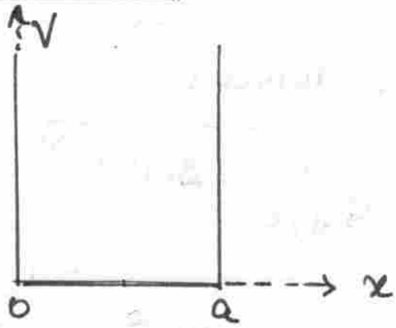
Exercice 7 | États non stationnaires dans puits infini. (7)



(1) État stationnaire : $\phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$ $n \in \mathbb{N}^*$

ϕ_n est solution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps ssi : $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\phi_n}{dx^2} = E_n \phi_n$ pour $x \in [0;a]$

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

$E_1 = \hbar\omega_0$ avec $\boxed{\omega_0 = \frac{\hbar \pi^2}{2ma^2}}$

$\boxed{E_n = n^2 E_1 = n^2 \hbar\omega_0}$

(2) $\boxed{\Psi_n(x,t) = \Psi_n(x,0)\, e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} = \phi_n(x)\, e^{-in^2\omega_0 t}}$

(3) (a) Par linéarité de l'équation de Schrödinger, on aura :

$$\Psi(x,t) = A(x)e^{-i\frac{E_1 t}{\hbar}} + B(x)e^{-i\frac{E_2 t}{\hbar}} \quad t > 0$$

A $t=0$: $\Psi(0,t) = A(x) + B(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\phi_1(x) + \phi_2(x)\right)$.

$$\Rightarrow \boxed{\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\phi_1(x)\, e^{-i\omega_0 t} + \phi_2(x)\, e^{-4i\omega_0 t}\right]}$$

par le résultat de la question (2).

(b) on peut écrire $\Psi(x,t)$ sous la forme suivante en s'aidant du fait que $\phi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\phi_g(x) + \phi_d(x)\right)$

et $\phi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\phi_g(x) - \phi_d(x)\right)$.

En remplaçant dans $\Psi(x,t)$ cela donne :

$$\boxed{\Psi(x,t) = \frac{1}{2}\left[(\phi_g+\phi_d)\, e^{-i\omega_0 t} + (\phi_g - \phi_d)\, e^{-i\omega_0 t}\right]}$$

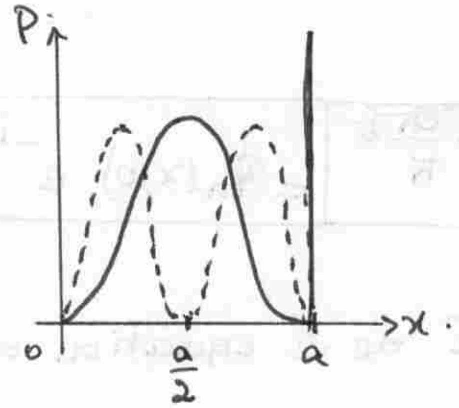
densité de probabilité : $p(x,t) = |\Psi(x,t)|^2 = \Psi.\Psi^*$

$$\Rightarrow \boxed{p(x,t) = \frac{1}{2}\left[\phi_g^2 + \phi_d^2 + (\phi_g^2 - \phi_d^2)\cos 3\omega_0 t\right]}$$

$p(x,t)$ oscille autour de la valeur moyenne $p_{moy} = \frac{1}{2}(\phi_1^2 + \phi_2^2)$ à la fréquence $\boxed{\nu = \frac{3\omega_0}{2\pi}}$

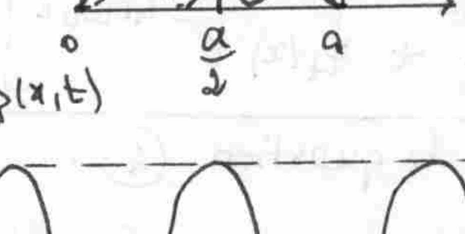
$$\boxed{\nu = \frac{4\omega_0 - \omega_0}{2\pi} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar}.}$$

