

TD Physique Quantique

Particule libre sur un cercle

On donne les expressions du Laplacien en coordonnées cartésiennes et en coordonnées cylindriques

$$\Delta V = \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial z^2} \text{ et } \Delta V = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial V}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 V}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial z^2}$$

Une particule de masse m est libre de se déplacer sur un cercle de rayon R . La position d'un point M est repérée par l'angle polaire θ .

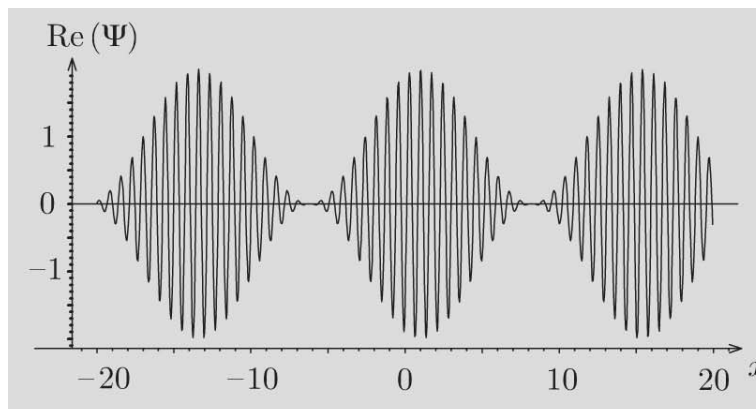
1. Par analogie avec l'équation de Schrödinger unidirectionnelle, proposer une équation indépendante du temps pour ce problème.
2. Quelle condition aux limites peut-on proposer pour une fonction d'onde stationnaire Ψ ?
3. En déduire l'ensemble des solutions stationnaires $\Psi_n(\theta)$ où n est un entier de quantification.
4. Écrire la solution superposition entre l'état stationnaire $n = 0$ et $n = 1$. Est-ce un état stationnaire ? Quelle est la position moyenne de la particule au cours du temps ?

Paquets d'onde

On envisage un paquet d'ondes qui est la superposition d'ondes planes sinusoïdales de pulsations voisines de ω_0 et de vecteurs d'onde voisins de k_0 . On suppose que $\Delta\omega \ll \omega_0$ et $\Delta k \ll k_0$. On représente en $x = 0$ la partie réelle de la fonction d'onde. Pour simplifier l'étude, on considère la superposition de trois ondes planes :

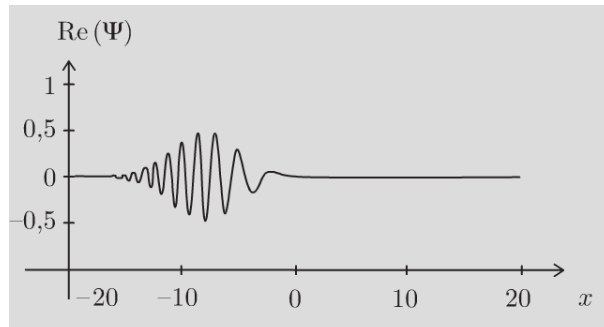
$$\Psi = B \left[e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} + \frac{1}{2} e^{i((k_0 + \Delta k/2)x - (\omega_0 + \Delta\omega/2)t)} + \frac{1}{2} e^{i((k_0 - \Delta k/2)x - (\omega_0 - \Delta\omega/2)t)} \right]$$

On donne le graphe représentant la partie réelle de la fonction d'onde en fonction de x à $t = 0$. Déterminer la largeur Δx des "bouffées d'onde".



1. Montrer que $\Delta k_x \Delta x \geq 2\pi$. Retrouver l'inégalité de Heisenberg spatiale. Déterminer la vitesse de la particule.

La figure ci-dessous représente la partie réelle de la fonction d'onde d'un paquet d'ondes gaussien à $t = 0$ en fonction de l'abscisse. Ce paquet d'ondes est la superposition d'une infinité d'ondes planes de pulsations voisines de ω_0 et de vecteurs d'onde voisins de k_0 .



2. Est-ce que la condition de normalisation peut être résolue? Définir la vitesse de phase et la vitesse de groupe. Comment est définie la vitesse de la particule?
3. Le milieu est-il dispersif? Le paquet d'onde se propage dans le sens des $x > 0$. Est-ce qu'il se déforme au cours du temps, en supposant qu'à l'avant du front d'onde à $t = 0$ se trouvent les longueurs d'onde les plus grandes?

