

TD MQ

Mécanique quantique

A. Fonction d'onde pour potentiel harmonique _____ ●○○

Soit $\psi(x, t)$ la fonction d'onde d'une particule de masse m pouvant se déplacer sur l'axe Ox

$$\psi(x, t) = A \exp\left(-\frac{m\omega_0 x^2}{2\hbar} - i\frac{\omega_0}{2}t\right)$$

où A et ω_0 sont des constantes.

On donne pour $\alpha > 0$: $\int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-\alpha u^2) du = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$ et $\int_{-\infty}^{+\infty} u^2 \exp(-\alpha u^2) du = \sqrt{\frac{\pi}{4\alpha^3}}$

1. Quelles sont les dimensions de A et ω_0 ?
2. Quelles sont les valeurs possibles de A ?
3. Quel type d'état est représenté par cette fonction d'onde ? Quelle est l'énergie de la particule ?
4. À quelle énergie potentielle $V(x)$ est soumise cette particule ?
5. Dans quel(s) type(s) de situation rencontre-t-on cette énergie potentielle ?
6. Quelle est la valeur moyenne $\langle x \rangle$ de la position x de la particule ? Plus précisément, si on prépare $N \gg 1$ systèmes dans cet état et que l'on mesure pour chacun d'entre eux la position x de la particule, quelle est la moyenne des mesures réalisées ?
7. Qu'en est-il de la moyenne quadratique $\langle x^2 \rangle$?
8. Que dire de l'étalement des mesures en quantité de mouvement dans cet état ?

B. Fil quantique _____ ●●○

On étudie la conduction électronique dans un fil quantique : il s'agit d'un matériau dans lequel des électrons peuvent se déplacer d'une extrémité à l'autre. Sa géométrie est celle d'un parallélépipède, de section carrée, de côté a , et de longueur $e \gg a$ (typiquement, a est l'ordre du nanomètre alors que e est de l'ordre du micromètre : ce qui justifie la dénomination de « fil »). Pour des raisons géométriques, il existe donc un fort confinement latéral de l'électron, qui ne lui laisse plus que la possibilité de se déplacer selon l'axe (Ox) du fil (voir figure ci-dessous). Les électrons à l'intérieur du fil sont traités comme des particules quantiques, de masse m , libres de se déplacer dans la direction (Ox) du fil. La fonction d'onde propre qui représente alors un état stationnaire d'un électron, d'énergie E , dans le fil s'écrit sous la forme suivante :

$$\varphi(x) = A \exp(ikx)$$

où A une constante réelle de normalisation.

1. Commenter la forme choisie pour $\varphi(x)$. Que représente k ?
2. Normaliser la fonction d'onde propre.
3. En utilisant l'équation de SCHRÖDINGER indépendante du temps, exprimer l'énergie E de l'électron en fonction de k , m et $\hbar$. Exprimer la vitesse de déplacement v_x d'un électron selon (Ox) en fonction de k , $\hbar$ et m .
4. Montrer que la densité de probabilité de présence $\frac{dP(x)}{dx}$ de l'électron est uniforme le long du fil et donner son expression.

