

EXERCICE 1 : TRANSFERT THERMIQUE

Le stockage des déchets radioactifs constitue un problème majeur de la technologie nucléaire. De nombreuses solutions sont à l'étude. Une d'entre elles a pour but d'enfouir, dans la roche, ces résidus inutilisables en les incorporant au béton. On se propose, ici, d'étudier un des problèmes posés par cette méthode : le contrôle de la production de chaleur. L'espace est rapporté, en coordonnées cartésiennes, à un repère orthonormé direct (Ox, Oy, Oz) de base $(\vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z)$.

Une barre d'épaisseur ℓ , comprise entre deux plans infinis et parallèles, perpendiculaires à l'axe Ox , est constituée d'un matériau de conductivité thermique λ , de masse volumique ρ et de capacité thermique massique c . Les grandeurs λ , ρ et c sont constantes, et les dimensions de la barre sont invariables.

La face F_1 , d'abscisse $x = 0$, est maintenue à la température T_1 constante. La seconde face F_2 , située en $x = \ell$, se trouve à une température $T(x = \ell)$. Soit Φ le flux thermique qui traverse une section droite, d'aire S , orthogonale à l'axe Ox et orientée par le vecteur unitaire $\vec{e}_x$. On note $\vec{j}_{th}$ le vecteur densité de flux thermique. Les parois latérales de la barre sont calorifugées (Voir figure 1).

PARTIE I - CONDUCTION THERMIQUE SIMPLE DANS LE MATERIAU

La face F_2 est maintenue à la température T_2 (avec $T_1 > T_2$). On considère la tranche cylindrique de section droite, d'aire S , comprise entre les plans d'abscisse x et $x + dx$.

I.1°/ Énoncer la loi de Fourier.

I.2°/ Montrer que : $\frac{\partial j}{\partial x} = -\frac{\partial u}{\partial t}$; avec u l'énergie interne de la barre par unité de volume.

I.3°/ En déduire que le long de la tranche cylindrique, la température vérifie la relation : $\frac{\partial T}{\partial t} = A \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$

I.4°/ Exprimer la constante A , en fonction de λ , ρ et c . Quelle est son unité ?

I.5°/ Déterminer l'expression de $T(x)$ en régime stationnaire.

I.6°/ Donner, en fonction de λ , ℓ , S , T_1 et T_2 , l'expression du flux thermique Φ à travers une section droite de surface S , orientée par le vecteur unitaire $\vec{e}_x$. En déduire l'expression de la résistance thermique du milieu.

I.7°/ Tracer l'allure de la courbe représentative de la fonction $T(x)$.

PARTIE II - DIFFUSION THERMIQUE DANS UN COMBUSTIBLE NUCLEAIRE

Le matériau est maintenant un mélange de résidus radioactifs et de béton, supposé homogène et de conductivité thermique λ_m . Il se dégage, dans ce matériau, une puissance thermique volumique p_i , créée par les réactions nucléaires résiduelles qui s'y produisent et répartie uniformément dans tout le volume. Les faces F_1 et F_2 sont toujours maintenues aux températures respectives T_1 et T_2 . Le système est stationnaire et la température $T(x)$ ne dépend que de l'abscisse x .

II.1°/ Effectuer le bilan d'énergie dans cette tranche d'épaisseur dx .

II.2°/ Établir l'équation différentielle vérifiée par $T(x)$.

II.3°/ En déduire l'expression de $T(x)$.

II.4. Établir, pour une section S d'aire unité, les expressions des flux thermiques algébriques Φ_0 et Φ_ℓ mis en jeu, respectivement, en $x = 0$ et en $x = \ell$.

II.5°/ Que devient, toujours en régime stationnaire, la puissance thermique créée au sein du matériau étudié ?

II.6°/ Pour des raisons de sécurité, chacune des faces F_1 et F_2 est protégée par une plaque métallique collée contre elle, d'épaisseur et de résistance thermique négligeables. Ce coffrage est arrosé en permanence avec de l'eau froide et on considère que ces plaques métalliques, ainsi que les faces qu'elles protègent, sont à la température T_0 de l'eau ($T_1 = T_2 = T_0$).

II.6.1°/ Déduire la nouvelle expression de la température $T(x)$.

II.6.2°/ Déterminer l'abscisse $x = x_m$ pour laquelle la température est maximale notée T_m .

II.6.3. Donner, en fonction de p_i , ℓ , λ et T_0 , l'expression de la température maximale T_m .

II.6.4. Tracer l'allure de $T(x)$.

II.6.5°/ Quelle est l'influence de l'épaisseur ℓ sur la température maximale T_m ?

