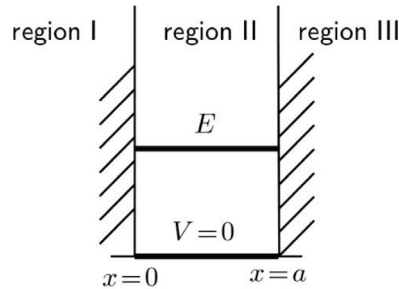


MQ2 – Equation de Schrödinger dans un potentiel V(x)

A – Travaux dirigés

MQ21 – Puits de potentiel infini et fonctions d'onde

1°)



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

Ecrivons : $\psi(x, t) = \phi(x)f(t)$ d'où :

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

$$\Leftrightarrow -f(t) \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 (\phi(x))}{\partial x^2} + V\phi(x)f(t) = i\hbar \phi(x) \frac{\partial (f(t))}{\partial t}$$

On divise tout par $\phi(x)f(t)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\phi''(x)}{\phi(x)} + V(x) = \frac{i\hbar f'(t)}{f(t)}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\phi''(x)}{\phi(x)} + V(x) = \frac{i\hbar f'(t)}{f(t)}$$

On a séparé les variables et on se retrouve avec une égalité du type $F(x) = G(t)$ par conséquent :

$$\frac{i\hbar f'(t)}{f(t)} = \text{cste} = A \Rightarrow f'(t) - \frac{A}{i\hbar} f(t) = 0$$

$$\Rightarrow f(t) = B e^{\frac{A}{i\hbar} t}$$

Or A a une dimension d'une énergie et par convention on pose B=1 afin d'avoir le module de f(t) égale à 1.

$$\Rightarrow f(t) = e^{\frac{E}{i\hbar} t} = e^{-i\omega t}$$

NB :

Le fait de poser E l'énergie provient de l'équation de Schrödinger suivante :

$$H \Psi = E \Psi$$

Où E est la valeur propre de l'opérateur hamiltonien qui entraîne :

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = E \Psi \Leftrightarrow i\hbar \frac{\partial (f(t))}{\partial t} = E f(t) \Leftrightarrow f(t) = A e^{-\frac{E}{i\hbar} t} \Rightarrow f(t) = e^{-i\omega t}$$

Déterminons $\phi(x)$:

$$\begin{aligned}
 & -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \\
 \Leftrightarrow & -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} f(t) + V\phi f(t) = i\hbar \left(-i \frac{E}{\hbar}\right) \phi f(t) \\
 \Leftrightarrow & -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + (V - E)\phi = 0
 \end{aligned}$$

Pour la région I et III on a :

$$V \rightarrow \infty \Rightarrow \phi \rightarrow 0 \text{ seule solution possible pour l'E.D}$$

Pour la région II :

$$\begin{aligned}
 & \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + E\phi = 0 \\
 \Leftrightarrow & \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + k^2 \phi = 0 \text{ où } k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}
 \end{aligned}$$

Vu que $E = E_c \geq 0$ on s'intéresse seulement au cas $E > 0$:

$$\Rightarrow \phi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx)$$

Or :

$$\begin{cases} \phi(0) = 0 \\ \phi(a) = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} B = 0 \\ \sin(ka) = 0 \end{cases}$$

Par conséquent :

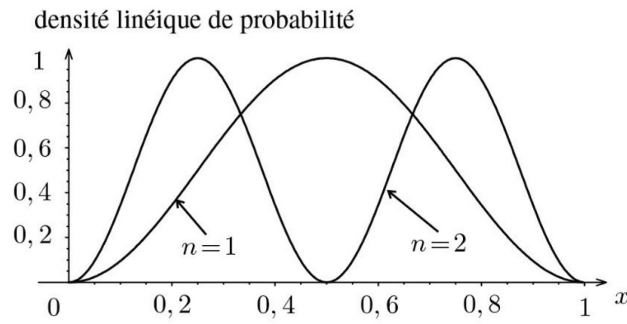
$$\phi(x) = A \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right)$$

Vu le choix de $f(t)$, ϕ doit être normalisée :

$$\begin{aligned}
 & \int_0^a A^2 \sin^2\left(\frac{n\pi}{a} x\right) dx = 1 \\
 \Leftrightarrow & A^2 \times \frac{a}{2} = 1 \\
 \Leftrightarrow & A = \pm \sqrt{\frac{2}{a}} \\
 \Rightarrow & \Psi_n(x, t) = \pm \sqrt{\frac{2}{a}} e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right)
 \end{aligned}$$

