

Double puits de potentiel et applications

On rappelle que $\hbar \approx 1,05 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$.

I Influence des symétries du potentiel

On étudie une particule de masse m soumise à un potentiel indépendant du temps $V(x)$. On s'intéresse aux états stationnaires de l'équation de Schrödinger de la forme $\psi(x, t) = \varphi(x)e^{-iEt/\hbar}$ où E représente l'énergie de la particule et $\varphi(x)$ une fonction non identiquement nulle.

1. Écrire l'équation différentielle vérifiée par $\varphi(x)$.
2. On suppose (dans cette question seulement) que $V(x)$ est paire. Soit $\varphi_0(x)$ une solution correspondant à un état stationnaire d'énergie E . Montrer que la fonction $\varphi_1 : x \mapsto \varphi_0(-x)$ correspond aussi à un état stationnaire d'énergie E . Un état stationnaire est dit *symétrique* (respectivement *antisymétrique*) si la fonction φ associée est paire (respectivement impaire). Montrer que, sans perte de généralité, on peut se contenter, pour trouver les états stationnaires, de les chercher parmi les états symétriques ou antisymétriques.

II Puits de potentiel asymétrique

On considère une particule de masse m soumise au potentiel représenté **figure 1** ($V(x) = +\infty$ pour $x \leq 0$). On note E_1 la valeur de l'énergie de l'état *fondamental* (état stationnaire d'énergie la plus faible). E_1 dépend *a priori* de V_0 .

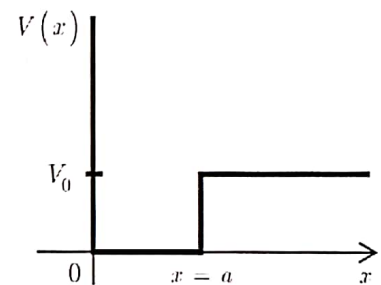


Figure 1

1. Dans le cas où $V_0 = +\infty$, donner la valeur $E_{1\infty}$ de E_1 et une expression de la fonction $\varphi(x)$ associée. Tracer le graphe de la fonction $\varphi(x)$.
2. Dans le cas où V_0 est assez grand, E_1 est proche de la valeur donnée à la question précédente. Préciser la signification physique de l'expression « V_0 est assez grand ». Quelle est la forme de $\varphi(x)$ pour $x > a$? Tracer et commenter l'allure du graphe de $\varphi(x)$ pour $x \in \mathbb{R}^+$. Justifier que $E_1 < E_{1\infty}$. Quelle est la raison physique de cette inégalité?
3. Pour quelles valeurs de E peut-on dire ici que l'état stationnaire étudié est un état lié, un état de diffusion? Dans le cas où l'état fondamental est un état lié, exprimer l'énergie de liaison en fonction de E_1 et des données du problème.

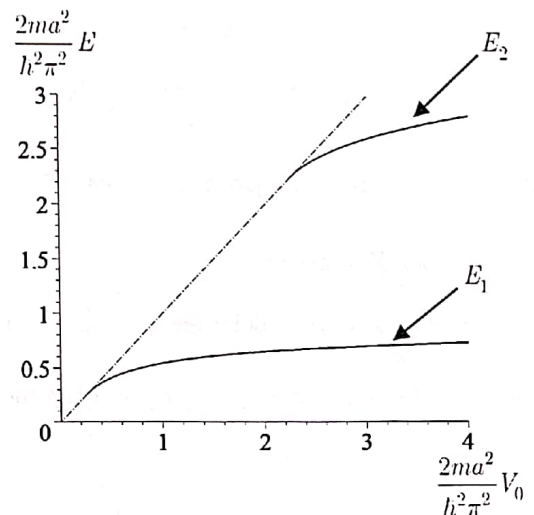
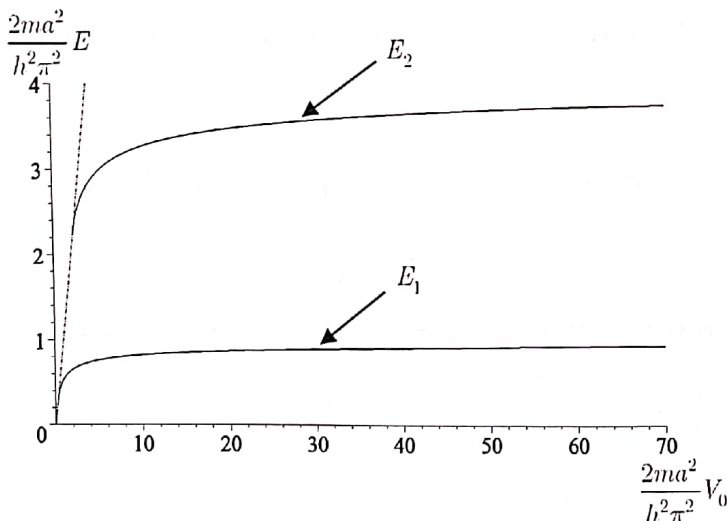


Figure 2

4. La figure 2 représente (traits continus) les énergies E_1 et E_2 des deux états stationnaires d'énergies les plus faibles en fonction de V_0 . Plus précisément, $\frac{2ma^2}{\hbar^2\pi^2}E$ est tracé (en ordonnée) en fonction de $\frac{2ma^2}{\hbar^2\pi^2}V_0$ (en abscisse). Les deux dessins correspondent à deux gammes différentes de variation de V_0 (voir les valeurs figurant en abscisse). On a également dessiné (en pointillés) le graphe de la fonction identité. Commenter ces graphes.

