



TD mécanique quantique

Exercice 1 . Particule libre

On s'intéresse à une particule quantique de masse m astreinte à se déplacer suivant l'axe Ox de vecteur unitaire $\vec{u}_x$. A cette particule on associe une fonction d'onde $\Psi(x, t)$ qui décrit son état à l'instant t .

Lorsque la particule possède une énergie potentielle $V(x)$, la fonction d'onde $\Psi(x, t)$ est solution de l'équation de Schrödinger :

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

- 1- On pose $\rho(x) = |\Psi(x, t)|^2$. Que représente cette grandeur ? Pourquoi doit-on avoir $\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 1$? En déduire la dimension de $|\Psi(x, t)|$.
- 2- Dans tout le problème on cherchera des fonctions d'ondes relatives à des états stationnaires d'énergie E définies par :

$$\Psi(x, t) = \varphi(x) e^{-i \frac{E}{\hbar} t}$$

- a- Pourquoi un tel état est appelé « état stationnaire » ? Déterminer l'équation de Schrödinger indépendante du temps vérifiée par $\varphi(x)$.
- b- En considérant le cas où $V(x) = V_0$, avec V_0 est une constante réelle, trouver les solutions possibles $\varphi(x)$ en comparant E à V_0 .

Cas d'une particule Libre

Considérons une particule libre de masse m , d'impulsion p évoluant suivant Ox .

- 3- Montrer que son énergie s'écrit : $E = \frac{p^2}{2m}$.
- 4- Montrer que la fonction d'onde $\Psi(x, t)$ de la particule libre s'écrit sous la forme :

$$\Psi(x, t) = A e^{-i(\omega t - kx)} + B e^{-i(\omega t + kx)}$$

A et B sont deux constantes complexes ; ω et k deux constantes positives à exprimer en fonction de E , $\hbar$ et m .

- 5- Interpréter la forme générale de $\Psi(x, t)$. Ecrire la relation de dispersion exprimant ω en fonction de k . En déduire la relation entre la longueur d'onde λ associée à cette particule et son impulsion p . Commenter.

- 6- Sachant qu'on peut écrire les constantes complexes A et B sous la forme suivante : $A = \sqrt{\rho_1} e^{i\theta_1}$ et $B = \sqrt{\rho_2} e^{i\theta_2}$ avec ρ_1, ρ_2, θ_1 et θ_2 sont des constantes réelles. Montrer que :

$$\rho(x) = \rho_1 + \rho_2 + 2\sqrt{\rho_1\rho_2} \cos(2kx + \theta_1 - \theta_2).$$

- 7- Tracer l'allure de $\rho(x)$ et interpréter.
 8- Pourquoi la solution $\Psi(x, t)$ trouvée dans la question (4) ne décrit pas la réalité ? Que peut-on proposer ?
 9- En réalité l'état quantique de la particule libre est décrit par un paquet d'ondes défini par :

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) e^{-i(\omega(k)t - kx)} dk \quad \text{avec} \quad g(k) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{k_2 - k_1}} & \text{pour } k_1 < k < k_2 \\ 0 & \text{ailleurs} \end{cases}$$

- a- On pose $k_0 = \frac{k_1 + k_2}{2}$ et $\Delta k = k_2 - k_1$, déterminer $\Psi(x, 0)$.
 b- En déduire la densité de probabilité $\rho(x) = |\Psi(x, 0)|^2$. Déterminer les valeurs qui annulent $\rho(x)$ et tracer ensuite la courbe $\frac{\rho(x)}{\rho_0}$ où $\rho_0 = \rho(x = 0)$.
 c- Montrer que $\Psi(x, 0)$ représente bien l'état d'une particule libre à l'instant $t = 0$. On donne :

$$\int_0^{+\infty} \left(\frac{\sin u}{u} \right)^2 du = \frac{\pi}{2}$$

 d- On pose $\Delta x = x_1 - x_{-1}$ où x_1 et x_{-1} sont les premières valeurs de x qui annulent $\rho(x)$ de part et d'autre de l'origine des abscisses. Calculer le produit $\Delta x \cdot \Delta k$. En déduire l'expression de $\Delta x \cdot \Delta p$. Quel nom donne-t-on à cette relation ? Commenter.
 10- En utilisant la relation de dispersion, déterminer la vitesse de groupe v_g et la vitesse de phase v_φ . Quelle est la relation entre v_g et l'impulsion p ? Conclure.

