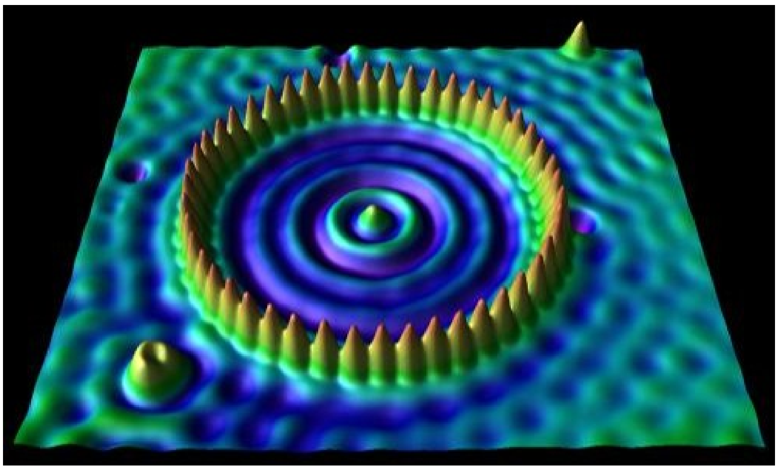
Révisions de Mécanique Quantique

Question de cours

Marche de potentiel Puits infini

1 Le corail quantique (CCINP)

En 1993, une équipe de l'entreprise IBM a réussi à déposer sur une surface métallique de cuivre 48 atomes de fer formant un cercle de rayon $R = 7{,}1\,\mathrm{nm}$ en les manipulant à l'aide d'une pointe de STM (abréviation pour le microscope à effet tunnel : Scanning Tunneling Microscope). La manipulation a été effectuée à une température très basse de $4\,\mathrm{K}$. Les atomes de fer forment alors une barrière quasi-infranchissable pour les électrons libres du cuivre situés à l'intérieur du cercle (à la manière d'une barrière de corail qui coupe les vagues de l'océan, d'où le nom de la structure).
La photo ci-dessous représente la répartition de densité électronique en fonction de la position, mesurée à l'aide d'un STM.



On considère un électron unique confiné à l'intérieur du cercle formé par les atomes de fer. On se ramène dans un premier temps à une dimension selon (Ox) et on s'intéresse aux états stationnaires de l'électron. L'électron se trouve dans un puits de potentiel de profondeur infinie.

1) Expliquer le lien entre la fonction d'onde $\psi(x,t)$ et ce que l'énoncé appelle « densité électronique ».

2) Établir les expressions des énergies des états stationnaires de l'électron, en supposant que le potentiel est nul dans le puits.

3) En exploitant la photo, estimer l'énergie en eV des électrons piégés par le corail.

Données : $m = 9{,}1 \cdot 10^{-31}$ kg et $\hbar = 1{,}0 \cdot 10^{-34}$ J · s

Question supplémentaire :
Se ramener à un problème à une dimension peut paraître assez critiquable. Il est possible d'affiner le modèle en cherchant les solutions stationnaires de l'équation de Schrödinger en coordonnées cylindriques (r, θ) ne dépendant pas de θ. On suppose que le corail quantique peut être modélisé par un puits circulaire, de rayon R et de profondeur infinie.

4) En s'aidant du document, calculer l'énergie des électrons piégés par le corail. Le modèle unidimensionnel est-il satisfaisant ?

Document

L'équation de Schrödinger à trois dimensions s'écrit :

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

L'opérateur laplacien dans le repère cylindrique pour une fonction ne dépendant que de r est :

$$\Delta\varphi(r) = \frac{1}{r}\frac{d}{dr}\left(r\frac{d\varphi(r)}{dr}\right)$$

Les solutions de l'équation

$$\frac{d^2F(u)}{du^2} + \frac{1}{u}\frac{dF(u)}{du} + F(u) = 0$$

qui ne divergent pas quand $u \to 0$ sont de la forme $F(u) = AJ_0(u)$, où $J_0(u)$ est une fonction de Bessel.
On donne ci-dessous le graphe de $J_0(u)^2$:

