Exercice 1

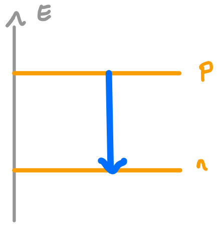
La série de Pfund de l'atome d'hydrogène correspond à une transition vers le niveau d'énergie $n = 5$.

1. Calculer la longueur d'onde $\lambda_{7\to5}$ 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 $\lambda = 2872nm$?

1.



$$E_{photon} = E_p - E_n = -\frac{E_0}{p^2} - \left(-\frac{E_0}{n^2}\right) = E_0\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{p^2}\right)$$

et $E_{photon} = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$ $\Rightarrow$ $\lambda_{p\to n} = \frac{hc}{E_0} \frac{1}{1/n^2 - 1/p^2}$

A.N : $\frac{hc}{E_0} = 9,13 \cdot 10^{-8}\ m = 91,3\ nm$

$\lambda_{7\to5} = 4660\ nm$

2. λ_{max} correspond à E_{photon} minimale, donc à une transition $6 \to 5$

$\lambda_{min} \Rightarrow E_{photon}$ max, donc transition $\infty \to 5$

A.N : $\lambda_{max} = 7470\ nm$ $\lambda_{min} = 2282\ nm$

3. On reprend $\lambda = \frac{hc}{E_0} \frac{1}{1/25 - 1/p^2}$ (car $n = 5$) $\Rightarrow \frac{1}{25} - \frac{1}{p^2} = \frac{hc}{\lambda E_0}$ $\Rightarrow \frac{1}{p^2} = \frac{1}{25} - \frac{hc}{\lambda E_0}$

A.N : $p = 11$ $\lambda_{11\to5} = 2872\ nm$

Exercice 2

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

Raisonnement analogue à celui fait pour l'atome d'hydrogène :

$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2$ et $\omega_0 = \sqrt{k/m}$ donc $k = m\omega_0^2$ $\Rightarrow$ $E = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega_0^2}{2}x^2$

$\Delta x \, \Delta p_x \geq \hbar$ donne, au minimum, $p \cdot x \sim \hbar$

donc $E \sim \frac{\hbar^2}{2mx^2} + \frac{m\omega_0^2}{2}x^2$

On cherche la valeur min. de E, donc $\frac{dE}{dx} = 0$

d'où $\frac{\hbar^2}{2m}\left(-\frac{2}{x^3}\right) + \frac{m\omega_0^2}{2} \cdot 2x = 0$ $\Rightarrow$ $\frac{\hbar^2}{m} = m\omega_0^2 x^4$ $\Rightarrow$ $x^2 = \frac{\hbar}{m\omega_0}$ $(x^2 > 0)$

On injecte dans l'expression de E :

$E \sim \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{m\omega_0}{\hbar} + \frac{m\omega_0^2}{2} \cdot \frac{\hbar}{m\omega_0} = \hbar\omega_0$

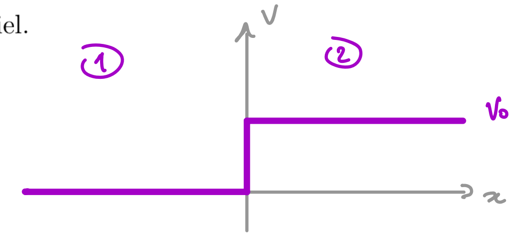
Donc $E_0 = \hbar\omega_0$

ce n'est pas exactement le résultat attendu (facteur 2 ...), mais il faut bien voir que Heisenberg ne donne que des ordres de grandeur. Si on tombe sur l'expression exacte, c'est juste une heureuse coïncidence.

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.



1- $E = p^2/2m + V$ en général, donc avant la marche

$E = p^2/2m$ car $V = 0$ $\Rightarrow$ $p = \sqrt{2mE}$

Or, $p = \hbar k$, donc $k = p/\hbar = \dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$

et comme $k = \dfrac{2\pi}{\lambda}$, $\lambda = \dfrac{2\pi}{k} = \dfrac{2\pi\hbar}{p} = \dfrac{h}{p} = \dfrac{h}{\sqrt{2mE}}$ $\boxed{\lambda = \dfrac{h}{\sqrt{2mE}}}$

On peut trouver la vitesse en tant que vitesse de groupe à partir de

$E = p^2/2m \Rightarrow \hbar\omega = \dfrac{(\hbar k)^2}{2m}$ et $v_g = \dfrac{d\omega}{dk}$, mais cela donne la même chose

que $v = \dfrac{p}{m}$, d'où $v = \dfrac{\sqrt{2mE}}{m} = \sqrt{\dfrac{2E}{m}}$ $\boxed{v = \sqrt{\dfrac{2E}{m}}}$

A.N : $\lambda_1 = 2,86 \cdot 10^{-14}$ m $v_1 = 1,38 \cdot 10^{7}$ m.s^{-1}

2. Même principe, mais cette fois $V = V_0$ donc $E = p^2/2m + V_0$ $\Rightarrow$ $p = \sqrt{2m(E-V_0)}$

Il suffit de remplacer E par $E - V_0$ dans les formules précédentes.

