

Potentiel quantique constant

Notes de cours

mardi 13 mars 2018



Les modes propres d'une corde *expérience de cours*

On peut visualiser les modes propres le long d'une corde, c'est l'analogie d'une particule dans un puits de potentiel.

à installer mardi 13 mars 2018 en salle L028.

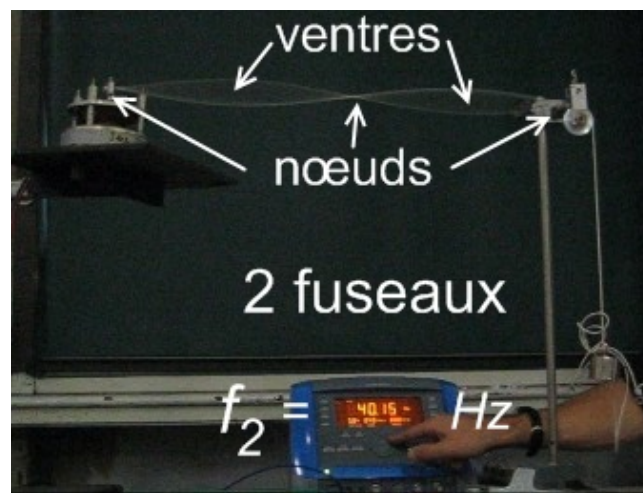


FIGURE 1 – Les modes propres d'une corde

I- Particule quantique ou "quanton"

1. Généralités sur les particules quantiques



Inégalité de Heisenberg spatiale *à retenir*

Une particule quantique, contrairement à la vision classique, a une position x définie à Δx près, et une quantité de mouvement p_x (suivant l'axe Ox) définie à Δp_x près.

L'inégalité de Heisenberg spatiale stipule que

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

où $\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,05 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$ est la constante de Planck réduite.



1 Inégalité de Heisenberg appliquée à une particule macroscopique et une particule microscopique *exercice*

On s'intéresse à une bille de masse $m = 100 \text{ g}$, se déplaçant à la vitesse $v = 2,0 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ suivant l'axe Ox .

▷ Estimer les incertitudes Δx sur x , la position de la bille, et Δp_x sur sa quantité de mouvement p_x . L'inégalité de Heisenberg spatiale est-elle vérifiée pour la bille?

On s'intéresse maintenant à un électron de masse $m \approx 10^{-31} \text{ kg}$, mal localisé dans un atome ($\Delta x \approx 10^{-10} \text{ m}$), tournant avec une pulsation $\omega \approx 10^{17} \text{ rad} \cdot \text{s}^{-1}$ (correspondant au proche UV).

▷ Estimer p_x de l'électron, puis, grâce à l'inégalité de Heisenberg spatiale, Δp_x . Montrer alors que la quantité de mouvement de l'électron est très mal connue.

▷ On peut estimer $\Delta x \approx 1$ mm et l'incertitude relative $\frac{\Delta p_x}{p_x} \approx 0,1\%$, d'où $\Delta p_x \approx 2 \times 10^{-4} \text{ kg} \cdot \text{m} \cdot \text{s}^{-1}$.

$\Delta p_x \approx 2 \times 10^{-7} \text{ J} \cdot \text{s} \gg \frac{\hbar}{2}$. L'inégalité de Heisenberg spatiale est donc bien vérifiée!

▷ $p_x = m r_0 \omega \approx 10^{-31} \times 10^{-10} \times 10^{17} \approx 10^{-24} \text{ kg} \cdot \text{m} \cdot \text{s}^{-1}$.

L'inégalité de Heisenberg donne $\Delta p_x \approx \frac{10^{-34}}{10^{-10}} \approx 10^{-24} \text{ kg} \cdot \text{m} \cdot \text{s}^{-1}$. Comme $\Delta p_x \approx p_x$, la quantité de mouvement de l'électron est très mal connue.



Critère pour savoir si le traitement sera quantique ou non à retenir

Pour un phénomène physique donné, la physique classique constitue une approximation valable de la physique quantique uniquement si toutes les grandeurs physiques du type « action » (en $\text{J} \cdot \text{s}$) sont très grandes par rapport à \hbar .

2. Exemples de comportements ondulatoires pour une particule quantique



Onde de DE BROGLIE *définition*

A toute particule d'énergie E et de quantité de mouvement p , on peut associer une onde

- de fréquence ν et de pulsation ω telles que $E = h\nu = \hbar\omega$;
- de vecteur d'onde k et de longueur d'onde λ tels que $p = \hbar k = \frac{h}{\lambda}$.



Principe de complémentarité *schéma*

La figure 2 représente la métaphore du cylindre : si on éclaire un cylindre sur sa longueur, l'ombre projetée sur un mur donne un rectangle. Au contraire, si on l'éclaire face à sa base, l'ombre donne un cercle. On a deux vues différentes d'un même objet : le cylindre.

De même, les aspects corpusculaire et ondulatoire sont deux représentations complémentaires d'une seule et même chose. Tout dépend où, quand et comment on l'observe.

On appelle parfois quanton, un objet quantique qui présente des aspects corpusculaire et ondulatoire.



Diffraction par une fente *schéma*

La figure 3 représente la diffraction du faisceau de particules par une fente.



2 Phénomène de diffraction et principe de Heisenberg *exercice*

Un faisceau de particule monodirectionnel suivant Oz est incident sur une fente.

▷ Déterminer Δp_x . Montrer que l'inégalité de Heisenberg spatiale impose au faisceau incident d'emplir tout l'espace.

Le faisceau passe à travers une fente de dimension d .

▷ Montrer que l'inégalité de Heisenberg spatiale impose au faisceau d'être diffracté avec un angle θ qu'on estimera.

▷ $\Delta p_x = 0$ car $p_x = \hbar k_x = 0$. L'inégalité de Heisenberg spatiale impose donc $\Delta x \rightarrow \infty$.

▷ $\Delta x \approx d$, aussi l'inégalité de Heisenberg spatiale impose $\Delta p_x = \hbar \Delta k_x \geq \frac{\hbar}{2d}$. Donc le faisceau est diffracté avec un angle

$$\theta = \frac{k_x}{k_z} \approx \frac{1}{2d \frac{2\pi}{\lambda}} \approx \frac{\lambda}{d}$$

où λ est la longueur d'onde de de Broglie associée à la particule quantique.

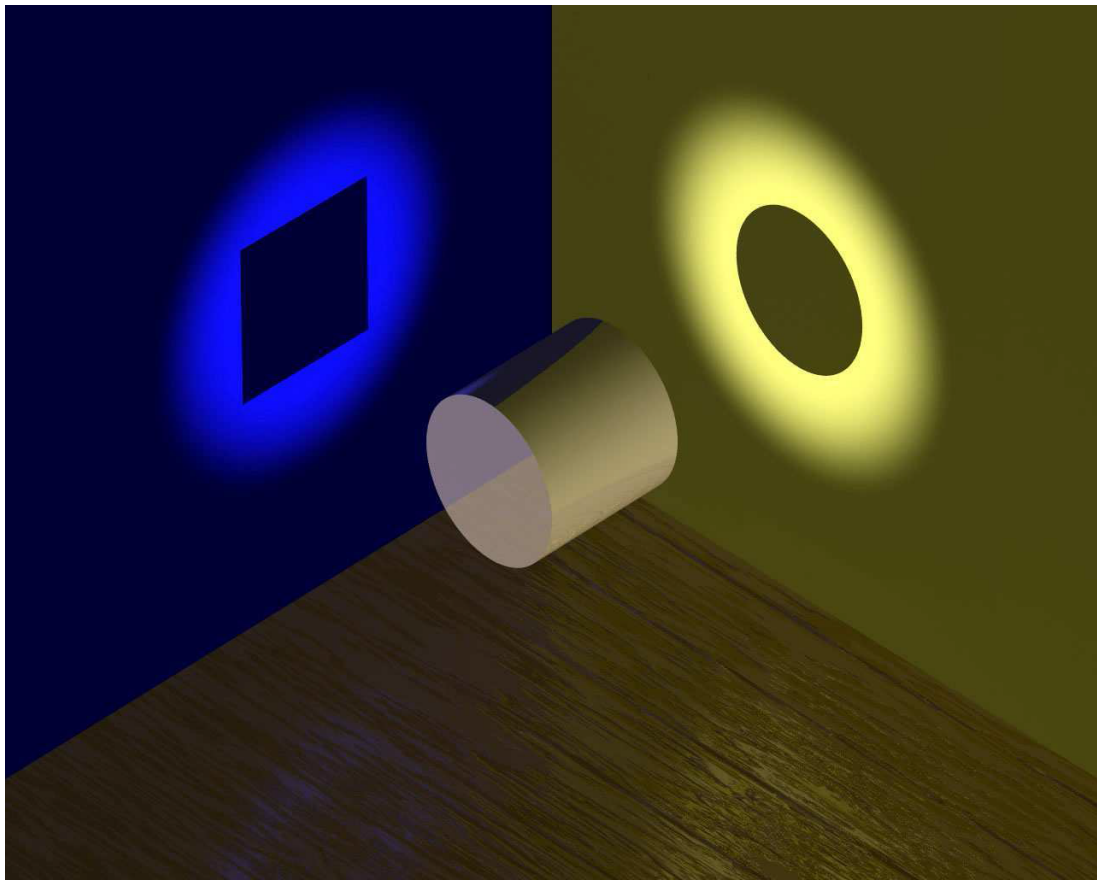


FIGURE 2 – Principe de complémentarité

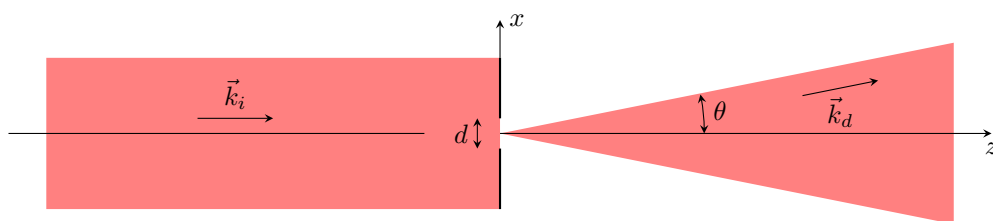


FIGURE 3 – Diffraction par une fente

II- La fonction d'onde

1. Intérêt de la fonction d'onde



Position du problème *s'y retrouver*

On s'intéressera à une particule quantique astreinte à se déplacer dans un espace unidimensionnel, assimilé à l'axe Ox .

À cette particule est associée une fonction d'onde $\tilde{\psi}(x, t)$, qui va décrire le comportement de cette particule.



Utilisation de la fonction d'onde pour le calcul d'une moyenne *à retenir*

La fonction d'onde est une densité linéique de présence de la particule à l'abscisse x et à la date t . Elle doit donc être normée :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\tilde{\psi}(x, t)|^2 dx = 1 \quad \forall t$$

La fonction d'onde donne la moyenne d'une grandeur g associée à la particule quantique :

$$g_m = \int_{-\infty}^{+\infty} g |\tilde{\psi}(x, t)|^2 dx$$

par exemple, la position moyenne est $x_m = \int_{-\infty}^{+\infty} x |\tilde{\psi}(x, t)|^2 dx$.



remarque

La fonction d'onde intervenant en module, elle est fixée à une phase près : $\tilde{\psi}(x, t)$ et $\tilde{\psi}(x, t) e^{i\alpha}$ donnent les mêmes résultats.



lien avec la notion d'orbitale en chimie : *s'y retrouver*



Interférences *schéma*

La figure 4 représente le phénomène d'interférences du faisceau de particules par le dispositif des fentes d'Young.



3 Interférences et fonction d'onde *exercice*

Un faisceau de particule est incident sur un dispositif de trous d'Young S_1 et S_2 . On note $\tilde{\psi}_1$ (respectivement $\tilde{\psi}_2$) la fonction d'onde associée à la particule lorsque S_2 est bouché (respectivement S_1).

▷ Quelle est la probabilité de trouver la particule en M , si S_1 et S_2 sont ouverts ? Comment interpréter le résultat ?

▷ La probabilité de trouver la particule en M , si S_1 et S_2 sont ouverts, est

$$|\tilde{\psi}_1(M, t) + \tilde{\psi}_2(M, t)|^2 = |\tilde{\psi}_1(M, t)|^2 + |\tilde{\psi}_2(M, t)|^2 + \left(\tilde{\psi}_1(M, t) \tilde{\psi}_2^*(M, t) + \tilde{\psi}_1^*(M, t) \tilde{\psi}_2(M, t) \right) \neq |\tilde{\psi}_1(M, t)|^2 + |\tilde{\psi}_2(M, t)|^2$$

il y a donc "interférence".

2. L'équation de Schrödinger

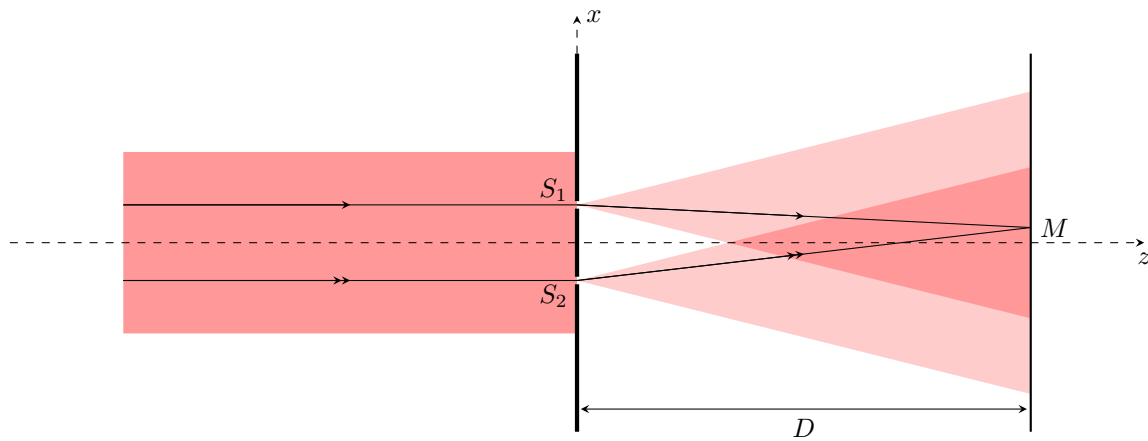


FIGURE 4 – Interférences

♥ Équation de Schrödinger à retenir

La fonction d'onde $\tilde{\psi}(x, t)$ associée à une particule quantique de masse m évolue suivant l'équation de Schrödinger :

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

où $V(x, t)$ est le potentiel dans lequel évolue la particule (énergie potentielle dont dérivent les forces auxquelles est soumise la particule).

✳ Évolution de la fonction d'onde s'y retrouver

L'équation de Schrödinger remplace le principe fondamental de la dynamique en mécanique classique. Connaissant la fonction d'onde à un instant initial, on peut, grâce à l'équation de Schrödinger, connaître sa valeur à n'importe quelle autre date.

🔗 4 États stationnaires *exercice*

On suppose que le potentiel n'est fonction que de l'espace : $V(x)$.

▷ Réécrire l'équation de Schrödinger en faisant apparaître l'opérateur hamiltonien \hat{H} qui est relatif à l'espace. Vérifier l'homogénéité de l'équation obtenue.

▷ Utiliser la méthode de séparation des variables : on cherche la fonction d'onde sous la forme $\tilde{\psi}(x, t) = \tilde{\varphi}(x) \tilde{\chi}(t)$. Écrire alors l'équation vérifiée par $\tilde{\varphi}(x)$. On fera apparaître l'énergie E de la particule.

▷ Montrer que $\tilde{\chi}(t) = e^{-i\omega t}$ est une solution.

