TD n°18 Mécanique quantique 2: Particule dans un puits de potentiel

Applications du cours

Exercice n°1: Modélisation d'une étoile à neutrons

On considère une étoile à neutrons dont le comportement est modélisé par un puits de potentiel infini de longueur $L = 10\ km$. Les neutrons n'interagissent pas entre eux. On suppose le modèle à une dimension, et le puits de potentiel ainsi créé comportant 0,5 neutrons par femtomètre. On rappelle qu'une particule est dite relativiste si $\gamma = \dfrac{1}{\sqrt{1-\left(\frac{v^2}{c^2}\right)}} >> 1$ avec $c = 3.10^8\ m.s^{-1}$ célérité de la lumière dans le vide. Pour une telle particule, l'énergie cinétique s'écrit $E_K = (\gamma - 1)mc^2$.

On précise que le neutron est une particule de masse $m = 1{,}67.10^{-27}\ kg$, de spin $S = \dfrac{1}{2}$ et satisfait au principe d'exclusion de Pauli (cas de toutes les particules de spin 1/2 entier)

❶ Donner l'équation de Schrödinger régissant l'évolution des neutrons dans l'étoile. Déterminer la fonction d'onde d'un neutron dans un tel modèle.

❷ Donner les niveaux d'énergie possibles des neutrons (E_n) avec $n \in \mathbb{N}^*$. Pourquoi existe-t-il exactement 2 neutrons de même niveau d'énergie? Pourquoi sont-ce les états de plus faible énergie qui sont majoritairement peuplés?

❸ L'étoile comporte-t-elle des neutrons non relativistes?

Exercice n°2: Diffusion des électrons par les gaz rares: effet Ramsauer-Townsend

Cet exercice propose de montrer que le coefficient de réflexion d'un électron lent sur un atome de gaz rare passe par un minimum pour certaines valeurs particulières de l'énergie de l'électron. Cet effet, dont l'origine est purement quantique, porte le nom d'effet Ramsauer-Townsend en hommage à Carl Ramsauer et John Townsend qui le découvrirent indépendamment au début des années 1920.

On considère un flux de particules monoénergétiques d'énergie E, incidente depuis $x \to -\infty$, se propageant suivant les x croissants, arrivant dans la zone d'action d'un potentiel donné par:

$$\begin{array}{l} V(x) = -V_0 = cste \quad si \quad x \in \left[-\frac{a}{2}, \frac{a}{2}\right] \\ V(x) = 0 \quad \text{ailleurs} \end{array}$$

avec $V_0 > 0$

❶ Proposer une situation physique réelle associée au modèle décrit ci-dessus.

❷ Donner la forme des fonctions d'onde dans les trois domaines considérés. On posera: $\begin{cases} K = \dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \\ k = \dfrac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar} \end{cases}$

❸ En écrivant les conditions de raccordement, écrire les quatre relations liant les constantes intervenant dans l'écriture des fonctions d'onde dans les différents domaines.

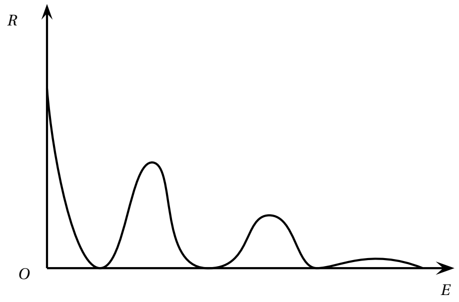
❹ Rappeler, en utilisant des densités de courant de probabilité dont on précisera l'expression, l'expression des coefficients de réflexion et de transmission R et T.