III Noyau de deutérium

Le noyau de deutérium est constitué par un neutron et un proton de même masse M en interaction forte. Il s'agit d'un problème à deux corps qu'on ramène à l'étude d'une particule fictive de masse réduite $m = M/2$, l'interaction est alors modélisée par le puits de potentiel de profondeur V_0 étudié dans la partie II. Sachant que l'énergie de liaison est 2,2 MeV et qu'il n'existe qu'un seul état lié pour le noyau de deutérium, donner une estimation numérique de V_0 en exploitant la figure 2.

On donne $a \approx 1,5 \times 10^{-15}$ m et $M \approx 1,7 \times 10^{-27}$ kg.

IV Double puits symétrique

Une particule de masse m évolue dans le double puits de la figure 3 (V est pair ; il est infini pour $|x| > a + \Delta/2$).

On cherche un état stationnaire symétrique d'énergie $E < V_0$ sous une forme dépendant de la zone (I, II ou III) :

$$\varphi_I(x) = \alpha \sin q \left(\frac{\Delta}{2} + a + x \right) \quad \text{zone où } V = 0 \text{ et } x < 0$$

$$\varphi_{II}(x) = \beta \operatorname{ch} \left(\frac{x}{x_0} \right) \quad \text{zone où } V = V_0$$

$$\varphi_{III}(x) = \alpha \sin q \left(\frac{\Delta}{2} + a - x \right) \quad \text{zone où } V = 0 \text{ et } x > 0$$

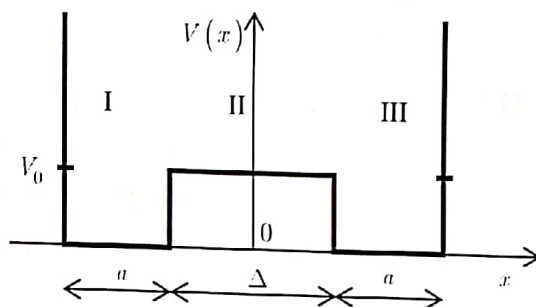


Figure 3

- Justifier ces expressions et donner l'expression des constantes positives x_0 et q en fonction de E et V_0 .
- Montrer que q doit vérifier $\tan qa = -qx_0 \coth(\Delta/2x_0)$.

On se place pour toute la suite du problème dans le cas où $E \ll V_0$ et $\Delta \gg x_0$.

3. Proposer une résolution graphique de l'équation précédente et en déduire un encadrement (éventuellement grossier) de la plus petite valeur de qa . Tracer l'allure du graphe de $\varphi(x)$ pour $x \in [-a - \Delta/2, a + \Delta/2]$.

4. D'après les questions précédentes, q dépend de Δ . Il en est de même pour l'énergie. On désire comparer la valeur de l'énergie pour $\Delta = \infty$ et $\Delta \gg x_0$ mais fini. En considérant que qa varie faiblement lorsque Δ varie, montrer que

$$(qa)_{\Delta=\infty} - (qa)_{\Delta \text{ fini}} \approx \frac{2\pi x_0}{a} \exp(-\Delta/x_0).$$

On rappelle que, lorsque $X \gg 1$, $\coth(X) \approx 1 + 2\exp(-2X)$ et que la dérivée de la fonction $X \mapsto \frac{\tan(X)}{X}$ vaut

$$\frac{1}{\pi} \text{ pour } X = \pi.$$

On peut alors en déduire (ne pas chercher à démontrer ce résultat) que $E_{\Delta=\infty} - E_{\Delta \text{ fini}} \approx A \exp(-\Delta/x_0)$ avec

$$A = 4 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \frac{x_0}{a} \text{ et } E_{\Delta=\infty} = E_1 \text{ (voir la partie II). Soit } E_{\Delta \text{ fini}} \approx E_1 - A \exp(-\Delta/x_0) < E_1$$

V Formation d'une liaison chimique

Le potentiel étudié en partie IV peut modéliser la formation de l'ion H_2^+ (un électron de masse m est soumis au potentiel créé par deux protons immobiles distants de Δ). L'action de chaque proton sur l'électron est modélisée par un puits de potentiel centré sur la position du proton ce qui conduit au potentiel de la figure 3. Les deux protons se repoussant, il faut ajouter à l'énergie étudiée (qui ne tient donc compte que du comportement de l'électron soumis au potentiel créé par les deux protons) l'énergie potentielle électrostatique proton-proton E_{pp} .

1. Exprimer E_{pp} en fonction de Δ .

~~FAUX~~ 2. Justifier qu'il est possible qu'il existe une valeur finie de Δ minimisant l'énergie totale de l'ion H_2^+ , pour laquelle l'énergie du système est inférieure à celle d'un atome H et d'un proton très éloigné.

VI La molécule d'ammoniac

1. L'état stationnaire étudié en partie IV est un état symétrique. Pour étudier complètement ce double puits, on doit aussi étudier les états antisymétriques (voir la partie I). Écrire, pour un tel état antisymétrique les formules analogues à celles données en préambule de la partie IV pour les zones I, II et III.

Un calcul analogue à celui de la partie IV montre alors que, pour l'état antisymétrique de plus faible énergie, $E_{\Delta=\infty} - E_{\Delta \text{ fini}} \approx -A \exp(-\Delta / x_0)$ avec, comme pour l'état symétrique, $E_{\Delta=\infty} = E_1$ et la même constante A . On pose $\Omega = \frac{E_{\text{antisym}} - E_{\text{sym}}}{\hbar} \approx \frac{2A}{\hbar} \exp\left(-\frac{\Delta}{x_0}\right)$. La figure 4 représente les fonctions $\varphi(x)$ (qui sont réelles) des états de plus faible énergie respectivement symétrique et antisymétrique dans le cas où $\Delta = a = 1$ (unités arbitraires).

2. À l'instant $t = 0$, la particule est dans l'état caractérisé par la fonction d'onde :

$$\psi(x, t = 0) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_{\text{sym}}(x) + \varphi_{\text{antisym}}(x))$$

Dessiner l'allure de $\|\psi(x, t = 0)\|^2$. Que peut-on dire concernant la localisation de la particule ?

