

Corrigé du T.D. Q2

Spé MP¹

Corr. 1 Diffusion quantique par un puits de potentiel

1. En mécanique classique et dans les régions I et III, la particule a une énergie cinétique égale à $E = \frac{1}{2}mv_0^2$ et son mouvement est rectiligne uniforme, à la vitesse v_0 . Dans la région II, l'énergie potentielle de la particule est $-V_0$. La conservation de l'énergie donne : $E = E_{c,II} - V_0$, ce qui donne $E_{c,II} = E + V_0 = \frac{1}{2}mv_0^2$. La particule a donc une énergie supérieure dans la zone II et une vitesse plus grande, égale à $v_{II} = \sqrt{v_0^2 + \frac{2V_0}{m}} = Cte$. Le mouvement de la particule est toujours rectiligne et uniforme.

2.a. Dans la région I, la fonction d'onde proposée fait apparaître une onde incidente et une onde réfléchie. Dans la région III, l'écriture proposée correspond à une onde transmise. Dans les régions I et III, la fonction d'onde propre $\varphi(x)$ vérifie l'équation différentielle $\frac{d^2\varphi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\varphi(x) = 0$. Les fonctions $\exp(\pm ikx)$ avec $k > 0$ sont solutions de cette équation si

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

2.b. Dans la région II, la fonction d'onde propre vérifie l'équation différentielle $\frac{d^2\varphi}{dx^2} + \frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}\varphi(x) = 0$, soit $\frac{d^2\varphi}{dx^2} + q^2\varphi(x) = 0$. On peut par conséquent écrire la solution sous la forme $\varphi(x) = A\exp(ikx) + B\exp(-ikx)$.

3. En $x = 0$ et en $x = d$, on doit écrire la **continuité de la fonction d'onde propre et de sa dérivée première** car le potentiel y présente des discontinuités d'amplitude finie. Cela se traduit par les relations suivantes

$$1+r = A+B \quad (1)$$

$$k(1-r) = q(A-B) \quad (2)$$

$$t\exp(ikd) = A\exp(ikd) + B\exp(-ikd) \quad (3)$$

$$kt\exp(ikd) = q[A\exp(ikd) - B\exp(-ikd)] \quad (4)$$

4. Une particule incidente est soit réfléchie soit transmise, sans autre possibilité, ce qui se traduit par la relation

$$|r|^2 + |t|^2 = 1 \quad \text{ou} \quad r^2 + t^2 = 1 \quad (\text{car ici } r, t \in \mathbb{R})$$

5. Dans le cas où $E \rightarrow 0$, on a $k \rightarrow 0$ et l'équation (2) impose $B = A$. L'équation (4) se réécrit alors $2iAq\sin(qd) = 0$. Or $q \neq 0$ et on suppose $\sin(qd) \neq 0$, donc $A = B = 0$ et (1) donne finalement $|r| = 1$. Dans cette situation, la probabilité de réflexion $R = |r|^2$ tend vers 1. C'est un effet **purement quantique**, sans équivalent classique.

6. Supposons cette fois que $\sin(qd) = 0$, i.e. que $qd = n\pi$ avec $n \in \mathbb{Z}$ et $\exp(ikd) = \exp(-ikd) = (-1)^n$. Les équations (1) à (4) se réécrivent alors

$$A+B = 1+r = (-1)^n t \exp(ikd) \quad (5)$$

$$q(A-B) = k(1-r) = (-1)^n kt \exp(ikd) \quad (6)$$

Comme $k \neq 0$ puisque $E \neq 0$, ces équations se combinent facilement pour donner $|r| = 0$.

7.a. La condition $qd = n\pi$ de la question 6 s'écrit $\frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar}d = n\pi$, soit, en utilisant les variables adimensionnées $V_0/E_R = (n/2)^2 - (v/v_R)^2$. Ces paraboles, qui

décrivent les conditions de transmission totale $R = 0$, sont bien vues en noir sur la figure (on peut en particulier vérifier les valeurs $(n/2)^2 = 1/4, 1, 9/4, 4, \dots$ d'intersection avec l'axe des ordonnées, et les valeurs $n/2 = 1/2, 1, 3/2, 2, \dots$ d'intersection avec l'axe des abscisses).

