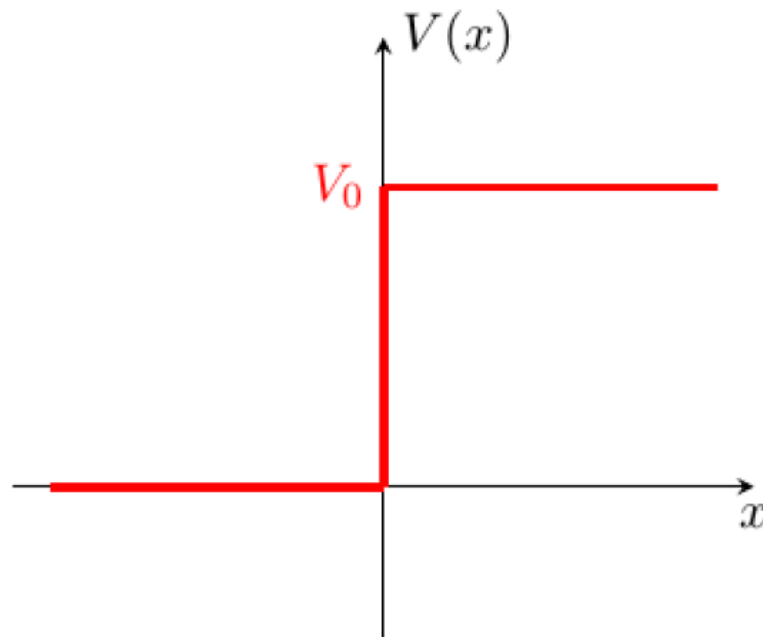


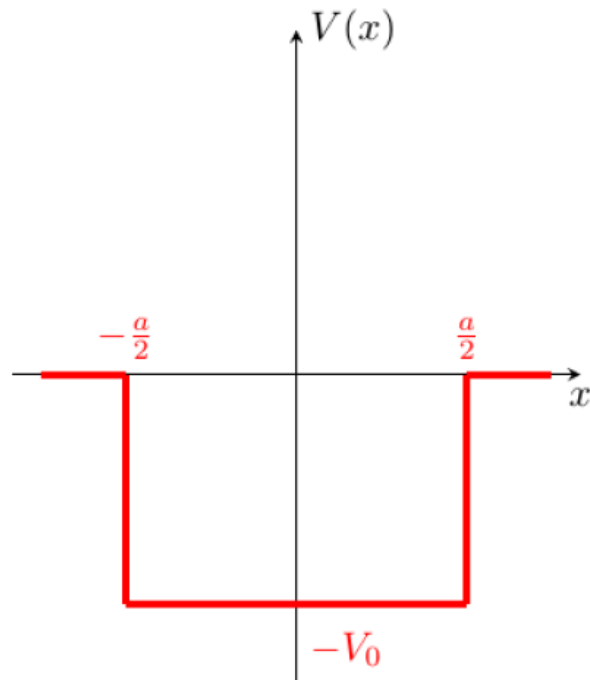
Comment a-t-on « vu » les atomes?



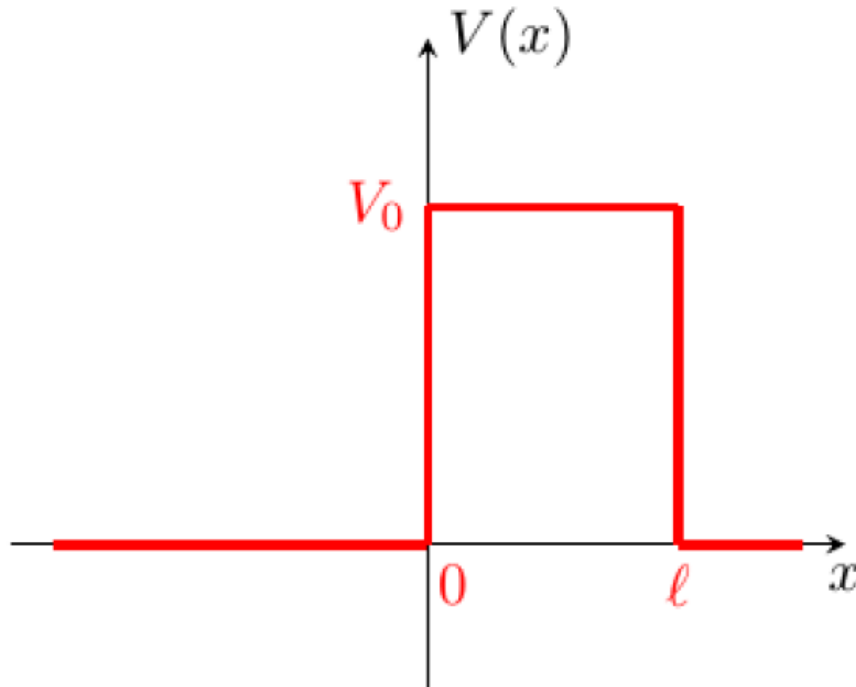
► **étudier le passage d'une marche de potentiel**



► **étudier les états dans un puits de potentiel de profondeur finie**



► étudier l'effet tunnel et ses applications



Introduction à la mécanique quantique

Les points du cours à connaître

I- Particule quantique

1. Généralités sur les particules quantiques



Inégalité de Heisenberg spatiale à retenir

Une particule quantique, contrairement à la vision classique, a une position x définie à Δx près, et une quantité de mouvement p_x (suivant l'axe Ox) définie à Δp_x près. L'inégalité de Heisenberg spatiale stipule que

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

où $\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,05 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$ est la constante de Planck réduite.



Critère pour savoir si le traitement sera quantique ou non à retenir

Pour un phénomène physique donné, la physique classique constitue une approximation valable de la physique quantique uniquement si toutes les grandeurs physiques du type « action » (en $\text{J}\cdot\text{s}$) sont très grandes par rapport à \hbar .



Position du problème s'y retrouver

On s'intéressera à une particule quantique astreinte à se déplacer dans un espace unidimensionnel, assimilé à l'axe Ox .

À cette particule est associée une fonction d'onde $\tilde{\psi}(x, t)$, qui va décrire le comportement de cette particule.



Utilisation de la fonction d'onde pour le calcul d'une moyenne à retenir

La fonction d'onde est une densité linéique de présence de la particule à l'abscisse x et à la date t . Elle doit donc être normée :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\tilde{\psi}(x, t)|^2 dx = 1 \quad \forall t$$

La fonction d'onde donne la moyenne d'une grandeur g associée à la particule quantique :

$$g_m = \int_{-\infty}^{+\infty} g |\tilde{\psi}(x, t)|^2 dx$$

par exemple, la position moyenne est $x_m = \int_{-\infty}^{+\infty} x |\tilde{\psi}(x, t)|^2 dx$.

*remarque*

La fonction d'onde intervenant en module, elle est fixée à une phase près : $\tilde{\psi}(x, t)$ et $\tilde{\psi}(x, t) e^{i\alpha}$ donnent les mêmes résultats.



lien avec la notion d'orbitale en chimie : s'y retrouver

2. Équation de Schrödinger



Équation de Schrödinger à retenir

La fonction d'onde $\tilde{\psi}(x, t)$ associée à une particule quantique de masse m évolue suivant l'équation de Schrödinger :

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

où $V(x, t)$ est le potentiel dans lequel évolue la particule (énergie potentielle dont dérivent les forces auxquelles est soumise la particule).

*remarque*

Le potentiel est fixé à une constante près : $V(x, t) \rightarrow V' = V(x, t) + V_0$ ne change rien.



Évolution de la fonction d'onde s'y retrouver

L'équation de Schrödinger remplace le principe fondamental de la dynamique en mécanique classique.

Connaissant la fonction d'onde à un instant initial, on peut, grâce à l'équation de Schrödinger, connaître sa valeur à n'importe quelle autre date.



États stationnaires définition

On appelle état stationnaire une fonction d'onde $\tilde{\psi}(x, t) = \tilde{\varphi}(x) e^{-i\omega t}$ où $\tilde{\varphi}(x)$ vérifie l'équation de Schrödinger indépendante du temps :

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \tilde{\varphi}(x) = \hat{H} \tilde{\varphi}(x) = E \tilde{\varphi}(x)$$

où l'énergie est $E = \hbar\omega$.

*remarque*

Bien distinguer l'onde associée à un état stationnaire en mécanique quantique d'une onde stationnaire au sens usuel de la physique des ondes.

✳ **Principe de superposition** *s'y retrouver*

L'équation de Schrödinger étant linéaire, toute combinaison d'état stationnaire est aussi solution de cette équation :

$$\tilde{\psi}(x, t) = \sum_n c_n \tilde{\varphi}_n(x) e^{-i\omega_n t}$$

3. Exemples de comportements ondulatoires pour une particule quantique



Onde de DE BROGLIE *définition*

A toute particule d'énergie E et de quantité de mouvement p , on peut associer une onde

- de fréquence ν et de pulsation ω telles que $E = h\nu = \hbar\omega$;
- de vecteur d'onde k et de longueur d'onde λ tels que $p = \hbar k = \frac{h}{\lambda}$.



Principe de complémentarité *schéma*

La figure 1 représente la métaphore du cylindre : si on éclaire un cylindre sur sa longueur, l'ombre projetée sur un mur donne un rectangle. Au contraire, si on l'éclaire face à sa base, l'ombre donne un cercle. On a deux vues différentes d'un même objet : le cylindre.

De même, les aspects corpusculaire et ondulatoire sont deux représentations complémentaires d'une seule et même chose. Tout dépend où, quand et comment on l'observe.

On appelle parfois quanton, un objet quantique qui présente des aspects corpusculaire et ondulatoire.



Diffraction par une fente *schéma*

| La figure 2 représente la diffraction du faisceau de particules par une fente.



Interférences *schéma*

| La figure 3 représente le phénomène d'interférences du faisceau de particules par le dispositif des fentes d'Young.

II- Particule quantique dans un potentiel homogène

1. États stationnaires d'une particule quantique dans un potentiel homogène



Position du problème *s'y retrouver*

| On s'intéressera à une particule quantique astreinte à se déplacer dans un espace unidimensionnel, assimilé à l'axe Ox , dans un potentiel homogène $V = V_0$.

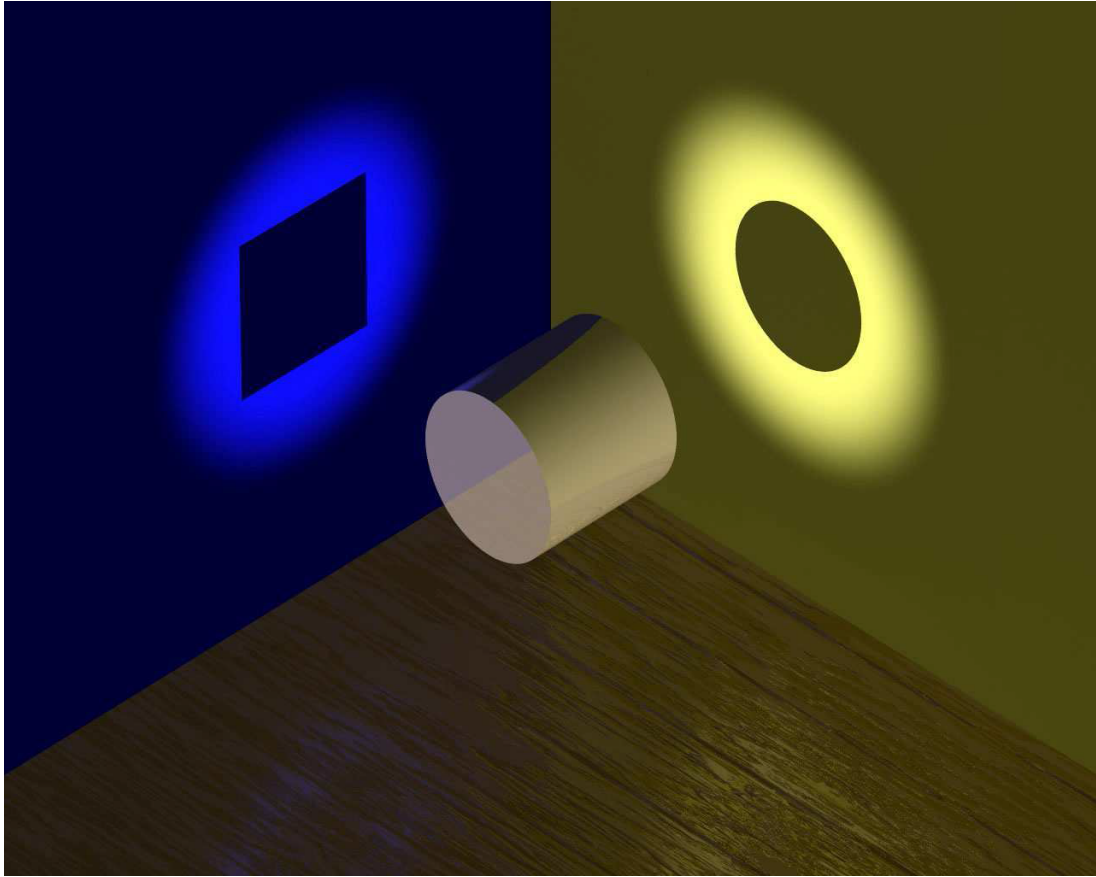


FIGURE 1 – Principe de complémentarité

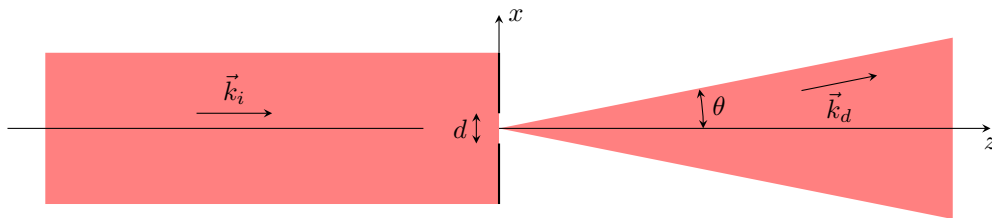


FIGURE 2 – Diffraction par une fente

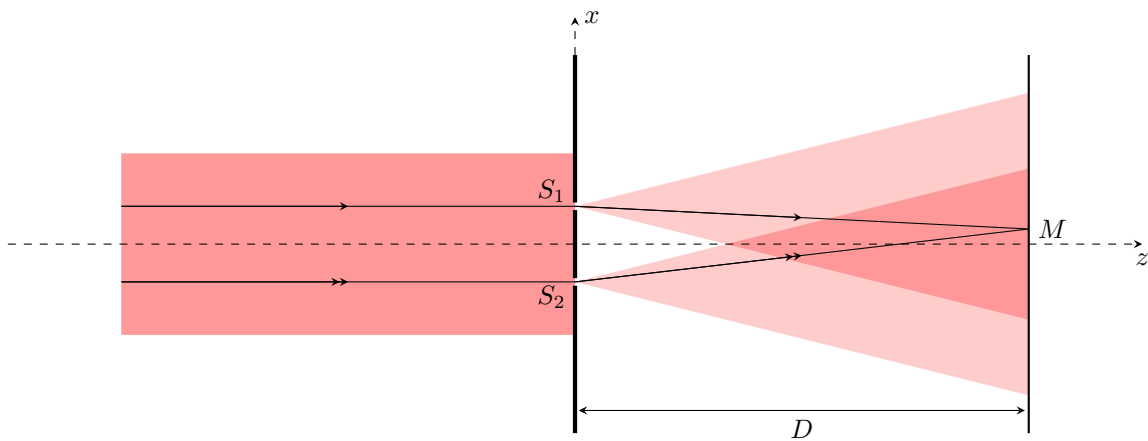


FIGURE 3 – Interférences

**Interprétation ondulatoire des fonctions d'onde dans un potentiel homogène***à retenir*Si $E > V_0$, la fonction d'onde est une superposition d'OPPM :

$$\tilde{\psi}(x, t) = \tilde{\psi}_0 e^{-i(\omega t \pm kx)}$$

Si $E < V_0$, la fonction d'onde est une superposition d'ondes évanescentes :

$$\tilde{\psi}(x, t) = \tilde{\psi}_0 e^{\pm kx} e^{-i\omega t}$$

*remarque*

Le potentiel est fixé à une constante près : $V(x, t) \rightarrow V' = V(x, t) + V_0$ décale l'énergie : $E \rightarrow E' = E + V_0$, qui introduit un déphasage $-i \frac{V_0}{\hbar} t$: $\tilde{\psi}(x, t) \rightarrow \tilde{\psi}'(x, t) = \tilde{\psi}(x, t) e^{-i \frac{V_0}{\hbar} t}$ qui ne change rien puisque la fonction d'onde intervient en module au carré : $|\tilde{\psi}'|^2 = |\tilde{\psi}|^2$.

2. Particule quantique libre**Position du problème** *s'y retrouver*On s'intéressera à une particule quantique astreinte à se déplacer dans un espace unidimensionnel, assimilé à l'axe Ox , dans un potentiel homogène $V = V_0 = 0$.On supposera aussi que son énergie est $E > V_0 = 0$.**Courant de probabilité associé à un état stationnaire** *définition*La probabilité de trouver une particule étant $|\tilde{\psi}(x, t)|^2$ et sa vitesse $\vec{v} = \frac{\vec{p}}{m} = \frac{\hbar \vec{k}}{m}$, on peut admettre que le courant de probabilité est le produit

$$\vec{J} = |\tilde{\psi}(x, t)|^2 \frac{\hbar \vec{k}}{m}$$

**Onde associée à un état stationnaire** *schéma*| La figure 4 représente la fonction $\varphi(x)$ dans le cas d'un état stationnaire.**Paquet d'ondes associé à une particule quantique** *schéma*| La figure 5 représente la fonction $\varphi(x)$ dans le cas d'un paquet d'ondes.*remarque*

Une particule libre, puisqu'elle n'est pas soumise à des conditions aux limites, peut voir son énergie varier continûment (c'est ce que l'on fait avec un paquet d'onde).

On verra que le confinement d'une particule quantique confère une quantification de son énergie.

