

Exercice 1 Oscillation harmonique quantique dans l'état fondamental

On considère une particule quantique, de masse m , soumise à une énergie potentielle de la forme $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$. Dans l'état fondamental la fonction d'onde s'écrit :

$$\psi(x, t) = N \exp\left(-\frac{x^2}{a^2}\right) \exp\left(-\frac{iE_0t}{\hbar}\right)$$

où N , E_0 et a sont des constantes réelles.

1. Déterminer la constante N .
2. Représenter l'allure de la densité de probabilité de présence $\rho(x)$ de la particule. en déduire, sans calcul la valeur de la position moyenne $\langle x \rangle$ de la particule.
3. Déduire de l'équation de Schrödinger indépendante du temps les expressions de E_0 et de a en fonction de m , ω et \hbar .
4. Soit x_m l'amplitude du mouvement de l'oscillateur en mécanique classique quand son énergie mécanique vaut E_0 . Comparer x_m et a . Calculer la probabilité pour la particule d'être en dehors de l'intervalle $[-x_m, x_m]$. Commenter.
5. Exprimer $\langle x^2 \rangle$ en fonction de a . En déduire l'indétermination quantique Δx sur x .
6. Soit p la quantité de mouvement de la particule et Δp l'indétermination quantique sur p . Montrer que $\langle p \rangle = 0$
7. Montrer que $E_0 = \frac{1}{2}m\omega^2\Delta x^2 + \frac{\Delta p^2}{2m}$. En déduire l'expression de Δp et commenter le résultat.
8. À température non nulle, en raison de l'agitation thermique, il existe aussi des fluctuations Δx_T de la position de l'oscillateur autour de sa valeur moyenne. On donne $\Delta x_T = \sqrt{\frac{k_B T}{m\omega^2}}$ où $k_B = 1,38 \times 10^{-23}$ J/K est la constante de Boltzmann.
 - (a) Donner l'expression de la température T_c en dessous de laquelle les fluctuations quantiques sont plus importantes que les fluctuations thermiques.
 - (b) Calculer T_c dans le cas d'un oscillateur mécanique constitué d'une masse suspendu à un ressort. (Choisir une fréquence d'oscillation correspondant à une expérience réalisable au laboratoire de physique).
 - (c) En 2010 une équipe de l'Université de Californie a atteint le régime quantique en amenant un microrésonateur piézo-électrique de fréquence très élevée (6,0 GHz) à une température de 25 mK. Commenter le choix de cette fréquence et de cette température.

Données :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-\alpha u^2) du = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}; \quad \int_{-\infty}^{+\infty} u^2 \exp(-\alpha u^2) du = \frac{1}{2\alpha} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \quad \text{et} \quad \int_{-1}^1 \exp(-2u^2) du = 1,196$$

Exercice 2 Radioactivité α et effet tunnel

Le tunnel de Fréjus abrite le Laboratoire Souterrain de Modane (LSM), sous 1700 mètres de roche. Unité mixte du CNRS et du CEA, le LSM est en fonctionnement depuis 1982. Le LSM est un site scientifique exceptionnel protégé des rayons cosmiques, où ont lieu des recherches sur le neutrino, la matière noire ainsi que des mesures de faibles radioactivités et leurs applications aux études sur l'environnement et aux datations. Le LSM est entre autres spécialisé

dans la spectrométrie γ . Le rayonnement γ , qui suit généralement une émission α ou β , est issu du noyau de l'atome et correspond à une désexcitation de ce dernier. En effet, après une désintégration α ou β , le nouveau noyau n'est pas toujours dans un état d'équilibre énergétique : il possède encore « un trop plein d'énergie », on dit qu'il est excité. Pour se débarrasser de cet excédent, il va émettre un ou plusieurs rayonnements γ d'énergie déterminée et caractéristique du noyau et donc de l'atome en présence. Nous allons dans cette partie nous intéresser plus particulièrement à la radioactivité α .

Le quanton libre

1. Une particule quantique (quanton) est localisée sur un axe (O, \hat{u}_x) . l'état quantique de cette particule est caractérisé par une fonction d'onde : $\psi(x, t)$. Rappeler le postulat de Born donnant la probabilité dP que la particule se trouve dans l'intervalle $[x, x + dx]$ à l'instant t . En déduire la dimension de $\psi(x, t)$
2. Interpréter la propriété $\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x, t)|^2 dx = 1$.
3. Quelle est la signification de $\rho = |\psi(x, t)|^2$? En associant la probabilité de présence à un « courant de probabilité » donner sans démonstration l'équation de conservation de la probabilité de présence. On fera apparaître un vecteur \vec{j} appelé vecteur densité de courant de probabilité. Une analyse non demandée montre que sans le cas mono-dimensionnel

$$\vec{j} = \frac{i\hbar}{2m} \left(\psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) \hat{u}_x$$

Lorsque la particule possède une énergie potentielle $V(x)$, la fonction $\psi(x, t)$ est la solution de l'équation de Schrödinger non relativiste :

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

avec $\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,05 \times 10^{-34}$ Js

4. Rappeler ce qu'on entend par particule relativiste. On cherche des états d'énergie stationnaires \mathcal{E} de la forme $\psi(x, t) = \phi(x)f(t)$. Déterminer l'équation de Schrödinger indépendante du temps vérifiée par $\phi(x)$ et la forme générale $\psi(x, t)$ en fonction notamment de $\phi(x)$ et de \mathcal{E} . Que peut-on dire de la probabilité de présence dP ?

On définit une particule libre comme une particule de masse m d'impulsion \vec{p} et d'énergie $\mathcal{E} = \frac{\vec{p}^2}{2m} > 0$ évoluant dans une région d'énergie potentielle $V(x)$ nulle.