▷ Relier E et ω .

▷ En faisant apparaître l'opérateur hamiltonien $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$ qui est relatif à l'espace, on peut réécrire l'équation de Schrödinger sous la forme :

$$i \hbar \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial t} = \hat{H} \tilde{\psi}$$

qui est bien homogène à des joules fois l'unité de $\tilde{\psi}$ ($\text{m}^{-\frac{1}{2}}$).

▷ On utilise la méthode de séparation des variables : en injectant la fonction d'onde sous la forme $\tilde{\psi}(x, t) = \tilde{\varphi}(x) \tilde{\chi}(t)$ dans l'équation de Schrödinger on trouve :

$$i \hbar \tilde{\varphi}(x) \frac{\partial \tilde{\chi}(t)}{\partial t} = \tilde{\chi}(t) \hat{H} \tilde{\varphi}(x) \Rightarrow i \hbar \frac{\tilde{\chi}'(t)}{\tilde{\chi}(t)} = \frac{\hat{H} \tilde{\varphi}}{\tilde{\varphi}} = \text{cste} = E \Rightarrow \hat{H} \tilde{\varphi} = E \tilde{\varphi}$$

▷ Comme on a aussi $\tilde{\chi}' + i \frac{E}{\hbar} \tilde{\chi} = 0$, on vérifie que $\tilde{\chi}(t) = e^{-i\omega t}$ est bien solution.

▷ On a donc $E = \hbar\omega$.

**États stationnaires** *définition*

On appelle état stationnaire une fonction d'onde $\tilde{\psi}(x, t) = \tilde{\varphi}(x) e^{-i\omega t}$ où $\tilde{\varphi}(x)$ vérifie l'équation de Schrödinger indépendante du temps :

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \tilde{\varphi}(x) = \hat{H} \tilde{\varphi}(x) = E \tilde{\varphi}(x)$$

où l'énergie est $E = \hbar\omega$.

*remarque*

Bien distinguer l'onde associée à un état stationnaire en mécanique quantique d'une onde stationnaire au sens usuel de la physique des ondes.

**Principe de superposition** *s'y retrouver*

L'équation de Schrödinger étant linéaire, toute combinaison d'état stationnaire est aussi solution de cette équation :

$$\tilde{\psi}(x, t) = \sum_n c_n \tilde{\varphi}_n(x) e^{-i\omega_n t}$$

III- Particule quantique dans un potentiel homogène

1. États stationnaires d'une particule quantique dans un potentiel homogène

**Position du problème** *s'y retrouver*

On s'intéressera à une particule quantique astreinte à se déplacer dans un espace unidimensionnel, assimilé à l'axe Ox , dans un potentiel homogène $V = V_0$.

**5 Recherche des fonctions d'onde** *exercice*

On s'intéresse à une particule quantique dans un potentiel homogène V_0 .

▷ Déterminer la forme de $\tilde{\varphi}(x)$ à partir de l'équation de Schrödinger indépendante du temps.

▷ Retrouver la fonction d'onde à partir de l'équation de Schrödinger en cherchant des solutions sous la forme traditionnelle $\tilde{\psi}(x, t) = \tilde{\psi}_0 e^{-i(\omega t - \tilde{k}x)}$.

▷ L'équation de Schrödinger indépendante du temps est :

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \tilde{\varphi}(x) = \hat{H} \tilde{\varphi}(x) = E \tilde{\varphi}(x) \Rightarrow \frac{\partial^2 \tilde{\varphi}}{\partial x^2} + \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} \tilde{\varphi} = 0$$

de solution

$\tilde{\varphi} = \tilde{\psi}_0 e^{\pm i k x}$ avec $k = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}$ si $E > V_0$,

ou bien $\tilde{\varphi} = \tilde{\psi}_0 e^{\pm k x}$ avec $k = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$ si $E < V_0$.

▷ En injectant la forme $\tilde{\psi}(x, t) = \tilde{\psi}_0 e^{-i(\omega t - \tilde{k}x)}$ dans l'équation de Schrödinger, on trouve une relation de dispersion

$$i \hbar (-i\omega) \tilde{\psi} = \frac{-\hbar^2}{2m} (i\tilde{k})^2 \tilde{\psi} + V_0 \tilde{\psi} \Rightarrow \tilde{k}^2 = \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}$$

donc :

$\tilde{\psi}(x, t) = \tilde{\psi}_0 e^{-i(\omega t \pm kx)}$ avec $k = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}$ si $E > V_0$,

ou bien $\tilde{\psi}(x, t) = \tilde{\psi}_0 e^{\pm kx} e^{-i\omega t}$ avec $k = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$ si $E < V_0$.

**Interprétation ondulatoire des fonctions d'onde dans un potentiel homogène***à retenir*Si $E > V_0$, la fonction d'onde est une superposition d'OPPM :

$$\tilde{\psi}(x, t) = \tilde{\psi}_0 e^{-i(\omega t \pm kx)}$$

Si $E < V_0$, la fonction d'onde est une superposition d'ondes évanescentes :

$$\tilde{\psi}(x, t) = \tilde{\psi}_0 e^{\pm kx} e^{-i\omega t}$$

2. Particule quantique libre**Position du problème** *s'y retrouver*On s'intéressera à une particule quantique astreinte à se déplacer dans un espace unidimensionnel, assimilé à l'axe Ox , dans un potentiel homogène $V = V_0 = 0$.On supposera aussi que son énergie est $E > V_0 = 0$.**6 Interprétation de l'opérateur hamiltonien** *exercice*

On pose l'opérateur hamiltonien

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$$

▷ Donner un sens physique à cet opérateur.

▷ En posant $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ (relation de de Broglie), on voit que l'opérateur hamiltonien

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) = \frac{-\hbar^2}{2m} (i\vec{k})^2 = \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2} m v^2 = E_c = E_{tot}$$

La relation de de Broglie $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ montre donc que

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} = \frac{p^2}{2m} = E_c$$

et l'opérateur hamiltonien est

$$\hat{H} = E_{tot} = E_c + V_0$$

**Courant de probabilité associé à un état stationnaire** *définition*La probabilité de trouver une particule étant $|\tilde{\psi}(x, t)|^2$ et sa vitesse $\vec{v} = \frac{\vec{p}}{m} = \frac{\hbar \vec{k}}{m}$, on peut admettre que le courant de probabilité est le produit

$$\vec{J} = |\tilde{\psi}(x, t)|^2 \frac{\hbar \vec{k}}{m}$$

**Onde associée à un état stationnaire** *schéma*| La figure 5 représente la fonction $\varphi(x)$ dans le cas d'un état stationnaire.

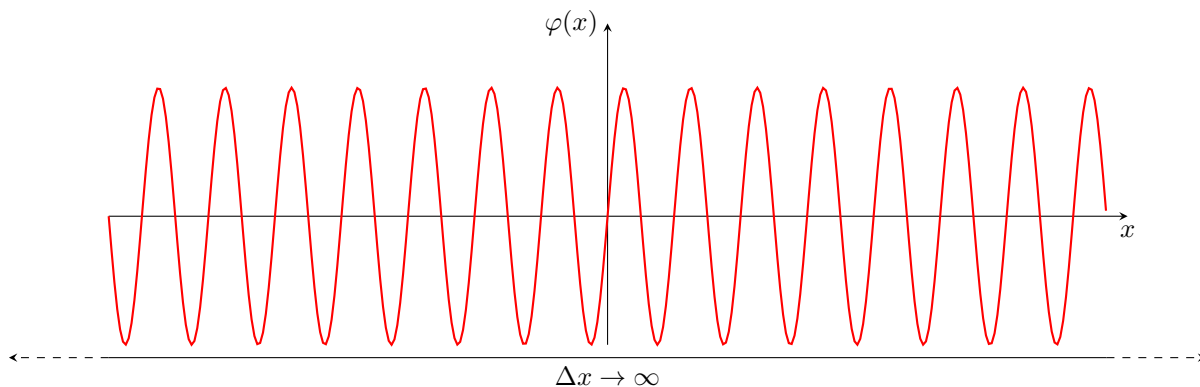


FIGURE 5 – Onde associée à un état stationnaire

7 Impossibilité physique de l'état stationnaire *exercice*

- | On s'intéresse à un état stationnaire.
- ▷ Estimer Δx et Δp_x . L'inégalité de Heisenberg spatiale est-elle vérifiée?
- ▷ Montrer qu'une solution de type OPPM est non physique.

- ▷ $\Delta x \rightarrow \infty$ et $\Delta p_x \rightarrow 0$ car $E = \frac{p^2}{2m}$ est parfaitement défini, ce qui n'est pas contradictoire avec l'inégalité de Heisenberg spatiale.
- ▷ Une solution de type OPPM est non physique car $\tilde{\psi}(x, t)$ est non normalisable :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\tilde{\psi}(x, t)|^2 dx = \infty \times |\tilde{\psi}_0|^2 \neq 1$$

8 Paquet d'onde quantique *exercice*

- | On s'intéresse à un paquet d'onde pour surmonter le problème de l'OPPM non physique.
- ▷ Montrer que l'inégalité de Heisenberg spatiale impose une largeur Δx dans laquelle se "trouve" la particule quantique.
- ▷ Montrer que la vitesse de groupe et la vitesse de la particule s'identifient.

- ▷ En créant un paquet d'onde, on a plusieurs énergies $E = \frac{p^2}{2m}$ donc $\Delta p_x \neq 0$. L'inégalité de Heisenberg spatiale impose alors $\Delta x \geq \frac{\hbar}{2\Delta p_x}$.
- ▷ En injectant la forme $\tilde{\psi}(x, t) = \tilde{\psi}_0 e^{-i(\omega t - \bar{k}x)}$ dans l'équation de Schrödinger, on trouve une relation de dispersion

$$i\hbar(-i\omega)\tilde{\psi} = \frac{-\hbar^2}{2m}(ik)^2\tilde{\psi} + V_0\tilde{\psi} \Rightarrow k^2 = \frac{2m\omega}{\hbar}$$

aussi $v_\varphi = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar k}{2m} = \frac{p}{2m} = \frac{v}{2}$ mais

$$2k dk = \frac{2m d\omega}{\hbar} \Rightarrow v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m} = v$$

Paquet d'ondes associé à une particule quantique *schéma*

- | La figure 6 représente la fonction $\varphi(x)$ dans le cas d'un paquet d'ondes.

remarque

- | Une particule libre, puisqu'elle n'est pas soumise à des conditions aux limites, peut voir son énergie varier continûment (c'est ce que l'on fait avec un paquet d'onde).
- | On verra que le confinement d'une particule quantique confère une quantification de son énergie.

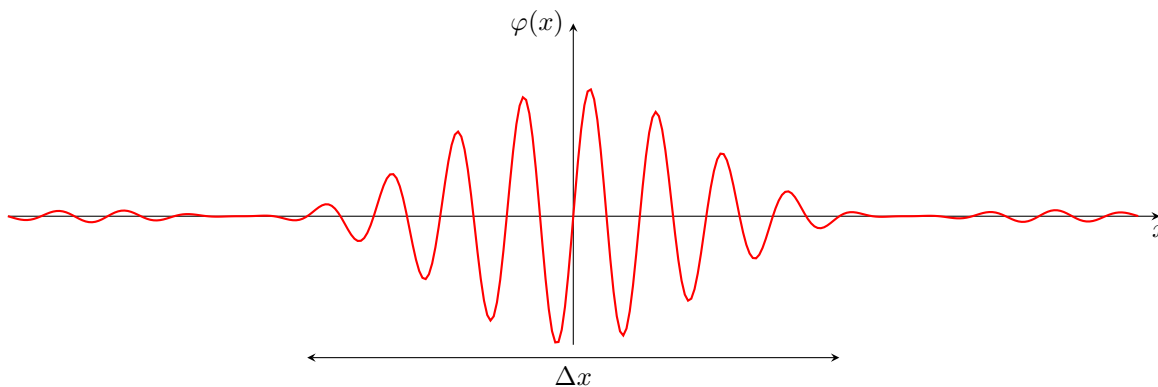


FIGURE 6 – Paquet d’ondes associé à une particule quantique

I

3. Particule quantique dans un puits infini

 **Position du problème** *s’y retrouver*

On s’intéressera à une particule quantique astreinte à se déplacer dans un espace unidimensionnel limité ($x \in [0; \ell]$).

C’est le cas par exemple pour un électron libre dans un fil électrique.

On prendra un potentiel $V = V_0 = 0$ si $x \in [0; \ell]$ et $V = \infty$ sinon.

 **Puits quantique de semi-conducteurs** *photo*

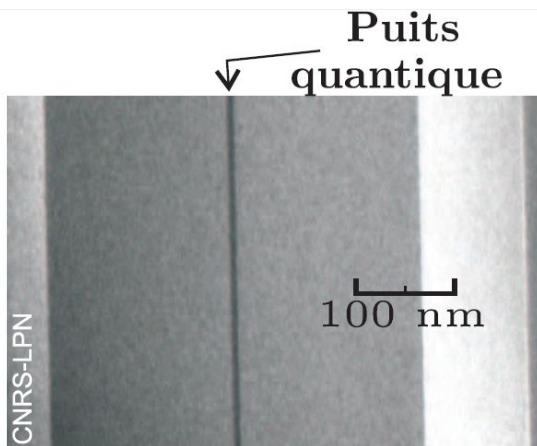



Image obtenue par microscopie électronique en transmission de couches minces $GaAs/GaAlAs$.

 **9 Forme des fonctions d’ondes dans le puits infini** *exercice*

On suppose que $E > V_0 = 0$ dans le puits infini.

- ▷ Montrer que la fonction d’onde qui vérifie les conditions aux limites est sinusoidale.
- ▷ Faire l’analogie avec la recherche des pulsations propres d’une corde vibrante fixée en ses deux extrémités.
- ▷ Établir les expressions des énergies des états stationnaires.

▷ La fonction d'onde est une superposition d'OPPM :

$$\tilde{\psi}(x, t) = \tilde{\psi}_0 e^{-i(\omega t \pm kx)}$$

on peut aussi la réécrire sous forme de sinus ou cosinus :

$$\tilde{\psi}(x, t) = \tilde{\psi}_0 \sin(kx + \varphi) e^{-i\omega t}$$

avec les conditions aux limites $\tilde{\psi}(x=0, t) = \tilde{\psi}(x=\ell, t) = 0$. On peut par exemple choisir $\varphi = 0$. D'autre part $k\ell = n\pi$ avec n un entier.

▷ Cela revient à

$$\frac{2\pi}{\lambda} \ell = n\pi \Rightarrow \ell = n \frac{\lambda}{2}$$

avec n un entier. Il y a en effet des nœuds à la fonction d'onde en $x = 0$ et $x = \ell$, comme pour la corde de Melde.

▷ En réinjectant dans l'équation de Schrödinger, on trouve

$$k^2 = \frac{2m\omega}{\hbar} = \frac{2mE}{\hbar^2} = \left(\frac{n\pi}{\ell}\right)^2 \Rightarrow E = E_n = \frac{1}{2m} \left(\frac{n\pi\hbar}{\ell}\right)^2$$



Caractéristiques d'une particule dans un puits de profondeur infinie *à retenir*

La probabilité de sortir du puits est nulle pour la particule.

La fonction d'onde de la particule s'annule donc au bord du puits infini, et il y a quantification des longueurs d'onde :

$$\ell = \frac{n\lambda}{2}$$

comme dans le cas des modes propres d'une corde fixée à ses deux extrémités.

L'énergie est quantifiée, c'est l'énergie cinétique correspondant à chaque mode.



Fonctions d'onde et énergies dans le puits infini *schéma*

La figure 7 représente les trois premières énergies, états stationnaires et probabilités de présence dans le puits infini.