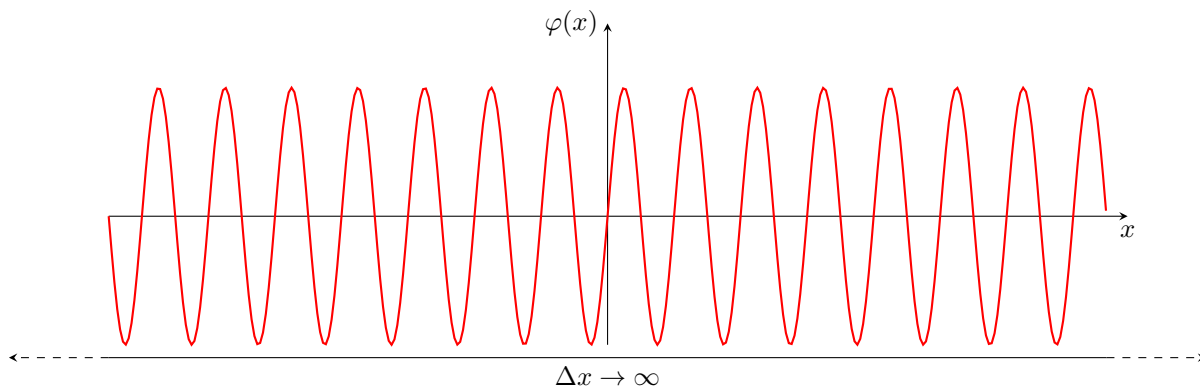


FIGURE 4 – Onde associée à un état stationnaire

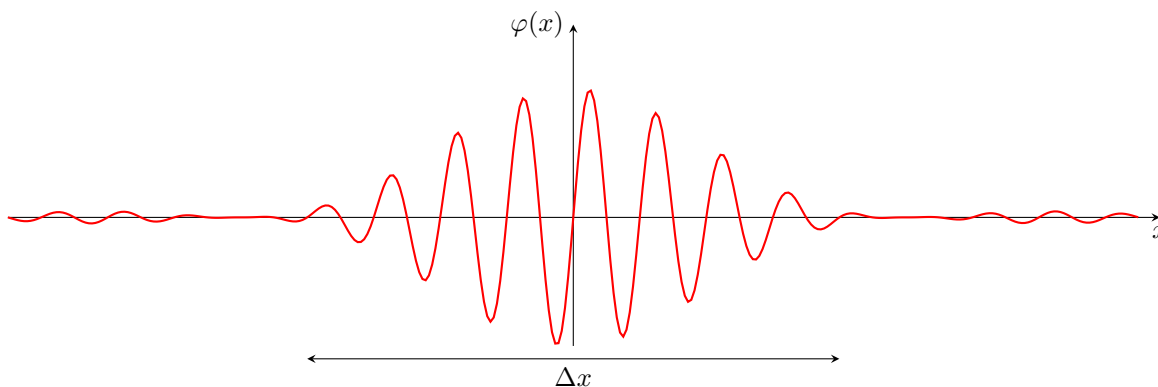


FIGURE 5 – Paquet d’ondes associé à une particule quantique

|

3. Marche de potentiel

👁 Étude de distributions de potentiels constants par parties : marche, puits et barrière schéma

La figure 6 représente divers types de potentiels constants par parties. À gauche, la discontinuité du potentiel dans le cas d’une marche en $x = 0$. Au centre, les discontinuités du potentiel dans le cas d’un puits de potentiel de profondeur finie. À droite, les discontinuités du potentiel dans le cas d’une barrière de potentiel de hauteur finie.

👁 Effet de la marche de potentiel sur un flux de particules schéma

| La figure 7 représente la réflexion et la transmission ou non due à la marche de potentiel.

👁 Comparaison des cas quantique et classique pour une marche de potentiel tableau

| Le tableau 1 présente le récapitulatif des comportements des particules quantiques vis-à-vis d’une marche de potentiel et la comparaison avec des particules classiques.

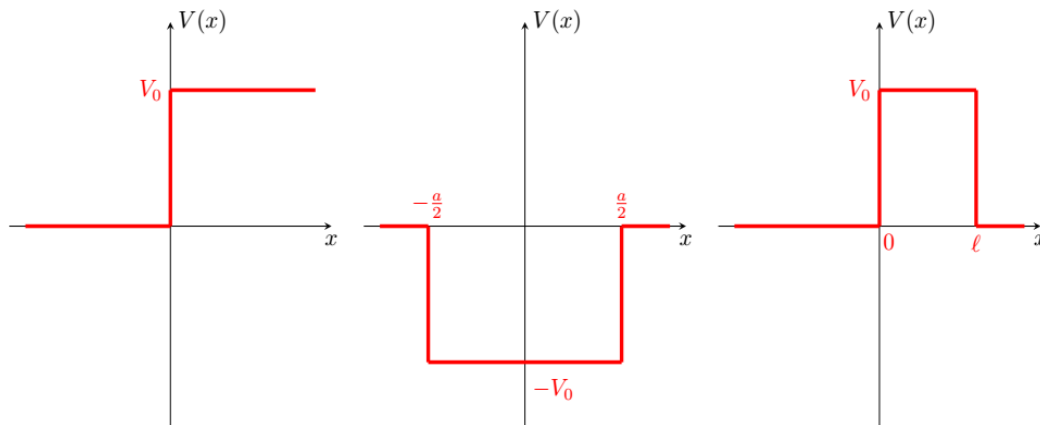


FIGURE 6 – Étude de distributions de potentiels constants par parties : marche, puits et barrière

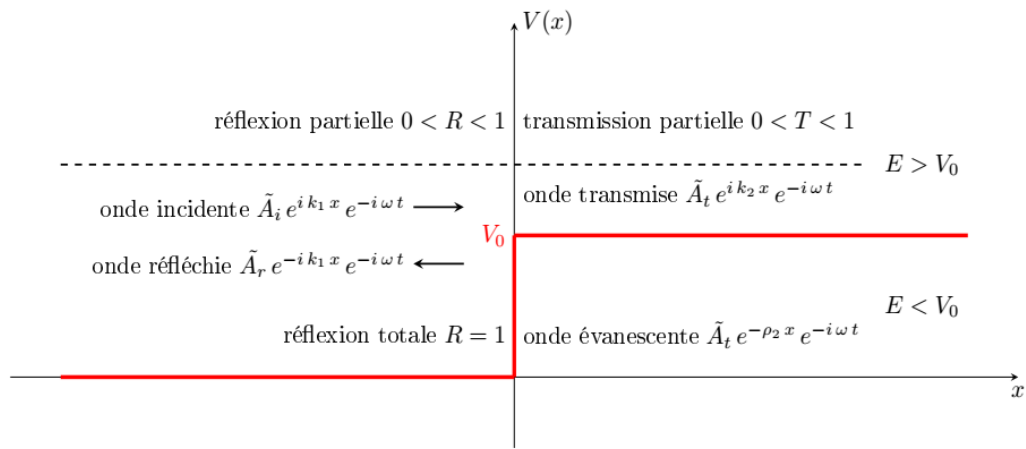


FIGURE 7 – Effet de la marche de potentiel sur un flux de particules

Cas	$E > V_0$	$E < V_0$
quantique	réflexion et transmission	réflexion mais onde évanescente dans le milieu interdit
classique	transmission	réflexion totale
passage quantique - classique	si $E \gg V_0, R \rightarrow 0$	si $V_0 \rightarrow \infty$, plus d'onde évanescente

TABLE 1 – comparaison classique-quantique pour la marche de potentiel

III- Puits de potentiel

1. Particule quantique dans un puits infini

✪ Position du problème *s'y retrouver*

On s'intéressera à une particule quantique astreinte à se déplacer dans un espace unidimensionnel limité ($x \in [0; \ell]$).

C'est le cas par exemple pour un électron libre dans un fil électrique.

On prendra un potentiel $V = V_0 = 0$ si $x \in [0; \ell]$ et $V = \infty$ sinon.

👁 Puits quantique de semi-conducteurs *photo*

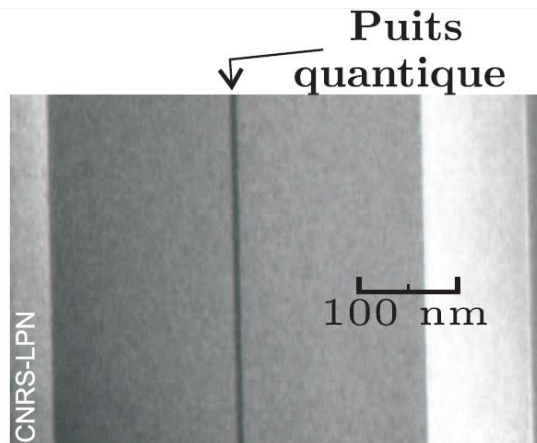


Image obtenue par microscopie électronique en transmission de couches minces $GaAs/GaAlAs$.

♥ Caractéristiques d'une particule dans un puits de profondeur infinie *à retenir*

La probabilité de sortir du puits est nulle pour la particule.

La fonction d'onde de la particule s'annule donc au bord du puits infini, et il y a quantification des longueurs d'onde :

$$\ell = \frac{n \lambda}{2}$$

comme dans le cas des modes propres d'une corde fixée à ses deux extrémités.

L'énergie est quantifiée, c'est l'énergie cinétique correspondant à chaque mode.

👁 Fonctions d'onde et énergies dans le puits infini *schéma*

La figure 8 représente les trois premières énergies, états stationnaires et probabilités de présence dans le puits infini.

📌 1 Effet du confinement sur l'énergie cinétique *théorème*

Si $\Delta x \searrow$ alors $\Delta p \nearrow \Rightarrow E_c \nearrow$. Aussi, on s'aperçoit que : \Rightarrow

le confinement de la particule quantique donne lieu à une augmentation de son énergie cinétique.

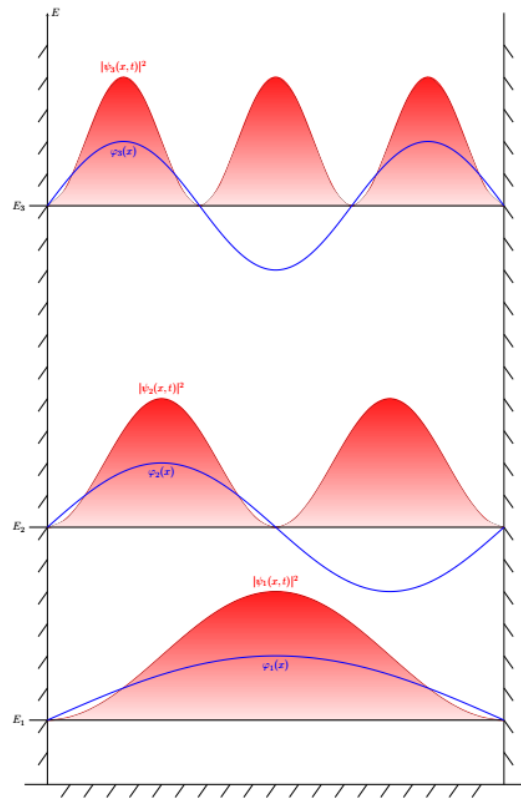


FIGURE 8 – Fonctions d'onde et énergies dans le puits infini

2 Quanton confiné dans une superposition d'états *théorème*

Si le quanton est dans une superposition de deux états stationnaires d'énergie E_1 et E_2 , une oscillation a lieu avec la pulsation $\omega = \frac{|E_2 - E_1|}{\hbar}$. \Rightarrow

Si le quanton est dans une superposition de deux états stationnaires d'énergie E_1 et E_2 , une oscillation a lieu avec la pulsation $\omega = \frac{|E_2 - E_1|}{\hbar}$.

2. Puits de potentiel de profondeur finie

Étude des états liés dans un puits de profondeur finie *s'y retrouver*

On s'intéresse à une particule de masse m dans le potentiel suivant :

si $x < -\frac{a}{2}$, $V(x) = V_0 > 0$;

si $x \in [-\frac{a}{2}; +\frac{a}{2}]$, $V(x) = 0$;

si $x > \frac{a}{2}$, $V(x) = V_0 > 0$.

On suppose que l'énergie cinétique de la particule est $E < V_0$.

Aide à la solution graphique des états stationnaires liés du puits fini *schéma*

La figure 9 représente les courbes de $\sin\left(\frac{ka}{2}\right)$, $|\sin\left(\frac{ka}{2}\right)|$, $\cos\left(\frac{ka}{2}\right)$, $|\cos\left(\frac{ka}{2}\right)|$ et $\alpha \frac{ka}{2}$. Il y a une quantification de l'énergie avec une alternance d'états symétrique / anti-symétrique.

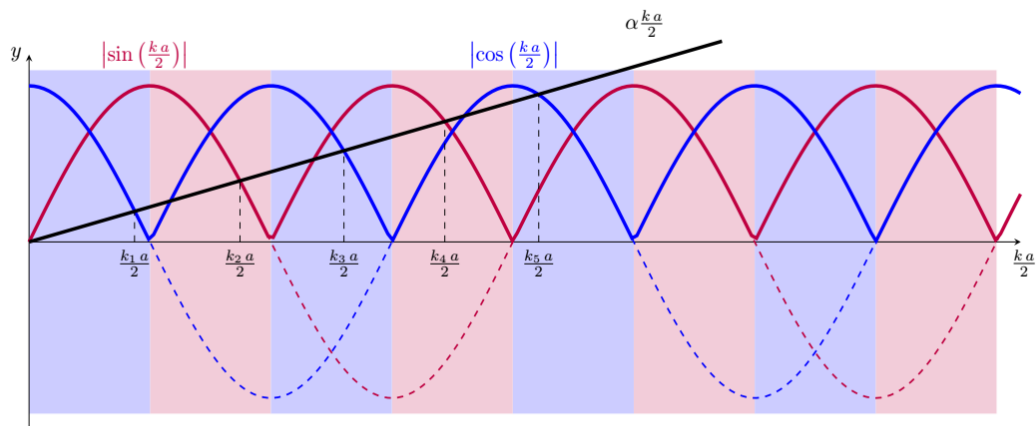


FIGURE 9 – Aide à la solution graphique des états stationnaires liés du puits fini



Fonctions d'onde et énergies dans le puits fini *schéma*

La figure 10 représente les énergies des états stationnaires et probabilités de présence dans le puits fini. Ici, $V_0 = 3,5 \frac{\hbar^2}{m a^2}$.

On visualise une profondeur de pénétration de la particule en dehors du puits d'autant plus grande que $V_0 - E$ est plus petite.



Propriétés des états liés dans le puits fini *à retenir*

Le confinement dans le puits fini se caractérise par :

- une quantification de l'énergie,
- une alternance d'états symétrique / anti-symétrique,
- une profondeur de pénétration de la particule en dehors du puits $\delta = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}$,
- un abaissement de l'énergie par rapport au puits infini dû à l'élargissement effectif du puits (par les ondes évanescentes sur les bords du puits).



Coefficient de transmission du flux à travers une barrière de potentiel *à retenir*

La probabilité que le flux d'énergie E traverse "par effet tunnel" la barrière de potentiel de hauteur $V_0 > E$ de largeur ℓ est non nulle, contrairement au cas classique. Le coefficient de transmission du flux, pour peu que $\rho \ell = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \ell \gg 1$ est :

$$T \approx \frac{16 E (V_0 - E)}{V_0^2} e^{-2\rho \ell}$$

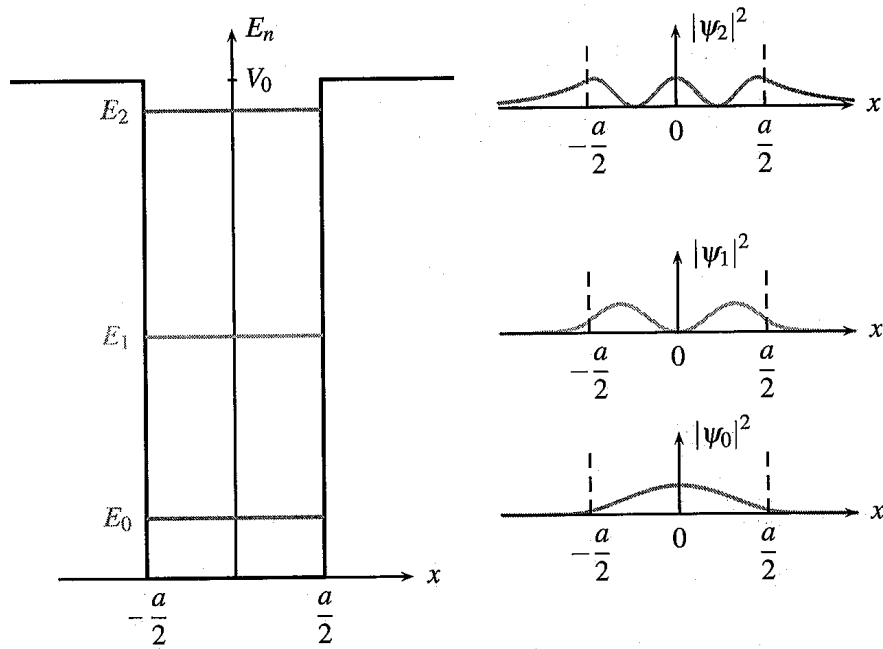


FIGURE 10 – Fonctions d’onde et énergies dans le puits fini

3. Principe du microscope à effet tunnel

👁 Principe du microscope à effet tunnel schéma

La figure 11 représente le principe du microscope à effet tunnel, avec deux schémas, l’un à l’échelle macroscopique, l’autre à l’échelle microscopique. L’espace entre l’échantillon et la pointe est un espace isolant, interdit aux électrons, mais dans lequel une onde évanescente existe. On récupère un flux d’électrons (un courant électrique) dont l’intensité dépend de la distance entre la pointe et l’échantillon. Le déplacement de la pointe permet de reconstituer la surface de l’échantillon.

