

Exercices : 29 – Évolution d'un quanton

— Solutions —

A. Généralités

1. Fil quantique

Réponses : la forme choisie pour $\varphi(x)$ est celle relative à une particule quantique libre se déplaçant selon l'axe (Ox) (pour $k > 0$, sinon c'est le sens opposé). En effet, l'amplitude de probabilité $\psi(x, t)$ correspondante est $A \exp i(kx - \omega t)$ et est une onde plane progressive monochromatique de vecteur d'onde $k \vec{e}_x$. L'impulsion associée est $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ par relation de DE BROGLIE et l'énergie associée est $E = \hbar \omega$ par relation de PLANCK-EINSTEIN. Cette fonction d'onde n'est pas normalisable. L'équation de SCHRÖDINGER indépendante du temps pour le quanton non relativiste permet d'accéder à $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ ce qui est cohérent car on retrouve là l'énergie cinétique d'une particule libre $p^2/(2m)$. En introduisant dans l'expression précédente l'expression $E = \hbar \omega$, on déduit la relation de dispersion des composantes du paquet d'ondes de probabilité $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$ d'où la vitesse de groupe suivant (Ox) $v_x = \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k}{m}$. Le résultat est cohérent compte tenu de la relation de DE BROGLIE $\vec{p} = \hbar \vec{k}$. Un électron a une probabilité de présence de 100 % dans le fil, soit $\int_{x=0}^{\ell} |\varphi(x)|^2 dx = 1$ donc $A = \frac{1}{\sqrt{\ell}}$. Finalement, $\varphi(x) = \frac{1}{\sqrt{\ell}} \exp ikx$. La densité de probabilité de présence de l'électron est uniforme dans le modèle proposé (où l'on néglige les effets de bord en $x = 0$ et $x = \ell$) : $\frac{dP(x)}{dx} = |\varphi(x)|^2 = \frac{1}{\ell}$. On considère une section droite du fil à une abscisse x quelconque. Comme un électron se déplace à la vitesse v_x , la probabilité qu'il traverse la section considérée pendant la durée dt est égale à sa probabilité de présence sur une longueur $v_x dt$ située juste en amont de cette surface. La charge électrique qui traverse celle-ci, dans le sens des x croissants, pendant la durée dt est $d^2Q = (-e) \frac{1}{\ell} \frac{\ell}{\pi} (v_x dt) dk = -\frac{e}{\pi} \frac{\hbar k}{m} dt dk$. On en déduit l'intensité du courant électrique associé $dI = \frac{d^2Q}{dt} = -\frac{e}{\pi} \frac{\hbar k}{m} dk$. On intègre l'expression précédente de dI pour k variant entre k_2 et k_1 (extensivité du courant et songer au sens de déplacement des électrons suivant les x décroissants) : $I = \int_{k_2}^{k_1} -\frac{e}{\pi} \frac{\hbar k}{m} dk = -\frac{e\hbar}{2\pi m} (k_1^2 - k_2^2)$. Or, $eU = E_1 - E_2 = \frac{\hbar^2}{2m} (k_1^2 - k_2^2)$ donc $I = -GU$ avec $G = \frac{2e^2}{h}$. G représente la conductance équivalente du fil et ne dépend pas de sa géométrie mais uniquement des constantes fondamentales e et h . Numériquement, $G = 7,73 \cdot 10^{-5} \text{ S}$ et $R = \frac{1}{G} = 12,9 \text{ k}\Omega$. Cette valeur de R constitue la base d'un étalon de résistance électrique utile en métrologie, par exemple pour la balance du watt conduisant à une meilleure définition du kilogramme depuis le 20 mai 2019.

2. Équation de Klein-Gordon

Réponses : on injecte l'onde plane proposée dans l'équation de KLEIN-GORDON, on arrive alors à $(-\frac{\omega^2}{c^2} + k^2 + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2})\psi(M, t) = 0$. L'amplitude de probabilité ne doit pas être identiquement nulle donc on déduit la relation de dispersion de KLEIN-GORDON $k^2 = \frac{\omega^2 - \omega_c^2}{c^2}$ avec $\omega_c = \frac{mc^2}{\hbar}$. Toutes les fréquences ne peuvent pas se propager librement puisque le vecteur d'onde doit être réel : il faut respecter la condition en pulsation $\omega \geq \omega_c$ où ω_c est une pulsation de coupure, soit la condition fréquentielle $f > f_c = \frac{mc^2}{h}$. On multiplie la relation de dispersion précédente par $\hbar^2 c^2$ et il vient $\hbar^2 k^2 c^2 = \hbar^2 \omega^2 - m^2 c^4$. En utilisant les relations de DE BROGLIE $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ et de PLANCK-EINSTEIN $E = \hbar \omega$, on reconnaît $p^2 c^2 = E^2 - m^2 c^4$ qui n'est qu'une reformulation du carré de la norme du quadrivecteur impulsion-énergie de la relativité restreinte. Autrement dit, l'équation de KLEIN-GORDON est compatible avec les relations de DE BROGLIE et de PLANCK-EINSTEIN de la physique quantique, ainsi qu'avec la relativité restreinte (ce qui n'est pas le cas de l'équation de SCHRÖDINGER). En fait, SCHRÖDINGER avait dans un premier temps écrit une équation de KLEIN-GORDON en raisonnant à partir de la relativité restreinte et avait rebroussé chemin au profit de l'équation à son nom en raison des désaccords qu'il obtenait avec l'expérience (notamment pour l'atome d'hydrogène). L'équation de SCHRÖDINGER (non relativiste!) marchait mieux mais c'était une chance ! En effet, l'approche relativiste est meilleure si l'on songe à prendre en compte dans la théorie le spin (caractéristique purement quantique). La vitesse de groupe du paquet d'ondes est (en choisissant de travailler en grandeur absolue, sans restriction sur l'analyse physique) $v_g = \frac{d\omega}{dk}$. Or, par différentielle de la relation de dispersion de KLEIN-GORDON, $2k dk = \frac{2\omega d\omega}{c^2}$ donc $v_g = \frac{c^2}{\omega/k} = \frac{c^2}{v_\varphi}$ soit $v_g = c \sqrt{1 - (\frac{\omega_c}{\omega})^2}$. En remplaçant ω_c et en utilisant la relation de PLANCK-EINSTEIN, on peut conclure que $v_g = c \sqrt{1 - \frac{m^2 c^4}{E^2}}$. Ceci induit, après inversion, la loi $E = \gamma m c^2$ avec $\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - (\frac{v_g}{c})^2}}$ qui est connue en relativité restreinte pour être l'énergie totale d'une particule libre de vitesse v_g (le facteur γ est appelé facteur de contraction et joue dans les phénomènes relativistes de contraction des longueurs et de dilatation des durées). Dans l'approche quantique, la vitesse de groupe du paquet d'ondes d'amplitude de probabilité remplace la vitesse corpusculaire. Pour des vitesses non relativistes ($v_g \ll c$), $E \simeq m c^2 + \frac{1}{2} m v_g^2$. On reconnaît la somme de l'énergie de masse de la particule quantique avec son énergie cinétique classique (il n'y a pas d'énergie potentielle car toute l'étude est menée sur un quanton libre).

B. Marche de potentiel

3. Analyse sur une marche

Réponses : les trajectoires classiques sont tout à fait conformes au phénomène de réflexion et de réfraction des ondes, elles correspondent de plus à la position moyenne du quanton (maximum du paquet d'ondes), on constate que la vitesse après la marche est inférieure à celle avant la marche ce qui est normal puisque l'énergie cinétique est plus faible, on perçoit des interférences quantiques qui sont dues à la superposition de l'onde incidente et de l'onde réfléchie, le paquet d'onde tend à s'élargir du fait de la dispersion ; de la même façon qu'avant les trajectoires classiques correspondent au phénomène de réflexion des ondes, elles correspondent de plus à la position moyenne du quanton (maximum du paquet d'ondes), on constate malgré tout un retard sur la figure, il est la conséquence de la présence d'une onde évanescence dans la marche, il y a aussi des interférences quantiques entre l'onde incidente et l'onde réfléchie.