5. Déterminer la solution générale de l'équation de Schrödinger indépendante du temps pour une particule libre. Montrer que sa fonction d'onde $\psi(x, t)$ est la somme de deux ondes planes se propageant en sens inverse.
6. Définir le vecteur d'onde \vec{k} que l'on peut associer à cette particule. Déterminer la relation entre \vec{p} et \vec{k} . Comment s'appelle cette relation?

Effet tunnel

Le quanton d'énergie \mathcal{E} arrive d'une région **I** définie par $x < 0$ et dans laquelle son énergie potentielle est $V(x) = 0$. Il est susceptible également de se trouver soit dans une région **II** telle que $0 < x < a$ où règne une énergie potentielle $V(x) = V_0$ ou bien dans une région **III** définie par $x > a$, dans laquelle $V(x) = 0$. On suppose que $0 < \mathcal{E} < V_0$ et on cherche des états stationnaires d'énergie \mathcal{E} .

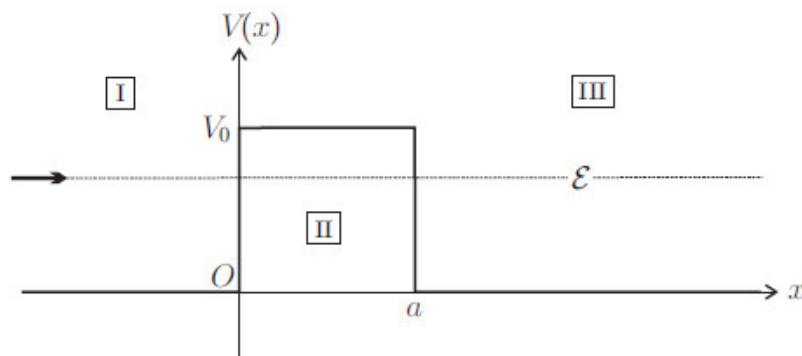


FIGURE 1 – Barrière d'énergie potentielle



7. Rappeler brièvement ce que serait le comportement de ce quanton s'il était régi par la mécanique classique.
8. Déterminer la forme générale de la solution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps dans les différentes régions. On ne cherchera pas à déterminer les constantes d'intégration. On posera $q = \sqrt{\frac{2m(V_0 - \mathcal{E})}{\hbar^2}}$.
9. Énoncer les propriétés générales de la fonction d'onde en $x = 0$ et $x = a$ permettant d'écrire un système de 4 équations dont les 5 inconnues sont les constantes d'intégration de la questions précédente. On ne cherchera pas à résoudre ce système. Quelle dernière hypothèse permet de définir complètement la fonction d'onde en tout point x ?
10. Déterminer les courants de probabilité dans les régions **I** et **III** en fonction des constantes d'intégration. Comment peut-on interpréter ces deux courants ? En déduire les coefficients de réflexion \mathcal{R} et de transmission \mathcal{T} caractérisant cette barrière d'énergie potentielle en fonction de ces mêmes constantes.

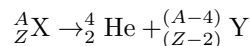
Un calcul non demandé permet d'obtenir

$$\mathcal{T} = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{\mathcal{E}(V_0 - \mathcal{E})} \text{sh}^2(qa)}$$

11. On considère que le quanton est une électron de masse $m_e = 9,11 \times 10^{-31}$ kg et d'énergie $\mathcal{E} = 1,00$ eV évoluant dans le potentiel décrit sur la figure 1 avec $V_0 = 2,00$ eV. Dresser un tableau des valeurs de qa et \mathcal{T} pour $a = 0,50$ nm ; 1,00 nm ; 2,00 nm. Définir ce que l'on appelle une barrière d'énergie potentielle épaisse et montrer que dans ce cas $T \approx T_0(\mathcal{E}, V_0) e^{-2qa}$. Préciser l'expression de $T_0(\mathcal{E}, V_0)$. Étudier les variations de T_0 pour V_0 fixé et $\mathcal{E} \in [0, V_0]$. En déduire que pour une barrière épaisse, l'on peut écrire $\ln T \approx -2qa$.

Radiactivité α

La radioactivité α est l'émission de noyaux d'hélium 4, appelés particules α , par des noyaux atomiques lourds (généralement $Z > 82$), selon la réaction :



dans laquelle A représente le nombre de nucléons (protons et neutrons) et Z le nombre de protons du noyau X . George Gamow fut le premier en 1928 à interpréter la radioactivité α grâce à l'effet tunnel. Il considéra que le noyau X était constitué au préalable de la particule α et du noyau Y . L'énergie potentielle $V(x)$ d'interaction entre ces deux particules est une fonction de la distance x qui les séparent dont l'allure est représentée ci-contre.

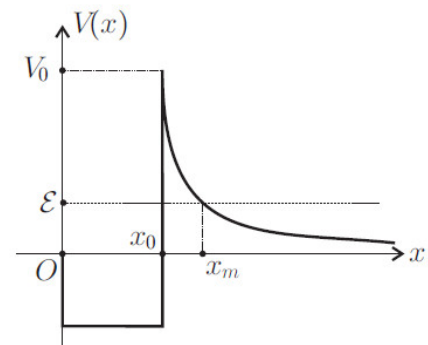


FIGURE 2 – Allure de l'énergie potentielle

Pour les grandes valeurs de x , cette énergie potentielle correspond à la répulsion électrostatique, et présente donc un profil coulombien de la forme $\frac{K}{4\pi\epsilon_0 x}$.

Pour $x < x_0$, les interactions nucléaires attractives interviennent et l'énergie potentielle est une puits très profond.

Pour l'uranium 238 : $Z = 92$ et $x_0 = 3,50 \times 10^{-15}$ m. La mesure de l'énergie \mathcal{E} des particules α émises par ce noyau donne une valeur proche de 4,00 MeV.