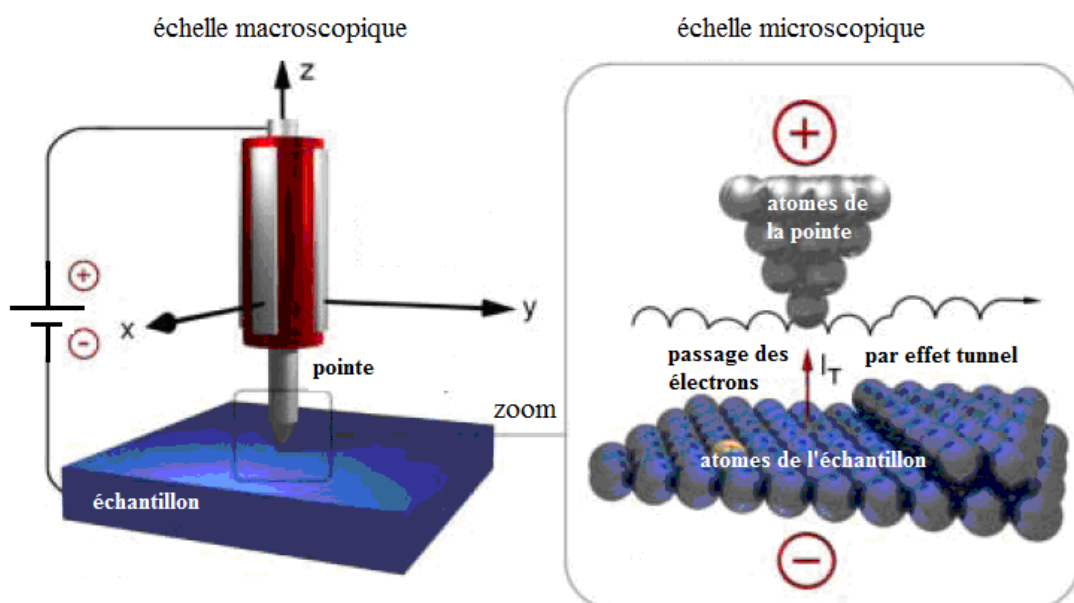


FIGURE 11 – Principe du microscope à effet tunnel

Exemple d'image reconstituée grâce à un microscope à effet tunnel *schéma*

La figure 12 représente un exemple d'image reconstituée grâce à un microscope à effet tunnel. L'intensité électrique passée par effet tunnel entre la pointe et l'échantillon est transformée en image. Ici, il s'agit d'un échantillon de 7 nm d'une surface de *GaAs* (en bleu) sur laquelle une chaîne d'atomes de césium (en rouge) a été déposée. Ref : Geometric and Electronic Properties of Cs Structures on III-V (110) Surfaces : From 1-D and 2-D Insulators to 3-D Metals, L.J. Whitman, J.A. Stroscio, R.A. Dragoset, and R.J. Celotta, Phys. Rev. Lett. 66, 1338 (1991).



FIGURE 12 – Exemple d'image reconstituée grâce à un microscope à effet tunnel

4. Le modèle de Gamow de la radioactivité alpha

Allure du potentiel auquel est soumis la particule α selon le modèle de Gamow. *schéma*

La figure 13 représente l'évolution du potentiel auquel est soumis une particule α avec la distance r au centre du noyau si le noyau est suffisamment gros. Gamow suppose que des particules α préformées peuvent exister dans le noyau. Une telle particule α est liée au reste du noyau du fait d'un potentiel nucléaire de courte portée R et de profondeur V_0 (interaction forte), et au delà est soumise au potentiel coulombien, répulsif (interaction électromagnétique).

Temps de vie des radioisotopes en fonction de l'énergie de la particule α émise *schéma*

La figure 14 représente le logarithme du temps de vie qui varie comme l'inverse de la racine de l'énergie de la particule a émise. Il y a un très bon accord entre les résultats expérimentaux et la loi de Geiger-Nuttall : la demi-vie $\lambda = \frac{\ln 2}{\tau} = \frac{-A}{\sqrt{E}} + B$ avec A et B constante.

5. Le modèle du double puits fini en chimie

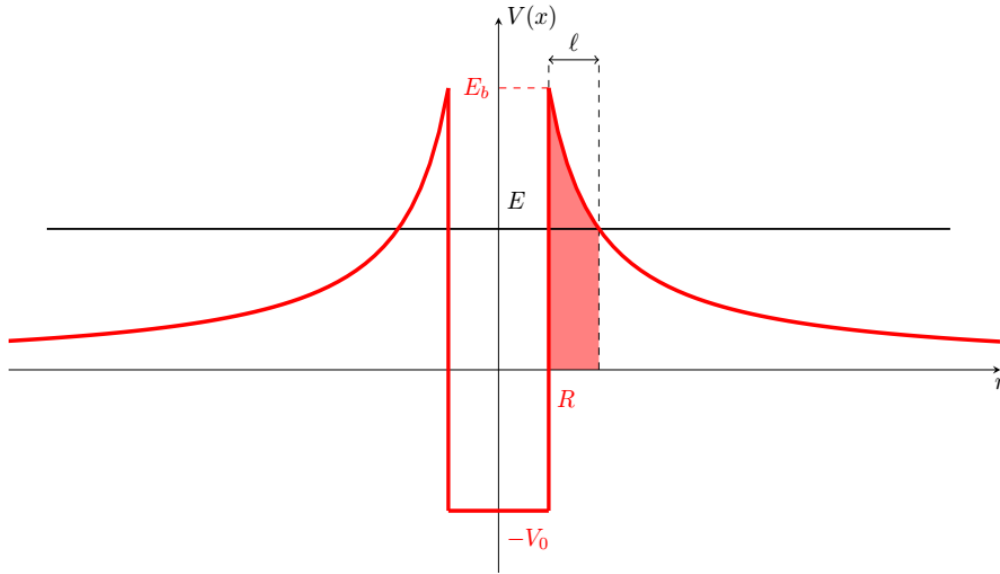


FIGURE 13 – Allure du potentiel auquel est soumis la particule α selon le modèle de Gamow.

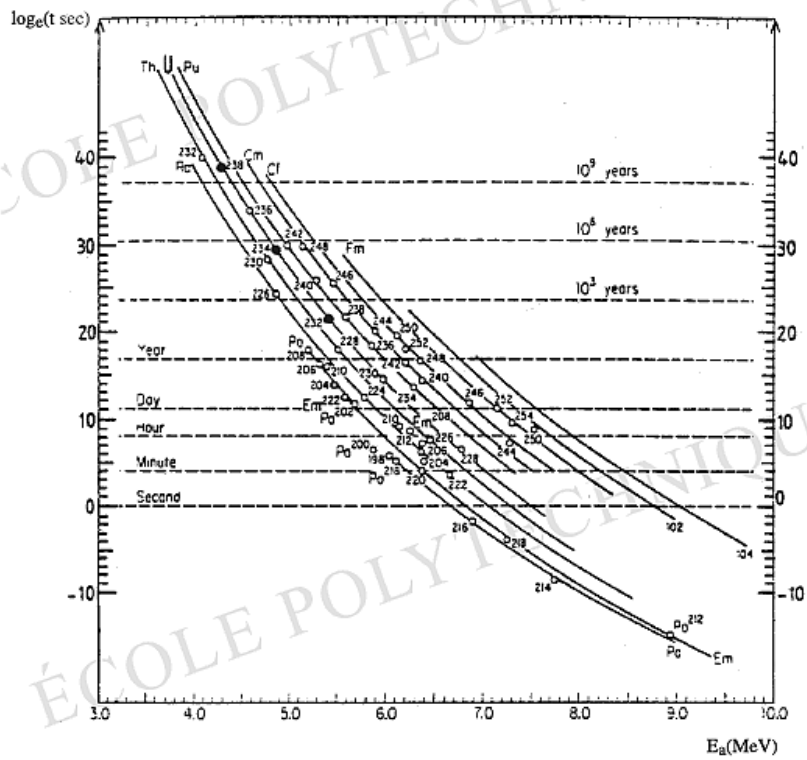


FIGURE 14 – Temps de vie des radioisotopes en fonction de l'énergie de la particule α émise

Premiers états stationnaires du double puits et leur énergie *schéma*

La figure 15 représente les allures du premier état stationnaire dans un double puits (en bleu) infini et fini, et la densité de probabilité de ces états (en rouge).

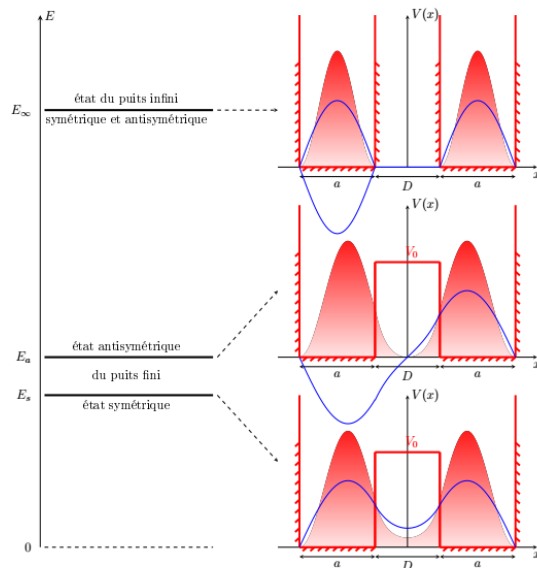


FIGURE 15 – Premiers états stationnaires du double puits et leur énergie

Passage du double puits infini au double puits fini *à retenir*

Le passage du double puits infini au double puits fini se caractérise par :

- la possibilité du passage d’un puits à l’autre par effet tunnel,
- un abaissement de l’énergie dû à l’élargissement effectif du puits,
- une levée de dégénérescence (les deux états symétrique et anti-symétrique ayant des énergies différentes),
- une oscillation possible de la densité de probabilité au cours du temps traduisant le passage par effet tunnel à travers la barrière.

Double puits fini et liaison covalente *s’y retrouver*

La liaison chimique s’effectue par une mise en commun d’un (ou plusieurs) électron entre deux atomes (les deux puits). La délocalisation de l’électron opérée par l’effet tunnel entre les deux puits se traduit par un abaissement de l’énergie du système, donc par une interaction attractive.

Double puits fini et molécule d’ammoniac *schéma*

La figure 16 représente les deux configurations de la molécule d’ammoniac, chacune dans un puits de potentiel. L’effet tunnel permet le passage d’une configuration à l’autre, comme le retournement d’un parapluie. L’oscillation a lieu à une fréquence de 23870 MHz, utilisée

, dans le MASER à ammoniac, prédécesseur du LASER.

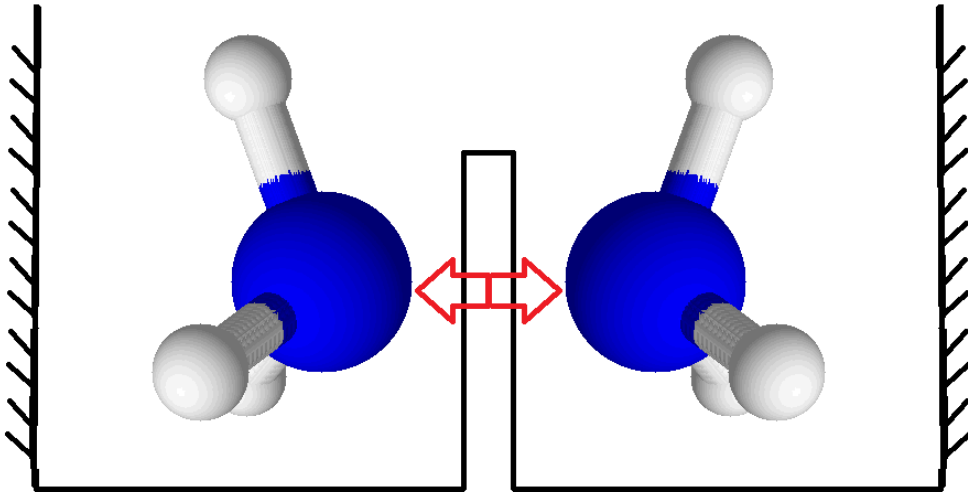


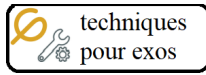
FIGURE 16 – Double puits fini et molécule d'ammoniac



Valeurs numériques (compléments) Introduction à la mécanique quantique

Constantes :

- constante de Planck : $h = 6,63 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$,
- constante de Planck réduite : $\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,05 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$,
- charge élémentaire : $e = 1,6 \times 10^{-19} \text{ C}$,
- masse de l'électron : $m_e = 9,11 \times 10^{-31} \text{ kg}$,
- masse du proton : $m_p = 1,67 \times 10^{-27} \text{ kg}$.



Techniques pour passer du cours aux exercices (à maîtriser)

Particules quantiques libres

Particules quantiques ou classiques

Pour un phénomène physique donné, créer une grandeur A du type « action » (en J·s) et en faire une estimation numérique.

Si $A \gg \hbar$, le phénomène physique ne mérite pas de traitement quantique.

Recherche des solutions de l'équation de Schrödinger par la méthode de séparation des variables

En injectant la fonction d'onde sous la forme $\underline{\psi}(x, t) = \underline{\varphi}(x) \underline{\chi}(t)$ dans l'équation de Schrödinger. On vérifie que $\underline{\chi}(t) = e^{-i\omega t}$ est bien solution avec $E = \hbar\omega$.

On appelle état stationnaire une fonction d'onde $\underline{\psi}(x, t) = \underline{\varphi}(x) e^{-i\omega t}$ où $\underline{\varphi}(x)$ vérifie l'équation de Schrödinger indépendante du temps :

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \underline{\varphi}(x) = \hat{H} \underline{\varphi}(x) = E \underline{\varphi}(x)$$

où l'énergie est $E = \hbar\omega$.

L'équation de Schrödinger étant linéaire, toute combinaison d'état stationnaire est aussi solution de cette équation :

$$\underline{\psi}(x, t) = \sum_n c_n \underline{\varphi}_n(x) e^{-i\omega_n t}$$

Recherche des solutions de type OPPM de l'équation de Schrödinger

En injectant la forme $\underline{\psi}(x, t) = \underline{\psi}_0 e^{-i(\omega t - kx)}$ dans l'équation de Schrödinger, on trouve une relation de dispersion, qui donne \underline{k} .

Recherche des solutions de l'équation de Schrödinger sous forme de superposition d'OPPM

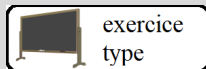
Une OOPPM seule présente une indétermination nulle en quantité de mouvement ($\Delta p = 0$) mais infinie en position ($\Delta x \rightarrow \infty$). D'autre part, elle n'est pas normalisable.

Par conséquent, pour la localiser, on peut choisir de superposer un grand nombre d'ondes planes d'impulsions différentes, ce qui augmente l'indétermination sur quantité de mouvement ($\Delta p \nearrow$) mais réduit celle sur la position ($\Delta x \searrow$), conformément à la relation d'indétermination d'Heisenberg.

La superposition peut se faire, par exemple en sommant les p :

$$\underline{\psi}(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \underline{A}(p) e^{-\frac{i}{\hbar}(E(p)t - px)} dp$$

avec $E(p) = \frac{p^2}{2m}$ pour une particule libre.



Exercice 21.1 (le prof fait cet exercice type jeudi) Quanton libre

On s'intéresse à un quanton de masse m libre : le potentiel de ce quanton $V(x)$ est nul pour $x \in \mathbb{R}$. La fonction d'onde $\underline{\psi}(x, t)$ évolue suivant l'équation de Schrödinger : $i\hbar \frac{\partial \underline{\psi}}{\partial t} = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \underline{\psi}}{\partial x^2} + V(x, t) \underline{\psi}$.

1) OPPM

- 1.a) Montrer que des OPPM $\underline{\psi}(x, t) = \underline{\psi}_0 e^{-i(\omega t - kx)}$ sont solutions de l'équation de Schrödinger.
- 1.b) Ecrire la relation de dispersion et déterminer la vitesse de phase.
- 1.c) Montrer qu'une telle OPPM est physiquement inacceptable.

2) Paquet d'onde

On représente l'état de la particule par un paquet d'ondes dont les nombres d'onde ont une valeur moyenne k_0 et une dispersion Δk qui détermine l'extension spatiale Δx_0 du paquet à $t = 0$.

On note ω_0 la pulsation moyenne associée à k_0 .

- 2.a) Exprimer la vitesse de groupe
- 2.b) Relier la dispersion pour la vitesse de groupe Δv_g à la dispersion Δk puis donner la limite inférieure de Δv_g en fonction de Δx_0 .
- 2.c) En considérant l'expression de Δv_g constante et égale à cette précédente limite inférieure, déterminer la durée au bout de laquelle l'étalement du paquet d'onde a été multiplié par deux.

3) Interprétation de l'équation de Schrödinger

- 3.a) Exprimer l'énergie cinétique grâce à la quantité de mouvement, puis grâce au vecteur d'onde, et enfin à l'aide d'une dérivée de la fonction d'onde.
- 3.b) Interpréter alors la vitesse de la particule en tant que vitesse de l'onde associée à la particule.
- 3.c) Interpréter ainsi l'équation de Schrödinger.

1)

1.a)

On utilise la méthode de séparation des variables : en injectant la fonction d'onde sous la forme $\underline{\psi}(x, t) = \underline{\varphi}(x) \underline{\chi}(t)$ dans l'équation de Schrödinger on trouve :

$$i \hbar \underline{\varphi}(x) \frac{\partial \underline{\chi}(t)}{\partial t} = \underline{\chi}(t) \hat{H} \underline{\varphi}(x) \Rightarrow i \hbar \frac{\underline{\chi}'(t)}{\underline{\chi}(t)} = \frac{\hat{H} \underline{\varphi}}{\underline{\varphi}} = cste = E \Rightarrow \hat{H} \underline{\varphi} = E \underline{\varphi}$$

$\underline{\psi}(x, t) = \underline{\psi}_0 e^{-i(\omega t \pm k x)}$ est bien solution.

1.b) En injectant dans l'équation de Schrödinger $\boxed{\hbar \omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}}$.

$$\hbar \omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Rightarrow k = \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} \Rightarrow v_\varphi = \frac{\omega}{k} = \sqrt{\frac{\hbar \omega}{2m}}$$

1.c) Si on veut normaliser

$$\int_{x=0}^{x=\ell} |\underline{\psi}(x, t)|^2 dx = 1 \Rightarrow |\underline{\psi}_0|^2 = 0$$

ce qui n'a pas de sens.

2) Paquet d'onde

2.a) La vitesse de groupe est

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k}{m}$$

2.b)

$$\Delta v_g = \frac{\hbar \Delta k}{m}$$

D'après Heisenberg,

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \Rightarrow \Delta k \geq \frac{1}{2 \Delta x_0} \Rightarrow$$

$$\boxed{\Delta v_g \geq \frac{\hbar}{2m \Delta x_0}}$$

2.c)

$$x(t) = x_0 + v_g t \Rightarrow \Delta x(t) = \Delta x_0 + \Delta v_g t = \Delta x_0 + \frac{\hbar}{2m \Delta x_0} t = 2 \Delta x_0 \Leftrightarrow t = \frac{2m \Delta x_0^2}{\hbar}$$

(soit $t \propto \Delta x_0^2$, qui est caractéristique de la diffusion).