A.N : $\lambda_2 = 3,01 \cdot 10^{-14}$ m $v_2 = 1,31 \cdot 10^{7}$ m.s^{-1}

3. Avant la marche : $-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2\varphi}{dx^2} = E\varphi \Rightarrow \dfrac{d^2\varphi}{dx^2} + k_1^2\varphi = 0$ avec $k_1 = \dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$

On obtient le même k avec Schrodinger qu'avec $\begin{cases} E = p^2/2m \\ p = \hbar k \end{cases}$

solutions : $\varphi_1(x) = A_1 e^{ik_1x} + B_1 e^{-ik_1x}$

$$\Rightarrow \psi_1(x,t) = \underbrace{A_1 e^{ik_1x} e^{-i\omega t}}_{\text{incidente}} + \underbrace{B_1 e^{-ik_1x} e^{-i\omega t}}_{\text{réfléchie}}$$

Après la marche : $-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2\varphi}{dx^2} + V\varphi = E\varphi \Rightarrow \dfrac{d^2\varphi}{dx^2} + k_2^2\varphi = 0$ avec $k_2 = \dfrac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$

solutions : $\varphi_2(x) = A_2 e^{ik_2x} + B_2 e^{-ik_2x}$

$$\Rightarrow \psi_2(x,t) = \underbrace{A_2 e^{ik_2x} e^{-i\omega t}}_{\text{transmise}} + \underbrace{B_2 e^{-ik_2x} e^{-i\omega t}}_{\text{traduirait une particule venant de la droite, ce qui n'est pas dans les hypothèses, donc } B_2 = 0}$$

4. On reprend les expressions calculées en cours (il est tout à fait conseillé de le refaire pour s'entraîner !) :

$$T = \frac{4 k_1 k_2}{(k_1+k_2)^2} = \frac{4 \sqrt{2mE}/\hbar \sqrt{2m(E-V_0)}/\hbar}{\left(\sqrt{2mE}/\hbar + \sqrt{2m(E-V_0)}/\hbar\right)^2} = \frac{4\sqrt{E(E-V_0)}}{\left(\sqrt{E} + \sqrt{E-V_0}\right)^2} = \frac{4\sqrt{\frac{E}{V_0}\left(\frac{E}{V_0}-1\right)}}{\left(\sqrt{\frac{E}{V_0}} + \sqrt{\frac{E}{V_0}-1}\right)^2}$$

A.N : $T = 0{,}999$

T augmente très vite avec le rapport E/V_0, ici égal à 10 $\left(\frac{1\,\text{MeV}}{100\,\text{keV}} = 10\right)$

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 δ 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 δ pour ces valeurs. Calculer T pour ces valeurs et $L = 0.1nm$.

4. Lorsque $L >> \delta$ 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 $0,3nm$.

1.

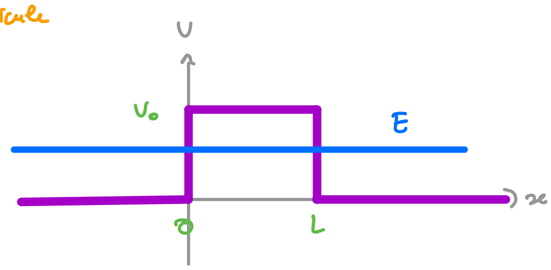
$$T = \frac{4E(V_0 - E)}{4E(V_0 - E) + V_0^2 sinh^2\left(\frac{\sqrt{2m(V_0-E)}\ L}{\hbar}\right)}$$

énergie de la particule

probabilité de traverser la barrière de potentiel

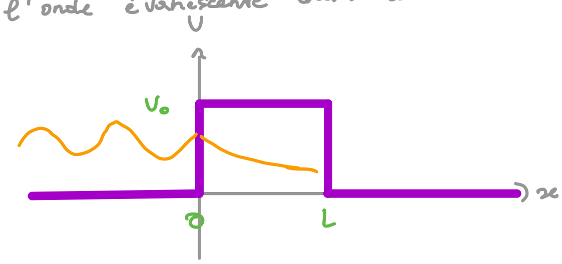
hauteur de la barrière

longueur de la barrière



2. On pose $\delta = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0-E)}}$ et $T = \frac{4E(V_0-E)}{4E(V_0-E) + V_0^2 \sinh^2(L/\delta)}$