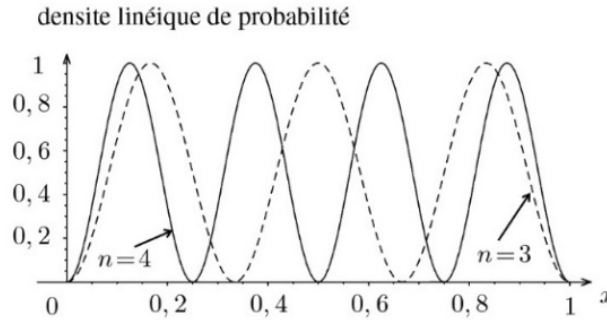
2°)

D'où la densité de probabilité : $|\Psi_n(x, t)|^2 = \frac{2}{a} \sin^2\left(\frac{n\pi}{a} x\right)$ que l'on représente sur la figure suivante :



3°)

Sur la figure on remarque que le niveau d'énergie E_n dispose de $(n-1)$ nœuds.



4°) On a démontré que :

$$\begin{aligned}
 k_n &= \frac{n\pi}{a} \Rightarrow E_n = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \\
 &\Rightarrow E_n = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2ma^2} \\
 \Rightarrow E_{n+1} - E_n &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} ((n+1)^2 - n^2)
 \end{aligned}$$

- Si a diminue, l'écart entre E_{n+1} et E_n *augmente*. (ainsi que l'énergie de chaque niveau)
- Vu que $E = E_c$ l'énergie cinétique de la particule augmente aussi.
- $E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \Rightarrow$ l'énergie minimal augmente aussi.
- D'après Heisenberg $\Delta p_x \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}$

$$\text{Posons } \Delta x = a \Rightarrow \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2a}.$$

Or la particule peut se déplacer de la gauche vers la droite et de la droite vers la gauche de façon équitable donc : $\langle p_x \rangle = 0$

$$\begin{aligned}
 &\Rightarrow \Delta p_x^2 = \langle p_x^2 \rangle \\
 &\Rightarrow \langle p_x^2 \rangle \geq \left(\frac{\hbar}{2a} \right)^2 \\
 &\Rightarrow \frac{\langle p_x^2 \rangle}{2m} \geq \frac{\hbar^2}{8ma^2} \\
 &\Rightarrow \langle E \rangle \geq \frac{\hbar^2}{8ma^2} = E_{\min}
 \end{aligned}$$

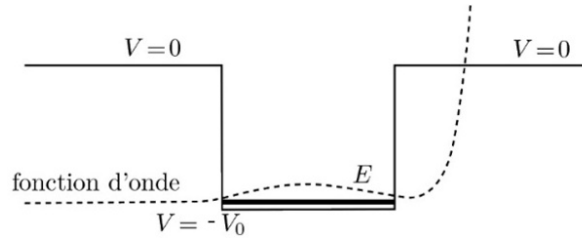
On vérifie que : $E_1 > E_{\min}$

5°)

- Si a est très grand, alors la particule n'est plus confinée, et les niveaux d'énergie se rapprochent jusqu'à devenir un continuum d'énergie comme en mécanique classique.
- C'est le confinement de la particule qui crée la quantification de l'énergie.
- On retrouve des quantifications de l'énergie, pour la corde fixée à ses deux extrémités, les niveaux d'énergie des hydrogéoïdes, le puits fini en mécanique quantique...

MQ22 – Puits de potentiel fini

1°) Soit la figure proposée :



On remarque que la solution diverge pour $x > a$ ce qui n'est pas acceptable car la probabilité de présence va tendre vers l'infini. (non normalisable aussi)

2°) La quantification de l'énergie est due au confinement de la particule dans le cas d'un état lié.