3) Interprétation de l'équation de Schrödinger

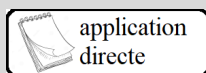
3.a) L'énergie cinétique est $E_c = \frac{1}{2} m v^2$ or $p = m v$, donc

$$E_c = \frac{p^2}{2m} = \frac{(\hbar k)^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}$$

3.b) On a vu que

$$v = \frac{(\hbar k)}{m} = v_g$$

3.c) Interprétation de l'équation de Schrödinger : diffusion + énergie

application
directe

Exercice 21.2 pour s'entraîner

Quantique ou pas quantique ?

La mécanique classique suffit pour une particule matérielle lorsque la longueur d'onde de DE BROGLIE est négligeable devant la taille caractéristique du système étudié.

1) Montrer que c'est cohérent avec le critère donné sur l'action.

2) La trotteuse d'une montre, d'une taille $\ell \approx 1$ cm, d'une masse $m \approx 1$ μ g, se déplace avec un temps caractéristique $\tau \approx 1$ s.

2.a) À partir de ces grandeurs, créer une nouvelle grandeur A qui aurait la dimension d'une action.

4.b) La trotteuse d'une montre mérite-t-elle un traitement quantique ?

3) Préciser, en utilisant le critère quantique, si l'étude de l'atome d'hydrogène nécessite la physique quantique sachant que l'on relève expérimentalement une énergie d'ionisation $E = 13,6 \text{ eV}$ et que son spectre présente une longueur d'onde minimale $\lambda = 100 \text{ nm}$.

4) Grain de poussière

Soit une particule de masse $m = 10^{-15} \text{ kg}$ de taille caractéristique $\ell = 1 \text{ }\mu\text{m}$ supposée correspondre à la largeur caractéristique d'un paquet d'ondes de matière.

4.a) Montrer que l'équation de Schrödinger donne, en ordre de grandeur le temps caractéristique d'étalement du paquet d'onde :

$$\tau = \frac{2m\ell^2}{\hbar}$$

4.b) Calculer numériquement τ et conclure.

En 1925, Elsasser fait remarquer que l'on peut vérifier la nature ondulatoire de particules matérielles de la même façon qu'on a vérifié en 1912 la nature ondulatoire des rayons X, c'est-à-dire en leur faisant traverser un solide cristallin conduisant à l'obtention d'un phénomène de diffraction.

4.c) Peut-on révéler ainsi la nature ondulatoire de grains de poussière de masse $m = 10^{-15} \text{ kg}$ et de vitesse $1 \text{ mm} \cdot \text{s}^{-1}$?

1) Si la longueur d'onde de DE BROGLIE λ telle que $p = \hbar k = \frac{hc}{\lambda}$ est négligeable devant la taille caractéristique d du système étudié, on a :

$$\lambda \ll d \Leftrightarrow \frac{hc}{p} \ll d \Leftrightarrow \frac{pd}{c} \gg h$$

Cette action ($\frac{pd}{c}$) est bien grande devant h (ou \hbar).

2) Trotteuse

2.a) $[A] = \text{J} \cdot \text{s} = \text{kg} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$. On peut donc poser $A = \frac{m\ell^2}{\tau}$.

2.b) AN : $A \approx \frac{10^{-6} \times (10^{-2})^2}{1} = 10^{-10} \text{ J} \cdot \text{s}$. Comme $A \gg \hbar$, la trotteuse n'est pas quantique.

3) Atome d'hydrogène :

$[A] = \text{J} \cdot \text{s} = \text{J} \cdot \text{m} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}$. On peut donc poser $A = \frac{E\lambda}{c}$.

AN : $A \approx \frac{13,6 \times 1,6 \times 10^{-19} \times 100 \times 10^{-9}}{3 \times 10^8} = 10^{-33} \text{ J} \cdot \text{s}$. Comme $A \approx \hbar$, l'atome d'hydrogène est quantique.

4) Grain de poussière

4.a) L'équation de Schrödinger

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

donne, en ordre de grandeur :

$$\hbar \frac{1}{\tau} = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{1}{\ell^2}$$

soit le temps caractéristique d'étalement du paquet d'onde :

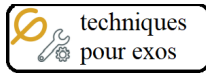
$$\tau = v \frac{2m\ell^2}{\hbar}$$

4.b) Dans le cas de cette particule, on obtient $\tau = 2 \times 10^7 \text{ s}$ soit 231 jours. On se rend compte que la faiblesse de la constante de Planck assure qu'une particule macroscopique reste forcément localisée à tout instant et on peut toujours utiliser la physique ordinaire pour la décrire.

4.c) Pour un grain de poussière (non relativiste), la longueur d'onde de de Broglie est

$$\lambda = \frac{h}{mv} = 0,7 \text{ fm}$$

Il est impossible de trouver un solide cristallin permettant d'obtenir un phénomène de diffraction observable avec de tels grains de poussière : on ne peut pas avoir de paramètre de maille de l'ordre d'une telle longueur d'onde de de Broglie (inférieure à la taille d'un nucléon!).



Techniques pour passer du cours aux exercices (à maîtriser)

Quanton dans un puits de potentiel

Recherche des solutions sous la forme d'onde stationnaires dans un puits de potentiel infini

On cherche la fonction d'onde sous la forme $\underline{\psi}(x, t) = \underline{\varphi}(x) \underline{\chi}(t) = \sin(kx + \varphi_0) e^{-i\omega t}$.

Attention : $\varphi(x)$ est continue mais pas $\frac{d\varphi}{dx}$.

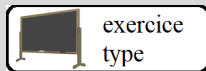
On trouve les k qui vérifient les conditions aux limites (comme celle de la corde vibrante).

En injectant la fonction d'onde dans l'équation de Schrödinger, on trouve les énergies des états stationnaires dans un puits de potentiel rectangulaire de profondeur infinie.

Normaliser une fonction d'onde

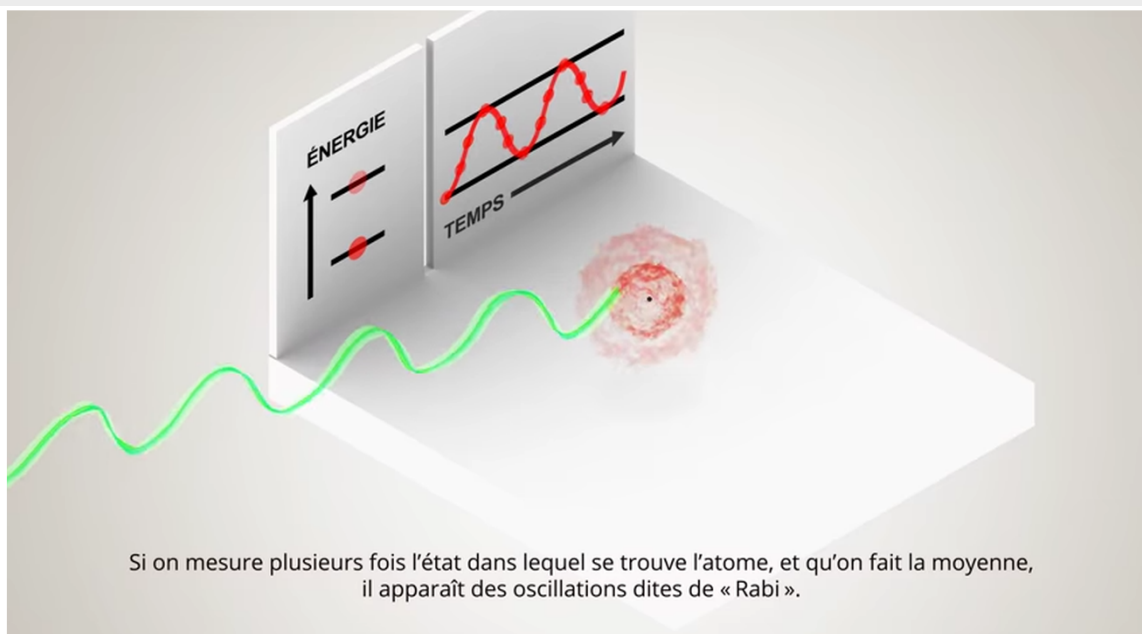
On doit avoir

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\underline{\psi}(x, t)|^2 dx = 1 \quad \forall t$$



Exercice 21.3 (le prof fait cet exercice type jeudi)

Puits de potentiel quantique de profondeur infinie



Saisies d'écrans d'une animation issue du site <http://toutestquantique.fr/>.

Soit un puits de potentiel infini de largeur a et une particule de masse m à l'intérieur.

1) On cherche des solutions sous forme d'états stationnaires. Montrer que l'énergie de la particule est quantifiée par un entier n . Exprimer $\varphi_n(x)$ la fonction d'onde spatiale associée.

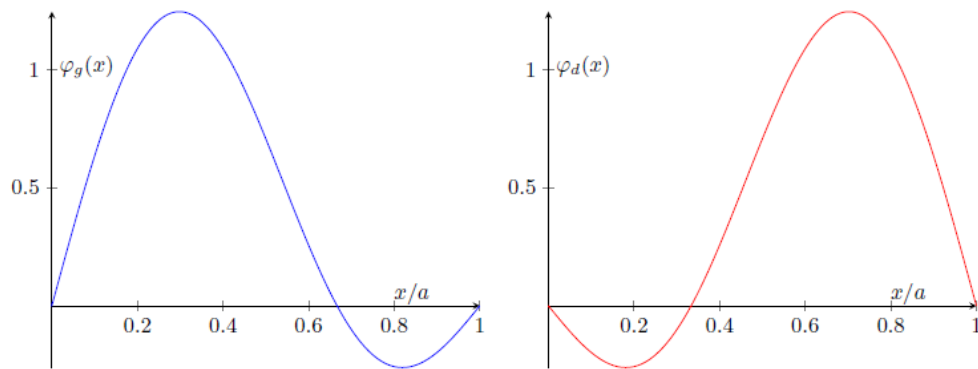
2) Représenter les deux superpositions des fonctions spatiales des deux premiers niveaux ($n = 1$ et $n = 2$) :

$$\varphi_g(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_1(x) + \varphi_2(x)) \quad \text{et} \quad \varphi_d(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_1(x) - \varphi_2(x))$$

3) Montrer qu'au cours du temps le système oscille à une pulsation dont on donnera l'expression.

1) cf cours ou exos précédents.

2)



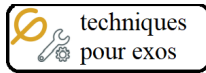
3) On note $\psi(x, t)$ la fonction d'onde :

$$|\psi(x, t)|^2 = \frac{1}{2} (\varphi_1(x)^2 + \varphi_2(x)^2 + \varphi_1(x)\varphi_2(x)e^{i(E_2-E_1)t/\hbar} + \varphi_1(x)\varphi_2(x)e^{i(E_1-E_2)t/\hbar})$$

Ainsi :

$$|\psi(x, t)|^2 = \frac{1}{2} \left(\varphi_1(x)^2 + \varphi_2(x)^2 + 2\varphi_1(x)\varphi_2(x) \cos\left(\frac{E_2 - E_1}{\hbar}t\right) \right)$$

On constate l'apparition d'un terme oscillatoire, variant avec une pulsation égale à $\omega = \frac{\Delta E}{\hbar}$ (analogue à l'émission/absorption d'un photon).



Techniques pour passer du cours aux exercices (à maîtriser)

Quanton dans un potentiel variable

Déterminer la forme des fonctions d'onde

Pour trouver les fonctions d'onde $\underline{\psi}(x, t) = \varphi(x) e^{-i \frac{E}{\hbar} t}$ des états stationnaires, il suffit d'écrire, dans chaque région où le potentiel est constant $V = V_0$, une combinaison linéaire de fonctions exponentielles d'argument réel ou imaginaire suivant que l'énergie est inférieure ou supérieure au potentiel :

- si $E > V_0$: $\varphi(x) = A_+ e^{i k x} + A_- e^{-i k x}$
- si $E < V_0$: $\varphi(x) = A_+ e^{+\rho x} + A_- e^{-\rho x}$

Déterminer les amplitudes des fonctions d'onde

Il faut ensuite raccorder la fonction d'onde d'une région à l'autre en imposant les conditions de continuité de la fonction et de sa dérivée :

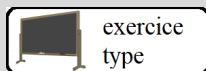
- $\varphi(x)$ continue en $x = x_0$: $\varphi(x = x_0^-) = \varphi(x = x_0^+)$
- $\frac{d\varphi}{dx}$ continue en $x = x_0$: $\frac{d\varphi}{dx}(x = x_0^-) = \frac{d\varphi}{dx}(x = x_0^+)$

NB : si $V_0 \rightarrow \infty$, $\varphi(x)$ est continue mais pas $\frac{d\varphi}{dx}$.

Normaliser une fonction d'onde

On doit avoir

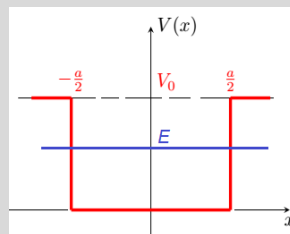
$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\underline{\psi}(x, t)|^2 dx = 1 \quad \forall t$$



Exercice 21.4 (le prof fait cet exercice type jeudi) Potentiel quantique variable

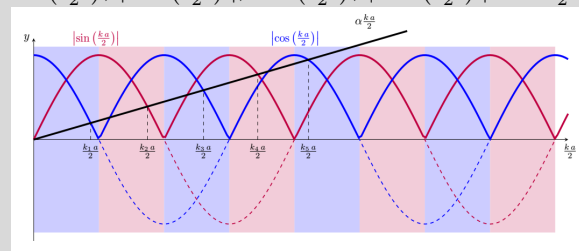
On s'intéresse à un quanton de masse m dans le potentiel suivant :

- si $x < -\frac{a}{2}$,
 $V(x) = V_0 > 0$;
- si $x \in [-\frac{a}{2}; +\frac{a}{2}]$,
 $V(x) = 0$;
- si $x > \frac{a}{2}$,
 $V(x) = V_0 > 0$.



On suppose que l'énergie du quanton est $E < V_0$.

Pour aider à la résolution graphique, on donne, en fonction de de ka , les courbes de $\sin(\frac{ka}{2})$, $|\sin(\frac{ka}{2})|$, $\cos(\frac{ka}{2})$, $|\cos(\frac{ka}{2})|$ et $\alpha \frac{ka}{2}$.



1) Donner la forme des états stationnaires dans les trois domaines. On notera k le vecteur d'onde dans le puits et k' le module du vecteur d'onde hors du puits. La probabilité de présence de la particule ne peut tendre vers l'infini à l'infini, qu'est-ce que cela impose ?

On peut, pour simplifier le problème, considérer séparément les fonctions d'ondes paires et les fonctions d'ondes impaires, dont la réunion donne l'ensemble des états stationnaires.

2) Donner la forme des états stationnaires symétrique ($\varphi_s(x)$ paire) et antisymétrique ($\varphi_a(x)$ impaire).

3) Montrer que les conditions aux limites du puits mènent à :

$$k' = k \tan\left(\frac{ka}{2}\right) \text{ pour les états symétriques,}$$

$$k' = -k \frac{1}{\tan\left(\frac{ka}{2}\right)} \text{ pour les états antisymétriques.}$$

4) En déduire que cela revient à :

$$\alpha \frac{ka}{2} = \left| \cos\left(\frac{ka}{2}\right) \right| \text{ avec } \cos\left(\frac{ka}{2}\right) \sin\left(\frac{ka}{2}\right) > 0 \text{ pour les états symétriques,}$$

$$\text{et } \alpha \frac{ka}{2} = \left| \sin\left(\frac{ka}{2}\right) \right| \text{ avec } \cos\left(\frac{ka}{2}\right) \sin\left(\frac{ka}{2}\right) < 0 \text{ pour les états antisymétriques}$$

avec α , un facteur qu'on exprimera.

5) Interpréter : quels sont les énergies et les états possibles ?

1) La forme des états stationnaires dans les trois domaines est la suivante :

$$\text{si } x < -\frac{a}{2}, \varphi(x) = A_g e^{-k'x} + B_g e^{k'x};$$

$$\text{si } x \in \left[-\frac{a}{2}; +\frac{a}{2}\right], \varphi(x) = A_c e^{-ikx} + B_c e^{ikx};$$

$$\text{si } x > \frac{a}{2}, \varphi(x) = A_d e^{-k'x} + B_d e^{k'x};$$

Comme la probabilité de présence de la particule ne peut tendre vers l'infini à l'infini, cela impose $A_g = B_d = 0$.

