

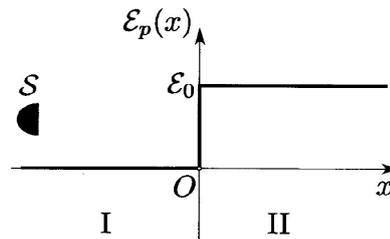
DM22 - Problèmes - Morceaux choisis - Mécanique quantique

1 ENAC - 2017

A savoir...

Ce QCM est à faire en ligne, sur le site Socrative, avec le *Room number* 473634. La correction se fait directement en ligne. Attention à ne pas aller trop vite; c'est moins simple que cela en a l'air.

1. Une source \mathcal{S} émet une particule d'énergie \mathcal{E} dans le sens d'un axe Ox croissant. La particule est soumise à une marche d'énergie potentielle $\mathcal{E}_p(x)$ stationnaire et infinie dans la direction des abscisses croissantes (Fig. ci-après).



On décrit quantiquement la particule par une fonction d'onde à une dimension $\Psi(x, t)$ qui obéit à l'équation de Schrödinger :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \mathcal{E}_p(x) \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

i étant l'unité imaginaire ($i^2 = -1$), $\hbar \approx 10^{-34}$ J.s la constante de Planck réduite et t désignant le temps. L'espace est divisé en deux régions :

$$\begin{aligned} \text{I:} \quad & x < 0 \quad \mathcal{E}_p(x) = 0 \\ \text{II:} \quad & x \geq 0 \quad \mathcal{E}_p(x) = \mathcal{E}_0 > 0 \end{aligned}$$

Indiquer l'éventuelle ou les éventuelles réponses exactes :

- A) La particule ne peut se trouver dans un état libre dans la région des $x > 0$ que si $\mathcal{E} > \mathcal{E}_0$.
 B) La particule peut être réfléchiée par la barrière si $\mathcal{E} > \mathcal{E}_0$.
 C) La particule ne peut pas se trouver dans la région II si $\mathcal{E} < \mathcal{E}_0$.
 D) En $x = 0$, la fonction d'onde est continue mais sa dérivée est discontinue si $\mathcal{E} < \mathcal{E}_0$.
2. La particule est dans un état stationnaire d'énergie caractérisé par la fonction d'onde $\Psi(x, t) = \underline{\psi}(x) \exp(-i\mathcal{E}t/\hbar)$. On suppose, dans un premier temps, $\mathcal{E} > \mathcal{E}_0$. La fonction d'onde dans la région II s'écrit :

$$\underline{\psi}(x) = \underline{A}'_2 \exp(ik_2x) + \underline{B}'_2 \exp(-ik_2x)$$

où \underline{A}'_2 , \underline{B}'_2 et k_2 sont trois constantes. Indiquer l'éventuelle ou les éventuelles réponses exactes :

- A) $\underline{A}'_2 = 0$ B) $\underline{B}'_2 \neq 0$ C) $k_2 = \frac{(m\mathcal{E})^{1/2}}{\hbar}$ D) $k_2 = \frac{(2m\mathcal{E}_0)^{1/2}}{\hbar}$
3. Le coefficient de transmission τ en amplitude de probabilité s'écrit :

$$\tau = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} \quad \text{avec} \quad k_1 = \frac{(2m\mathcal{E})^{1/2}}{\hbar}$$

Exprimer le coefficient r de réflexion en amplitude de probabilité en fonction de k_1 et k_2 .

- A) $r = \frac{k_2 - k_1}{k_1 + k_2}$ B) $r = \frac{2k_2}{k_1 + k_2}$ C) $r = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}$ D) $r = \frac{k_2}{k_1 + k_2}$
4. On suppose désormais $0 < \mathcal{E} < \mathcal{E}_0$. La fonction $\underline{\psi}(x)$ dans les régions I et II s'écrit respectivement $\underline{\psi}_I(x)$ et $\underline{\psi}_{II}(x)$:

$$\begin{aligned} \underline{\psi}_I(x) &= \underline{A}_1 \exp(c_1x) + \underline{B}_1 \exp(-c_1x) \\ \underline{\psi}_{II}(x) &= \underline{A}_2 \exp(c_2x) + \underline{B}_2 \exp(-c_2x) \end{aligned}$$

où \underline{A}_1 , \underline{B}_1 , c_1 , \underline{A}_2 , \underline{B}_2 , c_2 sont des constantes complexes. Les parties réelles et imaginaires de c_1 et c_2 sont toutes positives.