δ est l'ordre de grandeur de la "portée" de l'onde évanescente dans la barrière

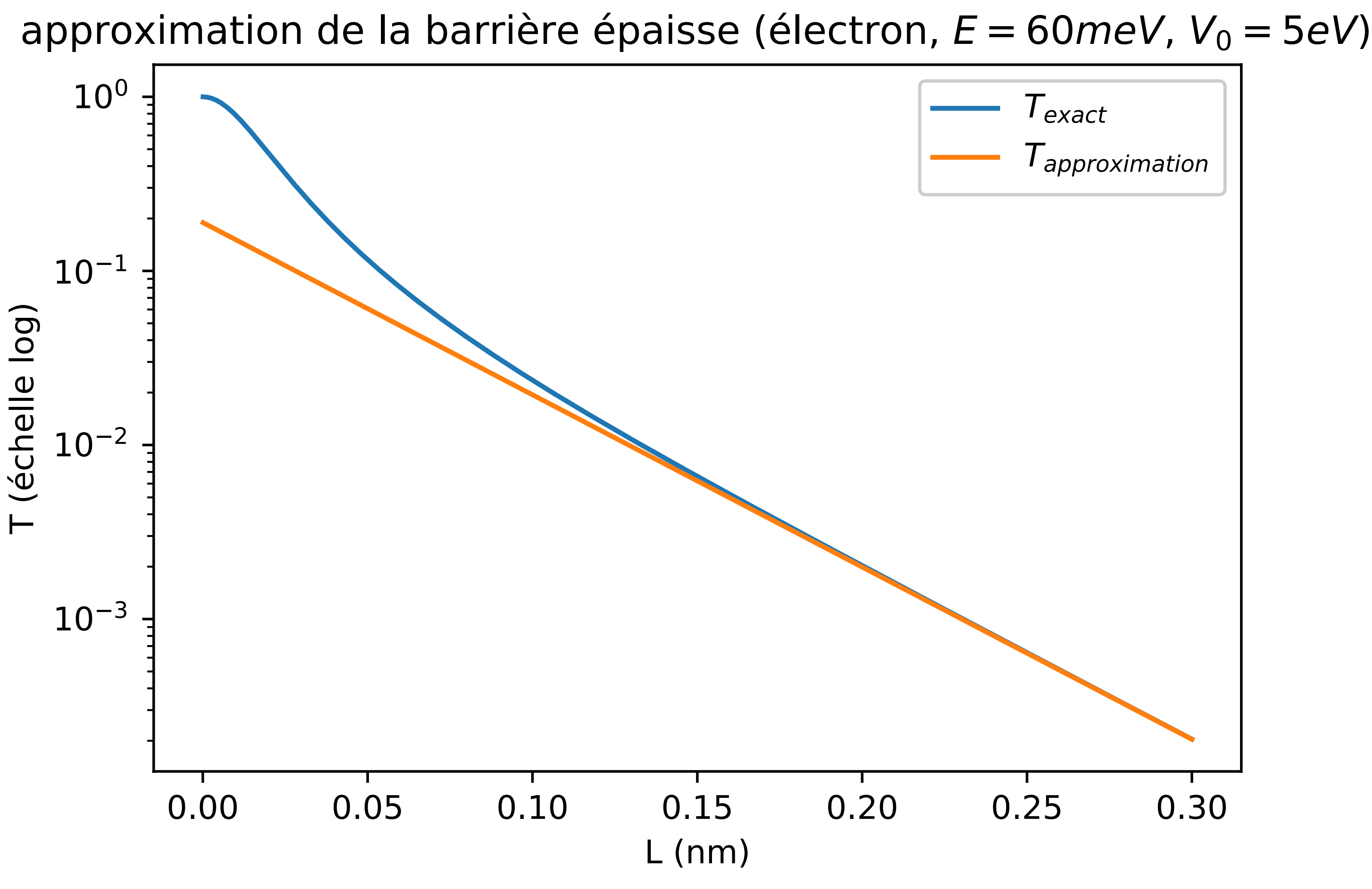


3. A.N : $\boxed{\begin{array}{l} \delta = 8{,}8.10^{-11}\ m \\ T = 0{,}024 \end{array}}$

4. Si $L >> \delta$, $\sinh(L/\delta) \simeq \frac{e^{L/\delta}}{2}$ et $e^{L/\delta} >> 1$

Or, $V_0 > E$, donc $\frac{V_0^2}{4} e^{2L/\delta} >> 4E(V_0-E)$

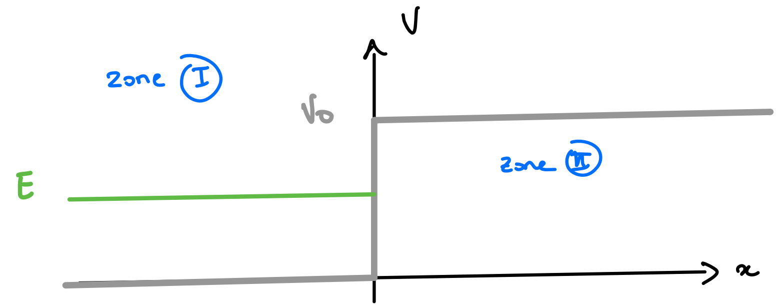
Donc $T = \frac{4E(V_0-E)}{\frac{V_0^2}{4} e^{2L/\delta}} = \frac{16E(V_0-E)}{V_0^2} e^{-2L/\delta}$



approximation de la barrière épaisse (électron, $E = 60meV$, $V_0 = 5eV$)
10^0
10^{-1}
10^{-2}
10^{-3}
T (échelle log)
0.00
0.05
0.10
0.15
0.20
0.25
0.30
L (nm)
T_{exact}
$T_{approximation}$

Exercice 5

Montrer que la probabilité de réflexion d'une particule d'énergie E sur une marche de potentiel de hauteur V_0 est égale à 1 dans le cas où $E < V_0$.



- Dans la zone (I) φ vérifie :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi}{dx^2} = E\varphi$$

$$\Rightarrow \frac{d^2\varphi}{dx^2} + k\varphi = 0 \quad \text{avec } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

solutions : $\varphi_I = \underbrace{A e^{ikx}}_{\text{particule incidente}} + \underbrace{B e^{-ikx}}_{\text{particule réfléchie}}$

- Dans la zone (II), φ vérifie : $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi}{dx^2} + V_0\varphi = E\varphi \Rightarrow \frac{d^2\varphi}{dx^2} - \rho^2\varphi = 0$

avec $\rho = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$

solutions : $\varphi_{II} = C e^{-\rho x} + D e^{\rho x}$

c'est donc un comportement évanescent. On doit avoir $D = 0$, sinon φ, et donc $|\varphi|^2$ diverge pour $x \to +\infty$.

Donc $\varphi_{II} = C e^{-\rho x}$

- On utilise les continuités : $\varphi_I(x=0) = \varphi_{II}(x=0) \Rightarrow A + B = C$ (1)

et $\frac{d\varphi_I}{dx}(x=0) = \frac{d\varphi_{II}}{dx}(x=0) \Rightarrow ik(A-B) = -\rho C$ (2)

On élimine C : $\rho(A+B) = -ik(A-B) \Rightarrow A(ik+\rho) = B(ik-\rho)$

$$\Rightarrow \frac{B}{A} = \frac{ik+\rho}{ik-\rho} \Rightarrow \left|\frac{B}{A}\right| = 1$$

Or, $\vec{J_I} = |A|^2 \frac{\hbar k}{m}\vec{e_x}$ et $\vec{J_{-I}} = |B|^2\frac{\hbar k}{m}(-\vec{e_x})$

D'où $R = \frac{J_{-I}}{J_I} = \left|\frac{B}{A}\right|^2 = 1.$

On a donc bien $R = 1$ (et donc $T = 0$) : la probabilité de réflexion vaut 1, la particule est systématiquement réfléchie.

Exercice 6

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 :

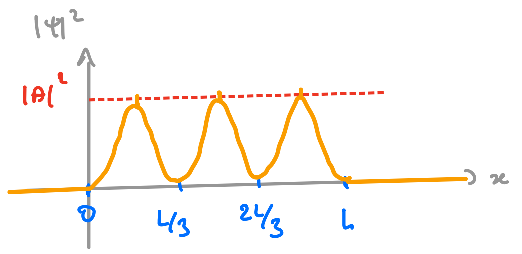
$$\psi(x,t) = A \sin\left(\frac{3\pi x}{L}\right) e^{-i\frac{Et}{\hbar}} \quad \forall x \in [0, L]$$

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 $x = L/3$?