2) États stationnaires symétriques :

$$\text{si } x < -\frac{a}{2}, \varphi(x) = B e^{k'x};$$

$$\text{si } x \in \left[-\frac{a}{2}; +\frac{a}{2}\right], \varphi(x) = A \cos(kx);$$

$$\text{si } x > \frac{a}{2}, \varphi(x) = B e^{-k'x}$$

et états stationnaires antisymétriques :

$$\text{si } x < -\frac{a}{2}, \varphi(x) = -B' e^{k'x};$$

$$\text{si } x \in \left[-\frac{a}{2}; +\frac{a}{2}\right], \varphi(x) = A' \sin(kx);$$

$$\text{si } x > \frac{a}{2}, \varphi(x) = B' e^{-k'x}.$$

3) Les conditions de continuité pour les états stationnaires symétriques sont :

$$\text{en } x = \frac{a}{2}, A \cos\left(k \frac{a}{2}\right) = B e^{-k' \frac{a}{2}}$$

$$\text{et pour la dérivée : } -A k \sin\left(k \frac{a}{2}\right) = -B k' e^{k' \frac{a}{2}}.$$

Les conditions de continuité pour les états stationnaires antisymétriques sont :

$$\text{en } x = \frac{a}{2}, A' \sin\left(k \frac{a}{2}\right) = B' e^{-k' \frac{a}{2}}$$

$$\text{et pour la dérivée : } -A' k \cos\left(k \frac{a}{2}\right) = -B' k' e^{k' \frac{a}{2}}.$$

Quand on fait le rapport, on voit donc bien que les conditions aux limites du puits mènent à :

$$k' = k \tan\left(\frac{k a}{2}\right) \text{ pour les états symétriques,}$$

$$k' = -k \frac{1}{\tan\left(\frac{k a}{2}\right)} \text{ pour les états antisymétriques.}$$

4) En élevant au carré, et en remarquant que $\tan^2\left(\frac{k a}{2}\right) = \frac{1 - \cos^2\left(\frac{k a}{2}\right)}{\cos^2\left(\frac{k a}{2}\right)}$, on trouve :

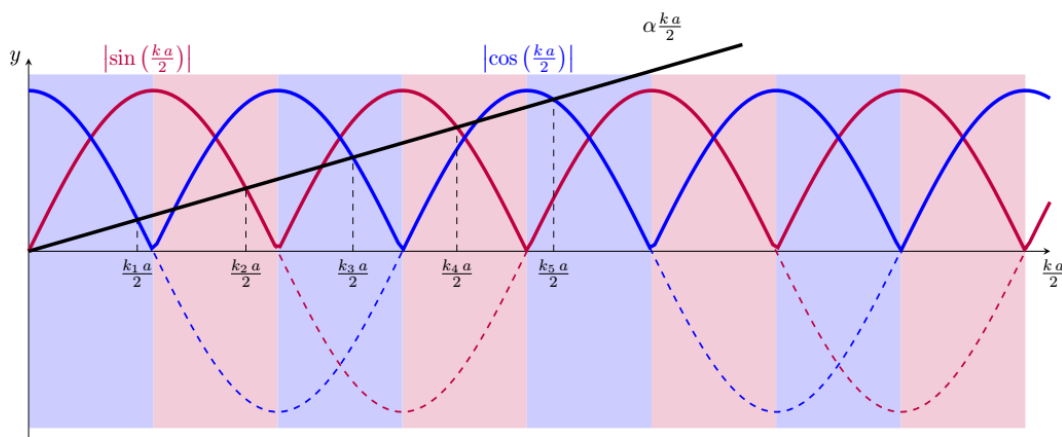
$$k^2 = (k^2 - k'^2) \cos^2\left(\frac{k a}{2}\right) \text{ pour les états symétriques,}$$

$$\text{et en remarquant que } \frac{1}{\tan^2\left(\frac{k a}{2}\right)} = \frac{1 - \sin^2\left(\frac{k a}{2}\right)}{\sin^2\left(\frac{k a}{2}\right)}, \text{ on trouve :}$$

$$k^2 = (k^2 - k'^2) \sin^2\left(\frac{k a}{2}\right) \text{ pour les états antisymétriques.}$$

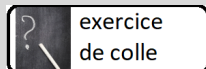
Enfin, comme $\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E$ et $\frac{\hbar^2 k'^2}{2m} = E - V_0$, on a aussi $k^2 - k'^2 = \frac{2m V_0}{\hbar^2}$, soit les formules proposées avec :

$$\alpha = \frac{2 \hbar}{a \sqrt{2 m V_0}}$$



5) Le confinement dans le puits fini se caractérise par :

- une quantification de l'énergie,
- une alternance d'états symétrique / anti-symétrique,
- une profondeur de pénétration de la particule en dehors du puits $\delta = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}$,
- un abaissement de l'énergie par rapport au puits infini dû à l'élargissement effectif du puits (par les ondes évanescentes sur les bords du puits).



exercice
de colle

Exercice 21.5 Diffusion quantique

On s'intéresse à un quanton de masse m libre : le potentiel de ce quanton $V(x)$ est nul pour $x \in \mathbb{R}$. La fonction d'onde $\psi(x, t)$ évolue suivant l'équation de Schrödinger :

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

1) OPPM

- 1.a) Montrer que des OPPM $\tilde{\psi}(x, t) = \tilde{\psi}_0 e^{-i(\omega t - kx)}$ sont solutions de l'équation de Schrödinger.
- 1.b) Ecrire la relation de dispersion et déterminer la vitesse de phase.
- 1.c) Montrer qu'une telle OPPM est physiquement inacceptable.

2) Paquet d'onde

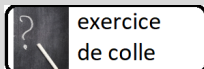
On représente l'état de la particule par un paquet d'ondes dont les nombres d'onde ont une valeur moyenne k_0 et une dispersion Δk qui détermine l'extension spatiale Δx_0 du paquet à $t = 0$.

On note ω_0 la pulsation moyenne associée à k_0 .

- 2.a) Exprimer la vitesse de groupe
- 2.b) Relier la dispersion pour la vitesse de groupe Δv_g à la dispersion Δk puis donner la limite inférieure de Δv_g en fonction de Δx_0 .
- 2.c) En considérant l'expression de Δv_g constante et égale à cette précédente limite inférieure, déterminer la durée au bout de laquelle l'étalement du paquet d'onde a été multiplié par deux.

3) Interprétation de l'équation de Schrödinger

- 3.a) Exprimer l'énergie cinétique grâce à la quantité de mouvement, puis grâce au vecteur d'onde, et enfin à l'aide d'une dérivée de la fonction d'onde.
- 3.b) Interpréter alors la vitesse de la particule en tant que vitesse de l'onde associée à la particule.
- 3.c) Interpréter ainsi l'équation de Schrödinger.



exercice
de colle

Exercice 21.6 Quantique ou pas quantique ?

La mécanique classique suffit pour une particule matérielle lorsque la longueur d'onde de DE BROGLIE est négligeable devant la taille caractéristique du système étudié.

- 1) Montrer que c'est cohérent avec le critère donné sur l'action.



vue d'artiste d'un atome

- 2) La trotteuse d'une montre, d'une taille $\ell \approx 1$ cm, d'une masse $m \approx 1$ μ g, se déplace avec un temps caractéristique $\tau \approx 1$ s.

- 2.a) À partir de ces grandeurs, créer une nouvelle grandeur A qui aurait la dimension d'une action.
2.b) La trotteuse d'une montre mérite-t-elle un traitement quantique ?

- 3) Préciser, en utilisant le critère quantique, si l'étude de l'atome d'hydrogène nécessite la physique quantique sachant que l'on relève expérimentalement une énergie d'ionisation $E = 13,6$ eV et que son spectre présente une longueur d'onde minimale $\lambda = 100$ nm.

- 4) Grain de poussière

Soit une particule de masse $m = 10^{-15}$ kg de taille caractéristique $\ell = 1$ μ m supposée correspondre à la largeur caractéristique d'un paquet d'ondes de matière.

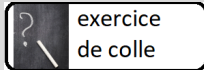
- 4.a) Montrer que l'équation de Schrödinger donne, en ordre de grandeur le temps caractéristique d'étalement du paquet d'onde :

$$\tau = \frac{2m\ell^2}{\hbar}$$

- 4.b) Calculer numériquement τ et conclure.

En 1925, Elsassler fait remarquer que l'on peut vérifier la nature ondulatoire de particules matérielles de la même façon qu'on a vérifié en 1912 la nature ondulatoire des rayons X, c'est-à-dire en leur faisant traverser un solide cristallin conduisant à l'obtention d'un phénomène de diffraction.

- 4.c) Peut-on révéler ainsi la nature ondulatoire de grains de poussière de masse $m = 10^{-15}$ kg et de vitesse 1 mm \cdot s $^{-1}$?



exercice
de colle

Exercice 21.7

La théorie de l'onde pilote de Louis de Broglie et David Bohm



Louis de Broglie (1892 - 1987)

De Broglie [...] en 1927 lorsqu'il a été invité à parler de sa théorie au fameux congrès Solvay [...] a inventé la théorie de l'onde pilote. [...] Il semble même que personne n'ait été convaincu.

[...] Quand Wolfgang Pauli avait vivement attaqué la théorie de Broglie, il avait avancé des arguments concernant les collisions inélastiques dont la théorie de l'onde pilote serait incapable de rendre compte. Si on y réfléchit maintenant, ces arguments ne tenaient pas. Mais, à l'époque, l'équivalence entre les prédictions des divers formalismes et leurs relations n'était pas bien claire!

En 1952, Bohm (qui ne connaissait pas le travail de Broglie) a proposé une théorie très proche de la deuxième version de la théorie de l'onde pilote. [...] Pour rendre la théorie strictement équivalente à la mécanique quantique standard [on introduit un] potentiel supplémentaire.

[...] La mécanique quantique pose des problèmes d'interprétation difficiles. [...] L'approche de la théorie de Broglie-Bohm n'est pas du tout de chercher à les éviter. Au contraire, elle vise vraiment à « prendre le taureau par les cornes ». Elle parle vraiment des « choses qui existent » et ne suit aucune stratégie d'évitement ou d'interdiction à la Bohr. C'est vraiment, de ce point de vue, une approche extrêmement directe et intéressante



David Bohm (1917 - 1982)

Franck Laloë in Bernard d'Espagnat et al., *Le monde quantique* Editions Matériologiques | « Sciences et philosophie » 2014 | pages 211 à 260.

On écrit la fonction d'onde sous la forme $\underline{\Psi} = R \exp(i\frac{S}{\hbar})$ où $R = |\underline{\Psi}| \in \mathbb{R}^+$ et $S \in \mathbb{R}$ (une action en J·s).

1) Définition générale du courant de probabilité

On donne l'expression du vecteur densité de courant de probabilité quantique

$$\vec{J} = \frac{i\hbar}{2m} [\underline{\Psi} \vec{\nabla} \underline{\Psi}^* - \underline{\Psi}^* \vec{\nabla} \underline{\Psi}]$$

en toute généralité.

1.a) Vérifier la compatibilité de cette définition dans le cas d'une OPPM.

1.b) Montrer grâce à l'expression de $\underline{\Psi}$ que $\vec{J} = \rho \vec{v}$. On donnera les expressions de ρ et $m\vec{v}$ à l'aide de R et S .

2) On rappelle l'équation de Schrödinger $i\hbar \frac{\partial \underline{\Psi}}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \underline{\Psi} + V \underline{\Psi}$ pour une particule quantique de masse m dans un potentiel V .

2.a) Ré-écrire l'équation de Schrödinger avec R et S .

2.b) Montrer que la partie imaginaire de la précédente expression donne l'équation de continuité de \vec{J} :

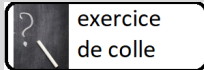
$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \vec{v}) = 0$$

2.c) Montrer que la partie réelle de l'équation de Schrödinger donne

$$-\frac{\partial S}{\partial t} = E_c + Q + V$$

où E_c est l'énergie cinétique. On donnera l'expression du « potentiel quantique » Q .

3) Montrer que l'on peut aboutir à une équation qui ressemble au principe fondamental de la dynamique en mécanique classique.



exercice
de colle

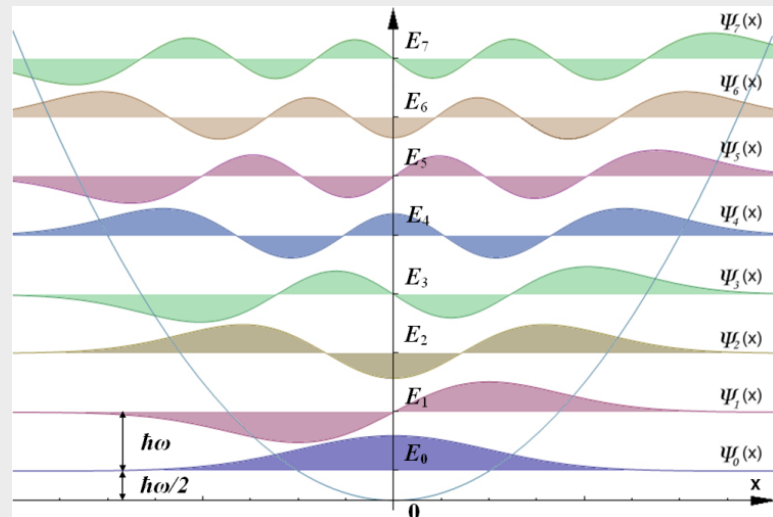
Exercice 21.8 Potentiel harmonique

De façon générale, un oscillateur est un système dont l'évolution dans le temps est périodique. Il est dit de plus harmonique si les oscillations effectuées sont sinusoïdales, avec une amplitude et une fréquence qui ne dépendent que des caractéristiques intrinsèques du système et des conditions initiales. Cela est le cas en mécanique classique pour une particule évoluant à une dimension dans un potentiel quadratique.

Loin d'être un cas particulier purement académique, cette forme de potentiel est obtenue notamment dans le cas d'oscillations de faible amplitude autour d'une position d'équilibre stable dans un potentiel quelconque. Pour cette raison, le concept d'oscillateur harmonique joue un rôle majeur dans de nombreuses applications de la physique.

La mécanique quantique a révolutionné un grand nombre de concepts fondamentaux. L'oscillateur harmonique a aussi subi une reformulation dans ce cadre quantique, ce qui a permis d'élucider plusieurs résultats expérimentaux. Les résultats principaux sont les suivants :

- les énergies accessibles par l'oscillateur sont quantifiées ;
- les états d'énergie sont espacés de la même quantité ;
- l'énergie de l'état fondamental est non nulle. Cette situation, très différente du cas classique, résulte de la relation d'incertitude de Heisenberg.



Représentation des sept premiers niveaux d'énergie et de $\psi_n(x)$ de l'oscillateur harmonique quantique unidimensionnel.

https://fr.wikipedia.org/wiki/Oscillateur_harmonique_quantique

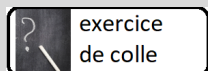
On s'intéresse à un quanton astreint à se déplacer suivant Ox , soumis au potentiel quantique de la forme $V(x) = \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2$.

On rappelle que pour une grandeur g , $\Delta g = \sqrt{\langle g^2 \rangle - \langle g \rangle^2}$.

On donne l'équation de Schrödinger stationnaire pour $\psi(x, t) = \exp(-i\frac{E}{\hbar}t) \varphi(x)$:

$$\hat{H} \varphi = E \varphi \quad \text{où} \quad \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x) \quad \text{avec} \quad \hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

- 1) Etude du potentiel
 - 1.a) Tracer l'allure de $V(x)$.
 - 1.b) Montrer que tout potentiel présentant un minimum peut être approximé par un potentiel harmonique.
 - 1.c) Sans aucun calcul, déterminer $\langle x \rangle$ et $\langle p \rangle$.
- 2) Utilisation de l'inégalité de Heisenberg $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$:
 - 2.a) Déterminer l'expression de Δp en fonction de Δx dans le cas du minimum de l'inégalité de Heisenberg.
 - 2.b) Déterminer l'expression de l'énergie minimale E_{\min} du quanton en fonction de Δx et Δp .
 - 2.c) En déduire l'énergie minimale E_{\min} en fonction de \hbar et ω .
 - 2.d) Montrer qu'il y a alors équipartition de l'énergie.
- 3) Solution gaussienne.
 - 3.a) Montrer que la fonction $\varphi_0(x) = A \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right)$ est solution de l'équation de Schrödinger stationnaire pour un certain σ à déterminer.
 - 3.b) Trouver l'énergie associée à cette solution. Qu'en conclure ?
 - 3.c) Comment est déterminé A ? Tracer l'allure de $\varphi_0(x)$.



exercice
de colle

Exercice 21.9 Electrons libres

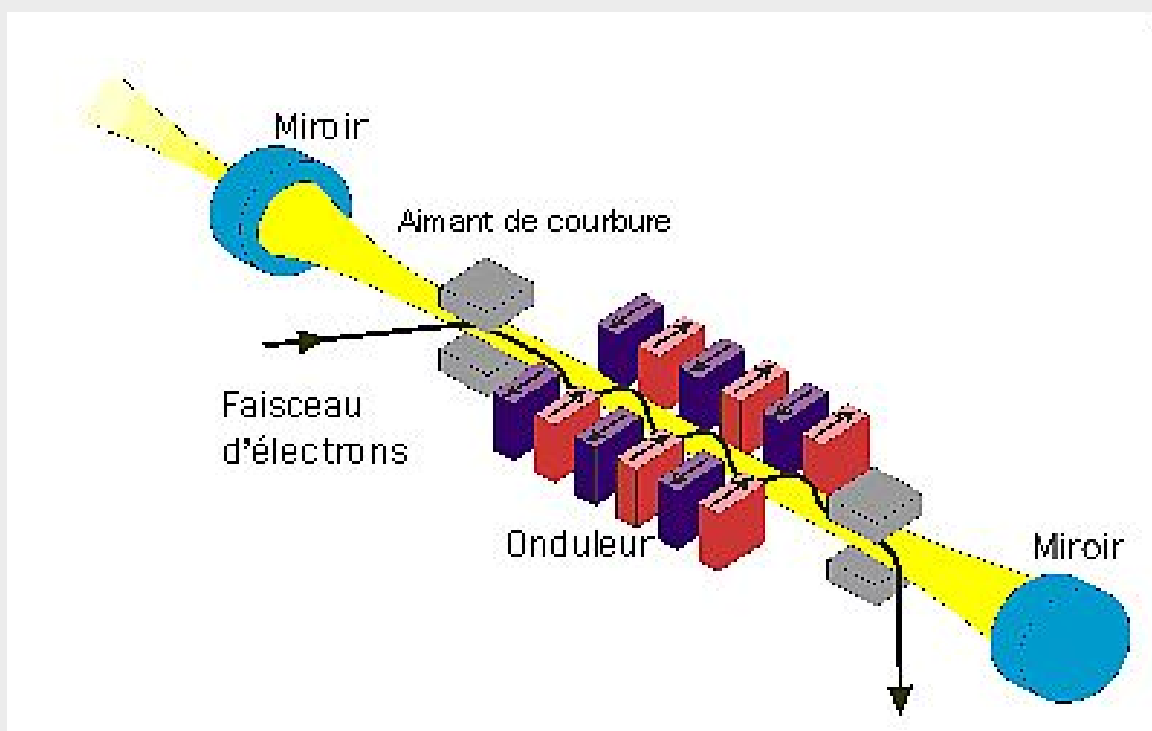
Les lasers "conventionnels" utilisent des atomes ou molécules excités pour amplifier la lumière. Un laser à électrons libres (LEL) utilise un faisceau d'électrons de haute énergie comme milieu amplificateur.

