MQ2-TD

Particule quantique dans un puit de potentiel

MQ2 — 01 Petites questions indépendantes

1) Quelle est la longueur d'onde λ_n du n-ième mode propre de vibration d'une corde de longueur L fixée à ses deux extrémités ? En déduire le vecteur d'onde k_n correspondant. Les vecteurs d'onde d'une particule quantique dans un puits infini de largeur L ont une expression identique : en déduire alors les énergies possibles de la particule quantique dans le puits infini.

2) Résoudre l'équation de Schrödinger indépendante du temps pour le puits infini

$$\frac{\mathrm{d}^2\varphi}{\mathrm{d}x^2} + \frac{2\,m\,E}{\hbar^2}\,\varphi = 0$$

Préciser les conditions aux limites vérifiées par $\varphi(x)$ et obtenir $\varphi_n(x)$, la partie spatiale de la fonction d'onde du n-ième état stationnaire du puits infini.

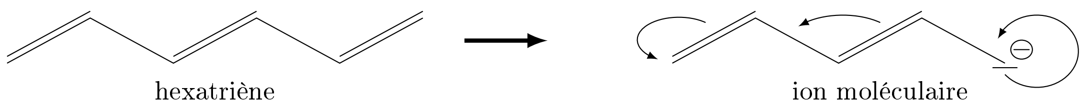
3) Tracer $\varphi(x)$ et $|\varphi(x)|^2$ pour les trois premiers états stationnaires.

4) Montrer à l'aide de l'inégalité de Heisenberg utilisée en ordre de grandeur que la particule quantique ne peut pas être au repos si elle est confinée.

5) Discuter les différences remarquables entre les états stationnaires du puits fini et ceux du puits infini.

MQ2 — 02 Molécule linéaire conjuguée

Certains pigments sont constitués d'ions moléculaires. On cherche ici à comprendre l'origine de leur couleur. Pour cela on considère une molécule de type $(C_nH_{n+2})^-$. Ce type d'ion est obtenu à partir de chaînes conjuguées ayant un nombre n pair d'atomes de carbone (comme l'hexatriène), auquel on a retiré un groupement $(CH)^+$ terminal, voir figure ci-dessous.



L'ion obtenu comporte alors un nombre impair $n-1$ d'atomes de carbone et n électrons engagés dans des liaisons π. On considère que la longueur de la chaîne est $L_n = (n-1)\,d$ avec $d = 1,40$ Å. Les électrons π sont supposés complètement indépendants ici. Ils se déplacent librement le long de la molécule modélisée par un potentiel unidimensionnel

$$V(x) = 0 \quad \text{si} \quad 0 \leqslant x \leqslant L_n \quad \text{et} \quad V(x) = +\infty \quad \text{sinon.}$$

1) Quels sont les niveaux d'énergies ε_k possibles pour un électron dans cette molécule ?

2) À cause du principe de Pauli, les électrons ne peuvent pas se ranger à plus de deux dans les niveaux ε_k. Obtenir alors l'énergie E_0 du niveau fondamental et celle E_1 du premier niveau excité pour la molécule de taille n. On rappelle que

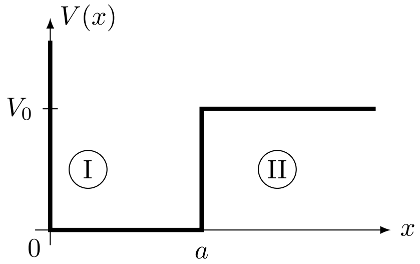
$$\sum_{k=1}^{n} k^2 = \frac{n\,(n+1)\,(2n+1)}{6}$$

3) Quelle est la longueur d'onde λ_n de la lumière absorbée lors de la transition de l'état fondamental vers le premier état excité ?

4) On observe expérimentalement que les ions $n = 9,\ 11$ et 13 absorbent respectivement dans le bleu, le jaune orangé et le rouge. Le modèle établi au dessus rend-il compte de ces observations ? Les ions ayant $n \geqslant 15$ ou $n \leqslant 7$ sont-ils colorés ?

MQ2 — 03 Puits semi-infini

Après avoir étudié dans le cours le puits infini puis le puits fini, on considère dans cet exercice une particule quantique de masse m et d'énergie E évoluant dans le potentiel suivant, infini d'un côté, fini de l'autre.



$$V(x) = \begin{cases} +\infty & \text{si} \quad x \leqslant 0 \\ 0 & \text{si} \quad 0 \leqslant x \leqslant a \qquad \text{(domaine I)} \\ V_0 & \text{si} \quad x \geqslant a \qquad \text{(domaine II)} \end{cases}$$

1) Quelle est la condition que doit vérifier l'énergie si on veut que la particule soit dans un état lié ?

2) On donne l'équation de Schrödinger stationnaire

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

Écrire la forme de $\varphi(x)$ dans les domaines I et II en toute généralité. On introduira les vecteurs d'onde k_0 (domaine I) et k (domaine II) ainsi que quatre constantes d'intégration A_{I}, B_{I}, A_{II} et B_{II}.

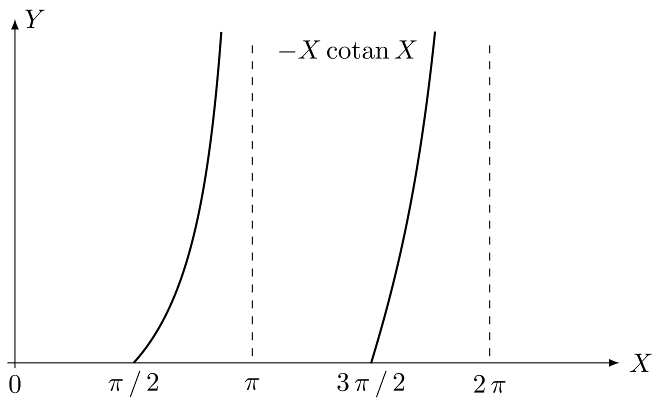
3) Quelles conditions aux limites sont vérifiées en $x = 0$ et en $x \to \infty$? En déduire la valeur de deux des quatre constantes.

4) Quelles conditions aux limites sont vérifiées en $x = a$? En déduire qu'il faut

$$-X \operatorname{cotan} X = Y \qquad \text{avec} \qquad X = k_0\,a \qquad \text{et} \qquad Y = k\,a$$

Quelle autre relation est vérifiée par X et Y ?

5) On donne la représentation graphique des deux premières branches de $x \operatorname{cotan} x$ ci dessous.



À quelle condition graphique un état lié existe-t-il ? Traduire ensuite cette condition sur V_0 en fonction de a.

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

7) Expliciter le lien entre cet exercice et les solutions impaires du puits fini.