❺ On obtient par un calcul non demandé les expressions suivantes:

$$R = \frac{\left(\frac{k_0^2}{2kK}\right)^2 \times \sin^2(ka)}{1 + \left(\frac{k_0^2}{2kK}\right)^2 \times \sin^2(ka)} \quad et \quad T = \frac{1}{1 + \left(\frac{k_0^2}{2kK}\right)^2 \times \sin^2(ka)}$$

avec $k_0^2 = 2mV_0/\hbar^2$

L'allure du coefficient R en fonction de l'énergie E est la suivante:



Ramsauer et Townsend ont montré expérimentalement que pour certaines valeurs de l'énergie E d'un faisceau monoénergétique d'électrons de basse énergie, certains gaz rares (Hélium, Néon, ou argon) sont parfaitement transparents.

a· Proposer une justification de l'idée de modéliser un atome de gaz rare par un centre diffusif en forme de "puits plat" fini.

b· Identifier sur le graphique ci-dessus les zones de transparence et écrire les conditions correspondantes liant k à a. Proposer ainsi une interprétation de l'effet Ramsauer-Townsend en terme d'interférences entre les ondes de De Broglie associées aux électrons. On pourra s'appuyer sur une analogie optique avec les réflexions multiples dans une lame.

Exercice n°3: **Puits de potentiel rectangulaire infini tridimensionnel - analyse d'un fil quantique**

On considère une particule de masse m dans un puits de potentiel rectangulaire infini tridimensionnel:

$$\begin{cases} V(x,y,z)=0\ \forall\ x\in[0,a] \quad y\in[0,b] \quad z\in[0,d[\\ V(x)\rightarrow\ +\infty\ sinon \end{cases}$$

où $a>b>d$ sont les dimensions du puits.

❶ Rappeler l'équation de Schrödinger indépendante du temps à $3D$.

❷ On pose une fonction d'onde spatiale à variables séparées:

$$\varphi(x,y,z)=A\cdot\varphi^{a}_{n_1}(x)\cdot\varphi^{b}_{n_2}(y)\cdot\varphi^{d}_{n_3}(z)\quad \text{avec}$$

avec $\varphi^{a}_{n_1}(x)=\sin\left(\dfrac{n_1\pi x}{a}\right)$ et $\varphi^{b}_{n_2}(y)$ et $\varphi^{d}_{n_3}(z)$ définies de manière analogue avec $(n_1,n_2,n_3)\in\mathbb{N}^3$.

❸ Montrer que $\varphi(x,y,z)$ est bien une fonction d'onde spatiale d'état stationnaire. Quelle est l'énergie E_{n_1,n_2,n_3} de cet état? On pourra poser $\alpha=\dfrac{\hbar^2\pi^2}{2m}$.

❹ Donner l'énergie E_1 du niveau fondamental, ainsi que celle E_2 du premier niveau excité.

❺ Pour un électron dans un fil quantique à section carrée, c'est à dire un électron libre dans la partie $0\leq(x,y)\leq a$ (a est une constante positive) et z quelconque, donner la forme des fonctions d'onde. Quelles sont les énergies associées?

Exercices à caractère technique

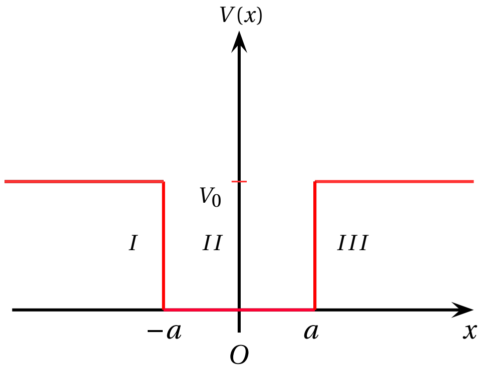
Exercice n°4: **Particule dans un puits rectangulaire fini**

Une particule de masse m est placée dans un puits de potentiel infini défini par:

$$\begin{cases} V(x)=0\ \forall\ x\in]-a,+a[\\ V(x)\rightarrow\ +\infty \end{cases}$$

❶ En vous appuyant exclusivement sur les analogies avec la fonction de déformation transverse d'une corde vibrante (notion vues en cours), déterminer le plus simplement possible les niveaux d'énergies des états stationnaires de la particule.

Le puits est désormais modélisé de manière un peu plus réaliste (sans toutefois ressembler encore à un vrai potentiel!) par le profil suivant:



❷ On s'intéresse aux états liés. Quelles sont les valeurs possibles de l'énergie?