4. Retard à la réflexion sur une marche

Réponses : L'état stationnaire d'énergie $E < V_0$ doit avoir une fonction d'onde spatiale $\varphi_{es}(x)$ solution de l'équation de SCHRÖDINGER indépendante du temps, ce qui conduit à $\frac{d^2 \varphi_{es}(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x)] \varphi_{es}(x) = 0$. Dans le domaine $x < 0$, cela donne une solution de la forme $\varphi_{es}(x < 0) = A \exp i k x + A' \exp -i k x$ et, dans le domaine $x > 0$, $\varphi_{es}(x > 0) = B \exp \rho x + B' \exp -\rho x$ avec $\rho = \frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar} = \sqrt{K_0^2 - k^2}$. Comme la fonction d'onde doit être bornée pour $x \rightarrow \infty$, on sait déjà que $B = 0$. De plus, on doit traduire la continuité de la fonction d'onde en $x = 0$, ainsi que de sa dérivée première en $x = 0$ (potentiel borné), d'où $A + A' = B'$ et $i k (A - A') = -\rho B'$ soit $A' = \frac{k-i\rho}{k+i\rho} A$ et $B' = \frac{2k}{k+i\rho} A$. La forme finale de l'état stationnaire demandé est, en fonction d'onde spatiale, $\varphi_{es}(x \leq 0) = A \left[\exp i k x + \frac{k-i\rho}{k+i\rho} \exp -i k x \right]$ et $\varphi_{es}(x \geq 0) = A \frac{2k}{k+i\rho} \exp -\rho x$. La fonction d'onde complète se déduit par la relation $\psi_{es}(x, t) = \varphi_{es}(x) \exp -i E t / \hbar$. Le facteur A n'est pas déterminable, sauf éventuellement pour un flux de quantons. On peut adopter une interprétation statistique (ou hydrodynamique) de cet état stationnaire : pour un flux de quantons indépendants incidents d'énergie E (premier terme de $\varphi_{es}(x \leq 0)$), il y a création d'un flux de quantons réfléchis (second terme de $\varphi_{es}(x \leq 0)$) et évanescence sous la marche de potentiel (vu l'expression de $\varphi_{es}(x \geq 0)$). Il s'agit d'une situation de réflexion totale des quantons qui n'empêche pas la possibilité de leur présence dans la marche ! On peut d'ailleurs vérifier que le coefficient de réflexion est unitaire. La distance caractéristique δ cherchée est la distance caractéristique de pénétration des quantons sous la marche (effet purement quantique !), c'est-à-dire $\delta = \frac{1}{\rho} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0-E)}} = \frac{1}{\sqrt{K_0^2 - k^2}}$. La fonction d'onde de l'état stationnaire n'est pas normalisable, donc elle ne peut pas représenter à elle seule la particule quantique (quanton). On ne peut que lui associer la vision statistique précédente, à grand nombre de quantons indépendants. On peut construire, par superposition d'états stationnaires d'énergies correspondant à l'intervalle équivalent $[0; K_0]$ en valeur de vecteur d'onde, la fonction d'onde dans le domaine $x < 0$ $\psi(x < 0, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{K_0} g(\chi) [\exp i [\chi x - \omega(\chi) t] + \exp -2i\theta(\chi) \exp -i [\chi x + \omega(\chi) t]] d\chi$ avec $\exp -2i\theta(\chi) = \frac{\chi - i\rho(\chi)}{\chi + i\rho(\chi)}$ et $\rho(\chi) = \sqrt{K_0^2 - \chi^2}$. Par conséquent, on déduit l'écriture $\psi(x < 0, t) = \psi_1(x < 0, t) + \psi_2(x < 0, t)$ avec $\psi_1(x < 0, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{K_0} g(\chi) \exp i [\chi x - \omega(\chi) t] d\chi$ et $\psi_2(x < 0, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{K_0} g(\chi) \exp -i [\chi x + \omega(\chi) t + 2\theta(\chi)] d\chi$ et $\theta(\chi) = \arctan \left(\frac{\sqrt{K_0^2 - \chi^2}}{\chi} \right)$. La dernière relation vient de l'identification de la tangente de $\theta(\chi)$ et du signe positif de son cosinus. Le terme $\psi_1(x < 0, t)$ représente un paquet d'ondes d'amplitude de probabilité incident (propagation suivant les x croissants), tandis que le terme $\psi_2(x < 0, t)$ représente un paquet d'ondes d'amplitude de probabilité réfléchi (propagation suivant les x décroissants). Ces deux paquets permettent de décrire l'aspect probabiliste en présence pour le quanton pour le domaine en amont de la marche de potentiel. Même si ce n'est pas demandé, on peut parfaitement écrire le paquet d'ondes d'amplitude de probabilité pour le domaine $x > 0$, c'est-à-dire dans la marche, toujours par superposition des états stationnaires : $\psi(x > 0, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{K_0} g(\chi) \frac{2k}{k+i\rho} \exp -\rho(\chi) x - i \omega(\chi) t d\chi$. Il s'agit d'un paquet d'ondes évanescence. On utilise la méthode de la phase stationnaire. Pour le paquet d'ondes incident $\psi_1(x < 0, t)$, on a une phase propagative $\phi_1(\chi, x, t) = \chi x - \omega(\chi) t$. On traduit sa stationnarité pour k_0 (là où le spectre $g(\chi)$ est piqué !), ce qui revient à avoir un maximum du paquet par interférences quantiques constructives de ses composantes : $0 = \frac{\partial \phi_1}{\partial \chi}(k_0, x_1, t) = x_1(t) - \frac{\partial \omega}{\partial \chi_{k_0}} t$ donc $x_1(t) = \frac{\hbar k_0}{m} t$. On effectue le même raisonnement pour le paquet d'ondes réfléchi $\psi_2(x < 0, t)$. La phase propagative est cette fois-ci $\phi_2(\chi, x, t) = -\chi x - \omega(\chi) t - 2\theta(\chi)$. On traduit sa stationnarité pour k_0 (là où le spectre $g(\chi)$ est piqué !), soit $0 = \frac{\partial \phi_2}{\partial \chi}(k_0, x_2, t) = -x_2(t) - \frac{\partial \omega}{\partial \chi_{k_0}} t - 2 \frac{\partial \theta}{\partial \chi_{k_0}}$ donc $x_2(t) = -\frac{\hbar k_0}{m} t + \frac{2}{\sqrt{K_0^2 - k_0^2}}$. Pour les instants $t < 0$, seul $x_1(t)$ a un sens car il est bien négatif ($x_2(t)$ est positif, donc en dehors du domaine de validité du paquet d'ondes associé). On note que $x_1(t)$ est une abscisse croissante de façon affine : elle repère le maximum de probabilité de présence du quanton incident et le paquet d'ondes réfléchi est négligeable. Ce maximum se déplace à une vitesse qui est la vitesse de groupe du paquet d'ondes et qui correspond à la vitesse de la particule classique équivalente par relation de DE BROGLIE. Pour l'instant

$t = 0$, $x_1(t)$ s'annule, ce qui signifie que le quanton incident présente un maximum de probabilité de présence à la zone de transition $x = 0$. C'est en fait la zone de réflexion totale de celui-ci. On constate qu'au même instant, $x_2(t)$ est encore positive et n'a pas toujours pas de sens physique : le paquet d'ondes incident interagit de façon complexe avec la zone de transition du potentiel (il y a en fait des interférences quantiques entre paquets incident et réfléchi, comme visualisé en cours). Le laps de temps correspondant est $[0; \tau]$ avec l'instant τ défini par le moment où $x_2(t)$ s'annule, soit $\tau = \frac{2m}{\hbar k_0 \sqrt{K_0^2 - k_0^2}}$. Pour $t > \tau$, $x_2(t)$ est négatif et décrit le déplacement du maximum de probabilité de présence du quanton réfléchi (le paquet d'ondes incident est devenu négligeable). Ce déplacement se fait en sens inverse de l'axe des x , avec une vitesse équivalente à celle d'une particule classique par relation de DE BROGLIE. Force est de constater qu'il y a un retard τ pris à la réflexion, retard purement quantique incompréhensible en mécanique classique (où la particule est instantanément réfléchie). On peut interpréter ce retard en notant qu'il y a évanescence du quanton sous la marche lors de sa réflexion, ce qui lui fait prendre du retard ! De façon imagée, il lui faut un temps τ pour rebrousser chemin sous la marche.

