

MQ2 – Equation de Schrödinger dans un potentiel V(x)

A – Travaux dirigés

MQ21 – Puits de potentiel infini et fonctions d'onde

Une particule qui se déplace sur un axe Ox est soumise à un potentiel V tel que $V = 0$ pour $0 < x < a$ et $V = \infty$ pour $x < 0$ et $x > a$. On écrit les fonctions d'onde des états stationnaires sous la forme :

$$\psi_n(x, t) = \phi_n(x) f_n(t)$$

On désigne par E_n les énergies correspondantes. On rappelle que l'équation de Schrödinger s'écrit :

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

1°) Déterminer $\psi_n(x, t)$.

2°) Tracer la densité linéique de probabilité de présence en fonction de x pour n=1 et pour n=2.

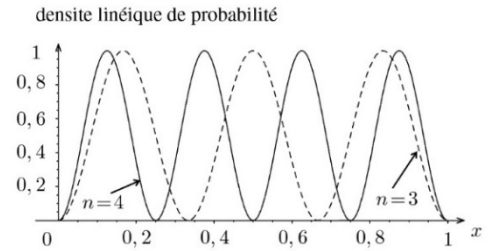
3°) La figure ci-contre représente la densité linéique de probabilité de présence pour n=3 et n=4. Quelle est la relation entre le niveau d'énergie E_n et le nombre de nœuds entre 0 et a ?

4°) Que se passe-t-il si a diminue ? Comment est modifié l'écart entre deux niveaux d'énergie successifs ? Comment est modifiée l'énergie cinétique ?

Comment est modifiée l'énergie minimale de la particule ? Retrouver qualitativement l'énergie minimale à partir de l'inégalité de Heisenberg spatiale.

5°) Quel cas limite retrouve-t-on si a tend vers l'infini ? À quoi est due la quantification de l'énergie ? Dans quel autre domaine de la physique a-t-on déjà rencontré une quantification des pulsations propres ?

Rép : 1°) $\psi_n(x, t) = A \sin(kx) e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}$ 2°) ... 3°) (n-1) nœuds 4°) Si a diminue l'écart entre les niveaux augmente... 5°) Corde vibrante.



MQ22 – Puits de potentiel fini

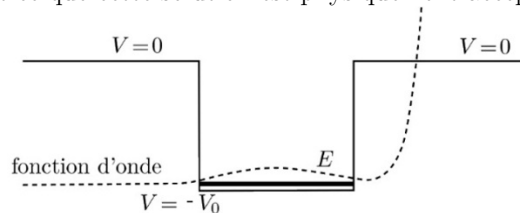
Une particule qui se déplace sur un axe Ox est soumise à un potentiel V tel que :

$$\begin{cases} V = 0 \text{ pour } x < 0 \text{ (région I)} \\ V = -V_0 \text{ pour } 0 < x < a \text{ (région II)} \\ V = 0 \text{ pour } x > a \text{ (région III)} \end{cases}$$

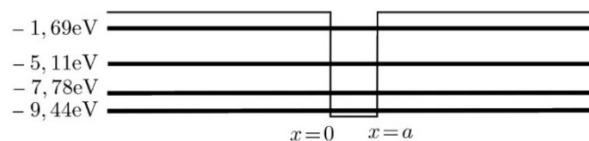
On cherche une fonction d'onde d'un état stationnaire sous la forme : $\psi(x, t) = \phi(x) e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$. On suppose que : $-V_0 < E < 0$. On rappelle que l'équation de Schrödinger s'écrit pour la partie spatiale :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \phi}{dx^2} + V\phi = E\phi$$

1°) Le graphe représente la fonction d'onde (trait en pointillés) à $t = 0$ en fonction de x pour une valeur quelconque du niveau d'énergie E (trait en gras). Est-ce que cette solution est physiquement acceptable ?