Dans les zones I et III :

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - \alpha^2 \phi = 0 \text{ où } \alpha^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2} \text{ car } E < 0$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \phi_I(x) = Ae^{\alpha x} + A'e^{-\alpha x} \\ \phi_{III}(x) = D'e^{\alpha x} + De^{-\alpha x} \end{cases}$$

Dans la zone II :

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + k^2 \phi = 0 \text{ où } k^2 = \frac{2m(E - V)}{\hbar^2} = \frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2} \text{ car } (E + V_0) > 0$$

$$\Rightarrow \phi_{II}(x) = Be^{ikx} + C e^{-ikx}$$

3°)

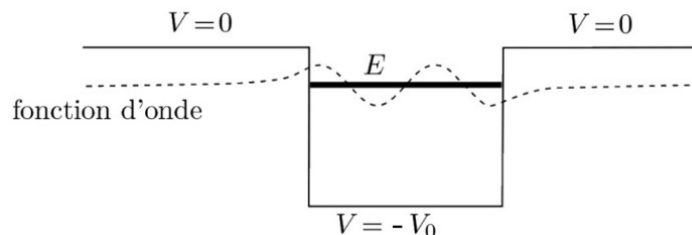
La fonction d'onde ne doit pas diverger, par conséquent :

$$\begin{cases} \phi_I(x) = Ae^{\alpha x} \\ \phi_{III}(x) = De^{-\alpha x} \end{cases}$$

Les relations de continuité s'écrivent :

$$\begin{cases} \phi_I(0) = \phi_{II}(0) \\ \phi'_I(0) = \phi'_{II}(0) \\ \phi_{III}(a) = \phi_{II}(a) \\ \phi'_{III}(a) = \phi'_{II}(a) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} A = B + C \\ \alpha A e^{\alpha x} = ik(B - C) \\ D e^{-\alpha a} = B e^{ika} + C e^{-ika} \\ -\alpha D e^{-\alpha a} = ik(B e^{ika} - C e^{-ika}) \end{cases}$$

Interprétons la courbe suivante :



On remarque que la probabilité de présence de la particule dans les régions I et III n'est pas nulle, alors qu'en mécanique classique ces zones sont interdites. On retrouve des ondes évanescentes dans ces zones.

4°) Plus le puits est profond et plus le nombre de niveaux d'énergie augmente. Si le puits devient infini ($V_0 \rightarrow \infty$), on aura une infinité de niveaux d'énergie.

5°) Comme pour le puits infini, si a diminué l'écart entre deux niveaux d'énergie augmente et on aura donc moins de niveaux d'énergie accessibles.

6°) Si $E > 0$, la particule est dans un état libre (de diffusion) et on n'observe plus de quantification.

MQ23 – Effet tunnel

1°)

L'équation de Schrödinger sur la partie spatiale s'écrit :

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) \phi = 0$$

Pour les régions I et III :

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \phi &= 0 \\ \Leftrightarrow \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + k^2 \phi &= 0 \text{ où } k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \\ \Rightarrow \begin{cases} \phi_I(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx} \\ \phi_{III}(x) = F e^{ikx} + G e^{-ikx} \end{cases} \end{aligned}$$

Pour la région II :

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - \alpha^2 \phi &= 0 \text{ où } \alpha^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} > 0 \\ \Rightarrow \phi_{II}(x) &= C e^{\alpha x} + D e^{-\alpha x} \end{aligned}$$

2°) La particule ne peut pas revenir vers la marche de potentiel dans la zone III donc :

$$G = 0$$

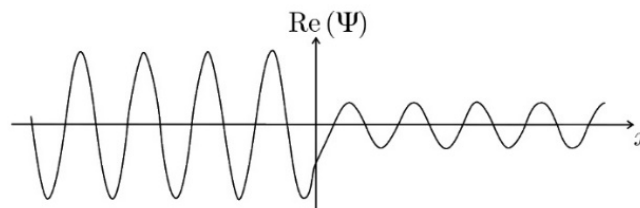
3°) On définit en mécanique quantique le coefficient de transmission par :

$$T = \frac{j_{transmis}}{j_{incident}} = \frac{\frac{\hbar k}{m} |\Psi_{III}|^2}{\frac{\hbar k}{m} |\Psi_I|^2} = \frac{|F|^2}{|A|^2}$$

Avec le résultat proposé on obtient :

$$\begin{aligned} T &= \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \operatorname{sh}^2(\alpha a)} \\ \Rightarrow \begin{cases} \text{Si } a = 0,1 \text{ nm}, T = 0,78 \\ \text{Si } a = 0,5 \text{ nm}, T = 0,024 \\ \text{Si } a = 0,6 \text{ nm}, T = 0,0085 \end{cases} \end{aligned}$$

Pour a=0,1 nm :



La particule a une chance non nulle de traverser la barrière, on parle d'effet tunnel comme si elle creusait un tunnel pour passer cette barrière.

4°) Une particule unique a une probabilité T de passer la région II et de se retrouver dans la région III.

