

## Exercices : 29 – Évolution d'un quanton

### A. Généralités

#### 1. Fil quantique

On étudie la conduction électronique dans un fil quantique : il s'agit d'un matériau dans lequel des électrons peuvent se déplacer d'une extrémité à l'autre. Sa géométrie est celle d'un parallélépipède de section carrée de côté  $a$  et de longueur  $\ell \gg a$  (typiquement,  $a$  est de l'ordre du nanomètre alors que  $\ell$  est de l'ordre du micromètre, ce qui justifie la dénomination de fil). Pour des raisons géométriques, il existe donc un fort confinement latéral des électrons dans le fil, ce qui ne leur laisse plus que la possibilité de se déplacer selon son axe ( $Ox$ ). Chaque électron est traité comme un quanton non relativiste de masse  $m$  et de charge  $-e$ , libre suivant ( $Ox$ ). La fonction d'onde propre qui représente un état stationnaire d'énergie  $E$  d'un électron s'écrit sous la forme  $\varphi(x) = A \exp i k x$  où  $A$  est une constante réelle de normalisation et sur l'intervalle  $[0; \ell]$  du fil.

1. (a) Commenter la forme choisie pour  $\varphi(x)$ . Que représente  $k$  ? Obtenir l'énergie  $E$  de l'électron en fonction de  $k$ ,  $m$  et  $\hbar$  à partir de l'équation de SCHRÖDINGER. Exprimer la vitesse  $v_x$  d'un électron selon ( $Ox$ ) en fonction des mêmes grandeurs à partir du paquet d'ondes associé. Commenter.
- (b) Normaliser la fonction d'onde propre.
2. (a) Montrer que la densité de probabilité de présence  $dP(x)/dx$  de l'électron est uniforme le long du fil et donner son expression.
- (b) On admet que la probabilité de présence entre  $x$  et  $x + dx$  d'un électron, de vecteur d'onde compris entre  $k$  et  $k + dk$  suivant ( $Ox$ ) est :

$$dP_k(x) = \frac{dP(x)}{dx} \frac{\ell}{\pi} dx dk$$

Déterminer la contribution  $dI$  au courant électrique qui traverse le fil, dans le sens des  $x$  croissants, d'un électron de vecteur d'onde compris entre  $k$  et  $k + dk$ , en fonction de  $e$ ,  $\hbar$ ,  $k$ ,  $m$  et  $dk$ .

3. Le fil quantique est disposé entre deux métaux portés à des potentiels électriques différents de  $U$ . Dans le métal 1 (côté  $x \leq 0$ ), les électrons de conduction occupent tous les niveaux d'énergie jusqu'à une valeur maximale notée  $E_1$  ; dans le métal 2 (côté  $x \geq \ell$ ), la valeur maximale est différente et est  $E_2 = E_1 - eU < E_1$ . Un électron du métal 1 dont l'énergie est comprise entre  $E_1$  et  $E_2$  peut transiter à travers le fil quantique vers le métal 2. Cet électron a un vecteur d'onde suivant ( $Ox$ ) de valeur  $k$  comprise entre  $k_1$  et  $k_2$ . Les énergies  $E_1$  et  $E_2$  sont liées à  $k_1$  et  $k_2$  par la relation déterminée en première partie d'exercice.
- (a) Montrer que l'intensité  $I$  du courant électrique qui traverse le fil dans le sens des  $x$  croissants s'exprime en fonction de  $U$  sous la forme  $I = -GU$  où  $G$  est à expliciter en fonction de  $e$  et  $\hbar$ .
- (b) Commenter l'expression de  $G$  et donner sa valeur numérique, ainsi que celle de la grandeur  $R = 1/G$ .

#### 2. Équation de Klein-Gordon

On pose, pour un quanton matériel de masse  $m$  libre et relativiste, l'équation dynamique de KLEIN-GORDON

$$\left( \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) \psi(M, t) = 0$$

où  $\psi(M, t)$  est sa fonction d'onde.

1. Quelle relation entre  $\omega$  et  $\vec{k}$  existe-t-il afin qu'une onde plane en  $\exp[i(\vec{k} \cdot \vec{OM} - \omega t)]$  avec  $\vec{k}$  réel puisse être solution ? Toutes les fréquences peuvent-elles se propager librement ?
2. Analyser la compatibilité de l'équation de KLEIN-GORDON avec les relations de DE BROGLIE, de PLANCK-EINSTEIN et de norme du quadrivecteur impulsion-énergie de la relativité restreinte ( $E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4$ ).
3. Expliciter la vitesse de groupe du paquet d'ondes associé au quanton en fonction de  $m$ ,  $c$  et de son énergie  $E$ . Discuter l'évolution conséquente de l'énergie  $E$  en fonction de  $v_g$ .

## B. Marche de potentiel

### 3. Analyse sur une marche

La figure 1 montre ce que l'on peut observer pour la densité de probabilité de présence d'un quanton incident représenté par un paquet d'ondes arrivant sur une marche de potentiel  $V_0$  avec une énergie  $E > V_0$ . Les trajectoires d'une particule classique associée au quanton sont soit consécutive à la réflexion par la marche, en amont de la marche, soit consécutive à la transmissions. Elles sont indiquées par les lignes noires fléchées.