12. Déterminer l'expression de la constante K en fonction de Z et de la charge élémentaire $e = 1,61 \times 10^{-19}$ C. En déduire la hauteur V_0 de la barrière d'énergie potentielle à franchir. Calculer la distance x_m à laquelle l'énergie potentielle coulombienne est égale à \mathcal{E} . Donner un ordre de grandeur de la largeur de la barrière d'énergie potentielle à franchir. Peut-on considérer que la barrière est épaisse ? On donne la masse de la particule α , $m_\alpha = 6,64 \times 10^{-27}$ kg et on rappelle que $\frac{1}{4\pi\epsilon_0} = 9,98 \times 10^9$ SI.

Étant donné que la barrière d'énergie potentielle n'a pas la forme simple de celle étudiée dans la section précédente, on ne peut donc plus utiliser l'approximation de \mathcal{T} obtenue précédemment. Pour $x > x_0$, on peut cependant approcher la fonction $V(x)$ par une succession de barrières rectangulaires de hauteur $V(x)$ et de largeur dx suffisamment épaisse pour pouvoir utiliser l'approximation.

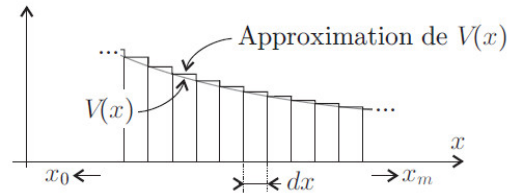


FIGURE 3 – Approximation de la barrière

13. En généralisant le résultat obtenu pour \mathcal{T} en fonction de \mathcal{T}_0 déterminer $\mathcal{T}(x + dx)$ en fonction de $\mathcal{T}(x)$, q et dx . En considérant, pour simplifier la suite du calcul, que $qdx \ll 1$ établir la relation :

$$\ln T \approx -\frac{2}{\hbar} \int_{x_0}^{x_m} \sqrt{2m_\alpha \left(\frac{K}{4\pi\epsilon_0 x} - \mathcal{E} \right)} dx$$

14. On admettra que $\int_{x_0}^{x_m} \sqrt{\frac{x_m}{x} - 1} dx \approx x_m \left(\frac{\pi}{2} - 2\sqrt{\frac{x_0}{x_m}} \right)$

En déduire la loi de Gamow-Condon-Gurney, valable pour $\frac{x_0}{x_m} \ll 1$:

$$\ln T = a - \frac{b}{\sqrt{\mathcal{E}}}$$

dans laquelle on exprimera a et b en fonction des données du problème.

15. En considérant que la particule fait des aller-retours dans une région d'extension $2x_0$ et que l'on peut obtenir un ordre de grandeur de la vitesse de la particule α en utilisant la relation $\mathcal{E} = \frac{1}{2}m_\alpha v^2$ exprimer le temps moyen t_m entre deux rebonds de la particule sur la barrière d'énergie potentielle. En déduire celles du nombre moyen de rebonds par seconde, de la probabilité dp d'émission α pendant dt et du temps de demi-vie radioactive $\tau_{1/2}$ de l'émetteur α . Montrer que

$$\ln \tau_{1/2} = Cte + \frac{b}{\sqrt{\mathcal{E}}}$$

16. Comparer cette dernière relation (appelée loi de Geiger-Nuttall) aux résultats expérimentaux présentés sur la figure 4.

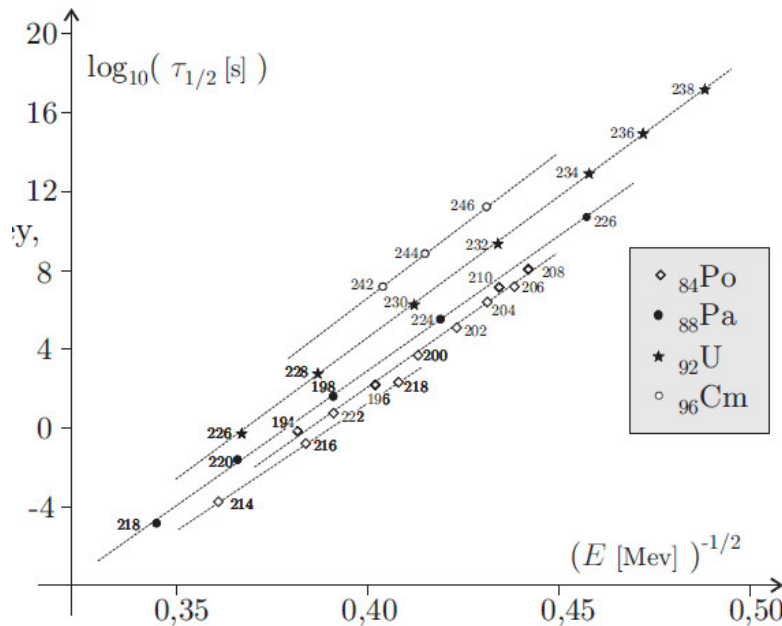
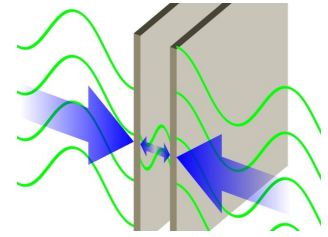


FIGURE 4 – Loi de Geiger-Nuttall

Exercice 3 **Effet Casimir**


En 1948, le physicien néerlandais Hendrik Casimir prédit l'existence d'une force attractive entre deux plaques conductrices, non chargées, parallèles, placées dans le vide. Cette force d'origine purement quantique, a été mise en évidence expérimentalement pour la première fois en 1997. Pour deux plaques de section S et distantes de d , le calcul de la force due à l'effet Casimir sur une plaque nécessite de faire appel à la théorie quantique des champs. Dans ce cadre, la théorie prévoit que,



$$F = \frac{\pi^2 \hbar c S}{240 d^4}$$

On modélise l'espace vide entre les plaques par un puits de potentiel infini compris entre $x = 0$ et $x = L$