3. Donner l'expression de $\psi(x, t)$.

4. On se place à la date $t = \frac{\pi}{\Omega}$. Dessiner l'allure de $\|\psi(x, t = \pi / \Omega)\|^2$. Que peut-on dire concernant la localisation de la particule ?

5. Décrire l'évolution au cours du temps de la position de la particule et expliquer le rôle de l'effet tunnel dans cette évolution.

6. La molécule d'ammoniac NH_3 est représentée classiquement par une pyramide à base triangulaire, le sommet de la pyramide étant occupé par l'atome N et les sommets de la base par les 3 atomes H. L'énergie dépend de la distance entre le plan des atomes H et l'atome N. L'étude faite dans les questions précédentes modélise le comportement de cette molécule, le rôle de la particule de masse m étant joué par l'ensemble des trois atomes d'hydrogène. Expliquer. On donne $A \exp\left(-\frac{\Delta}{x_0}\right) \approx 0,5 \times 10^{-4} \text{ eV}$. Calculer la fréquence d'oscillation de la molécule d'ammoniac.

Fonction d'onde symétrique

Les deux fonctions d'onde sur le même graphe

Fonction d'onde antisymétrique

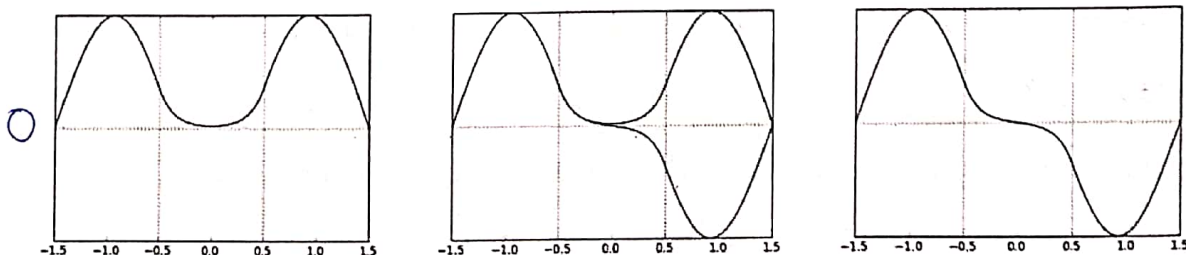


Figure 4

Principe d'une horloge atomique

La seconde est la durée de 9 192 631 770 périodes de la radiation correspondant à la transition entre les deux niveaux hyperfins de l'état fondamental de l'atome de césium.

Un petit nombre de laboratoires de métrologie réalisent l'unité de temps avec une exactitude ultime. En 2013, les meilleurs des étalons primaires délivrent la seconde du SI avec une incertitude-type relative de quelques 10^{-16} .

Le fonctionnement de l'horloge atomique à césium consiste à caler le plus précisément possible un champ électromagnétique hyperfréquence de pulsation réglable ω sur la pulsation $\omega_0 = 2\pi \times 9\,192\,631\,770 \text{ rad s}^{-1}$.

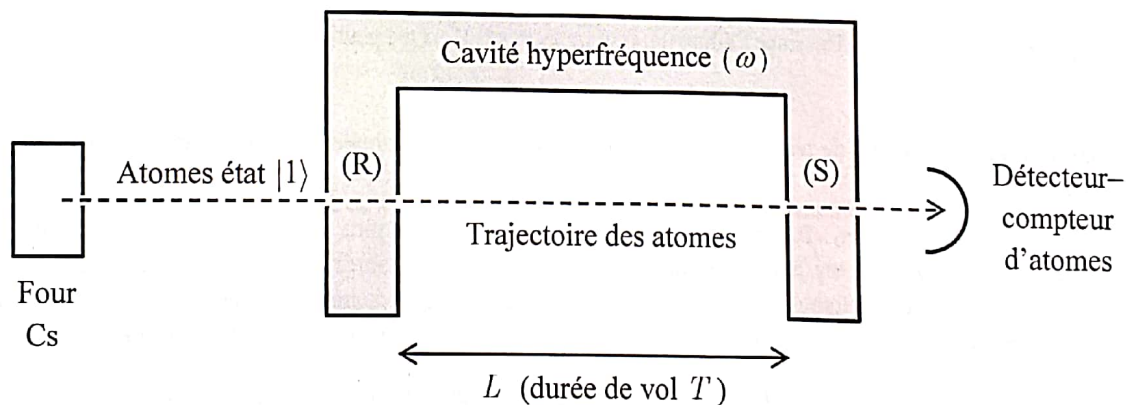
On considère que l'atome de césium possède deux états quantiques stationnaires notés $|1\rangle$ et $|2\rangle$ d'énergies respectives E_1 et E_2 avec $E_2 - E_1 = \hbar\omega_0 > 0$. On note φ_1 et φ_2 les fonctions d'onde associées solutions de l'équation de Schrödinger indépendante de t .

1. L'atome est dans l'état $|1\rangle$. Exprimer en fonction de φ_1 , E_1 et t la fonction d'onde $\psi_1(t)$ décrivant cet état.

Dans toute la suite du problème on étudie des états de l'atome superposition des états $|1\rangle$ et $|2\rangle$. On écrit donc la fonction d'onde sous la forme $\psi = a_1(t)\varphi_1 + a_2(t)\varphi_2$ où $a_1(t)$ et $a_2(t)$ sont complexes. Par ailleurs, sans perte de généralité, on fait un choix d'origine des énergies tel que $E_2 = -E_1 = \frac{\hbar\omega_0}{2}$.