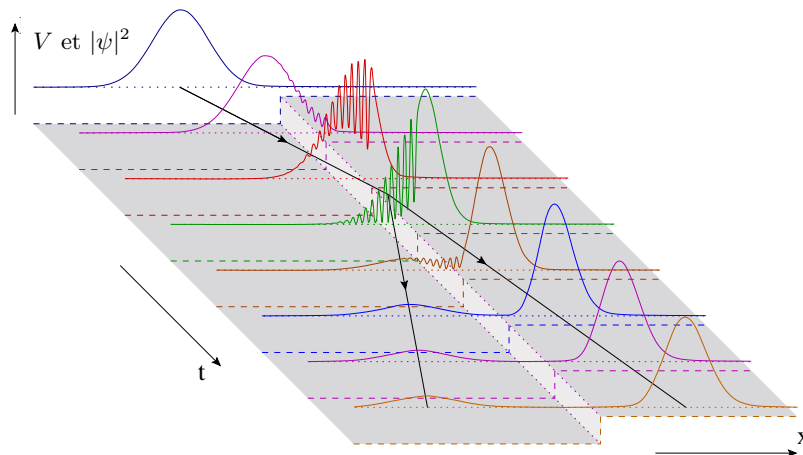


FIGURE 1 – Diffusion sur une marche de potentiel

La figure 2 montre toujours le problème de la barrière de potentiel mais maintenant dans le cas où le quanton possède une énergie  $E$  inférieure à la barrière :  $E < V_0$ .

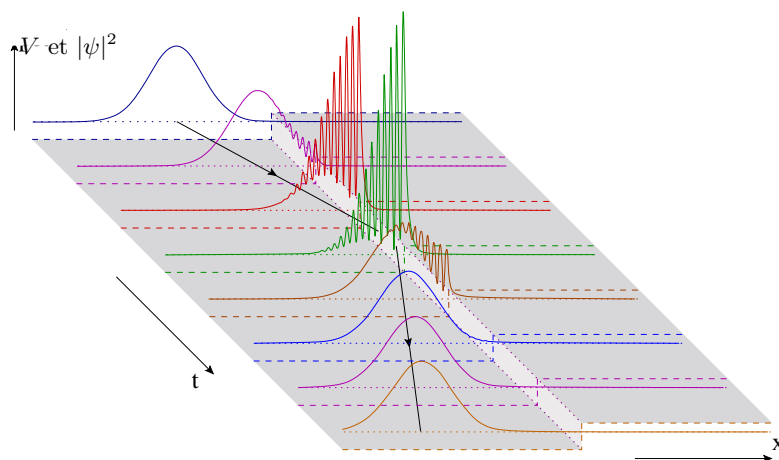


FIGURE 2 – Réflexion sur une marche de potentiel

1. Commenter la figure 1.
2. Commenter la figure 2.

### 4. Retard à la réflexion sur une marche

On considère une particule quantique non relativiste, de masse  $m$ , se déplaçant selon un axe  $(Ox)$  et venant depuis  $-\infty$ . Elle est soumise au potentiel de profil  $V(x < 0) = 0$  et  $V(x > 0) = V_0 > 0$ .

1. Déterminer l'état stationnaire d'énergie  $E < V_0$  associé à ce système. On posera les grandeurs  $k = \sqrt{2mE}/\hbar$  et  $K_0 = \sqrt{2mV_0}/\hbar$ .
2. Donner une interprétation physique possible de cet état stationnaire. Expliciter et interpréter une distance caractéristique  $\delta$ , relative au domaine  $x > 0$ .
3. Pourquoi l'état stationnaire seul précédent ne permet-il pas de décrire la particule quantique étudiée de façon satisfaisante ?

On adopte, pour décrire la particule quantique à l'instant  $t = 0$  et dans le domaine  $x < 0$ , la fonction d'onde

$$\psi(x < 0, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{K_0} g(\chi) [\exp i \chi x + \exp -2i\theta(\chi) \exp -i \chi x] d\chi$$

La fonction réelle  $g(\chi)$  n'est pas précisée mais elle présente un pic très prononcé, de largeur  $\Delta\chi$ , autour de la valeur  $\chi = k_0 < K_0$ . On pose  $\omega(\chi) = \frac{\hbar \chi^2}{2m}$ .

- Montrer que la fonction d'onde  $\psi(x < 0, t)$ , à un instant  $t$  quelconque, est composée de deux termes intégraux,  $\psi_1(x < 0, t)$  et  $\psi_2(x < 0, t)$ , pertinents physiquement. Les expliciter, ainsi que le terme  $\theta(\chi)$ , puis tout interpréter.
- On admet que la position du maximum de chaque fonction d'onde  $\psi_1$  et  $\psi_2$ , à un instant donné, correspond au lieu de phase propagative stationnaire (méthode de la phase stationnaire). En déduire les lois d'évolution  $x_1(t)$  et  $x_2(t)$  des positions respectives des maxima de  $\psi_1$  et  $\psi_2$ .
- Interpréter, en utilisant les lois  $x_1(t)$  et  $x_2(t)$ , ce qu'il se passe pour la particule quantique étudiée dans le domaine  $x < 0$  aux instants  $t < 0$  et aux instants ultérieurs. Montrer qu'il existe un retard  $\tau$  à la réflexion, d'expression :

$$\tau = \frac{2m}{\hbar k_0 \sqrt{K_0^2 - k_0^2}}$$

Comment expliquer qualitativement l'existence d'un tel retard ?