Indiquer l'éventuelle ou les éventuelles réponses exactes :

- A) $\underline{A}_1 = 0$ B) $\underline{B}_1 = 0$ C) $\underline{A}_2 = 0$ D) $\underline{B}_2 = 0$

5. Déterminer \underline{c}_1 et \underline{c}_2 :

- A) $\underline{c}_1 = i \frac{(2m\mathcal{E})^{1/2}}{\hbar}$ B) $\underline{c}_1 = \frac{(2m\mathcal{E})^{1/2}}{\hbar}$ C) $\underline{c}_2 = i \frac{[2m(\mathcal{E}_0 - \mathcal{E})]^{1/2}}{\hbar}$ D) $\underline{c}_2 = \frac{[2m(\mathcal{E}_0 - \mathcal{E})]^{1/2}}{\hbar}$

6. En déduire les probabilités de réflexion R et de transmission T :

- A) $R = 0$ B) $T = 0$ C) $R = 1$ D) $T = 1$

7. Calculer la profondeur caractéristique de pénétration δ dans la barrière d'un électron (masse $m_e \approx 10^{-30}$ kg) d'énergie $\mathcal{E} = 5$ eV pour une marche d'énergie $\mathcal{E}_0 = 6$ eV (on rappelle que $1 \text{ eV} \approx 1,6 \times 10^{-19}$ J) :

- A) $\delta \approx 2 \times 10^{-16}$ m B) $\delta \approx 2 \times 10^{-13}$ m C) $\delta \approx 2 \times 10^{-10}$ m D) $\delta \approx 2 \times 10^{-7}$ m

2 Centrale - MP - 2016

A savoir...

Problème très intéressant mais assez difficile. Pour ceux qui ont le temps et qui prennent le DSbis habituellement.

II Confinement d'objets quantiques

II.A – Confinement d'électrons dans une boîte quantique

On sait réaliser depuis quelques années des « boîtes quantiques », de dimensions nanométriques, qui confinent les électrons de conduction d'un solide à basse température. La possibilité de contrôler les états d'énergie d'un tel dispositif ouvre des perspectives très riches en opto-électronique. Une boîte quantique est constituée d'un matériau A jouant le rôle de puits, autour duquel on dépose un matériau B qui forme une barrière de potentiel autour de A (figure 4).