Pour N particules, il y aura NT particules transmises.

$$\text{Si } \alpha a \gg 1 \text{ alors } sh(\alpha a) \sim \frac{e^{\alpha a}}{2}$$

Or :

$$T = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} sh^2(\alpha a)} \text{ avec } \alpha^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}$$

$$T \sim \frac{1}{\frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \left(\frac{e^{\alpha a}}{2}\right)^2}$$

$$\Rightarrow T \sim \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-2\sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}a}$$

B – Exercices supplémentaires

MQ24 – Enclos quantique

1°) L'image représente en niveaux de gris une grandeur proportionnelle à la densité locale d'électrons. On peut donc dire que l'image permet de visualiser la densité de probabilité de présence.

2°) L'énergie associée au niveau n du puits infiniment profond, de largeur $2R$ est :

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m(2R)^2}$$

On compte 9 oscillations de la densité de probabilité de présence sur un diamètre : on prend donc $n = 9$. D'où :

$$E_9 = 6,3 \cdot 10^{-20} J \sim 0,40 \text{ eV}$$

On constate que les oscillations sont visibles à l'extérieur de l'enclos : les atomes qui constituent l'enclos forment plus vraisemblablement une barrière d'épaisseur finie. Les électrons peuvent franchir cette barrière par effet tunnel. La hauteur de la barrière est donc d'amplitude finie. Le confinement est moindre que celui qui est associé à un puits infini. Par conséquent on a réalisé une estimation par excès des niveaux d'énergie car :

$$E_{fini} < E_\infty$$

3°)

a) La condition de normalisation s'écrit :

$$\begin{aligned} \int_{r=0}^R \int_{\theta=0}^{2\pi} |\Psi(r, \theta, t)|^2 r dr d\theta &= 1 \\ \Leftrightarrow \int_{r=0}^R \int_{\theta=0}^{2\pi} |f(r)g(\theta)|^2 r dr d\theta &= 1 \\ \Leftrightarrow \int_{r=0}^R r |f(r)|^2 dr \int_{\theta=0}^{2\pi} |g(\theta)|^2 d\theta &= 1 \end{aligned}$$

Or la figure de l'énoncé montre qu'il y a invariance de la probabilité de présence suivant θ , par conséquent : $|g(\theta)| = \text{cste}$ que l'on choisit égale à 1.

$$\Rightarrow |g(\theta)| = 1$$

b) A l'aide du laplacien proposé par l'énoncé on peut écrire :

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \varphi + V \varphi &= E \varphi \text{ avec } \Delta \varphi = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \varphi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \theta^2} \text{ où } V = 0 \\ \Leftrightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \varphi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \theta^2} \right) &= E \varphi \\ \Leftrightarrow \frac{g(\theta)}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial f(r)}{\partial r} \right) + \frac{f(r)}{r^2} \frac{\partial^2 g(\theta)}{\partial \theta^2} &= -\frac{2mE}{\hbar^2} f(r) g(\theta) \end{aligned}$$

On divise par $f(r) g(\theta)$:

$$\begin{aligned} &\Leftrightarrow \frac{1}{rf(r)} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial f(r)}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 g(\theta)} \frac{\partial^2 g(\theta)}{\partial \theta^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2} \\ &\Leftrightarrow \frac{r}{f(r)} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial f(r)}{\partial r} \right) + \frac{1}{g(\theta)} \frac{\partial^2 g(\theta)}{\partial \theta^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2} r^2 \\ &\Leftrightarrow \frac{r}{f(r)} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial f(r)}{\partial r} \right) + \frac{2mE}{\hbar^2} r^2 = -\frac{1}{g(\theta)} \frac{\partial^2 g(\theta)}{\partial \theta^2} \end{aligned}$$

On retrouve une équation différentielle du type : $A(r) = B(\theta)$, par conséquent :

$$\frac{1}{g(\theta)} \frac{\partial^2 g(\theta)}{\partial \theta^2} = cste = -\alpha^2$$

$-\alpha^2$ pour conserver une solution de module unité. (non divergente)

$$\begin{aligned} &\Leftrightarrow \frac{\partial^2 g(\theta)}{\partial \theta^2} + \alpha^2 g(\theta) = 0 \\ &\Rightarrow g(\theta) = Ae^{i\theta\alpha} + Be^{-i\theta\alpha} \end{aligned}$$

Pour conserver une fonction de module unité on choisit : (l'autre solution est valable aussi)

$$g(\theta) = e^{i\theta\alpha}$$

Comme la fonction est 2π - *périodique* on a :

$$e^0 = e^{i2\pi\alpha} = e^{i4\pi\alpha} = \dots$$

Ce qui est réalisable si α est un entier.