## 5. Réciprocité et système neutron-noyau

- Retrouver l'expression du coefficient de probabilité de réflexion  $R$  d'un quanton non relativiste sur une marche de potentiel montante (potentiel  $V(x < 0) = 0$  et  $V(x > 0) = V_0 > 0$ ), sachant que sa masse est  $m$  et son énergie est  $E > V_0$ . On explicitera le résultat en fonction des constantes :

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E} \quad \text{et} \quad k_2 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0)}$$

- Montrer que le résultat précédent est inchangé lorsque les valeurs  $k_1$  et  $k_2$  sont échangées (propriété d'invariance associée au théorème de réciprocité de la physique des ondes). Que peut-on en déduire pour le cas d'une marche de potentiel descendante ?
- On s'intéresse à une application à la réflexion d'un neutron par un noyau atomique. Lorsqu'un neutron entre dans un noyau atomique, il fait face à une énergie potentielle qui décroît brusquement. À l'extérieur du noyau, l'énergie potentielle est nulle alors qu'à l'intérieur, elle chute à  $V'_0 = -50 \text{ MeV}$ . On considère un neutron incident sur un noyau avec une énergie cinétique  $E_c = 5 \text{ MeV}$  typique d'un neutron émis par fission nucléaire (supposé non relativiste). Estimer la probabilité pour que le neutron soit réfléchi à la surface du noyau et donc pour qu'il ne puisse pas pénétrer dans le noyau pour y induire une autre fission nucléaire.

## 6. Falaise de potentiel

Un quanton de masse  $m$ , d'énergie  $E$  approche - en provenance de  $-\infty$  - une falaise de potentiel de hauteur  $V_0$  placée en  $x = 0$ . En effet, le potentiel (énergie potentielle) est donnée par :

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{pour } x < 0 \text{ région 1} \\ -V_0 < 0 & \text{pour } x \geq 0 \text{ région 2} \end{cases}$$

- Quel est le mouvement d'une particule classique dans de telles conditions ? Comparer à la situation d'une particule quantique.
- Résoudre l'équation de SCHRÖDINGER dans les deux domaines.
- Déterminer les coefficients de réflexion et de transmission de la fonction d'onde.
- Étudier le cas particulier où  $E = V_0/2$  et déterminer le coefficient de réflexion  $R$  de la probabilité de présence.

### 7. Enrichissement isotopique

On étudie l'arrivée depuis  $-\infty$  d'un quanton de masse  $m$  et d'énergie  $E$  sur une marche de potentiel définie par :

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{pour } x < 0 \text{ région 1} \\ V_0 > 0 & \text{pour } x \geq 0 \text{ région 2} \end{cases}$$

On rappelle que le coefficient de réflexion en amplitude de la fonction d'onde dépend du signe de  $E - V_0$ . En effet, si l'on a  $E < V_0$  alors  $r = \frac{k_1 - i\mu}{k_1 + i\mu}$  avec  $k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$  et  $\mu = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$ . Dans le cas où  $E > V_0$ , on a  $r = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}$  avec  $k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$  et  $k_2 = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}$ .

On considère un faisceau non relativiste de particules quantiques composé de deux isotopes de masse  $m_1$  et  $m_2$  possédant la même vitesse qui arrivent sur la marche de potentiel.

1. Discuter la possibilité d'enrichir un faisceau d'isotopes homocinétiques (qui possèdent la même vitesse) en fonction du signe de  $E - V_0$ .
2. Prévoir qualitativement si le faisceau réfléchi est plus riche en isotope de masse plus grande ou plus petite.
3. On se place dans le cas limite où  $E \gg V_0$ . Donner une expression approchée de la probabilité de réflexion  $R$  sur la marche de potentiel.
4. Former le rapport de  $R_1$  et de  $R_2$  de la probabilité de réflexion sur la marche de potentiel en fonction des masses  $m_1$  et  $m_2$  des deux isotopes. Conclure.

### 8. Barrière de potentiel

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

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{pour } x < -\frac{a}{2} \text{ (région I),} \\ V_0 > 0 & \text{pour } -\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2} \text{ (région II),} \\ 0 & \text{pour } x > \frac{a}{2} \text{ (région III).} \end{cases} \quad (1)$$

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

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 dans la région III, proposer une forme adéquate de  $\varphi(x)$  dans chacune des trois régions. Préciser les conditions de raccordement qui doivent être vérifiées par  $\varphi(x)$ .

Ces conditions de raccordement permettent de déduire les expressions des probabilités de transmission au-delà de la barrière  $T$ , et de réflexion par la barrière  $R$ . On donne :

$$T = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(E - V_0)} \sin^2 \left( \frac{a\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar} \right)}$$

4. Déterminer l'expression de  $R$  à partir de l'expression de  $T$ .
5. Représenter l'allure de  $T$  et de  $R$  en fonction de  $E$  pour  $E > V_0$ . Commenter.
6. Des électrons d'énergie cinétique égale à 10 eV s'approchent d'une barrière de potentiel comme celle-ci de hauteur 4 eV. 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.

## C. Puits de potentiel

### 9. Température de Hawking

Dans les années 1960-1970, STEPHEN HAWKING et le mathématicien ROGER PENROSE travaillaient sur les conséquences mathématiques de la relativité générale d'EINSTEIN. Ils montrèrent l'existence de singularités comme celle que nous appelons le *Big Bang* qui a eu lieu dans le passé mais aussi des singularités locales bien connues sous le nom de *trous noirs* et existant à l'heure actuelle. Le trou noir crée un champ gravitationnel tel qu'en dessous d'une distance limite évaluée à partir de son centre et appelée *horizon*, la vitesse de libération est supérieure à la vitesse de la lumière dans le vide. En dessous de l'horizon, même la lumière est piégée, elle ne peut pas sortir du trou noir. Ces calculs font suite à la première prédiction théorique de KARL SCHWARZSCHILD datant de 1916.