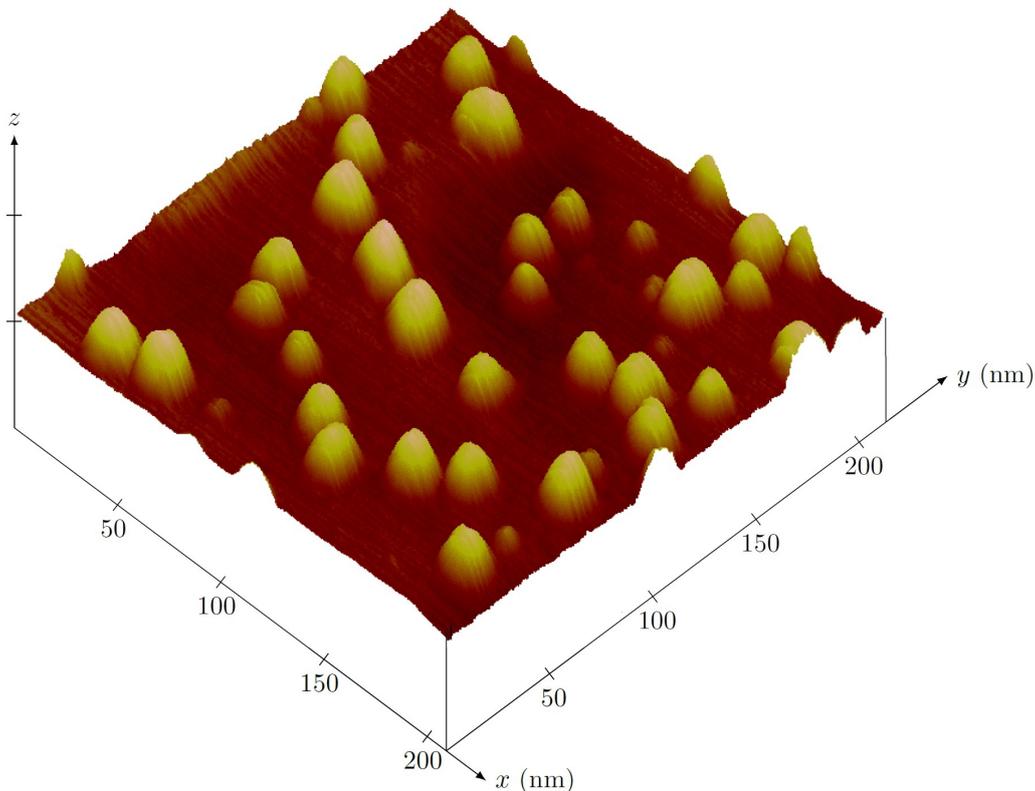


Figure 4 Ensemble de boîtes quantiques de GaN (matériau A) déposées à $705\text{ }^\circ\text{C}$ sur un substrat d'AlN (matériau B) et mûries sous vide. Image obtenue par microscopie à force atomique. Source : CEA-Grenoble/DSM/DRFMC/SP2M Rapport d'activité 1996-1998 du SP2M

II.A.1) Fonction d'onde électronique

Nous nous intéressons ici au confinement d'un électron dans une telle boîte. Les directions x et y étant supposées équivalentes, on traite dans un premier temps le problème à une dimension horizontale x . L'influence du confinement vertical suivant la direction z sera abordé ultérieurement.

On admet que dans la boîte, la dynamique de l'électron est décrite par l'équation de Schrödinger où :

- la masse de l'électron libre m est remplacée par une masse effective $m^* = 0,07m$;
- l'ensemble des atomes des matériaux A et B crée un potentiel effectif harmonique $V(x) = \frac{1}{2}m^*\omega^2x^2$ qui varie lentement à l'échelle atomique et pour lequel $\omega = 9,10 \times 10^{13}\text{ rad}\cdot\text{s}^{-1}$.

Dans tout le problème, on néglige tout effet associé au spin de l'électron.

a) Citer deux exemples d'oscillateurs harmoniques, dans des domaines différents de la physique classique. Pour chacun d'eux, établir l'équation d'évolution par une méthode énergétique et décrire les échanges énergétiques mis en jeu.

b) Écrire l'équation de Schrödinger vérifiée par la fonction d'onde $\Psi_{1D}(x,t)$ associée à l'état quantique de l'électron dans la boîte. Que représente cette fonction d'onde ?

c) On s'intéresse aux états stationnaires unidimensionnels $\Psi_{1D}(x, t) = \varphi(x)g(t)$ solutions de cette équation. Expliciter la fonction $g(t)$ et justifier le caractère stationnaire de ces états.

d) Ces états stationnaires sont-ils libres ou liés ? Que dire des fonctions d'onde $\Psi_{1D}(x, t)$ associées ?

e) La partie spatiale de la fonction d'onde associée à l'état fondamental $\Psi_{1D,0}(x, t)$ de l'électron dans la boîte s'écrit $\varphi_0(x) = \left(\frac{m^*\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m^*\omega x^2}{2\hbar}\right)$.

Quelle est dans cet état la position moyenne $\langle x \rangle$ de l'électron ? Quelle est l'extension caractéristique Δx de la distribution en position de l'électron ?

Effectuer l'application numérique.

f) Dédire de la relation d'indétermination spatiale d'Heisenberg l'énergie de l'état fondamental E_0 pour un électron dont l'impulsion moyenne $\langle p_x \rangle$ est nulle.

Montrer que cette valeur de l'énergie est liée au confinement spatial de l'électron.

Comparer au cas classique.