Sur l'axe des ordonnées $v \rightarrow 0$, i.e. $E \rightarrow 0$, on voit que les couleurs est blanche ($R = 1$) en dehors des courbes de transmission totale

7.b. À grande vitesse, l'énergie E devient très supérieure à V_0 et les effets quantiques sont progressivement gommés. On retrouve le comportement classique correspondant à $T \rightarrow 1$.

7.c. En lisant la figure, on constate que les particules de vitesse approximativement comprise entre $0,2v_R$ et $0,5v_R$ sont plus probablement réfléchies alors que les particules de vitesse comprise entre $0,5v_R$ et $0,8v_R$ sont plus probablement transmises. Ainsi les particules transmises sont celles de plus grande vitesse, et on a bien un filtre passe-haut de vitesse.

7.d. Pour obtenir un filtre passe-bas de vitesse, il suffit de régler la profondeur du puits de potentiel à $V_0 = E_R$.

7.e. Ordres de grandeur : avec les valeurs proposées, on trouve

$$v_R = 6,93 \text{ mm.s}^{-1}, \quad E_R = 3,48 \cdot 10^{-30} \text{ J}, \quad T_R = 0,252 \mu\text{K}$$

Afin de réaliser de telles expériences, il est nécessaire de ralentir au préalable considérablement les atomes de rubidium.

Corr. 2 Évolution d'une particule quantique dans un potentiel inconnu

La figure fait apparaître trois régions, notées I ($x \leq -a/2$), II ($-a/2 \leq x \leq a/2$) et III ($x \geq a/2$).

1. La probabilité de présence s'étend de $-\infty$ à $+\infty$: la particule est donc dans un état de **diffusion**.

2. Les oscillations de la densité de probabilité de présence dans la région I correspondent à des interférences quantiques qui résultent de la superposition de l'onde incidente et de l'onde réfléchie. Ce comportement n'existe pas en mécanique classique.

3. Dans chacune des régions, l'équation de SCHRÖDINGER indépendante du temps s'écrit $\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi}{dx^2} + (E-V)\varphi(x) = 0$, où E est l'énergie de la particule et V la valeur de l'énergie potentielle dans la région considérée. Dans le cas où $E > V$, on peut définir $k = \frac{\sqrt{2m(E-V)}}{\hbar}$.

Dans la région I, la période spatiale des interférences quantiques, à savoir $\lambda/2 = \pi/k$, est invariable ($\varphi(x)$ oscille avec une période spatiale λ , donc $|\varphi(x)|^2$ oscille avec la période moitié). Comme E est fixée, on en déduit que V est uniforme et égal à sa valeur en $-\infty$, qui est nulle d'après l'énoncé.

Dans la région II, les oscillations sont caractérisées par une période spatiale plus faible. Cela correspond à une augmentation de k et donc à une diminution de l'énergie potentielle. L'énergie potentielle de la particule est donc négative dans la région II. Notons $-V_0$ cette valeur (avec $V_0 > 0$).

Dans la région III, la probabilité de présence est uniforme. C'est celle d'une onde plane progressive. L'énergie potentielle de la particule est donc uniforme pour et égale à sa valeur en $+\infty$, qui est nulle selon l'énoncé.

La situation étudiée correspond donc à la diffusion de particules quantiques par un puits de potentiel fini, de profondeur V_0 .

Remarque : si la figure de l'énoncé était graduée en abscisse, on pourrait évaluer la profondeur du puits, en comparant les valeurs de k dans les régions I et II. À partir de $k_I^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ et

de $k_{II}^2 = \frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}$, on obtient $V_0 = \frac{\hbar^2}{2m}(k_{II}^2 - k_I^2)$. Il resterait simplement à mesurer les valeurs des longueurs d'onde et à connaître la valeur de m pour remonter à V_0 .

Remarque : Dans le cas général, la seule connaissance de la densité de probabilité de présence ne permet pas de déterminer complètement l'énergie potentielle, mais ici l'énoncé donne des informations supplémentaires.

4. Pour la fonction d'onde propre, on peut proposer les expressions suivantes

Région I : $\varphi_I(x) = A_1 \exp(ik_I x) + B_1 \exp(-ik_I x)$

Région II : $\varphi_{II}(x) = A_2 \exp(ik_{II} x) + B_2 \exp(-ik_{II} x)$

Région III : $\varphi_{III}(x) = A_3 \exp(ik_{III} x)$

$$\text{où } k_I = k_{III} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \text{ et } k_{II} = \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar}.$$

En $x = \pm a/2$, on doit assurer la continuité de la fonction d'onde propre, ainsi que la continuité de sa dérivée première puisque les discontinuités d'énergie potentielle sont d'amplitude finie.