En 1974, STEPHEN HAWKING décida d'étudier le problème théorique consistant à envoyer une particule quantique vers un trou noir. Les calculs qu'il effectua montrèrent que les trous noirs s'évaporaient et que leur rayonnement pouvait être assez bien caractérisé par la loi du rayonnement du corps noir et donc caractérisé par une température - dite aujourd'hui température de HAWKING - notée  $T_H$  et donnée par la formule :

$$T_H = \frac{\hbar c^3}{8\pi G M k_B}$$

où  $M$  est la masse du trou noir et  $G$  la constante de gravitation universelle. Les fluctuations quantiques du vide créent des couples particule-antiparticule. En général, les couples particule-antiparticule s'annihilent ou se recombinent pour redonner de l'énergie. Lorsque cette recombinaison se produit au voisinage de l'horizon d'un trou noir, l'une des particules est piégée dans le trou noir alors que l'autre est éjectée vers l'extérieur. C'est ce phénomène qui participe au rayonnement du trou noir et que STEPHEN HAWKING a caractérisé par une température.

1. Dans le cadre de la Mécanique classique, déterminer littéralement et numériquement la vitesse de libération à la surface de la Terre.
2. Toujours en se plaçant dans le cadre de la Mécanique classique, déterminer l'horizon  $R_h$  d'un trou noir sphérique possédant la masse de la Terre. Faire de même pour le Soleil.
3. Justifier par analyse dimensionnelle que  $T_H$  est une température.

### 10. État fondamental du puits infini

On considère un puits de potentiel rectangulaire infini de potentiel nul pour  $x \in [0, a]$ . On étudie un quanton de masse  $m$  est dans ce puits.

1. Rappeler sans calcul la forme de la fonction d'onde de l'état stationnaire  $\varphi(x)$  et la représenter graphiquement.
2. Calculer la valeur moyenne de la position  $\langle x \rangle$  dans cet état.
3. Faire de même avec la valeur moyenne du carré de la position  $\langle x^2 \rangle$ .
4. En déduire l'écart-type en position  $\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$ .
5. Que dire de l'écart-type en quantité de mouvement  $\Delta p_x$  dans cet état ?

On donne :  $\int_0^a x \sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx = \frac{a^2}{4}$  et  $\int_0^a x^2 \sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx = \frac{a^3}{6} - \frac{a^3}{4\pi^2}$ .

### 11. Puits harmonique

On s'intéresse à un puits de potentiel quadratique, c'est-à-dire à une énergie potentielle (appelée potentiel)  $V$  de la forme :

$$V(x) = \frac{1}{2} m \omega_0^2 x^2$$

où  $m$  est la masse de la particule et  $\omega_0$  la pulsation des oscillations au sens classique du terme. Cette forme de potentiel peut correspondre à une interaction entre deux atomes à l'intérieur d'une molécule où les oscillations d'un atome à l'intérieur d'un solide.

1. En écrivant la conservation de l'énergie classique, obtenir l'équation différentielle du mouvement d'une particule classique.
2. Donner une solution pour des oscillations d'amplitude  $x_0$ . Donner l'expression de la vitesse au cours du temps.
3. En déduire la valeur de l'énergie classique en fonction notamment de  $x_0$ .

- Quelle est l'énergie minimale d'un tel système en Mécanique classique ?
- En Mécanique quantique, quelle est l'énergie minimale  $E_{min}$  de la particule ? On propose comme relation d'indétermination  $\Delta x \times \Delta p_x \geq \hbar$ .

### 12. Oscillateur harmonique quantique

On considère une particule quantique, de masse  $m$ , soumise à une énergie potentielle de la forme  $V(x) = \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2$ . Dans un état stationnaire d'énergie  $E$ , on écrit la fonction d'onde sous la forme :

$$\psi(x, t) = \varphi(x) \exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right)$$

- Écrire l'équation de SCHRÖDINGER indépendante du temps dans le cas considéré.
- Pour l'état fondamental qu'on étudie dans la suite, on a :  $\varphi(x) = N \exp -\frac{x^2}{a^2}$ . Déterminer la constante de normalisation  $N$ .
- Représenter l'allure de la densité de probabilité de présence de la particule. En déduire, sans calcul, la valeur de la position moyenne de la particule.
- Déterminer l'expression de l'énergie  $E$  et de  $a$  en fonction de  $\hbar$ ,  $m$  et  $\omega_0$ .

On donne :  $\int_{-\infty}^{\infty} \exp -\alpha u^2 du = \sqrt{\pi/\alpha}$ .

### 13. Potentiel inconnu

On considère un faisceau de particules quantiques venant de  $-\infty$ , de masse  $m$  et d'énergie  $E$ . Chaque particule est astreinte à se déplacer sur un axe  $Ox$ . Elles sont soumises à un champ de force qui dérive d'une énergie potentielle ou potentiel  $V(x)$  inconnu. On admet que  $V(x \rightarrow \pm\infty) = 0$ . On étudie un état stationnaire des particules quantiques. La probabilité de présence est donnée sur le graphique de la figure 3.

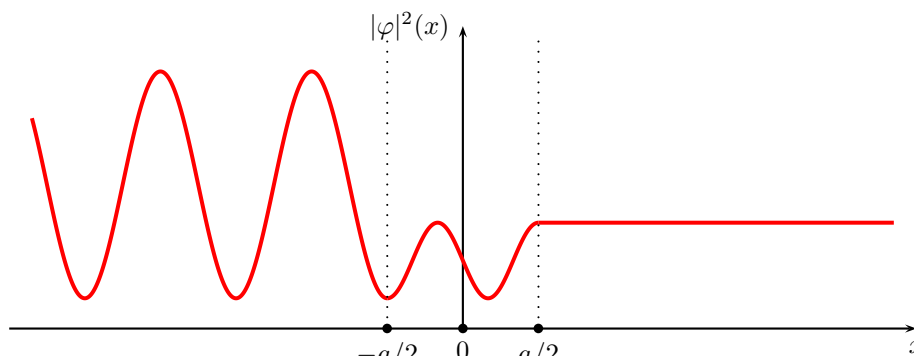


FIGURE 3 – Densité linéique de probabilité de présence

- L'état de chaque particule quantique est-il un état lié ou un état de diffusion ?
- Quelle interprétation peut-on donner des oscillations de la probabilité que l'on peut constater dans certaines régions du graphique ?
- Analyser l'ensemble du graphique de la figure 3 et déterminer la forme potentiel  $V(x)$ .
- La fonction d'onde associée à un état stationnaire est de la forme  $\psi(x, t) = \varphi(x) \exp -iEt/\hbar$ . Proposer des formes d'expression de  $\varphi(x)$  pour les différentes régions que l'on peut distinguer. Quelles sont les conditions de raccordement ?