$$\Rightarrow g(\theta) = e^{i\theta n} \text{ où } n \text{ est un entier.}$$

c) On a démontré que :

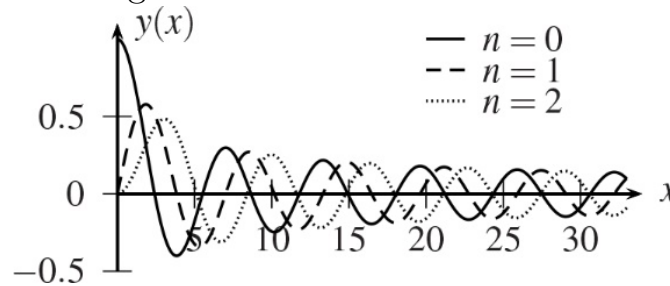
$$\begin{aligned} &\frac{r}{f(r)} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial f(r)}{\partial r} \right) + \frac{2mE}{\hbar^2} r^2 = -\frac{1}{g(\theta)} \frac{\partial^2 g(\theta)}{\partial \theta^2} \\ &\Leftrightarrow \frac{r}{f(r)} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial f(r)}{\partial r} \right) + \frac{2mE}{\hbar^2} r^2 = +n^2 \\ &\Leftrightarrow \frac{r}{f(r)} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial f(r)}{\partial r} \right) + k^2 r^2 = +n^2 \text{ où } k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \\ &\Leftrightarrow \frac{r}{f(r)} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial f(r)}{\partial r} \right) + (k^2 r^2 - n^2) = 0 \\ &\Leftrightarrow r \left(r \frac{\partial^2 f(r)}{\partial r^2} + \frac{\partial f(r)}{\partial r} \right) + (k^2 r^2 - n^2) f(r) = 0 \\ &\Leftrightarrow r^2 \frac{\partial^2 f(r)}{\partial r^2} + r \frac{\partial f(r)}{\partial r} + (k^2 r^2 - n^2) f(r) = 0 \end{aligned}$$

Posons : $x = kr$ alors :

$$\begin{aligned} &\frac{\partial f}{\partial r} = \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial r} = k \frac{\partial f}{\partial x} \text{ et } \frac{\partial^2 f}{\partial r^2} = k^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \\ &\Rightarrow \frac{x^2}{k^2} \left(k^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right) + \frac{x}{k} \left(k \frac{\partial f}{\partial x} \right) + (x^2 - n^2) f = 0 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow x^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + x \frac{\partial f}{\partial x} + (x^2 - n^2)f = 0$$

4°) L'énoncé nous fournit la figure suivante :



Sur la figure de l'enclos on remarque que la densité de probabilité est maximale en $x=0$, on choisit donc la courbe qui correspond à $n=0$.

Si on compte « les vaguelettes » des ondes sur la figure de l'enclos, on remarque qu'on a une cinquième annulation au bord de l'enclos qui correspond à $x=15$. Par conséquent :

$$\begin{aligned} kR &= 15 \\ \Leftrightarrow \sqrt{\frac{2m^*E}{\hbar^2}} R &= 15 \\ \Leftrightarrow E &= \frac{(15)^2 \hbar^2}{2m^* R^2} = 7,0 \cdot 10^{-20} \text{ J} = 0,44 \text{ eV} \end{aligned}$$

Par rapport au résultat de la question 2°), on remarque que la prise en compte de la géométrie circulaire modifie le résultat de 10% seulement.

5°) On en déduit la vitesse des électrons confinés :

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

MQ25 – Molécule d'ammoniac

1. L'équation de Schrödinger pour la partie spatiale s'écrit :

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\phi}{dx^2} + E\phi = 0, \text{ soit :}$$

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\phi = 0$$

On pose $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$. On a alors $\phi_d(x) = A \sin(kx + \theta)$.

Conditions aux limites :

La fonction d'onde doit être continue en a et b :

- Pour $x = a$: $\phi_d(a) = A \sin(ka + \theta) = 0$. On choisit θ tel que $ka + \theta = 0$.
- Pour $x = b$: $\phi_d(b) = A \sin(kb + \theta) = 0$,
soit $\phi_d(b) = A \sin(k(b - a)) = 0$.

On doit donc avoir $k(b - a) = n\pi$ avec n entier strictement positif.

