DEVOIR LIBRE

DL DE NIVEAU 1 FILIÈRE MP

# RÉVISIONS DE QUANTIQUE

L'utilisation des calculatrices n'est pas autorisée.

⋆ ⋆ ⋆

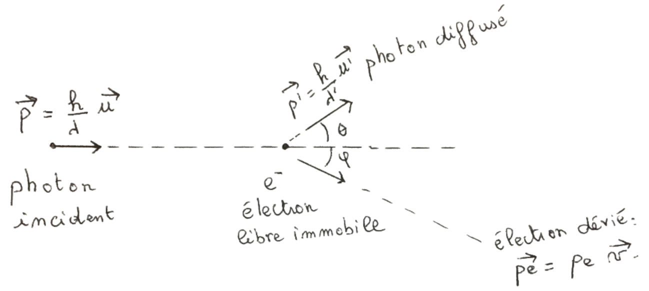
*Toute affirmation doit être clairement et complètement justifiée.*

*Ce DL de niveau 1 reprend les bases du cours de quantique, mais va un peu plus loin dans le sens où il présente une explication semi-quantitative de l'équation de Schrödinger, de l'étalement des paquets d'ondes quantiques.*

## I Émergence des fondements de la quantique

**Effet Campton**

1. Quelle est l'énergie de masse $E_0$ d'une particule de masse $m$ au repos ?
2. Dans un modèle relativiste, on donne $\gamma = \frac{1}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}} = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}$, et $\vec{p} = \gamma m\vec{v}$, ainsi que $E = \gamma mc^2$ et $E_c = E - E_0$. Calculer la quantité $E^2 - p^2c^2$ et en déduire la relation fondamentale de l'énergie d'une particule.
3. Que devient cette relation dans le cas d'un photon ? Déterminer alors la quantité de mouvement $p$ du photon en fonction d'une constante et de sa longueur d'onde.




4. On envoie un photon (de longueur d'onde $\lambda$) sur un électron libre immobile. L'expérience prouve que le photon incident est diffusé, et a une longueur d'onde $\lambda'$ différente après la collision. Écrire les principes de conservation de la quantité de mouvement et de l'énergie pour cette situation, dans le cas relativiste.
5. Trouver une relation reliant $\lambda - \lambda'$ et l'angle $\theta$. Comment expliquer que le photon diffusé ait une longueur d'onde différente que le photon incident ?

*Cette expérience connue a confirmé que le photon, en tant que particule, possède aussi une quantité de mouvement.*

***À retenir :***

$$\begin{cases} E = \hbar\omega = h\nu & \textbf{relation de Planck-Einstein} \\ \vec{p} = \hbar\vec{k} = \dfrac{h}{\lambda}\vec{u} \end{cases}$$

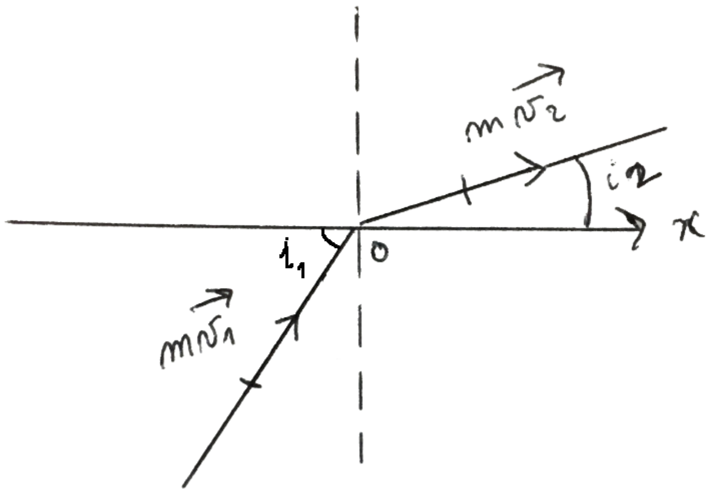
**Attention ! La relation $\frac{\omega}{k} = c$ n'est vraie que pour un photon !**

# II De la mécanique classique à la mécanique quantique

### Origines

On commence par étudier en mécanique classique le mouvement d'une masse ponctuelle $m$ soumise à l'énergie potentielle $E_p(x)$ telle que

$$E_p(x) = \begin{cases} U_1 & \text{pour } x \leqslant 0 \\ U_2 & \text{pour } x > 0 \end{cases}$$




1. Montrer que :

$$mv_1 \sin i_1 = mv_2 \sin i_2 \quad (\star)$$

2. On suppose que l'énergie mécanique de la particule est supérieure à $U_1$ et $U_2$. Déterminer $v_1$ et $v_2$ en fonction de $E, U_1$ et $U_2$.

