TD 25 Schrödinger

Les indispensables

Exercice 1 — *D'après CCP 17*

On modélise, en première approximation, une diode laser par un puits quantique rectangulaire infini de largeur L .Une particule quantique de masse m et d'énergie E, décrite par la fonction d'onde spatiale $\varphi(x)$ et soumise à l'énergie potentielle $\mathrm{V}(x)$, satisfait l'équation de Schrödinger des états stationnaires :

$$\frac{\mathrm{d}^2\varphi}{\mathrm{d}x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(\mathrm{E} - \mathrm{V}(x))\varphi = 0$$

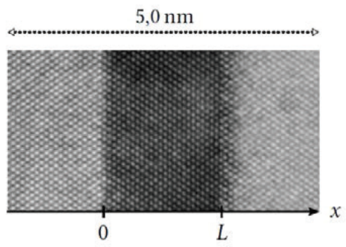


FIGURE 1 – Image au microscope électronique de la partie active d'une diode laser

La modélisation avec un puits quantique de hauteur infinie nous conduit à décrire l'énergie potentielle de la particule par :

$$\begin{cases} \mathrm{V} \to \infty & \text{si} \quad x < 0 \text{ ou } x > \mathrm{L} \\ \mathrm{V} = 0 & \text{si } 0 \leqslant x \leqslant \mathrm{L} \end{cases}$$

1 - Écrire l'équation de Schrödinger des états stationnaires dans la zone où le potentiel est nul. En déduire la forme générale de la fonction d'onde spatiale.

2 - Justifier que $\varphi(x=0) = \varphi(x=\mathrm{L}) = 0$ et que $\int_0^{\mathrm{L}} |\varphi(x)|^2 \mathrm{d}x = 1$.

3 - Montrer que la fonction d'onde spatiale est quantifiée. Quel lien peut être fait avec la corde vibrante ?

4 - En déduire, pour $0 \leqslant x \leqslant \mathrm{L}$, que la fonction d'onde spatiale s'écrit : $\varphi(x) = \sqrt{\frac{2}{\mathrm{L}}} \sin\left(\frac{\sqrt{2m\mathrm{E}}}{\hbar} x\right)$

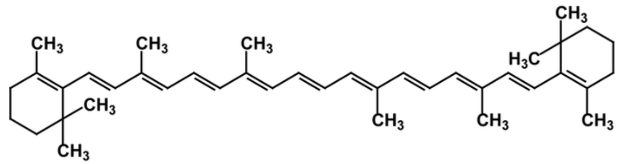
5 - Établir la quantification de l'énergie de la particule selon l'expression : $\mathrm{E}_n = n^2 \dfrac{\pi^2\hbar^2}{2m\mathrm{L}^2}, \quad n \in \mathbf{N}^*$

6 - D'aprés le cliché ci-dessous, déterminer l'énergie du niveau le plus bas, en supposant que la particule quantique placée dans le puits de potentiel est un électron. En déduire la longueur d'onde pour l'émission correspondant aux niveaux $n=1$ et $n=2$.
Données : $m_e = 9{,}1.10^{-31}$ kg $\hbar = 1{,}0.10^{-34}$ J.s

Pour s'entraîner

Exercice 2 — *D'après Oral CCP 18*

Le β-carotène est responsable de la coloration de certains fruits et légumes (carotte, abricot, courge, etc...). Les électrons des liaisons peuvent être considérés comme pouvant se déplacer librement dans un puits quantique rectangulaire infini de largeur L.



Molécule de β-carotène

Un électron de masse m et d'énergie E, est décrit par la fonction d'onde spatiale $\varphi(x)$ et soumise à l'énergie potentielle $\mathrm{V}(x)$, satisfait l'équation de Schrödinger des états stationnaires :

$$\frac{\mathrm{d}^2\varphi}{\mathrm{d}x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(\mathrm{E} - \mathrm{V}(x))\varphi = 0$$

La modélisation avec un puits quantique de hauteur infinie nous conduit à décrire l'énergie potentielle de la particule par :

$$\begin{cases} \mathrm{V} \to \infty & \text{si} \quad x < 0 \text{ ou } x > \mathrm{L} \\ \mathrm{V} = 0 & \text{si } 0 \leqslant x \leqslant \mathrm{L} \end{cases}$$

1 - Écrire l'équation de Schrödinger des états stationnaires dans la zone où le potentiel est nul. En déduire la forme générale de la fonction d'onde spatiale.