1. Effet d'une particule non relativiste de masse m et d'énergie \mathcal{E} piégée entre les plaques.
 - (a) Montrer que l'énergie de la particule est quantifiée et déterminer les énergies \mathcal{E}_n possibles pour la particule.
 - (b) La plaque en $x = 0$ est immobile mais la plaque en $x = L$ se déplace de $dL \ll L$. Effectuer un bilan d'énergie sur la particule et exprimer la force qu'elle exerce sur la plaque mobile.
 - (c) L'effet prédit par Hendrick Casimir peut-il être simplement expliqué par la présence d'une particule résiduelle entre les plaques ?

2. Effet du champ électromagnétique.

Un espace vide est caractérisé par l'absence de particule massive. Il peut néanmoins y régner un champ électromagnétique. La présence des plaques métalliques impose que la composante tangentielle du champ électrique doit être nulle au niveau des plaques.

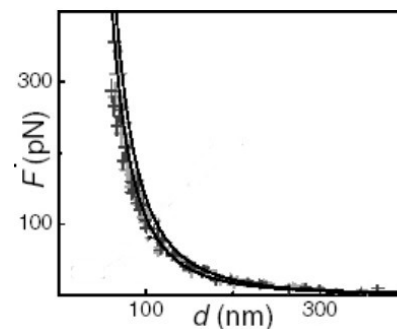
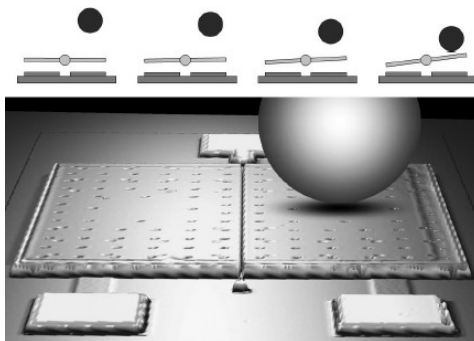
- (a) Proposer une forme pour le champ électrique compatible avec les conditions au limites. Montrer que les modes du champ électrique, caractérisés par la pulsation ω_n , sont quantifiés et préciser l'expression de ω_n .
- (b) Les modes du champ électrique sont-ils aussi quantifiés à l'extérieur des plaques ?
- (c) L'électrodynamique quantique permet de montrer que l'énergie du champ électromagnétique associée à un mode n s'exprime

$$\mathcal{E}_{n,m} = \left(m + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_n$$

où m est le nombre de photons, chacun d'énergie $\hbar \omega_n$, présents dans le mode n .

- i. Déterminer la force exercée par un photon occupant le mode n sur la plaque située en $x = L$
 - ii. L'effet prédit par Hendrick Casimir peut-il être expliqué par la présence de photons entre les plaques ?
3. Justifier qu'en l'absence de photon, l'existence d'un mode vide entraîne que la plaque située en $x = L$ subit une force. Donner son expression.
 4. Expliquer alors qualitativement l'origine de l'effet Casimir.

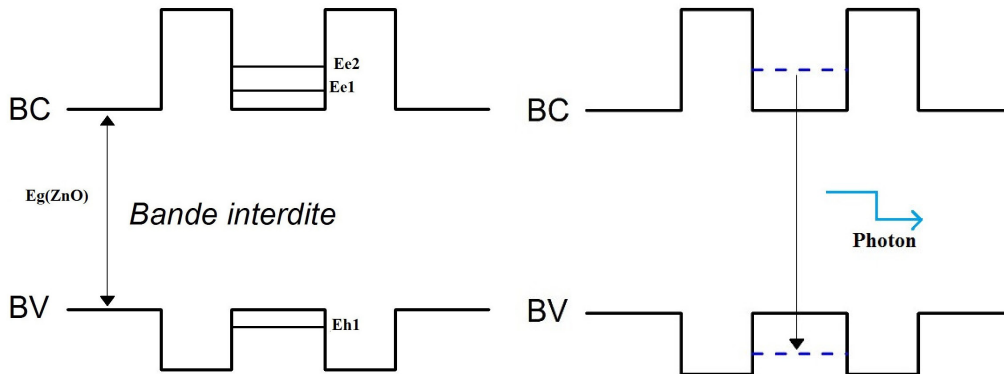
Le montage expérimental utilisé pour la mesure de la force de Casimir est constitué d'une plaque revêtue d'or (épaisseur 200 nm) et d'une sphère recouverte d'un miroir (rayon 100 μm). Les quatre croquis illustrent la rotation de la bascule micro-usinée en réponse à l'interaction de Casimir avec la sphère.



5. La courbe ci-dessus représente la force de Casimir mesurée en fonction de la distance d entre le bas de la sphère et la plaque d'or. Montrer que l'ordre de grandeur de la force de Casimir ainsi mesurée est bien en accord avec la prévision théorique.

Exercice 4 Étude d'une hétérostructure ZnO/(ZnMg)O

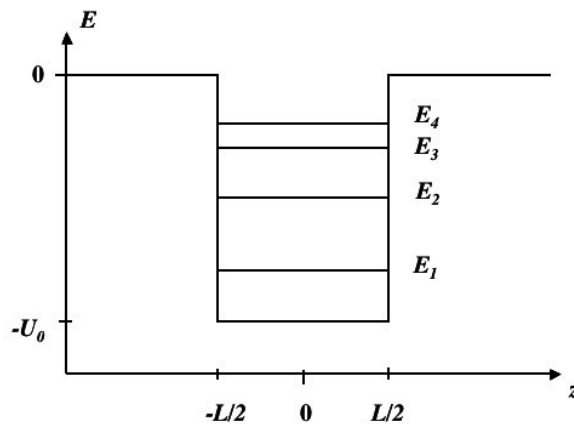
Nous allons maintenant nous intéresser au cas d'un puits de potentiel obtenu en insérant un matériau de plus petit gap (ZnO) entre deux barrières de potentiel (Zn,Mg)O. Le diagramme de bandes [bande de conduction (BC) et bande de valence (BV)] de ce type de structure est représenté ci-dessous. La faible dimension de ce puits de potentiel (i.e. quelques nanomètres) engendre l'apparition de niveaux discrets d'énergie dans le puits.