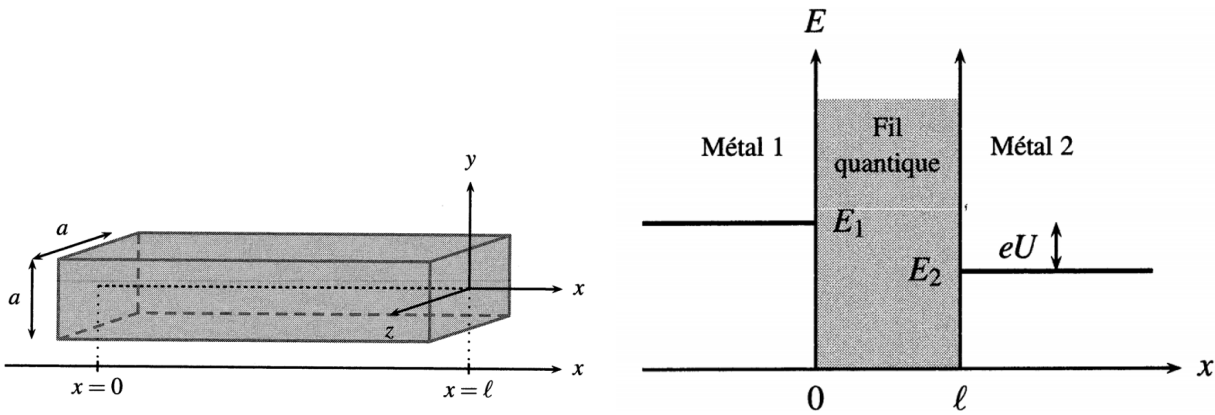


FIGURE 1 – Fil quantique

5. On admet que la probabilité de présence entre x et $x + dx$, d'un électron, dont le vecteur d'onde k est compris entre k et $k + dk$ est :

$$\frac{dP_k(x)}{dx} = \frac{dP(x)}{dx} \frac{\ell}{\pi} dx dk$$

Montrer que la contribution au courant électrique qui traverse le fil, dans le sens des x croissant, d'un électron dont le vecteur d'onde est compris entre k et $k + dk$ est :

$$dI = -\frac{ev_x}{\pi} dk$$

où e désigne la charge élémentaire.

Le fil quantique est disposé entre deux métaux, soumis à une différence de potentiel électrique U . La figure ci-dessous représente les niveaux d'énergie des électrons dans les deux métaux. Dans le métal 1, du côté $x < 0$, les électrons de conduction occupent tous les niveaux d'énergie jusqu'à une valeur maximale notée E_1 . Dans le métal 2, situé de l'autre côté du fil quantique ($x > \ell$), les électrons de conduction occupent tous les niveaux d'énergie jusqu'à une valeur maximale notée $E_2 = E_1 - eU$. Un électron du métal 1 dont l'énergie est comprise entre E_1 et E_2 peut transiter à travers le fil quantique vers le métal 2. Cet électron a un vecteur d'onde k compris entre k_1 et k_2 . Les énergies E_1 et E_2 sont liées à k_1 et k_2 par la relation déterminée à la question 3.

6. Montrer que l'intensité I du courant électrique qui traverse le fil dans le sens des x croissants s'exprime en fonction de U sous la forme suivante : $I = -GU$, où G s'exprime simplement en fonction de e et de la constante de PLANCK h .
7. Commenter l'expression de G et donner sa valeur numérique, ainsi que celle de la résistance R .

C. Orbitale 1s de l'atome d'hydrogène

Dans l'état fondamental, un électron en orbite autour d'un proton placé en O est décrit par la fonction d'onde à symétrie sphérique

$$\psi(M, t) = A \exp\left(-\frac{r}{a} - i\frac{E}{\hbar}t\right)$$

où $r = OM$, a et A sont des constantes positives.

On donne $\int_0^{+\infty} u^n \exp(-\alpha u) du = \frac{n!}{\alpha^{n+1}}$ pour $\alpha > 0$.

1. Ecrire le volume $d\tau$ compris entre les rayons r et $r + dr$.
2. On définit la probabilité radiale de présence $f(r) = \frac{dP}{dr}$ entre les rayons r et $r + dr$. Déterminer $f(r)$.
3. Déterminer une ou des valeurs de A .
4. Pour quelle valeur r_0 la probabilité de trouver l'électron est-elle maximale?
5. Déterminer la valeur moyenne de r .
6. Que représente a ?

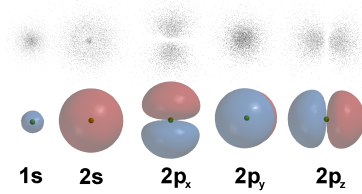


FIGURE 2 – Orbitales de l'électron de l'atome d'hydrogène

D. Puits quantique et semi-conducteur

Une particule quantique est confinée dans un puits de potentiel infiniment profond, de largeur a . On choisit l'énergie potentielle nulle au fond du puits. La longueur d'onde de DE BROGLIE associée à cette particule est notée λ_{DB} .

