

Correction - DM22 - Problèmes - Morceaux choisis - Mécanique quantique

1 ENAC - 2017

1. Si $\mathcal{E} < \mathcal{E}_0$, il n'y a pas d'onde transmise donc la particule ne peut se trouver dans un état libre sans la région $x > 0$ que si $\mathcal{E} > \mathcal{E}_0$. Réponse A

Elle peut être réfléchi si $\mathcal{E} > \mathcal{E}_0$ Réponse B

En 0, la fonction d'onde et sa dérivée sont continues.

2. Si $\mathcal{E} > \mathcal{E}_0$, Le premier terme en $\exp(ik_2x)$ correspond à une onde plane allant de gauche vers la droite: il représente donc l'onde transmise.

Par contre, le second terme représente une onde venant de $+\infty$ allant vers la gauche.

Comme nous n'avons pas de particule qui provient dans ce sens, nous poserons $A_2' = 0$

L'équation de Schrödinger conduit à $\frac{d^2\psi}{dx^2} + k_2^2\psi = 0$ avec $k_2^2 = \frac{2m(E - E_0)}{\hbar^2}$ soit

$$k_2 = \frac{\sqrt{2m(E - E_0)}}{\hbar} \quad \text{Réponse A et B}$$

3. Conditions aux limites: La fonction $\psi(x)$ et sa première dérivée $\psi'(x)$

doivent être continues en $x=0$. $A_2' = A_1' + B_1'$ et $A_2'k_2 = (A_1' - B_1')k_1$ alors $A_2' = A_1' \frac{2k_1}{k_1 + k_2}$ et

$$B_1' = A_1' \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \quad ; \quad r = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \quad : \quad \text{Réponse C}$$

4. Dans le milieu II, la solution est une onde évanescente : $A_2 = 0$: Réponse C

5. Dans le milieu I, $c_1 = ik_1 = i \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ et dans le milieu II, $c_2 = \frac{\sqrt{2m(E_0 - E)}}{\hbar}$

Réponses A et D

6. Dans ce cas, $T=0$ et $R=1$: Réponse B et C

7. Comme $c_2 = \frac{\sqrt{2m(E_0 - E)}}{\hbar} = \frac{1}{\delta} = 2 \times 3,14 \frac{\sqrt{2 \times 10^{-30} \times 1,6 \cdot 10^{-19}}}{6,6 \times 10^{-34}}$: $\delta = 2 \cdot 10^{10} \text{ m}$

Réponse C

2 Centrale - MP - 2016

II Confinement d'objets quantiques

II.A Confinement dans une boîte quantique

II.A.1. (a) Confinement au voisinage d'un minimum de potentiel : oscillateur harmonique

$E_m = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 = \text{cte}$ d'où en dérivant par rapport au temps $\ddot{x} + \omega^2x = 0$; conversion d'énergie cinétique en énergie potentielle et réciproquement.

Circuit électrique LC : $E = \frac{q^2}{2C} + \frac{1}{2}L i^2 = \text{cte}$ où $i = \frac{dq}{dt}$; $\omega = \frac{1}{\sqrt{LC}}$; mêmes calculs (analogie méca-élec) ; conversion d'énergie électrique stockée dans le condensateur en énergie magnétique stockée dans la bobine et réciproquement.

(b)
$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right) + V(x) \psi(x, t)$$
 où $\rho = |\psi|^2$ est la densité de probabilité de présence, c'est à dire que la probabilité dP de se trouver entre x et $x + dx$ à t est $dP = |\psi(x, t)|^2 dx$.

(c) $g(t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$ où E est l'énergie de cet état. Cet état est stationnaire car la densité de probabilité de présence $\rho = |\psi|^2$ est bien indépendante du temps.

(d) C'est un état lié et la fonction d'onde doit être normalisée : $\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2(x) dx = 1$.

(e) $\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x |\psi|^2(x) dx = 0$ (imparité de la fonction ou changement de variable $x \rightarrow -x$). Avec le formulaire on a directement l'extension caractéristique $\Delta x = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{\hbar}{m^* \omega}} = 3,0 \text{ nm}$.