5. Réciprocité et système neutron-noyau

Réponses : pour un quanton matériel non relativiste, on recherche les états stationnaires qui sont solutions de l'équation de SCHRÖDINGER indépendante du temps $\frac{d^2\varphi}{dx^2}(x) + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(x)]\varphi(x) = 0$. Comme $E - V(x) > 0$ et que $V(x)$ est constante par morceaux, il vient la forme des solutions générales $\varphi(x < 0) = A_1 \exp^{ik_1 x} + A'_1 \exp^{-ik_1 x}$ et $\varphi(x > 0) = A_2 \exp^{ik_2 x} + A'_2 \exp^{-ik_2 x}$ avec $k_1 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E}$ et $k_2 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)}$. De plus, il y a continuité de φ en $x = 0$, ainsi que de sa dérivée première (énergie potentielle bornée), donc $A_1 + A'_1 = A_2 + A'_2$ et $ik_1(A_1 - A'_1) = ik_2(A_2 - A'_2)$. En supposant que le quanton vient de $-\infty$, on peut adopter $A'_2 = 0$ car l'onde d'amplitude de probabilité correspondante évolue dans le domaine des $x > 0$ dans le sens des x décroissants. Par résolution élémentaire, il vient $\varphi(x \leq 0) = A_1 \exp^{ik_1 x} + r A_1 \exp^{-ik_1 x}$ et $\varphi(x \geq 0) = \tau A_1 \exp^{ik_2 x}$ avec $r = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}$ et $\tau = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}$. En fait, seule l'expression pour $x \leq 0$ est utile dans le cadre de l'exercice. Pour rappel, la constante A_1 est fixée par le choix du paquet d'ondes complet décrivant le quanton réel localisé et en pensant à la normalisation de la fonction d'onde. De plus, on peut visualiser le résultat précédent comme suit : une onde incidente $A_1 \exp^{i(k_1 x - \omega t)}$ avec $\omega = E/\hbar$ est partiellement réfléchie en $x = 0$ et partiellement transmise et les coefficients r et τ caractérisent les modifications d'amplitudes correspondantes. La fonction d'onde oscille plus vite là où l'énergie cinétique $E - V(x)$ est plus grande. On s'intéresse enfin aux vecteurs densité de courant de probabilité $\vec{J}(M) = |\Psi_{esn}(M, t)|^2 \frac{\vec{p}}{m} = |\varphi_{nl}(M)|^2 \frac{\hbar \vec{k}}{m}$ à associer aux ondes incidente et réfléchie d'amplitude de probabilité puisque, par définition, $R = \left| \frac{J_r}{J_i} \right|$. On obtient (en projection sur e_x), $J_i = |A_1|^2 \frac{\hbar k_1}{m}$ et $J_r = -|r A_1|^2 \frac{\hbar k_1}{m}$ donc $R = |r|^2 = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2$. Il est clair que le coefficient R est inchangé par échange de k_1 et k_2 . Cela veut dire que l'on a la même valeur du coefficient R dans le cas d'un quanton incident d'énergie $E > V_0$ sur une marche de potentiel descendant de la valeur V_0 à la valeur 0 (chose très surprenante si l'on s'arrête à une vision de mécanique classique) ! De façon très imagée, on dit qu'en physique quantique, un troupeau de moutons quantiques indépendants se dirigeant à vitesse constante vers un précipice (tout cela à l'échelle microscopique bien sûr) ne tombe pas forcément entièrement au fond de celui-ci : certains font demi-tour. . . . Pour estimer le coefficient de probabilité de réflexion R , on approxime le changement d'énergie potentielle du quanton d'énergie initiale $E = E_c = 5 \text{ MeV}$ par celui d'une marche de potentiel descendant de 0 à $V'_0 = -50 \text{ MeV}$. Par le théorème de réciprocité et puisque l'on peut choisir le zéro d'énergie à notre guise (cela ne change pas les densités de probabilité), on peut considérer plutôt la situation d'un quanton d'énergie $E' = 55 \text{ MeV}$ arrivant sur une marche de potentiel montante passant de 0 à $V_0 = -V'_0 = 50 \text{ MeV}$, ce qui nous place exactement dans la même situation que celle étudiée précédemment. Alors, $R = \frac{1 - \sqrt{1 - V_0/E'}}{1 + \sqrt{1 - V_0/E'}}^2 = 29 \%$. Les neutrons ont une probabilité plus grande de rentrer dans le noyau et d'éventuellement pouvoir y induire une fission que d'être réfléchi mais cette probabilité de réflexion est loin d'être négligeable !

6. Falaise de potentiel

Réponses : la particule classique continue son chemin vers $x \rightarrow \infty$ en gagnant de l'énergie donc de la vitesse lorsqu'elle passe en $x = 0$, la particule quantique aura une probabilité non nulle de réflexion par contre ; l'équation de SCHRÖDINGER indépendante du temps est $\frac{d^2\varphi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\varphi = 0$ pour la région 1 et $\frac{d^2\varphi}{dx^2} + \frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}\varphi = 0$ pour la région 2 d'où $k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ et $k_2 = \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar}$ et donc ; on écrit la continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée $1 + r = t$ et $\varphi(x) = A \exp ik_1 x + r A \exp -ik_1 x$ dans la région 1 et par $\varphi(x) = t A \exp ik_2 x$ dans la région 2 puisque le quanton provient de $-\infty$; on a $1 + r = t$ et $ik_1(1 - r) = ik_2 t$ d'où $r = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}$ et $t = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}$; on a $R = |r|^2 = \left(\frac{\sqrt{E} - \sqrt{E+V_0}}{\sqrt{E} + \sqrt{E+V_0}} \right)^2$, pour $E = V_0/2$, on trouve $R = 0,07$, la probabilité de réflexion est d'environ 7%.

7. Enrichissement isotopique

Réponses : si $E < V_0$ on constate que $R = |r|^2 = 1$ la probabilité de réflexion est la même pour chaque isotope, on ne peut pas les séparer, il faut $E > V_0$; l'énergie du quanton correspond pour $x < 0$ à son énergie cinétique, l'isotope le plus lourd possède l'énergie la plus élevée, on peut prévoir que celui qui a l'énergie la plus élevée sera le moins réfléchi car si l'énergie est très élevée par rapport à la marche de potentiel la particule ne sentira pour ainsi dire pas le changement, le faisceau réfléchi est enrichi en isotope le plus léger ; on peut écrire que $R = |r|^2 = \left(\frac{\sqrt{E} - \sqrt{E - V_0}}{\sqrt{E} + \sqrt{E - V_0}} \right)^2$ et donc $R = \left(\frac{1 - \sqrt{1 - V_0/E}}{1 + \sqrt{1 - V_0/E}} \right)^2$ avec $\sqrt{1 - \frac{V_0}{E}} \simeq 1 - \frac{V_0}{2E}$, on en déduit que $R \simeq \left(\frac{V_0}{4E} \right)^2$ et donc $R = \frac{V_0^2}{16E^2}$; on a $E = \frac{1}{2}mv^2$ et donc $\frac{R_1}{R_2} = \frac{m_2^2}{m_1^2}$, on voit bien que si $m_1 > m_2$ alors $R_1 < R_2$ ce qui avait été prévu qualitativement au départ.

8. Barrière de potentiel

Réponses : la particule classique ralentit en $x = -a : 2$ de façon brutale comme dans un choc et accélère de façon brutale en $a/2$; dans les régions I et III on a $\frac{d^2\varphi}{dx^2} + k^2\varphi(x) = 0$ et dans la région II $\frac{d^2\varphi}{dx^2} + K^2\varphi(x) = 0$, on a $\varphi_I(x) = A_1 \exp ikx + B_1 \exp -ikx$, $\varphi_{II}(x) = A_2 \exp iKx + B_2 \exp -iKx$ et $\varphi_{III}(x) = A_3 \exp ikx$, il y a continuité de φ d'où $\varphi_I(-a/2) = \varphi_{II}(-a/2)$ et $\varphi_{III}(a/2) = \varphi_{II}(a/2)$, le potentiel étant borné en tout point, on a aussi continuité de la dérivée $\left. \frac{d\varphi_I}{dx} \right|_{-a/2} = \left. \frac{d\varphi_{II}}{dx} \right|_{-a/2}$ et $\left. \frac{d\varphi_{II}}{dx} \right|_{a/2} = \left. \frac{d\varphi_{III}}{dx} \right|_{a/2}$; par conservation de la loi de probabilité, on a $R = 1 - T$; représentation graphique de T et de R sur le graphique de la figure 1 ; à chaque fois que $Ka = n\pi$, on a $T = 1$, cela se produit lorsque $a = n \frac{\hbar}{2\sqrt{2m(E - V_0)}}$, la longueur d'onde de DE BROGLIE est $\lambda_{DB} = \frac{\hbar}{p}$ avec $p = \sqrt{2m(E - V_0)}$, on voit que la condition précédente revient à $a = n \frac{\lambda_{DB}}{2}$ qui est équivalente à une condition d'ondes stationnaires entre deux nœuds comme par exemple sur la corde de MELDE ; $a_n = na_1$ avec $a_1 = 250$ pm, on a $a = 500$ pm $= 2a_1$, il y a bien transmission intégrale.