Dans la suite, on admettra que les états stationnaires unidimensionnels $\Psi_{1D,n_x}(x, t)$ ont des énergies du type $E_0 + n_x\hbar\omega$ avec $n_x \in \mathbb{N}$.

On souhaite désormais prendre en compte le confinement équivalent de l'électron dans la direction horizontale y . Le potentiel effectif bidimensionnel dans lequel évolue l'électron doit alors s'écrire

$$V(x) + V(y) = \frac{1}{2}m^*\omega^2x^2 + \frac{1}{2}m^*\omega^2y^2$$

g) On cherche les états stationnaires bidimensionnels $\Psi_{2D}(x, y, t) = \varphi(x)\chi(y)g(t)$ solutions de l'équation de Schrödinger. Montrer que l'énergie E de ces états s'écrit sous la forme $E = E_x + E_y$, E_x et E_y désignant les énergies des états stationnaires unidimensionnels suivant les directions x et y .

h) Quelle est le nombre d'états quantiques (dégénérescence) g_{2D} associé à chacun des niveaux d'énergie bidimensionnels de l'électron ?

II.A.2) Propriétés optiques de la boîte

a) Citer un dispositif usuel qui met à profit les propriétés optiques de telles boîtes quantiques. Quel est le domaine spectral concerné ?

b) L'étude précise des niveaux d'énergie bidimensionnels de la boîte se fait par spectroscopie d'absorption. Décrire le principe de cette technique en explicitant le fonctionnement d'un dispositif couramment utilisé en chimie.

La figure 5 fournit les résultats expérimentaux obtenus pour la fréquence des deux premiers pics d'absorption de la boîte quantique lorsqu'on lui applique un champ magnétique statique et uniforme $\vec{B}_s = B_s \vec{u}_z$.

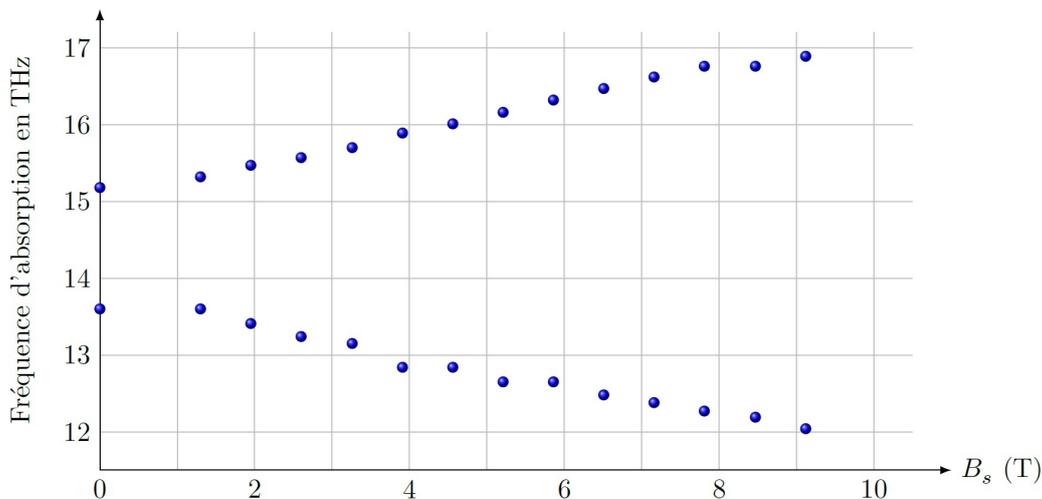


Figure 5 Fréquence des deux premiers pics d'absorption de la boîte quantique en fonction du champ magnétique appliqué à une température $T = 10$ K

Dans la suite, on désigne par ω_c la pulsation cyclotron mise en évidence dans la première partie. On admet alors que, dans le régime $\omega_c < \omega/\sqrt{2}$, la résolution de l'équation de Schrödinger dans le potentiel $V(x) + V(y)$ conduit pour les trois premiers niveaux d'énergie accessibles par l'électron à

$$E'_0 = \hbar\Omega \quad E_- \simeq 2\hbar\Omega - \frac{\hbar\omega_c}{2} \quad E_+ \simeq 2\hbar\Omega + \frac{\hbar\omega_c}{2}$$

avec $\Omega = \sqrt{\omega^2 + \omega_c^2/4}$.