On en déduit que : $\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} = \frac{n\pi}{b - a}$, soit :

$$E_n = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m(b - a)^2}$$

On en déduit : $\phi_d(x) = A \sin(k(x - a))$.

Degré de dégénérescence :

Il y a deux états physiques distincts pour chaque niveau d'énergie E . On dit que le niveau d'énergie est dégénéré et le degré de dégénérescence vaut 2.

Condition de normalisation :

$$\begin{aligned} \Psi_d(x, t) &= A \sin(k(x - a)) \exp\left(-\frac{i E_n t}{\hbar}\right) \\ &= A \sin\left(n\pi \frac{x - a}{b - a}\right) \exp\left(-\frac{i E_n t}{\hbar}\right) \end{aligned}$$

La condition de normalisation s'écrit : $\int_a^b |\phi_d(x, t)|^2 dx = 1$ puisque la

particule est confinée entre a et b . On doit avoir : $\frac{A^2}{2} (b - a) = 1$. On

choisit $A = \sqrt{\frac{2}{b - a}}$ pour retrouver la fonction d'onde de l'énoncé. On en déduit donc :

$$\Psi_d(x, t) = \sqrt{\frac{2}{b - a}} \sin\left(2\pi \frac{x - a}{b - a}\right) \exp\left(-\frac{i E_0 t}{\hbar}\right)$$

pour x compris entre a et b avec $n = 2$ et une énergie E_0 .

Relation entre α et β :

Ψ doit vérifier la condition de normalisation : $\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x,t)|^2 dx = 1$

$$|\Psi(x,t)|^2 = \Psi \Psi^* = (\alpha \Psi_g + \beta \Psi_d) (\alpha^* \Psi_g^* + \beta^* \Psi_d^*)$$

$= \alpha \alpha^* \Psi_g \Psi_g^* + \beta \beta^* \Psi_d \Psi_d^*$ car les termes $\Psi_d \Psi_g^*$ et $\Psi_d^* \Psi_g$ sont toujours nuls.

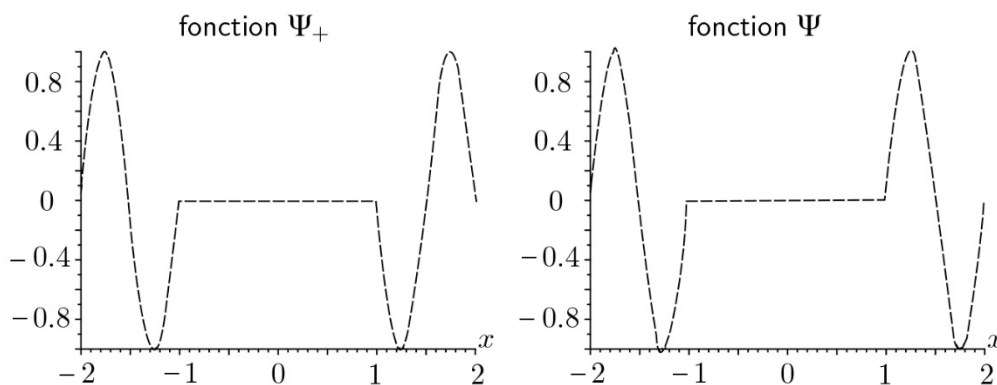
On a donc :

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x,t)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\alpha|^2 |\Psi_g|^2 + |\beta|^2 |\Psi_d|^2 dx = |\alpha|^2 + |\beta|^2.$$

On en déduit la relation :

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$$

2. On obtient les deux graphes suivants à $t = 0$:



La partie spatiale ϕ_+ est paire alors que la partie spatiale ϕ_- est impaire. La possibilité du passage de la particule d'un puits à un autre par effet tunnel décompose chaque niveau d'énergie : la dégénérescence est levée.

3. • Si la particule a pour énergie E_+ , alors

$$\Psi_+(x,t) = \phi_+(x) \exp\left(-\frac{iE_+t}{\hbar}\right) \text{ et } \Psi_-(x,t) = \phi_-(x) \exp\left(-\frac{iE_-t}{\hbar}\right).$$

• Il faut exprimer $\Psi(x,0) = \phi_g(x)$ en fonction de ϕ_+ et ϕ_- pour en déduire l'évolution temporelle.

Pour $t = 0$, on a $\Psi(x,0) = \phi_g(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_+(x) + \phi_-(x))$.