10 Ordre de grandeur de l'énergie dans le puits infini *exercice*

▷ Retrouver un ordre de grandeur de l'énergie minimale d'une particule quantique dans un puits de potentiel infini à partir de l'inégalité de Heisenberg spatiale.

▷ L'inégalité de Heisenberg spatiale s'écrit

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \Rightarrow \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2\ell}$$

Or p_x varie entre 0 et $p_{max} = \Delta p_x$. Or $E \approx \frac{p_{max}^2}{2m}$ d'où

$$E \geq \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{2\ell}\right)^2$$

ce qui est cohérent avec la valeur de la plus petite énergie $E_1 = \frac{1}{2m} \left(\frac{\pi\hbar}{\ell}\right)^2$.

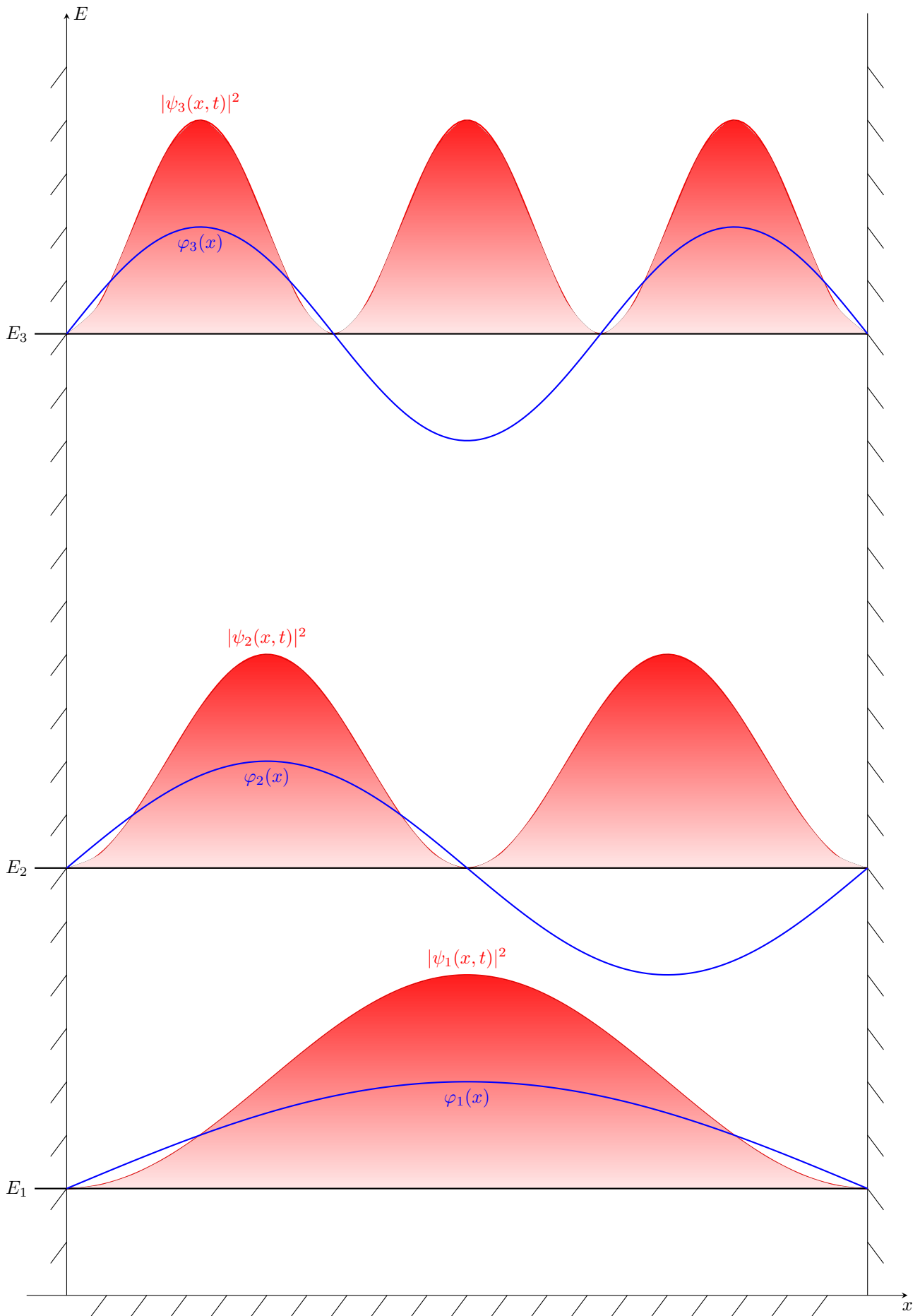


FIGURE 7 – Fonctions d'onde et énergies dans le puits infini

§ 11 Effet du confinement sur l'énergie cinétique *théorème*

Si $\Delta x \searrow$ alors $\Delta p \nearrow \Rightarrow E_c \nearrow$. Aussi, on s'aperçoit que : \Rightarrow
le confinement de la particule quantique donne lieu à une augmentation de son énergie cinétique.

§ 1) Modélisation de l'absorption de lumière par le β -carotène *exercice*

1) On s'intéresse à un électron confiné dans une molécule de β -carotène de longueur ℓ . L'électron est dans un puits infini entre $x = 0$ et $x = \ell$. On suppose que $E > V_0 = 0$ dans le puits infini.

1.a) Montrer que la fonction d'onde qui vérifie les conditions aux limites est sinusoïdale.

1.b) Établir les expressions des énergies des états stationnaires.

1.c) Retrouver ces énergies par une analogie avec une corde vibrante fixée en ses deux extrémités.

2) La molécule de β -carotène possède une bande d'absorption centrée sur la longueur d'onde $\lambda = 451$ nm (dans le bleu), correspondant à l'absorption d'un photon provoquant le passage d'un électron du dernier niveau occupé dans l'état fondamental au premier niveau non occupé.

2.a) Quels sont ces précédents niveaux, sachant qu'il y a 22 électrons délocalisés ?

2.b) En déduire la longueur ℓ . Commenter.

On donne la masse de l'électron : $m = 9,1 \times 10^{-31}$ kg.

Correction :

1) Puits quantique

1.a) La fonction d'onde est une superposition d'OPPM :

$$\tilde{\psi}(x, t) = \tilde{\psi}_0 e^{-i(\omega t \pm kx)}$$

on peut aussi la réécrire sous forme de sinus ou cosinus :

$$\tilde{\psi}(x, t) = \tilde{\psi}_0 \sin(kx + \varphi) e^{-i\omega t}$$

avec les conditions aux limites $\tilde{\psi}(x = 0, t) = \tilde{\psi}(x = \ell, t) = 0$. On peut par exemple choisir $\varphi = 0$. D'autre part $k\ell = n\pi$ avec n un entier.

1.b) En réinjectant dans l'équation de Schrödinger, on trouve

$$k^2 = \frac{2m\omega}{\hbar} = \frac{2mE}{\hbar^2} = \left(\frac{n\pi}{\ell}\right)^2 \Rightarrow E = E_n = \frac{1}{2m} \left(\frac{n\pi\hbar}{\ell}\right)^2$$

1.c) Cela revient à

$$\frac{2\pi}{\lambda} \ell = n\pi \Rightarrow \ell = n \frac{\lambda}{2}$$

avec n un entier. Il y a en effet des nœuds à la fonction d'onde en $x = 0$ et $x = \ell$, comme pour la corde de Melde.

2) Couleur

2.a) Chaque niveau accepte deux électrons (spins de projection $\pm \frac{1}{2}$). Donc les 11 premiers niveaux sont occupés et le 12ième libre.

2.b) Un photon absorbé ou émis entre deux niveaux a une énergie (ici $p = 11$ et $q = 12$) :

$$E_\varphi = |E_p - E_q| = \frac{hc}{\lambda} = \frac{1}{2m} \left(\frac{\pi\hbar}{\ell}\right)^2 (q^2 - p^2)$$

soit

$$\ell = \sqrt{\frac{\lambda}{2mhc} (\pi\hbar)^2 (q^2 - p^2)} = \sqrt{23 \frac{\lambda\pi\hbar}{4mc}}$$

AN : soit

$$\ell = \sqrt{\frac{23 \times 451 \times 10^{-9} \times \pi \times 1,05 \times 10^{-34}}{4 \times 9,1 \times 10^{-31} \times 3 \times 10^8}} = 1,8 \text{ nm}$$

ce qui est possible : cela fait un peu moins de 1 angström la liaison. **Éléments de correction :**

$$\ell = 1,8 \text{ nm.}$$

Les techniques mathématiques à connaître

Résolution d'équation différentielles linéaire sans second membre

Définitions

- équations différentielles : (la fonction est notée u , et la variable est conventionnellement le temps t);
- linéaires : (pas de multiplication, carré, racine, puissance de la fonction u ou de ses dérivées \dot{u} et \ddot{u});
- du premier ordre : ($\dot{u} + k.u = f(t)$);
- du second ordre : ($a.\ddot{u} + b.\dot{u} + c.u = f(t)$);
- avec second membre : ($f(t) \neq 0$);
- sans second membre : ($f(t) = 0$).

Solution générale de l'équation différentielle du premier ordre :

on cherche ici une solution générale de l'équation $\dot{u} + k.u = 0$:

$$du = -k.u. dt \Rightarrow \int_{u_0}^{u(t)} \frac{du}{u} = -k. \int_0^t dt \Rightarrow \ln \left[\frac{u(t)}{u_0} \right] = -k.t \Rightarrow$$

$$u_{\text{gene}}(t) = u_0 e^{-k.t}$$

On détermine la constante u_0 grâce aux conditions initiales.

Solution générale de l'équation différentielle du second ordre :

on cherche ici une solution générale de l'équation : $a.\ddot{u} + b.\dot{u} + c.u = 0$.

En remplaçant $u(t)$ par une exponentielle $e^{r.t}$, on aboutit à l'équation caractéristique :

$$a.r^2 + b.r + c = 0$$

dont les solutions sont r_+ et r_- .

La solution de l'équation différentielle est : $u_{\text{gene}}(t) = A_+ e^{r_+ t} + A_- e^{r_- t}$.

Posons donc $\Delta = b^2 - 4.a.c$. Suivant le signe de Δ , trois cas se présentent :

- si $\Delta < 0$, les deux racines sont complexes conjuguées :

$$r_{\pm} = \frac{-b \pm j.\sqrt{-\Delta}}{2.a}$$

et la solution de l'équation différentielle sans second membre est :

$$u_{\text{gene}}(t) = C e^{-\frac{t}{\tau}} \cos(\Omega t + \varphi)$$

Les coefficients (A_+ ; A_-) ou (A ; φ) sont déterminés grâce aux conditions initiales.

- si $\Delta > 0$, les deux racines sont réelles :

$$r_{\pm} = \frac{-b \pm \sqrt{\Delta}}{2.a}$$

La solution de l'équation différentielle sans second membre est :

$$u_{\text{gene}}(t) = A_+ e^{-\frac{t}{\tau_+}} + A_- e^{-\frac{t}{\tau_-}}$$

Les coefficients (A_+ ; A_-) sont déterminés grâce aux conditions initiales.

- si $\Delta = 0$, la racine est unique et réelle :

$$r_0 = \frac{-b}{2.a}$$

La solution de l'équation différentielle sans second membre est :

$$u_{\text{gene}}(t) = (At + B) e^{-\omega_0.t}$$

Les coefficients (A ; B) sont déterminés grâce aux conditions initiales.

Technique à maîtriser

jeudi 15 mars 2018

I- Les capacités exigibles

1. Particules quantiques libres



ce qu'il faut savoir faire *capacités*

Faire le lien qualitatif avec la notion d'orbitale en chimie.

Relier la superposition de fonctions d'ondes à la description d'une expérience d'interférences entre particules.

Utiliser l'équation de Schrödinger fournie.

Identifier les états stationnaires aux états d'énergie fixée. Établir et utiliser la relation : $\psi(x, t) = \varphi(x) \exp^{-i\frac{E}{\hbar}t}$ et l'associer à la relation de Planck-Einstein. Distinguer l'onde associée à un état stationnaire en mécanique quantique d'une onde stationnaire au sens usuel de la physique des ondes.

Utiliser l'équation de Schrödinger pour la partie spatiale $\varphi(x)$. En exploitant l'expression classique de l'énergie de la particule, associer la relation de dispersion obtenue et la relation de de Broglie. Utiliser l'expression admise $\vec{J} = |\tilde{\psi}(x, t)|^2 \frac{\hbar \vec{k}}{m}$ et l'interpréter comme produit densité \times vitesse.

Identifier vitesse de groupe et vitesse de la particule. Faire le lien avec l'inégalité de Heisenberg spatiale.

2. Particules dans un puits de potentiel de profondeur infinie



ce qu'il faut savoir faire *capacités*

Normaliser une fonction d'onde.

Établir les expressions des énergies des états stationnaires dans un puits de potentiel rectangulaire de profondeur infinie. Faire l'analogie avec la recherche des pulsations propres d'une corde vibrante fixée en ses deux extrémités. Retrouver qualitativement l'énergie minimale à partir de l'inégalité de Heisenberg spatiale.

Associer le confinement d'une particule quantique à une augmentation de l'énergie cinétique.

II- Méthodes

1. Particules quantiques libres



A) Quantique ou non quantique ? *méthode*

Pour un phénomène physique donné, créer une grandeur A du type « action » (en J · s) et en faire une estimation numérique.

Si $A \gg \hbar$, le phénomène physique ne mérite pas de traitement quantique.



B) Recherche des solutions de l'équation de Schrödinger par la méthode de séparation des variables *méthode*

En injectant la fonction d'onde sous la forme $\tilde{\psi}(x, t) = \tilde{\varphi}(x) \tilde{\chi}(t)$ dans l'équation de Schrödinger.

On vérifie que $\tilde{\chi}(t) = e^{-i\omega t}$ est bien solution avec $E = \hbar\omega$.

On appelle état stationnaire une fonction d'onde $\tilde{\psi}(x, t) = \tilde{\varphi}(x) e^{-i\omega t}$ où $\tilde{\varphi}(x)$ vérifie l'équation de

Schrödinger indépendante du temps :

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \tilde{\varphi}(x) = \hat{H} \tilde{\varphi}(x) = E \tilde{\varphi}(x)$$

où l'énergie est $E = \hbar\omega$.

L'équation de Schrödinger étant linéaire, toute combinaison d'état stationnaire est aussi solution de cette équation :

$$\tilde{\psi}(x, t) = \sum_n c_n \tilde{\varphi}_n(x) e^{-i\omega_n t}$$

C) Recherche des solutions de type OPPM de l'équation de Schrödinger *méthode*

En injectant la forme $\tilde{\psi}(x, t) = \tilde{\psi}_0 e^{-i(\omega t - \tilde{k}x)}$ dans l'équation de Schrödinger, on trouve une relation de dispersion, qui donne \tilde{k} .

D) Recherche des solutions de l'équation de Schrödinger sous forme de superposition d'OPPM *méthode*

Une OPPM seule présente une indétermination nulle en quantité de mouvement ($\Delta p = 0$) mais infinie en position ($\Delta x \rightarrow \infty$). D'autre part, elle n'est pas normalisable.

Par conséquent, pour la localiser, on peut choisir de superposer un grand nombre d'ondes planes d'impulsions différentes, ce qui augmente l'indétermination sur quantité de mouvement ($\Delta p \nearrow$) mais réduit celle sur la position ($\Delta x \searrow$), conformément à la relation d'indétermination d'Heisenberg.

La superposition peut se faire, par exemple en sommant les p :

$$\tilde{\psi}(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{A}(p) e^{-\frac{i}{\hbar}(E(p)t - px)} dp$$

avec $E(p) = \frac{p^2}{2m}$ pour une particule libre.