(f) $\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \Rightarrow \Delta p_x \geq \sqrt{\frac{m^* \hbar \omega}{2}}$. Et $\langle p_x \rangle = 0$ donc $\langle p_x^2 \rangle = (\Delta p_x)^2 \geq \frac{m^* \hbar \omega}{2}$ d'où $E = \left\langle \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2} m^* \omega^2 x^2 \right\rangle \geq \frac{\hbar \omega}{2}$. Pour l'OHQ le minimum est atteint et $E_0 = \frac{\hbar \omega}{2}$.

Contrairement au cas classique cette énergie minimale n'est pas nulle mais strictement positive. Cette énergie minimale est directement liée au confinement au travers de ω et de la relation d'incertitude de Heisenberg (c.f. calcul ci-dessus).

(g) On a toujours $g(t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$ et en injectant la solution à variables séparées $\psi(x, y, t) = \varphi(x)\chi(y)e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$ dans l'équation de Schrödinger bidimensionnelle
$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \underbrace{\Delta \psi}_{\text{laplacien}} + V(x, y) \psi$$
 on a

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} \chi + \varphi \frac{\partial^2 \chi}{\partial y^2} \right) + (V(x) + V(y)) \varphi \chi = E \varphi \chi$$
 ; on divise par $\varphi(x)\chi(y)$ et on sépare les variables pour obtenir $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\varphi(x)} \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} \right) + V(x) = E + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\chi(y)} \left(\frac{\partial^2 \chi}{\partial y^2} \right) - V(y) = \text{cte}$ puisque le terme de gauche ne dépend que de x et celui de droite que de y .

Ainsi $\varphi(x)$ est solution de l'équation de Schrödinger stationnaire 1D pour le potentiel harmonique V d'où une énergie $E_x = \left(n_x + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega$ et de même pour $\chi(y)$ avec une énergie $E_y = \left(n_y + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega$. En réinjectant dans l'égalité précédente on en déduit que $E = E_x + E_y = (n_x + n_y + 1) \hbar \omega$ avec n_x et n_y entiers positifs.

(h) On obtient $E_n^{2D} = (n + 1) \hbar \omega$ où n entier positif de dégénérescence $g_n^{2D} = n + 1$ (nombre de paires d'entiers positifs n_x et n_y tels que $n_x + n_y = n$). Le fondamental d'énergie $E_0^{2D} = \hbar \omega$ est non dégénéré.

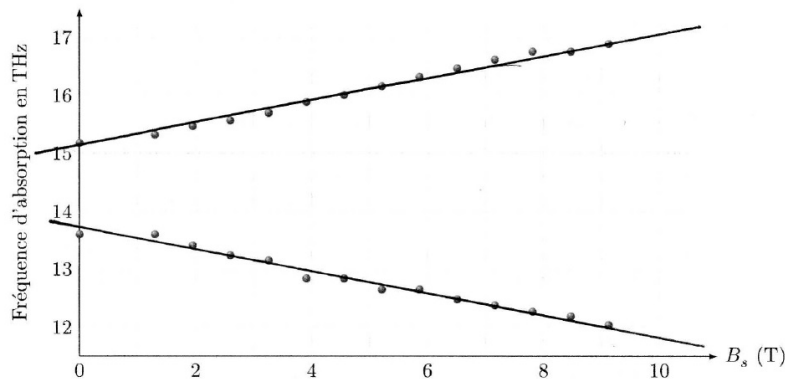
II.A.2. (a) On peut citer les diodes laser qui émettent principalement dans l'infrarouge.

(b) On éclaire l'échantillon par une source de fréquence réglable (IR/visible/UV) et on mesure l'absorbance en fonction de la fréquence ; des pics de résonance se présentent à certaines pulsations de résonance $\omega_{n,p}$ liée aux niveaux d'énergie par $\hbar \omega_{n,p} = E_n - E_p$.

(c) $\omega_c = \frac{eB_s}{m^*} < \frac{\omega}{\sqrt{2}} \Leftrightarrow B_s < B_{\text{max}} = \frac{m^* \omega}{e\sqrt{2}} = 25,6 \text{ T}$ ok !

(d) $k_B T \sim 10^{-22} \text{ J} \ll \hbar \omega \sim 10^{-20} \text{ J}$ donc l'agitation thermique est négligeable et la - quasi - totalité des électrons se trouve dans l'état fondamental d'énergie E'_0 qui est donc le seul à contribuer à l'absorbance.

