Extrait Centrale MP 2004 : (1)

1 - * $\|\psi(\vec{r})\|^2 d\tau$ = probabilité de trouver l'électron dans un volume $d\tau$ autour de $\vec{r}$.

* Condition de normalisation sachant qu'en coordonnées sphériques $d\tau = dr\, r\,d\theta\, r\sin\theta\, d\varphi$

$$\int_{r=0}^{r_0}\int_{\varphi=0}^{2\pi}\int_{\theta=0}^{\pi} |\psi(\vec{r})|^2 r^2 \sin\theta\, dr\, d\theta\, d\varphi = 1$$

$$|A|^2 2\pi \int_0^{r_0} r^2 dr \int_0^{\pi} \sin\theta\, d\theta = 2\pi |A|^2 \frac{r_0^3}{3} \times \left(-\cos\theta\right)_0^{\pi} = 1$$

$$\frac{4\pi}{3}|A|^2 r_0^3 = 1 \Rightarrow |A| = \sqrt{\frac{3}{4\pi r_0^3}}$$

$\boxed{A = \sqrt{\frac{3}{4\pi r_0^3}}}$ à une phase près.

2 - * $\langle \vec{r} \rangle = \iiint \vec{r}\, |\psi(\vec{r})|^2 d\tau = |A|^2 \iiint \vec{r}\, d\tau = \vec{0}$
par symétrie

* $\langle \|\vec{r}\|^2 \rangle = \iiint r^2 \frac{3}{4\pi r_0^3} \times r^2 dr \sin\theta\, d\theta\, d\varphi$

$$\langle \|\vec{r}\|^2 \rangle = \frac{3}{4\pi r_0^3} \times 2\pi \int_0^{r_0} r^4 dr \int_0^{\pi} \sin\theta\, d\theta$$

$$\boxed{\langle \|\vec{r}\|^2 \rangle = \frac{3}{r_0^3} \times \frac{r_0^5}{5} = \frac{3}{5} r_0^2}$$

* $\boxed{\Delta r = \sqrt{\langle \|\vec{r}\|^2 \rangle - (\langle \vec{r} \rangle)^2} = \sqrt{\frac{3}{5} r_0^2} = \sqrt{\frac{3}{5}}\, r_0}$

3 - Par analogie avec $\psi(\vec{r})$, $\|\chi(\vec{p})\|^2 d^3p$ représente la probabilité pour que l'impulsion de l'e^- vaille $\vec{p}$ à d^3p près.

4 - Par analogie avec $\psi(\vec{r})$, $\chi(\vec{p})$ doit vérifier (2)

$\iiint \|\chi(\vec{p})\|^2 d^3p = 1 \Rightarrow \boxed{B = \sqrt{\frac{3}{4\pi p_0^3}}}$

De même $\langle \vec{p} \rangle = \vec{0}$

$\langle \|\vec{p}\|^2 \rangle = \frac{3}{5} p_0^2$ $\boxed{\Delta p = \sqrt{\frac{3}{5}}\, p_0}$

5 - $\Delta r \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \Rightarrow \frac{3}{5} p_0 r_0 \geq \frac{\hbar}{2} \Rightarrow \underline{\frac{3}{5} p_0 r_0 \geq \frac{\hbar}{2}}$
(ou $\Delta r \Delta p \geq \hbar$)

6 - $\boxed{E_p(r) = -\frac{q_e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} = -\frac{e^2}{r}}$ $V(M) = \frac{q_e}{4\pi\varepsilon_0 r}$, $E_p = -q_e V(M)$

7 - $\langle E_p \rangle = \iiint E_p(r) \|\psi(\vec{r})\|^2 d\tau$

$$\langle E_p \rangle = \frac{3 \times 2\pi}{4\pi r_0^3} \int_{r=0}^{r_0} -\frac{e^2}{r} r^2 dr \int_0^{\pi} \sin\theta\, d\theta = \frac{3}{4\pi r_0^3} \int_0^{r_0} -\frac{e^2}{r} \dots$$

$$\langle E_p \rangle = \frac{3}{r_0^3} \times (-e^2) \left(\frac{r^2}{2}\right)_0^{r_0}$$

$$\boxed{\langle E_p \rangle = -\frac{3e^2}{2r_0}}$$

8 - $E_c = \frac{p^2}{2m}$

$$\langle E_c \rangle = \iiint E_c(\vec{p}) \|\chi(\vec{p})\|^2 d^3p = \frac{3}{4\pi p_0^3} \int_{p=0}^{p_0} \frac{p^2}{2m} \times 4\pi p^2 dp$$

$$\boxed{\langle E_c \rangle = \frac{3}{4\pi p_0^3} \times \frac{4\pi}{2m} \frac{p_0^5}{5} = \frac{3}{10} \frac{p_0^2}{m}}$$

