

# Exercices du chapitre On5

## Particule libre

### 1. Étalement du paquet d'ondes

On considère une particule quantique libre de masse  $m$ . Son état est représenté par un paquet d'ondes formé d'OPPH, dont les vecteurs d'onde sont distribués autour d'une valeur moyenne  $k_0$  avec une faible dispersion  $\Delta k$ , qui détermine l'extension spatiale initiale  $\Delta x_0$  du paquet d'ondes. La pulsation temporelle moyenne correspondant à  $k_0$  est notée  $\omega_0$ .

a) Retrouver rapidement la relation de dispersion.

b) Rappeler la définition de la vitesse de groupe  $v_{g0}$  du paquet d'ondes, et donner son expression.

c) Montrer qu'à la largeur spectrale  $\Delta k$  correspond une dispersion de la vitesse de groupe  $\Delta v_g$  autour de la valeur moyenne  $v_{g0}$  et exprimer  $\Delta v_g$  en fonction de  $\hbar$ ,  $m$  et  $\Delta x_0$ .

d) En déduire la largeur du paquet d'ondes  $\Delta x(t)$  après une durée  $t$ . Déterminer au bout de quelle durée  $t_2$  la largeur du paquet d'ondes a doublé.

e) Faire l'application numérique pour un électron ( $m = 9,11 \cdot 10^{-31}$  kg) initialement confiné dans un atome ( $\Delta x_0 = 1 \cdot 10^{-10}$  m). Comparer au temps qu'il met pour aller d'un atome à un autre dans un cristal, à une vitesse  $v \approx 1 \cdot 10^5$  m · s<sup>-1</sup>, et commenter.

On donne  $\hbar = 1,055 \cdot 10^{-34}$  J · s.

## Particule dans un potentiel uniforme par morceaux

### 2. Électron confiné dans une molécule

Certaines molécules ayant une longue chaîne linéaire, comme le  $\beta$ -carotène, contiennent des électrons qui ne sont pas attachés à un noyau particulier, mais peuvent au contraire se déplacer sur toute la longueur de la molécule.

On modélise un tel électron comme une particule se déplaçant librement sur un segment de droite, entre les abscisses  $x = 0$  et  $x = L$ ; l'énergie potentielle  $V$  est nulle sur le segment et infiniment grande partout ailleurs (puits rectangulaire infini).

On rappelle que pour un état stationnaire, la partie spatiale de la fonction d'onde  $\varphi(x)$  est liée à l'énergie totale  $E$  de la particule par l'équation de Schrödinger stationnaire :

$$-\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \frac{d^2 \varphi}{dx^2} = (E - V(x)) \varphi(x) \text{ où } \hbar = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}.$$

a) Justifier que  $\varphi(x)$  est nulle en dehors de l'intervalle  $[0 ; L]$ .

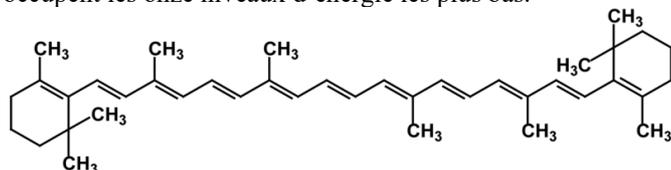
$\varphi(x)$  étant une fonction continue, elle est donc nulle aux deux extrémités de la molécule :  $\varphi(0) = \varphi(L) = 0$ .

b) Montrer que la solution de l'équation différentielle est de la forme  $\varphi(x) = A \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$  avec  $n$  un entier et  $A$  une constante.

c) Déterminer la valeur de  $A$ .

d) Déterminer l'expression des niveaux d'énergie  $E_n$  de l'électron en fonction de  $m$ ,  $L$ ,  $\hbar$  et  $n$ .

Dans le  $\beta$ -carotène (formule ci-dessous), ce sont les électrons des onze liaisons doubles conjuguées qui se comportent comme des particules libres confinées, sur une longueur effective  $L = 1,83$  nm. Dans l'état fondamental, ces électrons occupent les onze niveaux d'énergie les plus bas.



e) Calculer les niveaux d'énergie  $E_{11}$  et  $E_{12}$ .

f) En déduire l'énergie, puis la longueur d'onde  $\lambda$  dans le vide, d'un photon absorbé par la molécule lorsqu'un électron passe du niveau 11 au niveau 12.

g) Expliquer la couleur orangée des organismes contenant une grande quantité de cette molécule (carottes, citrouilles...).