### 14. Puits rectangulaire fini

Un quanton est placé dans un puits de potentiel compris entre  $x = -a$  et  $x = a$  de potentiel nul alors qu'en dehors de cet intervalle le potentiel est  $V_0 > 0$ . On s'intéresse aux états liés tels que  $E < V_0$  où  $E$  est l'énergie du quanton. On pose  $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$  et  $\mu = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$

- Dans le cas où  $V_0 \rightarrow \infty$ , retrouver le plus simplement possible les niveaux d'énergie des états stationnaires.
- Quelles équations différentielles sont vérifiées par la fonction d'onde indépendante du temps  $\varphi(x)$  ?
- Quelles sont les solutions de ces équations différentielles ?
- Quelles sont les différentes conditions aux limites ?

5. Au vu de la forme du potentiel, on admet que les fonctions d'onde des états stationnaires sont soit paires, soit impaires. En déduire les relations  $ka \tan ka = \mu a$  et  $ka \cotan ka = -\mu a$ .
6. Établir la relation  $(ka)^2 + (\mu a)^2 = \frac{2ma^2V_0}{\hbar^2}$ .
7. En utilisant une méthode graphique, déterminer la condition pour laquelle il existe des états liés. À quelle condition en existe-t-il un seul ?
8. Dans le cas où le puits devient très profond, retrouver les solutions du puits infini.

### 15. Molécule de benzène - $C_6H_6$

La molécule de benzène forme un cycle hexagonal. Les orbitales  $\pi$  de la molécule de benzène peuvent être modélisées de façon très approximative en considérant les fonctions d'onde et les énergies d'une particule quantique de masse  $m$  astreinte à se déplacer sur un cercle de rayon  $a$ . On adopte une modélisation unidimensionnelle en supposant que la particule quantique se déplace sur un segment  $0 \leq x \leq 2\pi a$  avec une énergie potentielle  $V(x) = 0$ . Un état stationnaire de cette particule est représenté par la fonction d'onde  $\psi(x, t) = \varphi(x) \exp -iEt/\hbar$ .

1. On cherche une fonction d'onde sous la forme  $\varphi(x) = A \exp ikx$ . Déterminer  $k$  avec  $A$  réel. Normaliser cette fonction d'onde.
2. Quelle condition aux limites voyez-vous dans ce problème ?
3. Montrer qu'on aboutit à une quantification des niveaux d'énergie. On utilisera un nombre quantique noté  $n$ . Étudier la question du dédoublement des niveaux d'énergie. Représenter les niveaux d'énergie.
4. Les 6 électrons  $\pi$  du benzène sont considérés comme des particules quantiques astreintes à se déplacer sur le cercle de rayon  $a$ . Ces électrons occupent les niveaux d'énergie en respectant les règles de HUND et de PAULI. Représenter l'état fondamental de la molécule de benzène.
5. Cette molécule présente une bande d'absorption à 255 nm. En déduire la valeur de  $a$ . Sachant que la longueur des liaisons C = C vaut 142 pm, commenter le résultat précédent.

### 16. Puits de potentiel semi-infini

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

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

On étudie les états stationnaires d'une particule quantique liée d'énergie  $E$  telle que  $-V_0 < E < 0$  dans ce puits de potentiel. On pose  $k = \frac{\sqrt{2m(E + V_0)}}{\hbar}$  et  $E = -\alpha^2 \frac{\hbar^2}{2m}$ .

1. Montrer qu'on doit peut écrire les parties spatiales des fonctions d'onde de la particule sous la forme :

$$\varphi(x < 0) = 0 ; \varphi(0 < x < a) = A \exp(ikx) + B \exp(-ikx) \quad \text{et} \quad \varphi(x > a) = C \exp(-\alpha x)$$

2. En déduire l'équation dont  $k$  est solution et montrer qu'il existe un nombre fini d'états liés.
3. Comparer l'énergie de liaison dans l'état fondamental avec celle de l'état fondamental dans un puits de même largeur mais infini des deux côtés.

### 17. Courant tunnel

Un faisceau d'électrons correspondant à une intensité  $I = 0,1$  mA est envoyé sur une barrière de potentiel de largeur  $a = 1,0$  nm et de hauteur  $V_0 = 2,0$  eV. Les électrons proviennent de  $x \rightarrow -\infty$ . L'énergie cinétique d'un électron incident est  $E = 1,0$  eV. On note  $\varphi(x)$  la fonction d'onde spatiale associée à un électron considéré comme un quanton.

1. Établir les différentes équations différentielles auxquelles obéit la fonction d'onde spatiale  $\varphi(x)$ .
2. Donner les formes de solutions que l'on peut rencontrer dans les différents cas de la question précédente.
3. Écrire les conditions auxquelles doivent satisfaire ces solutions.
4. Déterminer l'expression d'une longueur caractéristique de l'atténuation de  $\varphi(x)$  dans le domaine où celle-ci s'atténue bien évidemment.
5. Peut-on se placer dans l'approximation d'une barrière épaisse ?
6. Estimer l'intensité du courant tunnel qui émerge de l'autre côté de la barrière.