2. Montrer qu'en notant $[H_0]$ la matrice 2×2 $[H_0] = \begin{bmatrix} -\omega_0/2 & 0 \\ 0 & +\omega_0/2 \end{bmatrix}$ on peut écrire :

$$i \frac{d}{dt} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = [H_0] \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} \quad (1)$$



À partir d'un four dans lequel est placé du césium, on prépare un jet atomique constitué d'atomes tous dans l'état $|1\rangle$. Les atomes vont traverser deux zones (R) et (S) de même largeur dans une cavité où règne un champ électromagnétique (onde stationnaire) de pulsation ω . On admet que dans chaque zone (R) ou (S), l'influence du champ électromagnétique sur l'atome se traduit par une modification de la matrice $[H_0]$. Elle doit être

remplacée par $[H] = \begin{bmatrix} -\omega_0/2 & ke^{i\omega t} \\ ke^{-i\omega t} & +\omega_0/2 \end{bmatrix}$ où k est un réel proportionnel à l'amplitude du champ régnant dans

la cavité, ω étant la pulsation des oscillations de ce champ. Dans ces zones, on peut donc écrire :

$$i \frac{d}{dt} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = [H] \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} \quad (2)$$

Le système différentiel (1) est facile à résoudre (question 3). De même on peut résoudre le système (2) (question 12). On obtient alors des relations du type $\begin{bmatrix} a_1(t) \\ a_2(t) \end{bmatrix} = [U](t, t_0) \begin{bmatrix} a_1(t_0) \\ a_2(t_0) \end{bmatrix}$ où $[U](t, t_0)$ est nommée « matrice d'évolution entre les dates t_0 et t ».

On étudie un atome entrant à la date t_0 dans la zone (R), en sortant à la date $t_0 + \tau$, entrant dans la zone (S) à la date $t_0 + \tau + T$ et en sortant à la date $t_0 + \tau + T + \tau$. Les matrices d'évolution sont donc :

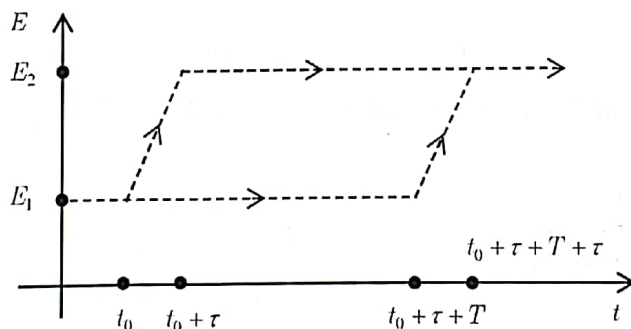
$$\begin{aligned} [R] &= [U](t_0 + \tau, t_0) && \text{traversée de la zone (R)} \\ [V] &= [U](t_0 + \tau + T, t_0 + \tau) && \text{traversée de la zone sans champ entre (R) et (S)} \\ [S] &= [U](t_0 + \tau + T + \tau, t_0 + \tau + T) && \text{traversée de la zone (S)} \end{aligned}$$

Pour toute matrice $[M]$, M_{jk} désigne le coefficient situé en ligne j et colonne k .

3. Montrer que $[V] = \begin{bmatrix} e^{i\omega_0 T/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\omega_0 T/2} \end{bmatrix}$.

4. L'état initial de l'atome étant $|1\rangle$, les conditions initiales sont $a_1(t_0) = 1$ et $a_2(t_0) = 0$. L'objectif est de calculer a_2 à la sortie. Montrer qu'il est donné par $a_2 = [0 \ 1][S][V][R] \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$ et l'exprimer en fonction des nombres complexes $S_{21}V_{11}R_{11}$ et $S_{22}V_{22}R_{21}$.

5. Interpréter le résultat comme un phénomène d'interférence faisant intervenir deux « chemins de phase » possibles pour l'atome, représentés par la figure ci-dessous.



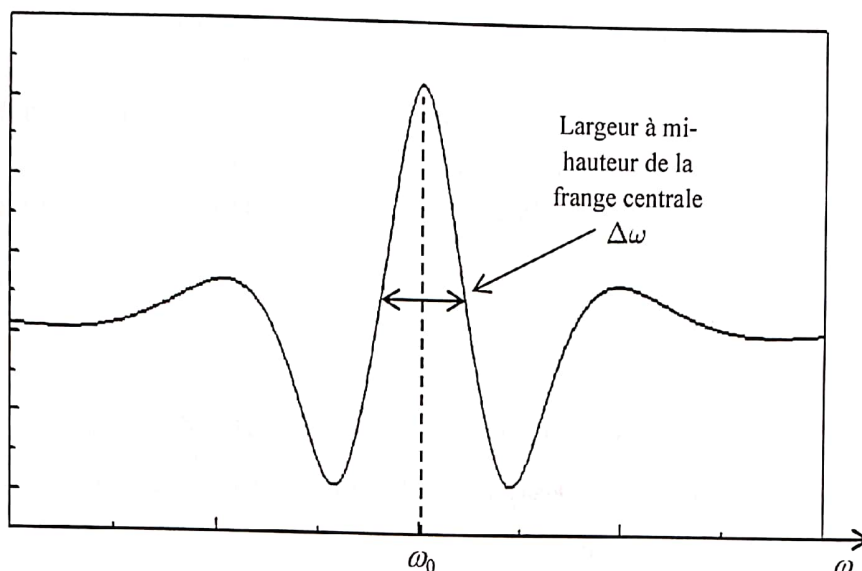
6. Dans la zone (R), pour $|\omega - \omega_0| \ll k$ et pour un réglage adéquat de l'amplitude du champ dans la cavité, la résolution du système (2) conduit à $[R] = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} e^{i\phi} & 0 \\ 0 & e^{-i\phi} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & -ie^{i\omega t_0} \\ -ie^{-i\omega t_0} & 1 \end{bmatrix}$ avec $\phi = \frac{\omega\tau}{2}$. (3)

Montrer que $S_{22}V_{22}R_{21} = -\frac{i}{2}e^{-i\omega t_0}e^{-2i\phi}e^{-i\omega_0 T/2}$.