II.6.6°/ Calculer, en $x = \ell$, le flux Φ_ℓ à travers une section droite S , d'aire unité (1m^2). Calculer T_m .

Application numérique : $p_i = 3 \text{ kW/m}^3$; $\ell = 0,5 \text{ m}$; $\lambda_m = 1,20 \text{ W m}^{-1}\text{K}^{-1}$ et $T_0 = 290 \text{ K}$.

PARTIE III - Refroidissement par échange radio-convectif

La face F_1 est maintenue à la température T_0 . Seule la plaque métallique, en contact avec la face F_2 , n'est plus arrosée, et les échanges superficiels ne s'y font plus que par rayonnement et convection avec l'air extérieur qui est à la température T_{ext} constante (figure 1).

III.1°/ Etablir le bilan des flux radiatifs ϕ_R relatif à la surface S de F_2 en supposant que le matériau et le

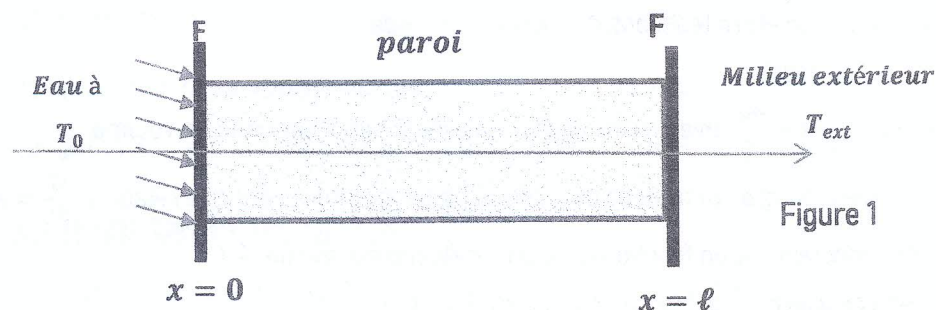


Figure 1

milieu extérieur émettent du rayonnement thermique similairement à un corps noir.

III.2°/ En faisant une approximation du premier ordre de T^4 au voisinage de T_{ext} ($\Delta T \ll T_{\text{ext}}$), Déterminer la nouvelle expression de ϕ_R . Soit $\Phi_R = h_R S (T_{\text{ext}} - T)$. Identifier h_R et définir son unité.

En tenant compte des deux modes de transfert thermique à la face F_2 , on pourra définir un coefficient d'échange global radio-convectif, noté h_{RC} .

III.3°/ Exprimer le coefficient h_{RC} en fonction de h (coefficient de transfert par convection), σ et T_{ext} . En déduire l'expression du flux global radio-convectif ϕ_{RC} .

III.4°/ Quelle relation simple existe-t-il, en $x = \ell$ et pour une même surface S , entre le nouveau flux de conduction, noté Φ' et le flux radio-convectif ϕ_{RC} ?

III.5°/ Déterminer l'expression de $T(x)$.

III.6°/ Calculer le nouveau flux Φ' , en $x = \ell$, pour une section droite d'aire unité (1 m^2).

A.N. : $p_i = 3 \text{ kW m}^{-3}$; $\ell = 0,50 \text{ m}$; $h = 5 \text{ W m}^{-2}\text{K}^{-1}$; $\lambda_m = 1,20 \text{ W m}^{-1}\text{K}^{-1}$; $T_0 = T_{ext} = 290 \text{ K}$. La constante de Stefan $\sigma = 5,69 \cdot 10^{-8} \text{ W m}^{-2}\text{K}^{-4}$.

III.7°/ Comparer la valeur des flux ϕ_ℓ , (calculé au II.6.6.) et Φ' . Que peut-on en conclure ?

III.8°/ Donner la limite de la valeur $T(x = \ell)$ lorsque le coefficient d'échange h_{RC} tend vers l'infini.

EXERCICE 2 : MECANIQUE QUANTIQUE

PARTIE 1 : EFFET PHOTOELECTRIQUE SUR LES METAUX

✓ Approche classique :

Une cellule photoélectrique en lithium (Li) est placée à une distance L d'une source de lumière (supposée ponctuelle et isotrope) de puissance P .

1. Exprimer la densité surfacique de puissance P_s émise par la source à une distance L .
2. Si λ_s est la longueur d'onde seuil de la cellule (la longueur d'onde qui correspond à l'extraction d'un électron), quel est l'énergie d'extraction d'un électron.
3. Quel temps t prévoit l'aspect ondulatoire de lumière pour qu'un atome de lithium collecte suffisamment d'énergie pour éjecter un photoélectron ?