7. 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.

### 18. Effet Ramsauer-Townsend (1922)

Lorsqu'un faisceau d'électrons d'énergie  $E = 0,7 \text{ eV}$  traverse l'hélium, celui-ci est parfaitement transparent.

1. En modélisant un atome d'hélium comme un puits de potentiel carré de profondeur  $-V_0 < 0$  et de largeur  $a = 0,2 \text{ nm}$  pour les électrons, expliquer par analogie avec une expérience d'interférences en optique ce qui permet au facteur de transmission de la barrière d'être égal à 1.
2. Quelle est la plus grande valeur de la longueur d'onde de DE BROGLIE convenable dans le puits ?
3. En déduire une valeur pour  $V_0$ .

### 19. États de diffusion d'un puits carré

Une particule quantique arrive avec une énergie  $E$  positive sur un puits carré de profondeur  $-V_0$  s'étendant de  $x = 0$  à  $x = L$  (le potentiel est nul en dehors de ce puits).

1. Montrer qu'on peut écrire les parties spatiales des fonctions d'onde des états stationnaires sous la forme :

$$\varphi(x < 0) = A_1 \exp ik_1 x + B_1 \exp -ik_1 x \quad \varphi(0 \leq x \leq L) = A_2 \exp ik_2 x + B_2 \exp -ik_2 x$$

$$\text{et} \quad \varphi(x > L) = A_3 \exp ik_1 x$$

2. En analysant le nombre d'inconnues et le nombre de contraintes, justifier, sans calcul, le fait que toutes les valeurs de l'énergie soient possibles.
3. Comparer avec le cas des états liés.

### 20. Deux quantons dans un puits...

On considère deux quantons de masse  $m_1 = m_0$  et  $m_2 = 2m_0$  dans un puits infini unidimensionnel de longueur  $L$ . Le potentiel du quanton  $U(x)$  est nul dans l'intervalle  $[0, L]$  et infini sinon. On suppose les deux quantons sans interaction.

1. Donner l'équation de SCHRÖDINGER indépendante du temps pour un seul quanton de masse  $m_0$  dans le puits.
2. Trouver les états stationnaires ainsi que les énergies propres correspondantes pour un seul quanton de masse  $m_0$  dans le puits infini.
3. Donner l'équation de SCHRÖDINGER indépendante du temps pour le système des deux quantons.
4. Montrer qu'une fonction d'onde  $\varphi_{nm}(x_1, x_2)$  sous la forme du produit du type  $\varphi_n(x_1)\varphi_m(x_2)$  est solution de l'équation de SCHRÖDINGER indépendante du temps pour deux quantons, et trouver ainsi les énergies propres  $E_{nm}$  du système des deux quantons.
5. 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).
6. Même question quand on considère deux quantons identiques ( $m_1 = m_2$ ).

### 21. Vol d'électrons au-dessus d'un puits

On envisage un potentiel électrique  $\psi$ , nul partout sauf entre  $x = 0$  et  $x = a$  où il vaut  $V_0/e$ ,  $V_0$  étant positif et de la dimension d'une énergie. Par abus de langage, en Mécanique quantique, on dit que  $V_0$  est un potentiel. Un jet d'électrons arrive depuis  $-\infty$  en suivant l'axe  $Ox$  sur la zone  $[0, a]$ . On note  $m$  la masse des électrons et  $E > 0$  l'énergie des électrons du faisceau qui arrivent au-dessus du puits.

1. Que se passe-t-il en Mécanique classique ?
2. Que se passe-t-il en Mécanique quantique ?
3. Y a-t-il des cas où il se passe la même chose en Physique classique et en Physique quantique ?

### 22. Colorants organiques et modèle de Kuhn

En 1949, HANS KUHN proposa, pour calculer les propriétés électroniques d'une molécule présentant des liaisons conjuguées comme celle représentée à la figure 4, d'oublier le squelette d'atomes de carbone, d'azote et d'hydrogène et d'attribuer les propriétés optiques dans le domaine visible au seul nuage d'électrons  $\pi$ . Un modèle simple consiste à considérer les  $N$  électrons  $\pi$  prisonniers d'un puits de potentiel rectangulaire infiniment profond, de largeur  $L$ . En notant  $\ell$  la longueur moyenne d'une liaison carbone-carbone ou carbone-azote, on adopte  $L = N\ell$ .



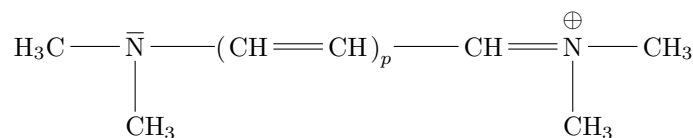


FIGURE 4 – Colorant organique

1. La molécule organique représentée appartient à la famille des cyanines symétriques. En incluant les atomes d'azote, quel est, en fonction de  $p$ , le nombre  $N$  d'électrons délocalisés ?
2. Retrouver les valeurs des différents niveaux d'énergie en fonction de  $\hbar$ , de la masse de l'électron  $m_e$ , de  $L$  et d'un nombre quantique entier  $n$ .
3. On admet que les électrons se répartissent dans les différents niveaux d'énergie en respectant la règle de HUND et le principe d'exclusion de PAULI. Identifier les nombres quantiques  $n$  des deux niveaux responsables de l'existence d'une bande d'absorption de la molécule modélisée sachant qu'il s'agit du dernier niveau occupé et du premier vide.
4. En déduire l'expression de la longueur d'onde  $\lambda_a$  du rayonnement électromagnétique absorbé en fonction de  $m$ ,  $c$ ,  $L$ ,  $N$  et de la constante de Planck  $h$ .
5. Pour la famille des cyanines symétriques, les raies d'absorption ont été mesurées :

$p$	1	2	3	4	5
$\lambda_0 \text{ nm}$	313	416	519	625	735

On donne  $\ell = 0,139 \text{ nm}$ . Comparer ces valeurs expérimentales aux valeurs fournies par le modèle de KUHN.