La photoluminescence est une technique de spectroscopie permettant la caractérisation des propriétés optiques du matériau étudié. Dans le cas d'un semi-conducteur, on excite les électrons de la bande de valence à l'aide d'un laser avec une énergie supérieure à celle du gap et passent donc de la bande de valence à la bande de conduction. Les paires électrons-trous ainsi créés se recombinent avec émission de photons. La mesure de cette énergie indique la nature de la recombinaison : l'étude de du spectre lumineux fournira des informations sur les différentes propriétés du matériau telles que son gap, sa composition ainsi que la présence d'éventuel défauts à sa surface.

On s'intéresse aux états d'énergie E accessibles pour un électron confiné dans un puits de potentiel de largeur $L = 10$ nm et de profondeur U_0 finie

On pose $k_0 = \sqrt{\frac{2mU_0}{\hbar^2}} = 1,63 \text{ nm}^{-1}$; $\Lambda = \sqrt{\frac{-2mE}{\hbar^2}}$ et $k = \sqrt{\frac{2m(U_0 + E)}{\hbar^2}}$



1. Quelle est la forme de la fonction d'onde dans chacun des 3 domaines ?
2. Rappeler les conditions aux limites et en déduire que

$$\tan\left(\frac{kL}{2}\right) = \frac{\Lambda}{k} \quad \text{pour les fonctions d'onde paires}$$

$$\cotan\left(\frac{kL}{2}\right) = -\frac{\Lambda}{k} \quad \text{pour les fonctions d'onde impaires}$$

3. Montrer que la quantification des états peut se mettre sous la forme :

$$\left| \cos\left(\frac{kL}{2}\right) \right| = \frac{k}{k_0} \quad \text{pour les états pairs}$$

$$\left| \sin \left(\frac{kL}{2} \right) \right| = \frac{k}{k_0} \quad \text{pour les états impairs}$$

4. Discuter qualitativement des solutions.
5. Exprimer l'énergie des photons émis en fonction de E_{e1} , E_g et E_{h1} .
6. Interpréter qualitativement, à partir de l'inégalité de Heisenberg spatiale, l'abaissement des niveaux d'énergie par rapport au puits infini

Exercice 5 Conformations de la molécule d'ammoniac

La molécule d'ammoniac NH_3 se présente sous la forme d'une pyramide symétrique, l'atome d'azote étant à son sommet. Les trois atomes d'hydrogène définissent le plan de référence. La position de l'atome d'azote est repérée par l'abscisse x telle que $|x|$ soit la distance de l'atome au plan de référence Oyz (figure 5).

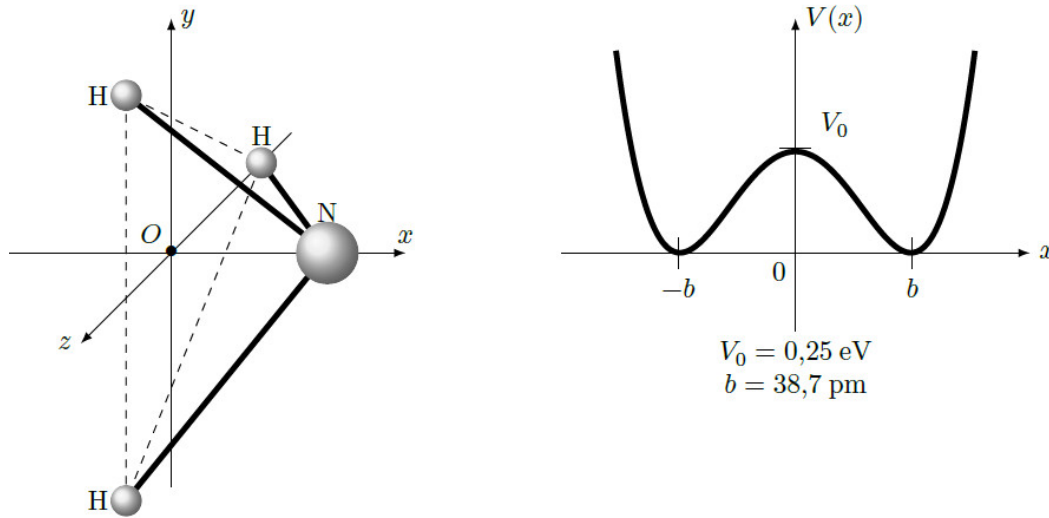


FIGURE 5 – Géométrie et énergie potentielle de la molécule d'ammoniac

1. Interpréter la forme, la symétrie et les points particuliers de la courbe d'énergie potentielle $V(x)$.

La molécule d'ammoniac peut se trouver dans deux états de conformation, selon que l'atome se trouve du côté $x > 0$ (conformation D, figure 6) ou du côté $x < 0$ (conformation G). Les deux états sont séparés par une barrière de potentiel $V_0 = 0,25 \text{ eV}$. On appelle inversion le passage d'une conformation à l'autre, lorsque l'atome d'azote traverse la barrière d'énergie due aux trois atomes d'hydrogène.