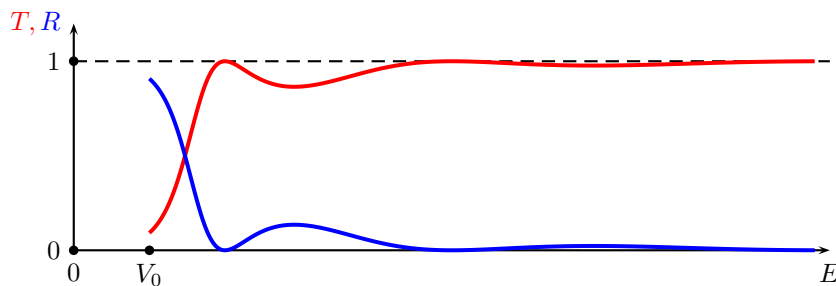


FIGURE 1 – Coefficient de transmission T et de réflexion R

C. Puits de potentiel

9. Température de Hawking

Réponses : pour se libérer de l'attraction gravitationnelle, une particule de masse m doit pouvoir atteindre $r \rightarrow \infty$ avec une vitesse nulle, la conservation de l'énergie mécanique donne $\frac{1}{2}mv_{lib}^2 - \frac{GMm}{R} = 0 + 0$ où R est le rayon de la Terre, $v_{lib} = \sqrt{\frac{2GM}{R}}$, sur Terre, on trouve $v_{lib} = 11,2 \text{ km} \cdot \text{s}^{-1}$; l'horizon est obtenu pour $v_{lib} = c$ d'où $R_h = \frac{2GM}{c^2}$, pour la Terre on trouve $R_h = 8,9 \text{ mm}$, pour le Soleil $R_h = 2,96 \text{ km}$; on a $k_B T = \frac{\hbar c^3}{8\pi G M}$, or \hbar est en $\text{J} \cdot \text{s}$ et $k_B T$ en J , il suffit de montrer que $\frac{GM}{c^3}$ est en s , lorsque l'on applique la relation de Dynamique pour un mouvement circulaire de gravitation on écrit que $m \frac{v^2}{R} = \frac{GMm}{R^2}$ d'où $v^2 R = GM$, on a donc $\frac{GM}{c^3} \equiv \frac{v^2 R}{c^3}$, cela suffit à prouver que ce rapport est en s , T_H est donc bien une température.

10. État fondamental du puits infini

Réponses : la fonction d'onde doit s'annuler en $x = 0$ et $x = a$, dans le mode fondamental elle ne s'annule pas entre les deux $\varphi(x) = A \sin \frac{\pi x}{a}$, on doit normaliser la probabilité $\int_0^a \varphi^2(x) dx = 1$ d'où $A = \sqrt{\frac{2}{a}}$; $\langle x \rangle = \frac{a}{2}$; $\langle x^2 \rangle = a^2 \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2\pi^2} \right)$; $\Delta x = a \sqrt{\left(\frac{1}{12} - \frac{1}{2\pi^2} \right)}$, on trouve $\Delta x = 0,18a < a$ ce qui confirme bien le confinement de la particule ; d'après la relation d'indétermination de HEISENBERG, on a $\Delta p_x = \frac{\hbar}{2\Delta x}$.

11. Puits harmonique

Réponses : $E_m = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 + \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2$ constante, on dérive par rapport au temps $\dot{x} + \omega_0^2 x = 0$; une solution est $x = x_0 \cos \omega_0 t$ et $\dot{x} = -\omega_0 x_0 \sin \omega_0 t$; l'énergie est $E_m = \frac{1}{2}m\omega_0^2 x_0^2$; lorsque $x_0 \rightarrow 0$, l'énergie minimale tend vers 0; en Mécanique quantique, cela n'est pas possible car on connaîtrait alors à la fois la position et la quantité de mouvement, la particule est localisée sur $\Delta x \simeq x_0$ et sa quantité de mouvement sur $\Delta p_x \simeq m\omega_0 x_0$, d'après HEISENBERG $\Delta x \times \Delta p_x \geq \hbar$, on a $m\omega_0 x_0^2 \geq \hbar$ et donc $E = \frac{1}{2}m\omega_0^2 x_0^2 \geq \frac{1}{2}\hbar\omega_0$.

12. Oscillateur harmonique quantique

Réponses : l'équation de SCHRÖDINGER est $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x)\psi$ donne $\frac{d^2 \varphi}{dx^2} + \frac{2m(E-V(x))}{\hbar^2} \varphi(x) = 0$, $\int_{-\infty}^{\infty} |\varphi(x)|^2 dx = 1$ d'où $N = \left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{1/4}$, $\langle x \rangle = 0$ par symétrie du puits de potentiel, on a $E\varphi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi}{dx^2} + V(x)\varphi(x)$ d'où $E = \frac{\hbar^2}{ma^2} + \left(\frac{1}{2}m\omega_0^2 - \frac{2\hbar^2}{ma^4}\right)x^2$, E ne peut pas dépendre de x donc $E = \frac{\hbar^2}{ma^2}$ et $\omega_0 = \frac{2\hbar}{ma^2}$, on retrouve bien le fait que $E = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega_0$, ici pour $n = 0$ qui est le fondamental.

13. Potentiel inconnu

Réponses : la probabilité est non nulle entre $-\infty$ et $+\infty$, c'est un état de diffusion; les oscillations résultent d'interférences entre l'onde incidente et une onde réfléchie; les oscillations sont dans les deux cas de période constante mais plus grande pour $x \leq -a/2$ que pour $-a/2 \leq x \leq a/2$, dans chaque cas on a donc un potentiel constant puisque $\varphi(x)$ vérifie l'équation $\frac{d^2 \varphi}{dx^2} + \frac{2m(E-V)}{\hbar^2} \varphi = 0$, le potentiel est donc constant par morceau pour ces deux régions, on pose $k = \frac{\sqrt{2m(E-V)}}{\hbar}$ comme V est nul à l'infini, on a $V(x) = 0$ pour $x \in]-\infty; -a/2]$ et $V(x) = -V_0$ avec $V_0 > 0$ pour $x \in [-a/2; a/2]$ car la période étant plus courte on a k plus grand puisque la période est π/k , pour $x \geq a/2$, on a une probabilité constante, il n'y a pas d'onde réfléchie, on a une forme onde plane progressive dans le sens x croissant, le potentiel est constant donc nul puisque nul en $+\infty$; $\varphi_1 = A_1 \exp ik_1 x + B_1 \exp -ik_1 x$, puis $\varphi_2 = A_2 \exp ik_2 x + B_2 \exp -ik_2 x$ et enfin $\varphi_3 = A_3 \exp ik_1 x$ avec $k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ et $k_2 = \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar}$, on raccorde les fonctions en disant que $\varphi(x)$ est continue et que sa dérivée $\frac{d\varphi}{dx}$ l'est aussi en $\pm a/2$.