2. Particules dans un puits de potentiel de profondeur infinie

E) Normaliser une fonction d'onde *méthode*

On doit avoir

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\tilde{\psi}(x, t)|^2 dx = 1 \quad \forall t$$

F) Recherche des solutions sous la forme d'onde stationnaires dans un puits de potentiel infini *méthode*

On cherche la fonction d'onde sous la forme $\tilde{\psi}(x, t) = \sin(kx + \varphi_0) e^{-i\omega t}$.

On trouve les k qui vérifient les conditions aux limites.

En injectant la fonction d'onde dans l'équation de Schrödinger, on trouve les énergies des états stationnaires dans un puits de potentiel rectangulaire de profondeur infinie.

III- Exercices

1. Particules quantiques libres

1.1) Critère quantique

La mécanique classique suffit pour une particule matérielle lorsque la longueur d'onde de DE BROGLIE est négligeable devant la taille caractéristique du système étudié.

1) Montrer que c'est cohérent avec le critère donné sur l'action.

1) Si la longueur d'onde de DE BROGLIE λ telle que $p = \hbar k = \frac{hc}{\lambda}$ est négligeable devant la taille caractéristique d du système étudié, on a :

$$\lambda \ll d \Leftrightarrow \frac{hc}{p} \ll d \Leftrightarrow \frac{pd}{c} \gg h$$

Cette action ($\frac{pd}{c}$) est bien grande devant h (ou \hbar).

1.2) Une trotteuse quantique ?

La trotteuse d'une montre, d'une taille $\ell \approx 1$ cm, d'une masse $m \approx 1$ μ g, se déplace avec un temps caractéristique $\tau \approx 1$ s.

- 1) À partir de ces grandeurs, créer une nouvelle grandeur A qui aurait la dimension d'une action.
- 2) La trotteuse d'une montre mérite-t-elle un traitement quantique ?

1) $[A] = \text{J} \cdot \text{s} = \text{kg} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$. On peut donc poser $A = \frac{m\ell^2}{\tau}$.

2) AN : $A \approx \frac{10^{-6} \times (10^{-2})^2}{1} = 10^{-10} \text{ J} \cdot \text{s}$. Comme $A \gg \hbar$, la trotteuse n'est pas quantique.

1.3) Pourquoi l'atome d'hydrogène mérite-t-il un traitement quantique ?

Préciser, en utilisant le critère quantique, si l'étude de l'atome d'hydrogène nécessite la physique quantique sachant que l'on relève expérimentalement une énergie d'ionisation $E = 13,6$ eV et que son spectre présente une longueur d'onde minimale $\lambda = 100$ nm.

1) $[A] = \text{J} \cdot \text{s} = \text{J} \cdot \text{m} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}$. On peut donc poser $A = \frac{E\lambda}{c}$.

2) AN : $A \approx \frac{13,6 \times 1,6 \times 10^{-19} \times 100 \times 10^{-9}}{3 \times 10^8} = 10^{-33} \text{ J} \cdot \text{s}$. Comme $A \approx \hbar$, l'atome d'hydrogène est quantique.

1.4) Diffraction d'un grain de poussière

En 1925, Elsassner fait remarquer que l'on peut vérifier la nature ondulatoire de particules matérielles de la même façon qu'on a vérifié en 1912 la nature ondulatoire des rayons X, c'est-à-dire en leur faisant traverser un solide cristallin conduisant à l'obtention d'un phénomène de diffraction.

1) Peut-on révéler ainsi la nature ondulatoire de grains de poussière de masse $m = 10^{-15}$ kg et de vitesse $1 \text{ mm} \cdot \text{s}^{-1}$?

1) Pour un grain de poussière (non relativiste), la longueur d'onde de de Broglie est

$$\lambda = \frac{h}{mv} = 0,7 \text{ fm}$$

Il est impossible de trouver un solide cristallin permettant d'obtenir un phénomène de diffraction observable avec de tels grains de poussière : on ne peut pas avoir de paramètre de maille de l'ordre d'une telle longueur d'onde de de Broglie (inférieure à la taille d'un nucléon!).

1.5) Vitesses de phase et de groupe pour une particule quantique libre

1) Si l'on adopte un paquet d'ondes de de Broglie pour la matière, comment peut-on obtenir la vitesse de son "centre" connaissant la relation de dispersion ?

2) On considère le cas d'une particule matérielle non relativiste ne ressentant aucune interaction. Obtenir la relation de dispersion $\omega(k)$ du paquet d'ondes qui la décrit. Vérifier l'accord avec le principe de correspondance de Bohr (1923) qui dit que "les prédictions de la théorie quantique tendent vers leurs valeurs classiques dans la limite des nombres quantiques élevés".

3) Compte tenu de la relation de dispersion précédente, que peut-on prévoir pour l'évolution du profil du paquet d'ondes au cours de sa propagation ?

1) Comme vu lors de l'étude du paquet d'ondes en physique des ondes, la vitesse de son "centre" est la vitesse de groupe de valeur $v_g = \frac{d\omega}{dk}$ (à calculer pour la valeur de k caractéristique du paquet...).

2) Pour le paquet d'ondes de de Broglie associé à la particule, on sait que son énergie est $E = \hbar\omega$ et son impulsion est $\vec{p} = \hbar\vec{k}$. Or, s'agissant d'une particule libre non relativiste, $E = E_c + E_p = E_c = \frac{p^2}{2m}$. donc

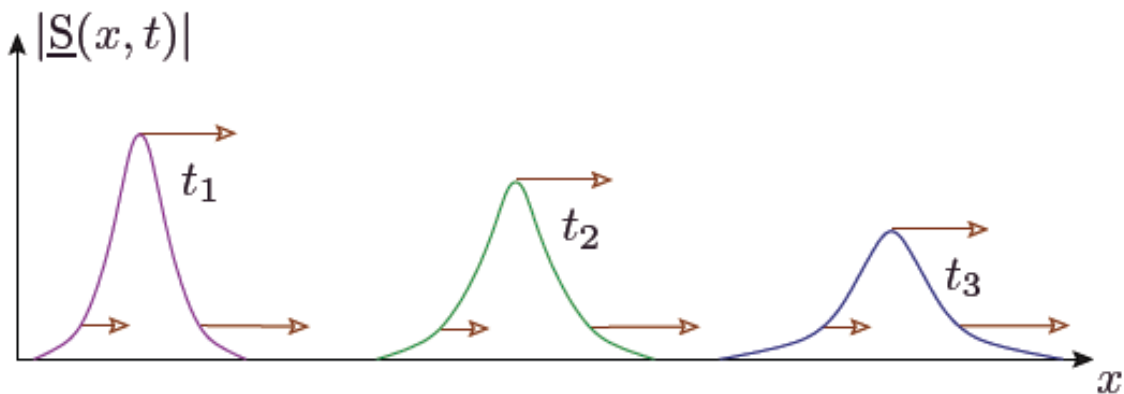
$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

soit la relation de dispersion $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$. Si l'on veut vérifier la correspondance entre la mécanique ondulatoire et la mécanique classique, on doit s'assurer que la vitesse de groupe du paquet d'ondes est la vitesse classique de la particule :

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k}{m} = v$$

Le principe de correspondance de Bohr est bien vérifié (mais l'on ne voit pas ici le rôle des nombres quantiques...)!

3) Avec la relation de dispersion précédente, la vitesse de phase dépend forcément de ω donc on prévoit une modification de la largeur du paquet d'ondes de matière au cours de sa propagation ("étalement") :



1.6) Fonction d'onde d'un faisceau d'électrons

1) Donner l'expression d'une fonction d'onde $\tilde{\psi}(x, t)$ décrivant les électrons libres d'un faisceau électronique de direction (Ox) sachant que le nombre d'électrons par unité de longueur dans le faisceau est $n = 5 \times 10^6 \text{ mm}^{-1}$. Chaque électron, sans spin et sans interaction avec les autres électrons, est non relativiste et a une énergie cinétique $E_c = 5 \text{ eV}$.

2) Calculer alors le courant de probabilité et discuter le résultat.

1) Ces électrons sont non relativistes et d'impulsion

$$p = \sqrt{2mE_c} = 10^{-24} \text{ kg} \cdot \text{m} \cdot \text{s}^{-1}$$

La fonction d'onde adoptable est

$$\tilde{\psi}(x, t) = \tilde{\psi}_0 e^{-i(\omega t - kx)} = \tilde{\psi}_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(E_c t - px)}$$

On peut affecter à $\tilde{\psi}_0$ une valeur pertinente :

$$|\tilde{\psi}_0|^2 = n$$

et on peut choisir $\tilde{\psi}_0$ réelle positive sans changer la physique du problème. Ainsi,

$$\tilde{\psi}_0 = \sqrt{n} = 7 \times 10^4 \text{ m}^{-\frac{1}{2}}$$

On trouve donc :

$$\tilde{\psi}(x, t) = \sqrt{n} e^{-\frac{i}{\hbar} (E_c t - \sqrt{2m E_c} x)}$$

2) Le courant de probabilité est

$$\vec{J} = |\tilde{\psi}(x, t)|^2 \frac{\hbar \vec{k}}{m} = n \frac{\vec{p}}{m} = n \vec{v}$$

ce qui est cohérent avec la définition classique.

1.7) Temps d'évolution d'une "grosse" particule

Soit une particule de masse $m = 10^{-15}$ kg de taille caractéristique $\ell = 1 \mu\text{m}$ supposée correspondre à la largeur caractéristique d'un paquet d'ondes de matière.

3) Montrer que l'équation de Schrödinger donne, en ordre de grandeur le temps caractéristique d'étalement du paquet d'onde :

$$\tau = \frac{2m\ell^2}{\hbar}$$

4) Calculer numériquement τ et conclure.

1) L'équation de Schrödinger

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

donne, en ordre de grandeur :

$$\hbar \frac{1}{\tau} = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{1}{\ell^2}$$

soit le temps caractéristique d'étalement du paquet d'onde :

$$\tau = \frac{2m\ell^2}{\hbar}$$

2) Dans le cas de cette particule, on obtient $\tau = 2 \times 10^7$ s soit 231 jours. On se rend compte que la faiblesse de la constante de Planck assure qu'une particule macroscopique reste forcément localisée à tout instant et on peut toujours utiliser la physique ordinaire pour la décrire.

1.8) Démonstration de l'inégalité de Heisenberg spatiale

1) On suppose que $\langle x \rangle = 0$ et $\langle p \rangle = 0$. Exprimer Δx et Δp .

2) Montrer que

$$I(\lambda) = \int_{-\infty}^{+\infty} \left| x \tilde{\psi} + \lambda \hbar \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial x} \right|^2 dx$$

est égal à

$$I(\lambda) = \langle x^2 \rangle - \lambda \hbar + \lambda^2 \langle p_x^2 \rangle$$

3) En utilisant le fait que $I(\lambda)$ est un trinôme du second degré en λ , toujours positif ou nul, en déduire l'inégalité de Heisenberg spatiale.

1) Pour peu que $\langle x \rangle = 0$,

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - (\langle x \rangle)^2} = \sqrt{\langle x^2 \rangle}$$

et

$$\Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - (\langle p \rangle)^2} = \sqrt{\langle p^2 \rangle}$$

si $\langle p \rangle = 0$.

2)

$$I(\lambda) = \int_{-\infty}^{+\infty} \left| x \tilde{\psi} + \lambda \hbar \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial x} \right|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(x^2 |\tilde{\psi}|^2 + \lambda x \tilde{\psi} \hbar \frac{\partial \tilde{\psi}^*}{\partial x} + \lambda x \tilde{\psi}^* \hbar \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial x} + \lambda^2 \hbar^2 \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial x} \frac{\partial \tilde{\psi}^*}{\partial x} \right) dx$$

soit

$$I(\lambda) = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 |\tilde{\psi}|^2 dx + \lambda \hbar \int_{-\infty}^{+\infty} x \frac{\partial (\tilde{\psi} \tilde{\psi}^*)}{\partial x} dx + \lambda^2 \hbar^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial x} \frac{\partial \tilde{\psi}^*}{\partial x} dx$$

On reconnaît, pour la première intégrale :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 |\tilde{\psi}|^2 dx = \langle x^2 \rangle$$

La seconde intégrale se calcule par intégration par partie :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x \frac{\partial (\tilde{\psi} \tilde{\psi}^*)}{\partial x} dx = \int_{-\infty}^{+\infty} x \frac{\partial (|\tilde{\psi}|^2)}{\partial x} dx = [x |\tilde{\psi}|^2]_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} |\tilde{\psi}|^2 dx = - \int_{-\infty}^{+\infty} |\tilde{\psi}|^2 dx = -1$$

Enfin la troisième intégrale devient, puisque $\frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial x} = i k \tilde{\psi} = \frac{i}{\hbar} p \tilde{\psi}$:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial x} \frac{\partial \tilde{\psi}^*}{\partial x} dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{i}{\hbar} p \tilde{\psi} \frac{-i}{\hbar} p \tilde{\psi}^* dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{p^2}{\hbar^2} |\tilde{\psi}|^2 dx = \frac{\langle p^2 \rangle}{\hbar^2}$$

On a donc bien

$$I(\lambda) = \langle x^2 \rangle - \lambda \hbar + \lambda^2 \langle p^2 \rangle$$

3) Comme $I(\lambda)$ est un trinôme du second degré en λ , toujours positif ou nul, il admet, au plus, une seule racine. Aussi,

$$\Delta = b^2 - 4ac \leq 0 \Rightarrow \hbar^2 \leq 4 \langle x^2 \rangle \langle p^2 \rangle = 4 \Delta x^2 \Delta p^2$$

Donc on retrouve bien

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

1.9) Paquet d'ondes

On s'intéresse à une particule libre qui se déplace suivant l'axe Ox .

1) OPPM

1.a) Rappeler les formes des ondes planes progressives monochromatiques solutions de l'équation de Schrödinger.

1.b) Montrer qu'on peut les réécrire sous la forme

$$\tilde{\psi}(x, t) = \tilde{\psi}_0 e^{\frac{i}{\hbar}(p x - E(p) t)}$$

1.c) Pourquoi une telle fonction d'onde n'est-elle pas acceptable?

2) Petit paquet d'ondes

On va supposer que plusieurs quantité de mouvement existent autour de p_0 , à $\Delta p \ll p_0$ près, et on construit le paquet d'ondes suivant :

$$\tilde{\psi}(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} A(p) e^{\frac{i}{\hbar}(p x - E(p) t)} dp$$

2.a) Exprimer $E(p)$ au premier ordre.

2.b) Montrer que le petit paquet d'onde peut se réécrire :

$$\tilde{\psi}(x, t) = e^{\frac{i p_0^2 t}{2 m \hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} A(p) e^{\frac{i}{\hbar}(x - \frac{p_0}{m} t) p} dp$$

1) OPPM

1.a) Les formes des ondes planes progressives monochromatiques solutions de l'équation de Schrödinger sont de type :

$$\tilde{\psi}(x, t) = \tilde{\psi}_0 e^{-i(\omega t - kx)}$$

1.b) Comme $E = \hbar\omega$ et $p = \hbar k$, on peut les réécrire sous la forme

$$\tilde{\psi}(x, t) = \tilde{\psi}_0 e^{\frac{i}{\hbar}(px - E(p)t)}$$

1.c) Une telle fonction d'onde n'est pas acceptable car non normalisable :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\tilde{\psi}|^2(x, t) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |\tilde{\psi}_0|^2 dx \neq 1$$

2) Petit paquet d'ondes

2.a) Au premier ordre :

$$E(p) = E(p_0) + \left(\frac{dE_p}{dp} \right)_{p_0} (p - p_0)$$

or $\frac{dE_p}{dp} = \frac{2p}{2m} \Rightarrow \left(\frac{dE_p}{dp} \right)_{p_0} = \frac{p_0}{m}$. Donc

$$E(p) = \frac{p_0^2}{2m} + \frac{p_0}{m} (p - p_0) = -\frac{p_0^2}{2m} + \frac{p_0}{m} p$$

2.b) Aussi, le petit paquet d'onde peut se réécrire :

$$\tilde{\psi}(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} A(p) e^{\frac{i}{\hbar} \left(px - \left(-\frac{p_0^2}{2m} + \frac{p_0}{m} p \right) t \right)} dp = e^{\frac{i}{\hbar} \frac{p_0^2}{2m} t} \int_{-\infty}^{+\infty} A(p) e^{\frac{i}{\hbar} \left(x - \frac{p_0}{m} t \right) p} dp$$

(cqfd).