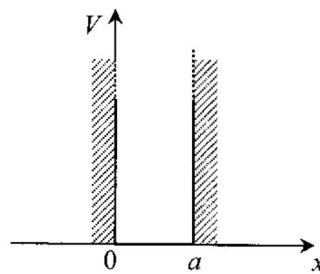


FIGURE 3 – Puit de potentiel infini

1. Représenter l'allure de la fonction d'onde propre (fonction de l'espace) pour les 3 premiers niveaux d'énergie.
2. La distance entre deux nœuds est égale à $\frac{\lambda_{DB}}{2}$. En déduire (dans chaque cas) la valeur de l'énergie $\mathcal{E}$ de chaque niveau, en fonction de a , n , h et de m (masse de la particule quantique).

Un électron est confiné dans un puits quantique formé d'une couche de GaAs (matériau semi-conducteur) prise en sandwich entre deux couches de GaAlAs. Pour déterminer les états stationnaires de l'électron, on considère une particule quantique de masse $m'_e = 0,067m_e$ (où $m_e = 9,1 \times 10^{-31}$ kg est la masse de l'électron) évoluant dans un puits de potentiel infini, de largeur $a = 3,0$ nm. On étudie la transition niveau d'énergie $n = 2$ au niveau d'énergie fondamental $n = 1$. On utilise les niveaux d'énergie $\mathcal{E}_n$ définis dans les questions précédentes.

3. Déterminer la longueur d'onde de la radiation émise lors de cette transition et la situer dans le spectre électromagnétique.

E. Effet tunnel

Dans une barrière de potentiel de largeur a et de hauteur V_0 , on définit une longueur caractéristique δ par : $\delta = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}$. On rappelle que la barrière est dite « épaisse » si $\exp\left(\frac{a}{\delta}\right) \gg \exp\left(-\frac{a}{\delta}\right)$ et que, dans ce cas précis, le facteur de transmission (par effet tunnel) est donné alors par : $T \approx \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} \exp\left(-\frac{2a}{\delta}\right)$.

Un faisceau d'électrons, correspondant à une intensité de 0,1 mA, est envoyé sur une barrière de potentiel de largeur $a = 1,0$ nm et de hauteur $V_0 = 2$ eV. L'énergie cinétique unitaire des électrons incidents est $E = 1,0$ eV.

1. Peut-on se placer dans l'approximation d'une barrière épaisse ?
2. Estimer l'intensité du courant tunnel qui émerge de l'autre côté de la barrière.

- On remplace les électrons par des protons de même énergie. Déterminer la nouvelle valeur de l'intensité du courant tunnel qui émerge de l'autre côté de la barrière.

F. États non-stationnaires

Une particule de masse m , confinée dans un puits de potentiel infini de largeur a , est dans un état non stationnaire décrit par la fonction d'onde $\psi(x, t)$ telle qu'à l'instant $t = 0$, on ait :

$$\psi(x, t = 0) = \varphi(x) = \sqrt{\frac{8}{5a}} \times \left[1 + \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) \right] \times \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)$$

On rappelle que les fonctions d'onde des états stationnaires d'une particule de masse m , confinée dans un puits de potentiel infini de largeur a sont données par :

$$\psi_n(x, t) = \varphi_n(x) \times \exp\left(-i\frac{E_n}{\hbar}t\right) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(n\frac{\pi x}{a}\right) \times \exp\left(-i\frac{E_n}{\hbar}t\right) \text{ avec } E_n = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

- Établir que ces fonctions $\varphi_n(x)$ vérifient $\int_0^a \varphi_m(x) \varphi_n(x) dx = \delta_{mn}$: où δ_{mn} désigne le symbole de KRONECKER ($\delta_{nn} = 1$ et $\delta_{mn} = 0$ pour $m \neq n$).
- Écrire la fonction $\varphi(x)$ comme une combinaison linéaire d'états stationnaires et en déduire l'expression de $\psi(x, t)$.
- Établir l'expression de $\rho(x, t)$, densité de probabilité de présence de la particule.