Indication : l'atome de lithium est assimilé à un disque de rayon r .

On donne : $r = 1,4 \text{ \AA}$, $L = 1 \text{ m}$, $P = 21 \text{ mW}$ et $\lambda_s = 5391 \text{ \AA}$, $h = 6,62 \cdot 10^{-34} \text{ J.s}$ et $c = 3 \cdot 10^8 \text{ m.s}^{-1}$

4. Dans le cas où la source de lumière émet une seule raie de longueur d'onde $\lambda = 2\lambda_s$ que vaut le temps d'attente ?
5. Les durées d'attente calculées dans les deux questions précédentes sont-elles réalistes ? Discuter.

✓ Approche quantique :

Sachant que pour extraire un électron d'un métal il faut lui fournir une énergie qui puisse compenser le travail des forces qui le relie au métal et l'excès est transformé en une énergie cinétique E_c .

6. Écrire la condition nécessaire pour qu'une onde lumineuse de fréquence ν puisse extraire les électrons du métal.
7. En déduire la fréquence seuil ν_s des radiations produisant un effet photoélectrique sur ce métal.
8. Exprimer la contre tension maximale V_0 (potentiel d'arrêt) capable d'annuler le courant sachant $E_c = e|V_0|$.

PARTIE 2 : ÉTUDE D'UN Puits DE POTENTIEL

La description de l'état d'une particule en un point M à l'instant t se fait au moyen d'une fonction d'onde complexe $\psi(M, t)$ qui obéit à la fameuse équation de Schrödinger :

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

On s'intéresse à la solution stationnaire unidimensionnelle de cette équation de la forme

$$\underline{\psi}(x, t) = \varphi(x) \exp\left(-i \frac{E}{\hbar} t\right)$$

1. Expliquer physiquement la signification du carré de la fonction d'onde $\underline{\psi}(x, t)$?
2. Soit $\vec{j}(x, t)$ le courant de probabilité de la forme

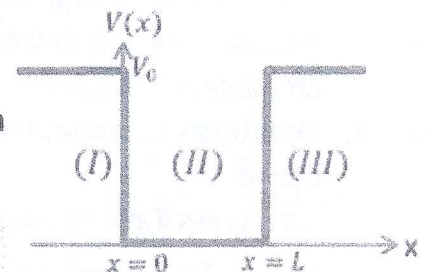
$$\vec{j}(x, t) = \frac{i\hbar}{2m} \left(\underline{\psi}(x, t) \cdot \frac{\partial \underline{\psi}^*(x, t)}{\partial x} - \underline{\psi}^*(x, t) \frac{\partial \underline{\psi}(x, t)}{\partial x} \right) \vec{e}_x$$

Montrer que toutes les solutions de l'équation de Schrödinger vérifient l'équation : $\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} + \frac{\partial \vec{j}(x, t)}{\partial x} = 0$

3. On considère une particule libre de masse m , d'énergie totale E dont l'état peut être décrit par la fonction $\underline{\psi}(x, t) = A \exp(i(kx - \omega t))$. Donner la relation qui existe entre k et ω pour que cette onde soit compatible avec l'équation de Schrödinger. En déduire la valeur de l'énergie E en fonction de ω . L'onde plane progressive monochromatique satisfait-elle les conditions de normalisation de la fonction ? A étant une constante réelle.
4. Déterminer le courant de probabilité dans le cas de la fonction d'onde plane $\underline{\psi}(x, t)$.

Particule piégée dans un puits de potentiel

Soit une particule de masse m d'énergie E se trouve piégée dans un puits de potentiel carré de la figure ci-contre tel que $0 < E < V_0$.



Cas 1 : Puits de potentiel fini $V_0 = \text{Cte}$

5. Donner l'expression l'équation de Schrödinger stationnaire.
6. Résoudre cette dernière dans les trois régions. Soit $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ et $q^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}$
7. Expliciter les conditions de continuité aux points en $x = 0$ et $x = L$.
8. Déduire la condition à laquelle doivent satisfaire E et V_0 (Condition de quantification).

Cas 2 : Puits de potentiel infini $V_0 = \infty$

9. Que deviennent les solutions de l'équation de Schrödinger dans les régions $x < 0$ et $x > L$?
10. Donner les conditions aux limites vérifiées par la fonction d'onde $\psi(x, t)$, en $x = 0$ et $x = L$.
11. Résoudre l'équation de Schrödinger pour une particule piégée dans le puits et montrer que les solutions stationnaires peuvent s'écrire : $\psi_n(x, t) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(k_n x) \exp\left(-i \frac{E_n}{\hbar} t\right)$
12. Donner les valeurs de k et de E compatibles avec les conditions aux limites et montrer que les valeurs de E possibles sont discrètes.
13. Donner l'expression de la fonction d'onde $\psi_n(x, t)$ pour les deux premiers états quantiques ($n = 1$ et $n = 2$). Déduire la densité de probabilité de présence et la représenter pour les deux premières valeurs du nombre quantique n .