1.10) Calcul d'un paquet d'ondes à spectre gaussien

On s'intéresse à une particule libre qui se déplace suivant l'axe Ox . On admet que le paquet d'onde peut s'écrire :

$$\tilde{\psi}(x, t) = e^{\frac{i}{\hbar} \frac{p_0^2}{2m} t} \int_{-\infty}^{+\infty} A(p) e^{\frac{i}{\hbar} \left(x - \frac{p_0}{m} t \right) p} dp$$

On suppose pour calculer la précédente formule que $A(p) = A_0 e^{-\frac{(p-p_0)^2}{\Delta p^2}}$ avec $p_0 \gg \Delta p$.

On donne

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha x^2} e^{-i\xi x} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} e^{-\frac{\xi^2}{4\alpha}}$$

1) Calculer la fonction d'onde et montrer en particulier que

$$|\tilde{\psi}(x, t)| = C e^{-\frac{\left(x - \frac{p_0}{m} t \right)^2}{\Delta x^2}}$$

où C et Δx sont deux constantes qu'on exprimera.

2) Est-ce cohérent avec l'inégalité de Heisenberg spatiale?

1) On calcule la fonction d'onde :

$$\tilde{\psi}(x, t) = e^{\frac{i}{\hbar} \frac{p_0^2}{2m} t} A_0 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{(p-p_0)^2}{\Delta p^2}} e^{\frac{i}{\hbar} \left(x - \frac{p_0}{m} t \right) p} dp$$

qui devient en faisant apparaître $u = p - p_0$:

$$\tilde{\psi}(x, t) = e^{\frac{i}{\hbar} \frac{p_0^2}{2m} t} A_0 e^{\frac{i}{\hbar} \left(x - \frac{p_0}{m} t \right) p_0} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{u^2}{\Delta p^2}} e^{\frac{i}{\hbar} \left(x - \frac{p_0}{m} t \right) (p-p_0)} dp$$

soit avec le changement de variable :

$$\tilde{\psi}(x, t) = e^{\frac{i}{\hbar} \left(p_0 x - \frac{p_0^2}{2m} t \right)} A_0 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha u^2} e^{-i \xi u} du$$

avec $\alpha = \frac{1}{\Delta p^2}$ et $\xi = \frac{1}{\hbar} \left(\frac{p_0}{m} t - x \right)$. La formule donnée nous permet de conclure :

$$\tilde{\psi}(x, t) = e^{\frac{i}{\hbar} \left(p_0 x - \frac{p_0^2}{2m} t \right)} A_0 \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} e^{-\frac{\Delta p^2}{4 \hbar^2} \left(\frac{p_0}{m} t - x \right)^2}$$

soit

$$|\tilde{\psi}(x, t)| = C e^{-\frac{\left(x - \frac{p_0}{m} t \right)^2}{\Delta x^2}}$$

où $\Delta x = \frac{2 \hbar}{\Delta p}$ et $C = A_0 \sqrt{\pi} \Delta p$.

2) C'est bien sûr cohérent avec l'inégalité de Heisenberg spatiale car

$$\Delta x \Delta p = 2 \hbar \geq \frac{\hbar}{2}$$

1.11) Interprétation d'un paquet d'ondes à spectre gaussien

On s'intéresse à une particule libre qui se déplace suivant l'axe Ox .

On va supposer que plusieurs quantité de mouvement existent autour de p_0 , à $\Delta p \ll p_0$ près, et on construit le paquet d'ondes suivant :

$$\tilde{\psi}(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} A(p) e^{\frac{i}{\hbar} (p x - E(p) t)} dp$$

On suppose pour calculer la précédente formule que $A(p) = A_0 e^{-\frac{(p-p_0)^2}{\Delta p^2}}$ avec $p_0 \gg \Delta p$.

On donne

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha x^2} e^{-i \xi x} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} e^{-\frac{\xi^2}{4 \alpha}}$$

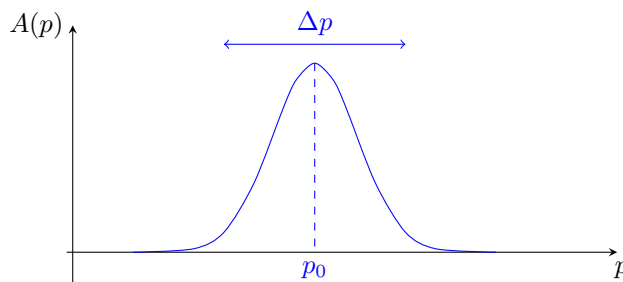
- 1) Tracer l'allure du spectre $A(p)$.
- 2) Le calcul de la fonction d'onde montre que :

$$|\tilde{\psi}(x, t)| = C e^{-\frac{\left(x - \frac{p_0}{m} t \right)^2}{\Delta x^2}}$$

où C et Δx sont deux constantes.

- 2.a) Qu'impose l'inégalité de Heisenberg spatiale?
- 2.b) Où se trouve le maximum de la densité de probabilité à la date t ? Interpréter sa dépendance en t .
- 2.c) Tracer l'allure de $|\tilde{\psi}(x, t)|$ en fonction de x à deux dates différentes.
- 2.d) Montrer qu'on peut normaliser cette fonction d'onde. On donnera C .

1) L'allure du spectre $A(p)$ est donnée ci-dessous :



- 2) Fonction d'onde
 - 2.a) L'inégalité de Heisenberg spatiale impose

$$\Delta x \Delta p = 2 \hbar \geq \frac{\hbar}{2}$$

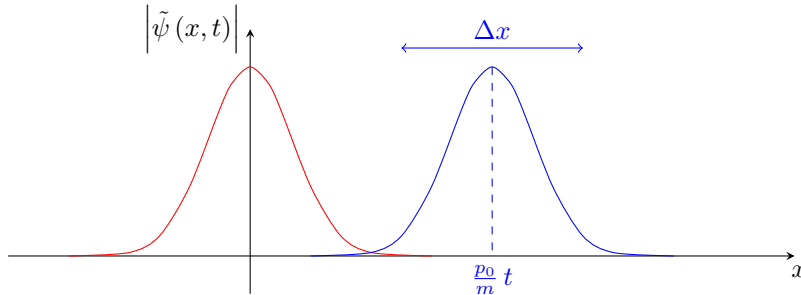
2.b) Le maximum de la densité de probabilité à la date t se trouve tel que

$$\frac{\left(x - \frac{p_0}{m}t\right)^2}{\Delta x^2} = 0$$

soit en $x = \frac{p_0}{m}t$. C'est normal : la particule se déplace à la vitesse $\frac{p_0}{m}$.

2.c) L'allure de $|\tilde{\psi}(x, t)|$ en fonction de x à deux dates différentes est donnée ci-dessous :

2.d) L'allure du spectre $A(p)$ est donnée ci-dessous :



2.e) Pour normaliser cette fonction d'onde, il faut que

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} |\tilde{\psi}|^2(x, t) dx = C^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2\frac{\left(x - \frac{p_0}{m}t\right)^2}{\Delta x^2}} dx$$

On peut poser $u = x - \frac{p_0}{m}t$, ce changement de variable donnant

$$1 = C^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2\frac{u^2}{\Delta x^2}} du$$

Grâce au formulaire, on trouve

$$1 = C^2 \sqrt{\frac{\pi}{2}} \Delta x$$

d'où $C = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{\Delta x}}$.

1.12) Interprétation d'un paquet d'ondes à spectre plat

On s'intéresse à une particule libre qui se déplace suivant l'axe Ox .

On va supposer que plusieurs quantité de mouvement existent autour de p_0 , à $\Delta p \ll p_0$ près, et on construit le paquet d'ondes suivant :

$$\tilde{\psi}(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} A(p) e^{\frac{i}{\hbar}(p x - E(p) t)} dp$$

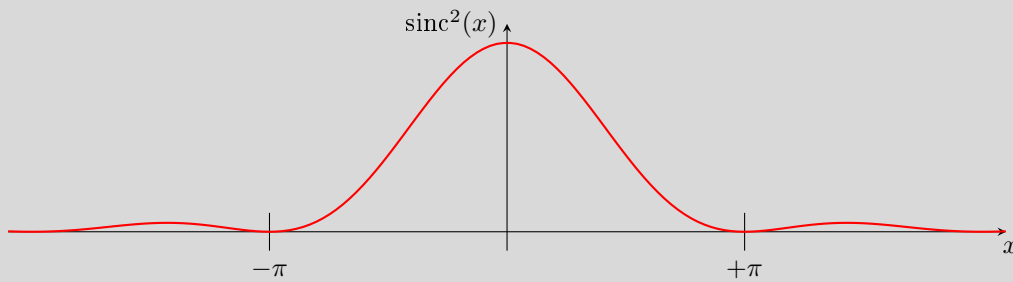
On suppose pour calculer la précédente formule que $A(p) = A_0$ si $p \in \left[p_0 - \frac{\Delta p}{2}; p_0 + \frac{\Delta p}{2}\right]$ et $A(p) = 0$ sinon.

- 1) Tracer l'allure du spectre $A(p)$.
- 2) Le calcul de la fonction d'onde montre en particulier que

$$\tilde{\psi}(x, t) = C e^{\frac{i}{\hbar}\left(p_0 x - \frac{p_0^2 t}{2m}\right)} \text{sinc} \left[\frac{\Delta p}{2\hbar} \left(x - \frac{p_0}{m}t\right) \right]$$

où C est une constante.

On donne l'allure de la fonction $(\text{sinc}(x))^2 = \left(\frac{\sin(x)}{x}\right)^2$:



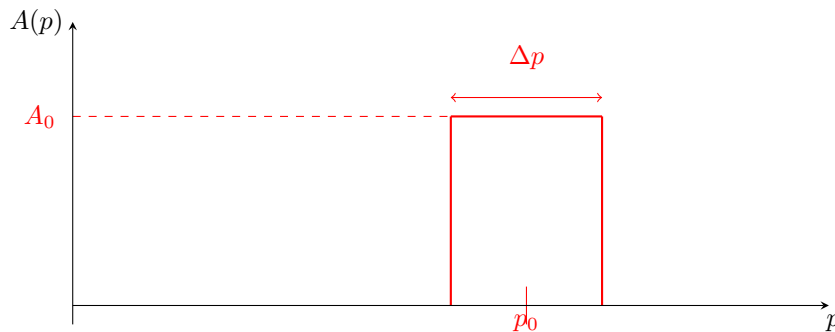
2.a) Où se trouve le maximum de la densité de probabilité à la date t ? Interpréter sa dépendance en t .
2.b) Évaluer la largeur Δx de la densité de probabilité. Est-ce cohérent avec l'inégalité de Heisenberg spatiale?

2.c) Tracer l'allure de la densité de probabilité en fonction de x à deux dates différentes.

2.d) Montrer qu'on peut normaliser cette fonction d'onde. On donnera C .

On donne $\int_{-\infty}^{+\infty} (\text{sinc}(x))^2 dx = \pi$.

1) L'allure du spectre $A(p)$ est le suivant :



2) Fonction d'onde

2.a) Le maximum de la densité de probabilité

$$|\tilde{\psi}(x, t)|^2 = C^2 \text{sinc}^2 \left[\frac{\Delta p}{2\hbar} \left(x - \frac{p_0}{m} t \right) \right]$$

se trouve tel que

$$\frac{\Delta p}{2\hbar} \left(x - \frac{p_0}{m} t \right) = 0$$

soit en $x = \frac{p_0}{m} t$. C'est normal : la particule se déplace à la vitesse $\frac{p_0}{m}$.

2.b) La densité de probabilité

$$|\tilde{\psi}(x, t)|^2 = C^2 \text{sinc}^2 \left[\frac{\Delta p}{2\hbar} \left(x - \frac{p_0}{m} t \right) \right]$$

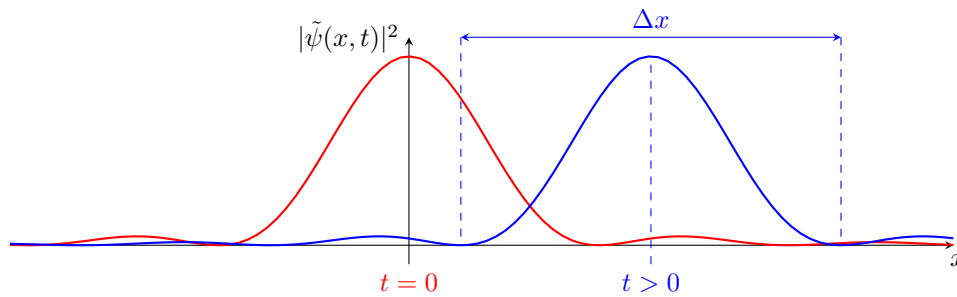
s'annule en

$$\frac{\Delta p}{2\hbar} \left(x - \frac{p_0}{m} t \right) = \pm\pi \Leftrightarrow x = \frac{p_0}{m} t \pm \frac{2\pi\hbar}{\Delta p}$$

La largeur de la densité de probabilité est donc $\Delta x = \frac{4\pi\hbar}{\Delta p}$. C'est bien sûr cohérent avec l'inégalité de Heisenberg spatiale car

$$\Delta x \Delta p = 4\pi\hbar \geq \frac{\hbar}{2}$$

2.c) L'allure de la densité de probabilité en fonction de x à deux dates différentes est la suivante :



2.d) Pour normaliser cette fonction d'onde, il faut que

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} |\tilde{\psi}|^2(x, t) dx = C^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \text{sinc}^2 \left(\frac{\Delta p}{2\hbar} \left(x - \frac{p_0}{m} t \right) \right) dx$$

On pose $u = \frac{\Delta p}{2\hbar} \left(x - \frac{p_0}{m} t \right)$, d'où $du = \frac{\Delta p}{2\hbar} dx$, ainsi ce changement de variable donne

$$1 = C^2 \frac{2\hbar}{\Delta p} \int_{-\infty}^{+\infty} \text{sinc}^2(u) du = C^2 \frac{2\hbar}{\Delta p} \pi$$

soit $C = \sqrt{\frac{\Delta p}{2\hbar}}$.

2. Particules dans un puits de potentiel de profondeur infinie

2.13) Fonctions d'onde dans un puits de potentiel infini

- 1) Déterminer la forme des fonctions d'onde pour une particule dans un puits infini entre $x = 0$ et $x = \ell$.
- 2) En proposer une expression exacte après détermination du facteur de normalisation.