14. Puits rectangulaire fini

Réponses : on écrit que les ondes stationnaires vérifient la condition de la corde de MELDE à avoir $2a = n\frac{\lambda}{2}$, comme $\lambda = \frac{h}{p}$ et que $E = \frac{p^2}{2m}$, on trouve $E_n = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2}$; pour l'intervalle $|x| \leq a$, on a $\frac{d^2 \varphi}{dx^2} + k^2 \varphi = 0$ et pour le reste de l'espace accessible $\frac{d^2 \varphi}{dx^2} - \mu^2 \varphi = 0$; on a $\varphi_1(x) = A_1 \exp \mu x$, $\varphi_2(x) = A_2 \exp ikx + B_2 \exp -ikx$ et $\varphi_3(x) = A_3 \exp -\mu x$; on a $A_1 \exp -\mu a = A_2 \exp -ika + B_2 \exp ika$ et $\mu A_1 \exp -i\mu a = ik(A_2 \exp -ika - B_2 \exp ika)$ pour $x = -a$ et $A_3 \exp -\mu a = A_2 \exp ika + B_2 \exp -ika$ et $-\mu A_3 \exp -i\mu a = ik(A_2 \exp ika - B_2 \exp -ika)$ pour $x = a$; si on retient les fonctions paires alors $A_1 = A_3$ et $A_2 = B_2$, on trouve alors $ka \tan ka = \mu a$, si on retient les fonctions impaires alors $A_1 = -A_3$ et $A_2 = -B_2$ et on obtient $ka \cotan ka = -\mu a$; avec la définition de k et de μ , on a immédiatement $(ka)^2 + (\mu a)^2 = \frac{2ma^2 V_0}{\hbar^2}$, ceci est l'équation d'un cercle, on peut représenter $Y = \mu a$ en fonction de $X = ka$, on trace $Y = X \tan X$ et $Y = -X \cotan X$ et le cercle précédent, les intersections sont les solutions possibles des états stationnaires, si le rayon du cercle est tel que $\frac{\sqrt{2ma^2 V_0}}{\hbar} < \frac{\pi}{2}$, il n'y a qu'une seule solution sinon il y a des solutions à chaque intersection entre les courbes $Y = X \tan X$ et $Y = -X \cotan X$ et le cercle, ceci se produit pour $V_0 < \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2}$; si $V_0 \gg E$ alors on retrouve le puits infini puisque l'intersection entre le cercle et les courbes s'effectue toujours pour $X = ka = n\frac{\pi}{2}$ d'où $E_n = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2}$.

15. Molécule de benzène - C₆H₆

Réponses : l'équation est $\frac{d^2 \varphi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \varphi = 0$, on a donc $k = \pm \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$, \pm pour représenter les deux sens possibles de parcours du cercle, la solution est donc bien de la forme proposée $\varphi(x) = A \exp ikx$, on a $\int_0^{2\pi a} |\varphi|^2 dx = 1$ d'où $A^2 2\pi a = 1$, on en déduit $A = \frac{1}{\sqrt{2\pi a}}$; la fonction d'onde ne peut pas présenter de discontinuité lorsqu'on fait un tour $\varphi(0) = \varphi(2\pi a)$; on doit donc avoir $2\pi ka = n2\pi$ d'où $k = \frac{n}{a}$ et par conséquent $E_n = n^2 \frac{\hbar^2}{2ma^2}$, $n = \pm 1$ est l'état de plus basse énergie; on met 2×2 (en raison des spins) électrons sur le niveau $n = \pm 1$, puis 2 sur le niveau E_2 pour $n = \pm 2$; l'absorption correspond au minimum à une transition du niveau $n = \pm 1$ au niveau $n = \pm 2$, la différence d'énergie de transition correspond à la longueur d'onde émise $E_2 - E_1 = \frac{2\pi \hbar c}{\lambda} = \frac{3\hbar^2}{2ma^2}$, on trouve $\lambda = \frac{4\pi m a^2 c}{3\hbar}$ ce qui donne $a = \sqrt{\frac{3\hbar \lambda}{4\pi m c}}$, on trouve $a \simeq 150$ pm, cette distance correspond bien à l'ordre de grandeur attendu.

16. Puits de potentiel semi-infini

Réponses : $\varphi(x < 0) = 0$ car le potentiel est infini en $x = 0$, les équations indépendantes du temps sont $\frac{d^2\varphi}{dx^2} + k^2\varphi = 0$ et $\frac{d^2\varphi}{dx^2} - \alpha^2\varphi = 0$ d'où la forme des solutions proposées car la solution $\exp \alpha x$ diverge en $x \rightarrow \infty$; on écrit $\varphi(x < 0) = 0$ et la continuité de φ et $\frac{d\varphi}{dx}$ en $x = a$, on obtient $A + B = 0$ $2Ai \sin ka = C \exp -\alpha a$ et $2Aik \cos ka = -\alpha C \exp -\alpha a$, on en déduit que $\alpha a = -ka \cotan ka$, on pose $X = ka$ et $Y = \alpha a$, on obtient alors l'équation $Y = -X \cotan X$ et d'après les définitions de k et de α , on a $X^2 + Y^2 = \frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2} = R^2$, l'étude est graphique ou numérique pour $Y > 0$, on cherche les intersections entre le quart de cercle pour $X > 0$ et $Y > 0$ et la courbe $-X \cotan X$, on voit que la première intersection se situe entre $X_1 = ka = \pi/2$ et $X_2 = \pi$, le rayon du cercle étant fixé, le nombre d'états liés est donc fini car le nombre de points d'intersection est fini, on a donc $\pi/2 < \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar} a < \pi$, on obtient la condition $\frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2} < E + V_0 < \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$ avec $E < 0$ et $E + V_0 > 0$, pour comparer au puits infini de potentiel nul, on prolonge au cas $E > 0$ et $V_0 = 0$ d'où la relation $\frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2} < E < \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$, pour le puits infini on a la condition de quantification issue de $\sin k'a = 0$ d'où $k'a = n\pi$ avec $k' = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ et donc une énergie donnée par $E_n = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$ de fondamental $\frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$, on constate que l'énergie de liaison dans l'état fondamental du puits semi-infini est inférieure à celle du fondamental du puits infini, l'onde évanescence du côté $x > a$ élargit en quelque sorte le puits et plus le puits est large plus l'énergie minimale de confinement est petite.

17. Courant tunnel

Réponses : on pose $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ et $\alpha^2 = \frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}$, en dehors de la barrière $\frac{d^2\varphi}{dx^2} + k^2\varphi = 0$ et dans la barrière $\frac{d^2\varphi}{dx^2} - \alpha^2\varphi = 0$; les solutions sont $\varphi_1(x) = A_1(\exp ikx + r \exp -ikx)$, $\varphi_2(x) = A_2 \exp \alpha x + B_2 \exp -\alpha x$ et $\varphi_3(x) = tA_1 \exp ikx$, continuité de la fonction et de sa dérivée en $x = 0$ et $x = a$, $A_1(1+r) = A_2 + B_2$, $A_2 \exp \alpha a + B_2 \exp -\alpha a = A_3 \exp ika$, $ikA_1(1-r) = \alpha(A_2 - B_2)$ et $\alpha(A_2 \exp \alpha a - B_2 \exp -\alpha a) = ikA_3 \exp ika$; la longueur caractéristique correspond à l'épaisseur de peau $\delta = \frac{1}{\alpha} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0-E)}}$, on trouve $\delta = 0,195 \text{ nm}$ et par conséquent $a \simeq 5\delta$, on peut considérer la barrière comme épaisse, la densité de probabilité va correspondre à $J_t = \frac{\hbar k}{m} |\varphi_3|^2$ et $J_{inc} = \frac{\hbar k}{m} A_1^2$ l'atténuation est de l'ordre de $\exp -\frac{2a}{\delta} = 3,5 \times 10^{-5}$, on trouve $I_{\text{tunnel}} = 3,5 \text{ nA}$, pour des protons, c'est la valeur de la masse qui va intervenir et $\delta' \simeq 4,6 \text{ pm}$, le courant sera pour ainsi dire nul car $a \gg \delta'$.