14. Considérons une particule décrite par une fonction d'onde $\underline{\psi}(x, t)$ combinaison linéaire de deux états stationnaires d'un puits quantique infiniment profond :

$$\underline{\psi}(x, t) = \alpha_1 \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\pi \frac{x}{L}\right) e^{-i \frac{E_1}{\hbar} t} + \alpha_2 \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(2\pi \frac{x}{L}\right) e^{-i \frac{E_2}{\hbar} t} \quad (0 < x < L)$$

Montrer la relation suivante $\alpha_1^2 + \alpha_2^2 = 1$. On choisit $\alpha_1 = \alpha_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$.

15. Donner l'expression alors de $\underline{\psi}(x, t)$.
16. Montrer que La densité de probabilité de présence de $\rho(x)$ dépend explicitement du temps et qu'une superposition de deux états stationnaires peut engendrer un état non stationnaire, c-à-d il y a évolution au cours du temps de l'état de la particule dont on déterminera la fréquence d'oscillation.

EXERCICE 3 : OSCILLATEUR HARMONIQUE

L'oscillateur harmonique est d'une grande importance en théorie quantique car il intervient dans tous les problèmes mettant en jeu des oscillations quantifiées telles que les vibrations moléculaires et cristallines. De plus, c'est aussi un système simple dont on sait résoudre parfaitement l'équation de Schrödinger.

PARTIE 1. OSCILLATEUR HARMONIQUE QUANTIQUE

On considère un oscillateur harmonique à une dimension de masse m et de pulsation ω , se déplaçant le long de l'axe Ox . Il est soumis au potentiel harmonique $V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$, où x représente l'écart par rapport à l'origine O . On s'intéresse aux états stationnaires de cet oscillateur définis par la fonction d'onde d'énergie E :

$$\psi(x, t) = \varphi(x) \exp\left(-i \frac{E}{\hbar} t\right)$$

L'énergie de cet oscillateur en fonction de sa position x et de sa quantité de mouvement p_x s'écrit :

$$E = \frac{p_x^2}{2m} + V(x) .$$

- 1.1. Donner l'équation aux dimensions de la constante de Planck réduite $\hbar$.
- 1.2. Écrire l'équation de Schrödinger spatiale dont $\varphi(x)$ est la solution.
- 1.3. Vérifier que, par un changement de variable ($\varepsilon = \frac{E}{\hbar \omega}$ et $X = \sqrt{\frac{m \omega}{\hbar}} x$), l'équation de Schrödinger spatiale peut se réduire à une équation adimensionnée :

$$\frac{\partial^2 \varphi(X)}{\partial X^2} + (2\varepsilon - X^2) \varphi(X) = 0$$

On donne la fonction d'onde spatiale du fondamental de l'oscillateur harmonique étudié :

$\varphi_0(x) = A_0 \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right)$, A_0 étant une constante.

1.4. Déterminer l'énergie E_0 associée à la fonction d'onde $\varphi_0(x)$ en fonction de $\hbar$ et ω .

1.5. À quoi sert la constante A_0 ? Déterminer son expression. On donne $\int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{(u-u_0)^2}{a^2}\right) du = a\sqrt{\pi}$.

1.6. Représenter sur le même graphe l'allure de $\varphi_0(x)$ et celle de $V(x)$.

1.7. Quelle est la densité de probabilité de présence de l'oscillateur en un point x lorsque le système est dans son état fondamental ? En déduire sans calcul la valeur moyenne $\langle x \rangle$ de la position de la particule.

1.8. Représenter l'allure de la densité de probabilité de présence de l'oscillateur dans l'état d'énergie E_0 .

1.9. On montre que les niveaux d'énergies E_n accessibles d'un oscillateur confiné par un puits de potentiel harmonique $V(x)$ sont donnés par $E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$. À quoi correspondent $n = 0$ et $n = 1$?

Partie 2. APPLICATION : VIBRATION THERMIQUE DES ATOMES D'UN SOLIDE.