1) La fonction d'onde est une superposition d'OPPM :

$$\tilde{\psi}(x, t) = \tilde{\psi}_0 e^{-i(\omega t \pm kx)}$$

on peut aussi la réécrire sous forme de sinus ou cosinus :

$$\tilde{\psi}(x, t) = \tilde{\psi}_0 \sin(kx + \varphi) e^{-i\omega t}$$

avec les conditions aux limites $\tilde{\psi}(x=0, t) = \tilde{\psi}(x=\ell, t) = 0$. On peut par exemple choisir $\varphi = 0$. D'autre part $k\ell = n\pi$ avec n un entier. La forme des fonctions d'onde est donc :

$$\tilde{\psi}(x, t) = \tilde{\psi}_0 \sin\left(\frac{n\pi}{\ell} x\right) e^{-i\omega t}$$

2) La normalisation donne

$$1 = \int_0^{+\ell} |\tilde{\psi}_0|^2 \sin^2\left(\frac{n\pi}{\ell} x\right) dx = |\tilde{\psi}_0|^2 \int_0^{+\ell} \frac{(1 - \cos \frac{2n\pi}{\ell} x)}{2} dx = \frac{|\tilde{\psi}_0|^2}{2} \left[x + \frac{\ell}{2n\pi} \sin \frac{2n\pi}{\ell} x \right]_0^{+\ell}$$

soit

$$1 = \frac{|\tilde{\psi}_0|^2}{2} \left[\ell + \frac{\ell}{2n\pi} \sin(2n\pi) \right] = |\tilde{\psi}_0|^2 \frac{\ell}{2}$$

on peut donc prendre $\tilde{\psi}_0 = \sqrt{\frac{2}{\ell}}$.

2.14) Électron et nucléon dans un puits de potentiel infini

1) Retrouver rapidement les niveaux d'énergie dans un puits de potentiel infini pour une particule de masse m .

2) Considérons un électron dans un atome ($m_e = 9,1 \times 10^{-31}$ kg) et un proton dans un noyau ($m_p = 1850 m_e$) que l'on suppose pouvoir être décrits par le modèle frustré du puits de potentiel rectangulaire infini à une dimension.

- 2.a)** Calculer pour l'électron et le proton leurs énergies respectives E_e et E_p à l'état fondamental,
2.b) Faire de même l'énergie ΔE_e et ΔE_p qu'il faut leur apporter pour les amener à leur premier état excité.
2.c) Quelle conclusion peut-on en tirer ?

1) La fonction d'onde est une superposition d'OPPM :

$$\tilde{\psi}(x, t) = \tilde{\psi}_0 e^{-i(\omega t \pm kx)}$$

on peut aussi la réécrire sous forme de sinus ou cosinus :

$$\tilde{\psi}(x, t) = \tilde{\psi}_0 \sin(kx + \varphi) e^{-i\omega t}$$

avec les conditions aux limites $\tilde{\psi}(x=0, t) = \tilde{\psi}(x=\ell, t) = 0$. On peut par exemple choisir $\varphi = 0$. D'autre part $k\ell = n\pi$ avec n un entier.

Cela revient à

$$\frac{2\pi}{\lambda} \ell = n\pi \Rightarrow \ell = n \frac{\lambda}{2}$$

avec n un entier. Il y a en effet des nœuds à la fonction d'onde en $x=0$ et $x=\ell$, comme pour la corde de Melde.

En réinjectant dans l'équation de Schrödinger, on trouve

$$k^2 = \frac{2m\omega}{\hbar} = \frac{2mE}{\hbar^2} = \left(\frac{n\pi}{\ell}\right)^2 \Rightarrow E = E_n = \frac{1}{2m} \left(\frac{n\pi\hbar}{\ell}\right)^2$$

2) Pour un électron dans un atome ($m_e = 9,1 \times 10^{-31}$ kg) avec $\ell_e = 10^{-10}$ m et un proton dans un noyau ($m_p = 1850 m_e$) avec $\ell_n = 10^{-15}$ m,

2.a) Pour l'électron

$$E_e = \frac{1}{2m_e} \left(\frac{\pi\hbar}{\ell_e}\right)^2 = \frac{1}{2 \times 9,1 \times 10^{-31}} \left(\frac{\pi \times 1,05 \times 10^{-34}}{10^{-10}}\right)^2 = 0,65 \times 10^{-17} \text{ J}$$

soit 40 eV (en fait 13,4 eV) et pour le proton

$$E_p = \frac{1}{2m_p} \left(\frac{\pi\hbar}{\ell_p}\right)^2 = \frac{1}{2 \times 1850 \times 9,1 \times 10^{-31}} \left(\frac{\pi \times 1,05 \times 10^{-34}}{10^{-15}}\right)^2 = 3,5 \times 10^{-11} \text{ J}$$

soit 216 MeV.

2.b)

$$\Delta E = E_2 - E_1 = \frac{3}{2m} \left(\frac{\pi\hbar}{\ell}\right)^2$$

Pour l'électron

$$\Delta E_e = 2,0 \times 10^{-17} \text{ J}$$

soit 120 eV et pour le proton

$$\Delta E_p = 10,5 \times 10^{-11} \text{ J}$$

soit 648 MeV.

2.c) Conclusion : les énergies mises en jeu dans le noyau sont bien plus importantes (transitions dans les gamma plutôt que dans l'UV).

2.15) Normalisation de la fonction d'onde dans un puits de potentiel infini grâce à un formulaire

On donne le formulaire suivant :

$$\int_{-\frac{n\pi}{2}}^{+\frac{n\pi}{2}} \sin^2(u) du = \int_{-\frac{n\pi}{2}}^{+\frac{n\pi}{2}} \cos^2(u) du = \frac{n\pi}{2}$$

On s'intéresse à une particule quantique dans un puits infini entre $x = -\frac{\ell}{2}$ et $x = +\frac{\ell}{2}$.

1) Déterminer la fonction d'onde pour le niveau d'énergie n .

1) La fonction d'onde est une superposition d'OPPM :

$$\tilde{\psi}(x, t) = \tilde{\psi}_0 e^{-i(\omega t \pm kx)}$$

on peut aussi la réécrire sous forme de sinus ou cosinus :

$$\tilde{\psi}(x, t) = \tilde{\psi}_0 \cos(kx + \varphi) e^{-i\omega t}$$

avec les conditions aux limites $\tilde{\psi}(x = -\frac{\ell}{2}, t) = \tilde{\psi}(x = +\frac{\ell}{2}, t) = 0$. $k\ell = n\pi$ avec n un entier. On peut par exemple choisir $\varphi = 0$. Aussi

$$\tilde{\psi}(x, t) = \tilde{\psi}_0 \cos\left(\frac{n\pi}{\ell} x\right) e^{-i\omega t}$$

La normalisation de la fonction d'onde impose

$$1 = \int_{-\frac{\ell}{2}}^{+\frac{\ell}{2}} |\tilde{\psi}_0|^2 \cos^2\left(\frac{n\pi}{\ell} x\right) dx$$

On pose $u = \frac{n\pi}{\ell} x \Rightarrow du = \frac{n\pi}{\ell} dx$, le changement de variable donne

$$1 = |\tilde{\psi}_0|^2 \int_{-\frac{n\pi}{2}}^{+\frac{n\pi}{2}} \cos^2(u) \frac{\ell}{n\pi} du$$

Or le formulaire donne

$$\int_{-\frac{n\pi}{2}}^{+\frac{n\pi}{2}} \cos^2(u) du = \frac{n\pi}{2}$$

Donc

$$1 = |\tilde{\psi}_0|^2 \frac{\ell}{n\pi} \frac{n\pi}{2}$$

donc

$$|\tilde{\psi}_0|^2 = \frac{2}{\ell}$$

on peut donc prendre $\tilde{\psi}_0 = \sqrt{\frac{2}{\ell}}$.

Conclusion :

$$\tilde{\psi}(x, t) = \sqrt{\frac{2}{\ell}} \cos\left(\frac{n\pi}{\ell} x\right) e^{-i\omega t}$$

2.16) Détermination de Δx dans un puits de potentiel infini grâce à un formulaire

On donne le formulaire suivant :

$$\int_{-\frac{n\pi}{2}}^{+\frac{n\pi}{2}} u \sin^2(u) du = \int_{-\frac{n\pi}{2}}^{+\frac{n\pi}{2}} u \cos^2(u) du = \int_{-\frac{n\pi}{2}}^{+\frac{n\pi}{2}} \sin(u) \cos(u) du = 0$$

$$\int_{-\frac{n\pi}{2}}^{+\frac{n\pi}{2}} u^2 \sin^2(u) du = \int_{-\frac{n\pi}{2}}^{+\frac{n\pi}{2}} u^2 \cos^2(u) du = \frac{n^3 \pi^3}{24} + \frac{n\pi}{4} (-1)^n$$

On s'intéresse à une particule quantique dans un puits infini entre $x = -\frac{\ell}{2}$ et $x = +\frac{\ell}{2}$ dont on admet que sa fonction d'onde est $\tilde{\psi}(x, t) = \sqrt{\frac{2}{\ell}} \cos\left(\frac{n\pi}{\ell} x\right) e^{-i\omega t}$.

1) Déterminer la moyenne de la position $\langle x \rangle$. Est-ce étonnant ?

2) Déterminer la moyenne du carré de la position $\langle x^2 \rangle$.

3) En déduire l'incertitude sur la position de la particule : $\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - (\langle x \rangle)^2}$.

1)

$$\langle x \rangle = \frac{2}{\ell} \int_{-\frac{\ell}{2}}^{+\frac{\ell}{2}} x \cos^2\left(\frac{n\pi}{\ell} x\right) dx$$

On pose $u = \frac{n\pi}{\ell} x \Rightarrow du = \frac{n\pi}{\ell} dx$, le changement de variable donne

$$\langle x \rangle = \frac{2}{\ell} \left(\frac{\ell}{n\pi} \right)^2 \int_{-\frac{n\pi}{2}}^{+\frac{n\pi}{2}} u \cos^2(u) du = 0$$

d'après le formulaire.

Ce n'est pas très étonnant : vues les symétries du puits, la particule est, en moyenne au centre, en $x = 0$.

2) D'autre part,

$$\langle x^2 \rangle = \frac{2}{\ell} \int_{-\frac{\ell}{2}}^{+\frac{\ell}{2}} x^2 \cos^2\left(\frac{n\pi}{\ell} x\right) dx$$

On pose $u = \frac{n\pi}{\ell} x \Rightarrow du = \frac{n\pi}{\ell} dx$, le changement de variable donne

$$\langle x^2 \rangle = \frac{2}{\ell} \left(\frac{\ell}{n\pi} \right)^3 \int_{-\frac{n\pi}{2}}^{+\frac{n\pi}{2}} u^2 \cos^2(u) du$$

or d'après le formulaire

$$\int_{-\frac{n\pi}{2}}^{+\frac{n\pi}{2}} u^2 \cos^2(u) du = \frac{n^3 \pi^3}{24} + \frac{n\pi}{4} (-1)^n$$

d'où

$$\langle x^2 \rangle = \frac{2}{\ell} \left(\frac{\ell}{n\pi} \right)^3 \left[\frac{n^3 \pi^3}{24} + \frac{n\pi}{4} (-1)^n \right] = \ell^2 \left[\frac{1}{12} + \frac{1}{2n^2 \pi^2} (-1)^n \right]$$

3) On en déduit l'incertitude sur la position de la particule :

$$\Delta x = \sqrt{\frac{1}{\ell} \left[\frac{x^3}{3} \right]_{-\frac{\ell}{2}}^{+\frac{\ell}{2}} + \frac{1}{\ell} \frac{\ell^3}{2n^2 \pi^2} (-1)^n} = \ell \sqrt{\frac{1}{12} + \frac{(-1)^n}{2n^2 \pi^2}}$$

2.17) Détermination de Δp dans un puits de potentiel infini grâce à un formulaire

On donne le formulaire suivant :

$$\int_{-\frac{n\pi}{2}}^{+\frac{n\pi}{2}} u \sin^2(u) du = \int_{-\frac{n\pi}{2}}^{+\frac{n\pi}{2}} u \cos^2(u) du = \int_{-\frac{n\pi}{2}}^{+\frac{n\pi}{2}} \sin(u) \cos(u) du = 0$$

$$\int_{-\frac{n\pi}{2}}^{+\frac{n\pi}{2}} u^2 \sin^2(u) du = \int_{-\frac{n\pi}{2}}^{+\frac{n\pi}{2}} u^2 \cos^2(u) du = \frac{n^3 \pi^3}{24} + \frac{n\pi}{4} (-1)^n$$

On s'intéresse à une particule quantique dans un puits infini entre $x = -\frac{\ell}{2}$ et $x = +\frac{\ell}{2}$ dont on admet que sa fonction d'onde est $\tilde{\psi}(x, t) = \sqrt{\frac{2}{\ell}} \cos\left(\frac{n\pi}{\ell} x\right) e^{-i\omega t}$.

1) Montrer que $\frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial x} = \frac{i}{\hbar} p \tilde{\psi}$.

2) Déterminer la moyenne de la quantité de mouvement $\langle p \rangle$. Est-ce étonnant ?

3) Déterminer la moyenne du carré de la quantité de mouvement $\langle p^2 \rangle$.

4) En déduire l'incertitude sur de la quantité de mouvement de la particule : $\Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - (\langle p \rangle)^2}$.

1) Comme la fonction d'onde est une superposition d'OPPM :

$$\tilde{\psi}(x, t) = \tilde{\psi}_0 e^{-i(\omega t \pm kx)}$$

on peut écrire $\frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial x} = ik \tilde{\psi} = \frac{i}{\hbar} p \tilde{\psi}$.

2) Puisque $\frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial x} = ik \tilde{\psi} = \frac{i}{\hbar} p \tilde{\psi}$:

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} p |\tilde{\psi}|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} p \tilde{\psi} \tilde{\psi}^* dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(-i\hbar \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial x} \right) \tilde{\psi}^* dx$$

Or

$$\tilde{\psi}(x, t) = \sqrt{\frac{2}{\ell}} \cos\left(\frac{n\pi}{\ell} x\right) e^{-i\omega t} \Rightarrow \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial x} = -\sqrt{\frac{2}{\ell}} \frac{n\pi}{\ell} \sin\left(\frac{n\pi}{\ell} x\right) e^{-i\omega t}$$

Donc

$$\langle p \rangle = \int_{-\frac{\ell}{2}}^{+\frac{\ell}{2}} \left(i\hbar \sqrt{\frac{2}{\ell}} \frac{n\pi}{\ell} \sin\left(\frac{n\pi}{\ell} x\right) e^{-i\omega t} \right) \left(\sqrt{\frac{2}{\ell}} \cos\left(\frac{n\pi}{\ell} x\right) e^{+i\omega t} \right) dx$$

soit

$$\langle p \rangle = i\hbar \frac{2}{\ell} \frac{n\pi}{\ell} \int_{-\frac{\ell}{2}}^{+\frac{\ell}{2}} \sin\left(\frac{n\pi}{\ell} x\right) \cos\left(\frac{n\pi}{\ell} x\right) dx$$

On pose $u = \frac{n\pi}{\ell} x \Rightarrow du = \frac{n\pi}{\ell} dx$, le changement de variable donne

$$\langle p \rangle = i\hbar \frac{2n\pi}{\ell^2} \frac{\ell}{n\pi} \int_{-\frac{n\pi}{2}}^{+\frac{n\pi}{2}} \sin(u) \cos(u) du$$

On trouve donc d'après le formulaire

$$\langle p \rangle = 0$$

ce qui ne doit pas nous étonner : la particule ne va ni vers la gauche, ni vers la droite en moyenne, puisqu'elle est confinée.