G. Particule piégée dans un puits de potentiel fini

Une particule de masse m est confinée dans un puits pair, de largeur a et de profondeur V_0 , représenté sur la figure 4. Suivant la région (1, 2 ou 3), la fonction d'onde d'un état stationnaire lié d'énergie E s'écrit $\psi(x, t) = \varphi(x) \times \exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right)$ avec :

$$\varphi(x) = \begin{cases} C_1 e^{qx} & \text{pour } x < -\frac{a}{2} \\ Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & \text{pour } -\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2} \\ C_3 e^{-qx} & \text{pour } x > \frac{a}{2} \end{cases}$$

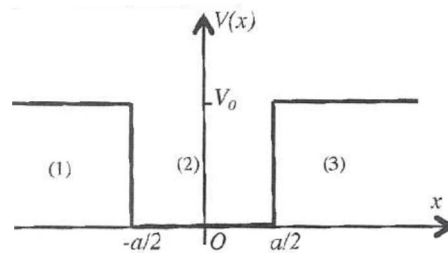


FIGURE 4 – Puit de potentiel fini

On notera $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ et $q = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$.

- La parité du potentiel permet d'affirmer que les fonctions décrivant les états stationnaires sont paires (modes symétriques) ou impaires (modes antisymétriques). Exprimer la relation entre $u = \frac{ka}{2}$ et $v = \frac{qa}{2}$ pour les modes symétriques, puis pour les modes antisymétriques.

- En remarquant que $u^2 + v^2 = \frac{ma^2 V_0}{2\hbar^2}$, en déduire graphiquement que les énergies possibles sont en nombre fini.
- Montrer que l'énergie de l'état fondamental est inférieure à $\frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$. L'état fondamental est-il symétrique ou antisymétrique ? Peut-il être le seul état possible ?

H. Fonction d'onde électronique ●●○

Un électron est dans un état décrit à l'instant $t = 0$ par la fonction d'onde :

$$\psi(x, t = 0) = \begin{cases} 0 & \text{pour } x < 0 \\ Ce^{-x}(1 + e^{-x}) & \text{pour } x \geq 0 \end{cases}$$

avec C , une constante réelle et x la variable donnant la position de l'électron exprimée en nm.

- Déterminer la valeur de C .
- Quelle est la valeur la plus probable de x ?
- Déterminer la valeur moyenne de la position $\langle x \rangle$.
- En déduire l'écart quadratique moyen $\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$.

I. Radioactivité α et effet tunnel ●●●

J. Inversion de la molécule d'ammoniac ●●●

K. Électron et gravitation ●●●

Une particule quantique de masse m est astreinte à se déplacer sur un axe vertical Oz ascendant dans le champ de pesanteur uniforme $\vec{g} = -g\vec{e}_z$. Un obstacle infranchissable en $z = 0$ limite le mouvement de la particule aux cotes positives, $z \geq 0$.

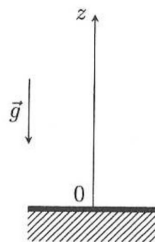


FIGURE 5 – Schématisation : électron dans le champ de pesanteur

- Exprimer le potentiel $V(z)$ de la particule pour $z \geq 0$. On prendra comme référence $V(0) = 0$. Tracer la courbe $V(z)$ pour $z \in \mathbb{R}$.
- Exprimer l'énergie cinétique E_c de la particule en fonction de la quantité de mouvement p_z puis l'énergie mécanique E_m . Quel est l'état de repos classique de la particule ?
- La quantité de mouvement p_z présente une dispersion Δp_z et la cote z présente une dispersion Δz autour des valeurs de repos classiques. En déduire une expression de E_m en fonction de Δp_z et Δz .
- Écrire l'inégalité de HEISENBERG entre les dispersions Δp_z et Δz . Expliquer pourquoi l'état de repos classique n'est pas envisageable.
- On considère le cas le plus favorable de l'inégalité de Heisenberg. Exprimer l'énergie mécanique en fonction de Δp_z et des constantes puis tracer $E_m = \langle E_m \rangle$. En déduire un ordre de grandeur de l'énergie mécanique minimale de la particule quantique. Vérifier l'homogénéité de l'expression trouvée.
- Quelle est l'ordre de grandeur de Δz pour l'électron de masse $m = 9,1 \times 10^{-31}$ kg ?