Un solide comportant N atomes est considéré, du point de vue thermique, comme un ensemble de N oscillateurs vibrant indépendamment les uns des autres autour de leur position d'équilibre avec la même pulsation ω (Modèle d'Einstein). L'énergie potentielle d'un oscillateur harmonique à trois dimension est $V(\vec{r}) = \frac{1}{2} m \omega^2 \vec{r}^2$, m étant la masse de l'atome, ω la pulsation propre de l'oscillateur et $\vec{r}$ le vecteur position de l'atome défini à partir de sa position d'équilibre. L'état d'un atome du solide est décrit par sa position $\vec{r} = (x, y, z)$ et sa vitesse $\vec{v} = (v_x, v_y, v_z)$. Le solide est en équilibre thermique avec un thermostat à la température T .

- 2.1. Exprimer l'énergie mécanique ε_a d'un atome.
- 2.2. Énoncer le théorème d'équipartition de l'énergie.
- 2.3. Montrer que l'énergie moyenne d'un atome du solide est donnée par $\langle \varepsilon_a \rangle = 3k_B T$ où k_B est la constante de Boltzmann.
- 2.4. Soit n_0 le nombre de moles d'atomes dans le solide. Exprimer l'énergie moyenne $\langle E \rangle$ du solide en fonction de n_0 , R , et T .
- 2.5. En déduire que la capacité calorifique molaire du solide est donnée par $C_m = 3R$.

Le modèle classique précédent n'explique pas le comportement de la capacité thermique molaire $C_m(T)$ d'un solide à basse température. Ce comportement est d'origine quantique. On considère que la vibration de chaque atome sur son site est quantifiée. Suivant le modèle de l'oscillateur harmonique à une dimension et de pulsation ω , les niveaux quantiques d'énergie ont pour expression :

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega ; n \geq 0 \text{ (n entier)}$$

On rappelle l'expression de la fonction de partition d'une particule :

$$Z = \sum_{n=0}^{+\infty} e^{-\beta E_n}, \text{ où } \beta = \frac{1}{k_B T}.$$

- 2.6. L'oscillateur est dans un environnement à la température T . Pour un atome oscillant à une dimension, montrer que la probabilité p_n d'occupation du niveau n d'énergie à la température T (donnée par la loi de Boltzmann) est donnée par :

$$p_n = 2 \sinh\left(\frac{\beta \hbar \omega}{2}\right) e^{-\beta E_n}$$

$\sinh(x)$ étant le sinus hyperbolique de x .

- 2.7. Que vaut $\sum_{n=0}^{+\infty} p_n$?
- 2.8. Montrer que l'énergie moyenne d'un atome à la température T est donnée par :

$$\langle \varepsilon_a \rangle = \frac{\hbar \omega}{2} \coth\left(\frac{\beta \hbar \omega}{2}\right)$$

$\coth(x)$ étant la tangente hyperbolique de x .

On donne : $\sum_{n=0}^{+\infty} n e^{-\alpha_0 n} = \frac{1}{4 \sinh^2\left(\frac{\alpha_0}{2}\right)}$ pour $\alpha_0 > 0$.

- 2.9. Déterminer l'expression de la capacité thermique molaire $C_m(1D)$ du solide à une dimension.
- 2.10. En déduire l'expression de la capacité thermique molaire $C_m(3D)$ d'un réseau cristallin en trois dimensions, fait d'atomes quantiques indépendants.
- 2.11. Dans la limite des hautes températures $T \gg \Theta_E$, avec $\Theta_E = \frac{\hbar \omega}{k_B}$ (température d'Einstein), donner l'expression simplifiée de $\langle \varepsilon_a \rangle$ et celle de la capacité thermique molaire $C_m(3D)$? Commenter. Quelle loi retrouve-t-on ?
- 2.12. Dans la limite des basses températures $T \ll \Theta_E$, donner l'expression simplifiée de la capacité thermique molaire $C_m(3D)$ en fonction de R et $\frac{\Theta_E}{T}$? Commenter.
- 2.13. Tracer l'allure de la capacité thermique molaire $C_m(3D)$ en fonction de la température T .
- 2.14. Pour le diamant qui est un métal très dur on a $\Theta_E = 2000 K$. Pour le cuivre, métal plus mou, $\Theta_E = 244 K$. Comment expliquer cette corrélation entre ces deux propriétés apparemment si éloignées, la constante d'élasticité, et la capacité thermique ?
- 2.15. Quelle est l'insuffisance du modèle d'Einstein ?

Données :

- Constante de Planck réduite : $\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,05 \cdot 10^{-34} \text{ S.I.}$
- Constante de Boltzmann : $k_B = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ S.I.}$
- Constante des gaz parfaits : $R = 8,314 \text{ J.K}^{-1}.\text{mol}^{-1}$.
- Équation de Schrödinger : $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t}$.