Exercice 2 : Effet tunnel (d'après MP 2018)

La particule d'énergie E venant de la région I ($x < 0$) évolue dans un potentiel $V(x)$ défini par (figure 1) :

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{si } 0 < x < a \\ 0 & \text{ailleurs} \end{cases}$$

On suppose que $0 < E < V_0$ et on cherche les états stationnaires de cette particule dans les trois régions (région I ; région II et région III).

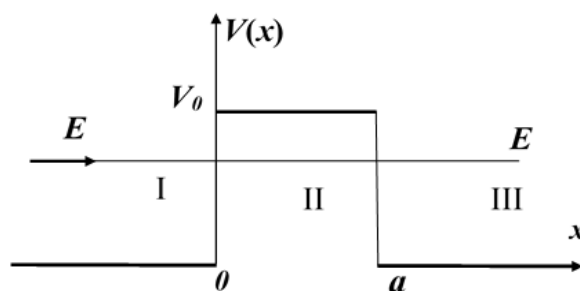


Figure 1

- 1- On pose $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ et $q = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$. Trouver les solutions $\varphi(x)$ dans chaque région. On introduira les constantes d'intégration A_I, B_I, A_{II}, B_{II} et A_{III} correspondantes respectivement aux régions I, II et III.

- 2- En appliquant les conditions aux limites aux interfaces $x=0$ et $x=a$, écrire un système de quatre équations dont les inconnus sont A_I , B_I , A_{II} , B_{II} et A_{III} . Quelle condition supplémentaire permet d'établir une cinquième équation ?

- 3- On définit les coefficients $R = \frac{\|\vec{j}_r\|}{\|\vec{j}_i\|}$ et $T = \frac{\|\vec{j}_t\|}{\|\vec{j}_i\|}$, où $\vec{j}_i$, $\vec{j}_r$ et $\vec{j}_t$ sont les vecteurs densité de courant de probabilité liés respectivement à l'onde incidente, réfléchi dans la région (I) et transmise dans la région III. On rappelle que le vecteur densité de courant de probabilité d'une onde plane de vecteur d'onde $\vec{k}$ s'écrit :

$$\vec{j} = |\Psi(x,t)|^2 \frac{\hbar \vec{k}}{m}$$

Exprimer R et T en fonction des constantes d'intégration. Que représentent ces coefficients? Pourquoi doit-on avoir $R+T=1$?

- 4- La résolution du système d'équations précédent donne :

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

Calculer T dans le cas d'une barrière de potentiel atomique de hauteur $V_0 = 2,00 \text{ eV}$ et de largeur $a = 0,1 \text{ nm}$ pour les particules suivantes :

- Un électron d'énergie $E = 1,00 \text{ eV}$ et de masse $m_e = 9,11 \cdot 10^{-31} \text{ Kg}$.
- Un proton d'énergie $E = 1,00 \text{ eV}$ de masse $m_p = 2000m_e$.

Commenter.

- 5- Une barrière est dite épaisse si $a \gg \delta = \frac{1}{q}$.

- a- Montrer que dans ce cas on a $T \simeq T_0 e^{-2qa}$ avec $T_0 = 16 \frac{E(V_0 - E)}{V_0^2}$.

- b- Tracer l'allure de $T_0(E)$ et discuter les cas limites $E=0$ et $E=V_0$. Calculer la valeur moyenne de T_0 définie par :

$$\langle T_0 \rangle = \frac{1}{V_0} \int_0^{V_0} T_0(E) dE$$

- c- En supposant que pour $E \neq 0$ et $E \neq V_0$, $\ln T_0 \simeq \ln \langle T_0 \rangle$, montrer que $\ln T \simeq -2qa$.