3. En utilisant $(\star)$, trouver une relation liant $U_1, U_2$ et les angles $i_1, i_2$.

*Il s'agit d'une loi **analogue** à la loi de la réfraction. On peut associer à chaque demi-espace un « indice » $n = f(E) \cdot \sqrt{E - U}$, et la fonction $f$ ne peut pas dépendre de $U$, sinon on n'aurait pas la relation de la question 3) (pas de simplification par $f(E)$).*

4. Donner sans démonstration l'équation de propagation de la vibration lumineuse $s$ dans un milieu d'indice $n$ transparent, dans un modèle unidimensionnel.

La question qui se pose est alors la suivante : existe-t-il une fonction d'onde $\psi(x,t)$, représentant une onde de matière, qui vérifierait une certaine équation de propagation comme c'est le cas de l'onde lumineuse ?

5. On envisage le cas d'une onde de matière de pulsation $\omega$ et de vecteur $\vec{k}$ :

$$\psi(x,t) = Ae^{i(kx-\omega t)}$$

Quelle doit-être la pulsation $\omega$ si l'on veut généraliser la relation de Planck-Einstein ?

6. On pose $v_\varphi = \frac{c_0}{n}$ la vitesse de phase de l'onde, où $c_0$ est une vitesse de référence. Donner l'expression de $v_\varphi$ en fonction de $\omega$ et de toute autre grandeur dont vous avez besoin.

7. En posant $U = \hbar\omega_0$, donner l'expression de la vitesse de phase sous la forme :

$$v_\varphi = \frac{1}{g(\omega)} \cdot \frac{1}{\sqrt{\omega - \omega_0}}$$

où $g$ est une fonction à déterminer.

8. Donner la vitesse de groupe de l'onde, si on l'identifie avec la vitesse de la particule.

9. On pose $G(\omega) = \omega g(\omega)$. Montrer que $G$ vérifie :

$$G'(\omega) + \frac{1}{2\left(\omega - \omega_0\right)} G(\omega) = \sqrt{\frac{m}{2\hbar}} \cdot \frac{1}{\omega - \omega_0}$$

10. En utilisant le fait que $G$ ne peut pas dépendre de $U$, déterminer $G$.

11. Déduire de ce qui précède l'équation de Schrödinger :

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

**L'équation de Schrödinger**

12. Donner sans démonstration l'équation de Schrödinger dans un modèle tridimensionnel.

13. On interprète la fonction d'onde comme une onde complexe dont le module au carré $|\psi(M,t)|^2$ est la densité de probabilité de présence à l'instant $t$ de la particule. En déduire une condition de normalisation.

14. L'équation de Schrödinger est linéaire. Cependant, la question précédente apporte une restriction à cette propriété. Soient $\psi_1(M,t)$ et $\psi_2(M,t)$ deux solutions de l'équation de Schrödinger. Donner une condition sur $\alpha_1$ et $\alpha_2 \in \mathbb{R}$ pour que $\alpha_1\psi_1 + \alpha_2\psi_2$ soit aussi solution.

**Définition**

Une particule est dite dans un état stationnaire si sa densité de probabilité de présence est indépendante du temps. Cela correspond mathématiquement à une fonction d'onde factorisée, sous la forme :

$$\psi(x,t) = \varphi(x)f(t)$$

Par convention, on choisit $|f(t)| = 1 \Rightarrow f(t) = e^{i\alpha(t)}$.