3) Puisque $\frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial x} = ik \tilde{\psi} = \frac{i}{\hbar} p \tilde{\psi}$:

$$\langle p^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} p^2 |\tilde{\psi}|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} p \tilde{\psi} p \tilde{\psi}^* dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(-i\hbar \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial x} \right) \left(+i\hbar \frac{\partial \tilde{\psi}^*}{\partial x} \right) dx$$

soit

$$\langle p^2 \rangle = \hbar^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial x} \frac{\partial \tilde{\psi}^*}{\partial x} dx = \hbar^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \left| \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial x} \right|^2 dx$$

Or

$$\tilde{\psi}(x, t) = \sqrt{\frac{2}{\ell}} \cos\left(\frac{n\pi}{\ell} x\right) e^{-i\omega t} \Rightarrow \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial x} = -\sqrt{\frac{2}{\ell}} \frac{n\pi}{\ell} \sin\left(\frac{n\pi}{\ell} x\right) e^{-i\omega t}$$

Donc

$$\langle p^2 \rangle = \hbar^2 \frac{2}{\ell} \left(\frac{n\pi}{\ell}\right)^2 \int_{-\frac{\ell}{2}}^{+\frac{\ell}{2}} \sin^2\left(\frac{n\pi}{\ell} x\right) dx$$

On pose $u = \frac{n\pi}{\ell} x \Rightarrow du = \frac{n\pi}{\ell} dx$, le changement de variable donne

$$\langle p^2 \rangle = \hbar^2 \frac{2}{\ell} \left(\frac{n\pi}{\ell}\right)^2 \frac{\ell}{n\pi} \int_{-\frac{\ell}{2}}^{+\frac{\ell}{2}} \sin^2(u) du = \hbar^2 \frac{2}{\ell} \left(\frac{n\pi}{\ell}\right)^2 \frac{\ell}{n\pi} \int_{-\frac{n\pi}{2}}^{+\frac{n\pi}{2}} \sin^2(u) du$$

Or, d'après le formulaire

$$\int_{-\frac{n\pi}{2}}^{+\frac{n\pi}{2}} \sin^2(u) du = \frac{n\pi}{2}$$

Donc

$$\langle p^2 \rangle = \hbar^2 \frac{2}{\ell} \left(\frac{n\pi}{\ell}\right)^2 \frac{\ell}{n\pi} \frac{n\pi}{2} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{\ell^2}$$

4) L'incertitude sur la quantité de mouvement est

$$\Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - (\langle p \rangle)^2} = \sqrt{\langle p^2 \rangle} = \frac{n\pi \hbar}{\ell}$$

2.18) Détermination de Δp dans un puits de potentiel infini sans formulaire

On s'intéresse à une particule quantique dans un puits infini entre $x = -\frac{\ell}{2}$ et $x = +\frac{\ell}{2}$.

1) Déterminer l'énergie de la particule pour le niveau d'énergie n .

2) En déduire l'incertitude sur de la quantité de mouvement de la particule : $\Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - (\langle p \rangle)^2}$.

1) La fonction d'onde est une superposition d'OPPM :

$$\tilde{\psi}(x, t) = \tilde{\psi}_0 e^{-i(\omega t \pm kx)}$$

on peut aussi la réécrire sous forme de sinus ou cosinus :

$$\tilde{\psi}(x, t) = \tilde{\psi}_0 \cos(kx + \varphi) e^{-i\omega t}$$

avec les conditions aux limites $\tilde{\psi}(x=0, t) = \tilde{\psi}(x=\ell, t) = 0$. On peut par exemple choisir $\varphi = 0$. D'autre part $k\ell = n\pi$ avec n un entier.

Cela revient à

$$\frac{2\pi}{\lambda} \ell = n\pi \Rightarrow \ell = n \frac{\lambda}{2}$$

avec n un entier. Il y a en effet des nœuds à la fonction d'onde en $x=0$ et $x=\ell$, comme pour la corde de Melde.

En réinjectant dans l'équation de Schrödinger, on trouve

$$k^2 = \frac{2m\omega}{\hbar} = \frac{2mE}{\hbar^2} = \left(\frac{n\pi}{\ell}\right)^2 \Rightarrow E = E_n = \frac{1}{2m} \left(\frac{n\pi\hbar}{\ell}\right)^2$$

2)

$$\langle p \rangle = 0$$

car la particule ne va ni vers la gauche, ni vers la droite en moyenne, puisqu'elle est confinée. D'autre part

$$\langle p^2 \rangle = \langle 2mE \rangle = 2mE_n = \left(\frac{n\pi\hbar}{\ell}\right)^2$$

d'après la première question. L'incertitude sur la quantité de mouvement est donc

$$\Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - (\langle p \rangle)^2} = \sqrt{\langle p^2 \rangle} = \frac{n\pi\hbar}{\ell}$$

2.19) Vérification de l'inégalité de Heisenberg spatiale dans un puits de potentiel infini

On s'intéresse à une particule quantique dans un puits infini entre $x = -\frac{\ell}{2}$ et $x = +\frac{\ell}{2}$. On admet que l'incertitude sur de la quantité de mouvement de la particule est

$$\Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - (\langle p \rangle)^2} = \frac{n\pi\hbar}{\ell}$$

et que l'incertitude sur la position de la particule est :

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - (\langle x \rangle)^2} = \ell \sqrt{\frac{1}{12} + \frac{(-1)^n}{2n^2\pi^2}}$$

1) Vérifier que l'inégalité spatiale de Heisenberg $\Delta p_x \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}$ n'est pas mise en défaut pour les 3 premiers niveaux d'énergie.

1) Vérification

$$\begin{cases} \Delta p = \frac{n\pi\hbar}{\ell} \\ \Delta x = \ell \sqrt{\frac{1}{12} + \frac{(-1)^n}{2n^2\pi^2}} \end{cases}$$

donc

$$\frac{\Delta p}{\hbar} \Delta x = \sqrt{\frac{n^2\pi^2}{12} + \frac{(-1)^n}{2}}$$

Niveau $n = 1$:

$$\frac{\Delta p}{\hbar} \Delta x = \sqrt{\frac{\pi^2}{12} + \frac{(-1)^1}{2}} = 0,56786 \geq 0,5$$

Niveau $n = 2$:

$$\frac{\Delta p}{\hbar} \Delta x = \sqrt{\frac{4\pi^2}{12} + \frac{(-1)^2}{2}} = \text{????} \geq 0,5$$

Niveau $n = 3$:

$$\frac{\Delta p}{\hbar} \Delta x = \sqrt{\frac{9\pi^2}{12} + \frac{(-1)^3}{2}} = \dots \geq 0,5$$

3. Techniques mathématiques - Résolution d'équation différentielles linéaire sans second membre

3.20) Solutions d'un oscillateur amorti en fonction du facteur de qualité

1) Exprimer les solutions de l'équation différentielle

$$\ddot{x} + \frac{\omega_0}{Q} \dot{x} + \omega_0^2 x = 0$$

suivant les valeurs de Q .

1)

- Relaxation aperiodique

Si les frottements sont forts ($Q < \frac{1}{2}$) la solution est de type :

$$x_{aperiodique}(t) = A.e^{-\frac{t}{\tau_1}} + B.e^{-\frac{t}{\tau_2}}$$

- Relaxation pseudo - périodique

Si les frottements sont faibles ($Q > \frac{1}{2}$), on peut réécrire les solutions dans le cas pseudo-périodique sous la forme :

$$x_{pseudo}(t) = C.e^{-\frac{t}{\tau}} \cdot \cos(\omega.t + \varphi).$$

Ainsi, il apparaît que la solution, dans le cas pseudo-périodique, est une sinusoïde d'amplitude modulée par une exponentielle décroissante.

- Relaxation critique

Dans le cas des frottements intermédiaires ($Q = \frac{1}{2}$), la relaxation critique suit la loi :

$$x_{critique}(t) = (A + B.t) \cdot e^{-\frac{t}{\tau_{critique}}}.$$

L'amortissement optimal (c'est à dire le plus rapide), se fait dans le régime critique, avec un temps caractéristique : $\tau_{critique} = \frac{1}{\omega_0}$.

Travaux dirigés

vendredi 16 mars 2018

Cet exercice sera fait en demi-groupe lors de la séance de travaux dirigés.

La délocalisation des électrons par mésomérie

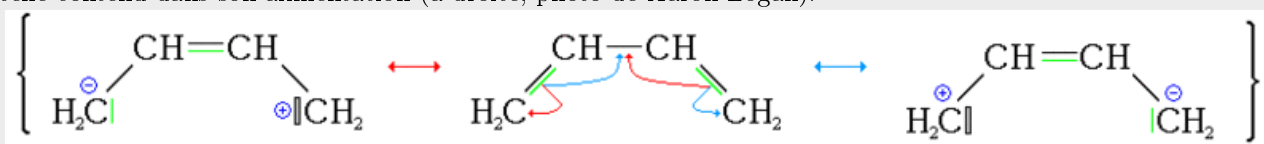
D'après les extraits de divers articles Wikipédia
Carotène, butadiène, mésomérie

L'alternance liaison simple - doublet liant dans une molécule est une "boîte à électron" à une dimension

En chimie, la mésomérie désigne une délocalisation d'électrons dans les molécules conjuguées, que l'on représente par une combinaison virtuelle de structures aux électrons localisés appelées mésomères, lorsqu'on a par exemple une alternance liaison simple - liaison double - liaison simple, comme dans un diène conjugué.

Le diène conjugué le plus simple est le buta-1,3-diène (en dessous : ses formules mésomères), un hydrocarbure de formule C_4H_6 gazeux incolore et inflammable. C'est un important réactif qui est utilisé dans la synthèse de nombreux polymères.

La molécule de β -carotène $C_{40}H_{56}$ possède onze doubles liaisons conjuguées. Elle peut absorber une lumière bleu-indigo et donc apparaître orange comme dans la carotte. La coloration des plumes du flamant rose est due à l'accumulation de carotène contenu dans son alimentation (à droite, photo de Aaron Logan).



Enoncé

Évaluer l'ordre de grandeur de la longueur d'onde d'absorption du buta-1,3-diène dans le proche ultra-violet.

Correction

Le buta-1,3-diène présente une alternance liaison double - liaison simple - liaison double, avec des électrons π délocalisables au niveau des deux doubles liaisons.

On peut modéliser cet espace à une dimension comme un puits quantique rectangulaire de longueur L de profondeur infini.

Il s'agit de calculer l'énergie E_c des électrons pour avoir un ordre de grandeur de l'énergie $h\nu = \frac{hc}{\lambda}$ des photons.

Première méthode :

La relation d'Heisenberg $\Delta k_x \Delta x \approx 2\pi$ donne, puisque $p = \hbar k$ et $E = \frac{p^2}{2m}$

$$\Delta p_x \Delta x \approx h \Rightarrow 2mEL^2 \approx h^2$$

donc

$$\frac{hc}{\lambda} \approx \frac{h^2}{2mL^2} \Rightarrow \lambda \approx \frac{2mcL^2}{h}$$

AN (en prenant $L \approx 3 \times 10^{-10}$ m) :

$$\lambda \approx \frac{2 \times 9,1 \times 10^{-31} \times 3 \times 10^8 \times (3 \times 10^{-10})^2}{6,62 \times 10^{-34}} \approx 0,1 \mu\text{m}$$

λ est bien dans l'ultra violet proche (< 400 nm).

Deuxième méthode :

La fonction d'onde est une superposition d'OPPM :

$$\tilde{\psi}(x, t) = \tilde{\psi}_0 e^{-i(\omega t \pm kx)}$$

on peut aussi la réécrire sous forme de sinus ou cosinus :

$$\tilde{\psi}(x, t) = \tilde{\psi}_0 \sin(kx + \varphi) e^{-i\omega t}$$

avec les conditions aux limites $\tilde{\psi}(x=0, t) = \tilde{\psi}(x=\ell, t) = 0$. On peut par exemple choisir $\varphi = 0$. D'autre part $k\ell = n\pi$ avec n un entier.

Cela revient à

$$\frac{2\pi}{\lambda} \ell = n\pi \Rightarrow \ell = n \frac{\lambda}{2}$$

avec n un entier. Il y a en effet des nœuds à la fonction d'onde en $x=0$ et $x=\ell$, comme pour la corde de Melde.

En réinjectant dans l'équation de Schrödinger, on trouve

$$k^2 = \frac{2m\omega}{\hbar} = \frac{2mE}{\hbar^2} = \left(\frac{n\pi}{\ell}\right)^2 \Rightarrow E = E_n = \frac{1}{2m} \left(\frac{n\pi\hbar}{\ell}\right)^2$$

On peut par exemple prendre la transition entre les deux premiers niveaux $n=1 \rightarrow n=2$, soit

$$\frac{hc}{\lambda} \approx (E_2 - E_1) = \frac{3}{2m} \left(\frac{\pi\hbar}{\ell}\right)^2 \Rightarrow \lambda \approx \frac{4}{3} \frac{2mcL^2}{h} = \frac{3}{4} \frac{2 \times 9,1 \times 10^{-31} \times 3 \times 10^8 \times (3 \times 10^{-10})^2}{6,62 \times 10^{-34}} \approx 0,1 \mu\text{m}$$

λ est bien dans l'ultra violet proche (< 400 nm).

Troisième méthode :

On calcule les énergies des niveaux, comme dans la seconde méthode :

$$E = E_n = \frac{1}{2m} \left(\frac{n\pi\hbar}{\ell}\right)^2$$

On compte les électrons π délocalisés : il y a deux doublet donc 4 électrons. Puis on remplit les niveaux, deux électrons pouvant coexister sur le même niveaux (2 projections de spin). Aussi, les niveaux 1 et 2 sont occupés.

Il s'agit donc de la transition entre les niveaux $n=2$ et $n=3$, soit

$$\frac{hc}{\lambda} \approx (E_3 - E_2) = \frac{3^2 - 2^2}{2m} \left(\frac{\pi\hbar}{\ell}\right)^2 \Rightarrow \lambda \approx \frac{4}{5} \frac{2mcL^2}{h} = \frac{5}{4} \frac{2 \times 9,1 \times 10^{-31} \times 3 \times 10^8 \times (3 \times 10^{-10})^2}{6,62 \times 10^{-34}} \approx 0,1 \mu\text{m}$$

λ est bien dans l'ultra violet proche (< 400 nm).

NB : en réalité $\lambda = 217$ nm.

Devoir non surveillé

vendredi 16 mars 2018

Le document est à lire, l'exercice est à rendre.

Des électrons en boîte pour donner des couleurs

On peut moduler la couleur de certaines substances en jouant sur la taille des structures qui confinent les électrons.

Jean-Michel COURTY et Édouard KIERLIK

Idées de physique © Pour la Science - n° 403 - Mai 2011

Les sensibilisateurs pour les sels d'argent que l'on utilisait dans les pellicules pour la photographie en couleurs appartiennent à la vaste famille de colorants de synthèse nommés cyanines. Qu'est-ce qui détermine la couleur de ces molécules organiques linéaires ? Leur simple longueur ! Comment cela se fait-il ? Comme on le verra, la réponse se trouve dans la physique quantique...

Si un objet nous apparaît coloré lorsqu'il est éclairé par de la lumière blanche, c'est qu'il absorbe une partie de cette lumière. La couleur résultante est alors la complémentaire de celle absorbée. Ainsi, les carottes sont orange parce que la molécule de carotène absorbe la lumière bleue, les feuilles vertes parce que la chlorophylle absorbe le rouge.