Les électrons émettent de la lumière lorsqu'ils zigzaguent sous l'action d'une succession d'aimants permanents : l'onduleur. La lumière est alors stockée dans une cavité optique et peut rétroagir sur les électrons. Cette rétroaction se traduit par une modulation de la densité électronique du faisceau, qui conduit à un accroissement de la cohérence et de l'intensité de la lumière émise.

La longueur d'onde rayonnée dépend de l'énergie des électrons, de la période de l'onduleur et du champ magnétique appliqué. En principe, n'importe quelle longueur d'onde est accessible de cette manière : des rayons X au terahertz ! Mais la plupart des LEL jusqu'à présent opèrent dans un domaine qui s'étend de l'UV à l'infrarouge.

Le développement des LEL est limité en pratique par la qualité des faisceaux d'électrons, et bien sûr par l'encombrement et le prix des installations requises.

(http://old.clio.lcp.u-psud.fr/cliio_fr/FEL.html).



1) On s'intéresse aux électrons libres d'un faisceau électronique de direction (Ox) . Le nombre d'électrons par unité de longueur dans le faisceau est $n = 5 \times 10^6 \text{ mm}^{-1}$. Chaque électron, sans spin et sans interaction avec les autres électrons, est non relativiste et a une énergie cinétique $E_c = 5 \text{ eV}$.

1.a) Donner l'expression d'une fonction d'onde $\psi(x, t)$ décrivant ces électrons.

1.b) Calculer alors le courant de probabilité et discuter le résultat.

2) On considère maintenant un unique électron non relativiste ne ressentant aucune interaction.

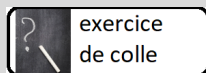
2.a) Pourquoi faut-il s'intéresser à un paquet d'onde ?

2.b) Obtenir la relation de dispersion $\omega(k)$ du paquet d'ondes qui décrit l'électron.

2.c) Comment peut-on obtenir la vitesse de son "centre" connaissant la relation de dispersion ?

2.d) Vérifier l'accord avec le principe de correspondance de Bohr (1923) qui dit que "les prédictions de la théorie quantique tendent vers leurs valeurs classiques dans la limite des nombres quantiques élevés".

2.e) Compte tenu de la relation de dispersion précédente, que peut-on prévoir pour l'évolution du profil du paquet d'ondes au cours de sa propagation ?

**Exercice 21.10****Evolution d'une particule quantique libre assimilée à un paquet d'onde gaussien**

On s'intéresse à une particule libre qui se déplace suivant l'axe Ox .

1) OPPM

1.a) Rappeler les formes des ondes planes progressives monochromatiques solutions de l'équation de Schrödinger.

1.b) Montrer qu'on peut les réécrire sous la forme

$$\tilde{\psi}(x, t) = \tilde{\psi}_0 e^{\frac{i}{\hbar}(p x - E(p) t)}$$

1.c) Pourquoi une telle fonction d'onde n'est-elle pas acceptable ?

2) Petit paquet d'ondes

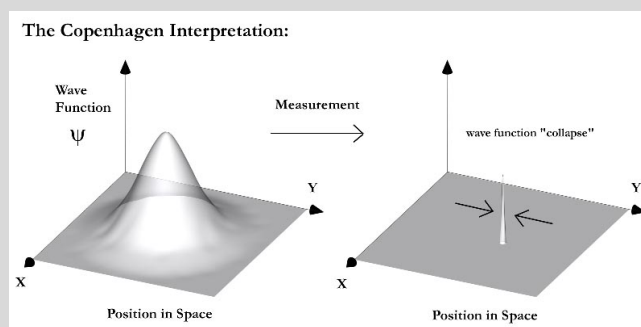
On va supposer que plusieurs quantité de mouvement existent autour de p_0 , à $\Delta p \ll p_0$ près, et on construit le paquet d'ondes suivant :

$$\tilde{\psi}(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} A(p) e^{\frac{i}{\hbar}(p x - E(p) t)} dp$$

2.a) Exprimer $E(p)$ au premier ordre.

2.b) Montrer que le petit paquet d'onde peut se réécrire :

$$\tilde{\psi}(x, t) = e^{\frac{i p_0^2 t}{2 m \hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} A(p) e^{\frac{i}{\hbar}(x - \frac{p_0}{m} t) p} dp$$

**3) Paquet d'onde gaussien**

On admet donc que le paquet d'onde peut s'écrire :

$$\tilde{\psi}(x, t) = e^{\frac{i p_0^2 t}{2 m \hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} A(p) e^{\frac{i}{\hbar}(x - \frac{p_0}{m} t) p} dp$$

On suppose pour calculer la précédente formule que $A(p) = A_0 e^{-\frac{(p-p_0)^2}{\Delta p^2}}$ avec $p_0 \gg \Delta p$.

3.a) Tracer l'allure du spectre $A(p)$.

On donne

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha x^2} e^{-i \xi x} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} e^{-\frac{\xi^2}{4\alpha}}$$

3.b) Calculer la fonction d'onde et montrer en particulier que

$$|\tilde{\psi}(x, t)| = C e^{-\frac{(x - \frac{p_0}{m} t)^2}{\Delta x^2}}$$

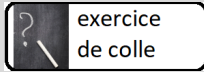
où C et Δx sont deux constantes qu'on exprimera.

3.c) Est-ce cohérent avec l'inégalité de Heisenberg spatiale ?

3.d) Où se trouve le maximum de la densité de probabilité à la date t ? Interpréter sa dépendance en t .

3.e) Tracer l'allure de $|\tilde{\psi}(x, t)|$ en fonction de x à deux dates différentes.

3.f) Montrer qu'on peut normaliser cette fonction d'onde. On donnera C .



exercice
de colle

Exercice 21.11

Evolution d'une particule quantique libre assimilée à un paquet d'onde rectangulaire

On s'intéresse à une particule libre qui se déplace suivant l'axe Ox .

1) OPPM

1.a) Rappeler les formes des ondes planes progressives monochromatiques solutions de l'équation de Schrödinger.

1.b) Montrer qu'on peut les réécrire sous la forme

$$\tilde{\psi}(x, t) = \tilde{\psi}_0 e^{\frac{i}{\hbar}(p x - E(p) t)}$$

1.c) Pourquoi une telle fonction d'onde n'est-elle pas acceptable ?

2) Petit paquet d'ondes

On va supposer que plusieurs quantité de mouvement existent autour de p_0 , à $\Delta p \ll p_0$ près, et on construit le paquet d'ondes suivant :

$$\tilde{\psi}(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} A(p) e^{\frac{i}{\hbar}(p x - E(p) t)} dp$$

2.a) Exprimer $E(p)$ au premier ordre.

2.b) Montrer que le petit paquet d'onde peut se réécrire :

$$\tilde{\psi}(x, t) = e^{\frac{i p_0^2 t}{2 m \hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} A(p) e^{\frac{i}{\hbar}(x - \frac{p_0}{m} t) p} dp$$

3) Paquet d'ondes à spectre plat

On suppose pour calculer la précédente formule que $A(p) = A_0$ si $p \in \left[p_0 - \frac{\Delta p}{2}; p_0 + \frac{\Delta p}{2} \right]$ et $A(p) = 0$ sinon.

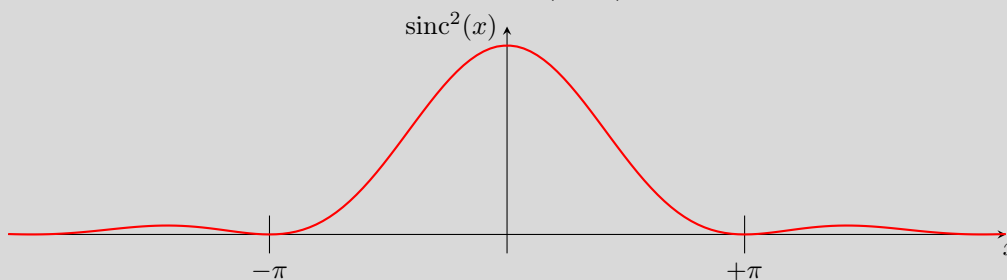
3.a) Tracer l'allure du spectre $A(p)$.

3.b) Calculer la fonction d'onde et montrer en particulier que

$$\tilde{\psi}(x, t) = C e^{\frac{i}{\hbar} \left(p_0 x - \frac{p_0^2 t}{2 m} \right)} \text{sinc} \left[\frac{\Delta p}{2 \hbar} \left(x - \frac{p_0}{m} t \right) \right]$$

où C est une constante qu'on exprimera.

On donne l'allure de la fonction $(\text{sinc}(x))^2 = \left(\frac{\sin(x)}{x} \right)^2$:



3.c) Où se trouve le maximum de la densité de probabilité à la date t ? Interpréter sa dépendance en t .

3.d) Évaluer la largeur Δx de la densité de probabilité. Est-ce cohérent avec l'inégalité de Heisenberg spatiale ?

3.e) Tracer l'allure de la densité de probabilité en fonction de x à deux dates différentes.

3.f) Montrer qu'on peut normaliser cette fonction d'onde. On donnera A_0 .

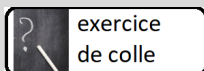
On donne $\int_{-\infty}^{+\infty} (\text{sinc}(x))^2 dx = \pi$.

? \ exercice
de colle

Exercice 21.12
La couleur du carotène



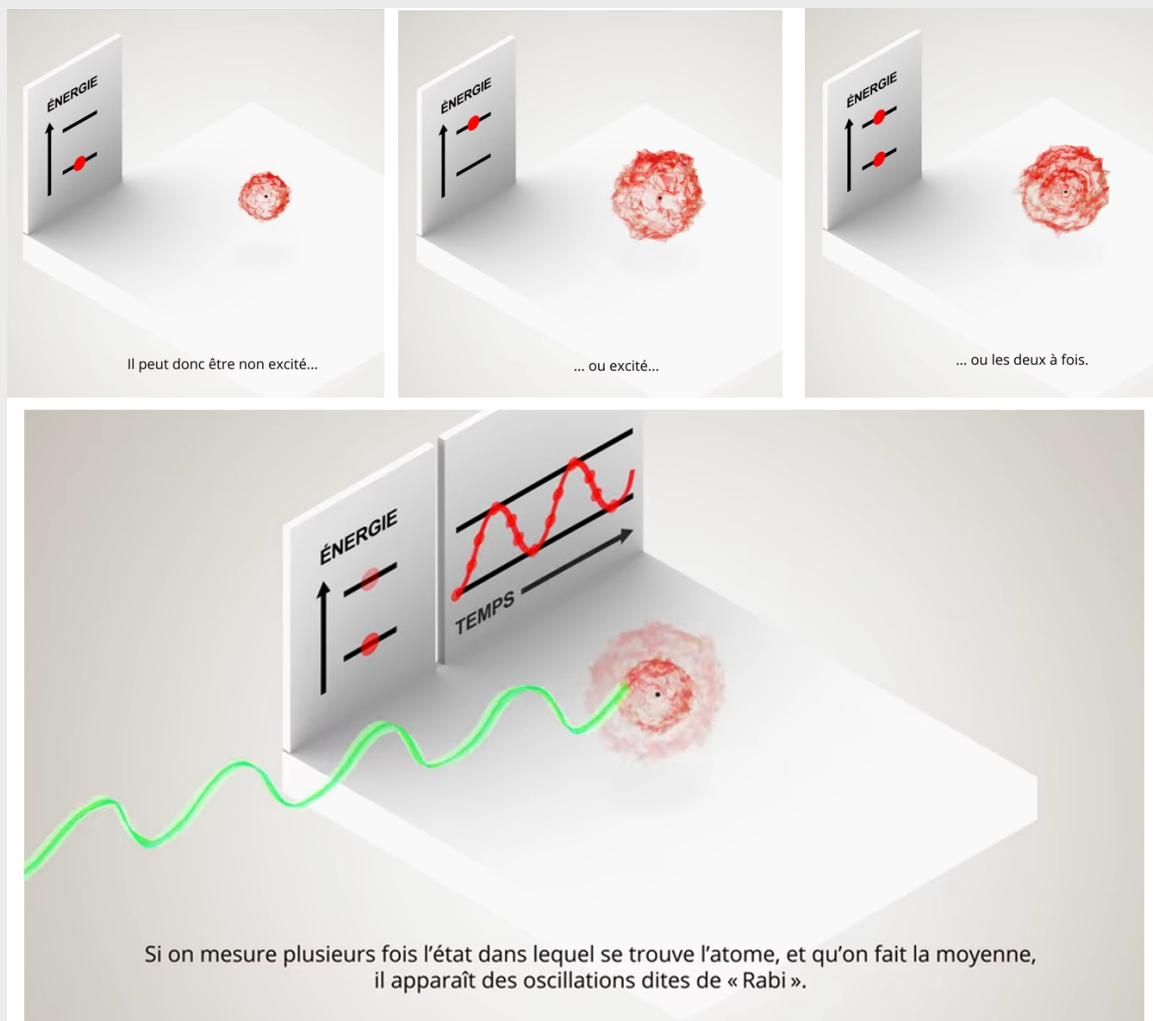
- 1) On s'intéresse à un électron confiné dans une molécule de β -carotène de longueur ℓ . L'électron est dans un puits infini entre $x = 0$ et $x = \ell$. On suppose que $E > V_0 = 0$ dans le puits infini.
- 1.a) Montrer que la fonction d'onde qui vérifie les conditions aux limites est sinusoïdale.
 - 1.b) Établir les expressions des énergies des états stationnaires.
 - 1.c) Retrouver ces énergies par une analogie avec une corde vibrante fixée en ses deux extrémités.
- 2) La molécule de β -carotène possède une bande d'absorption centrée sur la longueur d'onde $\lambda = 451$ nm (dans le bleu), correspondant à l'absorption d'un photon provoquant le passage d'un électron du dernier niveau occupé dans l'état fondamental au premier niveau non occupé.
- 2.a) Quels sont ces précédents niveaux, sachant qu'il y a 22 électrons délocalisés ?
 - 2.b) En déduire la longueur ℓ . Commenter.
- On donne la masse de l'électron : $m = 9,1 \times 10^{-31}$ kg.



exercice
de colle

Exercice 21.13

État non stationnaire dans un puits de potentiel infini



Saisies d'écrans d'une animation issue du site <http://toutestquantique.fr/>.

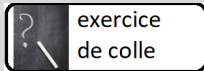
Soit un puits de potentiel infini de largeur a et une particule de masse m à l'intérieur.

1) On cherche des solutions sous forme d'états stationnaires. Montrer que l'énergie de la particule est quantifiée par un entier n . Exprimer $\varphi_n(x)$ la fonction d'onde spatiale associée.

2) Représenter les deux superpositions des fonctions spatiales des deux premiers niveaux ($n = 1$ et $n = 2$) :

$$\varphi_g(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_1(x) + \varphi_2(x)) \quad \text{et} \quad \varphi_d(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_1(x) - \varphi_2(x))$$

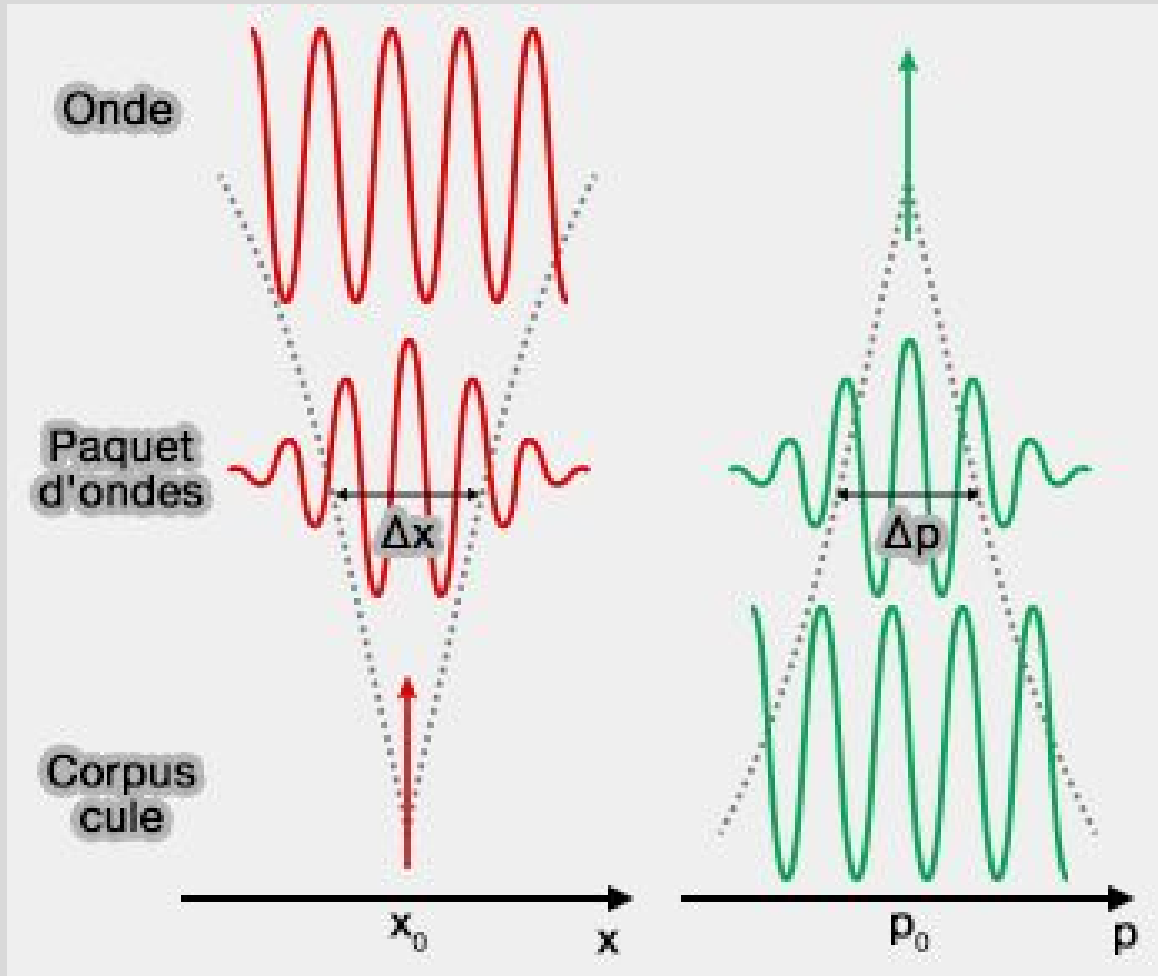
3) Montrer qu'au cours du temps le système oscille à une pulsation dont on donnera l'expression.



exercice
de colle

Exercice 21.14

Les relations de Heisenberg sont-elles vérifiées dans un puits de potentiel ?