ⓒ



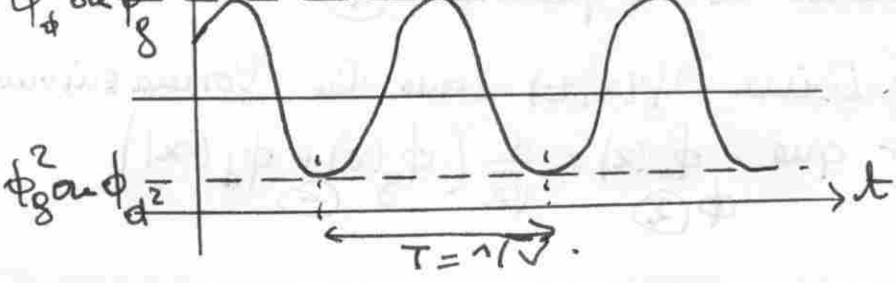
$\phi_1^2(x) = \frac{2}{a}\sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right)$. ———

$\phi_2^2(x) = \frac{2}{a}\sin^2\left(\frac{2\pi x}{a}\right)$. - - - -



- - - $|\phi_d|^2$

——— $|\phi_g|^2$



la particule fait des allers-retours dans le puits.

$\frac{1}{2}(\phi_1^2 + \phi_2^2)$.

à x donné

Exercice 2 : potentiel inconnu

1. la probabilité de présence existe sur tout le domaine $(-\infty, +\infty)$ donc diffusion.

2. oscillations ≡ interférences dues la superposition de l'onde incidente et de l'onde réfléchie (phénomène quantique)

3. Dans chaque région, on a $k = \frac{\sqrt{2m(E-V)}}{\hbar}$ avec E énergie de la particule, V pot. de la zone.

• $x < -a/2$: la période spatiale $\frac{\pi}{k}$ est constante. Comme E = cte alors V_0 aussi donc $V = V(-\infty) = 0$ (zone I)

• $-a/2 \leq x \leq \frac{a}{2}$: ici la période spatiale est plus faible donc k est plus grand donc $E - V > E \Rightarrow V < 0 \Rightarrow V = -V_0$ (zone II)

• $x > \frac{a}{2}$: la probabilité de présence est uniforme $\Rightarrow$ onde plane progressive. L'énergie potentielle est donc uniforme $\Rightarrow V = V(+\infty) = 0$ (zone III)

On a donc un puits de potentiel fini

Comme $k_I^2 = \frac{2mE}{\hbar}$ et $k_{II}^2 = \frac{2m(E+V_0)}{\hbar} \Rightarrow V_0 = \frac{\hbar^2}{2m}\left(k_{II}^2 - k_I^2\right)$

4. I : $\varphi_I(x) = A_1 e^{ik_Ix} + B_1 e^{-ik_Ix}$

II : $\varphi_{II}(x) = A_2 e^{ik_{II}x} + B_2 e^{-ik_{II}x}$

III : $\varphi_{III}(x) = A_3 e^{ik_{III}x}$

avec $k_I = k_{III} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$

$k_{II} = \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar}$

en $x = \pm a/2$: continuités de $\varphi(x)$ et de $\frac{d\varphi}{dx}$

Exercice 3 : potentiel harmonique

1. $[\omega_0] = T^{-1}$. Comme $\int |\varphi|^2 dx = 1 \Rightarrow [A] = L^{-1/2}$

2. cond. de normalisation : $1 = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dx = |A|^2 \sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega_0}} \Rightarrow A = \left(\frac{m\omega_0}{\pi\hbar}\right)^{1/4}$

Rq : tous les $\underline{A} = \left(\frac{m\omega_0}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{i\theta}$ conviennent.

3. c'est un état stationnaire car $\psi(x,t) = f(x).g(t)$ et $E = \frac{\hbar\omega_0}{2}$ car la partie temporelle est en $e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$

4. l'éq. de Schrödinger s'écrit : $i\hbar\frac{d\psi}{dt} + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = V(x)\psi$

soit $\frac{\hbar^2}{2m}\left(\left(\frac{m\omega_0 x}{\hbar}\right)^2 - \frac{m\omega_0}{\hbar}\right)\psi + \frac{\hbar\omega_0}{2}\psi = V(x)\psi \Rightarrow V(x) = \frac{1}{2}m\omega_0^2x^2$

5. en classique, ce serait une énergie potentiel harmonique type ressort en MQ, c'est plutôt un DL de l'E_p au voisinage d'une position d'équilibre stable.