18. Effet Ramsauer-Townsend (1922)

Réponses : on va considérer une onde qui traverse directement le puits et une seconde issue de la réflexion de la première à la sortie du puits. Cette seconde onde va se propager en sens x décroissant mais revenue au début du puits, elle va se réfléchir à nouveau (et aussi se transmettre en $x < 0$ sans que cela ne nous intéresse) et repartir dans le sens x croissant. Arrivée à nouveau en $x = a$ à l'extrémité du puits, elle se transmet (et se réfléchit encore) dans le milieu $x > a$. Si le déphasage entre les deux ondes - l'onde qui a traversé directement et la seconde - est un multiple de 2π , alors elle interfère de façon constructive. Cela peut expliquer le coefficient de transmission de 1. Pour des interférences constructives, il faut donc que la différence de marche vérifie $2a = n\lambda$. La plus grande valeur de la longueur d'onde est donc $\lambda_{\text{max}} = 2a = 0,4 \text{ nm}$. Par définition de l'énergie mécanique, on a $E = E_c - V_0$ et donc $E_c = \frac{p^2}{2m} = E + V_0$ avec $p = \frac{h}{\lambda}$. En prenant $\lambda = 2a$, on trouve $E + V_0 = \frac{h^2}{8ma^2} = 9,4 \text{ eV}$. On trouve $V_0 = 8,7 \text{ eV}$.

19. États de diffusion d'un puits carré

Réponses : en dehors du puits, l'équation différentielle vérifiée par la fonction d'onde est $\frac{d^2\varphi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\varphi = 0$ avec $E > 0$, on a donc bien les solutions $\varphi(x < 0) = A_1 \exp ik_1 x + B_1 \exp -ik_1 x$ puisqu'il y a une incidente et une onde réfléchie et $\varphi(x > L) = A_3 \exp ik_1 x$ puisqu'il n'y a pas d'onde réfléchie. Dans le puits, on a $\frac{d^2\varphi}{dx^2} + \frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}\varphi = 0$ avec $E + V_0 > 0$. La solution est donc $\varphi(0 \leq x \leq L) = A_2 \exp ik_2 x + B_2 \exp -ik_2 x$ puisqu'il y a là aussi, une onde de propagation dans le sens x croissant et une se propageant dans le sens x décroissant. On possède donc 5 inconnues avec les différentes amplitudes des fonctions d'onde. La continuité de φ en $x = 0$ et $x = L$ apportent deux équations, tout comme la continuité de $\frac{d\varphi}{dx}$ aux extrémités du puits. Avec la condition de normalisation de la loi de probabilité, on dispose de 5 équations pour 5 inconnues. Le système est déterminé sans contrainte sur l'énergie. Pour une énergie $-V_0 < E' < 0$, on obtient une équation différentielle possédant des solutions réelles en dehors du puits alors que dans le puits, on reste avec des solutions complexes, c'est-à-dire harmoniques. On a $\varphi(x < 0) = A_1 \exp \mu_1 x$ avec $\mu_1 = \sqrt{\frac{-2mE'}{\hbar^2}}$ et $\varphi(x > L) = A_3 \exp -\mu_1 x$ alors que $\varphi(0 \leq x \leq L) = A_2 \exp ik_2 x + B_2 \exp -ik_2 x$ avec $k_2 = \sqrt{\frac{2m(V_0+E')}{\hbar^2}}$. Comme dans le cas précédent, on a 4 relations de continuité et la condition de normalisation. Le bilan est de 5 relations pour 4 amplitudes inconnues. On constate donc que la contrainte en plus va avoir des conséquences, l'énergie sera quantifiée.

20. Deux quantons dans un puits...

Réponses : On a $\frac{d^2\varphi_1}{dx^2} + \frac{2m_0E_1}{\hbar^2}\varphi_1 = 0$; avec les conditions aux limites la solution est de la forme $\varphi_1 = A_1 \sin k_1 x$ avec $k_1 L = n\pi$, en normalisant $\int_0^L \varphi_1^2(x) dx = 1$, on trouve $\varphi_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L}$ et pour l'énergie $\frac{n\pi}{L} = \frac{\sqrt{2m_0E_1}}{\hbar}$ d'où $E_1 = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2m_0L^2}$; on a $E_{nm}\varphi(x_1, x_2) = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2\varphi(x_1, x_2)}{dx_1^2} - \frac{\hbar^2}{4m_0} \frac{d^2\varphi(x_1, x_2)}{dx_2^2}$; en séparant les variables on a $E_{nm} + \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{1}{\varphi(x_1)} \frac{d^2\varphi(x_1)}{dx_1^2} = -\frac{\hbar^2}{4m_0} \frac{1}{\varphi(x_2)} \frac{d^2\varphi(x_2)}{dx_2^2} = K$ d'où $\frac{d^2\varphi(x_1)}{dx_1^2} + \frac{2m_0(E_{nm}-K)}{\hbar^2}\varphi(x_1) = 0$ de solution $\varphi(x_1) = A'_1 \sin k_1 x$ avec $k_1 L = n\pi$ d'où $\frac{\sqrt{2m_0(E_{nm}-K)}}{\hbar} = \frac{n\pi}{L}$, on en déduit que $K = E_{nm} - \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2m_0L^2}$ et $\frac{d^2\varphi(x_2)}{dx_2^2} + \frac{4m_0}{\hbar^2} K \varphi(x_2) = 0$ de solution $\varphi(x_2) = A'_2 \sin \frac{\sqrt{4m_0K}}{\hbar} x$ avec $\frac{\sqrt{4m_0K}}{\hbar} = \frac{m\pi}{L}$ d'où $\frac{m^2\pi^2\hbar^2}{4m_0L^2} = E_{nm} - \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2m_0L^2}$ et par conséquent $E_{nm} = E_0(n^2 + \frac{m^2}{2})$ avec $E_0 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m_0L^2}$; on a $E_{11} = \frac{3}{2}E_0$, $E_{12} = 3E_0$, $E_{21} = \frac{9}{2}E_0$, $E_{13} = \frac{11}{2}E_0$, $E_{22} = 6E_0$ et $E_{23} = \frac{17}{2}E_0$ pas de dégénérescence $g = 1$, un seul état pour un niveau d'énergie donné ; si on a deux quantons identiques alors $E_{nm} = E_0(n^2 + m^2)$, $E_{11} = 2E_0$ $g = 1$, $E_{12} = E_{21} = 5E_0$ $g = 2$, $E_{22} = 8E_0$ $g = 1$, $E_{13} = E_{31} = 10E_0$ $g = 2$, $E_{23} = E_{32} = 13E_0$ $g = 2$, $E_{14} = E_{41} = 17E_0$ $g = 2$.

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

Réponses : En Mécanique classique, les électrons vont dans la région 1 $x < 0$ à une vitesse constante v_1 telle que $E = \frac{1}{2}mv_1^2$. Arrivés dans la région 2 $x \in [0, a]$, leur vitesse augmente puisque l'on a alors $E = \frac{1}{2}mv_2^2 - e\frac{V_0}{e} = \frac{1}{2}mv_2^2 - V_0$, ce qui donne $v_2^2 = v_1^2 + \frac{2V_0}{m}$. Enfin dans la région 3 $x > a$, les électrons retrouvent leur vitesse $v_3 = v_1$ puisque le potentiel redevient nul. En Mécanique quantique, les électrons peuvent se réfléchir en $x = 0$ et en $x = a$. L'équation de SCHRÖDINGER indépendante du temps, dans les régions 1 et 3, est : $\frac{d^2\varphi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\varphi = 0$. Dans la région 2, c'est $\frac{d^2\varphi}{dx^2} + \frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}\varphi = 0$. On pose $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ et $k' = \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar}$. Comme il n'y a pas d'onde en sens décroissant dans la région 3, les solutions sont $\varphi_1(x) = A_1 \exp ikx + B_1 \exp -ikx$, $\varphi_2(x) = A_2 \exp ik'x + B_2 \exp -ik'x$ et $\varphi_3(x) = A_3 \exp ikx$. La probabilité de présence étant nécessairement continue et le potentiel étant borné, il y a continuité de la fonction d'onde ainsi que de sa dérivée spatiale en $x = 0$ et $x = a$. On obtient les relations $A_1 + B_1 = A_2 + B_2$, $k(A_1 - B_1) = k'(A_2 - B_2)$, $A_2 \exp ik'a + B_2 \exp -ik'a = A_3 \exp ika$ et $k'(A_2 \exp ik'a - B_2 \exp -ik'a) = kA_3 \exp ika$. On procède à des combinaisons linéaires comme par exemple en multipliant la première relation par k et en additionnant avec la seconde, on obtient ainsi $2kA_1 = (k + k')A_2 + (k - k')B_2$, $2kB_1 = (k - k')A_2 + (k + k')B_2$, $2k'A_2 \exp ik'a = (k + k')A_3 \exp ika$ et $2k'B_2 \exp -ik'a = -(k - k')A_3 \exp ika$. On peut donc relier A_1 et A_3 : $A_3 = A_1 \frac{4kk' \exp -ika}{(k+k')^2 \exp -ik'a - (k-k')^2 \exp ik'a}$. On prend le module carré et, après calcul, on trouve $A_3^2 = A_1^2 \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(E+V_0)} \sin^2 k'a}$. La densité de courant de probabilité incidente est $J_1 = \frac{\hbar k}{m} A_1^2$ et celle transmise $J_3 = \frac{\hbar k}{m} A_3^2$. Le coefficient de transmission est donc $T = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(E+V_0)} \sin^2 k'a}$ et le coefficient de réflexion en $x = 0$ est $R = 1 - T$ par conservation de la densité de probabilité de part et d'autre du puits. On peut retrouver le cas classique où la probabilité de transmission vaut 1 à chaque fois que $\sin k'a = 0$. Cela correspond à une condition de type MELDE pour les ondes de la région 2, on a donc $k'a = n\pi$ avec n entier ce qui revient à avoir des énergies quantifiées $E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} - V_0$.

