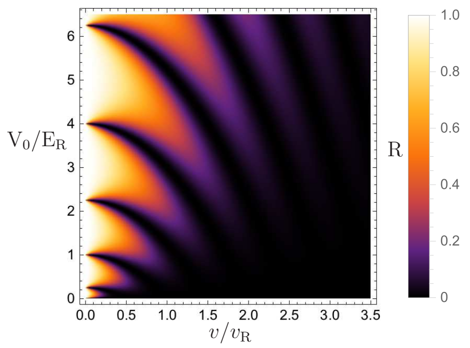
T.D. Q_2 : Particule dans un potentiel constant par morceaux

Exercice 1 Diffusion quantique par un puits de potentiel

On étudie la diffusion d'une onde de matière sur un puits de potentiel de profondeur finie. Le puits de potentiel considéré vaut ($V_0 > 0$)

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{pour} \quad x < 0 \quad \text{(région I)}, \\ -V_0 & \text{pour} \quad 0 \leqslant x \leqslant d \quad \text{(région II)}, \\ 0 & \text{pour} \quad x > d \quad \text{(région III)}. \end{cases}$$

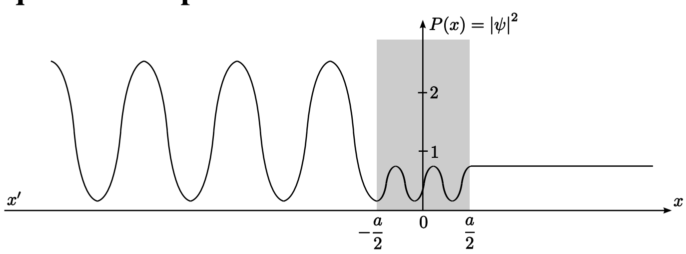
1. On commence par envisager le cas d'une particule classique d'énergie $E = \frac{1}{2}mv_0^2 > 0$ se déplaçant dans le sens des x croissants (de $x \to -\infty$ vers $x \to +\infty$). Décrire le mouvement de cette particule dans chacune des trois régions (on donnera en particulier la vitesse de déplacement de la particule classique dans chacune des trois régions).
2. On souhaite maintenant déterminer les états stationnaires d'une particule quantique, d'énergie $E > 0$, soumise à l'énergie potentielle $V(x)$. On pose $\hbar q = \sqrt{2m(E+V_0)}$.
   a. Dans la région I, la fonction d'onde se met sous la forme $\psi(x<0,t) = \left[\exp(ikx) + r\exp(-ikx)\right]\exp(-iEt/\hbar)$. Dans la région III, on écrit $\psi(x>d,t) = t\exp(ikx)\exp(-iEt/\hbar)$. On admet que les constantes r et t sont réelles. La constante k est un réel positif. Interpréter l'écriture proposée pour la fonction d'onde dans les régions I et III. Établir la relation liant la constante k à l'énergie E.
   b. Exprimer la fonction d'onde dans la région II en faisant intervenir q.
3. Écrire les relations de raccordement en $x = 0$ et en $x = d$.
4. Sans calcul, donner la relation liant $|r|^2$ et $|t|^2$. Quel est son sens physique ?
5. Montrer que dans la limite où $E \to 0$, on a $r \to -1$ si on suppose $\sin(qd) \neq 0$. Ce résultat a-t-il un équivalent en mécanique classique ou est-il de nature purement quantique ?
6. Que vaut r lorsque $\sin(qd) = 0$ et que E est non nulle ?
7. La figure ci-contre représente la probabilité de réflexion R en fonction de la vitesse v de la particule et de la profondeur V_0 du puits de potentiel. L'échelle spatiale caractéristique d permet de construire deux grandeurs $v_R = \frac{h}{md}$, homogène à une vitesse, et $E_R = \frac{1}{2}mv_R^2$, homogène à une énergie, qui permettent d'utiliser des variables sans dimensions $\frac{v}{v_R}$ et $\frac{V_0}{E_R}$. La couleur blanche correspond à une réflexion totale (R = 1) et la couleur noire correspond à une transmission totale (T = 1).