2 - Justifier que $\varphi(x=0)=\varphi(x=\mathrm{L})=0$ et que

$$\int_0^{\mathrm{L}} |\varphi(x)|^2 \mathrm{d}x = 1$$

3 - Montrer que la fonction d'onde spatiale est quantifiée. Quel lien peut être fait avec la corde vibrante ?
4 - En déduire, pour $0 \leqslant x \leqslant \mathrm{L}$, que la fonction d'onde spatiale s'écrit : $\varphi(x)=\sqrt{\frac{2}{\mathrm{L}}}\sin\left(\frac{\sqrt{2m\mathrm{E}}}{\hbar}x\right)$
5 - Établir la quantification de l'énergie de la particule selon l'expression :

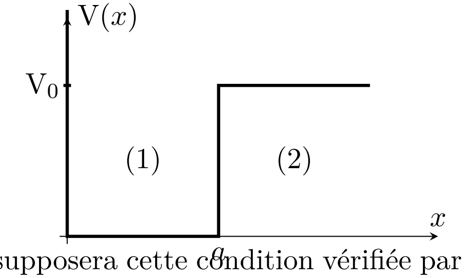
$$\mathrm{E}_n = n^2\frac{\pi^2\hbar^2}{2m\mathrm{L}^2}, \quad n\in\mathbf{N}^*$$

6 - La molécule de β-carotène a pour longueur $\mathrm{L}=1{,}83$ nm, calculer les niveaux d'énergie E_{11} et E_{12}, en déduire la longueur d'onde absorbée par cette molécule. Conclure.
Données :

- $m_e = 9{,}1.10^{-31}$ kg
- $\hbar = 1{,}0.10^{-34}$ J.s

Exercice 3

On considère une particule quantique de masse m et d'énergie E évoluant dans le potentiel suivant, infini d'un côté, en $x=0$, et fini de l'autre, pour $x>a$.



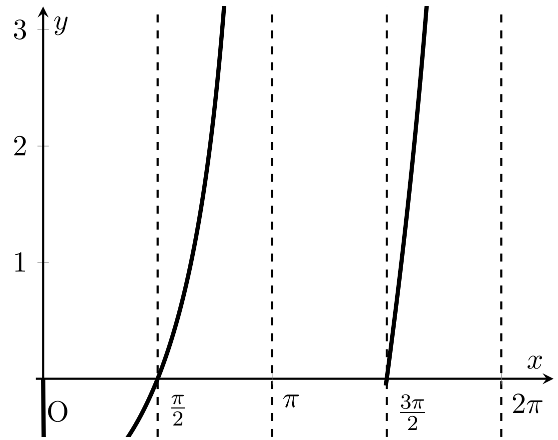
1 - Quelle est la condition que doit vérifier l'énergie si on veut que la particule soit dans un état lié ? On supposera cette condition vérifiée par la suite.
On donne l'équation de Schrödinger stationnaire

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

2 - Écrire la forme générale de $\phi(x)$ dans les domaines 1 et 2. On introduira les grandeurs $k=\sqrt{2m\mathrm{E}}/\hbar$ et $q=\sqrt{2m(\mathrm{V}_0-\mathrm{E})}/\hbar$ ainsi que quatre constantes d'intégration A_1, B_1, A_2 et B_2.
3 - Déduire des conditions aux limités en 0 et $+\infty$ des conditions parmi les constantes A_1, B_1, A_2 et B_2.
4 - En utilisant les conditions aux limites sont vérifiées en $x=a$, montrer que :

$$\mathrm{Y}=-\mathrm{X}\,\mathrm{cotan}\,\mathrm{X} \quad \text{avec} \quad \mathrm{X}=ka \quad \text{et} \quad \mathrm{Y}=qa$$