(e) On effectue une modélisation linéaire très satisfaisante des courbes $f_{\text{abs}}(B_s)$.



Interprétation : on a $B_s < 9 \text{ T} \sim \frac{B_{\text{max}}}{3}$ donc $\frac{\omega_c^2}{4} < \frac{\omega^2}{3^2 * 4 * 2} \ll \omega^2$; on peut donc considérer que $\Omega \simeq \omega$.

Les fréquences d'absorption s'expriment alors $f_1 = \frac{E_- - E'_0}{h} \simeq \frac{\omega}{2\pi} - \frac{e}{4\pi m^*} B_s$ et $f_2 = \frac{E_+ - E'_0}{h} \simeq \frac{\omega}{2\pi} + \frac{e}{4\pi m^*} B_s$.

Cela correspond bien aux variations affines symétriques observées.

Aspect quantitatif : pente mesurée $\pm 2,0 \cdot 10^{11} \text{ Hz} \cdot \text{T}^{-1}$ pour une pente théorique $\pm \frac{e}{4\pi m^*} = \pm 2,0 \cdot 10^{11} \text{ Hz} \cdot \text{T}^{-1}$; l'accord est excellent !

Il y a par contre un problème car les deux droites devraient se croiser sur l'axe des ordonnées à $\frac{\omega}{2\pi} = 14,5 \text{ THz}$ ce qui n'est pas le cas (la question suivante va apporter l'explication).

II.A.3. On se place à $B = 0$ et l'anisotropie lève la dégénérescence sur le premier niveau excité $E'_1 = 2\hbar\omega$:

en effet on a $E_x = (n_x + \frac{1}{2}) \hbar\omega (1 + \frac{\varepsilon}{2})$ (DL au premier ordre en ε), $E_y = (n_y + \frac{1}{2}) \hbar\omega (1 - \frac{\varepsilon}{2})$ et $E = E_x + E_y$.

Le fondamental $(n_x, n_y) = (0, 0)$ est d'énergie inchangée $\hbar\omega$ mais les couples $(1, 0)$ et $(0, 1)$ correspondent désormais à des niveaux d'énergie différents :

$E_{(0,1)} = (2 - \frac{\varepsilon}{2}) \hbar\omega$ premier niveau excité et $E_{(1,0)} = (2 + \frac{\varepsilon}{2}) \hbar\omega$ deuxième niveau excité. C'est bien ce qui est observé à $B = 0$ sur la figure 5 avec $f_{(0,1)} = (1 - \frac{\varepsilon}{2}) \frac{\omega}{2\pi} \simeq 13,75 \text{ THz}$ et $f_{(1,0)} = (1 + \frac{\varepsilon}{2}) \frac{\omega}{2\pi} \simeq 15,15 \text{ THz}$. On note que l'on a bien une moyenne de $14,45 \text{ THz}$ égale à la valeur attendue de $14,5 \text{ THz}$ aux incertitudes de lecture près.

On obtient une anisotropie $\varepsilon = \frac{f_{(1,0)} - f_{(0,1)}}{f_{\text{moy}}} = \frac{15,15 - 13,75}{14,45} \simeq 0,1$. On note qu'on a bien $\varepsilon \ll 1$.

II.A.4. (a) C'est le cours sur le puits infini de largeur D : $E_z = \frac{n_z^2 \hbar^2 \pi^2}{2m^* D^2}$ où $n_z \in \mathbb{N}^*$.

(b) On pourra considérer que le mvt de l'électron selon z est « gelé » si $|E_{z,2} - E_{z,1}| \gg \hbar\omega$ soit $D \ll \sqrt{\frac{3}{2}} \pi \sqrt{\frac{\hbar}{m^* \omega}}$ (voir paragraphe B ci-après pour la justification).

(c) L'inégalité ci dessus se réécrit $D \ll \pi \sqrt{3} \Delta x$ alors que sur la figure on a $\Delta z \sim \Delta x$ donc l'échelle verticale a été dilatée.