   a. Contrôler que les valeurs de R sur le graphe correspondent aux analyses effectuées aux questions 5 et 6.
   b. Interpréter la transmission totale à « grande » vitesse.
   c. On considère un faisceau incident de particules, dont les vitesses se distribuent entre $0{,}2v_R$ et $0{,}8v_R$, avec une vitesse moyenne $v = \frac{v_R}{2}$. La profondeur du puits est ajustée à $V_0 = 2E_R$. Décrire la distribution des vitesses des particules transmises. Cette configuration réalise un filtre passe-haut de vitesse.
   d. Comment peut-on choisir la profondeur du puits de potentiel pour réaliser un filtre passe-bas avec la même distribution initiale des vitesses ?
   e. Ordres de grandeur : ces filtres sélectifs de vitesse ont été développés par l'équipe de D. Guéry-Odelin, à l'Université Paul Sabatier de Toulouse. Ce sont des atomes de rubidium qui sont utilisés, de masse $m = 1{,}45.10^{-25}\,\text{kg}$, sur un réseau de puits de potentiel de largeur $d = 660\,\text{nm}$. Donner la valeur numérique de v_R, de E_R et de $T_R = \frac{E_R}{k_B}$ (la constante $k_B = 1{,}38.10^{-23}\,\text{J.K}^{-1}$ est la constante de BOLTZMANN).

Exercice 2 Évolution d'une particule quantique dans un potentiel inconnu

Un faisceau de particules quantiques incidentes, de masse m et d'énergie E, provient de $x \to -\infty$. Chaque particule est astreinte à se déplacer le long de l'axe $(x'Ox)$. Elle est soumise à un champ de force qui dérive de l'énergie potentielle $V(x)$. On admet que cette énergie s'annule quand x tend vers $\pm\infty$. Sur le graphe de la figure ci-contre est représentée la densité de probabilité de présence $P(x)$ d'une particule quantique. Les oscillations qui apparaissent sont sinusoïdales.



1. L'état de chaque particule quantique est-il un état « lié » ou un état de « diffusion » ?
2. Quelle interprétation peut-on donner aux oscillations de la densité de probabilité de présence pour $x \leqslant 0$? Le même comportement est-il observable en mécanique classique ?
3. L'énergie potentielle $V(x)$ de la particule est constante par morceaux. Déterminer son allure possible en fonction de x.
4. La fonction d'onde associée à cet état stationnaire est notée $\psi(x,t) = \varphi(x)\exp(-iEt/\hbar)$. Dans la mesure du possible, proposer une expression de $\varphi(x)$ pour chacune des trois régions $x \leqslant -a/2$, $-a/2 \leqslant x \leqslant a/2$ et $x \geqslant a/2$. Donner les conditions de raccordement qui doivent être vérifiées en $\pm a/2$.

Exercice 3 Courant tunnel

Un faisceau d'électrons, correspondant à courant d'intensité $I = 0{,}1\,mA$, est envoyé sur une barrière de potentiel de largeur $d = 1{,}0\,nm$ et de hauteur $V_0 = 2{,}0\,eV$. L'énergie cinétique d'un électron incident est $E = 1{,}0\,eV$.

1. Peut-on se placer dans l'approximation d'une barrière épaisse ?
2. Estimer l'intensité du courant tunnel qui émerge de l'autre côté de la barrière.
3. Toutes choses égales par ailleurs, on remplace les électrons par des protons. Déterminer la nouvelle valeur de l'intensité du courant tunnel qui émerge de l'autre côté de la barrière.

Exercice 4 Barrière de potentiel

On cherche à déterminer certains états stationnaires d'une particule quantique de masse m évoluant dans le potentiel suivant (barrière de potentiel) :

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{pour} \quad x < -\dfrac{a}{2} \quad \text{(région I)}, \\ V_0 > 0 & \text{pour} \quad -\dfrac{a}{2} \leqslant x \leqslant \dfrac{a}{2} \quad \text{(région II)}, \\ 0 & \text{pour} \quad x > \dfrac{a}{2} \quad \text{(région III)}. \end{cases}$$

On se limite au cas où $E > V_0$. On pose $k = \dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ et $K = \dfrac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$.