9 - $\langle E_m \rangle = \langle E_c \rangle + \langle E_p \rangle = \frac{3}{10}\frac{p_0^2}{m} - \frac{3e^2}{2r_0}$

$$\langle E_m \rangle \geq \frac{3}{10} \times \left(\frac{5}{3}\right)^2 \frac{\hbar^2}{m r_0^2} - \frac{3e^2}{2r_0} = \frac{5}{6}\frac{\hbar^2}{m r_0^2} - \frac{3}{2}\frac{e^2}{r_0}$$

10 - $\frac{d\langle E_m\rangle}{dr_0} = -\frac{5}{3}\frac{\hbar^2}{m\, r_0^3} + \frac{3}{2}\frac{e^2}{r_0^2} = 0$ (mini de $\langle E_m\rangle$).

$\Rightarrow r_0 = a_0$ t.q $\frac{5}{3}\frac{\hbar^2}{m a_0^3} = \frac{3}{2}\frac{e^2}{a_0^2}$

$\Rightarrow a_0 = \frac{5}{3}\frac{\hbar^2}{m}\times\frac{2}{3e^2} = \frac{10}{9}\frac{\hbar^2}{me^2}$

$\boxed{a_0 \simeq \frac{\hbar^2}{me^2}}$

11 - AN : $a_0 = \frac{(1{,}05.10^{-34})^2}{9{,}1.10^{-31}\times 2{,}3.10^{-28}}$

$a_0 = 5{,}3.10^{-11}$ m) on retrouve bien l'ordre de grandeur du rayon de l'atome d'hydrogène du modèle classique.

Ex: Effet Hall Quantique.

1- $\Delta x\, \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$

2- $\Delta x = l_x$

$\Delta p_x = \sqrt{\langle p_x^2\rangle - \langle p_x\rangle^2}$

$\langle p_x\rangle = 0$ il y a autant de particules allant selon $+\vec{e}_x$ et $-\vec{e}_x$

$E_x = \frac{p_x^2}{2m} \Rightarrow \Delta p_x = \sqrt{2m\langle E_x\rangle}$

$\Rightarrow l_x\sqrt{2m\langle E_x\rangle} \geq \frac{\hbar}{2} \Rightarrow \langle E_x\rangle \simeq E_x \geq \frac{\hbar^2}{8ml_x^2}$

$\boxed{E_{x\,min} = \frac{\hbar^2}{8 m l_x^2}}$

Dans le cas classique $E_{min} = E_{x\,min} = 0$.

3 - $|\psi(x,y,t)|^2$ densité de probabilité de présence.
la probabilité dP de présence entre x et $x+dx$ et y et $y+dy$ = $dP = |\psi(x,y,t)|^2 dx\,dy$

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

$\varphi(x,y) = X(x)\,Y(y)$

$\psi(x,y,t)$ vérifie l'équation pour $-\frac{l_x}{2} < x < \frac{l_x}{2}$ et $-\frac{l_y}{2} < y < \frac{l_y}{2}$

$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}\right)$

En réinjectant l'expression de ψ, on a : (8)

$\forall x,y,t \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\left(Y(y)\frac{d^2X}{dx^2}+X(x)\frac{d^2Y}{dy^2}\right)e^{-i\frac{Et}{\hbar}} = +E X(x)Y(y)e^{-i\frac{Et}{\hbar}}$

$\Rightarrow \forall(x,y) \quad \boxed{\frac{1}{X(x)}\frac{d^2X}{dx^2}+\frac{1}{Y(y)}\frac{d^2Y}{dy^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}}$ (1)

x et y étant des variables indépendantes on en déduit que les fonctions $\frac{1}{X(x)}\frac{d^2X}{dx^2}$ et $\frac{1}{Y(y)}\frac{d^2Y}{dy^2}$ sont des fonctions constantes.

De plus la fonction doit vérifier

$\forall y,\ \left.\begin{array}{l}\varphi(0,y)=0\\ \varphi(l_x,y)=0\end{array}\right\} \Rightarrow \begin{array}{l}X(x=0)=0\\ X(x=l_x)=0.\end{array}$

$\forall x,\ \left.\begin{array}{l}\varphi(x,0)=0\\ \varphi(x,l_y)=0\end{array}\right\} \Rightarrow \begin{array}{l}Y(y=0)=0\\ Y(y=l_y)=0.\end{array}$

$X(x)$ vérifie :

$\frac{d^2X}{dx^2} = AX(x)$ avec A cste

Si $A=0$: $\frac{d^2X}{dx^2}=0 \quad X(x)=K_1x+K_2$

$\left.\begin{array}{l}X(0)=0\\ X(l_x)=0\end{array}\right\} \Rightarrow \begin{array}{l}K_1=0\\ K_2=0\end{array}$

Si $A>0$ ($+k^2$) : $\frac{d^2X}{dx^2}-k^2X=0$

$X(x)=K_1e^{-kx}+K_2e^{kx}$

$X(0)=0 \ldots \Rightarrow K_1=0 \quad K_2=0$

Seul cas possible $A<0$, posons $A=-k_x^2$ (9)

avec k_x réel.