- c) Déterminer les valeurs de champ magnétique vérifiant l'inégalité $\omega_c < \omega/\sqrt{2}$ et $\omega_c = eB_s/m^*$.
- d) À une température de 10 K, on constate que seul le niveau d'énergie E'_0 contribue de manière significative au signal d'absorption. Justifier quantitativement ce fait.
- e) En exploitant la figure 5 reproduite en figure A dans le document réponse, déterminer le domaine de champ magnétique pour lequel le modèle adopté pour la boîte quantique permet d'interpréter les résultats expérimentaux obtenus.

II.A.3) Anisotropie de la boîte quantique

On peut montrer que les résultats expérimentaux précédents sont interprétables intégralement si on prend en compte une légère anisotropie de la boîte quantique, ce qui revient à considérer le potentiel de confinement

$$\tilde{V}(x, y) = \frac{1}{2}m^*\omega^2(1 + \epsilon)x^2 + \frac{1}{2}m^*\omega^2(1 - \epsilon)y^2 \quad \text{avec } \epsilon \ll 1$$

En exploitant la figure 5, déterminer la valeur de l'anisotropie ϵ .

II.A.4) Rôle de la dimension z

Le confinement dans la direction z peut être modélisé par un puits carré infini de largeur D .

- a) Établir les énergies E_z des états stationnaires unidimensionnels de l'électron suivant la direction z .
- b) À quelle condition reliant D et ω est-il légitime de considérer que le mouvement de l'électron selon z est « gelé », c'est à dire que l'on peut ne s'intéresser qu'aux premiers niveaux du mouvement harmonique dans la direction x ou y ?
- c) Sur la figure 4, l'échelle de la direction verticale n'est pas la même que l'échelle dans le plan xOy . En supposant que l'approximation consistant à ignorer le mouvement selon z est valide, déterminer si cette échelle verticale est dilatée ou contractée. On se servira de la grandeur Δx déterminée à la question II.A.1.
- d) Déterminer complètement l'expression des états stationnaires unidimensionnels de l'électron suivant la direction z .
- e) Proposer une analogie formelle entre ces résultats et ceux obtenus pour une corde vibrante. Mettre en regard les différences notables entre ces deux systèmes.
- f) Représenter les fonctions d'ondes spatiales de l'électron dans la direction z pour les trois premiers niveaux d'énergies E_z sur la figure B du document réponse ainsi que les densités de probabilité de présence associées. Commenter.
- g) Discuter des résultats attendus dans le cas des énergies élevées.

II.B – Oscillateur harmonique quantique en équilibre thermique

Nous allons préciser les propriétés physiques d'un unique oscillateur harmonique quantique à une dimension en équilibre thermodynamique avec un thermostat à la température T . Comme indiqué dans la partie précédente, la résolution de l'équation de Schrödinger pour un tel oscillateur de pulsation ω conduit à des états stationnaires d'énergie $E_n = E_0 + n\hbar\omega$ avec $n \in \mathbb{N}$.

On admet qu'à l'équilibre avec le thermostat, cet oscillateur ne se trouve pas dans un état stationnaire mais dans un mélange statistique des états stationnaires d'énergie E_n affectés des poids respectivement proportionnels au facteur de Boltzmann $e^{-\frac{E_n}{k_B T}}$.

II.B.1) Exprimer la probabilité d'occupation p_n de l'état d'énergie E_n .

II.B.2) En déduire le rapport r entre la probabilité d'occupation de l'état d'énergie E_{n+1} et celle de l'état d'énergie E_n . Comment la température influence-t-elle ce résultat ?

II.B.3) Déterminer l'énergie moyenne $\langle E \rangle$ de l'oscillateur harmonique quantique en équilibre thermodynamique.

II.B.4) La figure 6 représente la variation en fonction de la température des énergies moyennes d'un oscillateur harmonique quantique et d'un oscillateur harmonique classique. Identifier, en justifiant votre réponse, chacune des courbes.