1. $n = 3$ car $\psi(x,t) = A \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$ en général.

$E = \frac{n^2 h^2}{8 m L^2}$ A.N : $E = 7{,}38 \cdot 10^{-23}$ J $= 0{,}46$ meV

2. 

$|\psi|^2 = |A|^2 \underbrace{\sin^2\left(\frac{3\pi x}{L}\right)}$

s'annule pour $x = 0$; $L/3$; $2L/3$ et L

3. $A = \sqrt{\frac{2}{L}}$ (vu en cours) en écrivant $\int_0^L |\psi|^2 \, dx = 1$

$\cos(2x) = \cos^2 x - \sin^2 x$
$= 1 - 2\sin^2 x$
$\Rightarrow \sin^2 x = \frac{1 - \cos(2x)}{2}$

car $|\psi|^2 = |A|^2 \sin^2\left(\frac{3\pi x}{L}\right) = \frac{|A|^2}{2}\left(1 - \cos\left(\frac{6\pi x}{L}\right)\right)$

et $\int_0^L \frac{|A|^2}{2}\left(1 - \cos\left(\frac{6\pi x}{L}\right)\right) dx = \frac{|A|^2}{2}\left(\underbrace{\int_0^L dx}_{L} - \underbrace{\int_0^L \cos\left(\frac{6\pi x}{L}\right) dx}_{0}\right)$

$= \frac{|A|^2 L}{2}$

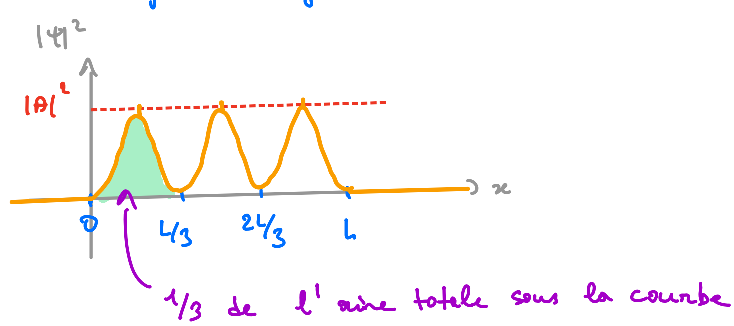
Donc $\frac{|A|^2 L}{2} = 1$, d'où $|A|^2 = \frac{2}{L}$ et donc $|A| = \sqrt{\frac{2}{L}}$ on choisit $A = \sqrt{\frac{2}{L}}$

(peu importe la phase)

4. $P(0 < x < L/3) = \int_0^{L/3} |\psi|^2 \, dx$ ce qui donne $P(0 < x < L/3) = 1/3$

même calcul qu'au 3) à part la borne sup. de l'intégrale

on le voit facilement graphiquement :



Exercice 7

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

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

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 :

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

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

4. On se place dans le cas d'une boite 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 boite de potentiel de coté $0,1nm$.

1. On est dans le cas général à 3D, avec $V = 0$ (à l'intérieur de la boite) :

$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\phi = E\phi$ donc en cartésiennes : $-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\phi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\phi}{\partial z^2}\right) = E\phi$

2. $\phi(x,y,z) = \phi_x(x)\ \phi_y(y)\ \phi_z(z)$

ainsi, $\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2} = \frac{\partial^2\phi_x}{\partial x^2}\phi_y\phi_z$; $\frac{\partial^2\phi}{\partial y^2} = \phi_x\frac{\partial^2\phi_y}{\partial y^2}\phi_z$ et $\frac{\partial^2\phi}{\partial z^2} = \phi_x\phi_y\frac{\partial^2\phi}{\partial z^2}$

en injectant ceci dans l'équation de la question 1 et en divisant par ϕ,

on obtient : $-\frac{\hbar^2}{2m}\Big(\underbrace{\frac{1}{\phi_x}\frac{\partial^2\phi_x}{\partial x^2}}_{\text{dépend de } x} + \underbrace{\frac{1}{\phi_y}\frac{\partial^2\phi_y}{\partial y^2}}_{\text{dépend de } y} + \underbrace{\frac{1}{\phi_z}\frac{\partial^2\phi_z}{\partial z^2}}_{\text{dépend de } z}\Big) = E = \underbrace{E_x + E_y + E_z}_{\text{constant}}$

On en déduit les 3 équations :

$$\begin{cases} \frac{\partial^2\phi_x}{\partial x^2} + k_x^2\phi_x = 0 \quad \text{avec } k_x = \frac{\sqrt{2mE_x}}{\hbar} \quad (1) \\ \frac{\partial^2\phi_y}{\partial y^2} + k_y^2\phi = 0 \quad \text{avec } k_y = \frac{\sqrt{2mE_y}}{\hbar} \quad (2) \\ \frac{\partial^2\phi_z}{\partial z^2} + k_z^2\phi = 0 \quad \text{avec } k_z = \frac{\sqrt{2mE_z}}{\hbar} \quad (3) \end{cases}$$

3. Résolvons (1) : $\phi_x = A e^{ik_x x} + B e^{-ik_x x}$

$\phi_x(x=0)$ donne $A + B = 0 \Rightarrow \phi_x = A(e^{ik_x} - e^{-ik_x}) = 2iA\sin(k_x)$

et $\phi_x(x = L_x)$ donne $\sin(k_x L_x) = 0 \Rightarrow k_x L_x = n_x\pi \Rightarrow k_x = \frac{\pi n_x}{L_x}$

d'où $E_x = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\pi^2 n_x^2}{L_x^2} = \frac{h^2 n_x^2}{8 m L_x^2}$

c'est exactement les mêmes calculs que pour le puits infini 1D.

de même, $E_y = \frac{h^2 n_y^2}{8 m L_y^2}$ et $E_z = \frac{h^2 n_z^2}{8 m L_z^2}$

Enfin, $E = E_x + E_y + E_z$, ce qui donne $\boxed{E = \frac{h^2}{8m}\left(\left(\frac{n_x}{L_x}\right)^2 + \left(\frac{n_y}{L_y}\right)^2 + \left(\frac{n_z}{L_z}\right)^2\right)}$

4.