Radioactivité α

L'exemple le plus célèbre de l'effet tunnel est celui de l'émission des particules α (${}^4_2\text{He}^{2+}$) de masse $m_\alpha = 6,64 \times 10^{-27} \text{ kg}$ par des noyaux lourds radioactifs dont l'interprétation a été proposée par le physicien russe Georges Gamow. Ces particules sont émises avec une énergie $4 \leq E \leq 9 \text{ MeV}$.

A l'intérieur du noyau de rayon r_0 la particule α est soumise à l'interaction nucléaire forte de courte portée modélisée par un puits de potentiel de profondeur $V_0 > 0$ (figure 2).

Une fois que la particule a quitté le noyau ($r > r_0$), son énergie potentielle se réduit uniquement à son énergie potentielle coulombienne : $V(r) = \frac{K}{4\pi\epsilon_0 r}$ où $K = 2(Z-2)e^2$.

Z est le numéro atomique de l'atome radioactif.

Dans la suite on se place dans le cas unidimensionnel suivant $\vec{u}_r$. La particule α est représentée par la fonction d'onde $\Psi(r,t)$ qui vérifie l'équation de Schrödinger :

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

- **1^{er} cas** : La particule est piégée dans le puits de potentiel et possède une énergie $E < 0$. On se propose de déterminer les niveaux d'énergie et les états liés de cette particule.

On suppose que ce puits est tel que :

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & \text{si } 0 < r < r_0 \\ +\infty & \text{ailleurs} \end{cases}$$

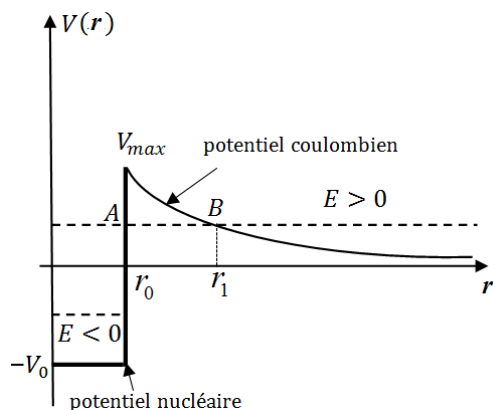


Figure 2

- a- Sachant que la fonction d'onde de la particule hors du puits est nulle, montrer que la solution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps pour $0 < r < r_0$ est : $\varphi(r) = D \sin(kr)$, où D est une constante à exprimer. Exprimer k en fonction de E et V_0 .

- b- Montrer que $k_n = \frac{n\pi}{r_0}$, où n est un entier positif. En déduire l'expression de l'énergie E_n correspondante.

Commenter.

- 7- **2^{ème} cas** : La particule α possède maintenant une énergie $E > 0$,

- a- Justifier qu'elle a la possibilité de franchir la barrière de potentiel située entre A et B (Figure 2).

- b- Pour l'uranium $^{238}_{92}\text{U}$ de rayon $r_0 = 3,50 \times 10^{-15} \text{ m}$, l'énergie E des particules émises est de 4,00 MeV.

Calculer en MeV la hauteur $V_{\max}$ de la barrière.

- c- Déterminer le rayon r_1 correspondant au point B.

- 8- Etant donné que la barrière de potentiel n'a pas la forme simple que celle étudiée dans la section précédente, on peut, pour $r_0 < r < r_1$, approcher la fonction $V(r)$ par une succession de barrières rectangulaires de hauteur $V(r)$ et de largeur dr suffisamment épaisses pour que l'approximation de la question 5-c soit valable (Figure 3).