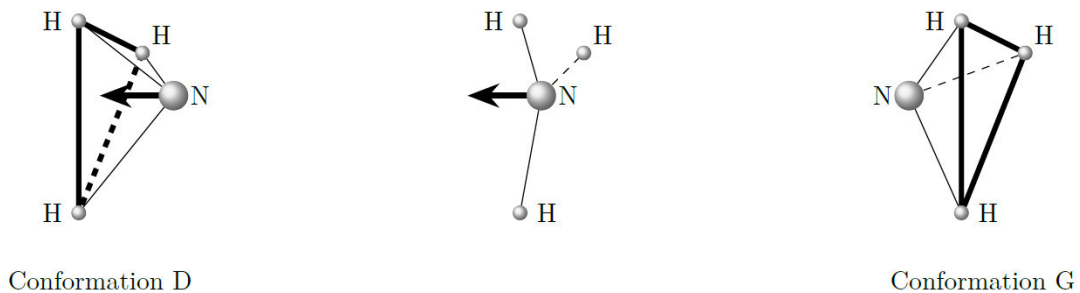


FIGURE 6 – Inversion de la molécule d'ammoniac

2. L'énergie $k_B T$ est-elle suffisante pour que la molécule puisse s'inverser à $T = 293 \text{ K}$ d'un point de vue classique ? À partir de quelle température cette inversion peut-elle s'effectuer ? Commenter.

On se propose de montrer que l'inversion de la molécule d'ammoniac est possible du point de vue quantique, indépendamment de la température. La fonction d'onde décrivant le mouvement relatif de l'atome d'azote et des trois atomes d'hydrogène est notée $\psi(x, t)$; elle vérifie l'équation de Schrödinger

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

où m est la masse réduite du système composé de l'atome d'azote et des trois atomes d'hydrogène (on prendra $m \approx 2,5 m_H$).

3. On s'intéresse aux états stationnaires d'énergie E et on pose $\psi(x, t) = \varphi(x) \exp(-iEt/\hbar)$. Déterminer l'équation différentielle vérifiée par $\varphi(x)$

On considère dans un premier temps un modèle de potentiel $V_1(x)$ à double puits infini symétrique rectangulaire (figure 7).

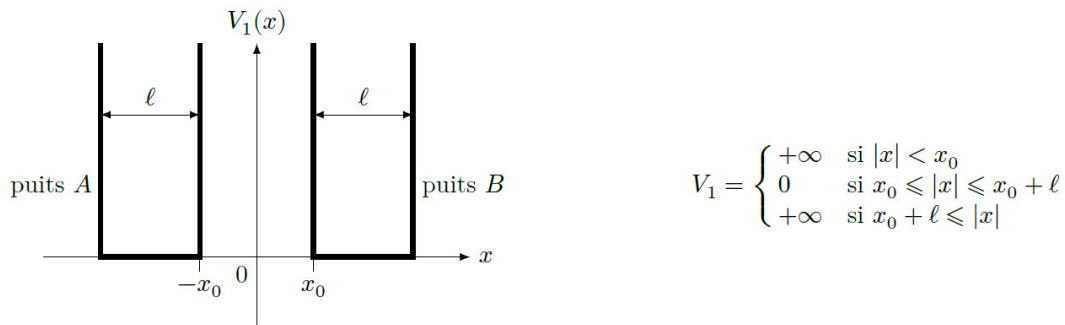


FIGURE 7 – Profil en double puits infini symétrique rectangulaire

Les fonctions d'onde localisées dans le puits A sont notées $\psi_A(x, t)$, celles localisées dans le puits B , $\psi_B(x, t)$. Les fonctions $\varphi(x)$ associées sont notées respectivement $\varphi_A(x)$ et $\varphi_B(x)$.

4. Que veut dire qu'une fonction d'onde est localisée sur un domaine ?
5. Pourquoi doit-on considérer les fonctions d'onde identiquement nulles pour $|x| < x_0$ et $|x| > x_0 + \ell$?
6. Quelles sont les conditions aux limites de $\varphi_A(x)$ et $\varphi_B(x)$?
7. Donner, sous forme intégrale, sans les calculer, les conditions de normalisation pour $\varphi_A(x)$ et $\varphi_B(x)$.
8. Résoudre l'équation différentielle pour le potentiel $V_1(x)$ dans l'intervalle $[-x_0 - \ell, -x_0]$ correspondant au puits A . On donnera les solutions normalisées $\varphi_{A,n}(x)$ indicées par un entier $n \in \mathbb{N}^*$ et les énergies E_n^A associées.
9. Quelles sont, sans calcul, les solutions $\varphi_B(x)$ et les énergies E_n^B ?
10. Soit une molécule d'ammoniac dans un état décrit par $\psi_{A,n}(x, t)$ d'énergie E_n^A à un instant t donné. Quelle est la probabilité de trouver l'atome d'azote dans l'intervalle $[x_0, x_0 + \ell]$ à l'instant $t' > t$? Conclure.

On modélise cette fois le profil d'énergie potentielle par un double puits infini rectangulaire à saut fini, $V_2(x)$ (figure 8).