22. Colorants organiques et modèle de Kuhn

Réponses : les électrons délocalisés correspondent aux électrons π des $p + 1$ liaisons doubles et au doublet non liant de l'atome d'azote, donc $N = 2p + 4$. On peut retrouver rapidement les énergies demandées des niveaux en exploitant l'analogie avec la corde de MELDE, la longueur d'onde de DE BROGLIE et la largeur L du puits (on peut aussi revenir à la résolution de l'équation de Schrödinger stationnaire). Le mode n vérifie $L = n \frac{\lambda_{DB,n}}{2}$ donc $p_n = \frac{h}{\lambda_{DB,n}} = n \frac{h}{2L}$ puis $E_n = \frac{p_n^2}{2m_e} = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_e L^2}$. On a choisi, comme usuellement, la référence d'énergie potentielle à la valeur nulle. Cela ne change pas les longueurs d'onde d'absorption calculées à la fin de l'exercice (car ce sont des différences d'énergies qui interviennent). En utilisant les règles de remplissage, on remplit les $p + 2$ niveaux d'énergie avec deux électrons appariés et de spins opposés pour chacun d'eux (puisque $N = 2p + 4$). Par conséquent, la transition d'absorption concerne les niveaux $p + 2$ (dernier plein) et $p + 3$ (premier vide). La longueur d'onde d'absorption vérifie, compte tenu des questions précédentes, $\frac{hc}{\lambda_a} = E_{p+3} - E_{p+2} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_e L^2} [(p+3)^2 - (p+2)^2]$ soit $\lambda_a = \frac{4m_e c L^2}{(2p+5)\pi \hbar}$ d'où $\lambda_a = \frac{8m_e c \ell^2}{h} \frac{N^2}{N+1}$. Le tableau suivant reprend le tableau de l'énoncé en le complétant par les valeurs calculées grâce à la formule précédente :

p	1	2	3	4	5
λ_0 nm	313	416	519	625	735
λ_a nm	328	453	579	706	833

Compte tenu de la grande simplicité des arguments invoqués, les résultats, certes perfectibles, donnent une première idée des longueurs d'onde d'absorption.

23. Le deutéron

Réponses : pour $r < a$, l'interaction nucléaire est répulsive, ce qui traduit l'impossibilité d'interpénétration des nucléons (modèle de cœur dur, associé à une densité uniforme du noyau). Pour $r > a$, l'interaction nucléaire est positive, ce qui traduit l'attraction entre nucléons (en raison de l'interaction forte). La représentation fournie semble montrer que cette interaction a une intensité de plus en plus faible avec l'éloignement et ne s'annule qu'à l'infini. De façon plus rigoureuse, sa portée est finie et le potentiel devrait être constant à partir d'une distance typiquement de l'ordre de grandeur de la taille d'un noyau atomique (il ne faut pas confondre interaction électromagnétique de portée infinie et interaction forte de portée finie). On peut adopter grossièrement le profil de potentiel $V(x)$ en puits rectangulaire semi-infini de la figure 2. On a placé sur la représentation la position énergétique de l'état lié expérimental du deutéron.

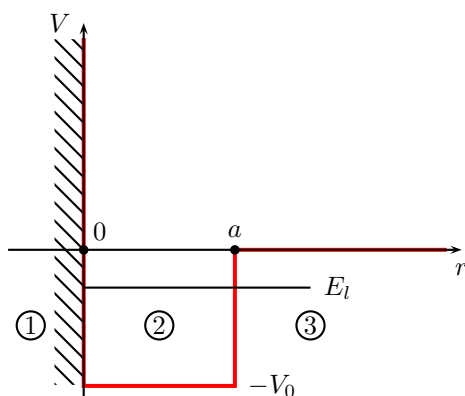


FIGURE 2 – Modélisation en puits semi-infini

L'énoncé dit bien que la largeur classique de confinement est a . Il ne s'agit pas de la largeur quantique car, comme on le voit ensuite, il y a une évanescence des fonctions d'onde stationnaires liées dans la région (3). Dans la modélisation d'espace unidimensionnel cartésien adoptée et en supposant le quanton équivalent de masse m non relativiste, celui-ci doit vérifier l'équation de SCHRÖDINGER indépendante du temps pour ses états stationnaires d'énergie E . Dans la région (1), qui est interdite, on sait déjà que $\varphi_1(x) = 0$. Dans la région (2), on a nécessairement $E > -V_0$ et il vient $\varphi_2(x) = A_2 \exp ikx + A'_2 \exp -ikx$ avec $k = \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar}$. Dans la région (3), le contexte de l'exercice impose $E < 0$ pour avoir un état stationnaire lié pour le deutéron (les états excités de diffusion ne sont pas étudiés ici). Du coup, il vient la fonction d'onde spatiale à évanescence $\varphi_3(x) = A_3 \exp qx + A'_3 \exp -qx$ avec $q = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$. À présent, on doit traduire les conditions adéquates en $x = 0$ (limite) et $x = a$ (raccordement), sachant que $A_3 = 0$ pour la normalisation de l'état lié cherché. Il y a annulation de la fonction d'onde en $x = 0$ (potentiel infini), soit $A_2 + A'_2 = 0$. De plus, il y a continuité de la fonction d'onde en $x = a$, ainsi que de sa dérivée (potentiel borné), donc, en tenant compte de l'égalité précédente et de $A_3 = 0$, $A_2 (\exp ika \exp -ika) = A'_3 \exp -qa$ et $ik A_2 (\exp ika + \exp -ika) = -q A'_3 \exp -qa$. On élimine A_2 et A'_3 cherchés non nuls de ce système et on obtient la condition de quantification : $k \cotan(ka) = -q$ qui se transforme en la condition simultanée $|\sin(ka)| = \frac{k}{k_0}$ et $\tan(ka) < 0$. On peut donc proposer pour fonction f la fonction sinus et pour fonction g la fonction tangente. Le graphique fourni dans l'énoncé permet de visualiser les intersections entre la fonction représentée $f_r(k) = |\sin(ka)|$ (arches) et la fonction affine k/k_0 ; seuls les points des parties décroissantes sont pertinents puisqu'il faut assurer dans le même temps la condition $\tan(ka) < 0$. On a un seul état propre lié lorsqu'il n'y a qu'un seul point de fonctionnement possible. Cela se produit lorsque la pente $1/k_0$ de la droite est comprise entre $2a/(3\pi)$ et $2a/\pi$, d'où, après remplacement de l'expression de k_0 et manipulation élémentaire d'inégalités, la condition (double) $\frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2} < V_0 < 9 \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2}$. Cela donne numériquement une valeur de V_0 comprise entre $0,51.10^2$ MeV et $4,6.10^2$ MeV, d'où l'ordre de grandeur cherché $\tilde{V}_0 = 10^2$ MeV. Un modèle plus précis du deutéron fournit la valeur $V_0 = 35,5$ MeV. On constate que l'énergie de liaison est telle que $|E_l| \ll V_0$. Le puits du deutéron est profond par rapport à la position énergétique du premier et unique état lié ; ce dernier n'est somme toute pas très loin d'un état de diffusion. L'état stationnaire lié est assez proche d'un état de diffusion, sans en être un ; on peut le qualifier d'à peine lié et il est alors aisé, par un relativement faible apport énergétique, d'extraire un neutron du deutéron dans un accélérateur de particules.