7. Exprimer de même $S_{21}V_{11}R_{11}$.

8. À la sortie de (S), le détecteur sélectionne et compte les atomes dans l'état $|2\rangle$. La probabilité de trouver un atome dans l'état $|2\rangle$ est $p_2 = |a_2|^2$. Montrer que le nombre d'atomes détectés par unité de temps (débit) D_{out} en fonction du débit en entrée D_{in} est $D_{\text{out}}(\omega) = \frac{D_{\text{in}}}{2}(1 + \cos(\omega - \omega_0)T)$.

9. La courbe expérimentale ci-dessous, représentant $D_{\text{out}}(\omega)$, montre une perte de contraste dès qu'on s'écarte de la frange centrale. En raisonnant par analogie avec les résultats de l'étude des interférences lumineuses, identifier la cause de ce brouillage.

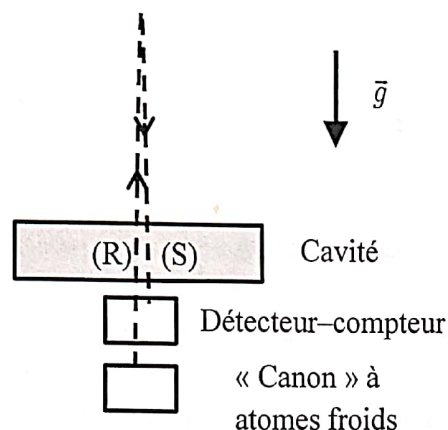


10. La précision avec laquelle on peut ajuster la fréquence du rayonnement hyperfréquence sur la fréquence caractéristique du césium $\frac{\omega_0}{2\pi}$ dépend de la largeur à mi-hauteur $\Delta f = \frac{\Delta\omega}{2\pi}$ de la courbe expérimentale. Exprimer Δf . AN pour des atomes de vitesse moyenne $v = 100 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ et $L = 1 \text{ m}$. Quelle précision relative obtient-on sur la fréquence de l'horloge si la précision de l'ajustement est $\frac{\Delta f}{100}$?

11. Le dispositif de « fontaine atomique » représenté ci-contre est une amélioration consistant à utiliser des « atomes froids » lancés à la verticale et passant à l'aller et au retour par la même zone (R) = (S). Quel est le gain en précision obtenu si la vitesse initiale des atomes est $v_0 = 4 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$?

12. Résoudre effectivement, pour $|\omega - \omega_0| \ll k$, les équations couplées (2) pour obtenir l'expression de la matrice $[R]$. Déterminer la valeur de k permettant d'obtenir le résultat (3).

On posera : $a_1(t) = b_1(t)e^{i\omega t/2}$ et $a_2(t) = b_2(t)e^{-i\omega t/2}$



Le projet PHARAO (Projet d'Horloge Atomique par Refroidissement d'Atomes en Orbite) permettra de placer en 2020 à bord de l'ISS (Station Spatiale Internationale) une horloge atomique utilisant des atomes de vitesse $v = 0,05 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ pour mesurer le temps avec une précision relative égale à 10^{-16} et tester la théorie de la relativité générale.

<https://pharao.cnes.fr/fr/PHARAO/Fr/index.htm>

Double puits de potentiel et applications

I.1. Équation de Schrödinger indépendante du temps : $E\varphi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi}{dx^2}(x) + V(x)\varphi(x)$

I.2. $\frac{d\varphi_1}{dx}(x) = -\frac{d\varphi_0}{dx}(-x)$ puis $\frac{d^2\varphi_1}{dx^2}(x) = +\frac{d^2\varphi_0}{dx^2}(-x)$. D'après I.1, $E\varphi_0(-x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi_0}{dx^2}(-x) + V(-x)\varphi_0(-x)$

Donc $E\varphi_1(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi_1}{dx^2}(x) + V(-x)\varphi_1(x)$. Mais, si $V(x)$ est paire, cette dernière relation signifie que φ_1 est, tout comme φ_0 solution de l'équation de Schrödinger (avec la même énergie). Si φ_0 est paire ou impaire, elle correspond à un état stationnaire symétrique ou antisymétrique. Si elle n'est ni paire ni impaire, par linéarité de l'équation, $\varphi_0 + \varphi_1$ (symétrique) et $\varphi_0 - \varphi_1$ (antisymétrique) sont solutions de l'équation, sont non nulles et correspondent donc à des états stationnaires d'énergie E . Comme $\varphi_0 = \frac{(\varphi_0 + \varphi_1)}{2} + \frac{(\varphi_0 - \varphi_1)}{2}$, tout état stationnaire s'obtient à partir d'états symétriques ou antisymétriques.

II.1. Question de cours : $E_1 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$. $\varphi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)$. Le graphe est une demi-période de la fonction sinus.

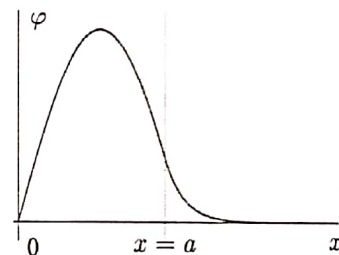
II.2. $V_0 \gg \frac{\hbar^2}{ma^2}$ (seule grandeur homogène à une énergie fonction des données du

problème). Pour $x > a$, $\varphi(x) \propto \exp(-x/\delta)$ c'est une onde évanescence.

Le graphe respecte la continuité de φ et de sa dérivée première en $x = a$. La

forme de $\varphi(x)$ pour $x < a$ est $\sin kx$ et le graphique montre que $ka < \pi$

donc $k < \pi/a$ et $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} < \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} = E_1$. Grâce à la partie évanescence



de l'onde, la particule est moins confinée si V_0 est fini. L'énergie de confinement (voir Heisenberg) est donc plus faible.