On pose $k = \sqrt{\dfrac{2mE}{\hbar^2}} \qquad \kappa = \sqrt{\dfrac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$

❸ Ecrire l'équation de Schrödinger indépendante du temps dans les différentes zones.

❹ Combien de constantes interviennent dans les amplitudes? Lesquelles peut-on naturellement éliminer?

❺ Quelles sont les différentes conditions aux limites exploitables?

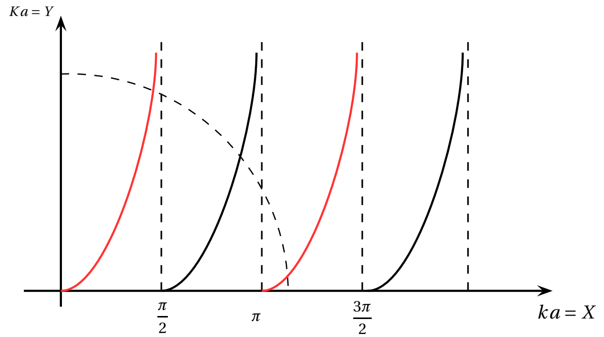
❻ Compte tenu de la parité du potentiel, que peut-on en déduire sur celle des fonctions d'onde des états stationnaires de la particule. En déduire les relations:

$$\tan(ka) = \frac{\kappa}{k} \qquad \text{cotan}(ka) = -\frac{\kappa}{k}$$

❼ En exploitant le fait que:

$$(ka)^2 + (\kappa a)^2 = \frac{2ma^2 V_0}{\hbar^2}$$

interpréter graphiquement les solutions dans le plan de coordonnées $(ka, \kappa a)$ à l'aide de la figure ci-dessous:



❽ Existe-t-il toujours des états liés? A quelle condition existe-t-il un seul état lié?

❾ Dans le cas où le puits devient très profond, retrouver les solutions du ❶.

EXERCICE N°5: Modélisation d'une annihilation électron-positon (CCS épreuve 1 PC 2022)

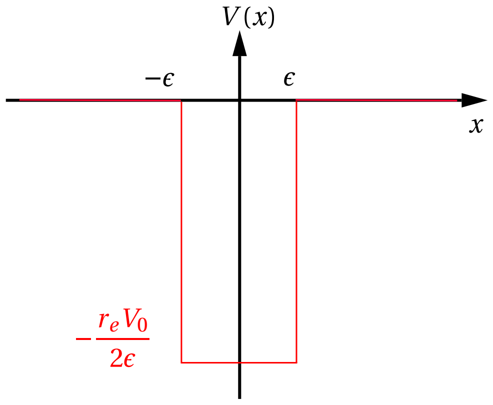
L'annihilation est l'une des réactions possibles lors de la rencontre au repos (en fait à très basse vitesse) d'un électron et d'un positon, antiparticule de l'électron de mêmes masse m et rayon r_e que l'électron, mais de charge électrique opposée $q = +e$; l'un des résultats possibles est alors la création de deux photons γ :

$$^{0}_{-1}e \; + \; ^{0}_{1}e \longrightarrow 2\gamma$$

Ce phénomène est notamment à la base du fonctionnement du système d'imagerie médicale appelé TEP-scan, pour **T**omographe à **E**mission de **P**ositons. On propose ici de modéliser ce mécanisme par une approche quantique.

❶ A grande distance, l'interaction entre les deux antiparticules est négligée et seule l'énergie de masse est à prendre en compte. Evaluer l'énergie d'un tel système. Faire l'application numérique.

❷ Les deux antiparticules se rapprochent désormais et l'interaction coulombienne entre celles-ci (seule interaction considérée dans ce problème) sera modélisée par un puits de potentiel de type "puits de Dirac", et défini ainsi:



$$\begin{cases} V(x) = 0 \quad \text{pour } |x| > \epsilon \\ V(x) = -\dfrac{r_e V_0}{2\epsilon} \quad \text{pour } |x| \leq \epsilon \end{cases}$$

avec $\epsilon \to 0$ et $V_0 > 0$

Expliquer en quoi cette modélisation semble judicieuse. On pose que $-V_0$ est la valeur du potentiel coulombien lorsque les deux particules sont distantes de r_e, rayon de l'électron. Exprimer V_0, et le calculer numériquement.