### 23. Le deutéron

Le deutéron est le noyau de l'atome d'hydrogène, constitué d'un neutron de masse  $m_n$  et d'un proton de masse  $m_p$ . On traite ce système à deux corps en le remplaçant par une particule fictive de masse réduite  $m = \frac{m_n m_p}{m_n + m_p}$  soumise au potentiel de Yukawa  $V(r)$ , d'allure donnée à la figure 5, qui modélise l'interaction nucléaire ( $r$  désigne une coordonnée radiale). On observe expérimentalement que le deutéron est le seul état lié stable du système proton-neutron et que son énergie de liaison vaut  $E_l = -2,2 \text{ MeV}$ . L'ordre de grandeur de la portée de l'interaction nucléaire est  $a \simeq 1 \text{ fm}$  qui est donc le rayon du noyau. On pose  $k_0 = \sqrt{2mV_0}/\hbar$ .

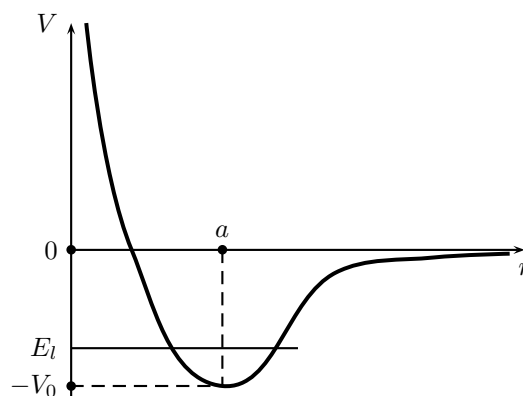


FIGURE 5 – Potentiel de YUKAWA

1. Commenter physiquement la forme du potentiel de YUKAWA.
2. On adopte pour la suite une approche quantique simplifiée. Pour cela, on assimile la coordonnée radiale  $r$  à une coordonnée  $x$  d'un espace unidimensionnel cartésien et on modélise le potentiel de YUKAWA sur ce nouvel espace par un nouveau potentiel  $V(x)$  uniforme par morceaux dans trois régions distinctes, l'une d'elles étant interdite et une autre traduisant un confinement classique de largeur  $a$ . Représenter ce potentiel  $V(x)$ .
3. Obtenir la forme des fonctions d'onde stationnaires envisageables pour le deutéron et en déduire une condition de quantification à écrire sous la forme :

$$|f(ka)| = \frac{k}{k_0} \quad \text{et} \quad g(ka) < 0$$

Les fonctions  $f$  et  $g$  sont à préciser.

4. Vérifier que les solutions de la condition de quantification précédente peuvent être déterminées à l'aide du graphique fourni à la figure 6 (les arches sont des portions sinusoïdales).

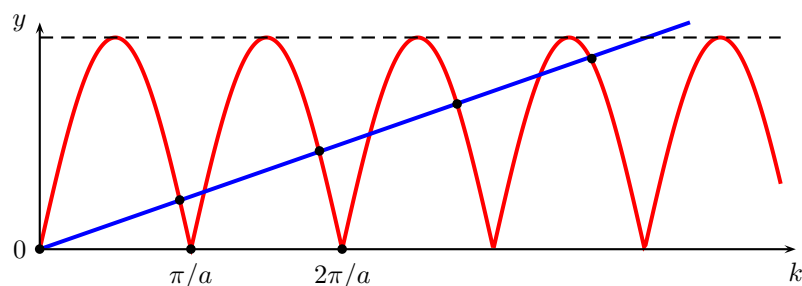


FIGURE 6 – Solutions graphiques de la condition de quantification

5. Déterminer par approche graphique un ordre de grandeur de  $V_0$  cohérent avec l'existence d'un seul état propre lié dans le deutéron. Le comparer avec la valeur connue de l'énergie de liaison.
6. Pourquoi le deutéron est-il utilisé dans les accélérateurs du type synchrotron pour produire des neutrons de haute énergie ?

## 24. Effet Hall quantique

La découverte de l'effet HALL quantique en 1980 à Grenoble, a bouleversé la physique de la matière condensée. Parmi les retombées de cette découverte, on trouve l'étalon standard de résistance électrique qui s'intègre très bien dans le nouveau système d'unité SI qui a fixé des constantes fondamentales de la Physique en 2019. En 1980 KLAUS VON KLITZING montre qu'un semi-conducteur à la température de l'hélium liquide (4 K), plongé dans un champ magnétique intense possède une résistance de HALL qui prend des valeurs quantifiées selon :

$$R_H = \frac{1}{p} \frac{h}{e^2}$$

où  $h$  est la constante de PLANCK,  $e$  la charge élémentaire et  $p$  un entier naturel non nul. La résistance étalon est  $R_H(p=1) = 25,8 \text{ k}\Omega$ . L'explication de ce comportement fait appel à la Mécanique quantique : les niveaux d'énergie d'un gaz bidimensionnel d'électrons dans un champ magnétique perpendiculaire, appelés niveaux de LANDAU, sont discrets et régulièrement espacés.

Dans un premier temps, on considère un puits de potentiel bidimensionnel d'extension définie par :

$$V(x, y) = 0 \quad \text{si} \quad x \in ]-\ell_x/2, +\ell_x/2[ \quad \text{et} \quad y \in ]-\ell_y/2, +\ell_y/2[$$

et  $V(x, y) \rightarrow \infty$  sinon. On considère qu'un électron est une particule quantique non relativiste de masse  $m$ . Le champ magnétique n'est pas imposé au départ.