$L_x = L_y = L_z = L \Rightarrow E = \frac{h^2}{8mL^2}\left(n_x^2 + n_y^2 + z^2\right)$

$\frac{8mL^2E}{h^2}$

- 14 $(3,2,1)$; $(3,1,2)$; $(2,1,3)$; $(2,3,1)$; $(1,2,3)$ et $(1,3,2)$ $\Rightarrow g = 6$
- 12 $\rightarrow (2,2,2) \Rightarrow g = 1$
- 11 $\rightarrow (3,1,1)$; $(1,3,1)$ et $(1,1,3)$ $\Rightarrow g = 3$
- 9 $(1,2,2)$; $(2,1,2)$ et $(2,2,1)$ $\Rightarrow g = 3$
- 6 $(2,1,1)$; $(1,2,1)$ et $(1,1,2)$ $\Rightarrow g = 3$
- 3 $(1,1,1) \Rightarrow g = 1$

5. $E_{min} = \frac{3h^2}{8mL^2}$ A.N : $E_{min} = 1,8 \cdot 10^{-17}$ J $= 113$ eV.

Exercice 8

On considère une particule de masse m, soumise à un potentiel de la forme $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$. 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 : $\int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\alpha u^2\right) \mathrm{d}u = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$

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 ω.

1. $V = \frac{1}{2} m\omega x^2 = \frac{1}{2} k x^2$ en posant $k = m\omega^2$, on retrouve l'énergie potentielle associée à une force de rappel élastique, or une masse m soumise à une telle force constitue un oscillateur harmonique.

2. Condition de normalisation 1D : $\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 \, dx = 1$

Or, $|\psi|^2 = |A|^2 e^{-\frac{2x^2}{a^2}}$

Donc $|A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{2x^2}{a^2}} dx = 1$

Or, $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{2x^2}{a^2}} dx = \sqrt{\frac{\pi a^2}{2}}$ donc $|A|^2 \sqrt{\frac{\pi}{2}}\, a = 1 \Rightarrow |A|^2 = \frac{1}{a}\sqrt{\frac{2}{\pi}}$

D'où $\boxed{A = \sqrt{\frac{1}{a}\sqrt{\frac{2}{\pi}}}}$ en choisissant arbitrairement une phase nulle, on n'a obtenu que $|A|$ ...

3. Représentation graphique page suivante. a (homogène à une longueur) est associé à l'extension spatiale de la fonction d'onde (de l'ordre de $4a$, de $-2a$ à $+2a$).

4. État stationnaire : $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi}{dx^2} + V\varphi = E_0\varphi$

Or, $\varphi(x) = A e^{-x^2/a^2} \Rightarrow \frac{d\varphi}{dx} = A e^{-x^2/a^2}\left(-\frac{2x}{a^2}\right) \Rightarrow \frac{d^2\varphi}{dx^2} = A e^{-x^2/a^2}\left(\frac{4x^2}{a^4} - \frac{2}{a^2}\right)$

$= \varphi \cdot \frac{2}{a^2}\left(\frac{2x^2}{a^2} - 1\right)$

et $V = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$

D'où $-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \varphi \cdot \frac{2}{a^2}\left(\frac{2x^2}{a^2} - 1\right) + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \varphi = E_0 \varphi$

Soit $\frac{\hbar^2}{ma^2}\left(1 - \frac{2x^2}{a^2}\right) + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 = E_0$

Ça doit être vérifié $\forall x$, donc :

$$\begin{cases} \frac{\hbar^2}{ma^2} = E_0 & (1) \\ -\frac{2\hbar^2}{ma^4} + \frac{1}{2} m\omega^2 = 0 & (2) \end{cases}$$

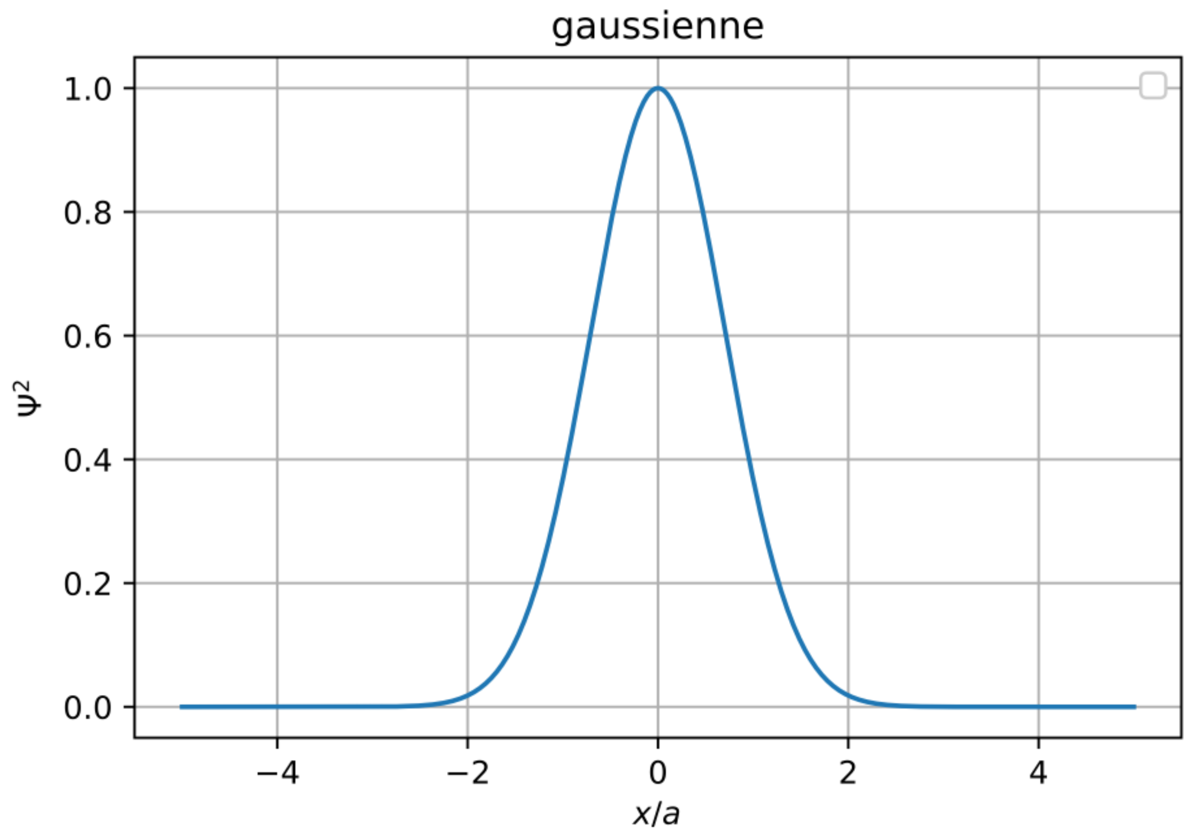
(2) donne $2\hbar^2 = \frac{m^2 a^4 \omega^2}{2}$