15. On donne l'inégalité de Heisenberg temps-énergie :

$$\tau \cdot \Delta E \geqslant \frac{\hbar}{2}$$

où $\tau$ est le temps caractéristique du système, et $\Delta E$ les fluctuations statistiques de $E$ autour de sa valeu moyenne. Montrer que pour un état stationnaire, $E$ est parfaitement définie et $E = \langle E \rangle$.

16. Montrer que $\alpha(t) = -\frac{Et}{\hbar}$ et trouver l'équation que vérifie $\varphi$, appelée équation de Schrödinger indépendante du temps.

17. En intégrant l'équation précédente entre $x_0 - \varepsilon$ et $x_0 + \varepsilon$, montrer que $\varphi'$ est continue partout où $U(x)$ ne présente pas de discontinuité d'amplitude infinie.

# III Évolution d'une particule quantique libre

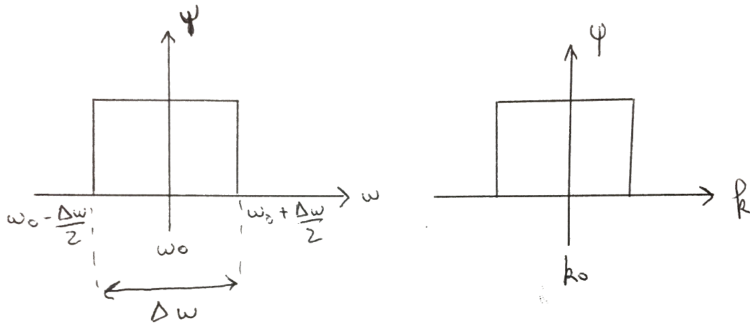
Une particule quantique libre est une particule qui évolue dans le vide, sans interactions. Son énergie $E$ est totalement sous la forme d'énergie cinétique.

1. Donner l'équation vérifiée par $\varphi$. La résoudre dans le cas où $\omega < 0$, puis dans le cas où $\omega = 0$. On s'aperçoit que la condition de normalisation ne peut pas être réalisée.

2. Résoudre dans le cas où $\omega > 0$. On s'aperçoit aussi que la condition ne peut pas être réalisée : la particule est en fait définie par un paquet d'ondes, une OPPH n'a pas de sens physique ! On admet que même avec un paquet d'ondes, les cas $\omega < 0$ et $\omega = 0$ ne peuvent pas satisfaire la normalisation.

3. Démontrer la relation de dispersion $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$. On retrouve le fait qu'une particule quantique ne vérifie pas la même relation que le photon (car sa masse n'est pas nulle !). En déduire l'expression de la vitesse de phase et de la vitesse de groupe.

On considère un paquet d'ondes, quasi-monochromatique.




$$\mathrm{d}\psi = \frac{\mathrm{d}\omega}{\Delta\omega} A \exp\left(i\left(k(\omega)x - \omega t\right)\right)$$
$$\psi = \int \mathrm{d}\psi$$

On pose $\omega = \omega_0 + \varepsilon$.

4. Effectuer un développement limité de $k(\omega)$ à l'ordre 2. On néglige l'ordre 2 pour l'instant.

5. En remarquant que $\frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}\omega} \mid_{k_0} = \frac{1}{v_g}$, donner l'expression de $\psi$. Quelle est la vitesse de propagation du paquet d'ondes ? Tracer $|\psi(x,0)|^2$ en fonction de $x$.

6. On observe un profil en sinus cardinal au carré. On appelle $\Delta x$ la largeur entre les deux premières annulations de ce sinus cardinal (pour les $x > 0$ et $x < 0$). Montrer que l'on a :

$$\Delta x \cdot \Delta k = 4\pi$$

On admet que, pour un profil de superposition non plus « en porte » (toutes les ondes du paquet ont la même amplitude), mais en gaussienne, par un calcul similaire, on obtient $\Delta x \cdot \Delta k = \frac{1}{2}$. On admet aussi que la quantité $\Delta x \Delta k$ admet son minimum pour un profil de superposition en gaussienne.