1. On étudie les états stationnaires du quanton caractérisés par la fonction d'onde :

$$\psi(x, y, t) = \varphi(x, y) \left( \exp -i \frac{E}{\hbar} t \right) \quad \text{avec} \quad \varphi(x, y) = X(x) Y(y)$$

Montrer que l'énergie du quanton est alors quantifiée par les deux nombres entiers positifs non nuls  $n_x$  et  $n_y$  tels que :

$$E(n_x, n_y) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left( \frac{n_x^2}{\ell_x^2} + \frac{n_y^2}{\ell_y^2} \right)$$

On impose maintenant un champ magnétique  $\vec{B} = B \vec{e}_z$  ( $B > 0$ ) uniforme et indépendant du temps dans tout le puits bidimensionnel. On étudie toujours les états stationnaires du quanton d'énergie  $E$ . L'équation de SCHRÖDINGER spatiale est alors modifiée. Elle devient :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \varphi(x, y) + i \frac{\hbar e B}{m} x \frac{\partial \varphi}{\partial y} + \frac{e^2 B^2}{2m} x^2 \varphi = E \varphi$$

2. On propose d'étudier la solution  $\varphi(x) = \Omega(x) \exp ik_y y$ . Montrer que l'équation de SCHRÖDINGER précédente se réduit à :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Omega}{dx^2} + V_{eff}(x) \Omega(x) = E \Omega(x)$$

où  $V_{eff}(x)$ , énergie potentielle effective, est à exprimer en fonction de  $m$ ,  $\omega_0$ ,  $x_0$  et  $x$  avec  $\omega_0 = eB/m$  et  $x_0 = \hbar k_y / (eB)$  où  $k_y$  vérifie la condition de quantification de l'étude sans champ magnétique.

3. Quel système physique possède une telle énergie potentielle ? La modélisation impose que  $x_0$  soit situé dans le puits de potentiel. Quelle est alors la valeur maximale de  $n_y^{max} = g$  ?  $g$  est la dégénérescence de l'état d'énergie  $E$ .
4. L'équation précédente vérifiée par  $\Omega(x)$  ne possède de solution que pour des valeurs de l'énergie  $E = (p - \frac{1}{2})\hbar\omega_0$  avec  $p \in \mathbb{N}^*$ . Chaque niveau d'énergie est dégénéré  $g$  fois. On doit placer  $N_e$  électrons dans ces niveaux  $p$  d'énergie. Quelle est la relation entre  $N_e$ ,  $g$  et  $p$  ?
5. La résistance de HALL est donnée par :

$$R_H = \frac{B}{n_v e b}$$

où  $n_v$  est la densité volumique d'électrons dans une boîte de potentiel et  $b$  la hauteur selon  $Oz$  de la boîte de potentiel bidimensionnel en  $(x, y)$ . Montrer que  $R_H$  obéit à la loi caractéristique de l'effet HALL quantique fractionnaire.

## 25. États liés du neutron dans le noyau

On considère un neutron d'un noyau comme situé au fond d'un puits de potentiel de profondeur  $U_0$  que l'on pourra considérer comme infini. L'état libre du neutron en dehors du noyau est d'énergie  $E \geq 0$ .

1. On considère, en physique quantique, un état stationnaire lié à symétrie sphérique du neutron dans le noyau ; il est décrit par la fonction d'onde  $\psi(r) = f(r)/r$ . Déterminer la forme de  $f(r)$ .
2. Montrer que l'énergie  $E$  du neutron est quantifiée.

On donne l'équation de Schrödinger et l'expression du laplacien scalaire à symétrie sphérique :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + U \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad \text{et} \quad \Delta \psi(r) = \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d\psi}{dr} \right)$$

## D. État non stationnaire

### 26. Puits infini et état non stationnaire

On étudie l'évolution d'une particule quantique, de masse  $m$ , piégée dans un puits de potentiel infini de largeur  $a$ . Le potentiel dans le puits est nul. On considère un état stationnaire de la particule quantique, d'énergie  $E_n$ , associé à une fonction d'onde de la forme où  $n = 1, 2, 3, \dots$  :

$$\varphi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$

1. Donner l'expression de l'énergie  $E_n$ . On pose  $E_1 = \hbar\omega_0$ . Exprimer  $\omega_0$  en fonction de  $a$ ,  $m$  et  $\hbar$ . Exprimer ensuite  $E_n$  en fonction de  $n$ ,  $\hbar$  et  $\omega_0$ .
2. On considère l'état décrit par la fonction d'onde  $\psi_n(x, t)$  telle que  $\psi_n(x, t = 0) = \varphi_n(x)$ . Donner l'expression de  $\psi_n(x, t)$  pour  $t > 0$ .
3. On considère maintenant l'état décrit par la fonction d'onde  $\psi(x, t)$  telle que :

$$\psi(x, t = 0) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_1(x) + \varphi_2(x))$$

En utilisant le résultat de la question précédente, donner l'expression de  $\psi(x, t)$  pour  $t > 0$ .

4. On définit les deux états suivants :

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

Exprimer  $\psi(x, t)$  en fonction de  $\varphi_g(x)$  et  $\varphi_d(x)$ . En déduire l'expression de la densité de probabilité de présence  $\frac{dP(x, t)}{dx} = |\psi(x, t)|^2$ . Montrer qu'elle oscille à une fréquence  $\nu$  que l'on exprimera en fonction de  $\omega_0$  et  $h$  puis en fonction de  $E_2$ ,  $E_1$  et  $h$ .

5. Comment évolue la densité de probabilité de présence de la particule quantique dans le puits en fonction du temps ?