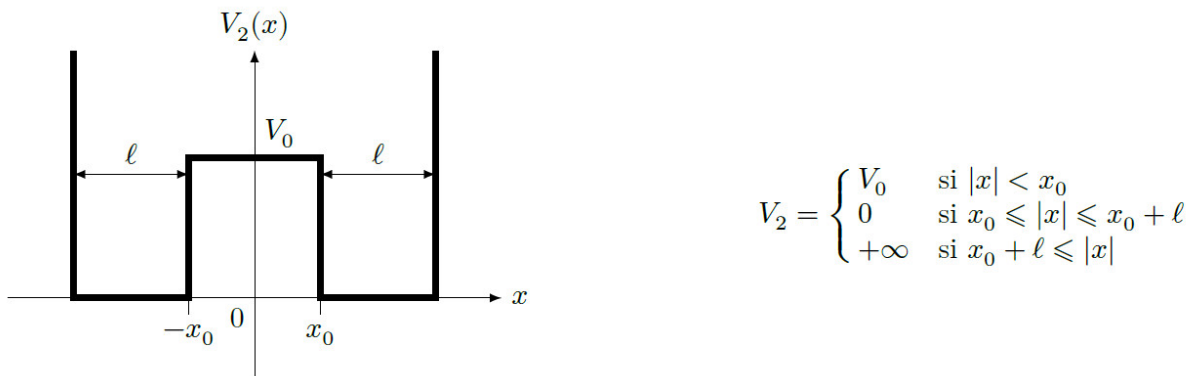


FIGURE 8 – Profil en double puits à saut fini

On donne $V_0 = 0,25 \text{ eV}$, $x_0 = 10 \text{ pm}$. On considère $0 \leq E \leq V_0$.

11. Justifier que dans le domaine $x_0 \leq x \leq x_0 + \ell$,

$$\varphi_B(x) = \mathcal{B} \sin(k(x - x_0 - \ell)) \quad \text{avec } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

où \mathcal{B} une constante que l'on ne cherchera pas à exprimer.

En déduire une forme de solution $\varphi_A(x)$ dans le domaine $-x_0 - \ell \leq x \leq -x_0$.



12. Dans le domaine $-x_0 < x < x_0$, $\varphi_C(x) = C_1 \cosh(Kx) + C_2 \sinh(Kx)$ où C_1 , C_2 et K sont des constantes. Exprimer K en fonction de E , V_0 , m et \hbar .
13. Quelles conditions doivent être vérifiées par la fonction d'onde $\psi(x, t)$ en tout point où le potentiel est borné? En déduire deux relations entre $\varphi_C(x_0^-)$, $\varphi_B(x_0^+)$, $\frac{d\varphi_C}{dx}(x_0^-)$ et $\frac{d\varphi_B}{dx}(x_0^+)$.
À partir de ces relations qui relient K à k , il est possible de déterminer l'énergie E de l'état stationnaire $\varphi(x)$, selon qu'il est symétrique (ou pair en x , ce qui conduit à $C_2 = 0$) ou antisymétrique (ou impair en x , donc $C_1 = 0$).

La première solution symétrique $\varphi_1^{\text{sym}}(x)$ d'énergie E_1^{sym} et la première solution antisymétrique, impaire en x , $\varphi_1^{\text{anti}}(x)$ d'énergie E_1^{anti} sont représentées en figure 9. Dans le cas où les énergies de ces deux états sont très petites devant V_0 , leur différence est

$$\delta E = E_1^{\text{anti}} - E_1^{\text{sym}} = \frac{4\pi^2 \hbar^3 \exp(-2x_0 \sqrt{2mV_0}/\hbar)}{m\ell^3 \sqrt{2mV_0}}$$

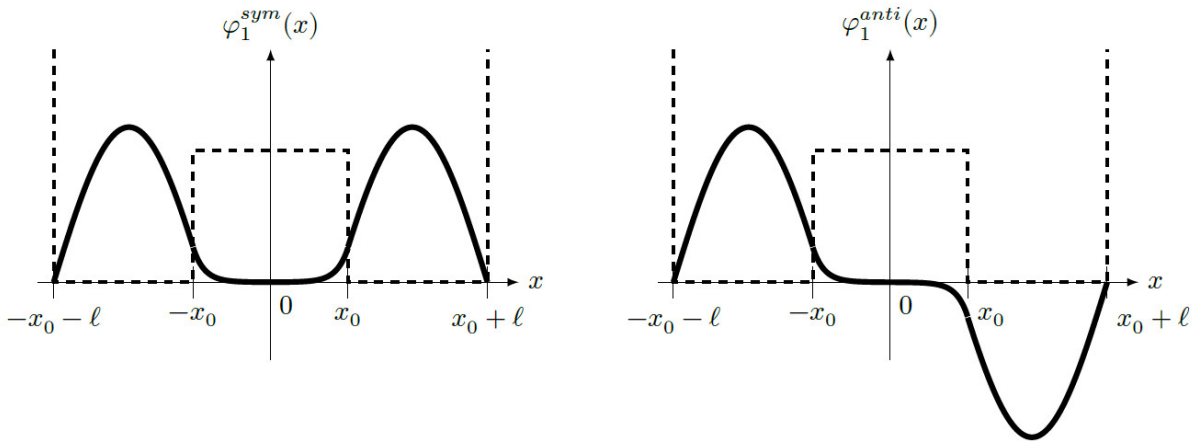


FIGURE 9 – Solutions φ_1^{sym} et φ_1^{anti}

À l'instant $t = 0$, la molécule d'ammoniac est dans une conformation G figure 10, décrite par la fonction d'onde

$$\psi(x, 0) = \varphi_G(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_1^{\text{sym}}(x) + \varphi_1^{\text{anti}}(x))$$