Corr. 3 Courant tunnel

1. Dans la barrière, l'équation de SCHRÖDINGER indépendante du temps s'écrit $\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi}{dx^2} + (V_0 - E)\varphi(x) = 0$. Les solutions sont donc exponentielles, avec une distance caractéristique $\delta = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}$ qui est la distance de pénétration dans la barrière. Ainsi, $d/\delta \approx 5$ et on peut considérer que la barrière est épaisse.

2. L'expression de la probabilité de transmission pour une barrière épaisse a été vue en cours. On trouve

$$T \approx \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} \exp\left(-\frac{2d}{\delta}\right) \approx 1,4 \cdot 10^{-4}$$

L'intensité du courant transmis vaut par conséquent

$$I_{\text{transmis}} = TI = 14 \text{ nA}$$

3. Remplacer les électrons par des protons revient à modifier la masse dans l'expression de la distance de pénétration. On trouve cette fois :

$$d/\delta = 219, \quad T \approx 2 \cdot 10^{-190} \quad \text{et} \quad I_{\text{transmis}} \approx 2 \cdot 10^{-194} \text{ A}$$

Le courant transmis est si faible qu'on peut le considérer comme nul.

Corr. 4 Barrière de potentiel

1. Une particule classique d'énergie $E > V_0$ est en mouvement rectiligne uniforme dans chacune des trois régions. Lorsqu'elle passe dans la région II, son énergie cinétique est diminuée. Elle retrouve son énergie cinétique initiale quand elle passe dans la région III.

2. L'équation de SCHRÖDINGER indépendante du temps s'écrit

Régions I et III : $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi}{dx^2} = E\varphi(x)$

Région II : $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi}{dx^2} = (E - V_0)\varphi(x)$

3. Pour la fonction d'onde propre, on peut proposer les expressions suivantes en l'absence de sources de particules dans la région III

Région I : $\varphi_I(x) = A_1 \exp(ik_I x) + B_1 \exp(-ik_I x)$

Région II : $\varphi_{II}(x) = A_2 \exp(ik_{II} x) + B_2 \exp(-ik_{II} x)$

Région III : $\varphi_{III}(x) = A_3 \exp(ik_{III} x)$

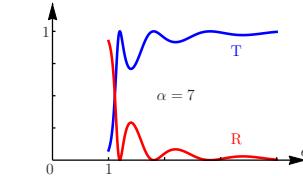
$$\text{où } k_I = k_{III} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \text{ et } k_{II} = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}.$$

En $x = \pm a/2$, on doit assurer la continuité de la fonction d'onde propre et de sa dérivée première, puisque les discontinuités d'énergie potentielle sont d'amplitude finie.

4.a. Une particule quantique étant soit réfléchie soit transmise par la barrière, $R + T = 1$. En posant pour simplifier $T = \frac{1}{1+\tau}$, avec $\tau = \frac{1}{4e(e-1)}$ sin²($\alpha\sqrt{e-1}$), où $e = E/V_0$ et $\alpha = a\sqrt{2mV_0}/\hbar$, on trouve

$$R = \frac{\tau}{1+\tau}$$

4.b. Les allures de R et T sont données sur la figure ci-dessous pour $\alpha = 7$.



On constate que contrairement à ce que prévoient les lois de la mécanique classique, la probabilité de transmission de la particule n'est pas identiquement égale à 1. De même, l'existence d'une probabilité de réflexion non nulle est un effet purement quantique. On constate néanmoins qu'il existe des valeurs discrètes de l'énergie pour lesquelles on a $T = 1$ et $R = 0$. Lorsque l'énergie des particules quantiques devient élevée, les effets quantiques sont gommés : les probabilités de réflexion et de transmission tendent vers leurs valeurs classiques respectives.

5. Pour $E \neq V_0$, la transmission est totale lorsque $T = 1$, ce qui est réalisé lorsque $\tau = 0$, i.e. $\sin(\alpha\sqrt{e-1}) = 0$, i.e. $\alpha\sqrt{e-1} = n\pi$ avec $n \in \mathbb{Z}$, soit pour $a = n\sqrt{2m(E-V_0)}/\hbar$.

