

# Chapitre 17

## ■ Physique quantique ■

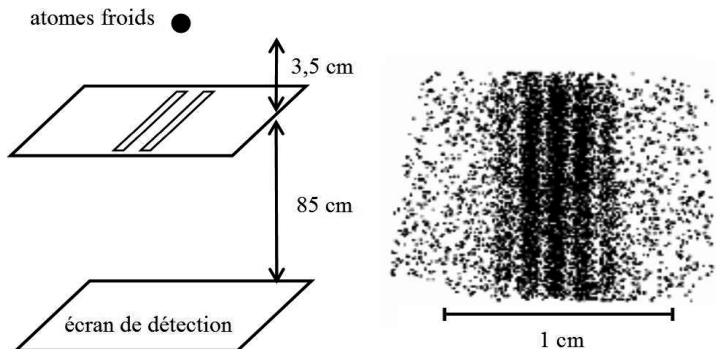
Ce chapitre de 2<sup>de</sup> année ne concerne que les élèves des filières **MP** et **PC**.

### ■ Comportement quantique

#### 1. Expérience de Shimizu et Takuma (MP, PC)

En 1992, les japonais Shimizu et Takuma réalisaient une expérience d'interférences atomiques. Un nuage d'atomes de Néon est lâché sans vitesse initiale à 3,5 cm au dessus d'un écran percé de deux fentes parallèles, de largeur égale à  $2,0 \mu\text{m}$  et distantes de  $d = 6,0 \mu\text{m}$ . Les atomes sont alors détectés sur une plaque située à une distance  $D = 85 \text{ cm}$  à l'aplomb du plan des fentes.

Chaque point noir sur la plaque réceptrice représente l'impact d'un atome.



Estimer la masse de l'atome à partir de l'expérience.

#### 2. (\*\*\*) Effet photoélectrique dans une boule de cuivre (MP, PC)

Une petite sphère de cuivre de rayon  $R = 1 \text{ cm}$ , suspendue dans le vide par un fil isolant, est éclairé par une lumière de longueur d'onde  $\lambda = 0,2 \mu\text{m}$ . Le travail de sortie (ou d'extraction) d'un électron du cuivre vaut  $W_s = 4,47 \text{ eV}$ .

Après avoir rappelé ce qu'est l'effet photoélectrique, expliquer pourquoi le potentiel électrostatique de la sphère atteint une valeur maximale  $V_{max}$  à évaluer.

Soit  $\eta = 10^{-3}$  le rendement photo-électrique ; avec  $N = 10^{15}$  photons incidents par seconde, trouver le temps  $\Delta t$  au bout duquel la sphère est portée à  $V_{max}$ .

Données : Dans un conducteur à l'équilibre électrostatique, le champ intérieur est nul et les densités de charges non nulles sont surfaciques.

## ■ Fonction d'onde et équation de Schrödinger

---

### 3. Comment Schrödinger a-t-il « intuité » son équation ? (MP, PC)

Schrödinger a adopté l'idée de de Broglie généralisant à une particule matérielle classique les relations de Planck-Einstein (établies pour le photon) donnant le lien entre grandeurs corpusculaires ( $p$  et  $E$ ) et grandeurs ondulatoires ( $k$  et  $\omega$ ).

En partant d'une onde plane à 1D,  $\psi(x,t) = \psi_0 e^{i(kx - \omega t)}$ , il a exprimé les dérivées spatio-temporelle en fonction de  $p$  et  $E$ . Quelle équation a-t-il trouvé pour une particule dans un champ de force dérivant du potentiel  $V(x)$  ?

### 4. (\*) Orbitale 1s de l'atome d'hydrogène (MP, PC)

La fonction d'onde de l'état fondamental de l'électron d'un atome d'hydrogène est donnée, en coordonnées sphériques, par l'expression  $\psi(r,t) = \varphi(r) e^{-\frac{iE_0 t}{\hbar}}$  où  $\varphi(r) = A e^{-r/a_0}$  et  $a_0 = 53$  pm est le rayon de Bohr.

Quelle est la probabilité de trouver l'électron à l'intérieur d'une sphère de rayon  $R = a_0$  centrée sur le noyau ?