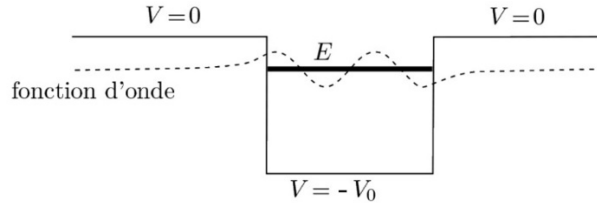
2°) On constate que pour $V_0 = 10 \text{ eV}$ et $a = 0,7 \text{ nm}$, 4 niveaux d'énergie donnent des solutions physiquement acceptables. À quoi est due la quantification de l'énergie ?



Montrez que la partie spatiale peut s'écrire :

$$\begin{cases} \phi_I(x) = Ae^{\alpha x} + A'e^{-\alpha x} \\ \phi_{II}(x) = Be^{ikx} + C e^{-ikx} \\ \phi_{III}(x) = D'e^{\alpha x} + D e^{-\alpha x} \end{cases}$$

3°) Que valent les coefficients A' et D' ? Écrire 4 relations de continuité. Le graphe représente la fonction d'onde (trait en pointillés) à $t = 0$ en fonction de x pour une valeur quelconque du niveau d'énergie E (trait en gras).



Interpréter cette courbe.

4°) Pour $V_0 = 15 \text{ eV}$ et $a = 0,7 \text{ nm}$, on constate que les niveaux d'énergie ($-1,33 \text{ eV}$; $-5,85 \text{ eV}$; $-9,75 \text{ eV}$; $-12,64 \text{ eV}$ et $-14,41 \text{ eV}$) donnent des solutions physiquement acceptables. Comment évolue le nombre de niveaux d'énergie en fonction de la profondeur du puits ? Quel modèle retrouve-t-on si $V_0 \rightarrow \infty$?

5°) Pour V_0 fixé, comment évolue les niveaux d'énergie en fonction de a ?

6°) Observe-t-on une quantification de l'énergie si $E > 0$?

Rép : 1°) Solution physiquement non acceptable 2°) $\alpha = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}$ et $k = \sqrt{+\frac{2mE}{\hbar^2}}$ 3°) $A'=D'=0$ 4°) Modèle du puits infini

5°) Augmentation de l'énergie minimale... 6°) Non car la particule n'est plus dans un état lié

MQ23 – Effet tunnel

Une particule qui se déplace sur un axe Ox est soumise à un potentiel V tel que :

$$\begin{cases} V = 0 \text{ pour } x < 0 \text{ (région I)} \\ V = V_0 \text{ pour } 0 < x < a \text{ (région II)} \\ V = 0 \text{ pour } x > a \text{ (région III)} \end{cases}$$

Cette particule d'énergie E arrive de la région I sur la barrière. On cherche une fonction d'onde d'un état stationnaire sous la forme : $\psi(x,t) = \phi(x)e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$. On suppose que $0 < E < V_0$.

On rappelle que l'équation de Schrödinger s'écrit pour la partie spatiale : $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\phi}{dx^2} + V\phi = E\phi$

1°) Montrer que la partie spatiale peut se mettre sous la forme :

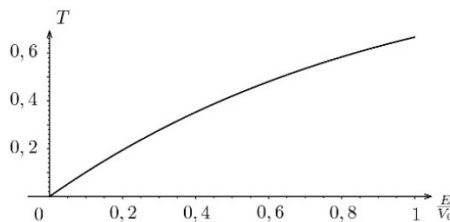
$$\begin{cases} \phi_I(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \\ \phi_{II}(x) = Ce^{\alpha x} + De^{-\alpha x} \\ \phi_{III}(x) = Fe^{ikx} + Ge^{-ikx} \end{cases}$$

2°) Que vaut le coefficient G ? Ecrire les relations de continuité.

3°) Définir T le coefficient de transmission en fonction des courants de probabilité et exprimer T en fonction de F et A. En résolvant le système précédent, on trouve :

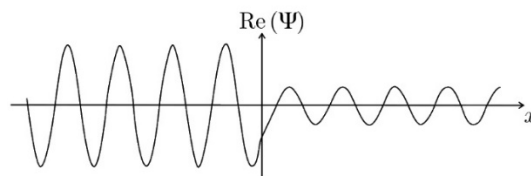
$$T = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \sinh^2(\alpha a)}$$

que l'on représente graphiquement en fonction de $\frac{E}{V_0}$.