II.3. À grande distance, V vaut V_0 . Un état lié correspond à $E < V_0$, un état de diffusion à $E \geq V_0$. L'énergie de liaison est la différence entre l'énergie « à l'infini » et l'énergie de l'état lié, c'est-à-dire $E_{\text{liaison}} = V_0 - E_1$.

II.4. Pour $V_0 \rightarrow \infty$ on retrouve les états d'énergie quantifiés du puits infini soit $E_n = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$ (asymptotes d'ordonnées $1^2 = 1$ et $2^2 = 4$). E_1 et E_2 décroissent lorsque V_0 décroît (moins de confinement). Pour les faibles valeurs de V_0 , E_2 et E_1 rejoignent V_0 : l'état lié disparaît (le second niveau disparaît pour $V_0 \approx \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \times 2,25$ et le niveau fondamental pour $V_0 \approx \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \times 0,25$).

III. On calcule $\frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} = 178 \text{ MeV}$. L'énergie de liaison $V_0 - E_1 = 2,2 \text{ MeV}$ est donc très petite devant $\frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$. On doit donc considérer que $E_1 \approx V_0$ ce qui se produit (voir II.4) pour $V_0 \approx 0,25 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \approx 7 \times 10^{-12} \text{ J} \approx 44 \text{ MeV}$.

IV.1. φ_I et φ_{III} sont solutions de l'équation de Schrödinger avec $V = 0$ à condition que $q = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$. Ce sont les formes nécessaires pour assurer la parité de φ et l'annulation de φ là où le potentiel tend vers l'infini. φ_{II} est la

forme nécessaire pour que φ soit une solution paire de l'équation de Schrödinger avec $V = V_0$ à condition que

$$x_0 = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}.$$

IV.2. La continuité de φ en $x = -\Delta/2$ impose $\alpha \sin qa = \beta \operatorname{ch}(\Delta/2x_0)$ et la continuité de la dérivée conduit à $-\alpha q \cos qa = \beta/x_0 \operatorname{sh}(\Delta/2x_0)$. Il n'y a pas de condition supplémentaire en $x = -\Delta/2$ grâce à la parité des fonctions. Pour avoir $(\alpha, \beta) \neq (0, 0)$, il faut alors que $\tan qa = -qx_0 \coth(\Delta/2x_0)$.

IV.3. Pour $E \ll V_0$, $x_0 \approx \hbar/\sqrt{2mV_0}$ est une donnée. En posant $X = qa$, la condition devient $\tan X = -(x_0/a)X \coth(\Delta/2x_0)$. Il suffit de trouver une intersection entre le graphe de la fonction $\tan$ et la droite de pente (négative) $-(x_0/a) \coth(\Delta/2x_0)$. La plus petite valeur de X convenant est comprise entre $\pi/2$ et π . En fait, $qx_0 = \sqrt{\frac{E}{V_0 - E}} \approx \sqrt{\frac{E}{V_0}} \ll 1$ et pour $\Delta \gg x_0$, $\coth(\Delta/2x_0) \approx 1$ donc $\tan qa$ est proche de 0 et qa est proche de π . Le graphe de $\varphi(x)$ est sur la figure 4 de l'énoncé.

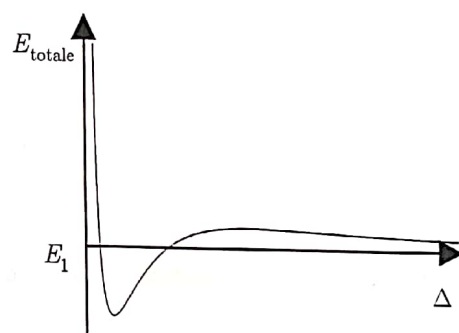
IV.4. L'équation vérifiée par qa est $\frac{\tan X}{X} = -\frac{x_0}{a} \coth\left(-\frac{\Delta}{2x_0}\right) \approx -\frac{x_0}{a} \left(1 + 2 \exp\left(-\frac{\Delta}{x_0}\right)\right)$. En assimilant le graphe de $\tan X/X$ à sa tangente au voisinage de π (de pente $1/\pi$) on en déduit que :

$$-\frac{2x_0}{a} \exp\left(-\frac{\Delta}{x_0}\right) = \frac{1}{\pi} [qa_{\Delta} - qa_{\Delta=\infty}]. \text{ cqfd}$$

Pour passer à l'énergie, on utilise $E = \frac{\hbar^2 q^2}{2m}$ (question IV.1) $\Rightarrow dE = \frac{\hbar^2 qa}{ma^2} d(qa) \Rightarrow \delta E \approx \frac{\hbar^2 \pi}{ma^2} \delta(qa)$

V.1. $E_{pp} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\Delta}$. Fonction décroissante de Δ tendant vers $+\infty$ en 0 et 0 en $+\infty$.

V.2. L'énergie totale est alors $E_1 - A \exp(-\Delta/x_0) + E_{pp}$. Pour les valeurs extrêmes ($\Delta \rightarrow 0$ ou $\Delta \rightarrow \infty$) la fonction décroissante $E_{pp}(\Delta)$ l'emporte mais pour les valeurs intermédiaires l'exponentielle (croissante) peut l'emporter. L'énergie présente alors un minimum (et un maximum). Le minimum peut être inférieur à E_1 . Or E_1 représente, dans ce modèle, l'énergie d'un état lié d'un électron soumis à l'action d'un seul proton. E_1 correspond donc à un atome d'hydrogène et



à un proton très éloigné (pour que $E_{pp} = 0$). Ce modèle peut donc expliquer la formation de l'ion H_2^+ .