Equation de conservation particulaire

Une particule de fonction d'onde complexe $\Psi(x, t)$ et de densité de probabilité de présence $\rho(x, t) = \Psi(x, t) \cdot \Psi^*(x, t)$ vérifie l'équation de Schrödinger à une dimension dans le champ de potentiel $V(x)$.

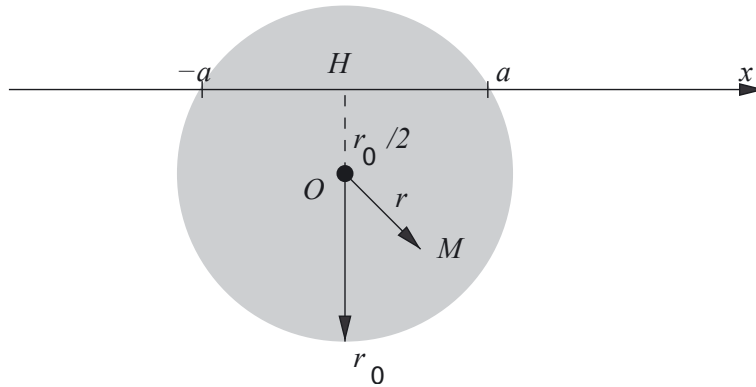
1. Ecrire l'équation de Schrödinger (E) vérifiée par Ψ .
2. Ecrire l'équation (E') issue de la combinaison linéaire $(E') = \Psi^* \cdot (E) - \Psi \cdot (E)^*$.
3. On pose $j(x, t) = \frac{-\hbar}{2m} \left[\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right]$. Traduire l'équation (E') en fonction de ρ et de $j(x, t)$.
4. Justifier que pour une particule libre de pulsation ω , $j(x, t)$ coïncide avec la densité de courant donnée par le cours.

Effet Ramsauer

La vapeur d'hélium peut être, dans certaines conditions, parfaitement transparente à un faisceau d'électrons : c'est l'effet Ramsauer dont on veut donner un modèle quantique simplifié.

étude du profil énergétique

On assimile l'atome d'hélium à un noyau ponctuel immobile en O de charge $2e$ au centre d'un nuage électronique sphérique de rayon r_0 et de densité volumique de charge uniforme $\rho = -\frac{2e}{\frac{4}{3}\pi r_0^3}$



- Par application du théorème de Gauss, montrer que le champ électrique en un point M à la distance r de O vaut

$$\vec{E} = E(r)\vec{e}_r \text{ avec } E(r) = 0 \text{ si } r \geq r_0 \text{ et } E(r) = \frac{e}{2\pi\epsilon_0 r_0^2} \left[\frac{r_0^2}{r^2} - \frac{r}{r_0} \right] \text{ si } r \leq r_0$$

- Endéduire le potentiel électrique $U(r)$ en prenant un potentiel nul à l'infini et en assurant sa continuité en $r = r_0$. On donne en coordonnées sphériques $\vec{\text{grad}}(U(r)) = \frac{\partial U}{\partial r} \vec{e}_r$.
- Un électron provient de $x = -\infty$ sur un axe (H,x) où H est situé à l'intérieur du nuage électronique, à la distance $OH = \frac{r_0}{2}$ du noyau. Donner l'expression de son énergie potentielle $V(x) = -eU(x)$ en distinguant $x < -a$, $x \in [-a, a]$ et $x > a$, où on précisera l'expression de a en fonction de r_0 .
- Tracer l'allure de $V(x)$.

Calcul du coefficient de réflexion

On modélise le potentiel énergétique $V(x)$ de la question précédente par un potentiel constant par morceaux :

$$\begin{aligned} V(x) &= 0 \text{ si } x < -a \\ &= -V_0 \text{ si } -a < x < a \\ &= 0 \text{ si } x > a \end{aligned}$$

On braque dans la direction et le sens de \vec{e}_x un faisceau d'électron de masse m , de vitesse v d'énergie $E = \frac{1}{2}mv^2 > 0 > -V_0$. On pose

$$k_0 = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}}, k = \sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}} \text{ et } K = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

- Dans la zone $[-a, a]$ (où le potentiel est constant égal à $-V_0$), on cherche une solution stationnaire de l'équation de Schrödinger sous la forme

$$\Psi(x, t) = \chi(t)\phi(x)$$

Etablir l'expression de $\chi(t)$ (on précisera la relation entre ω et E) et l'équation différentielle du second ordre vérifiée par $\phi(x)$.