On donne $E = 1 \text{ eV}$; $\hbar = 6,62 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$; $m = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$ et $V_0 = 2 \text{ eV}$. Calculez le coefficient de transmission pour $a=0,1 \text{ nm}$; $a=0,5 \text{ nm}$ et $a=0,6 \text{ nm}$.

Pour $a = 0,1 \text{ nm}$, on représente la partie réelle de la fonction d'onde en fonction de l'abscisse x à un instant t .



Pourquoi parle-t-on d'effet tunnel ?

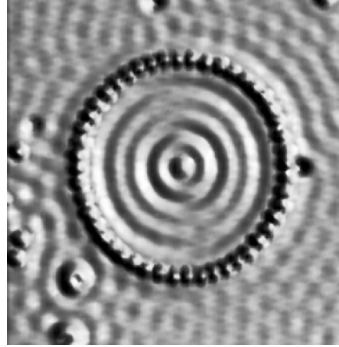
4°) Interpréter les résultats pour une seule particule incidente puis si on recommence l'expérience de manière indépendante un très grand nombre de fois N. Donner une expression simplifiée de T si $\alpha a \gg 1$.

Rép : 1°) $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ et $\alpha = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$ 2°) $G=0$... 3°) $T = \frac{|F|^2}{|A|^2}$ 4°) $T \sim \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-2\alpha a}$

B – Exercices supplémentaires

MQ24 – Enclos quantique

En 1993, Crommie, Lutz et Eigler ont positionné 48 atomes de fer le long d'un cercle, sur une surface de cuivre, afin d'emprisonner des électrons dans cet enclos quantique. Une image de cet enclos, réalisée à l'aide d'un microscope à effet tunnel, est représentée sur la figure. On propose d'estimer l'énergie des électrons piégés. On donne le rayon de l'enclos : $R = 7,13 \text{ nm}$ et la masse des électrons : $m^* = 0,38m_e$ où $m_e = 9,1 \times 10^{-31} \text{ kg}$ est la masse d'un électron dans le vide.



1°) Expliquer ce que représente l'image fournie par le microscope à effet tunnel : quelle est la grandeur représentée en niveaux de gris ?

2°) En utilisant un modèle de puits de potentiel infiniment profond unidimensionnel, estimer l'énergie des électrons piégés grâce à la figure. Discuter la validité des hypothèses retenues. Avez-vous réalisé une estimation par excès ou par défaut de l'énergie des électrons ?

3°) Pour obtenir une évaluation plus précise de l'énergie des électrons dans le cadre du modèle du puits de potentiel infiniment profond, on propose de tenir compte de la géométrie circulaire de l'enclos. On recherche une solution stationnaire en coordonnées polaires de la forme :

$$\psi(r, \theta, t) = \varphi(r, \theta) e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \text{ avec } \varphi(r, \theta) = f(r)g(\theta) \text{ et } n \text{ entier}$$

On donne l'expression de l'équation de Schrödinger indépendante du temps :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \varphi + V \varphi = E \varphi \text{ avec } \Delta \varphi = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \varphi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \theta^2}$$

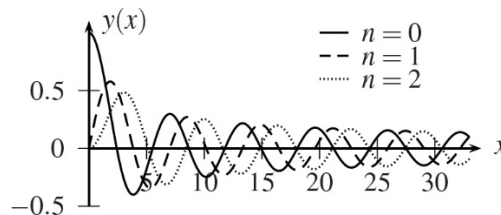
a) En écrivant la condition de normalisation de la fonction d'onde $\psi(r, \theta, t)$, montrer qu'on peut imposer $|g(\theta)| = 1$.

b) En utilisant l'équation de Schrödinger indépendante du temps et les propriétés de périodicité de la fonction d'onde, montrer que $g(\theta) = e^{in\theta}$ où n est un nombre entier positif.

c) Rechercher ensuite l'équation différentielle vérifiée par $f(r)$ et la transformer en faisant le changement de variable $x = kr$ où $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$

4°) La figure qui suit fournit une représentation graphique de plusieurs solutions de l'équation différentielle suivante :

$$x^2 \frac{d^2 y}{dx^2} + x \frac{dy}{dx} + (x^2 - n^2)y = 0 \text{ pour } n = \{0, 1, 2\} \text{ et on précise que } y(x=0) = 0 \text{ pour } n \geq 1.$$



Estimer l'énergie E des électrons. Comparer avec le résultat obtenu précédemment.