À un instant t quelconque, la fonction d'onde est :

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\phi_+(x) \exp\left(-\frac{iE_+t}{\hbar}\right) + \phi_-(x) \exp\left(-\frac{iE_-t}{\hbar}\right) \right)$$

On pose : $E_m = \frac{E_+ + E_-}{2}$ et $\Delta E = E_+ - E_-$. On en déduit que

$$\begin{cases} 2E_m = E_+ + E_- \\ \Delta E = E_+ - E_- \end{cases}$$

Soit

$$\begin{cases} E_+ = E_m + \frac{\Delta E}{2} \\ E_- = E_m - \frac{\Delta E}{2} \end{cases}$$

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\phi_+(x) \exp\left(-\frac{i \Delta E t}{2\hbar}\right) + \phi_-(x) \exp\left(\frac{i \Delta E t}{\hbar}\right) \right) \exp\left(-\frac{i E_m t}{\hbar}\right).$$

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_g(x) + \phi_d(x)) \exp\left(-\frac{i \Delta E t}{2\hbar}\right) \right) \exp\left(-\frac{i E_m t}{\hbar}\right) + \dots$$

$$\dots + \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_g(x) - \phi_d(x)) \exp\left(\frac{i \Delta E t}{\hbar}\right) \right) \exp\left(-\frac{i E_m t}{\hbar}\right)$$

On a alors :

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{2} \exp\left(-\frac{i E_m t}{\hbar}\right) \left(\phi_g(x) \left(\exp\left(-\frac{i \Delta E t}{2\hbar}\right) + \exp\left(\frac{i \Delta E t}{\hbar}\right) \right) \right) + \dots$$

$$\dots + \frac{1}{2} \exp\left(-\frac{i E_m t}{\hbar}\right) \left(\phi_d(x) \left(\exp\left(-\frac{i \Delta E t}{2\hbar}\right) - \exp\left(\frac{i \Delta E t}{\hbar}\right) \right) \right)$$

On en déduit que :

$$\Psi(x, t) = \exp\left(-\frac{i E_m t}{\hbar}\right) \left(\phi_g(x) \cos\left(\frac{\Delta E t}{\hbar}\right) - i \phi_d(x) \sin\left(\frac{\Delta E t}{2\hbar}\right) \right)$$

L'énergie n'est pas connue avec certitude puisque $\Psi(x, t)$ n'est pas un état propre de l'hamiltonien.

La probabilité de présence dans le puits de droite est :

$$P_d = \int_a^b |\Psi(x, t)|^2 dx = \int_a^b \left| \phi_d(x) \sin\left(\frac{\Delta E t}{2\hbar}\right) \right|^2 dx = \sin^2\left(\frac{\Delta E t}{2\hbar}\right)$$

puisque $\int_a^b |\phi_d(x, t)|^2 dx = 1$.

De même la probabilité de présence dans le puits de gauche est :

$$P_d = \cos^2\left(\frac{\Delta E t}{2\hbar}\right) = \frac{1 + \cos\left(\frac{\Delta E t}{\hbar}\right)}{2}$$

On vérifie que $P_g + P_d = 1$.

La particule oscille donc dans chacun des puits avec une pulsation

$$\omega = \frac{\Delta E}{\hbar} = \frac{2\pi}{T}, \text{ une période } T = \frac{\hbar}{\Delta E} \text{ et une fréquence } \nu = \frac{\Delta E}{h}.$$

4. Pour une fréquence $\nu = 23\,870$ MHz, on obtient $\Delta E = 1,58 \times 10^{-23}$ J et une longueur d'onde $\lambda = 1,26$ cm.

MQ26 – Radioactivité alpha

1. On trouve $R = r_0 A^{\frac{1}{3}} = 7,3 \times 10^{-15}$ m. Pour $r = R_C$, on a

$$V = E = \frac{2(Z-2)e^2}{4\pi\epsilon_0 R_C}, \text{ d'où } R_C = \frac{2(Z-2)e^2}{4\pi\epsilon_0 E} = 52 \times 10^{-15} \text{ m.}$$

$$\text{La valeur maximale du potentiel est } V_M = \frac{2(Z-2)e^2}{4\pi\epsilon_0 R} = 34 \text{ MeV.}$$

2. D'après la mécanique classique, la particule α , initialement dans le puits de potentiel, ne devrait pas franchir le pic de potentiel de hauteur V_M . L'émission α ne peut donc se faire que par effet tunnel.