7. Démontrer l'inégalité de Heisenberg spatiale.

*Remarque culturelle :* On ne néglige plus l'ordre 2 dans le DL de $k(\omega)$. L'enveloppe n'est plus simplement fonction de la variable $\frac{x}{v_g} - t$, mais aussi de la variable $x$ !
Ainsi, $\Delta v_g = \left(\frac{\mathrm{d}v_g}{\mathrm{d}k}\right) \Delta k = \left(\frac{\mathrm{d}^2\omega}{\mathrm{d}k^2}\right) \Delta k$. D'où :

$$\Delta x(t > 0) = \Delta x(t = 0) + \Delta v_g \cdot t$$

Il y a étalement du paquet d'ondes !

8. Expliquer physiquement d'où provient le phénomène d'étalement du paquet d'ondes (qui n'est pas un phénomène purement quantique, on le retrouve dès que l'on manipule des paquets d'ondes).
9. Expliquer pourquoi il est impossible de localiser une particule quantique lors de son évolution sur un temps suffisamment long.

# IV Marche de potentiel

*Remarque : $U$* est une énergie potentielle, mais par abus de langage, on parle de potentiel, et $U$ est souvent notée $V$.

On commence par étudier en mécanique quantique l'évolution d'une particule quantique soumise à l'énergie potentielle $E_p(x)$ telle que

$$E_p(x) = \begin{cases} 0 \quad \text{pour } x \leqslant 0 \quad \text{(zone 1)} \\ V_0 \quad \text{pour } x > 0 \quad \text{(zone 2)} \end{cases}$$

1. En utilisant la continuité de $\varphi$ et $\varphi'$ en 0, déterminer l'onde de matière de cette particule quantique dans un état stationnaire, dans le cas où son énergie $E$ est supérieure à $V_0$.

2. Montrer qu'il n'y a pas de quantification de $k_1$ ou $k_2$.

3. On pose $R$ et $T$ les coefficients de réflexion et transmission. Les calculer et montrer que $R + T = 1$. Qu'est ce que cela signifie physiquement ?
   *Indication : Utiliser les vecteurs densité de probabilité incident $J_i$, transmis $J_t$ et réfléchi $J_r$, avec $J = v_g \, |\psi|^2$ pour une OPPH ou un paquet d'onde progressif. L'expression est à savoir.*

4. Que peut on dire si $E >> V_0$ ? Pourquoi ?

5. Résoudre dans le cas où $E < V_0$. Calculer la densité de probabilité de présence en zone 2. Est-elle nulle ? Calculer le coefficient $T$. Comment expliquer que lui soit nul ?

6. Mettre en évidence une profondeur de pénétration.

# V Puits de potentiel rectangulaire unidimensionnel :

On étudie en mécanique quantique l'évolution d'une particule quantique soumise à l'énergie potentielle $E_p(x)$ telle que

$$E_p(x) = \begin{cases} +\infty \quad \text{pour } x \leqslant 0 \quad \text{(zone 1)} \\ 0 \quad \text{pour } 0 < x \leqslant a \quad \text{(zone 2)} \\ +\infty \quad \text{pour } x > a \quad \text{(zone 3)} \end{cases}$$

On suppose que l'énergie $E$ de la particule est positive.

1. Résoudre l'équation de Schrödinger indépendante du temps, en utilisant les conditions limites et la condition de normalisation. On obtient une onde stationnaire. **La particule quantique est confinée dans le puit de potentiel**.

2. Montrer que les valeurs possibles de $k$ sont quantifiées, et donc les valeurs de $E$.

3. Retrouver les différentes expressions possibles de $E$ grâce à une analogie avec la corde de Melde. Quelles sont toutefois les différences avec la corde de Melde ?

4. Interpréter la valeur minimale de $E$ avec l'inégalité spatiale de Heisenberg.

On étudie en mécanique quantique l'évolution d'une particule quantique soumise à l'énergie potentielle $E_p(x)$ telle que

$$E_p(x) = \begin{cases} V_0 \quad \text{pour } x \leqslant -\dfrac{a}{2} \quad \text{(zone 1)} \\ 0 \quad \text{pour } -\dfrac{a}{2} < x \leqslant \dfrac{a}{2} \quad \text{(zone 2)} \\ V_0 \quad \text{pour } x > \dfrac{a}{2} \quad \text{(zone 3)} \end{cases}$$

Si $E \geqslant V_0$, la particule quantique n'est pas confinée, elle est délocalisée dans tout l'espace. Dans ce cas, $E$ est non quantifiée. On suppose désormais $0 \leqslant E < V_0$.