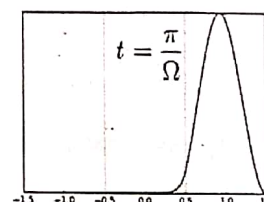
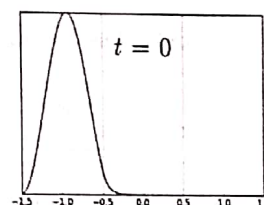
VI.1. $\varphi_I(x) = \alpha \sin q(\Delta/2 + a + x)$ $\varphi_{II}(x) = \beta \operatorname{sh}(x/x_0)$ $\varphi_{III}(x) = -\alpha \sin q(\Delta/2 + a - x)$

VI.2. Les deux fonctions d'onde sont pratiquement opposées pour $x > 0$. $\|\psi(x, t=0)\|^2$ n'est conséquent que dans le puits de gauche.

$$\text{VI.3. } \psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\varphi_{\text{sym}} e^{-i\frac{E_{\text{sym}}}{\hbar}t} + \varphi_{\text{antisym}} e^{-i\frac{E_{\text{antisym}}}{\hbar}t} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\frac{E_{\text{sym}}}{\hbar}t} (\varphi_{\text{sym}} + \varphi_{\text{antisym}} e^{-i\Omega t})$$

VI.4. Ici $e^{-i\Omega t} = -1$. Les deux fonctions se retranchent et la somme est pratiquement nulle pour $x < 0$. La particule est maintenant localisée à droite !

VI.5. La particule oscille donc entre les deux puits bien que son énergie soit très inférieure à la barrière de potentiel à franchir (V_0). L'effet tunnel permet ce phénomène en couplant les deux puits de potentiel. L'oscillation est de période $2\pi/\Omega$.



VI.6 Il y a *a priori* deux positions symétriques d'équilibre, pointe de la pyramide au-dessus ou en-dessous de la base. Ces positions correspondent à deux minima de potentiel modélisables par un double puits. La pyramide peut se retourner (comme un parapluie), le plan formé par les atomes H oscillant de part et d'autre de l'atome N par effet tunnel à la fréquence $\nu = \Omega / 2\pi \approx (A / \pi \hbar) \exp(-\Delta / x_0) \approx 24 \text{ GHz}$. C'est la fréquence du maser à ammoniac (1953 → Prix Nobel 1964 Townes + Basov et Prokhorov).

Principe d'une horloge atomique

1. Par définition d'un état stationnaire, (avec $\omega = E_1 / \hbar$) $\psi_1 = \varphi_1 e^{-iE_1 t / \hbar}$.

2. En appliquant le résultat de la question 1 aux états $|1\rangle$ et $|2\rangle$ et en superposant ces états, $a_1(t) = a_1(0) e^{-iE_1 t / \hbar}$ soit

$$\frac{da_1}{dt} = -i \frac{E_1}{\hbar} a_1 = +i \frac{\omega_0}{2} a_1. \text{ De même, } \frac{da_2}{dt} = -i \frac{E_2}{\hbar} a_2 = -i \frac{\omega_0}{2} a_2 ; \text{ cqfd.}$$

3. Le résultat est une conséquence de l'écriture de la question 2, $a_1(t) = a_1(0) e^{-iE_1 t / \hbar}$ avec $E_1 = -\frac{\hbar\omega_0}{2}$, de de l'équation analogue pour a_2 avec $E_2 = +\frac{\hbar\omega_0}{2}$ et du fait que la « durée de vol » sans champ est T .

4. En utilisant les trois étapes du mouvement, d'un atome, $\begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix}_{\text{sortie}} = [S][V][R] \begin{bmatrix} a_1(t_0) \\ a_2(t_0) \end{bmatrix}$.

Dans l'état initial $|1\rangle$, $\begin{bmatrix} a_1(t_0) \\ a_2(t_0) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$ et $\begin{bmatrix} 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix}_{\text{sortie}} = a_2 \text{ sortie} ; \text{ cqfd.}$

Le calcul du produit matriciel conduit (en utilisant le fait que $V_{21} = V_{12} = 0$) à $a_2 = S_{21}V_{11}R_{11} + S_{22}V_{22}R_{21}$.

5. Ce résultat pour l'amplitude de probabilité a_2 d'obtenir l'état $|2\rangle$ peut s'interpréter comme la superposition de 2 possibilités :

– traverser (R) sans changer d'état, parcourir L en tant qu'état $|1\rangle$ et devenir $|2\rangle$ en traversant (S)

– passer à l'état $|2\rangle$ en traversant (R), parcourir L en tant qu'état $|2\rangle$ et rester $|2\rangle$ en traversant (S)

Le schéma est analogue à celui d'un interféromètre de Mach-Zehnder, (R) joue le rôle d'une lame séparatrice, (S) celui d'une autre lame en sortie. Tout comme un photon qui est en même temps dans les deux bras de l'interféromètre, l'atome est en même temps dans les deux états $|1\rangle$ et $|2\rangle$.

6. Avec la relation (3), on calcule $[R] = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} e^{i\phi} & -ie^{i\omega t_0} e^{i\phi} \\ -ie^{-i\omega t_0} e^{-i\phi} & e^{-i\phi} \end{bmatrix}$ donc $R_{21} = -\frac{i}{\sqrt{2}} e^{-i\omega t_0} e^{-i\phi}$ et $R_{22} = \frac{e^{-i\phi}}{\sqrt{2}}$.