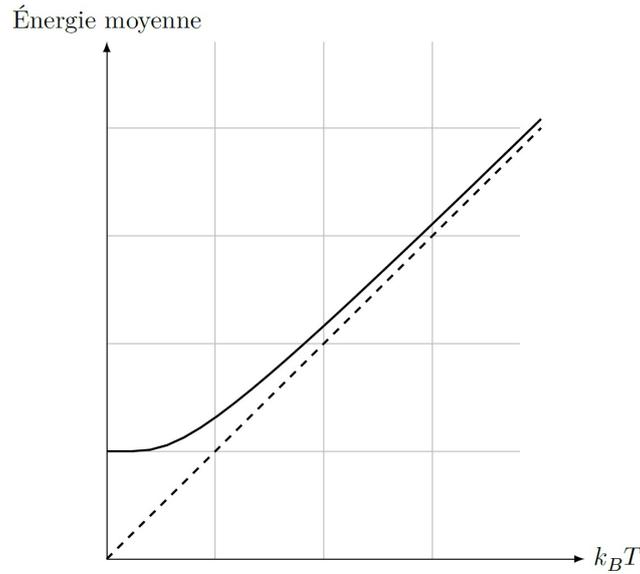


Figure 6

Commenter le comportement de ces oscillateurs

- à $T = 0 \text{ K}$;
- à basse température ;
- à haute température.

Données numériques

Célérité de la lumière dans le vide	$c = 3,00 \times 10^8 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$
Masse de l'électron	$m = 9,11 \times 10^{-31} \text{ kg}$
Charge élémentaire	$e = 1,60 \times 10^{-19} \text{ C}$
Permittivité diélectrique du vide	$\epsilon_0 = 8,85 \times 10^{-12} \text{ F}\cdot\text{m}^{-1}$
Constante d'Avogadro	$\mathcal{N}_A = 6,02 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$
Constante de Boltzmann	$k_B = 1,38 \times 10^{-23} \text{ J}\cdot\text{K}^{-1}$
Constante de Planck	$h = 6,63 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$
Constante de Planck réduite	$\hbar = h/(2\pi)$
Rayon de la Terre	$R_T = 6,37 \times 10^3 \text{ km}$
Vitesse angulaire de rotation propre de la Terre	$\Omega_T = 7,29 \times 10^{-5} \text{ rad}\cdot\text{s}^{-1}$
Rayon de l'orbite géostationnaire	$R_g = 4,22 \times 10^4 \text{ km}$
Intensité du champ de pesanteur à la surface de la Terre	$g = 9,81 \text{ m}\cdot\text{s}^{-2}$
Ordre de grandeur du champ magnétique à la surface de la Terre	$5 \times 10^{-5} \text{ T}$

Formulaire

- Impulsion d'une particule relativiste

$$\vec{p} = \gamma m \vec{v} \quad \text{avec} \quad \gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

- Énergie cinétique d'une particule relativiste

$$E_c = mc^2(\gamma - 1) \quad \text{avec} \quad \gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

- Champ créé au point M par un dipôle de moment magnétique $\vec{\mathcal{M}}$ placé en O

$$\vec{B}(M) = \frac{\mu_0}{4\pi r^3} \left(3 \frac{\vec{\mathcal{M}} \cdot \vec{r}}{r^2} \vec{r} - \vec{\mathcal{M}} \right) \quad \text{avec } \vec{r} = \vec{OM}$$

- Couple subi par un dipôle de moment magnétique $\vec{\mathcal{M}}$ dans un champ magnétique extérieur \vec{B}

$$\vec{\Gamma} = \vec{\mathcal{M}} \wedge \vec{B}$$

- Opérateur divergence en coordonnées cylindriques au point $M(r, \theta, z)$

$$\operatorname{div} \vec{A} = \frac{1}{r} \frac{\partial(rA_r)}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial A_\theta}{\partial \theta} + \frac{\partial A_z}{\partial z}$$

- Densité de probabilité pour une loi normale d'espérance (moyenne) $\langle x \rangle$ et d'écart type σ

$$f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2} \left(\frac{x - \langle x \rangle}{\sigma}\right)^2\right)$$

- Relation d'indétermination spatiale d'Heisenberg

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$