## ■ Puits infinis

---

### 5. (\*) Boîte quantique 3D (MP, PC)

Un gaz enfermé dans une cavité parallélépipédique de côtés  $a$ ,  $b$  et  $c$  se trouve dans un puits de potentiel infini à trois dimensions. On cherche des états stationnaires décrits par une fonction d'onde à variables séparées de la forme  $\Phi_{\vec{n}}(x, y, z) = \varphi_{n_1}(x) \varphi_{n_2}(y) \varphi_{n_3}(z)$  avec la notation  $\vec{n} = (n_1, n_2, n_3)$ .

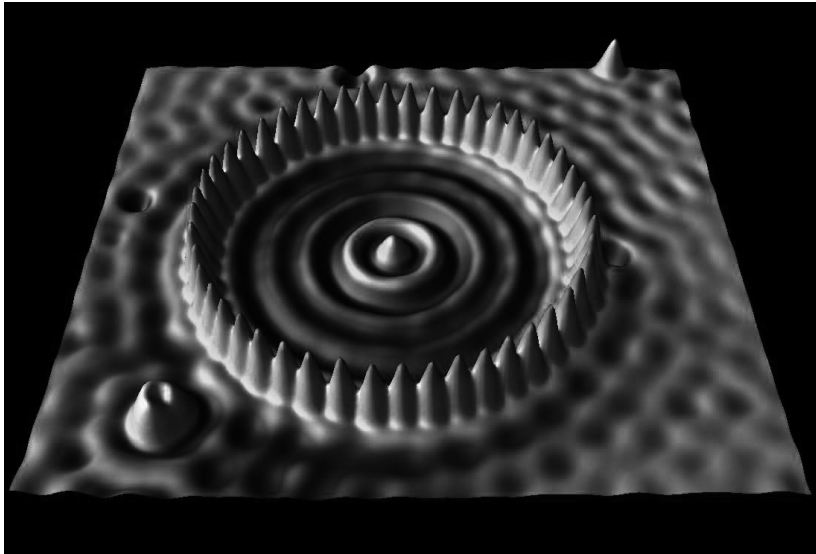
Quelle est, à partir de la résolution de l'équation de Schrödinger à 3D et des quantifications associées, l'expression des niveaux d'énergie  $E_{\vec{n}}$  ?

### 6. (\*\*\*) La barrière de corail quantique (MP, PC) (Réf : Science, 8 octobre 1993, et IBM Almaden, USA 1993)

En 1993, des chercheurs réussissent à déposer 48 atomes de fer en forme de cercle de rayon  $R = 7,13$  nm sur une surface métallique de cuivre. Cette structure est nommée « corail quantique » car pour les électrons libres du cuivre situés à l'intérieur de cet enclos, les atomes de fer forment une barrière de potentiel « infranchissable ».

Ci-dessous une distribution topographique de la densité électronique (obtenue par microscopie à effet tunnel) transformée en image 3D montrant l'onde électronique stationnaire à l'intérieur du cercle formé par les atomes de fer (les pics) sur le support 2D de cuivre.

Pour établir des ordres de grandeur, on se limite à un problème à une dimension selon  $Ox$ , en considérant un unique électron confiné sur un diamètre du cercle ; l'électron se trouve ainsi dans un puits de potentiel, pris nul à l'intérieur du puits, et l'on cherche des états stationnaires.



Pour établir des ordres de grandeur, on se limite à un problème à une dimension selon  $Ox$ , en considérant un unique électron confiné sur un diamètre du cercle ; l'électron se trouve ainsi dans un puits de potentiel, pris nul à l'intérieur du puits, et l'on cherche des états stationnaires.

Dans le cas d'une modélisation par un puits de potentiel de profondeur infinie, quel est l'intervalle effectivement exploré par la particule ? Estimer l'énergie de l'électron piégé dans le corail dans le mode représenté sur la figure.

Dans un modèle plus réaliste, le puits de potentiel n'est plus infini, mais a une hauteur  $V_0 = 0,44$  eV finie. Estimer l'énergie de l'état fondamental dans ce puits fini.

### 7. (\*) Centres colorés de cristaux cubiques (MP, PC)

Lors de l'irradiation d'un cristal cubique par des rayons X, un anion peut être éjecté, laissant une lacune susceptible d'être occupée par un électron. Lorsque c'est le cas, la lacune occupée par un électron est appelé « centre coloré ». Cette dénomination se justifie par le fait qu'un cristal éclairé, incolore avant irradiation par les rayons X, absorbe dans le visible après irradiation.