### 3. Marche de potentiel

On étudie la réflexion et la transmission d'une particule par une marche de potentiel : l'énergie potentielle est nulle pour  $x < 0$ , et vaut  $V_0$  pour  $x > 0$ .

Une particule libre venant de la partie  $x < 0$  et se déplaçant vers les  $x$  croissants rencontre la marche de potentiel en  $x = 0$ . Elle possède initialement une énergie cinétique  $E$ .

a) Représenter la situation sur un schéma.

b) Étudier succinctement les deux cas possibles ( $E < V_0$  ou  $E > V_0$ ) dans le cadre de la mécanique classique.

Dans le cadre de la mécanique quantique, on recherche des états stationnaires, pour lesquels la partie spatiale de la fonction d'onde  $\varphi(x)$  vérifie l'équation de Schrödinger

$$\text{stationnaire : } -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi}{dx^2} = (E - V(x)) \varphi(x). \text{ La fonction } \varphi(x)$$

et sa dérivée première sont supposées continues dans l'espace.

c) Étudier le cas  $E > V_0$  en déterminant les coefficients de réflexion et de transmission en amplitude. Interpréter le cas  $E \gg V_0$ .

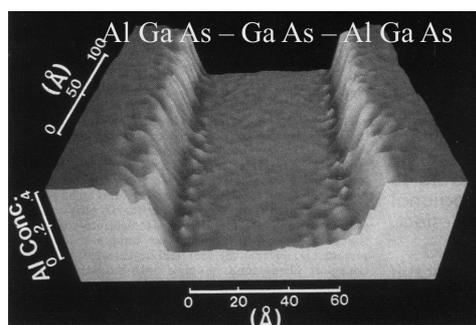
d) Dans le cas  $E < V_0$ , calculer ces deux coefficients et leurs modules, et commenter le résultat.

### 4. Puits quantique semi-conducteur

Les puits quantiques semi-conducteurs sont des structures sous forme de plaques minces aux nombreuses applications dans les lasers, cellules solaires, capteurs de rayonnements...



Un tel puits est constitué d'une mince couche d'un semi-conducteur entre deux couches d'un autre semi-conducteur. On considère ici un puits où la couche centrale est constituée d'arséniure de gallium (GaAs), les deux couches externes étant en arséniure de gallium-aluminium (AlGaAs). L'image ci-dessous représente le profil de concentration en atomes d'aluminium, qui correspond à un puits d'énergie potentielle, sensiblement rectangulaire, pour les électrons du matériau ; sa profondeur est  $V_0 = 0,32$  eV, sa largeur  $a = 6,0$  nm.



Dans ce puits, un électron de conduction a une masse effective  $m = 6,1 \cdot 10^{-32}$  kg .

On donne  $\hbar = 1,055 \cdot 10^{-34}$  J · s et  $c = 3,00 \cdot 10^8$  m · s<sup>-1</sup>.