On considère l'ensemble électron-positon comme une particule fictive de masse réduite $\mu = \dfrac{m}{2}$ avec m masse de l'électron (ou du positon). On s'intéresse aux états liés de cette particule, c'est à dire des états d'énergie $E < 0$.

Déterminer les formes des fonctions d'onde de la particule pour $x > 0$ et $x < 0$ dans cette limite $\epsilon \to 0$.

❸ En exploitant l'équation de Schrödinger, montrer que lors de la traversée du puits, la dérivée première de la partie spatiale de la fonction d'onde subit une discontinuité. L'exprimer notamment en fonction de $\varphi(0)$.

❹ Montrer qu'il existe un seul état lié de la particule dans ce puits, et d'énergie:

$$E = -\frac{\mu r_e^2 V_0^2}{2\hbar^2}$$

Faire l'application numérique pour E, et proposer une explication de l'émergence de deux photons γ. Déterminer également l'énergie de chacun d'entre-eux.

DONNÉES:

- Vitesse de la lumière: $c = 3.10^8\ m.s^{-1}$
- Energie de masse d'une particule de masse m: $E_w = mc^2$
- Permittivité diélectrique du vide: $\epsilon_0 = 8{,}85.10^{-12}\ F.m^{-1}$
- Constante de Planck réduite: $\hbar = \dfrac{h}{2\pi} = 1{,}05.10^{-34}\ J.s$
- Masse de lélectron: $m = 9{,}1.10^{-31}\ kg$
- Rayon de l'électron: $r_e = 2{,}8179.10^{-15}\ m$
- Charge élémentaire: $e = 1{,}609.10^{-19}\ C$
- Equation de Schrödinger à une dimension (selon l'axe $[Ox)$) pour une particule de masse m soumise à un potentiel $V(x)$ et de fonction d'onde $\psi(x,t)$:

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

EXERCICE N°6: **Fonction d'onde et énergie de l'atome d'hydrogène en état fondamental**

On considère l'atome d'hydrogène ${}_1^1H$. L'origine du repère d'espace est placée sur son noyau que l'on considèrera immobile ici. On analysera le comportement de l'électron de cet atome qui sera repéré par ses coordonnées sphériques (r,θ,φ).

1. Donner l'expression de l'énergie potentielle $V(r)$ de l'électron dans le champ électrostatique du noyau.
2. On propose de rechercher une solution à symétrie sphérique de l'équation de Schrödinger de la forme:

$$\psi(\overrightarrow{r},t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}\frac{u(r)}{r}\cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

Dégager l'équation satisfaite par $u(r)$. Quelle interprétation donner à $|u(r)|^2$?

3. On cherche à déterminer l'énergie d'un état lié (toujours de symétrie sphérique). On propose pour cela une fonction $u(r)$ de forme:

$$u(r) = r^{\alpha} \cdot e^{-\frac{r}{r_0}} \qquad \text{avec } \alpha \text{ un paramètre entier}$$

Déterminer complètement l'état quantique proposé en dégageant les valeurs de α et r_0, ainsi que celle de l'énergie en eV de l'électron dans cet état quantique. Faire les applications numériques et commenter.

DONNÉES:

- Opérateur laplacien scalaire en coordonnées sphériques:

$$\Delta f(r,\theta,\varphi) = \frac{1}{r}\frac{\partial^2\left(r\cdot f(r,\theta,\varphi)\right)}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial f(r,\theta,\varphi)}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2 f(r,\theta,\varphi)}{\partial\varphi^2}$$

- Equation de Schrödinger à 3 dimensions:

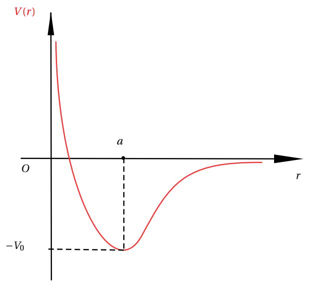
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\overrightarrow{r},t) + V(\overrightarrow{r})\psi(\overrightarrow{r},t) = i\hbar\frac{\partial\psi(\overrightarrow{r},t)}{\partial t}$$