La lacune d'un centre coloré peut être assimilée à une boîte cubique, dont le côté est de l'ordre de  $a$ , paramètre de maille du réseau cristallin. Un électron occupant cette lacune peut se trouver dans l'un des deux niveaux d'énergie les plus bas.

Trois sachets, identiques à première vue, contiennent des cristaux incolores (qui apparaissent blanchâtres) de chlorure de sodium, d'iodure de potassium et de chlorure de potassium. Après irradiation, ils sont colorés par absorption dans le visible, et deviennent l'un jaune, l'autre vert, le troisième mauve. Quel est le contenu de chacun des sachets ?

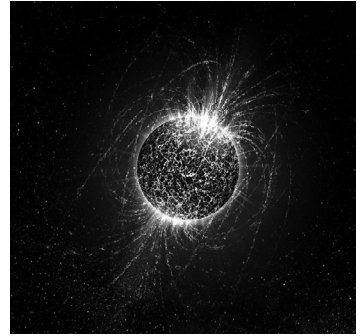
Données : Paramètres de maille :  $a(\text{NaCl}) = 0,56$  nm ;  $a(\text{KI}) = 0,72$  nm ;  
 $a(\text{KCl}) = 0,63$  nm .

Un sachet apparaît de la couleur complémentaire de la longueur d'onde absorbée ; la couleur complémentaire par absorption :

- du jaune est le violet,
- du vert est le rouge,
- du mauve est le jaune.

**8. (\*) Étoile à neutrons (MP, PC)**

Une étoile à neutrons de masse  $M$  (constituée de  $N$  neutrons de masse  $m_n \approx 10^{-27}$  kg) et de rayon  $R$ , résulte d'un équilibre entre la gravitation qui tend à la contracter et la pression des neutrons qui résiste à l'effondrement. En minimisant l'énergie totale  $E_p + E_c$  par rapport au rayon de l'étoile et en admettant que l'on peut raisonner comme si chaque neutron était confiné dans un puits de potentiel 3D de taille  $V/N$  où  $V$  est le volume total de l'étoile, déterminer l'ordre de grandeur du rayon d'une étoile à neutrons de masse égale à celle du soleil  $M_\odot \approx 10^{30}$  kg.



On peut se contenter dans cette estimation de prendre tous les préfacteurs égaux à 1.

**9. (\*\*\*) Particule confiné dans un puits delta (MP, PC)**

Un quanton de masse  $m$ , évolue selon un axe  $Ox$  en subissant une interaction décrite par l'énergie potentielle  $V(x) = -aV_0\delta(x)$ , où  $a$  désigne une constante positive (homogène à une longueur),  $V_0$  une constante positive (homogène à une énergie) et  $\delta(x)$  la distribution de Dirac pour laquelle on rappelle :

$$\delta(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x \neq 0 \\ +\infty & \text{si } x = 0 \end{cases} \text{ avec } \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) dx = 1 \text{ et } \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\delta(x-x_0) dx = f(x_0)$$

C'est l'équivalent d'un puits infiniment fin mais infiniment profond...

On s'intéresse aux états stationnaires liés décrits par la fonction d'onde  $\psi(x,t) = \varphi(x)e^{-iEt/\hbar}$  avec  $E < 0$ .

Quelle est l'expression du seul niveau d'énergie  $E$  possible ?

Lemme : Pour la discontinuité de  $\varphi'(x)$ , partir de l'équation de Schrödinger, l'intégrer sur un intervalle de largeur  $2\varepsilon$  centré sur l'origine, puis fait tendre  $\varepsilon$  vers 0, afin d'établir la relation  $\varphi'(0^+) - \varphi'(0^-) = -\alpha\varphi(0)$  en exprimant  $\alpha > 0$  en fonction de  $m$ ,  $a$ ,  $V_0$  et  $\hbar$ .

**■ Potentiels uniformes par morceaux**

**10. (\*\*\*) Polariseur à neutrons (MP, PC)**

Données : L'électron, mais aussi les nucléons (proton et neutron), possèdent un moment cinétique intrinsèque, le spin  $\vec{S}$  de norme  $S = \hbar/2$  ; cela

signifie que la projection du spin  $\vec{S}$  suivant  $\vec{u}_z$  ne peut prendre que deux valeurs  $S_z = \hbar/2$  (polarisation positive) ou  $S_z = -\hbar/2$  (polarisation négative).