6. La densité de probabilité est $\rho(x) = |\varphi|^2$. Elle est paire

donc $\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x).x\,dx = 0$

7. $\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \rho(x)\,dx = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 |\varphi|^2 dx = \sqrt{\frac{m\omega_0}{\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-\frac{m\omega_0 x^2}{\hbar}} dx$

soit $\langle x^2 \rangle = \sqrt{\frac{m\omega_0}{\pi\hbar}} \cdot \sqrt{\frac{\pi\hbar^3}{4m^3\omega_0^3}} = \frac{\hbar}{2m\omega_0}$

8. Le ppe d'incertitude d'Heisenberg donne : $\Delta x \Delta p_x \gtrsim \hbar$

or $\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle}$ $\Rightarrow$ $\Delta p_x \simeq \sqrt{2m\hbar\omega_0}$

Exercice 4 : boîte unidimensionnelle

1.a. $V(x) = 0 \Rightarrow E = \frac{1}{2} m v^2 + 0 \Rightarrow v = v_0 = \sqrt{\frac{2E}{m}}$

1.b. La durée du passage entre x et $x + dx$ s'écrit $dt = \frac{dx}{v_0}$

La densité de prob. de présence s'écrit $dP_{cl} = C\,dt = C\frac{dx}{v_0}$ où $C = cte$

En normalisant : $1 = \int_0^L dP_{cl} = \frac{C}{v_0}\int_0^L dx = \frac{CL}{v_0} \Rightarrow C = \frac{v_0}{L}$

alors $dP_{cl} = \frac{v_0}{L}\frac{dx}{v_0} = \frac{dx}{L} \Rightarrow \frac{dP_{cl}}{dx} = \frac{1}{L}$

1.c. $P_{cl} = \int_0^{\frac{L}{4}} \frac{dx}{L} = \frac{1}{4}$

2.a. $1 = \int_0^L |\varphi|^2 dx = A_n^2 \int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx = A_n^2 \frac{L}{2} \Rightarrow A_n = \sqrt{\frac{2}{L}}$

2.b. $P = \int_0^{\frac{L}{4}} |\varphi|^2 dx = \frac{2}{L}\int_0^{L/4} \sin^2\left(n\frac{\pi x}{L}\right) dx = \frac{1}{4} - \frac{\sin(n\pi/2)}{n\pi}$

2.c. si $n \to \infty$, $P \to 1/4$ on retrouve la valeur classique.

Exercice 5 : potentiel quadrique

1. Le ppe d'incertitude d'Heisenberg donne $\Delta x \Delta p_x \gtrsim \frac{\hbar}{2}$

On ne peut pas avoir simultanément $x = 0$ et $p_x = 0$

or l'énergie de la particule est $E = \frac{p_x^2}{2m} + gx^4 \Rightarrow E \neq 0$

2. Il va y avoir des oscillations autour de la position d'éq $x = 0$

On aura alors : $\langle x^4 \rangle = (\Delta x)^4$ et $\langle p_x^2 \rangle = (\Delta p_x)^2$

l'énergie moyenne sera : $E_m = \frac{\langle p_x \rangle^2}{2m} + g\langle x^4 \rangle = \frac{(\Delta p_x)^2}{2m} + g(\Delta x)^4$

or $\Delta x \simeq \frac{\hbar}{2\Delta p_x} \Rightarrow E_m = \frac{(\Delta p_x)^2}{2m} + g\left(\frac{\hbar}{2(\Delta p_x)}\right)^4$

Le minimum est tel que $\frac{dE_m}{d\Delta p_x} = 0 \Rightarrow \Delta p_x = \left(\frac{mg\hbar^4}{4}\right)^{1/6} \Rightarrow E_m \sim \left(\frac{g\hbar^4}{m^2}\right)^{1/3}$

exercice 6 : marche de potentiel

1. On a l'équation de Schrödinger indepéndante du temps dans la région (1) :

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2} + E\varphi = 0$$

dont la solution est : $\varphi(x) = A\exp(ik_1x) + rA\exp(-ik_1x)$ avec $k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$.
Dans la région (2)

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2} + (E - V_0)\varphi = 0$$

de solution

$$\varphi(x) = tA\exp(ik_2x) \quad \text{avec} \quad k_2 = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$$

2. Il y a continuité de φ et de φ' donc $1 + r = t$ et $ik_1(1-r) = ik_2t$.

d'où
$$\boxed{r = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \quad \text{et} \quad t = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}}$$

Si $E \gg V_0$, $k_1 \approx k_2$ et $r \approx 0$, $t \approx 1$.