donc $a^2 = \frac{2\hbar}{m\omega}$

et on injecte dans (1) :

$E_0 = \frac{\hbar^2}{m} \cdot \frac{m\omega}{2\hbar}$ donc $\boxed{E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}}$

On retrouve ainsi l'énergie de l'état fondamental d'un oscillateur harmonique en physique quantique.



gaussienne
1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0.0
ψ²
−4
−2
0
2
4
x/a

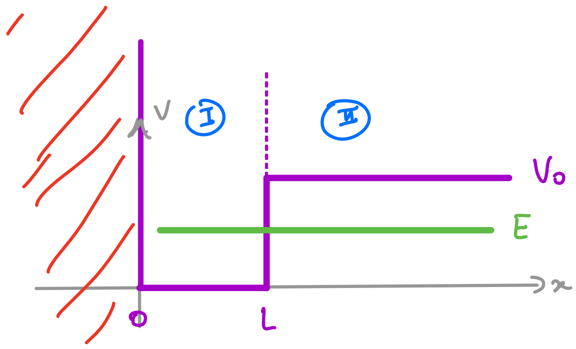
Exercice 9

En déposant une fine couche d'un matériau semi-conducteur comme GaAS sur un autre semi-conducteur (tel que $Ga_{0,7}Al_{0,3}As$), 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) :

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

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.



1. zone I : $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi}{dx^2} = E\varphi$

$\Rightarrow \frac{d^2\varphi}{dx^2} + k^2\varphi = 0 \qquad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$

$\varphi_I(x) = A\,e^{ikx} + B\,e^{-ikx}$

zone II : $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi}{dx^2} + V_0\varphi = E\varphi \qquad (E < V_0)$

$\Rightarrow \frac{d^2\varphi}{dx^2} - \rho^2\varphi = 0 \quad , \quad \rho = \frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}$

$\varphi_{II}(x) = C\,e^{-\rho x} + \underbrace{D\,e^{\rho x}}_{\text{diverge}}$

diverge, donc il faut $D = 0$

continuité : $\varphi_I(x=0) = 0$ (présence "interdite" pour $x \leq 0$)

$\Rightarrow A + B = 0$ (1)

on n'exploite pas la continuité de $\frac{d\varphi}{dx}$ à la limite d'une zone interdite.

$\varphi_I(x=L) = \varphi_{II}(x=L)$

$\Rightarrow A\,e^{ikL} + B\,e^{-ikL} = C\,e^{-\rho L}$ (2)

$\frac{d\varphi_I}{dx}(x=L) = \frac{d\varphi_{II}}{dx}(x=L)$

$\Rightarrow ik(A\,e^{ikL} - B\,e^{-ikL}) = -\rho C\,e^{-\rho L}$ (3)

(1) donne $B = -A$, donc :

(2) $\Rightarrow A(e^{ikL} - e^{-ikL}) = C\,e^{-\rho L} \Rightarrow 2iA\sin(kL) = C\,e^{-\rho L}$

(3) $\Rightarrow ikA(e^{ikL} + e^{-ikL}) = -\rho C\,e^{-\rho L} \Rightarrow 2ikA\cos(kL) = -\rho C\,e^{-\rho L}$

donc $2iA\sin(kL) = \frac{2ikA}{-\rho}\cos(kL) \Rightarrow \sin(kL) = -\frac{k}{\rho}\cos(kL) \Rightarrow \boxed{\tan(kL) = -\frac{k}{\rho}}$

2. $V_0 \gg E$ $\Rightarrow$ $\rho \gg k$ et donc $\frac{k}{\rho} \ll 1$

d'où $\tan(kL) \simeq 0$ donc $kL \simeq n\pi$ $\Rightarrow$ $k \simeq \frac{n\pi}{L}$

et ensuite $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ $\Rightarrow$ $E = \frac{(\hbar k)^2}{2m}$ $\Rightarrow$ $E = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2mL}$

soit $E = \frac{n^2 h^2}{8mL^2}$

On retrouve les résultats obtenus pour le puits infini, ce qui est logique pour $V_0 \gg E$.

Exercice 10

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

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

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 :

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

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

5. On considère les valeurs suivantes : $m = 9.10^{-31} kg$ (électron), $V_0 = 10eV$ et $L = 1nm$. Calculer numériquement k_0.