Ce spin  $\vec{S}$  est relié à un moment magnétique de spin  $\vec{\mathcal{M}}$  par la relation  $\vec{\mathcal{M}} = \gamma \vec{S}$ , le coefficient  $\gamma$  étant différent pour chaque type de particule.

Ainsi pour les neutrons de masse  $m$ , on a  $\gamma = g \frac{e}{2m}$  avec  $g = -3,83$ .

Dans un faisceau de neutrons, tous possèdent la même énergie  $E$ , mais 50 % d'entre eux ont une polarisation positive et 50 % une polarisation négative. Ce faisceau est émis par une source située dans le vide en  $x \rightarrow -\infty$ , il se dirige vers un milieu (en  $x > 0$ ) où règne un potentiel constant  $V_0 > 0$  (indépendant du couplage magnétique) ainsi qu'un champ magnétique constant et uniforme  $\vec{B} = B \vec{u}_z$ . Le milieu semi-infini en  $x > 0$  constitue donc une marche de potentiel.

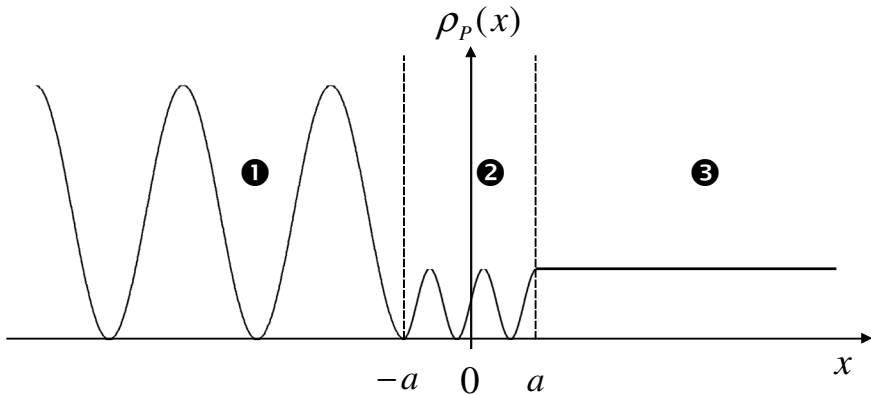
On note  $\omega_L = |\gamma| B$  la pulsation de Larmor et  $E = V_0$  l'énergie des neutrons incidents de masse  $m$ .

Quelle est la nature du faisceau transmis (en  $x > 0$ ), en polarisation et en proportion ?

AN :  $E = V_0 = 10^{-3}$  eV ;  $B = 1$  T ;  $m = 1,67 \cdot 10^{-27}$  kg.

### 11. (\*) Évolution de particules dans un potentiel inconnu (MP, PC)

Un faisceau de particules quantiques d'énergie  $E$ , décrit par la fonction d'onde  $\psi(x, t)$ , évolue suivant l'axe  $Ox$ . Le graphe ci-dessous représente, pour chacune des 3 parties de l'espace,  $\rho_p(x) = |\psi|^2$ .



On suppose que le potentiel  $V(x)$  qui règne s'annule quand  $x \rightarrow \pm\infty$ .

Après examen de la courbe  $\rho_p(x)$ , donner toutes les précisions possibles sur le potentiel  $V(x)$  et tracer l'allure de sa courbe.

**12. (\*\*) Puits mixte (MP, PC)**

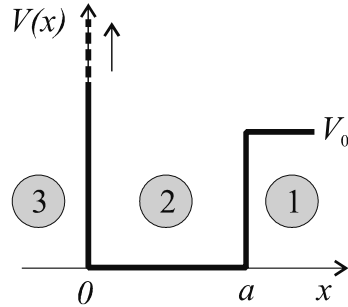
Une particule de masse  $m$  évolue dans le potentiel  $V(x)$  représenté ci-dessous :

$V(x) \rightarrow \infty$  pour  $x < 0$ , région inaccessible à la particule, notée (3).

$V(x) = 0$  pour  $0 \leq x \leq a$ , région notée (2).

$V(x) = V_0$  pour  $x > a$ , région notée (1).

On note  $\psi(x, t) = \varphi(x)e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$ , avec  $E > 0$ , la fonction d'onde stationnaire, lorsqu'elle existe, de la particule d'énergie  $E$  dans la région (2).