5°) À quelle vitesse moyenne se déplace un électron dans l'enclos ?

Rép : 1°) C'est la densité de probabilité de présence...

2°) $E = 0,40 \text{ eV}$

3°) a) Condition de normalisation...

b) $g(\theta) = e^{in\theta}$ où n entier

c) $x^2 \frac{d^2 y}{dx^2} + x \frac{dy}{dx} + (x^2 - n^2)y = 0$

4°) $E = 0,44 \text{ eV}$

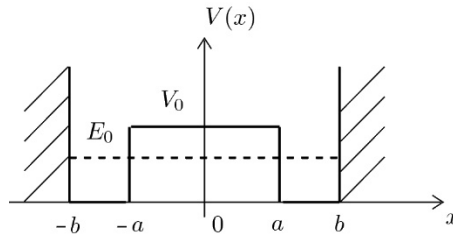
5°) $v = \sqrt{\frac{2E}{m^*}} \sim 6,4 \cdot 10^5 \text{ ms}^{-1}$

MQ25 – Molécule d'ammoniac

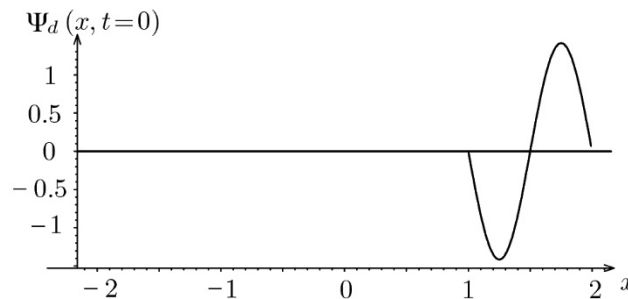
On étudie l'un des nombreux degrés de liberté de la molécule d'ammoniac : possibilité d'un atome d'azote de se déplacer par rapport au plan des atomes d'hydrogène, sur l'axe du triangle équilatéral et en particulier d'osciller autour d'un des points N_1 ou N_2 ou de passer de l'un à l'autre. Au cours 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 par le mouvement d'une particule par un ensemble de deux puits de potentiel à une dimension, correspondant aux deux états d'équilibre possibles de la molécule, et séparés par une barrière de potentiel :

$$\begin{cases} V = \infty & \text{si } |x| > b \\ V = V_0 & \text{si } |x| < a \\ V = 0 & \text{si } a < |x| < b \end{cases}$$

On rappelle que pour un état stationnaire d'énergie E_0 : $\psi(x, t) = \phi(x)e^{-iEt/\hbar}$



1°) On considère d'abord le cas limite où V_0 est infini. Rappeler les niveaux d'énergie dans chaque puits de potentiel infini. Quel est le degré de dégénérescence ? On définit $\phi_d(x)$ la partie spatiale de la fonction d'onde $\Psi_d(x, t)$ non nulle dans l'intervalle $[a, b]$. Déterminer $\Psi_d(x, t)$ correspondant au graphe ci-contre pour l'énergie E_0 à $t = 0$.



On définit $\phi_g(x, t)$ la partie spatiale de la fonction d'onde $\psi_g(x, t)$ non nulle dans l'intervalle $[-b, -a]$ telle que $\phi_g(x, t) = \phi_d(-x, t)$. On considère $\psi(x, t) = \alpha\psi_d(x, t) + \beta\psi_g(x, t)$. Déterminer une relation entre α et β .

2°) 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 :

$$\begin{cases} \phi_+(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_g(x) + \phi_d(x)) \\ \phi_-(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_g(x) - \phi_d(x)) \end{cases}$$

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

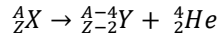
3°) Déterminer la fonction $\psi_+(x, t)$ pour une partie d'énergie E_+ . Déterminer de même $\psi_-(x, t)$ pour une particule d'énergie E_- . On suppose qu'à $t = 0$, la particule est dans la partie gauche du double puits avec une énergie E , la fonction d'onde est approximativement : $\psi(x, 0) = \phi_g(x)$. Calculer les probabilités de présence de chaque côté du puits puis déterminer la période d'oscillation de la molécule en fonction de $\Delta E = E_+ - E_-$.