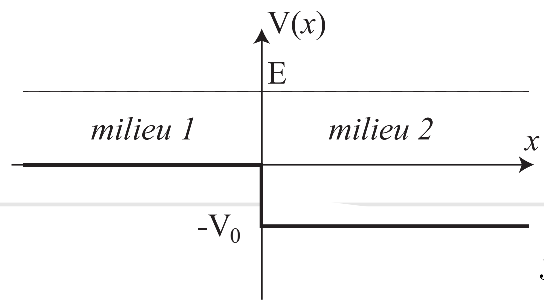
5 - On donne la représentation graphique de la fonction $x\mapsto x\,\mathrm{cotan}\,x$. En remarquant que $\mathrm{Y}=q\mathrm{X}/k$, déterminer les solutions possibles correspondant aux états liés.



6 - Dans le cas où au moins un état lié existe, tracer la forme de la partie spatiale de la fonction d'onde $\phi(x)$ pour l'état de plus basse énergie.

Exercice 4 *D'après Mines 17*

On étudie l'évolution d'un quanton de masse m qui aborde, avec une énergie $\mathrm{E}>0$, une falaise de potentiel de hauteur V_0



constante située en $x = 0$. L'étude est undimensionnelle conduite sur un axe Ox.

1 - À partir de l'équation de Schrödinger, établir l'équation différentielle vérifiée par la fonction d'onde spatiale $\varphi(x)$ associée au quanton.

2 - Dans le cas où le quanton arrive depuis $x \to -\infty$, établir les expressions de la fonction d'onde $\varphi_1(x)$ dans le milieu 1 et $\varphi_2(x)$ dans le milieu 2. Il n'est pas nécessaire de déterminer les constantes d'intégration.

3 - établir l'expression du coefficient r rapport de l'amplitude de la fonction d'onde spatiale correspondant à l'onde réfléchie et de l'amplitude de l'onde incidente. De la même façon, établir l'expression du coefficient t rapport de l'amplitude de la fonction d'onde spatiale correspondant à l'onde transmise et de l'amplitude de l'onde incidente.

4 - En déduire les coefficients R et T de réflexion et de transmission de la densité de courant de probabilité.

5 - Faire l'application numérique lorsque $8\mathrm{E} = \mathrm{V}_0$. Interpréter le résultat pour un faisceau incident contenant 1000 quantons.

Exercice 5 *D'après Oral CCP 18*

Une particule de masse m^* est placé dans un puits fini de largeur $2a$ dont le potentiel est défini de façon symétrique par :

$$\mathrm{V}(x) = \begin{cases} 0 & \text{pour} \quad a > x > -a \\ \mathrm{V}_0 & \text{pour} \quad |x| > a \end{cases}$$

1 - Pour quelle énergie a-t'on des états liés ?

2 - Donner l'équation de Schrödinger puis les formes de fonctions d'onde spatiales acceptables dans les différents domaines.

3 - On donne pour un état lié qu'il existe des solutions symétriques ou anti-symétriques :

$$\begin{cases} \phi_{\mathrm{I}}(x) = & \mathrm{A_I} e^{qx} \\ \phi_{\mathrm{II}}(x) = & \mathrm{A_{II}} \cos kx \\ \phi_{\mathrm{III}}(x) = & \mathrm{A_{III}} e^{-qx} \end{cases} \quad \text{ou} \quad \begin{cases} \phi_{\mathrm{I}}(x) = & \mathrm{A_I} e^{qx} \\ \phi_{\mathrm{II}}(x) = & \mathrm{B_{II}} \sin kx \\ \phi_{\mathrm{III}}(x) = & -\mathrm{A_{III}} e^{-qx} \end{cases}$$

Déterminer les expressions de q et k. Justifier les formes proposées et déterminer une relation entre $\mathrm{A_I}$ et $\mathrm{A_{III}}$

4 - Pour un état lié, la particule peut-elle être observée hors du puits de potentiel ? Est ce différent en mécanique classique ?

5 - Montrer que la condition de quantification des niveaux d'énergie pour une fonction symétrique s'écrit : $\tan \frac{\sqrt{2m^*\mathcal{E}}a}{\hbar} = \sqrt{\frac{\mathrm{V}_0 - \mathcal{E}}{\mathcal{E}}}$ On admettra que la fonction d'onde et sa dérivée sont continues.