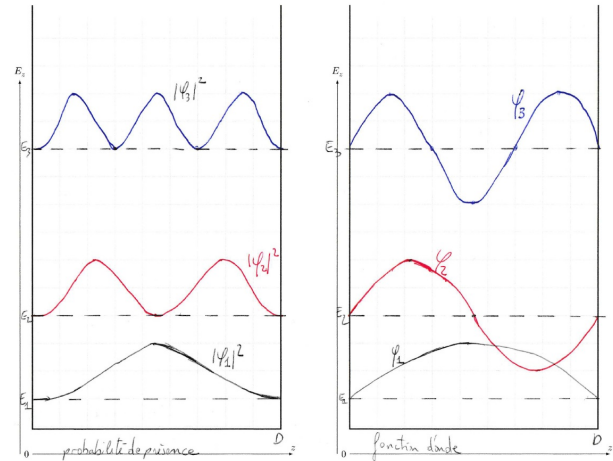
(d) cf. cours, avec la condition de normalisation ($z \in [0 ; D]$), $\varphi_n(z) = \sqrt{\frac{2}{D}} \sin\left(\frac{n\pi z}{D}\right)$.

(e) Dans les deux cas les états stationnaires correspondent à $D = n \frac{\lambda}{2}$ mais la corde de Melde correspond à une onde mécanique classique alors que le puits quantique est justement quantique avec des aspects à la fois ondulatoires et corpusculaires où $|\varphi|^2$ est une probabilité de présence; pour le puits quantique l'énergie est quantifiée, contrairement à la corde de Melde où elle ne l'est pas.

(f) Voir tracés ci-contre.

La fonction d'onde φ_n et la probabilité de présence $|\varphi_n|^2$ s'annulent sur les bords, et présentent n maxima (ventres) entre 0 et D et $n - 1$ annulations (nœuds) à l'intérieur.

(g) Pour les énergies élevées, la distance entre les nœuds et les ventres devient très faible : on tend vers une probabilité de présence uniforme qui est le comportement classique attendu.



II.B OHQ en équilibre thermique

II.B.1. $P_n = \frac{1}{Z} e^{-\frac{E_n}{k_B T}}$ où $Z = \sum_{n=0}^{+\infty} e^{-\frac{E_n}{k_B T}} = e^{-\frac{E_0}{k_B T}} \sum_{n=0}^{+\infty} \left(e^{-\frac{\hbar\omega}{k_B T}} \right)^n = \frac{e^{-\frac{\hbar\omega}{2k_B T}}}{1 - e^{-\frac{\hbar\omega}{k_B T}}} = \frac{1}{2 \operatorname{sh} \frac{\hbar\omega}{2k_B T}}$ est la fonction de partition.

II.B.2. $r = \frac{P_{n+1}}{P_n} = e^{-\frac{\hbar\omega}{k_B T}} < 1$.

Si $\hbar\omega \ll k_B T$ alors l'agitation thermique domine et $P_{n+1} \simeq P_n$; les états sont sensiblement équiprobables.

Si $\hbar\omega \gg k_B T$ alors $P_{n+1} \ll P_n$. On peut dire que l'OHQ est « gelé » dans son état fondamental où se trouvent l'immense majorité des particules.

II.B.3. $\langle E \rangle = \sum_{n=0}^{+\infty} P_n E_n$. On pose $\beta = \frac{1}{k_B T}$ et on constate que $\langle E \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{n=0}^{+\infty} E_n e^{-\beta E_n} = -\frac{1}{Z} \frac{dZ}{d\beta}$.

Du calcul de Z au 1) on déduit $\langle E \rangle = \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1} = \frac{\hbar\omega}{2 \tanh\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right)}$

II.B.4. On déduit que pour l'OHQ en équilibre thermique :

- Si $\hbar\omega \ll k_B T$ alors $\tanh\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right) \simeq \frac{\hbar\omega}{2k_B T}$ et $\langle E \rangle = k_B T$; on retrouve le résultat classique correspondant au théorème d'équipartition de l'énergie : 2 degrés de liberté (DL) quadratiques et $\frac{k_B T}{2}$ par DL quadratique classique.

- Si $\hbar\omega \gg k_B T$, l'OHQ est « gelé » dans son état fondamental et $\langle E \rangle = E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$ (ok car $\tanh u \rightarrow 1$ si $u \rightarrow +\infty$).

La courbe en trait plein correspond donc à l'OHQ et celle en pointillés à l'OH classique.