficients de transmission et de réflexion, l'énergie n'est pas quantifiée.

VII. **Puits semi infini**

1. Du point de vue de la mécanique classique, on a $E_m = E_c + E_p$ avec E_c positive donc le mouvement n'est possible que dans une zone où l'énergie mécanique est supérieure à l'énergie potentielle soit seule la région 2 où $0 < x < a$ est autorisée.

2. La fonction d'onde dans la région 1 est nulle car une particule ne peut pas se trouver dans une zone où le potentiel est infini.

3. En remplaçant $\underline{\psi}$ par son expression dans l'équation de Schrödinger on trouve $\ddot{\phi} + \dfrac{2m(E-V)}{\hbar^2}\phi = 0$.

Dans la zone 3, on a $V = V_0 > E$, on met donc l'équation différentielle sous la forme $\ddot{\phi}_3 - \dfrac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}\phi_3 = 0$ avec $\dfrac{2m(V_0-E)}{\hbar^2} > 0$: ce n'est pas un OH, on pose $k_3 = \sqrt{\dfrac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}}$. Les solutions sont en exponentielles réelles de la forme $e^{k_3 x}$ et $e^{-k_3 x}$. Aussi dans cette région, x peut tendre vers l'$+\infty$ et dans ce cas le terme $e^{k_3 x}$ diverge donc on doit prendre $C = 0$.

Dans la zone 2, on a $V = 0 < E$, on met donc l'équation différentielle sous la forme $\ddot{\phi}_2 + \frac{2mE}{\hbar^2}\phi_2 = 0$ avec $\frac{2mE}{\hbar^2} > 0$: c'est un OH de pulsation spatiale $k_2 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$. Les solutions sont en exponentielles complexes de la forme e^{ik_2x} et e^{-ik_2x}.

4. On écrit la continuité de ϕ en $x = 0$ (ici le potentiel diverge donc seule ϕ est continue):

$\phi_1(x = 0) = \phi_2(x = 0) = 0 = A + B$ soit $\phi_2(x) = A(e^{ik_2x} - e^{-ik_2x}) = 2Ai\sin(k_2x) = A'\sin(k_2x)$.

5. On écrit la continuité de ϕ et ϕ' en $x = a$ soit

$\phi_2(x = a) = \phi_3(x = a)$ donc $A'\sin(k_2a) = De^{-k_3a}$

et $\phi_2'(x = a) = \phi_3'(x = a)$ donc $k_2A'\cos(k_2a) = -k_3De^{-k_3a}$.

On en déduit $\tan(k_2a) = -\frac{k_2}{k_3} < 0$.

6. **6.a.** On lit $V_0 = 400.1,6.10^{-19}\ J$, $m = 9.10^{31}\ kg$ et $a = 2.10^{-10}\ m$.

6.b. $g(k_2) = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2mV_0}}k_2$ est une fonction linéaire de la forme $y = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2mV_0}}x$ avec $\sqrt{\frac{\hbar^2}{2mV_0}} = 9,3.10^{-12}$. Cette droite passe par l'origine des coordonnées et on place un point pour tracer la droite. Par exemple, le point pour $x = k_2 = 5.10^{10}$ a pour ordonnées $y = 9,3.10^{-12}5.10^{10} = 0,46$.

Résoudre l'équation $|\sin(k_2a)| = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2mV_0}}k_2$ revient à chercher les points d'intersection entre la droite que l'on a tracé d'équation $y = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2mV_0}}x$ et la courbe donnée par l'énoncé d'équation $y = |\sin(k_2a)|$. On lit les valeurs de k_2 qui correspondent aux points d'intersection.

6.c. Attention on ne garde que les valeurs de k_2 qui vérifie $\tan(k_2a) < 0$. On trouve graphiquement les valeurs de k_2 et on en déduit les énergies possibles par la relation $k_2 = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$.

6.d. Plus V_0 est grand plus la droite d'équation $y = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2mV_0}}x$ a une pente faible, graphiquement on trouvera plus de valeurs de k_2 d'intersection entre la droite et la courbe d'équation $y = |\sin(k_2a)|$. Ce qui signifie qu'il y aura plus d'énergies possibles dans le puits, c'est normal, le puits est plus profond quand V_0 est plus grand.