Or la longueur de DE BROGLIE des électrons dans la barrière vaut $\lambda = \frac{2\pi}{k_{II}} = \frac{h}{\sqrt{2m(E-V_0)}}$. On peut donc écrire la condition de transmission totale sous la forme $a = n\frac{\lambda}{2}$, qui n'est

rien d'autre qu'une condition de résonance d'une cavité résonante (cf électromagnétisme et optique) ! L'application numérique donne

$$\lambda = 0,5 \text{ nm} \quad \text{et} \quad a = 0,25n \text{ nm}$$

Corr. 5 Du puits de profondeur infini au puits de profondeur finie

1. On rappelle que pour le puits infini de largeur a l'énergie du niveau n s'écrit $E_n = n^2 E_1$ avec $E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$. Sous forme adimensionnée, avec $e_n = \frac{ma^2}{\hbar^2}$, ceci se réécrit $e_n = n^2 e_1$ avec $e_1 = \frac{\pi^2}{2}$. Le tableau ci-dessous donne les valeurs numériques demandées.

n	1	2	3
e_n	4,935	19,74	44,41

2. On peut mettre δ_n sous la forme suivante, en remplaçant V_0 par l'expression donnée dans l'énoncé et E_n par son expression en fonction de e_n , et on trouve

$$\delta_n = \frac{1}{a\sqrt{2(32-e_n)}}$$

Le tableau ci-dessous donne les valeurs de δ_n/a pour les deux premiers niveaux

n	1	2
δ_n/a	0,1359	0,2019

3. On commence par calculer les nouvelles largeurs, à savoir $a'_n = a + 2\delta_n$ pour $n = 1$ et 2, puis on en déduit les nouvelles valeurs des énergies $E'_n = n^2 \frac{\pi^2 h^2}{2m a'^n_0}$ soit $e'_n = n^2 \frac{\pi^2}{2(1+2\delta_n/a)^2}$. Les résultats sont présentés dans le tableau ci-dessous.

n	1	2
a'_n/a	1,272	1,404
e'_n	3,051	10,02

4.a. On réalise maintenant une seconde itération en utilisant la distance δ'_n qui est définie par

$$\frac{\delta'_n}{a} = \frac{1}{\sqrt{2(32 - e'_n)}}$$

On en déduit ensuite une nouvelle estimation de la largeur effective du puits $a''_n = a + 2\delta'_n$, ce qui permet finalement d'affiner la valeur de l'énergie $e''_n = n^2 \frac{\pi^2}{2(1+2\delta'_n/a)^2}$. Le tableau suivant regroupe les résultats numériques obtenus pour cette seconde itération.

n	1	2
δ''_n/a	0,1314	0,1508
a''_n/a	1,263	1,302
e''_n	3,094	11,65

5. Le processus est inopérant pour $n = 3$, car la valeur de l'énergie E_3 , obtenue à partir du modèle de puits infini, est supérieure à la profondeur du puits ($e_3 = 44,41 > 32$).

6. On peut utiliser Python pour faire le calcul numérique des valeurs approchées des niveaux d'énergie. Le code suivant fournit les valeurs approchées des deux premiers niveaux d'énergie après une dizaine d'itérations.

```
import numpy as np
e = 0.5 * np.pi ** 2 * np.arange(1, 3) ** 2
a = np.ones(2)

for iter in range(10):
    delta = 1 / np.sqrt(2 * (32 * np.ones(2) - e))
    a = np.ones(2) + 2 * delta
    e = np.pi ** 2 * 0.5 * np.arange(1, 3) ** 2 / (a ** 2)
```

Les résultats convergés sont $e_1 = 3,093$ et $e_2 = 11,47$.

Remarque : En fait, on peut calculer les deux premiers niveaux de manière exacte, et on trouve, pour la valeur de V_0 de l'énoncé, $e_1 = 3,137$ et $e_2 = 12,25$. La méthode proposée dans cet exercice n'est donc qu'approchée, malgré son caractère itératif. Il n'y a effectivement aucune raison que la largeur du puits de potentiel infini « effectif » soit prise égale à $a + 2\delta$. Il n'existe même pas de largeur effective d'un tel puits qui donne les résultats exacts pour les deux niveaux simultanément. Enfin, notons que pour la valeur de V_0 proposée dans l'énoncé, le système n'admet, de manière exacte, que deux états liés, tous les autres étant des états de diffusion.