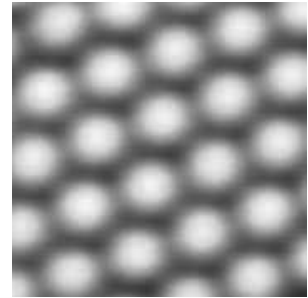
Quelle est, pour  $V_0$  fixé, la plus petite valeur de  $a$  en dessous de laquelle il n'existe plus d'état stationnaire ?

**■ Effet tunnel**

**13. Résolution d'un microscope à effet tunnel (MP, PC)**

Pour explorer la surface d'un échantillon conducteur, on lui approche la fine pointe métallique d'un microscope à effet tunnel. Il en résulte, pour les électrons, une barrière de potentiel de largeur  $L$  entre la pointe et l'échantillon. On rappelle l'expression approchée du facteur de transmission tunnel  $T$  d'une particule, valable pour une « barrière épaisse » donc dans le domaine des faibles valeurs ( $T \ll 1$ ) :

$$T \approx \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} \exp\left[-\frac{2L}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)}\right]$$



Si la variation relative minimale du courant que peut déceler le microscope est de 5 % ; déterminer, pour  $V_0 - E \approx 4$  eV (appelé travail d'extraction), la variation  $\Delta L$  correspondante, définissant la résolution du microscope.

**14. (\*) Effet tunnel comparé sur 4 barrières de potentiel différentes (MP, PC)**

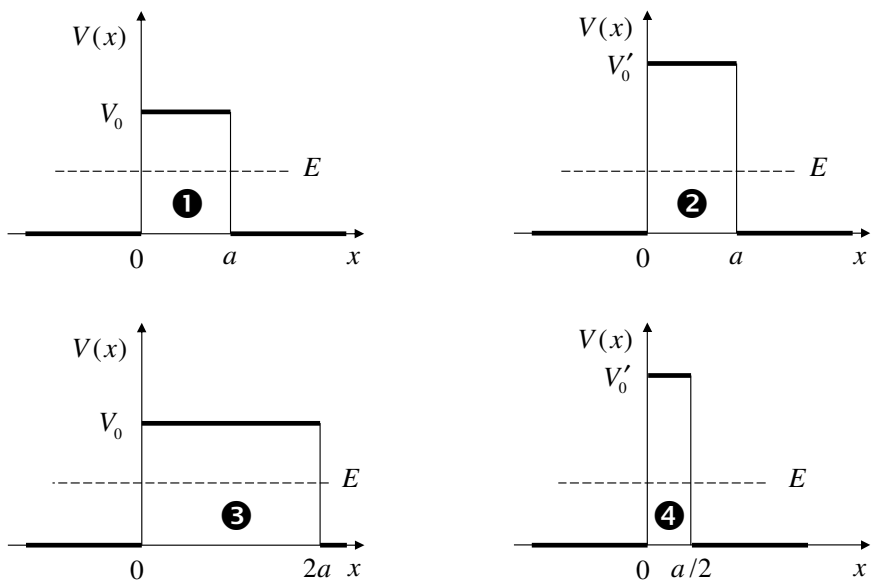
Des particules quantiques identiques de masse  $m$  et de même énergie  $E$  rencontrent, en provenant de la gauche, 4 types de barrières de potentiel notées de ① à ④. Dans les situations ① et ③,  $V_0 = 2E$ , et dans les situations ② et ④,  $V_0 = 3E$ .

Les graphes se trouvent à la page suivante.

Est-il possible de classer, par ordre croissant, les 4 probabilités de traversée de barrière par effet tunnel ?

Données : On rappelle l'expression approchée du coefficient de transmission tunnel à travers une barrière d'épaisseur  $a$  et de hauteur  $V_0$  :

$$T \approx \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} \exp\left(-\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)}\right) ; \text{poser } \alpha = \frac{2a}{\hbar} \sqrt{2mE} .$$



**15. (\*) Extraction d'un électron d'un métal (MP, PC)**

Un effet photoélectrique s'observe lorsqu'on éclaire une plaque de Zn avec des photons d'énergie supérieure à 5 eV. Rappeler le principe.

Soit un bloc de Zn remplissant le demi-espace  $x < 0$  et donnant sur l'air en  $x > 0$ . Justifier à partir de la donnée précédente qu'un électron de conduction se trouve en présence d'une marche de potentiel à préciser. En déduire qu'un électron de conduction a une probabilité de présence non nulle à l'extérieur du métal. Déterminer une distance caractéristique de décroissance de cette probabilité.