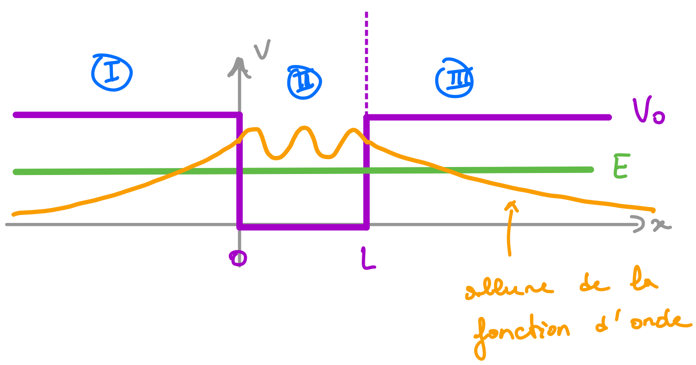
6. Résoudre numériquement (de manière approximative, on peut se limiter à tracer les courbes et repérer les intersections) pour trouver les trois valeurs de k possibles et calculer les énergies associées (il y a d'autres valeurs possibles associées au cas $exp(ikL) = \frac{\rho-ik}{\rho+ik}$).

1. zones (I) et (III) : $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi}{dx^2} + V_0\varphi = E\varphi$

$\Rightarrow \frac{d^2\varphi}{dx^2} - \rho^2\varphi = 0$, $\rho = \frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}$

zone (II) : $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi}{dx^2} = E\varphi$

$\Rightarrow \frac{d^2\varphi}{dx^2} + k^2\varphi = 0$, $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$



2. (I) : $\varphi_I(x) = A e^{\rho x} + \underbrace{A' e^{-\rho x}}$ diverge pour $x \to -\infty \Rightarrow A' = 0$

(II) : $\varphi_{II}(x) = B e^{ikx} + C e^{-ikx}$

(III) : $\varphi_{III}(x) = D e^{-\rho x} + \underbrace{D' e^{\rho x}}$ diverge pour $x \to +\infty \Rightarrow D' = 0$

3. continuité de φ en $x = 0$: $\varphi_I(x=0) = \varphi_{II}(x=0) \Rightarrow A = B + C$ (1)

continuité de $\frac{d\varphi}{dx}$ en $x = 0$: $\frac{d\varphi_I}{dx}(x=0) = \frac{d\varphi_{II}}{dx}(x=0) \Rightarrow \rho A = ik(B - C)$ (2)

continuité de φ en $x = L$: $\varphi_{II}(x=L) = \varphi_{III}(x=L) \Rightarrow B e^{ikL} + C e^{-ikL} = D e^{-\rho L}$ (3)

continuité de $\frac{d\varphi}{dx}$ en $x = L$: $\frac{d\varphi_{II}}{dx}(x=L) = \frac{d\varphi_{III}}{dx}(x=L) \Rightarrow ik(B e^{ikL} - C e^{-ikL}) = -\rho D e^{-\rho L}$ (4)

(1) et (2) donnent : $B + C = \frac{ih}{\rho}(B - C) \Rightarrow C\left(1 + \frac{ih}{\rho}\right) = B\left(\frac{ih}{\rho} - 1\right)$

$$\Rightarrow B = C\,\frac{ih + \rho}{ih - \rho} \quad (5)$$

(3) et (4) donnent : $B e^{ihL} + C e^{-ihL} = -\frac{ih}{\rho}\left(B e^{ihL} - C e^{-ihL}\right) \quad (6)$

On injecte (5) dans (6) : $C\,\frac{ih+\rho}{ih-\rho} e^{ihL} + C e^{-ihL} = -\frac{ih}{\rho}\left(C\,\frac{ih+\rho}{ih-\rho} e^{ihL} - C e^{-ihL}\right)$

On divise par C et on multiplie par e^{ihL} :

$$\frac{ih+\rho}{ih-\rho} e^{2ihL} + 1 = -\frac{ih}{\rho}\left(\frac{ih+\rho}{ih-\rho} e^{2ihL} - 1\right)$$

$$\Leftrightarrow \frac{ih+\rho}{ih-\rho} e^{2ihL}\left(1 + \frac{ih}{\rho}\right) = \frac{ih}{\rho} - 1$$

$$\Leftrightarrow \frac{ih+\rho}{ih-\rho} e^{2ihL}(ih + \rho) = ih - \rho$$

et donc $e^{2ihL} = \left(\frac{ih-\rho}{ih+\rho}\right)^2$ soit $\boxed{e^{2ihL} = \left(\frac{\rho - ih}{\rho + ih}\right)^2}$

4.

$$e^{2ihL} = \left(\frac{\rho - ih}{\rho + ih}\right)^2 \quad \begin{cases} e^{ihL} = \frac{\rho - ih}{\rho + ih} \\ \text{ou} \\ e^{ihL} = -\frac{\rho - ih}{\rho + ik} \end{cases}$$

Dans ce second cas, cela conduit à :

$$e^{ihL}(ih + \rho) = ih - \rho$$

$$\Leftrightarrow ih\left(e^{ihL} - 1\right) = -\rho\left(e^{ihL} + 1\right)$$

$$\Leftrightarrow ih\underbrace{\left(e^{ihL/2} - e^{-ihL/2}\right)}_{2i\sin(hL/2)} = -\rho\underbrace{\left(e^{ihL/2} + e^{-ihL/2}\right)}_{2\cos(hL/2)}$$

$$\Leftrightarrow -h\sin(hL/2) = -\rho\cos(hL/2)$$

On en déduit : $\tan(hL/2) = \frac{\rho}{h}$ donc $\boxed{\tan(hL/2) > 0}$

et $\rho^2\cos^2(hL/2) = h^2\sin^2(kL/2) = h^2\left(1 - \cos^2(hL/2)\right)$

$$\Rightarrow (h^2 + \rho^2)\cos^2(hL/2) = h^2$$

On pose $k_0^2 = k^2 + \rho^2$, donc $k_0^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} + \frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2} = \frac{2mV_0}{\hbar^2}$

donc $\boxed{k_0 = \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar}}$

et $k_0^2 \cos^2(kL/2) = k^2$

donc $\cos^2(kL/2) = \frac{k^2}{k_0^2}$ soit $\boxed{\left|\cos(kL/2)\right| = \frac{k}{k_0}}$