On s'intéresse à une particule quantique dans un puits infini entre $x = -\frac{\ell}{2}$ et $x = +\frac{\ell}{2}$.

1) Déterminer l'énergie de la particule pour le niveau d'énergie n .

2) En déduire l'incertitude sur la quantité de mouvement de la particule : $\Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - (\langle p \rangle)^2}$.
On donne le formulaire suivant :

$$\int_{-\frac{n\pi}{2}}^{+\frac{n\pi}{2}} \sin^2(u) du = \int_{-\frac{n\pi}{2}}^{+\frac{n\pi}{2}} \cos^2(u) du = \frac{n\pi}{2}$$

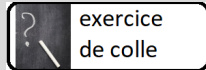
$$\int_{-\frac{n\pi}{2}}^{+\frac{n\pi}{2}} u \sin^2(u) du = \int_{-\frac{n\pi}{2}}^{+\frac{n\pi}{2}} u \cos^2(u) du = \int_{-\frac{n\pi}{2}}^{+\frac{n\pi}{2}} \sin(u) \cos(u) du = 0$$

$$\int_{-\frac{n\pi}{2}}^{+\frac{n\pi}{2}} u^2 \sin^2(u) du = \int_{-\frac{n\pi}{2}}^{+\frac{n\pi}{2}} u^2 \cos^2(u) du = \frac{n^3 \pi^3}{24} + \frac{n\pi}{4} (-1)^n$$

3) Montrer que l'incertitude sur la position de la particule est :

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - (\langle x \rangle)^2} = \ell \sqrt{\frac{1}{12} + \frac{(-1)^n}{2n^2\pi^2}}$$

4) Vérifier que l'inégalité spatiale de Heisenberg $\Delta p_x \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}$ n'est pas mise en défaut pour les 3 premiers niveaux d'énergie.



Exercice 21.15 Densité de courant de probabilité quantique

« En mécanique quantique, le courant de probabilité est un concept décrivant le flux de densité de probabilité. Tout comme la loi de conservation de la charge en électrodynamique, il existe une loi de conservation de la densité de probabilité en mécanique quantique. Intuitivement, cette dernière indique que lorsque la densité de probabilité dans un volume fixé varie dans le temps, alors il doit exister un flux de densité de probabilité à travers les parois de ce volume. La notion de courant de probabilité permet de décrire ce flux de probabilité. »
https://fr.wikipedia.org/wiki/Courant_de_probabilité.

1) Définition générale du courant de probabilité

On cherche, en physique quantique, relativement à des quantons qui se déplacent selon l'axe Ox , à trouver des grandeurs qui vérifient l'équation locale de conservation suivante :

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \text{div} \vec{J} = 0$$

(ou équation de continuité).

1.a) En partant de l'équation de Schrödinger, montrer que :

$$\frac{\partial}{\partial t} [\psi \psi^*] + \frac{i \hbar}{2m} \left[\psi \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi^* - \psi^* \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi \right] = 0$$

1.b) Donner l'expression de n , densité linéique de probabilité.

1.c) Vérifier que $\vec{J} = \frac{i \hbar}{2m} [\psi \vec{\nabla} \psi^* - \psi^* \vec{\nabla} \psi]$.

2) Applications dans le cas d'un quanton non confiné

Cette dernière définition de \vec{J} est très générale et n'est pas au programme. On va essayer de retomber sur la définition vue en cours.

On s'intéresse à un quanton qui entre dans l'espace $x > 0$, d'énergie E , dans un potentiel V_0 constant.

2.a) Déterminer \vec{J} si $E > V_0$.

2.b) Déterminer \vec{J} si $E < V_0$.

2.c) Redéfinir \vec{J} à partir du vecteur d'onde complexe $\underline{k} \vec{u}_x$.

3) Application dans le cas d'un quanton confiné

Le quanton est maintenant confiné dans un puits infini entre $x = 0$ et $x = \ell$.

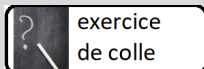
3.a) Vérifier que $\underline{\psi} = \sqrt{\frac{2}{\ell}} \sin\left(\frac{n\pi x}{\ell}\right) \exp(-i\omega_n t)$ où $n \in \mathbb{N}^*$.

On donne le formulaire suivant :

$$\int \sin^2(u) du = \frac{u}{2} - \frac{\sin(2u)}{4}$$

3.b) Calculer \vec{J} avec la définition générale.

3.c) Le résultat précédemment trouvé était-il prévisible ?



exercice
de colle

Exercice 21.16 Deux électrons dans un puits infini

1) On s'intéresse à un électron de masse m dans un puits infini unidimensionnel (d'axe Ox) de longueur ℓ . Le potentiel de ce quanton $V(x)$ est nul dans l'intervalle $[0, \ell]$ et infini sinon.

La fonction d'onde $\tilde{\psi}(x, t)$ évolue suivant l'équation de Schrödinger :

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

1.a) Déterminer la fonction d'onde $\tilde{\psi}_1(x, t)$ (avec le facteur de normalisation).

On donne le formulaire suivant :

$$\int \sin^2(u) \, du = \frac{u}{2} - \frac{\sin(2u)}{4}$$

1.b) En déduire les énergies possibles E_n de cet électron.

2) On considère maintenant deux électrons dans ce puits de potentiel, sans interaction entre eux.

On cherche la fonction d'onde sous la forme $\tilde{\psi}(x, t) = \tilde{\varphi}(x_1, x_2) e^{-i\omega t} = \tilde{\varphi}_1(x_1) \tilde{\varphi}_2(x_2) e^{-i\omega t}$.


2.a) Réécrire alors, dans le puits, l'équation de Schrödinger

$$i \hbar \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \tilde{\psi}}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \tilde{\psi}}{\partial x_2^2} + V(x_1, x_2, t) \tilde{\psi}$$

2.b) Ecrire $\tilde{\varphi}_1(x_1)$ grâce au nombre quantique (entier) n_1 et $\tilde{\varphi}_2(x_2)$ grâce au nombre quantique (entier) n_2 .

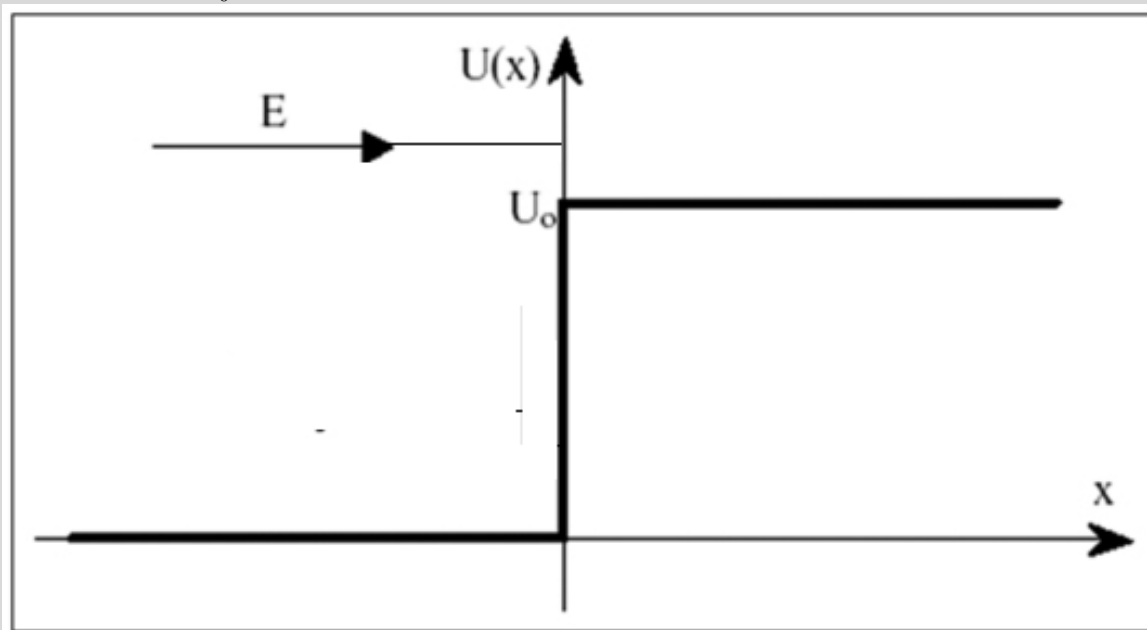
2.c) Trouver ainsi les énergies propres du système des deux quantons en fonction de n_1 et n_2 .

2.d) Calculer les 6 premiers niveaux d'énergie et trouver le degré de dégénérescence g de chaque niveau d'énergie (c'est-à-dire le nombre d'états pour un niveau d'énergie donné).

 **exercice de colle**

Exercice 21.17
Un flux de quantons sur une marche basse

1) On s'intéresse à un flux de particules incidentes avec une vitesse $\vec{v} = v \vec{u}_x$ venant de $x \rightarrow -\infty$ sur une marche de potentiel en $x = 0$: si $x < 0$, $V(x) = 0$ et si $x > 0$, $V(x) = V_0 > 0$. On suppose que l'énergie cinétique des particules est $E > V_0$.



1.a) Déterminer la forme des fonctions d'onde $\tilde{\psi}(x, t) = \varphi(x) e^{-i \frac{E}{\hbar} t}$ des états stationnaires dans chacun des deux domaines.

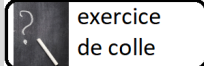
1.b) En utilisant les conditions de continuité de la fonction $\varphi(x)$ et de sa dérivée $\frac{d\varphi}{dx}$, déterminer parfaitement les fonctions d'onde.

1.c) Associer un courant de probabilité $\vec{J} = |\tilde{\psi}(x, t)|^2 \frac{\hbar \vec{k}}{m}$ aux flux incident, réfléchi et transmis pour déterminer les coefficients R et T de réflexion et transmission des flux.

2) Montrer qu'on retrouve les résultats de la mécanique classique si $E \gg V_0$.

3) On s'intéresse à un flux de particules incidentes avec une vitesse $\vec{v} = v \vec{u}_x$ venant de $x \rightarrow -\infty$ sur une marche de potentiel en $x = 0$: si $x < 0$, $V(x) = V_1$ et si $x > 0$, $V(x) = V_2$. On suppose que l'énergie cinétique des particules est $E > V_1$ et V_2 .

Proposer une analogie pour une onde électromagnétique qui se propage dans l'air ou dans le verre.

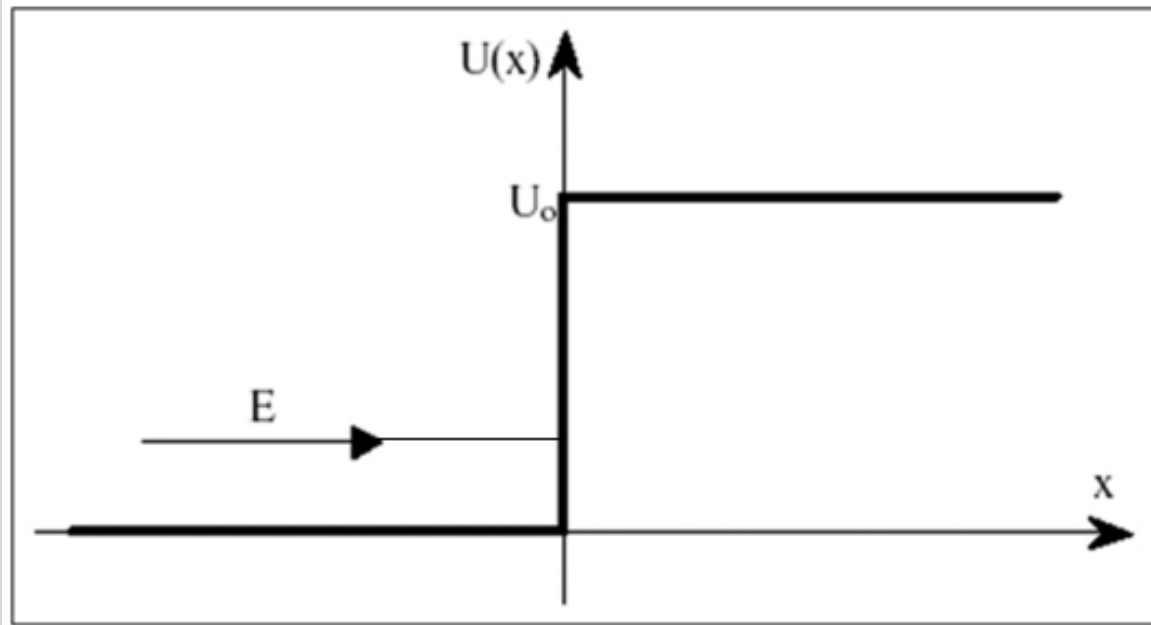


exercice
de colle

Exercice 21.18

Un flux de quantons sur une marche haute

On s'intéresse à un flux de particules incidentes avec une vitesse $\vec{v} = v \vec{u}_x$ venant de $x \rightarrow -\infty$ sur une marche de potentiel en $x = 0$: si $x < 0$, $V(x) = 0$ et si $x > 0$, $V(x) = V_0 > 0$. On suppose que l'énergie cinétique des particules est $E < V_0$.



1)

1.a) Déterminer la forme des fonctions d'onde $\tilde{\psi}(x, t) = \varphi(x) e^{-i \frac{E}{\hbar} t}$ des états stationnaires dans chacun des deux domaines.

1.b) En utilisant les conditions de continuité de la fonction $\varphi(x)$ et de sa dérivée $\frac{d\varphi}{dx}$, déterminer parfaitement les fonctions d'onde.

1.c) Associer un courant de probabilité $\vec{J} = |\tilde{\psi}(x, t)|^2 \frac{\hbar \vec{k}}{m}$ aux flux incident, réfléchi et transmis pour déterminer les coefficients R et T de réflexion et transmission des flux.

2) En déduire l'épaisseur caractéristique de pénétration de l'onde dans le milieu interdit.

3) Que devient cette épaisseur si $V_0 \rightarrow \infty$?

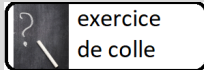
4) On fait tendre V_0 vers l'infini.

4.a) Montrer qu'il n'y a plus d'onde évanescente.

4.b) Montrer qu'il y a un déphasage de π .

4.c) φ est-elle continue ? Et sa dérivée ?

4.d) Proposer une analogie pour une onde électromagnétique.



exercice
de colle

Exercice 21.19 Analogie optique avec un flux de quanta

1) Proposer une analogie pour une onde électromagnétique qui se propage dans l'air ou dans le verre dans le cas d'un flux de particules incidentes avec une vitesse $\vec{v} = v \vec{u}_x$ venant de $x \rightarrow -\infty$ sur une marche de potentiel en $x = 0$: si $x < 0$, $V(x) = V_1$ et si $x > 0$, $V(x) = V_2$. On suppose que l'énergie cinétique des particules est $E > V_1$ et V_2 .

2) Proposer une analogie pour une onde électromagnétique qui se propage dans l'air ou dans le verre dans le cas d'un flux de particules incidentes avec une vitesse $\vec{v} = v \vec{u}_x$ venant de $x \rightarrow -\infty$ sur un puits de potentiel :
 si $x < -\frac{a}{2}$, $V(x) = V_0$;
 si $x \in [-\frac{a}{2}; +\frac{a}{2}]$, $V(x) = 0$;
 si $x > \frac{a}{2}$, $V(x) = V_0$.

On suppose que l'énergie cinétique de la particule est $E > V_0 > 0$.

3) Proposer une analogie pour une onde électromagnétique qui se propage dans l'air ou dans le verre dans le cas d'un flux de particules incidentes avec une vitesse $\vec{v} = v \vec{u}_x$ venant de $x \rightarrow -\infty$ sur un ressaut de potentiel :
 si $x < -\frac{a}{2}$, $V(x) = 0$;
 si $x \in [-\frac{a}{2}; +\frac{a}{2}]$, $V(x) = V_0$;
 si $x > \frac{a}{2}$, $V(x) = 0$.

On suppose que l'énergie cinétique de la particule est $E > V_0 > 0$.

4) On s'intéresse à un flux de particules incidentes avec une vitesse $\vec{v} = v \vec{u}_x$ venant de $x \rightarrow -\infty$ sur un puits de potentiel :
 si $x < -\frac{a}{2}$, $V(x) = 0$;
 si $x \in [-\frac{a}{2}; +\frac{a}{2}]$, $V(x) = -V_0$;
 si $x > \frac{a}{2}$, $V(x) = 0$.

On suppose que l'énergie cinétique de la particule est $E > 0 > -V_0$.

4.a) Proposer une analogie pour une onde électromagnétique qui se propage dans l'air ou dans le verre.

On admet que le coefficient de transmission du flux de particules à travers ce puits est :

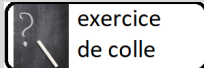
$$T = \frac{1}{1 + \left(\frac{q^2}{2kK}\right)^2 \sin^2(ka)}$$

où $k = \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar}$, $K = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ et $q = \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar}$.

4.b) En déduire le coefficient de réflexion R en flux de particules.

4.c) Montrer qu'il existe des "transparences" pour lesquelles $R = 0$. Que doit vérifier k ?

4.d) Retrouver ce résultat en utilisant l'analogie.



exercice
de colle

Exercice 21.20 La radioactivité α

1) Energie cinétique

On suppose

- le noyau de numéro atomique Z et de nombre de nucléons A
- et le noyau α (4 nucléons et une charge $q = 2e$)

initialement au repos en $r = 0$ dans le référentiel barycentrique.

A l'état final, la particule *alpha* est infiniment éloignée du noyau.

1.a) Sous quelle condition peut-on appliquer la conservation de la quantité de mouvement du système ?

Ce faisant, exprimer le rapport des énergies cinétiques finales des deux corps.

1.b) Est-ce en accord avec ce que dit le texte pour la radioactivité α du radium-226 : "la particule alpha emporte les 222/226 ièmes et le radon 4/226 ièmes" de l'énergie ou encore "les particules α emportent environ 98 % de l'énergie" ?

1.c) Pourquoi peut-on assimiler le référentiel barycentrique au référentiel du noyau ?