3. La particule rebondit un certain nombre de fois sur la paroi. La particule α oscille sur un diamètre R à la vitesse v . Le temps mis pour un aller et retour est $t_0 = \frac{2R}{v}$.

On a un phénomène périodique de fréquence $f = \frac{v}{2R}$.

La particule frappe donc la paroi $\frac{v}{2R}$ fois par seconde.

La probabilité qu'elle franchisse la barrière par seconde est $T \frac{v}{2R} = \frac{T}{t_0}$.

Le temps de vie est $\tau = \frac{t_0}{T}$, d'où : $\ln \tau = \ln t_0 + \frac{341}{\sqrt{E \text{ (en MeV)}}} - 74,8$

Pour $E = 4,78$ MeV :

La vitesse de la particule α se calcule avec $E = \frac{1}{2}m_\alpha v^2$, soit

$$v = \sqrt{\frac{2E}{m_\alpha}} = 1,51 \times 10^7 \text{ m.s}^{-1}. \text{ On a alors } t_0 = \frac{2R}{v} = 9,66 \times 10^{-22} \text{ s.}$$

On en déduit alors $t_0 = 9,7 \times 10^{-22}$ s et $\tau = 1,7 \times 10^{14}$ s.

Pour $E = 9$ MeV :

On a $t_0 = 7,0 \times 10^{-22}$ s et $\tau = 5,3 \times 10^{-5}$ s.

On a donc des variations assez faibles de t_0 pour les émetteurs α . Le facteur dominant dans l'émission α est la pénétration de la barrière de potentiel. t_0 est le temps entre deux rebonds successifs sur la barrière de potentiel. Ce temps est quasiment le même pour tous les émetteurs α . On a donc la formule approchée :

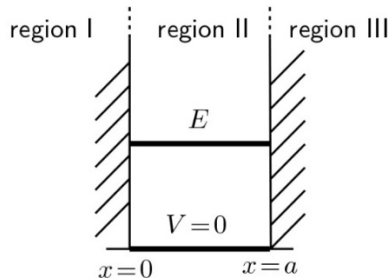
$$\ln \tau = \ln 10^{-21} + \frac{341}{\sqrt{E \text{ (en MeV)}}} - 74,8 = -123 + \frac{341}{\sqrt{E \text{ (en MeV)}}}$$

On peut vérifier expérimentalement que le graphe représentant $\ln \tau$ en fonction de $-\frac{1}{\sqrt{E \text{ (en MeV)}}}$ est très proche d'une droite prédite par cette théorie élémentaire.

MQ27 – Puits de potentiel infini et énergie

La fonction d'onde pour les états stationnaires s'écrit :

$\Psi(x, t) = \phi(x) \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right)$. L'équation de Schrödinger pour la partie spatiale s'écrit : $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\phi}{dx^2} + V\phi = E\phi$.



Région I et III :

Le potentiel est infini, on doit avoir : $\phi_I(x) = \phi_{III}(x) = 0$.

Région II :

L'équation de Schrödinger s'écrit :

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\phi}{dx^2} + E\phi = 0, \text{ soit } \frac{d^2\phi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \phi = 0.$$

- 1^{er} cas : $E < 0$. On a alors $\phi(x) = A' \operatorname{ch}(\alpha x) + B' \operatorname{sh}(\alpha x)$ en posant

$\alpha = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}$. Pour avoir $\phi(0) = 0$ et $\phi(a) = 0$, on doit avoir $A' = 0$ et $B' = 0$. Ce premier cas est exclu physiquement puisque la densité linéique de probabilité de présence de la particule est toujours nulle.

- 2^{ème} cas : $E = 0$. On exclut physiquement ce cas puisque la fonction d'onde est également nulle.

- 3^{ème} cas : $E > 0$. On pose $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$. On a alors :

$$\phi_{II}(x) = A \cos(kx) + B \sin(kx)$$

Conditions aux limites :

La fonction d'onde doit être continue en 0 et a :

- Pour $x = 0$: $\phi_{II}(0) = A = 0$
- Pour $x = a$: $\phi_{II}(a) = B \sin(ka)$. On doit donc avoir $ka = n\pi$ avec n entier strictement positif.

On en déduit que : $\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} = \frac{n\pi}{a}$, soit :

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

On observe donc une quantification de l'énergie contrairement à la mécanique classique où l'énergie mécanique peut prendre toutes les valeurs entre 0 et ∞ .

On a une **quantification de l'énergie** puisqu'on a un état lié de la particule. Elle intervient lors de l'étude des conditions aux limites.