24. Effet Hall quantique

Réponses : l'équation de SCHRÖDINGER spatiale pour les états stationnaires dans le puits de potentiel infini est $-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi(x,y) = E\varphi(x,y)$. En utilisant le modèle de la séparation des variables $\varphi(x,y) = X(x)Y(y)$, on arrive à $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{X(x)}\frac{d^2X}{dx^2} = E + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{Y(y)}\frac{d^2Y}{dy^2}$. Cette équation doit être vraie $\forall x, \forall y$, les deux membres doivent être égaux à une même constante qui ne peut être qu'une énergie que nous noterons E_x . On a donc l'équation $\frac{d^2X}{dx^2} + \frac{2mE_x}{\hbar^2}X = 0$. On a forcément $E_x > 0$ puisque la fonction d'onde doit s'annuler deux fois à chaque bord du puits de potentiel infini. Les solutions sont donc de la forme $X(x) = A \exp ik_x x + B \exp -ik_x x$ où $k_x = \sqrt{\frac{2mE_x}{\hbar^2}}$ avec les conditions aux limites imposant $A \exp ik_x \frac{\ell_x}{2} + B \exp -ik_x \frac{\ell_x}{2} = 0$ et $A \exp -ik_x \frac{\ell_x}{2} + B \exp ik_x \frac{\ell_x}{2} = 0$. Si on additionne ces deux équations, on obtient $2(A+B) \cos \frac{k_x \ell_x}{2} = 0$ ce qui réserve deux possibilités. Soit $A = -B$ qui impose alors que $\sin \frac{k_x \ell_x}{2} = 0$ et par conséquent $k_x \ell_x = 2m\pi$ avec $m \in \mathbb{N}^*$. Soit $\cos \frac{k_x \ell_x}{2} = 0$ ce qui donne $\frac{k_x \ell_x}{2} = (2m+1)\frac{\pi}{2}$ d'où $k_x \ell_x = (2m+1)\pi$. Dans tous les cas, on constate que $k_x \ell_x = n_x \pi$ où n_x est un entier naturel non nul. On constate donc que $E_x = n_x^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m\ell_x^2}$. On conduit exactement le même raisonnement pour la fonction $Y(y)$ et on trouve bien que l'énergie dans le puits de potentiel infini est donnée par $E(n_x, n_y) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{\ell_x^2} + \frac{n_y^2}{\ell_y^2} \right)$. Si on teste la forme de solution de $\varphi(x,y) = \Omega(x) \exp ik_y y$, on arrive à l'équation différentielle $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Omega}{dx^2} + \frac{\hbar^2}{2m}2m\Omega(x) - k_y \frac{\hbar e B}{m} x \Omega(x) + \frac{e^2 B^2}{2m} x^2 \Omega(x) = E\Omega(x)$. Avec les formes proposées pour x_0 et ω_0 , on arrive à l'équation $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Omega}{dx^2} + (\frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2 + \frac{1}{2}m\omega_0^2 x_0^2 - m\omega_0^2 x x_0)\Omega(x) = E\Omega(x)$. On obtient pour terminer le calcul $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Omega}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega_0^2(x-x_0)^2\Omega(x) = E\Omega(x)$. L'énergie potentielle effective est donc $V_{eff} = \frac{1}{2}m\omega_0^2(x-x_0)^2$, c'est celle d'un oscillateur harmonique de pulsation propre ω_0 , centré en x_0 . Comme attendu pour l'oscillateur harmonique quantique, l'énergie est quantifiée selon la loi fournie $E = (p - \frac{1}{2})\hbar\omega_0$. On a $x_0 \leq \frac{\ell_x}{2}$ avec $x_0 = \frac{\hbar k_y}{eB}$ d'où $k_y \leq \frac{eB\ell_x}{\hbar}$ et donc $n_y^{max} = g = \frac{eB\ell_x\ell_y}{2\pi\hbar} = \frac{eB\ell_x\ell_y}{h}$. On a $N_e = gp$. La densité volumique moyenne des électrons dans la boîte est $n_v = \frac{N_e}{\ell_x\ell_y b} = \frac{gp}{\ell_x\ell_y b} = \frac{eB}{\hbar b}p$. Comme la résistance de HALL est $R_H = \frac{B}{n_v e b}$, on trouve que $R_H = \frac{1}{p} \frac{e^2}{h}$.

25. États liés du neutron dans le noyau

Réponses : Cette étude n'est raisonnablement accessible que dans le cadre du modèle du puits infini. Comme le puits de potentiel représenté par le noyau est de profondeur U_0 , on en déduira que l'énergie du neutron ne pourra pas différer beaucoup de $-U_0$ pour que les calculs que l'on va réaliser soient corrects. L'équation de SCHRÖDINGER indépendante du temps permet d'écrire que $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}(r^2\frac{d\psi}{dr}) - U_0\psi(r) = E\psi(r)$. En utilisant la forme proposée pour la fonction d'onde, on arrive à $\frac{d}{dr}(r^2\frac{d}{dr}(\frac{f(r)}{r})) + \frac{2m(E+U_0)}{\hbar^2}(rf(r)) = 0$. On calcule $\frac{d}{dr}(r^2\frac{d}{dr}(\frac{f(r)}{r}))$ et on trouve que $\frac{d}{dr}(r^2\frac{d}{dr}(\frac{f(r)}{r})) = \frac{d}{dr}(\frac{df}{dr}r - f) = \frac{d^2f}{dr^2}$. L'équation différentielle donnant $f(r)$ est de la forme $\frac{d^2f}{dr^2} + \frac{2m(E+U_0)}{\hbar^2}f(r) = 0$. On en déduit la solution suivante : $f(r) = A \cos kr + B \sin kr$ avec $k = \sqrt{\frac{2m(E+U_0)}{\hbar^2}}$. La fonction d'onde est donc $\psi(r) = \frac{A}{r} \cos kr + \frac{B}{r} \sin kr$. En $r = 0$, la fonction d'onde ne peut pas diverger, il faut donc que $A = 0$. On a donc $\psi(r) = \frac{B}{r} \sin kr$. L'hypothèse du puits suffisamment profond pour le considérer comme infini intervient pour la condition aux limites $\psi(r=r_0) = \frac{B}{r_0} \sin kr_0 = 0$. B est une constante qui pourrait être déterminée afin de normaliser la loi de probabilité. Ici, la seule solution qui a du sens physique est $kr_0 = n\pi$ avec $n \in \mathbb{N}$. Ainsi, on a $k^2 = \frac{n^2\pi^2}{\hbar^2}$. En utilisant l'expression de k , on montre que l'énergie est bien quantifiée puisqu'elle est donnée par $E = -U_0 + \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mr_0^2}$. Cette formule est valable uniquement pour les valeurs de n telles que $\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mr_0^2} \ll U_0$.

D. État non stationnaire

26. Puits infini et état non stationnaire

Réponses : l'équation différentielle est $\frac{d^2\varphi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\varphi = 0$, on trouve alors $E_n = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} = n^2 \hbar \omega_0$ d'où $\omega_0 = \frac{\pi^2 \hbar}{2ma^2}$; on a $\psi(x,t) = \varphi(x) \exp -iE_n t/\hbar = \varphi(x) \exp -in^2 \omega_0 t$; on a $\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_1(x) \exp -i\omega_0 t + \varphi_2(x) \exp -i4\omega_0 t)$; on constate que $\varphi_1(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_g(x) + \varphi_d(x))$ et $\varphi_2(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_g(x) - \varphi_d(x))$, $\frac{dP(x,t)}{dx} = \frac{1}{2}(|\psi_g(x,t)|^2 + |\psi_d(x,t)|^2) + \frac{1}{2}(|\psi_g(x,t)|^2 - |\psi_d(x,t)|^2) \cos 3\omega_0 t$, la probabilité oscille à la pulsation $3\omega_0$ et donc à la fréquence $\nu = \frac{3\omega_0}{2\pi} = \frac{E_2 - E_1}{h}$, la probabilité oscille entre la gauche et la droite du puits.