4°) Dans le maser à ammoniac (ancêtre du laser), on utilise une transition entre deux niveaux résultant du dédoublement de son état fondamental avec émission de photons de fréquence $\nu = 23\,870\text{ MHz}$. Calculer ΔE et la longueur d'onde des photons.

Rép : 1°) $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ 2°) ... 3°) $T = \frac{h}{\Delta E}$ 4°) $\lambda = 1,26\text{ cm}$

MQ26 – Radioactivité alpha

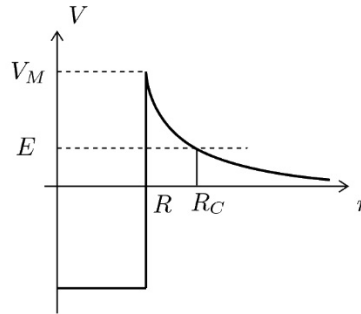
La radioactivité α est l'émission par un noyau ${}^A_ZX$ d'un noyau d'hélium ${}^4_2He$ ou particule α :



Dans une théorie élémentaire de la radioactivité α proposée par Gamow en 1928, on considère que la particule α préexiste dans le noyau X, considéré comme résultant de la réunion du noyau Y et de la particule α . La loi d'interaction entre ces deux particules est définie par leur énergie potentielle $V(r)$ représentée en fonction de leur distance r . Si r est supérieur à une limite $R = r_0 A^{\frac{1}{3}}$ (pratiquement égal au rayon du noyau Y, car la particule α est quasi ponctuelle), l'énergie potentielle V est due à la seule répulsion électrostatique entre les $Z - 2$ protons de Y et les 2 protons de He :

$$V(r) = 2 \frac{(Z-2)e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Pour $r < R$, les interactions nucléaires attractives interviennent ; on peut les schématiser par un puits de potentiel très profond :



On donne : $r_0 = 1,2 \cdot 10^{-15} m$; L'énergie de la particule α est $E = 4,78 \text{ MeV}$. Le coefficient de transmission peut se mettre sous la forme approchée :

$$\ln T \approx -2 \int_{R_A}^{R_C} \sqrt{\frac{2m_\alpha(V(r) - E)}{\hbar^2}} dr \approx -\frac{341}{\sqrt{E \text{ (en MeV)}}} + 74,8$$

1°) On considère un atome X de radium ${}^{226}_{88}Ra$. Calculer R et R_C .

2°) Expliquer pourquoi l'émission α ne peut se faire que par effet tunnel.

3°) On considère que la particule α de vitesse v rebondit un certain nombre de fois sur la paroi. À chaque collision avec la paroi située en $r = R$, la probabilité pour que la particule franchisse la barrière est T . On appelle t_0 le temps mis entre deux collisions. Calculer t_0 et $\tau = \frac{t_0}{T}$ le temps de vie de la particule alpha dans le puits de potentiel.

4°) L'énergie E des particules α peut varier entre 4 et 9 MeV pour les différents émetteurs α . Montrer avec le modèle précédent que t_0 est presque le même pour tous les émetteurs α . En déduire une formule approchée numérique de $\ln \tau$ en fonction de E exprimé en MeV.

Rép : 1°) $V_M = 34 \text{ MeV}$ 2°) ... 3°) $t_0 = \frac{2R}{v}$ 4°) $\ln \tau \approx -\frac{341}{\sqrt{E \text{ (en MeV)}}} - 123$

MQ27 – Puits de potentiel infini et énergie

Quelles sont les valeurs possibles que peut prendre l'énergie d'une particule de masse m dans un puits de potentiel à une dimension, infiniment profond, de largeur a ?

On rappelle que pour un état stationnaire : $\psi(x, t) = \phi(x)e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$

L'équation de Schrödinger s'écrit pour la partie spatiale de la fonction d'onde :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\phi}{dx^2} + V\phi = E\phi$$

Rép : $E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$