6 - Représenter l'allure de la fonction d'onde pour les premiers niveaux d'énergie dans le cas symétrique. On ne demande pas de calculer les constantes $\mathrm{A_I}$ et $\mathrm{A_{II}}$.

7 - Déterminer la demi-largeur effective a^* du puits dans lequel évolue le quanton. On rappelle que l'énergie dans un puits infini de potentiel de largeur $2a$ est donnée par : $\mathrm{E}_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{8m^*a^2}$. Proposer un diagramme d'énergie pour le puits fini à partir du diagramme d'énergie du puits infini.

Pour performer

Exercice 6 *D'après Mines 17*

On note $\Psi(x,t)$ la fonction d'onde du système décrivant un oscillateur harmonique associé à une molécule diatomique. Ce système est assimilé un point matériel M de masse m évoluant le long d'un axe Ox, la distance $x = \mathrm{OM}$ représente l'élongation du ressort de raideur k modélisant la liaison chimique entre les deux atomes à travers le potentiel $\mathrm{V}(x) = \frac{1}{2}kx^2$. Le système est de plus stationnaire, on peut donc séparer la fonction d'onde en deux parties sous la forme $\Psi(x,t) = f(x)e^{-i\mathrm{E}t/\hbar}$ où E représente les valeurs de l'énergie accessibles à ce système. Pour l'oscillateur harmonique, on montre êque ces valeurs de E doivent être positives. La fonction $\Psi(x,t)$ est une solution de norme unité de l'équation de Schrödinger

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

1 - Ecrire l'équation différentielle vérifiée par la fonction $f(x)$ en fonction des paramètres k, m, $\hbar$ et E.

On effectue le changement de variable $\alpha = x\left(\frac{mk}{\hbar^2}\right)^{1/4}$ et l'on pose $\gamma = \left(\frac{4m\mathrm{E}^2}{\hbar^2 k}\right)^{1/2}$

2 - Quelles sont les dimensions de α et de γ ?

3 - Écrire l'équation différentielle vérifiée par la fonction $f(\alpha)$ en fonction de γ.

4 - Vérifier que dans le régime $\alpha \to \pm\infty$, on peut écrire $f(\alpha) \sim e^{\pm\alpha^2/2}$

5 - Justifier succinctement que seule la solution $\alpha \mapsto e^{-\alpha^2/2}$ est physiquement acceptable.

Dès lors que nous connaissons le comportement asymptotique de la solution recherchée, nous pouvons l'extraire de celle-ci en effectuant le changement de fonction $f(\alpha) = g(\alpha)e^{-\alpha^2/2}$

6 - Déterminer l'équation différentielle vérifiée par la fonction $\alpha \mapsto g(\alpha)$.

Pour résoudre cette équation, on effectue un développement en série entière de la fonction g :

$$g(\alpha) = \sum_{p=0}^{\infty} b_p \alpha^p$$

7 - Exprimer le coefficient b_{p+2} en fonction du coefficient b_p, de l'entier p et de γ.

Si l'on conserve tous les termes de la série, on montre que le comportement asymptotique de la fonction g l'emporte sur $\exp(-\alpha^2/2)$ en $p \to \infty$ ce qui ne permet pas de construire de solution physiquement acceptable. La seule possibilité est de tronquer la série en imposant l'existence d'un entier n tel que si $p \geqslant n$ alors $b_{p+2} = 0$.

8 - En déduire que les énergies accessibles à un oscillateur harmonique en régime quantique sont de la forme

$$\mathrm{E}_n = (n+\frac{1}{2})\hbar\omega$$

où ω est une grandeur que l'on exprimera en fonction de m et k.