5. A.N : $k_0 = 5{,}1.10^{10}\ m^{-1}$

6. On pose $x = \frac{kL}{2}$ (rien à voir avec le x de $\psi(x)$)

alors $|\cos(kL/2)| = \frac{kL}{2} \cdot \frac{2}{Lk_0}$ $\Rightarrow$ $|\cos(x)| = \alpha x$ avec $\alpha = \frac{2}{Lk_0}$ | avec les valeurs données, $\alpha = 0{,}12$

On cherche donc les intersections de $y = |\cos(x)|$ et $y = \alpha x = 0{,}12\, x$,

en tenant compte du fait que $\tan(x) > 0$, donc $x \in]0, \pi/2[$ ou $]\pi, 3\pi/2[$

ou $]2\pi, 5\pi/2[$ etc...

Voir page suivante.

On trouve pour x les valeurs (approximatives) : $1{,}35$; $4{,}25$ et $4{,}85$ (sans dimension)

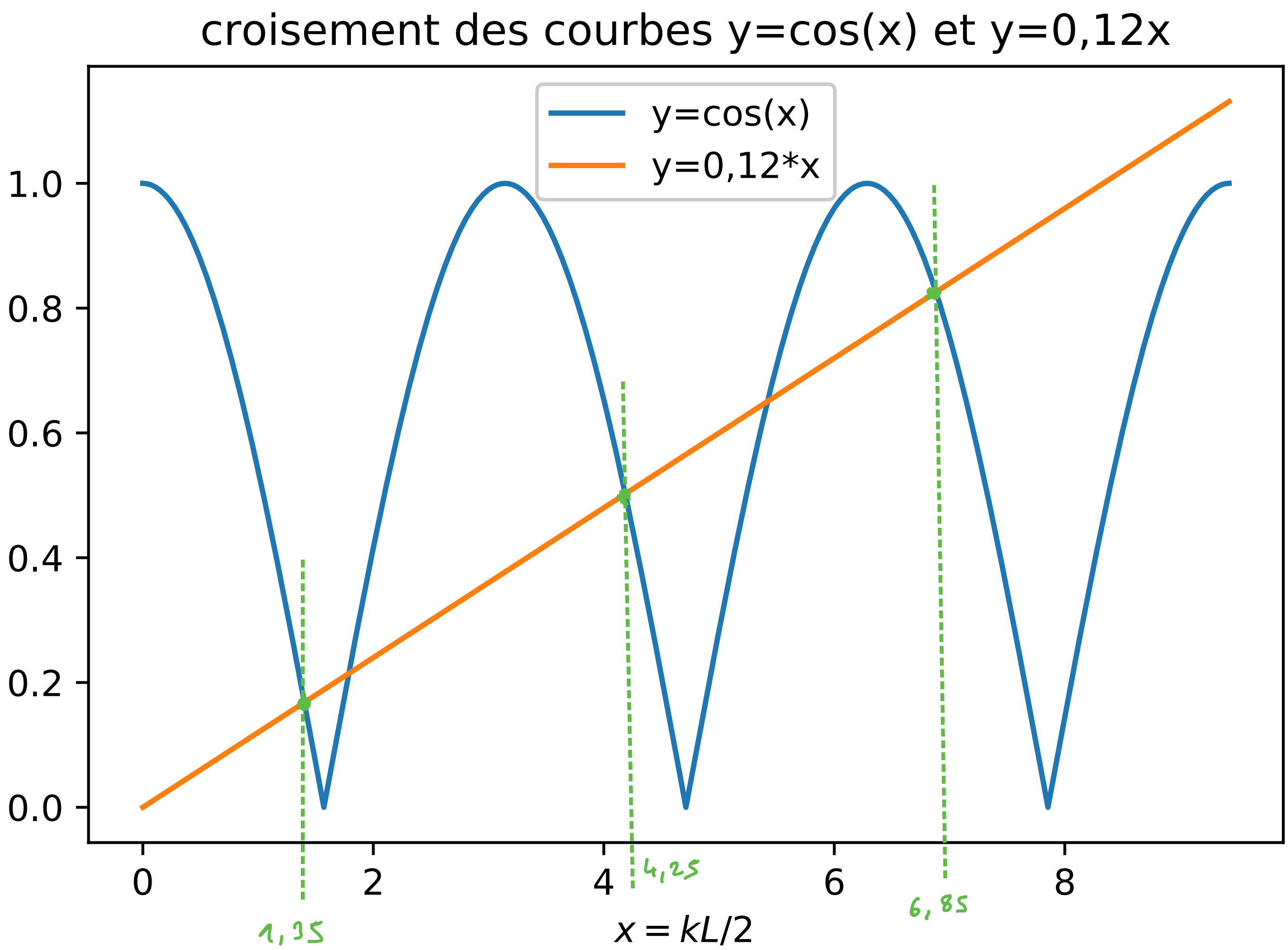
on en déduit les valeurs de k ($k = \frac{2x}{L}$) : $2{,}7$; $8{,}5$ et $13{,}6$ (en $10^9\ m^{-1}$)

Et les énergies correspondantes ($E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$) : $0{,}28$; $2{,}7$ et $7{,}1$ eV.

on a donc trouvé 3 niveaux d'énergie

(avec les valeurs données, il y en a

3 autres associées à $e^{\tau kL} = \frac{\rho - \tau k}{\rho + \tau k}$).


croisement des courbes y=cos(x) et y=0,12x
y=cos(x)
y=0,12*x
1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0.0
0
2
4
6
8
$x = kL/2$
1,35
4,25
6,85