1. Décrire qualitativement le mouvement de la particule dans le cas où il peut être décrit dans le cadre de la mécanique classique.
2. Dans le cadre d'une description quantique, l'état de la particule est décrit par la fonction d'onde $\psi(x,t) = \varphi(x)\exp(-iEt/\hbar)$. Établir l'équation différentielle vérifiée par $\varphi(x)$ dans chacune des trois régions.
3. En l'absence de source de particules quantiques du côté $x > a/2$, proposer une forme adéquate de $\varphi(x)$ dans chacune des trois régions. Préciser les conditions aux limites et les conditions de raccordement qui doivent être vérifiées par $\varphi(x)$.
4. Les conditions de raccordement permettent de déduire les expressions des probabilités de transmission T au-delà de la barrière, et de réflexion R par la barrière. On donne : $T = \dfrac{1}{1 + \dfrac{V_0^2}{4E(E-V_0)}\sin^2\left(\dfrac{a\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}\right)}$.
   a. Déterminer l'expression de R à partir de celle de T.
   b. Représenter l'allure de T et de R en fonction de E pour $E > V_0$. Commenter.
5. Des électrons d'énergie cinétique égale à $10\,eV$ s'approchent d'une barrière de potentiel de $4\,eV$ de haut. Déterminer les épaisseurs de la barrière pour laquelle la transmission du faisceau électronique est totale. Comparer, dans cette situation, l'épaisseur de la barrière à la longueur d'onde de DE BROGLIE des électrons dans la barrière.

Exercice 5 Du puits de profondeur infinie au puits de profondeur finie

Considérons un puits de potentiel infini, compris entre $-a/2$ et $a/2$. Les niveaux d'énergie successifs d'une particule quantique de masse m piégée dans ce puits sont notés E_n où $n \in \mathbb{N}^*$. On se propose dans cet exercice d'utiliser la distance caractéristique δ d'atténuation de l'amplitude de la fonction d'onde dans une région interdite par la mécanique classique, pour modifier l'énergie E_n de façon à reproduire l'extension de la fonction d'onde au-delà de $\pm a/2$ lorsque le puits de potentiel devient de hauteur finie V_0. Cette modification va se faire de manière itérative.

Pour simplifier les calculs, on exprimera toutes les valeurs de l'énergie en unités de $\dfrac{\hbar^2}{ma^2}$, c'est-à-dire qu'on exprimera les valeurs de l'énergie E en donnant la valeur numérique de $\dfrac{ma^2}{\hbar^2}E$.

1. Donner les valeurs numériques de E_1, E_2 et E_3.
2. Pour mettre en place le processus d'itération, on pose $\delta_n = \dfrac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E_n)}}$. Calculer δ_1 et δ_2 en fonction de a pour $V_0 = 32\dfrac{\hbar^2}{ma^2}$.
3. Pour traduire la délocalisation de la fonction d'onde, on élargit le puits de potentiel infini en utilisant une largeur effective $a'_n = a + 2\delta_n$. Calculer les nouvelles valeurs numériques de l'énergie E'_1 et E'_2.
4. On propose d'effectuer une seconde itération.
   a. Exprimer δ'_n en fonction de E'_n et poser $a''_n = a + 2\delta'_n$ pour $1 \leqslant n \leqslant 2$.
   b. Calculer les valeurs numériques de E''_n pour $1 \leqslant n \leqslant 2$.
5. Expliquer pourquoi ce processus est inopérant pour le niveau $n = 3$.
6. Écrire un programme dans le langage Python, basé sur ce processus itératif et qui permet d'obtenir les valeurs numériques approchées des deux premiers niveaux d'énergie du puits de profondeur fini étudié, ainsi que les valeurs numériques approchées de δ_n/a pour chacun des deux niveaux d'énergie.

Quelques indications ou solutions…

Exercice 1
Pas d'indication
Exercice 2
Pas d'indication
Exercice 3
Pas d'indication

Exercice 4
Pas d'indication
Exercice 5
Pas d'indication