

# TD physique 23

## Physique quantique

### Exercice 1

La série de Pfund de l'atome d'hydrogène correspond à une transition vers le niveau d'énergie  $n = 5$ .

1. Calculer la longueur d'onde  $\lambda_{7 \rightarrow 5}$  associée à la transition du niveau 7 vers le niveau 5.
2. A quelles transitions correspondent les longueurs d'onde maximale et minimale de cette série? Déterminer leurs valeurs.
3. A quelle transition correspond la longueur d'onde  $\lambda = 2872nm$ ?

### Exercice 2

En utilisant l'inégalité de Heisenberg position - impulsion, retrouver l'énergie minimale d'un oscillateur harmonique  $E_0 = \hbar\omega_0/2$ .

### Exercice 3

Un proton d'énergie  $E = 1MeV$  aborde une marche de potentiel «haute» de  $V_0 = 100keV$ .

1. Avant la marche de potentiel, calculer la longueur d'onde et la vitesse du proton.
2. Même question «au dessus de la marche de potentiel».
3. Retrouver les expressions de la fonction d'onde associée au proton .
4. Calculer la probabilité pour le proton d'être réfléchi par la marche de potentiel.

### Exercice 4

On donne, à propos de l'effet tunnel, le résultat suivant :

$$T = \frac{4E(V_0 - E)}{4E(V_0 - E) + V_0^2 \sinh^2 \left( \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)} L}{\hbar} \right)}$$

1. Expliquer ce que représentent les différentes grandeurs qui interviennent dans cette égalité.
2. Re-écrire cette expression en faisant intervenir un paramètre  $\delta$  homogène à une longueur et expliquer sa signification physique.
3. Les microscopes à effet tunnel mettent en jeu des électrons avec les ordres de grandeur suivants :  $E = 60meV$  et  $V_0 = 5eV$ . Calculer numériquement  $\delta$  pour ces valeurs. Calculer  $T$  pour ces valeurs et  $L = 0.1nm$ .
4. Lorsque  $L \gg \delta$  on peut utiliser l'approximation de la barrière de potentiel épaisse. Montrer que l'on obtient la relation approchée :

$$T = \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} \exp \left( \frac{-2L}{\delta} \right)$$

5. En prenant pour  $E$  et  $V_0$  les valeurs de la question 3 (et toujours pour un électron), tracer  $T = f(L)$  en échelle log pour  $T$  avec et sans l'approximation de la barrière épaisse sur le même graphe, pour  $L$  variant entre 0 et  $0,3nm$ .

## Exercice 5

Un atome d'hydrogène est confiné à l'intérieur d'un puits de potentiel infiniment profond, de largeur  $L = 2$  nm selon  $(Ox)$  : le puits correspond au domaine  $[0, L]$ . Son énergie est  $E$  et on admet que la fonction d'onde qui le décrit est donnée par :

$$\psi(x, t) = A \sin\left(\frac{3\pi x}{L}\right) e^{-i\frac{Et}{\hbar}} \quad \forall x \in [0, L]$$

La fonction d'onde est nulle en dehors du puits.

1. A quel niveau d'énergie cette fonction d'onde correspond-elle ? Calculer numériquement cette énergie.
2. Représenter graphiquement  $|\psi|^2$  en fonction de  $x$ .
3. Déterminer la constante  $A$ .
4. Quelle est la probabilité de détecter l'atome entre les abscisses  $x = 0$  et  $x = L/3$  ?

## Exercice 6

On appelle boîte de potentiel une situation où une particule est dans un puits de potentiel infini à 3 dimensions, c'est-à-dire que :

$$V(x, y, z) = \begin{cases} 0 & \text{si } 0 < x < L_x \text{ et } 0 < y < L_y \text{ et } 0 < z < L_z \\ \infty & \text{sinon} \end{cases}$$

On recherche des états stationnaires, et on admettra que la partie spatiale de la fonction d'onde  $\Phi(x, y, z)$  peut s'écrire :

$$\Phi(x, y, z) = \phi_x(x) \phi_y(y) \phi_z(z)$$

1. Ecrire l'équation de Schrodinger vérifiée par  $\Phi(x, y, z)$ .
2. Mettre sous la forme d'une somme de 3 termes qui ne dépendent respectivement que de  $x$ ,  $y$  et  $z$  et d'un terme constant. En déduire 3 équations différentielles vérifiées, respectivement, par  $\phi_x(x)$ ,  $\phi_y(y)$  et  $\phi_z(z)$  (on posera  $E = E_x + E_y + E_z$ ).
3. En déduire la quantification de l'énergie de la particule :

$$E = \frac{\hbar^2}{8m} \left( \left(\frac{n_x}{L_x}\right)^2 + \left(\frac{n_y}{L_y}\right)^2 + \left(\frac{n_z}{L_z}\right)^2 \right)$$

où  $n_x$ ,  $n_y$  et  $n_z$  sont 3 entiers strictement positifs.

4. On se place dans le cas d'une boîte cubique :  $L_x = L_y = L_z = L$ . Donner les expressions des 6 premiers niveaux d'énergie ainsi que les facteurs de dégénérescence qui leur sont associés.
5. Calculer numériquement l'énergie minimale d'un électron dans une boîte de potentiel de côté  $0,1$  nm.