— Justifier qu'on peut prendre

$$\begin{aligned} & A_1 e^{iKx} + B_1 e^{-iKx} \text{ si } x < -a \\ & \phi(x) A_2 e^{ikx} + B_2 e^{-ikx} \text{ si } -a < x < a \\ & A_3 e^{iKx} \text{ si } a < x \end{aligned}$$

— Écrire le système d'équations liant les différents coefficients complexes.

— On note les vecteurs courants de densité de probabilité

$$\vec{j}_i = |A_1|^2 \frac{\hbar K}{m} \vec{e}_x, \vec{j}_r = -|B_1|^2 \frac{\hbar K}{m} \vec{e}_x, \text{ et } \vec{j}_t = |A_3|^2 \frac{\hbar K}{m} \vec{e}_x$$

Et on définit les coefficients de réflexion et de transmission

$$R = \frac{||\vec{j}_r||}{||\vec{j}_i||} \text{ et } T = \frac{||\vec{j}_t||}{||\vec{j}_i||}$$

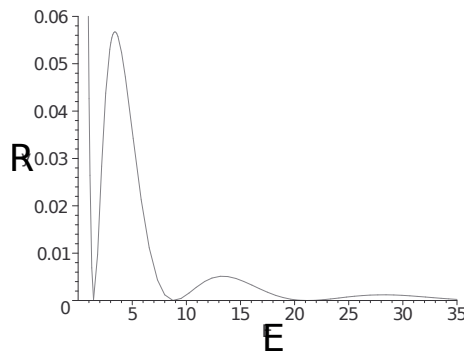
— Quel est la signification de T et R et quelle est la relation qui les lie ?

effet Ramsauer

Pour la suite, on admet les expression suivantes

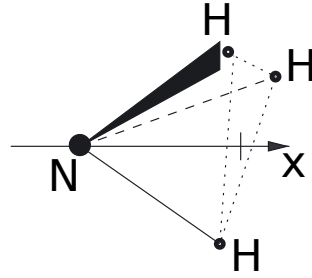
$$R = \frac{\beta^2 \sin^2(2ka)}{1 + \beta^2 \sin^2(2ka)} \text{ et } T = \frac{1}{1 + \beta^2 \sin^2(2ka)} \text{ avec } \beta = \frac{k_0^2}{2kK}$$

Voici l'allure des variations de R avec E (on a pris $V_0 = 1$, $a = 1$ et $\frac{2m}{\hbar^2} = 1$)



- Pour quelles valeurs de E, R s'annule-t-il ? Est-ce cohérent avec la courbe donnée ?
- En quoi les résultats obtenus prouvent-ils l'effet Ramsauer ?
- Donner l'expression de la vitesse minimale v qu'il faut donner aux électrons pour observer cet effet.

Molécule d'ammoniac

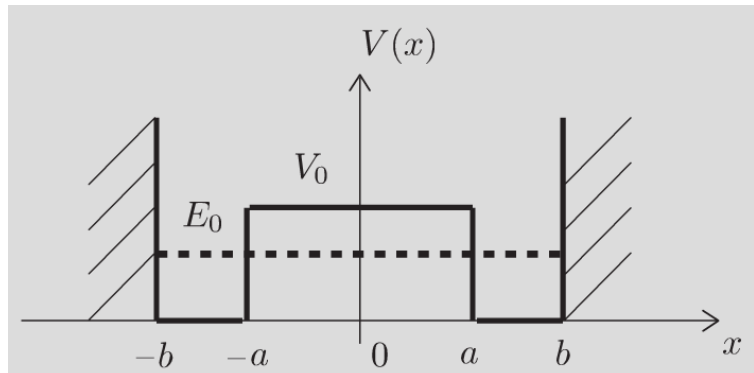


On étudie l'un des nombreux degrés de liberté de la molécule d'ammoniac : possibilité d'un atome d'azote de se déplacer par rapport au plan des atomes d'hydrogène, sur l'axe du triangle équilatéral et en particulier d'osciller autour des points N_1 ou N_2 ou de passer de l'un à l'autre. Au cours d'un mouvement de ce type, le centre de masse reste fixe et le triangle des atomes d'hydrogène se déforme en se déplaçant en même temps que l'atome d'azote.