2) Energie potentielle

On suppose donc

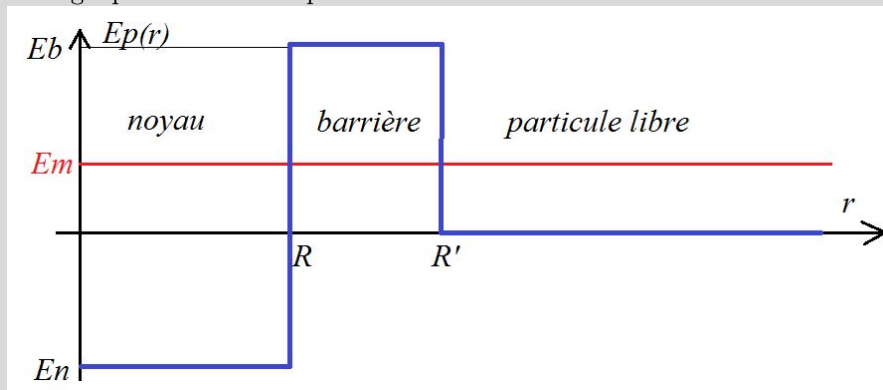
- le noyau de numéro atomique Z et de nombre de nucléons A , quasi ponctuel en $r = 0$,
- et la particule α (4 nucléons et une charge $q = 2e$) à une distance r du noyau.

2.a) Donner l'expression de l'énergie potentielle d'interaction électrostatique $E_{pe}(r)$ ressentie par la particule α en fonction de r . Quelle est la forme de la courbe $E_{pe}(r)$?

2.b) D'après le texte, à quoi est dû l'écart entre le graphe de l'énergie potentielle de la particule α et $E_{pe}(r)$? En déduire la taille du noyau du polonium 212.

3) Effet tunnel

L'énergie de la particule α est notée E_m . Pour simplifier le problème, on va modéliser les variations de l'énergie potentielle de la particule α comme suit :



3.a) Pourquoi y a-t-il une zone interdite du point de vue classique pour la particule α ? Du point de vue quantique, à quel type d'onde peut-on assimiler la particule α dans cette "zone interdite" ?

3.b) Exprimer la vitesse v_n de la particule α dans le noyau en fonction de sa masse m , de E_m et de E_n . La particule α fait donc des allers et retours dans le noyau. A quelle fréquence f rebondit-elle sur les bords du noyau ?

3.c) On note p la probabilité de passage de la particule α par effet tunnel à travers la barrière de potentiel. En déduire la période radioactive T qu'il faut attendre en moyenne avant que la particule α ne sorte du noyau.

3.d) On admet que la probabilité de passage p de la particule α par effet tunnel est proportionnelle à $e^{-2K(R'-R)}$ où $K = \sqrt{\frac{(E_b - E_m)}{\hbar^2}}$. Représenter sur un graphique $\ln(T) = f(\ln(E_m))$ (en échelles logarithmiques) les valeurs des périodes radioactives T en fonction des énergies E_m des particules α données dans le document. En déduire que le facteur exponentiel de p fait varier de façon considérable les périodes.

exercice de colle

Exercice 21.21
Etude de l'effet tunnel

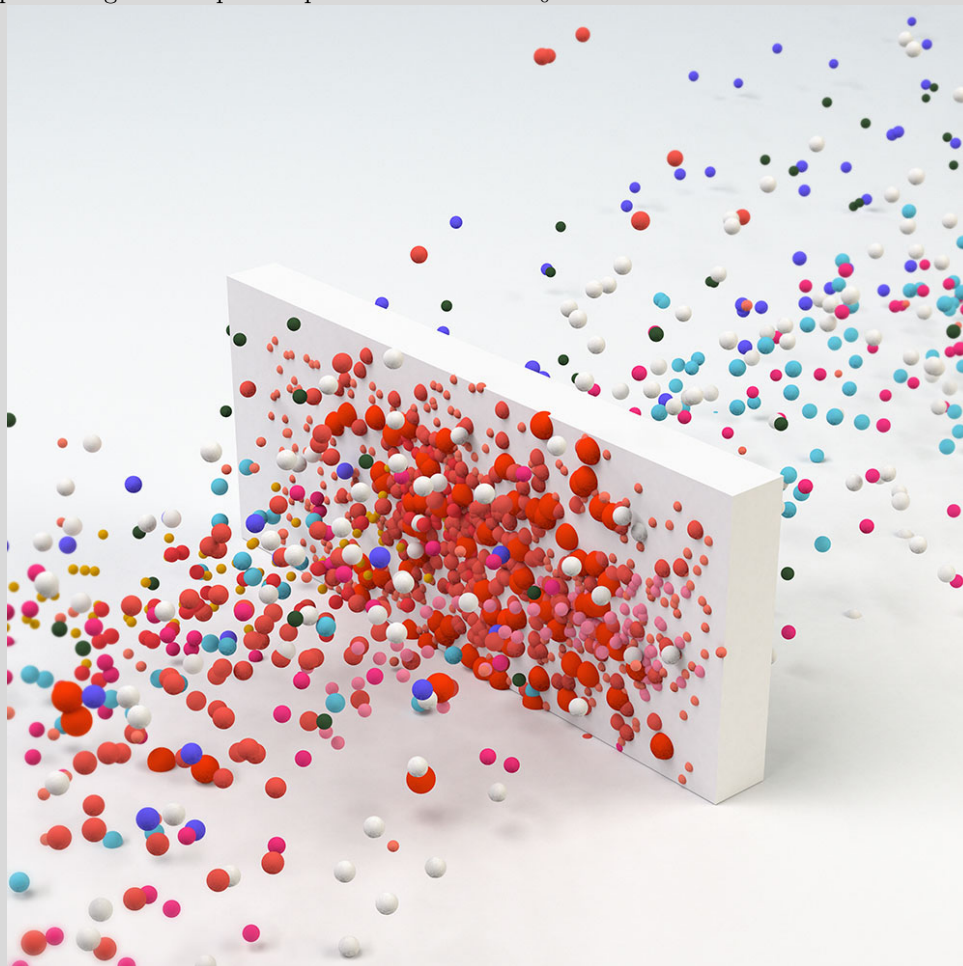
On s'intéresse à un flux de particules incidentes avec une vitesse $\vec{v} = v\vec{u}_x$ venant de $x \rightarrow -\infty$ sur une barrière de potentiel entre $x = 0$ et $x = \ell$:

si $x < 0$, $V(x) = 0$;

si $x \in [0; \ell]$, $V(x) = V_0 > 0$;

et si $x > \ell$, $V(x) = 0$.

On suppose que l'énergie cinétique des particules est $E < V_0$.



1) Déterminer la forme des fonctions d'onde $\tilde{\psi}(x, t) = \varphi(x) e^{-i \frac{E}{\hbar} t}$ des états stationnaires dans chacun des trois domaines.

2) Écrire les conditions de continuité de la fonction $\varphi(x)$ et de sa dérivée $\frac{d\varphi}{dx}$.

3) En déduire les coefficient de transmission \tilde{t} et de réflexion \tilde{r} en amplitude pour la fonction d'onde :

$$\tilde{t} = \frac{2 k_2 k e^{-i k \ell}}{-i (k^2 + k_2^2) \sin(k_2 \ell) + 2 k k_2 \cos(k_2 \ell)} \text{ et } \tilde{r} = \frac{-i (k^2 - k_2^2) \sin(k_2 \ell)}{-i (k^2 + k_2^2) \sin(k_2 \ell) + 2 k k_2 \cos(k_2 \ell)}$$

avec $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ et $k_2 = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$.

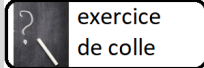
4) Associer un courant de probabilité $\vec{J} = |\tilde{\psi}(x, t)|^2 \frac{\hbar \vec{k}}{m}$ aux flux incident, réfléchi et transmis pour déterminer les coefficients R et T de réflexion et transmission des flux.

5) Vérifier qu'on a bien $R + T = 1$.

6) Comparer avec le cas classique.

7) Que devient T dans le cas où $\rho \ell \gg 1$?

8) Dans quel cas retrouve-t-on le cas classique ?



exercice
de colle

Exercice 21.22

Etude du premier état stationnaire du double puits infini

On s'intéresse à un double puits infini, chaque puits étant de largeur a , les deux puits étant éloignés de D . Le potentiel $V(x)$ est défini par :

- si $x \in [-a - \frac{D}{2}; -\frac{D}{2}]$, $V(x) = 0$;
- si $x \in [\frac{D}{2}; \frac{D}{2} + a]$, $V(x) = 0$;
- $V(x)$ infini sinon.

1) On s'intéresse aux états stationnaires $\varphi_G(x)$ et $\varphi_D(x)$ de plus basse énergie E de chacun des puits.

1.a) Déterminer leur forme.

1.b) En utilisant la condition de normalisation déterminer leur facteur de normalisation.

1.c) Quelle est leur énergie ?

2) On en déduit qu'il existe pour le double puits deux fonctions d'onde :

une fonction symétrique : $\tilde{\psi}_S(x, t) = \frac{e^{-i\frac{E}{\hbar}t}}{\sqrt{2}} (\varphi_D(x) + \varphi_G(x))$;

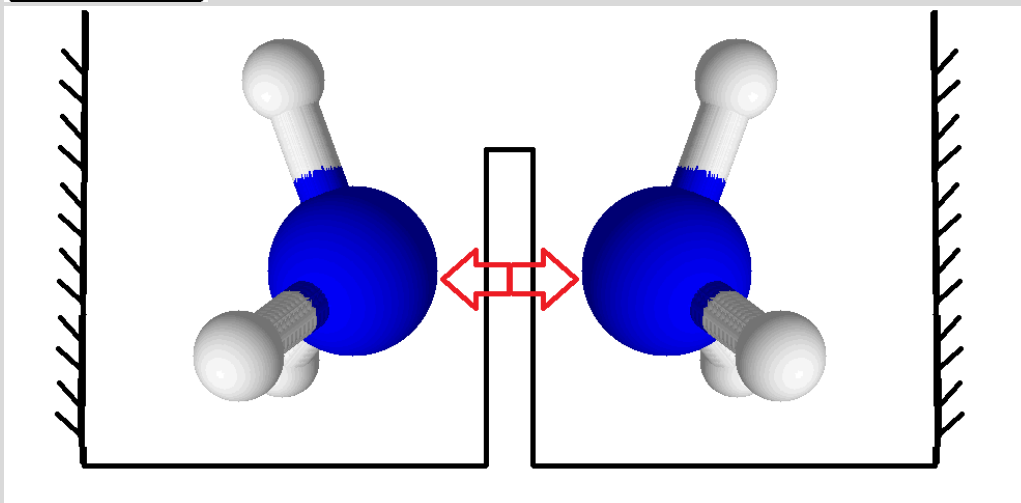
et une fonction anti symétrique : $\tilde{\psi}_A(x, t) = \frac{e^{-i\frac{E}{\hbar}t}}{\sqrt{2}} (\varphi_D(x) - \varphi_G(x))$.

2.a) Y a-t-il possibilité de passage d'un puits à l'autre ?

2.b) Pourquoi dit-on qu'il y a dégénérescence ?

exercice de colle

Exercice 21.23
Modélisation quantique de l'ammoniac



On s'intéresse à un double puits fini symétrique, chaque puits étant de largeur a , les deux puits étant éloignés de D . Le potentiel $V(x)$ est défini par :

- si $x \in [-a - \frac{D}{2}; -\frac{D}{2}]$, $V(x) = 0$;
- si $x \in [-\frac{D}{2}; +\frac{D}{2}]$, $V(x) = V_0$;
- si $x \in [\frac{D}{2}; \frac{D}{2} + a]$, $V(x) = 0$;
- $V(x)$ infini sinon.

1) Etats stationnaires de l'ammoniac

On s'intéresse aux états stationnaires antisymétrique $\varphi_a(x)$ et symétrique $\varphi_s(x)$ de plus basse énergie E ($E < V_0$).

1.a) Donner la forme de $\varphi_a(x)$ et $\varphi_s(x)$ si $x \in [-\frac{D}{2}; +\frac{D}{2}]$.

1.b) Que doivent vérifier $\varphi_a(x)$ et $\varphi_s(x)$ là où le potentiel devient infini ? En déduire la forme de $\varphi_s(x)$ si $x \in [\frac{D}{2}; \frac{D}{2} + a]$.

1.c) En utilisant la parité de $\varphi_s(x)$ donner sa forme dans chacun des domaines.

1.d) En utilisant le fait que $\varphi_a(x)$ est impaire, donner sa forme dans chacun des domaines.

2) Interprétation

Expliquer pourquoi le double puits fini se caractérise par :

2.a) la possibilité du passage d'un puits à l'autre par effet tunnel,

2.b) un abaissement de l'énergie,

2.c) une levée de dégénérescence (les deux états symétrique et anti-symétrique ayant des énergies différentes E_s et E_a).

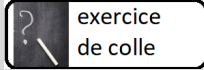
3) Laser à ammoniac

On superpose ces deux états grâce aux fonctions $\tilde{\psi}_+ = A \left(\varphi_s(x) e^{-i\frac{E_s}{\hbar}t} + \varphi_a(x) e^{-i\frac{E_a}{\hbar}t} \right)$

et $\tilde{\psi}_- = B \left(\varphi_s(x) e^{-i\frac{E_s}{\hbar}t} - \varphi_a(x) e^{-i\frac{E_a}{\hbar}t} \right)$.

3.a) Expliciter les densités de probabilités dans le cas des deux superpositions.

3.b) Montrer que les densités de probabilités oscillent avec une pulsation Ω qu'on déterminera.

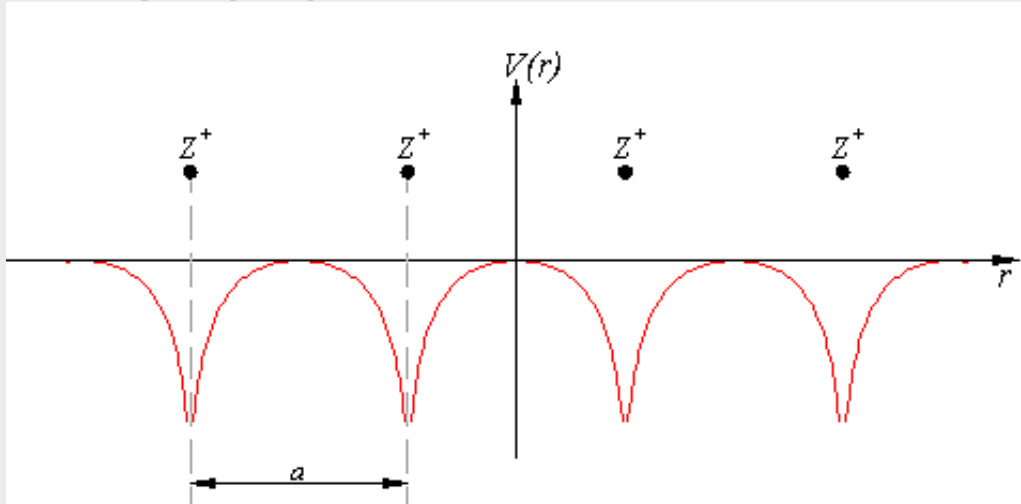


exercice
de colle

Exercice 21.24 Électron dans un solide cristallin

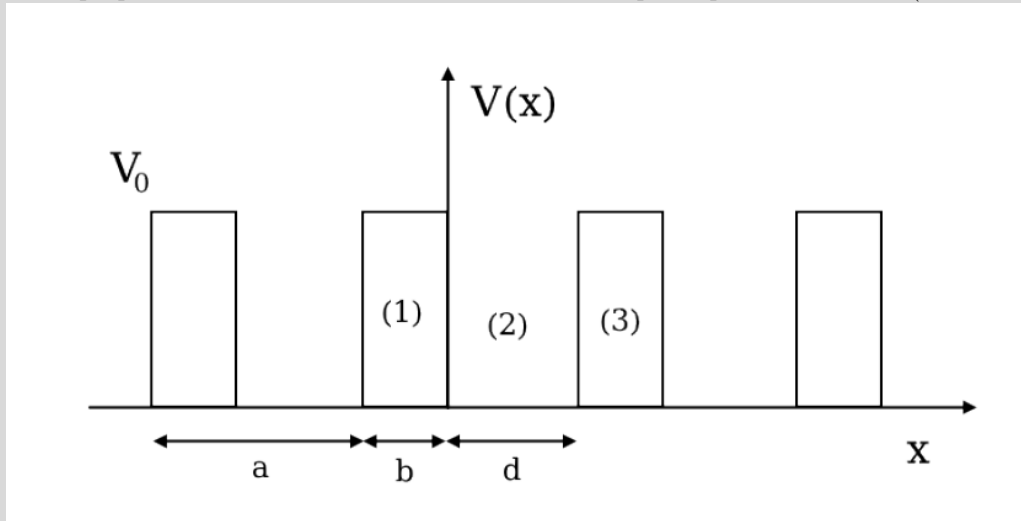
En mécanique quantique, la particule dans réseau à une dimension est un problème apparaissant dans le modèle du réseau cristallin périodique. L'exemple-type de ce problème est le comportement des électrons dans un réseau cristallin périodique (métal, semi-conducteur ou isolant) qui subissent un potentiel régulier périodique provoqué par les ions formant la structure cristalline, et donc disposés de façon régulière. C'est une extension du modèle de l'électron libre, dans lequel on suppose que le potentiel est nul dans le réseau.

Dans ce problème, on étudie les matériaux solides et en particulier les cristaux présentant un réseau cristallin périodique. Pour simplifier le problème, on se place dans un réseau à une dimension constitué par les cations du matériau, régulièrement espacés d'une distance a , paramètre du réseau. Le potentiel du réseau ressemble donc à une fonction périodique de période a :



https://fr.wikipedia.org/wiki/Particule_dans_r%C3%A9seau_%C3%A0_une_dimension.

On se propose de modéliser un électron dans un solide par le potentiel suivant (modèle de Krönig- Penney) :



où a , b et d sont des constantes positives.

- 1) Déterminer les énergies $E > V_0$ possibles pour des ondes stationnaires.
- 2) Montrer que pour que ces niveaux d'énergie existent, on doit avoir $\gamma \neq 0[\pi]$ tel que $\cos \gamma = f(E)$ (on donnera l'expression de la fonction f).