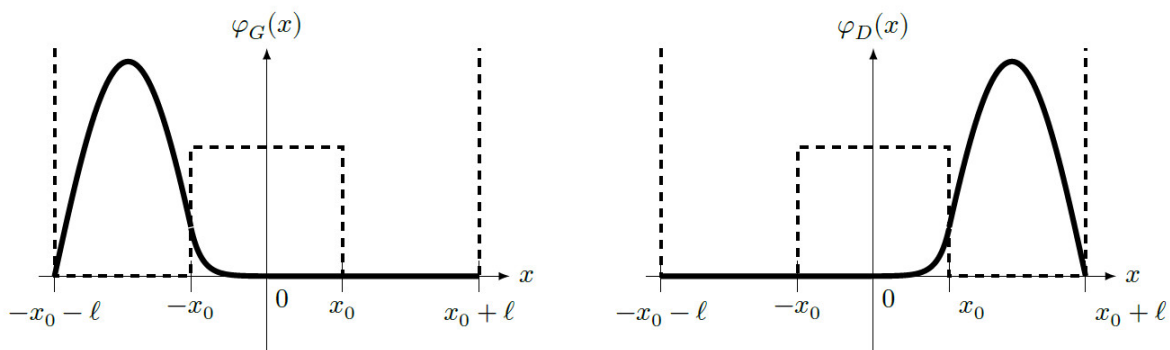


FIGURE 10 – Fonctions φ_G et φ_D

14. Écrire l'expression de la fonction d'onde $\psi(x, t)$ de la molécule d'ammoniac à un instant t quelconque, en fonction de φ_1^{sym} , φ_1^{anti} , des énergies E_1^{anti} et E_1^{sym} et de \hbar .
15. Pourquoi deux fonctions d'onde ψ_1 et ψ_2 telles que $\psi_1 = \psi_2 \exp(i\alpha)$, où $\exp(i\alpha)$ est un nombre complexe de module 1, décrivent-elles le même état physique?



16. En déduire que la fonction d'onde $\psi(x, t)$ décrit une évolution périodique de l'état de la molécule d'ammoniac, dont on exprimera la période τ en fonction de δE et de \hbar . Calculer la fréquence f correspondante si $\delta E = 9,85 \times 10^{-5}$ eV. Dans quel domaine spectral se situe une onde électromagnétique de fréquence f ?

C'est sur cette transition que fonctionna le premier maser construit par C. Townes, J. Gordon et H. Ziegler en 1954.

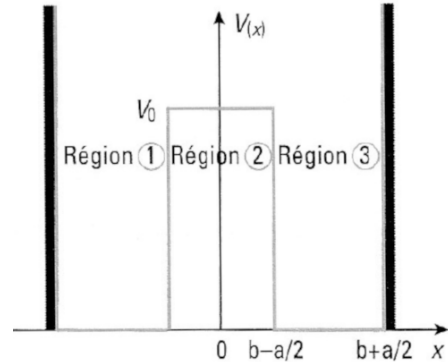
17. Décrire l'état de la molécule d'ammoniac à l'instant $t = \tau/2$. En quoi ce changement d'état entre les instants $t = 0$ et $t = \tau/2$ permet-il d'illustrer l'effet tunnel ?
18. Quelle est l'influence de la barrière de potentiel V_0 et de la largeur x_0 sur la fréquence d'oscillation f ? Pour l'arsine, de formule AsH_3 , de même structure que NH_3 , la hauteur de la barrière de potentiel est multipliée par six et sa largeur par cinq. Calculer la fréquence f' d'inversion de l'arsine ainsi que la période τ' . Commenter.

Exercice 6 Oscillation par effet tunnel dans un puits double

Une particule se déplace dans un puits de potentiel symétrique représenté ci-après. On appelle V_0 la hauteur de la barrière centrale, a la largeur du puits et b l'abscisse du centre de celui-ci. On considère que l'énergie de la particule est telle que $0 < E < V_0$.

On pose :

$$k_0 = \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar}, k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, K = \sqrt{k_0^2 - k^2} \text{ et } \ell = 2b - a$$



- Décrire qualitativement le comportement de la particule dans ce potentiel.
- Justifier que la symétrie du problème implique que les fonctions d'onde sont soit paires $\phi(-x) = \phi(x)$, soit impaires $\phi(-x) = -\phi(x)$.
- Quelles sont les conditions aux limites exploitables dans ce problème ?
- Montrer que les fonctions d'onde des états stationnaires dans chacune des 3 régions peuvent se mettre sous la forme :

$$\begin{aligned} \phi_1(x) &= A_1 e^{ikx} + A'_1 e^{-ikx} \\ \phi_2(x) &= A_2 e^{Kx} + A'_2 e^{-Kx} \\ \phi_3(x) &= A_3 e^{ikx} + A'_3 e^{-ikx} \end{aligned}$$

- Montrer que pour les fonctions d'onde paires, la condition de quantification de l'énergie se traduit par

$$\frac{K}{k} \tan(ka) = -\coth \frac{K\ell}{2}$$

On peut montrer de même (calcul non demandé) que pour les fonctions d'onde impaires, la condition de quantification de l'énergie s'exprime

$$\frac{K}{k} \tan(ka) = -\tanh \frac{K\ell}{2}$$

- Montrer alors que, dans le cas des états pairs, les fonctions d'onde ont pour expressions :

$$\begin{aligned} \phi_1(x) &= A \sin \left(k \left(b + \frac{a}{2} + x \right) \right) \\ \phi_2(x) &= -A \sin(ka) \frac{\cosh(Kx)}{\cosh \left(\frac{K\ell}{2} \right)} \\ \phi_3(x) &= A \sin \left(k \left(b + \frac{a}{2} - x \right) \right) \end{aligned}$$

avec

$$A = 2iA_1 e^{-ik \left(b + \frac{a}{2} \right)}$$

- Écrire la relation qui permettrait de déterminer l'expression de A (calcul non demandé)



8. On note $\phi_S(x)$ et E_S les fonctions d'onde et énergie des états pairs. De même, on note $\phi_A(x)$ et E_A les fonctions d'onde des états impairs. On place le système dans un état décrit par la fonction d'onde :

$$\phi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\phi_A(x) e^{\frac{-iE_A t}{\hbar}} + \phi_S(x) e^{\frac{-iE_S t}{\hbar}} \right)$$

Prévoir le comportement du système et donner l'expression de la fréquence d'oscillation au travers de la barrière de potentiel.