5. En admettant que $|\psi(x,t)|^2 = |\psi(-x,t)|^2$ car $V(x)$ est paire (principe de Curie), montrer que $\varphi$ est paire ou impaire.

6. On cherche les solutions $\varphi_S$ (paires) et $\varphi_A$ (impaires). On va simplement chercher les solutions paires (le travail est analogue pour les solutions impaires). Déterminer la forme générale de $\varphi_S$ dans la zone 1, 2 et 3.

7. En utilisant les relations de continuité, montrer que
$$\det\begin{pmatrix} e^{-\frac{qa}{2}} & -\cos\left(\frac{ka}{2}\right) \\ qe^{-\frac{qa}{2}} & -\sin\left(\frac{ka}{2}\right)\end{pmatrix} = 0$$
avec $q^2 = \frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}$ et $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$. En déduire que $q = k\tan\left(\frac{ka}{2}\right)$.

8. On pose $\alpha = \frac{ka}{2}$ et $\beta = \frac{qa}{2}$. Montrer que $\alpha^2 + \beta^2 = R^2$, avec $R$ que l'on déterminera. C'est l'équation d'un cercle. Tracer dans le demi cadran $\alpha > 0, \beta > 0$ ($\beta$ en ordonnée, $\alpha$ en abscisse) le quart de cercle de rayon $R$.

9. Superposer sur ce graphe les courbes $\beta = \alpha\tan\alpha$. Déterminer graphiquement les solutions, et montrer qu'elles sont discrètes.

10. Une grandeur de pénétration $\delta = \frac{1}{q}$ apparaît. On peut la retrouver qualitativement. Pour un paquet d'ondes, $E_C = E + \Delta E - V_0$, et $v = \sqrt{\frac{2E_C}{m}}$. Donner l'ordre de grandeur de $\tau$ le temps caractéristique d'évolution du système en fonction de $\Delta E$. Exprimer $\delta$ en fonction de $v$ et $\tau$.
Trouver $\Delta E$ tel que $\delta$ est maximal. On retrouve le résultat attendu à un facteur numérique près.

11. On suppose que $\alpha = (2n+1)\,\pi + \varepsilon$, et $|\varepsilon| << 1$. Démontrer que
$$k = \frac{(2n+1)\,\pi}{a + 2\delta}$$
$a + 2\delta$ est la largeur effective du puits de potentiel. Interpréter physiquement.

# VI Barrière de potentiel et effet tunnel

On étudie en mécanique quantique l'évolution d'une particule quantique soumise à l'énergie potentielle $E_p(x)$ telle que
$$E_p(x) = \begin{cases} 0 \quad \text{pour } x \leqslant -\dfrac{a}{2} \quad \text{(zone 1)} \\ V_0 \quad \text{pour } \; -\dfrac{a}{2} < x \leqslant \dfrac{a}{2} \quad \text{(zone 2)} \\ 0 \quad \text{pour } x > \dfrac{a}{2} \quad \text{(zone 3)} \end{cases}$$

1. Résoudre si $0 \leqslant E < V_0$, en fonction de plusieurs constantes inconnues. Combien a-t-on d'inconnues ? Combien d'équations ? En déduire qu'il n'y a pas quantification de $k$ et que la particule n'est pas confinée.

2. Exprimer $R$ et $T$ en fonction des inconnues introduites à la question précédente. En faisant un calcul long et chiant, on obtient :
$$R = \frac{\frac{V_0^2}{4E(V_0-E)}\,\text{sh}^2(qa)}{1 + \frac{v_0^2}{4E(V_0-E)}\,\text{sh}^2(qa)}$$
$$T = \frac{1}{1 + \frac{v_0^2}{4E(V_0-E)}\,\text{sh}^2(qa)}$$
Expliquer le principe de l'effet tunnel, et son origine physique.

* *
*