3. Dans ce cas, les solutions dans (2) sont réelles ($\varphi(x) = te^{-\alpha x}$). On peut poser $k_2 = \alpha i$ avec $\alpha > 0$. On a

$$r = \frac{k_1 - i\alpha}{k_2 + i\alpha} \quad \text{et} \quad R = |r|^2 = 1$$

La particule de franchit pas la barrière me si sa probabilité de présnece n'est pas nulle dans la région (2). L'onde est alors évanescente.

Exercice 7 : Enrichissement isotopique

1. si $E < V_0$, toutes les particules sont réfléchies quelle que soit leur masse. Il est impossible de séparer les isotopes. Il faut donc $E > V_0$.

2. si $E > V_0$, le phénomène de réflexion (effet quantique) est plus marqué pour les molécules légères $\Rightarrow$ le faisceau transmis est + riche en isotope de + grande masse.

3. Comme $E > V_0$ $\quad r = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}$ $\Rightarrow$ $R = |r|^2 = \left(\frac{\sqrt{E} - \sqrt{E - V_0}}{\sqrt{E} + \sqrt{E - V_0}}\right)^2$

$\Rightarrow R = \left(\frac{2E - 2\sqrt{E(E-V_0)} - V_0}{2E + 2\sqrt{E(E-V_0)} - V_0}\right) = \left(\frac{2 - 2\sqrt{1 - \frac{V_0}{E}} - \frac{V_0}{E}}{2 + 2\sqrt{1 - \frac{V_0}{E}} - \frac{V_0}{E}}\right)$ or $E \gg V_0$ DL ordre 2

$\Rightarrow \underset{\sim}{R} = \dfrac{2 - 2\left(1 - \frac{1}{2}\frac{V_0}{E} - \frac{V_0^2}{8E^2}\right) - \frac{V_0}{E}}{2 + 2\left(1 - \frac{1}{2}\frac{V_0}{E} - \frac{V_0^2}{8E^2}\right) - \frac{V_0}{E}} = \dfrac{\frac{V_0^2}{4E^2}}{4} = \underset{\sim}{\dfrac{V_0^2}{16E^2}}$

4. Pour toutes les particules, la vitesse est la même donc $E_1 = \frac{1}{2}m_1v^2$
$E_2 = \frac{1}{2}m_2v^2$

alors $\underset{\sim}{\dfrac{R_1}{R_2}} = \dfrac{E_2^2}{E_1^2} = \underset{\sim}{\dfrac{m_2^2}{m_1^2}}$

Si $m_1 > m_2$ alors $R_1 < R_2$: les particules les + lourdes sont moins réfléchies $\Rightarrow$ le faisceau transmis est + riche en élts les + lourds.

Exercice 8: Molécule de benzène

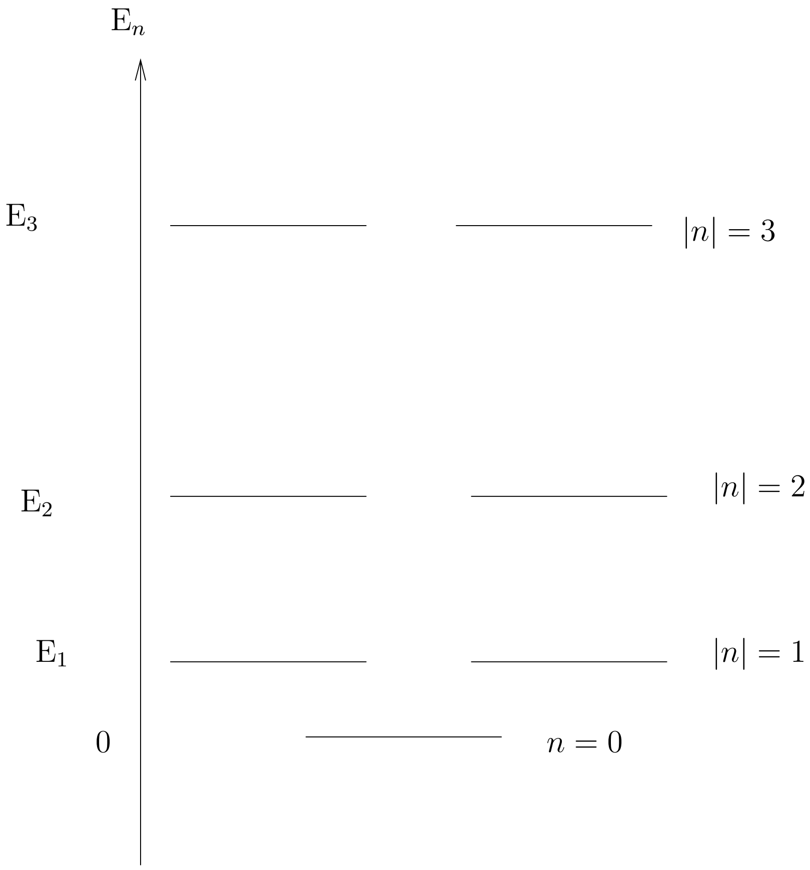
(Tous)