## Exercice 7

On considère une particule de masse  $m$ , soumise à un potentiel de la forme  $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ . Dans l'état fondamental (stationnaire) d'énergie  $E_0$ , la fonction d'onde de la particule est donnée par  $\psi(x, t) = A \exp\left(-\frac{x^2}{a^2}\right) e^{-i\frac{E_0 t}{\hbar}}$

On donne :  $\int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-\alpha u^2) du = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$

1. Pourquoi qualifie-t-on cette situation d'oscillateur harmonique ?
2. Déterminer la constante  $A$ .
3. Représenter l'allure de la densité de probabilité de présence de la particule en fonction de  $x$ . Que représente  $a$  physiquement ?
4. En utilisant l'équation de Schrödinger, déterminer l'expression de  $E_0$  en fonction de  $\hbar$  et  $\omega$ .

## Exercice 8

En déposant une fine couche d'un matériau semi-conducteur comme GaAs sur un autre semi-conducteur (tel que  $\text{Ga}_{0,7}\text{Al}_{0,3}\text{As}$ ), on réalise un puits d'énergie potentielle pour un électron de cette couche. L'interface vide-GaAs peut-être assimilée à une barrière de hauteur infinie, ce qui donne la forme suivante pour  $V(x)$  :

$$V(x) = \begin{cases} +\infty & \text{pour } x < 0 \\ 0 & \text{pour } 0 < x < L \\ V_0 & \text{pour } x > L \end{cases} \quad (V_0 > 0)$$

1. L'énergie de l'électron est inférieure à  $V_0$ . Résoudre l'équation de Schrödinger des états stationnaires et établir la condition de quantification de l'énergie :  $\tan(kL) = -k/\rho$  avec  $k = \sqrt{2mE}/\hbar$  et  $\rho = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$ .
2. Que devient cette condition si le rapport  $V_0/E$  tend vers l'infini ? Commenter.

## Exercice 9

On s'intéresse à un puits de potentiel de profondeur finie à une dimension, c'est à dire que :

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } 0 < x < L \\ V_0 & \text{sinon} \end{cases}$$

On recherche les solutions à l'équation de Schrodinger pour des états stationnaires.

1. Ecrire l'équation de Schrodinger pour chacun des deux cas. On notera  $\rho = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$  et  $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ .
2. En déduire les expressions des fonctions d'onde associées pour chacune des 3 zones de l'espace. On ne cherchera pas à normaliser et on fera attention à ce que les solutions obtenues ne divergent pas.
3. En exploitant les conditions de continuité, montrer que :

$$\exp(2ikL) = \left( \frac{\rho - ik}{\rho + ik} \right)^2$$

4. On traite le cas  $\exp(ikL) = -\frac{\rho - ik}{\rho + ik}$  (l'autre cas étant  $\exp(ikL) = \frac{\rho - ik}{\rho + ik}$ ). Montrer que cela conduit à :

$$\begin{cases} |\cos(\frac{kL}{2})| = \frac{k}{k_0} \\ \tan(\frac{kL}{2}) > 0 \end{cases}$$

avec  $k_0 = \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar}$ .

5. On considère les valeurs suivantes :  $m = 9.10^{-31} \text{kg}$  (électron),  $V_0 = 10 \text{eV}$  et  $L = 1 \text{nm}$ . Calculer numériquement  $k_0$ .
6. Résoudre numériquement (de manière approximative, on peut se limiter à tracer les courbes et repérer les intersections) pour trouver les trois valeurs de  $k$  possibles et calculer les énergies associées (il y a d'autres valeurs possibles associées au cas  $\exp(ikL) = \frac{\rho - ik}{\rho + ik}$ ).

## Exercice 10

On cherche à retrouver les niveaux d'énergie de l'atome d'hydrogène en résolvant l'équation de Schrödinger. On se limitera aux états  $s$ , qui possèdent la symétrie sphérique.

1. On donne l'expression du laplacien en coordonnées sphériques :

$$\Delta f = \frac{1}{r} \frac{\partial^2 (rf)}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2 \sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin(\theta) \frac{\partial f}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2(\theta)} \frac{\partial^2 f}{\partial \phi^2}$$

Montrer que, compte tenu de l'hypothèse de symétrie sphérique et pour des états stationnaires, l'équation de Schrödinger s'écrit :

$$\frac{d^2(r\psi)}{dr^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} \left( E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) (r\psi)$$

2. On pose  $r = \rho a_0$  et  $E = \beta E_0$  avec  $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2}$  et  $E_0 = \frac{me^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2}$ . Calculer les valeurs numériques de  $a_0$  et  $E_0$  et montrer que l'équation devient avec ces notations :

$$\frac{d^2(\rho\psi)}{d\rho^2} = -\left( \beta + \frac{2}{\rho} \right) (\rho\psi)$$

3. On pose  $\rho\psi = f = e^{-\alpha\rho}g$  avec  $\alpha^2 = -\beta$ . Montrer que  $g$  vérifie :

$$\frac{d^2g}{d\rho^2} - 2\alpha \frac{dg}{d\rho} + \frac{2}{\rho}g = 0$$

4. On cherche une solution sous la forme d'une série :  $g(\rho) = \sum_{k=1}^{\infty} a_k \rho^k$ . Montrer que l'on doit avoir, pour tout  $k$  supérieur ou égal à 1 :

$$a_{k+1} = \frac{2(\alpha k - 1)}{k(k+1)} a_k$$

5. Montrer que, si les termes de la série ne sont pas nuls à partir d'un certain rang, le comportement de la fonction d'onde n'est pas physiquement acceptable.
6. En déduire les valeurs possibles pour  $\alpha$  et donc celles que peut prendre l'énergie  $E$ .