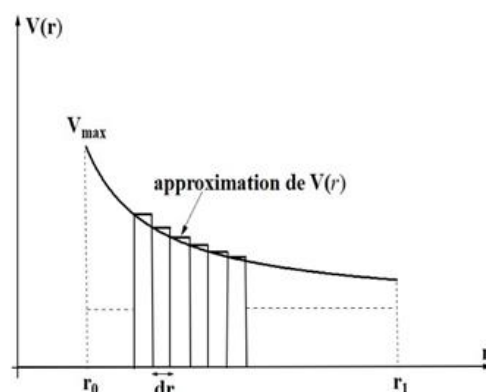


Figure 3

- a- Montrer que : $\ln(T(r+dr)) \approx \ln(T(r)) - 2qdr$.

b- En déduire la relation suivante : $\ln T = -\frac{2}{\hbar} \int_{r_0}^{r_1} \sqrt{2m_\alpha \left(\frac{K}{4\pi\epsilon_0 r} - E \right)} dr$

c- On admet que : $\int_{r_0}^{r_1} \sqrt{\left(\frac{r_1}{r} - 1 \right)} dr \approx r_1 \left(\frac{\pi}{2} - 2\sqrt{\frac{r_0}{r_1}} \right)$, en déduire que :

$$\ln T = a - \frac{b}{\sqrt{E}} \quad (\text{Loi de Gamow}).$$

Exprimer a et b en fonction des données du problème.

9- Typiquement, pour le noyau d'uranium ${}^{238}_{92}\text{U}$, on trouve $T \approx 2 \times 10^{-39}$. Par ailleurs, la particule α effectue des allers-retours (oscillations) dans le puits de potentiel nucléaire de largeur r_0 à une vitesse moyenne v .

a- En négligeant l'énergie potentielle de la particule devant son énergie cinétique, montrer que : $v = \sqrt{\frac{2E}{m_\alpha}}$. Calculer sa valeur.

b- Montrer que la durée moyenne entre deux rebonds successifs de la particule sur la barrière s'écrit :

$$t_m = r_0 \sqrt{\frac{2m_\alpha}{E}}. \text{ En déduire le nombre } n \text{ de rebonds par unité de temps. Calculer sa valeur numérique.}$$

c- Montrer que la probabilité par unité de temps d'émission d'une particule α est : $\beta = n.T$ avec β est la constante radioactive de l'élément radioactif.

10- Soit $N(t)$ le nombre de noyaux radioactifs à l'instant t , et N_0 ce nombre à $t = 0$.

a- Justifier que : $\frac{dN}{dt} = -\beta N(t)$.

b- Calculer la valeur de β pour l'uranium ${}^{238}_{92}\text{U}$. Comparer cette valeur à celle mesurée $\beta_{exp} = 5.10^{-18} \text{s}^{-1}$. Commenter.

c- Le temps de demi-vie $t_{\frac{1}{2}}$ (ou période radioactive) de l'élément radioactif est défini par : $N\left(\frac{t_1}{2}\right) = \frac{N_0}{2}$. Exprimer $t_{\frac{1}{2}}$ en fonction de β .

d- Déterminer en utilisant la loi de Gamow, une relation entre $\ln\left(\frac{t_1}{2}\right)$ et E . Cette loi fut établie empiriquement par Geiger et Nuttall en 1911. Comparer ce résultat à ceux que l'on peut déduire des mesures rassemblés sur la figure 4.

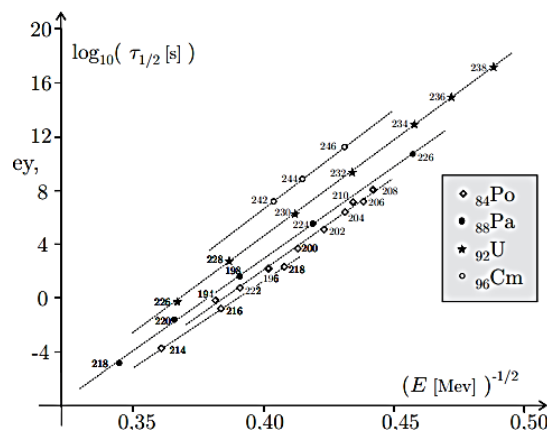


Figure 4 : loi de Geiger-Nuttall