1. $\displaystyle\int_0^{2\pi a} |\varphi(x)|^2 \,\mathrm{d}x = 1 \quad \text{d'où} \quad \mathrm{A} = \frac{1}{\sqrt{2\pi a}}$
2. La particule étant liée à un cercle de rayon a, la condition limite s'exprime : $\varphi(x) = \varphi(x + 2\pi a)$
3. On a donc

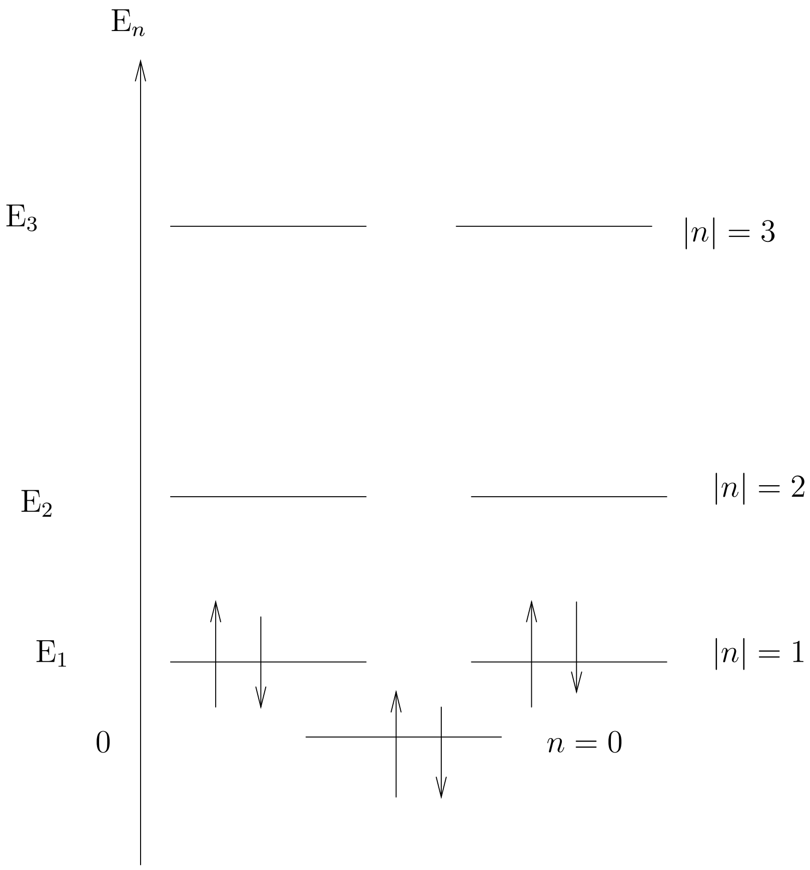
$$2\pi k a = 2n\pi \quad \text{avec} \quad n \in \mathbb{Z}$$

$$\boxed{k_n = \frac{m}{a} \quad \text{avec} \quad n \in \mathbb{Z}}$$

Or l'équation de Schrödinger implique $\mathrm{E}_n = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m} = n^2 \dfrac{\hbar^2}{2ma^2}$ avec $n \in$ Z. A chaque niveau d'énergie correspond deux valeurs opposées de n c'est-à-dire deux états de la particule (sauf pour $n = 0$. On a la situation :



4. Il faut placer les 6 électrons par énergie croissante sur le diagramme précédent :



5. La transition d'energie la plus faible correspond à une transition $|n| = 1$ à $|n| = 2$ soit

$$\Delta E = \frac{2\pi\hbar c}{\lambda} = E_2 - E_1 = \frac{3\hbar^2}{2ma^2}$$

d'où $$\boxed{a = 153pm}$$

L'accord est assez bon.