$\frac{d^2X}{dx^2}+k_x^2X(x)=0$

$X(x)=K_1e^{ik_xx}+K_2e^{-ik_xx}$

$X(0)=0 \Rightarrow K_2=-K_1 \Rightarrow X(x)=2iK_1\sin(k_xx)$

$X(l_x)=0 \Rightarrow \sin(k_xl_x)=0$

$\Rightarrow$ il existe un entier n_x t.q.

$k_xl_x=n_x\pi \Rightarrow \boxed{k_x=\frac{n_x\pi}{l_x}}$

$X(x)=X_{n_x}\sin\left(\frac{n_x\pi}{l_x}x\right)$

De même $Y(y)=Y_{n_y}\sin\left(\frac{n_y\pi}{l_y}y\right)$ avec n_y entier

En reprenant l'équation (1), on obtient :

$-\left(\frac{n_x\pi}{l_x}\right)^2-\left(\frac{n_y\pi}{l_y}\right)^2=-\frac{2mE}{\hbar^2}$

$\Rightarrow \boxed{E(n_x,n_y)=\frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\left[\left(\frac{n_x}{l_x}\right)^2+\left(\frac{n_y}{l_y}\right)^2\right]}$

L'énergie du quanton est donc quantifiée par les 2 entiers n_x et n_y.

(4)

2 – $-\frac{\hbar^2}{2m}\underbrace{\Delta\varphi(x,y)}_{\left(\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\varphi}{\partial y^2}\right)} + i\frac{\hbar e B}{m}x\frac{\partial\varphi}{\partial y} + \frac{e^2B^2}{2m}x^2\varphi = E\varphi \quad (\alpha)$

$\varphi(x,y) = \Omega(x)\exp(ik_y y)$

On réinjecte l'expression de φ dans l'eq (α), on obtient :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2\Omega}{dx^2} - k_y^2\Omega(x)\right)e^{ik_y y} - \frac{\hbar e B k_y x\Omega(x)}{m}e^{ik_y y} + \frac{e^2B^2}{2m}x^2\Omega(x)e^{ik_y y} = E\Omega(x)e^{ik_y y}$$

D'où $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Omega}{dx^2} + \left(\frac{\hbar^2k_y^2}{2m} - \frac{\hbar e B k_y}{m}x + \frac{e^2B^2}{2m}x^2\right)\Omega(x) = E\Omega(x)$

On pose $V_{eff}(x) = \frac{\hbar^2k_y^2}{2m} - \frac{\hbar e B k_y}{m}x + \frac{e^2B^2}{2m}x^2$

$\omega_0^2 = \frac{e^2B^2}{m^2} \qquad x_0 = \frac{\hbar k_y}{eB}$

$V_{eff}(x) = m\left(\frac{x_0^2\omega_0^2}{2} - \omega_0^2 x x_0 + \frac{\omega_0^2x^2}{2}\right)$

$$\boxed{V_{eff}(x) = \frac{1}{2}m\omega_0^2(x-x_0)^2}$$

3 – On retrouve l'énergie potentielle d'un oscillateur harmonique (ex syst masse – ressort).

4 – $-\frac{L_x}{2} \le x_0 \le \frac{L_x}{2}$

$-\frac{L_x}{2} \le \frac{\hbar k_y}{eB} \le \frac{L_x}{2}$

$-\frac{eBL_x}{2\hbar} \le k_y \le \frac{eBL_x}{2\hbar} \Rightarrow k_y = \frac{n_y 2\pi}{L_y} \le \frac{eBL_x}{2\hbar}$

$$\boxed{n_y \le \frac{eBL_xL_y}{2\hbar\pi} = g}$$

(5)

5 – $N_e = n_0 L_x L_y b$

6 – Pour un niveau, il y a au maximum g états quantiques c'est à dire g électrons. Les électrons occupent au plus p niveaux d'énergie si $N_e \le gp = \frac{eBL_xL_y}{2\hbar\pi}p$

$$\Rightarrow B \ge B_p = \frac{N_e h}{eL_xL_y p} = \frac{n_0 b h}{pe}$$

7 – $\boxed{R_H = \frac{B_p}{n_0 e b} = \frac{1}{p}\frac{h}{e^2}}$

Ce qui correspond aux observations expérimentales

8 – Il faut que la température soit faible pour occuper les niveaux de plus basse énergie.