Comme $[S]$ est la même matrice que $[R]$ au remplacement près de t_0 par $t_0 + T + \tau$, $S_{22} = \frac{e^{-i\phi}}{\sqrt{2}}$. Alors on obtient

$$S_{22}V_{22}R_{21} = \frac{e^{-i\phi}}{\sqrt{2}} e^{-i\omega_0 T / 2} \left(\frac{-i}{\sqrt{2}} \right) e^{-i\omega t_0} e^{-i\phi} = -\frac{i}{2} e^{-i\omega t_0} e^{-2i\phi} e^{-i\omega_0 T / 2}.$$

7. À partir de R_{21} , en changeant t_0 en $t_0 + T + \tau$, $S_{21} = -\frac{i}{\sqrt{2}} e^{-i\omega(t_0 + T + \tau)} e^{-i\phi}$. On obtient alors

$$S_{21}V_{11}R_{11} = -\frac{i}{\sqrt{2}} e^{-i\omega(t_0 + T + \tau)} e^{-i\phi} e^{i\omega_0 T / 2} \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\phi} = -\frac{i}{2} e^{-i\omega t_0} e^{-i\omega \tau} e^{-i\omega T} e^{i\omega_0 T / 2}.$$

8. Alors $a_2 = -\frac{i}{2} e^{-i\omega_0 t_0} e^{-i\omega \tau} e^{-i\omega T} e^{i\omega_0 T/2} - \frac{i}{2} e^{-i\omega_0 t_0} e^{-2i\phi} e^{-i\omega_0 T/2} = -\frac{i}{2} e^{-i\omega_0 t_0} e^{-i\omega \tau} e^{-i\omega T/2} \left(e^{-i\omega T/2} e^{i\omega_0 T/2} + e^{-i\omega_0 T/2} e^{i\omega T/2} \right)$

donc $a_2 = -i e^{-i\omega_0 t_0} e^{-i\omega \tau} e^{-i\omega T/2} \cos(\omega_0 - \omega) T / 2$ et $|a_2|^2 = \cos^2(\omega_0 - \omega) T / 2 = \frac{1}{2} (1 + \cos(\omega_0 - \omega) T)$. En multipliant le débit en entrée par cette probabilité, on obtient le débit en sortie d'atomes dans l'état $|2\rangle$.

9. Le débit théorique est comparable à l'intensité lors d'une interférence lumineuse à deux ondes : $I = \frac{I_{\max}}{2} \left(1 + \cos \frac{2\pi \delta}{\lambda} \right)$

. Ici la variable est $\omega_0 - \omega$ à la place de δ . Or on sait que, pour les interférences lumineuses, le contraste diminue si $|\delta|$ augmente à cause de l'incohérence temporelle (présence de plusieurs longueurs d'ondes). Ici l'analogue de $\frac{2\pi}{\lambda}$ est

$T = \frac{L}{vitesse}$. Le contraste des franges diminue donc si $|\omega_0 - \omega|$ augmente à cause de la présence de différentes valeurs de vitesses des atomes. En effet, le jet atomique issu du four n'est pas, *a priori*, homocinétique (distribution thermique des vitesses).

10. À mi-hauteur, $\cos(\omega_0 - \omega) T = 0$ donc $\frac{\Delta\omega}{2} T = \frac{\pi}{2}$ d'où $\Delta f = \frac{\Delta\omega}{2\pi} = \frac{1}{2T} = \frac{v}{2L} = 50 \text{ Hz}$. Si on arrive à caler la fréquence des ondes électromagnétiques pour rester à moins de $\frac{\Delta f}{100}$ du sommet du pic, la précision relative sur la fréquence est meilleure que $\frac{\Delta f}{100 f_0} = 5 \times 10^{-11}$.

11. La durée de montée est v_0 / g donc la durée de vol $2v_0 / g = 0,8 \text{ s}$ soit 80 fois plus qu'à la question 11. On gagne un facteur $80 \approx 100$ sur la précision de l'horloge.

12. Les équations à résoudre sont $\frac{da_1}{dt} = i\frac{\omega_0}{2} a_1 - ik e^{i\omega t} a_2$ et $\frac{da_2}{dt} = -i\frac{\omega_0}{2} a_2 - ik e^{-i\omega t} a_1$. En utilisant b_1 et b_2

$$\frac{da_1}{dt} = i\frac{\omega}{2} b_1 e^{i\omega t/2} + \frac{db_1}{dt} e^{i\omega t/2} \text{ et la première équation donne } i\frac{\omega}{2} b_1 e^{i\omega t/2} + \frac{db_1}{dt} e^{i\omega t/2} = i\frac{\omega_0}{2} b_1 e^{i\omega t/2} - ik e^{i\omega t} b_2 e^{-i\omega t/2}$$

$$\text{c'est-à-dire } \frac{db_1}{dt} = i\frac{\omega_0 - \omega}{2} b_1 - ik b_2. \text{ De même, la seconde équation devient } \frac{db_2}{dt} = -i\frac{\omega_0 - \omega}{2} b_2 - ik b_1.$$

Si on néglige $|\omega_0 - \omega|$ devant k :

$$\begin{aligned} \frac{db_1}{dt} = -ik b_2 &\Rightarrow \frac{d}{dt}(b_1 + b_2) = -ik(b_1 + b_2) \Rightarrow (b_1 + b_2)_{t_0+\tau} = (b_1 + b_2)_{t_0} e^{-ik\tau} \Rightarrow b_1 = b_{1t_0} \cos k\tau - ib_{2t_0} \sin k\tau \\ \frac{db_2}{dt} = -ik b_1 &\Rightarrow \frac{d}{dt}(b_1 - b_2) = +ik(b_1 - b_2) \Rightarrow (b_1 - b_2)_{t_0+\tau} = (b_1 - b_2)_{t_0} e^{+ik\tau} \Rightarrow b_2 = -ib_{1t_0} \sin k\tau + b_{2t_0} \cos k\tau \end{aligned}$$

$$\text{On choisit } k\tau = \frac{\pi}{4} \text{ (} 2\pi \text{) pour avoir } \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix}_{t_0+\tau} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & -i \\ -i & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix}_{t_0}.$$

$$\text{On obtient alors l'expression (3) de la matrice } [R] \text{ en utilisant } \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix}_t = \begin{bmatrix} e^{i\omega t/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\omega t/2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix}_t.$$