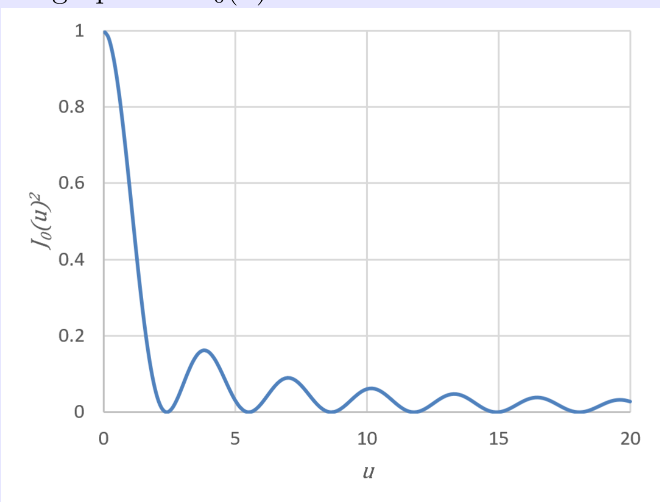


FIGURE 1 – Graphe de $J_0(u)^2$.

2 Puits de potentiel tridimensionnel (Centrale)

Un électron est dans un puits de potentiel infini de largeur $a \sim 1 \cdot 10^{-10}$ m.

1) Le puits de potentiel est monodimensionnel selon (Ox), $V = 0$ pour $0 < x < a$, partout ailleurs V tend vers $+\infty$.

Trouver les états stationnaires de l'électron, les énergies associées et la dégénérescence de chaque énergie.

2) Le puits de potentiel est cubique à trois dimensions : $V = 0$ pour $0 < x < a$, $0 < y < a$ et $0 < z < a$, partout ailleurs V tend vers $+\infty$.

Chercher des solutions de l'équation de Schrödinger sous la forme $X(x)Y(y)Z(z)F(t)$.

Trouver les énergies. Calculer les énergies des trois premiers états et la dégénérescence de chacun.

Est-ce que ce modèle peut correspondre à un électron de l'atome d'hydrogène ?

3) On déforme le volume cubique : selon x, a devient $a - \delta a$, selon y et z on remplace a par a' de telle façon que le volume total reste le même.

Trouver les niveaux d'énergie possibles, que deviennent les deux premiers états précédents (on fera un développement limité à l'ordre le plus bas), quelle est leur dégénérescence ?

3 Particule dans un puits de potentiel harmonique (CCINP)

Une particule est maintenue captive dans un puits de potentiel harmonique de pulsation ω_0. Cela équivaut à un potentiel $V(x) = \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2$. Les niveaux d'énergie de cette particule sont quantifiés avec :

$$E_n = \hbar\omega_0 \left(n + \frac{1}{2}\right), \quad \forall n \in \mathbb{N}.$$

La fonction d'onde associée à une particule dans l'état fondamental E_0 est :

$$\Psi(x,t) = A \exp\left(-\frac{m\omega_0 x^2}{2\hbar}\right) \exp\left(-i\frac{E_0 t}{\hbar}\right).$$

1) Utilisez la condition de normalisation pour trouver l'expression de A.

2) Utilisez l'équation de Schrödinger pour retrouver l'expression de E_0.

3) Tracez l'allure de la courbe de densité linéaire de probabilité, justifiez sa forme, puis justifiez sans calcul que la position moyenne $\langle X \rangle = 0$.

4) Calculez l'indétermination sur la position ΔX.

5) Lorsque le système est à une température T, on a de plus une indétermination sur la position due à l'agitation thermique :

$$\Delta X_T = \sqrt{\frac{k_B T}{E_0}}.$$

a) À partir de quelle température ΔX_T est supérieure à l'indétermination trouvée précédemment ?

b) Que représente physiquement la température T_1 pour laquelle $\Delta X_T = \Delta X$?

c) En supposant que la particule est un électron ($m = 9.11 \times 10^{-31}\,\mathrm{kg}$) et que $\omega_0 = 10^{14}\,\mathrm{rad/s}$ (fréquence typique des vibrations moléculaires), calculer numériquement T_1. Commenter la valeur obtenue par rapport aux températures typiques (par exemple, température ambiante $T_{\mathrm{amb}} = 300\,\mathrm{K}$).

<u>**Données**</u>

On rappelle l'équation de Schrödinger à une dimension :

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

Intégrales utiles :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \exp(-ax^2)\,dx = \sqrt{\frac{\pi}{4a^3}},$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-ax^2 + bx)\,dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}\exp\left(\frac{b^2}{4a}\right).$$

On rappelle enfin pour X suivant une distribution de probabilité f :

$$\langle X \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x f(x)\,dx, \quad \Delta X = \sqrt{\langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2}.$$