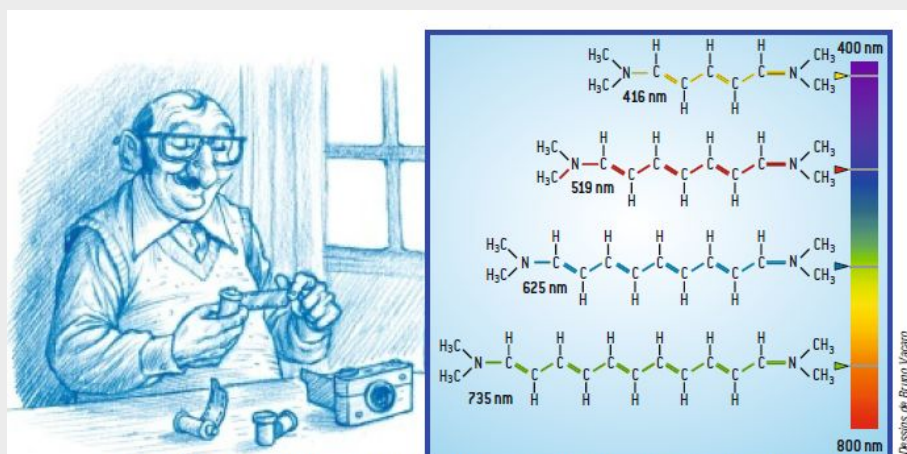
La couleur absorbée par ces molécules dépend de leurs niveaux d'énergie : l'absorption d'un grain de lumière, un photon, qui fait passer la molécule d'un état d'énergie à un autre, n'est possible que si la fréquence ν de la lumière (qui détermine sa couleur) est égale

à la différence d'énergie ΔE entre les niveaux divisée par la constante de Planck (on a $h\nu = \Delta E$, où $h = 6,63 \times 10^{-34}$ joule \times seconde).

En général, il n'est pas aisé de déterminer l'échelle des énergies moléculaires, qui fait intervenir le détail des structures atomiques et des liaisons chimiques. Le plus souvent, on ne sait donc pas prévoir sous quelles couleurs les molécules apparaîtront. Mais certaines ont une structure suffisamment simple pour que l'on puisse estimer les valeurs des niveaux d'énergie. C'est le cas des cyanines, molécules organiques qui ont pour colonne vertébrale une chaîne linéaire d'atomes de carbone liés à des atomes d'hydrogène. Dans ces molécules, chaque électron qui participe à une liaison carbone-carbone n'est pas localisé entre les deux atomes de carbone, mais se répartit, en moyenne, tout le long de la chaîne.

Des ondes le long de la molécule

Autrement dit, la molécule se comporte vis-à-vis de ces électrons comme un segment de fil conducteur. La longueur d'une liaison carbone-carbone étant de l'ordre de 0,139 nanomètre dans ces molécules, une cyanine



1. LES CYANINES sont des colorants organiques répandus. Par exemple, on les utilise dans les pellicules pour la photographie argentique en couleurs. La longueur d'une telle molécule détermine la longueur d'onde lumineuse qu'elle absorbe, c'est-à-dire la couleur absorbée (*bande grisée sur le spectre*). La couleur de la substance vue en lumière blanche sera donc complémentaire. Ainsi, celle qui absorbe dans le violet, à 416 nanomètres de longueur d'onde, apparaîtra jaune.

constituée de neuf atomes de carbone (soit dix liaisons, compte tenu des deux atomes d'azote terminaux) mesure 1,4 nanomètre de long.

Quelle est l'échelle des énergies de ces électrons qui sont délocalisés? Elle dépend de la longueur ℓ de la molécule et l'explication fait appel à la mécanique quantique. Depuis le début du XXe siècle, on sait que tout corpuscule se comporte aussi comme une onde, dont la longueur d'onde est égale au quotient de la constante de Planck par la quantité de mouvement. On en déduit que l'énergie d'un électron, en l'occurrence son énergie cinétique, est inversement proportionnelle au carré de sa longueur d'onde.

Quelles sont les longueurs d'onde possibles dans un fil conducteur? Pour répondre à la question, utilisons l'analogie avec une corde vibrante de longueur ℓ , fixée à ses deux extrémités. Ces dernières devant être des nœuds de l'onde, les seuls modes de vibration possibles correspondent à des longueurs d'onde égales à $2\ell/n$, où n est un entier.

Un fil quantique moléculaire

Ainsi, pour un fil conducteur, plus il est court, plus la longueur d'onde de l'électron est petite et plus son énergie est élevée : elle croît comme $1/\ell^2$. L'échelle est telle que le n -ième niveau électronique a une énergie proportionnelle à n^2 . Ainsi, dans la cyanine à neuf atomes de carbone, tous facteurs pris en compte, l'énergie

du niveau électronique fondamental est de l'ordre de 0,195 électronvolt (soit $3,1 \times 10^{-20}$ joule), celle du deuxième niveau est égale à 0,78 électronvolt, celle du cinquième à 4,9 électronvolts, etc.

Une complication supplémentaire est due au principe d'exclusion de Pauli, qui interdit qu'un niveau soit occupé par plus de deux électrons. Il s'ensuit qu'avec N électrons, l'énergie la plus basse s'obtient quand les $N/2$ niveaux les plus bas sont remplis. Les niveaux supérieurs étant vides, l'absorption la moins exigeante en énergie correspond au saut d'un électron du niveau occupé le plus haut jusqu'au niveau libre le plus bas.

Pour la cyanine à neuf atomes de carbone et dix électrons mobiles, cela représente une transition du niveau $n = 5$ au niveau $n = 6$, séparés de 2,15 électronvolts, écart d'énergie qui correspond à une longueur d'onde de 575 nanomètres. Cette molécule absorbe ainsi dans le rouge, d'où une coloration bleue. Avec 11 atomes de carbone, l'absorption a lieu vers 700 nanomètres de longueur d'onde, dans le rouge profond, et la couleur est alors verte.

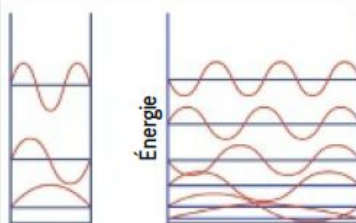
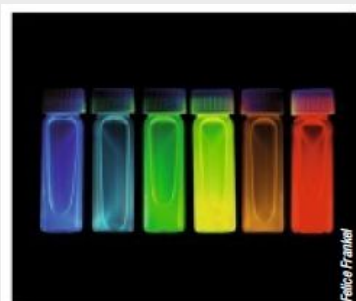
Jusqu'à il y a une dizaine d'années, seule la chimie nous donnait de tels exemples d'une couleur modulée par une dimension. Mais grâce à l'essor des nanotechnologies, on conçoit aujourd'hui des matériaux où les électrons sont confinés dans des structures tridimensionnelles. Les plus simples sont les nanosphères.

Dans ces édifices de taille nanométrique, les électrons mobiles sont confinés dans de petites billes de matériau conducteur. Selon les mêmes principes que ceux à l'œuvre dans les molécules de cyanines, seule la taille des sphères détermine la couleur de ces objets : plus le rayon est petit, plus l'onde associée à l'électron a une longueur d'onde petite et plus l'énergie cinétique correspondante est élevée. Les différences d'énergie augmentent aussi ; dans le domaine visible, les couleurs passent ainsi du rouge au bleu.

Boîtes quantiques pour électrons

C'est notamment le cas des nanosphères de sélénure de cadmium (Cd Se). Ces particules sont utilisées comme marqueurs fluorescents : après absorption d'un photon, elles réémettent de la lumière d'une couleur bien définie. Des nanosphères de cinq nanomètres de diamètre ont ainsi une fluorescence de couleur bleue, tandis que celles mesurant 20 nanomètres sont rouges. En pratique, les nanosphères sont enrobées d'une coque isolante qui les protège de leur environnement. On peut donc les utiliser dans des liquides ainsi que comme marqueurs au sein de cellules vivantes.

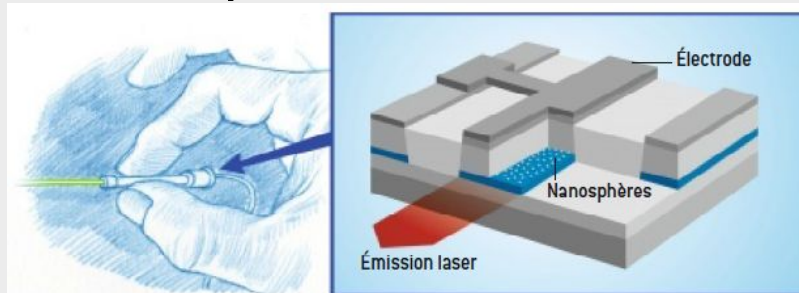
Ces atomes artificiels géants permettent aussi de réaliser des lasers. Dans les lasers habituels à semi-



2. DES NANOSPHERES de sélénure de cadmium de quelques nanomètres de diamètre sont utilisées comme marqueurs fluorescents, par exemple par les biologistes. Dans une telle sphère, l'onde [en rouge sur le schéma] associée à un électron mobile est contrainte, ce qui produit des niveaux d'énergie discrets. L'écart entre niveaux, qui détermine la couleur de fluorescence, dépend notamment de la taille de la nanosphère. Le choix de cette taille permet alors d'obtenir la couleur de fluorescence désirée.

conducteurs, la couleur de la lumière émise est déterminée par la différence d'énergie entre le haut de la bande d'énergies «de valence» du semi-conducteur (qui est entièrement remplie par les électrons) et le bas de la bande d'énergies «de conduction» (qui est vide). Pour obtenir des lasers de longueurs d'onde différentes, il fallait jouer sur cette différence d'énergie, c'est-à-dire rechercher le matériau adéquat.

Désormais, on met plutôt les électrons en boîte en réalisant des «hétérostructures». Ce sont des structures de taille nanométrique qui prennent la forme d'un fil, d'un plan ou d'un volume de forme appropriée, réalisées dans un matériau différent de celui du substrat environnant. Les électrons mobiles qui y sont présents ne peuvent pas aller dans le substrat si ce dernier est isolant. Ils sont donc confinés, de sorte que l'échelle de leurs énergies dépend non seulement du matériau constitutif, mais aussi de la taille de ces «boîtes quantiques». Excitées par un courant électrique, ces dernières peuvent jouer le rôle de milieu actif dans un laser ou dans un amplificateur de lumière. De tels dispositifs arrivent sur le marché.



3. DES LASERS peuvent être réalisés avec des «boîtes quantiques» telles que les nanosphères de séléniure de cadmium. Intégrées en nombre dans un dispositif électrique adéquat (à droite) qui excite leurs électrons, elles donnent lieu à une émission laser dans l'infrarouge. Par un procédé d'optique non linéaire qui double la fréquence, on obtient un laser vert.

Énoncé

1) On s'intéresse à un électron confiné dans une molécule de cyanine de longueur $\ell = 1,4$ nm. L'électron est dans un puits infini entre $x = 0$ et $x = \ell$. On suppose que $E > V_0 = 0$ dans le puits infini.

1.a) Montrer que la fonction d'onde qui vérifie les conditions aux limites est sinusoïdale.

1.b) Établir les expressions des énergies des états stationnaires. Montrer que l'énergie varie bien "comme $1/\ell^2$ " comme le dit le document.

1.c) Faire l'analogie proposée par le document avec la recherche des pulsations propres d'une corde vibrante fixée en ses deux extrémités et retrouver le résultat précédent.

1.d) Quelle devrait être la masse m de l'électron pour que la valeur numérique de l'énergie du fondamental donnée par le document corresponde à l'expression littérale trouvée? Commenter.

1.e) Vérifier que pour "une transition du niveau $n = 5$ au niveau $n = 6$, séparés de 2,15 électronvolts, l'écart d'énergie correspond à une longueur d'onde de 575 nanomètres".

2) On s'intéresse à un électron confiné dans une nanosphère de rayon R .

2.a) Que vaut la quantité de mouvement moyenne de l'électron dans cette "boîte" ?

2.b) En utilisant le principe d'incertitude de Heisenberg, montrer que plus R est grande, plus la nanosphère peut admettre des niveaux d'énergie faible.

2.c) En déduire que, comme le dit le document "plus le rayon est petit, plus l'onde associée à l'électron a une longueur d'onde petite".

Correction

1) Cyanine

1.a) La fonction d'onde est une superposition d'OPPM :

$$\tilde{\psi}(x, t) = \tilde{\psi}_0 e^{-i(\omega t \pm kx)}$$

on peut aussi la réécrire sous forme de sinus ou cosinus :

$$\tilde{\psi}(x, t) = \tilde{\psi}_0 \sin(kx + \varphi) e^{-i\omega t}$$

avec les conditions aux limites $\tilde{\psi}(x=0, t) = \tilde{\psi}(x=\ell, t) = 0$. On peut par exemple choisir $\varphi = 0$. D'autre part $k\ell = n\pi$ avec n un entier.

1.b) En réinjectant dans l'équation de Schrödinger, on trouve

$$k^2 = \frac{2m\omega}{\hbar} = \frac{2mE}{\hbar^2} = \left(\frac{n\pi}{\ell}\right)^2 \Rightarrow E = E_n = \frac{1}{2m} \left(\frac{n\pi\hbar}{\ell}\right)^2$$

1.c) Cela revient à

$$\frac{2\pi}{\lambda} \ell = n\pi \Rightarrow \ell = n \frac{\lambda}{2}$$

avec n un entier. Il y a en effet des nœuds à la fonction d'onde en $x=0$ et $x=\ell$, comme pour la corde de Melde.

1.d) On cherche

$$E_1 = \frac{1}{2m} \left(\frac{\pi\hbar}{\ell}\right)^2 \Leftrightarrow m = \frac{1}{2E_1} \left(\frac{\pi\hbar}{\ell}\right)^2 = \frac{1}{2 \times 3,1 \times 10^{-20}} \left(\frac{\pi \times 1,05 \times 10^{-34}}{1,4 \times 10^{-9}}\right)^2 = 2,8 \times 10^{-31} \text{ kg}$$

au lieu de $9,1 \times 10^{-31}$ kg. C'est le bon ordre de grandeur...

1.e) Un photon absorbé ou émis entre deux niveaux a une énergie (ici $p=5$ et $q=6$) :

$$E_\varphi = |E_p - E_q| = \frac{hc}{\lambda} \Rightarrow \lambda = \frac{hc}{|E_p - E_q|}$$

AN :

$$\lambda = \frac{2 \times \pi \times 1,05 \times 10^{-34} \times 3 \times 10^8}{1,6 \times 10^{-19} \times 2,15} = 575 \text{ nm}$$

comme le dit le document.

2) Nanosphère de rayon R .

2.a) Bien sûr, l'électron ne sort pas de la boîte : sa quantité de mouvement moyenne est nulle.

2.b) Le principe d'incertitude de Heisenberg stipule, pour la direction x :

$$\Delta x \Delta p_x > \frac{\hbar}{2} \Rightarrow \Delta p_x^2 > \frac{\hbar^2}{4\Delta x^2} \Rightarrow E > \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar^2}{4\Delta x^2} + \frac{\hbar^2}{4\Delta y^2} + \frac{\hbar^2}{4\Delta z^2} \right) \approx \frac{3}{2m} \frac{\hbar^2}{R^2}$$

Donc, "plus les boîtes sont grandes, plus elles peuvent admettre des niveaux d'énergie faible".

2.c) En déduire que, comme le dit le document "plus le rayon est petit, plus l'onde associée à l'électron a une longueur d'onde petite".

2.d) Un photon absorbé ou émis entre deux niveaux a une énergie

$$E_\varphi = E_p - E_q = \frac{1}{2m} \left(\frac{\pi\hbar}{\ell}\right)^2 |p^2 - q^2|$$

Or

$$E_\varphi = \frac{hc}{\lambda} \Rightarrow \lambda = \frac{2mhc}{|p^2 - q^2|} \left(\frac{\ell}{\pi\hbar}\right)^2 = \frac{4m c \ell^2}{|p^2 - q^2| \pi \hbar}$$

Donc "plus le rayon est petit ($\ell \searrow$), plus l'onde associée à l'électron a une longueur d'onde petite ($\lambda \searrow$)".