- DONNÉES NUMÉRIQUES:
  - masse de l'électron $m = 9,1.10^{-31}\ kg$
  - constante de Planck réduite $\hbar = 1,05.10^{-34}\ J.s$
  - charge élémentaire $e = 1,6.10^{-19}\ C$
  - permittivité diélectrique du vide $\epsilon_0 = 8,85.10^{-12}\ F.m^{-1}$

EXERCICE N°7: **Modélisation du deutéron**

On appelle deutéron le noyau de l'atome de deutérium, isotope de l'hydrogène, comportant un proton de masse m_p et un neutron de masse m_n.

On montre que l'étude de ce problème à deux corps peut être réduite à celle d'une seule particule fictive, dite particule réduite, de masse $m = \dfrac{m_p m_n}{m_p + m_n}$ plongée dans un potentiel de Yukawa modélisant l'interaction subie par cette particule, et dont l'allure est donnée ci-contre:



On observe expérimentalement que le deutéron est le seul état lié stable d'un système proton-neutron, et que son énergie de liaison vaut $E_l = -2,2\ MeV$. L'ordre de grandeur de la portée de l'interaction nucléaire est $a \simeq 1\ fm$ qui est donc le rayon du noyau.

On donne pour cet exercice: $m_n \simeq m_p \simeq 1,67.10^{-27}\ kg$, $h \simeq 6,62.10^{-34}\ J.s$

❶ Commenter la forme de ce potentiel, et proposer en se plaçant à une dimension radiale, une modélisation simplifiée utilisant un potentiel constant par morceaux dans trois régions distinctes que l'on précisera.

❷ Donner la forme des fonctions d'onde de l'état stationnaire du système dans les trois régions considérées. En déduire une équation de quantification de la forme:

$$\left[\begin{array}{l} |g(ka)| = \dfrac{k}{k_0} \\ h(ka) < 0 \end{array}\right. \qquad \text{avec } k_0 = \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar}, \text{ où les fonctions } g \text{ et } h \text{ seront précisées}$$

❸ **Recherche graphique des solutions**

- **a·** Montrer que les solutions de l'équation de quantification peuvent être obtenues graphiquement. On déterminera les niveaux d'énergie par l'intersection de deux courbes judicieusement choisies.
- **b·** Montrer graphiquement que la condition $V_0 >> |E_l|$ doit être vérifiée pour qu'il n'existe qu'un seul état lié.

c· Déduire dans le cadre de cette condition une expression littérale approchée ainsi qu'un ordre de grandeur de V_0. (on vérifiera à postériori l'hypothèse $V_0 >> |E_l|$).

d· Quelle est la signification physique de cette condition?

e· Pourquoi le deutéron est-il utilisé dans les accélérateurs de type synchrotron pour produire des neutrons de haute énergie?

EXERCICE N°8: **Etats de diffusion d'une particule au dessus d'un puits de potentiel fini**

On cherche ici à étudier les états de diffusion d'une particule de masse m et d'énergie $E > 0$ passant au dessus d'un potentiel de la forme:

$$\left[\begin{array}{l} V(x) = 0 \text{ si } |x| > a \\ V(x) = -V_0 \text{ si } |x| < a, \text{ avec } V_0 = \dfrac{\hbar^2 q_0^2}{2m} \end{array}\right.$$

On posera $q_0^2 = q^2 + k^2$ avec $(k, q, q_0) > 0$

❶ Déterminer la fonction d'onde de la particule dans tous les domaines de l'espace. On posera $E = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m}$ et $q^2 = q_0^2 + k^2$ et on prendra le coefficient de l'onde plane incidente égal à 1.

❷ Montrer que pour certaines valeurs de l'énergie que l'on déterminera, la particule est indifférente à la présence du puits de potentiel. On appelle cela le phénomène de transparence quantique.

❸ Pour quelles valeurs de l'énergie la particule est-elle fortement réfléchie par le puits (résonance de réflexion).