On modélise ce problème en considérant deux puits de potentiel à une dimension, séparés par une barrière de potentiel. Chaque puits de potentiel correspond à un état d'équilibre possible de la molécule.

On pose $V = +\infty$ si $x > |b|$, $V = V_0$ si $|x| < a$ et $V = 0$ si $a < |x| < b$. On rappelle que pour un état stationnaire d'énergie E_0 : $\Psi(x, t) = \phi(x) \exp\left(-\frac{iE_0 t}{\hbar}\right)$.

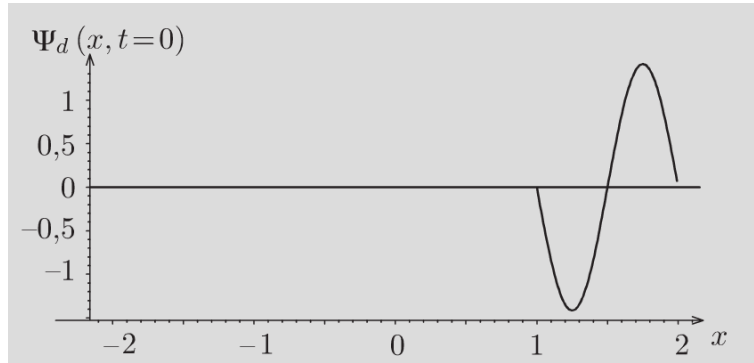
L'équation de Schrödinger s'écrit pour la partie spatiale de la fonction d'onde : $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \phi}{dx^2} + V\phi = E_0 \phi$. On donne $\hbar = 6,62 \times 10^{-34}$ J.s On a $0 < E_0 < V_0$.



1. On considère d'abord le cas limite où V_0 est infini. Rappeler les niveaux d'énergie dans chaque puits de potentiel infini.

On définit $\phi_d(x)$ la partie spatiale de la fonction d'onde $\Psi_d(x, t)$ non nulle dans l'intervalle $[a, b]$. On cherchera $\phi_d(x)$ de la forme $\phi_d(x) = A \sin(kx + \theta)$.

2. Déterminer $\Psi_d(x, t)$ correspondant au graphe ci-dessous pour l'énergie E_0 à $t = 0$.



On définit $\phi_g(x)$ la partie spatiale de la fonction d'onde $\Psi_g(x, t)$ non nulle dans l'intervalle $[-b, -a]$ telle que $\phi_g(x) = \phi_d(-x)$.

3. On considère $\Psi(x, t) = \alpha\Psi_g(x, t) + \beta\Psi_d(x, t)$. Déterminer une relation entre α et β .

On suppose maintenant que V_0 est fini. Comme le potentiel est symétrique et que les niveaux d'énergie ne sont plus dégénérés, on peut montrer que la fonction propre de l'hamiltonien doit être paire ou impaire. On obtient deux fonctions d'onde normalisées Ψ_+ et Ψ_- d'énergie E_+ et E_- différentes et voisines de E_0 . On note ϕ_+ et ϕ_- les parties spatiales : $\phi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_g(x) + \phi_d(x))$; $\phi_- = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_g(x) - \phi_d(x))$.

4. Représenter graphiquement ϕ_+ et ϕ_- en fonction de x à $t = 0$.

5. Déterminer la fonction $\Psi_+(x, t)$ pour une partie d'énergie E_+ . Déterminer de même $\Psi_-(x, t)$ pour une particule d'énergie E_- .

On suppose que, à $t = 0$, la particule est dans la partie gauche du double puits avec une énergie E ; la fonction d'onde est approximativement : $\Psi(x, 0) = \phi_g(x)$.

6. Déterminer la période d'oscillation de la molécule en fonction de $\Delta E = E_+ - E_-$.

Dans le maser à ammoniac (ancêtre du laser), on utilise une transition entre deux niveaux résultant du dédoublement de son état fondamental avec émission des photons de fréquence $\nu = 23,87$ GHz.

7. Calculer ΔE et la longueur d'onde des photons.