Exercice 7 *D'après Mines 18*

L'étude d'un système de deux particules ponctuelles de masses m_1 et m_2, si tuées en A_1 et A_2 et telles que $\overrightarrow{\mathrm{A}_1\mathrm{A}_2} = \vec{r}$ est réalisée en utilisant les coordonnées sphériques (r,θ,ϕ) pour le vecteur $\vec{r}$. Les particules sont en interaction, décrite par l'énergie potentielle $\mathrm{E_P}(r)$; la probabilité d'observer une particule dans l'élément de volume $\mathrm{d}\tau$ entourant le point $\vec{r}$ est donnée par $\mathrm{d}p = |\Psi(\vec{r},t)|^2\mathrm{d}\tau$, où la fonction d'onde $\Psi(\vec{r},t)$ est solution de l'équation de Schrödinger,

$$\frac{-\hbar^2}{2\mu}\Delta\Psi + \mathrm{E}_p(r)\Psi(\vec{r},t) = j\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

où Δ est l'opérateur de Laplace ou laplacien ; le coefficient μ qui remplace, dans cette équation, la masse d'une particule unique, est donné par $\mu = m_1m_2/(m_1+m_2)$.

On rappelle aussi l'expression de l'opérateur laplacien en coordonnées sphériques :

$$\Delta f = \frac{1}{r^2}\left[\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial f}{\partial r}\right) + \Delta_{ang} f\right]$$

Avec

$$\Delta_{ang} f = \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial f}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 f}{\partial\phi^2}$$

On cherche une solution de l'équation de Schrödinger sous la forme

$$\Psi(\vec{r},t) = \frac{\mathrm{R}(r)}{r}\mathrm{Y}(\theta,\phi)e^{-j\omega t}$$

1 - Indiquer et justifier brièvement l'expression liant l'énergie E d'un tel état et la pulsation ω.

2 - Montrer que $\mathrm{R}(r)$ et $\mathrm{Y}(\theta,\phi)$ vérifient les deux équations

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2\mathrm{R}}{\mathrm{d}r^2} + \left[\mathrm{E_P}(r) + \frac{\hbar^2\mathrm{C}}{2\mu r^2}\right]\mathrm{R}(r) = \mathrm{E}\mathrm{R}(r) \quad \text{et} \quad \Delta_{ang}\mathrm{Y} = -\mathrm{C}\mathrm{Y}(\theta,\phi)$$

où C est une certaine constante. On rappelle les résultats de la mécanique classique pour l'étude du mouvement d'une particule de masse μ en mouvement dans un champ de forces centrales décrit par l'énergie potentielle $\mathrm{E_P}(r)$:

- le mouvement est plan et peut, dans ce plan, être décrit en coordonnées polaires r, θ ;
- le moment cinétique est constant, directement perpendiculaire au plan du mouvement avec pour moment cinétique $\sigma = \mu r^2 \dot{\theta}$? ;
- le mouvement est entièrement décrit par la conservation de l'énergie $E = \frac{1}{2}\mu \dot{r}^2 + U_{eff}(r)$ où l'énergie potentielle effective a pour expression $U_{eff}(r) = E_p(r) + \frac{1}{2}\frac{\sigma^2}{\mu r^2}$

3 - Précisez, dans l'équation vérifiée par $R(r)$ établie ci-dessus, les expressions analogues de l'énergie cinétique radiale $\frac{1}{2}\mu \dot{r}^2$ de l'énergie potentielle effective et du moment cinétique σ.

4 - Quelle serait la valeur de la constante C pour une fonction d'onde purement radiale ? On ne fera pas nécessairement cette hypothèse dans les questions qui suivent.

5 - On procède à une nouvelle séparation des variables en posant $Y(\theta, \phi) = \Theta(\theta)\Phi(\phi)$. établir les équations différentielles vérifiées par $\Theta(\theta)$ et $\Phi(\phi)$.

6 - Justifier le plus précisement possible le fait, qu'à une constante multiplicative près, que l'on peut imposer $\Phi(\phi) = e^{jm\phi}$ où $m \in \mathbb{Z}$.

7 - On peut montrer, et on admettra, que les solutions de l'équation différentielle vérifiée par $\Theta(\theta)$ sont des polynômes de degré ℓ (avec $\ell > |m|$) de la variable $x = \cos\theta$:

$$\Theta(x) = a_\ell x^\ell + ... + a_1 x + a_0$$

En ne considérant que le terme de plus haut degré, exprimer C en fonction de ℓ seulement. Montrer que le moment cinétique σ pour une fonction d'onde caractérisée par ℓ vaut :

$$\sigma = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1)}$$