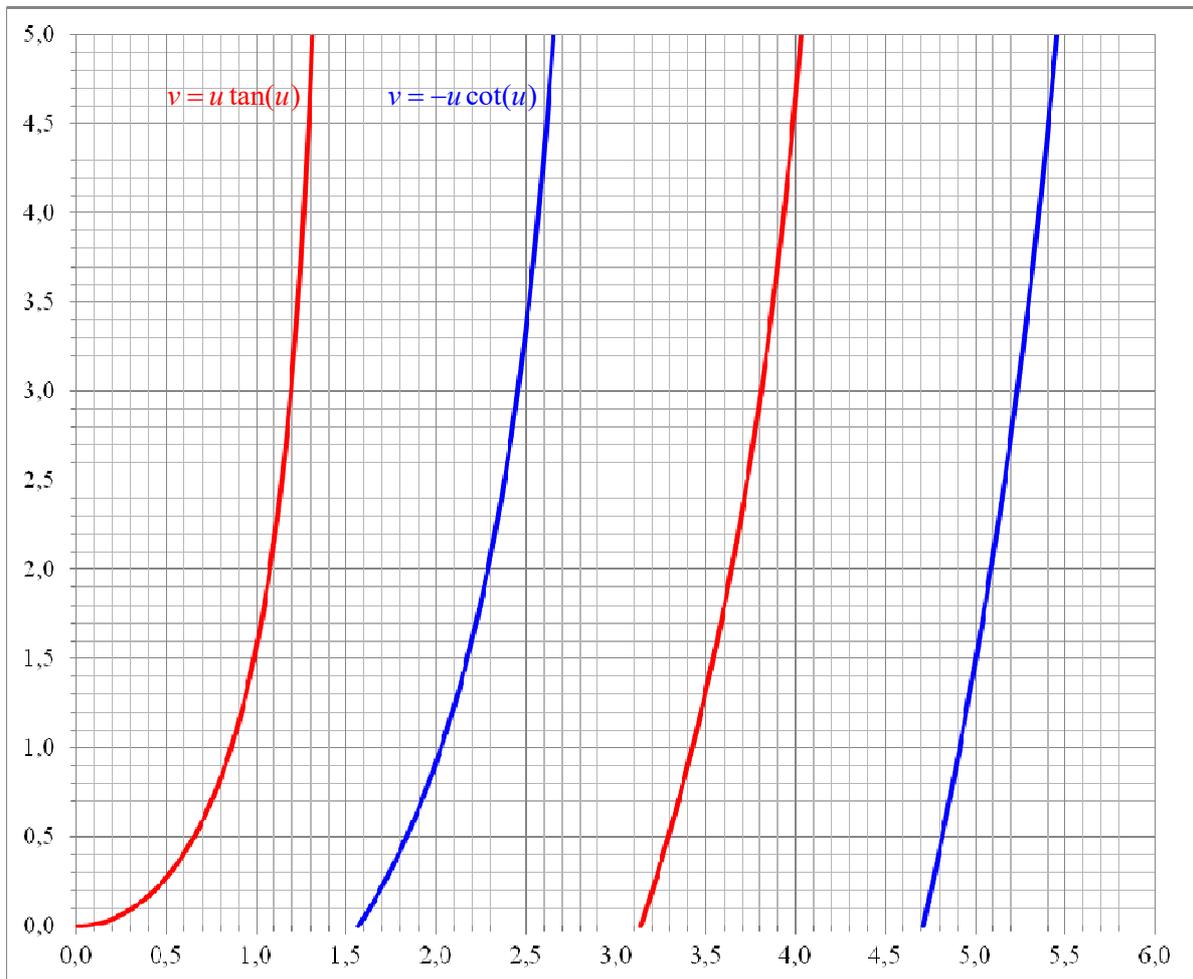
a) En utilisant le raisonnement graphique du cours (partie 3.b), déterminer le nombre d'états stationnaires dans le puits.

On utilisera les courbes ci-dessous :  $v = u \tan(u)$  (en rouge) ;

$v = -u \cot(u)$  (en bleu).

b) Calculer les niveaux d'énergie des états stationnaires, en joules et en électronvolts.

c) Déterminer la ou les longueurs d'onde possibles d'un photon absorbé lors d'une transition entre deux niveaux d'énergie. Dans quel domaine spectral est utilisé ce type de puits quantique ?



☞ Réponses partielles

1. c)  $\Delta v_g = \frac{\hbar}{2m \Delta x_0}$  . e)  $t_2 = 2 \cdot 10^{-16}$  s.

2. f)  $\lambda = 480$  nm.

3. c)  $r = \frac{\sqrt{E} - \sqrt{E - V_0}}{\sqrt{E} + \sqrt{E - V_0}}$  ,  $t = \frac{2\sqrt{E}}{\sqrt{E} + \sqrt{E - V_0}}$  .

d)  $\underline{r} = \frac{\sqrt{E} - i\sqrt{V_0 - E}}{\sqrt{E} + i\sqrt{V_0 - E}}$  ,  $\underline{t} = \frac{2\sqrt{E}}{\sqrt{E} + i\sqrt{V_0 - E}}$  .

4. a) On trouve deux états stationnaires.