À présent, le bloc de Zn est placé dans un champ électrostatique extérieur et uniforme  $\vec{E}_{elec} = E_{elec} \vec{u}_x$ . Représenter la nouvelle forme du puits de potentiel. Quel doit être le signe de  $E_{elec}$  pour qu'on puisse extraire des électrons de la plaque de Zn (appelé émission froide). Donner l'ordre de grandeur de  $E_{elec}$  pour que l'extraction soit significative.

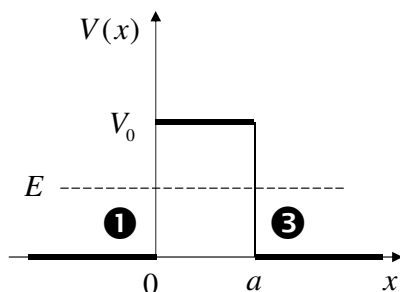
Données : Le champ électrique est nul à l'intérieur du conducteur ; ce dernier est donc équipotentiel, on convient que le potentiel électrostatique du conducteur est nul.

**16. (\*\*) Une barrière est-elle franchie pour  $E > V_0$  ? (MP, PC)**

Rappel :

Dans l'effet tunnel, une particule de masse  $m$  et d'énergie  $E < V_0$  évolue dans la région (1) et arrive, en  $x = 0$ , sur une barrière de potentiel de largeur  $a$  et de hauteur en énergie  $V_0$ .

Pour la région (3) la mécanique quantique prédit un coefficient de transmission non nul :



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

Pour une barrière inchangée, la nouvelle situation est telle que  $E > V_0$ . Que prédit la mécanique classique ? *Sans calcul*, donner le nouveau coefficient de transmission, puis commenter la fonction  $T(E)$  et tracer son graphe. Par analogie avec situation rencontrée en cours d'optique, donner une interprétation de la condition  $T = 1$ .

### 17. (\*\*\*) Transmission à travers une barrière delta (MP, PC)

La barrière de potentiel delta est un modèle qui permet de décrire de façon efficace les phénomènes quantiques observés au niveau de l'interface entre deux matériaux conducteurs. En effet, la surface de tels matériaux est souvent couverte d'une fine pellicule d'oxyde non conductrice et l'interface de très faible épaisseur est alors modélisée par une barrière delta à travers laquelle les électrons peuvent passer par effet tunnel.

Un faisceau incident constitué de quanta de masse  $m$  et d'énergie  $E$  ( $E > 0$ ) se propage selon les  $x$  croissants et subit au voisinage de  $x=0$  une interaction modélisée par l'énergie potentielle  $V(x) = aV_0\delta(x)$ , où  $a$  désigne une constante positive (homogène à une longueur),  $V_0$  une constante positive (homogène à une énergie) et  $\delta(x)$  la distribution de Dirac pour laquelle on rappelle :

$$\delta(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x \neq 0 \\ +\infty & \text{si } x = 0 \end{cases} \quad \text{avec} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) dx = 1 \quad \text{et} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\delta(x-x_0) dx = f(x_0)$$

C'est l'équivalent d'une barrière infiniment étroite mais infiniment haute...

La fonction d'onde stationnaire de ce faisceau est cherchée sous la forme :

$$\psi_g(x, t) = (Ae^{ikx} + Be^{-ikx})e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \quad \text{pour } x < 0 \quad \text{et} \quad \psi_d(x, t) = Ce^{ikx}e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \quad \text{pour } x > 0$$

Établir les expressions des coefficients de réflexion et de transmission en amplitude notés respectivement  $r = \frac{B}{A}$  et  $t = \frac{C}{A}$ , puis déterminer le coefficient de transmission de ce faisceau, noté  $T$  (à donner en fonction de  $E$ ) ; commentaire. Peux-t-on retrouver le coefficient de transmission  $T$  autrement ?

Données : \* Prendre la même valeur de  $k = \sqrt{2mE} / \hbar$  dans les deux milieux.

\* Il a été établi à la question 9. la relation de discontinuité de  $\phi'$  ; mais du puits à la barrière, il faut prévoir un changement de signe :

$$\phi'(0^+) - \phi'(0^-) = \frac{2maV_0}{\hbar^2} \phi(0)$$

\* On rappelle l'expression non approchée du facteur de transmission  $T$  d'une particule d'énergie  $E$  à travers une barrière d'épaisseur  $a$  et de hauteur  $V_0$  :  $T = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \operatorname{sh}^2(\frac{a}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)})}$