

Mécanique quantique – SMC (2014 – 2015)

Série N° 4

Exercice N° 1

On considère le potentiel $V(x)$ suivant :

$$\begin{aligned} V(x) &= 0 && \text{pour } x < 0 \\ &= -V_0 && \text{pour } 0 \leq x \leq a \\ &= \infty && \text{pour } x > a \end{aligned}$$

V_0 et a sont des constantes positives.

On s'intéressera seulement aux états liés pour lesquels l'énergie totale $-V_0 < E < 0$.

1- Représenter la courbe $V(x)$.

2- Résoudre l'équation de Schrödinger dans les différentes zones.

On posera : $k_1 = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}}$ et $k_2 = \sqrt{\frac{-2mE}{\hbar^2}}$

3- Ecrire les équations de continuité.

Exercice N° 2

Soit une particule quantique libre dont l'état dynamique est décrite par la fonction d'onde suivante :

$$\psi(x, t) = c(k) \exp[i(kx - \frac{\hbar k^2 t}{2m})]$$

Donnez

1. l'impulsion p de la particule ;
2. l'incertitude sur l'impulsion;
3. la densité de probabilité de présence de la particule ;
4. l'incertitude sur la position de la particule $\langle \Delta x \rangle$;

Exercice N°3

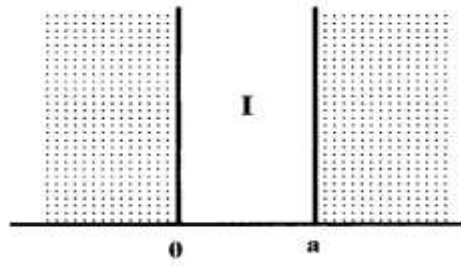
Soit un puits de potentiel uni-dimensionnel de profondeur infinie tel que $V(x) = 0$ pour $-a/2 < x < a/2$ et $V(x) = +\infty$ pour $x < -a/2$ et $x > a/2$ avec $a = 5 \text{ nm}$.

- A. Quelle est l'expression de la fonction de densité de probabilité pour le nombre quantique $n = 3$?
- B. Pour $n = 1$, quelle est la probabilité de présence de la particule hors du puits de potentiel ?
- C. Pour $n = 4$, quelle est la valeur de la probabilité de présence de la particule dans l'intervalle $-a/4 < x < a/4$?

Exercice N° 4 : Particule dans un puits de potentiel infini

On considère une particule dans un puits de potentiel infiniment profond

$$\begin{aligned} V(x) &= \infty && \text{pour } x < 0 \\ &= 0 && \text{pour } 0 \leq x \leq a \\ &= \infty && \text{pour } x > a \end{aligned}$$



Puits de potentiel infini

Déterminer les niveaux d'énergie E_n et les fonctions propres $\psi(x)$ caractérisant l'état de la particule dans la région I.

Exercice N°5: Puits de potentiel fini

Un électron est situé dans un puits de potentiel de largeur $2a$, de hauteur V_0 . On étudie les états liés, c'est-à-dire ceux dont l'énergie E des électrons est telle que $0 < E < V_0$.

- 1- Déterminer la fonction d'onde $\phi(x)$ d'un électron.
- 2- En utilisant les conditions aux limites, déterminer les équations qui permettent le calcul des valeurs des énergies.
- 3- Comment peut-on résoudre ces équations?
- 4- Pour quelle valeur maximale de V_0 n'y a-t-il qu'un seul état possible?
- 5- Pour une largeur de puits égale à 5 nm, calculer, en électron-volt, la valeur maximale de V_0 ne permettant qu'un seul état. Déterminer l'écart maximal entre les deux premiers niveaux.

Exercice N° 6 : Puits de potentiel

On se place en 1 dimension et on considère une particule soumise au potentiel $V(x)$ suivant :

$$\begin{aligned} V(x) &= -V_0 & \text{si } -L/2 < x < L/2 \\ V(x) &= 0 & \text{sinon} \end{aligned}$$

avec V_0 positif.

1. Comment appelle-t-on les états d'énergie négative ? Et ceux d'énergie positive ?
2. Résoudre l'équation de Schrödinger pour une particule de masse m et d'énergie $0 > E > -V_0$.

Traiter le cas où la fonction d'onde est paire. On posera $K^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2}$ et $k^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} - K^2$.

3. On suppose que la fonction d'onde ainsi que sa dérivée sont continues. Quelles sont les conditions pour que cette hypothèse soit vérifiée ? En déduire une deuxième relation entre K et k .

4. Posez $a = \frac{kL}{2}$, $b = \frac{KL}{2}$ et $R = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \left(\frac{L}{2}\right)$ et résoudre graphiquement la condition de continuité.

5. Traiter le cas où la fonction d'onde est impaire.

Exercice N° 7

On considère une particule enfermée dans une boîte uni-dimensionnelle. Ce système est décrit par le potentiel suivant : $V(x) = 0$ si $0 < x < L$; $V(x) = +\infty$ sinon :

1. Etant donné la nature du potentiel, déterminer l'intervalle sur lequel on doit résoudre l'équation de Schrödinger :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} + V(x)\Psi(x) = E\Psi(x)$$

et déterminer les conditions limites de la fonction d'onde.

En sachant que :

$$\Psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

est la solution générale de cette équation sur l'intervalle intéressant, donner l'expression de k .

3. En utilisant les conditions limites, déterminer B en fonction de A . Puis montrer que l'énergie E de la particule ne peut prendre que certaines valeurs et peut s'écrire $En = n^2 E_0$ où n est un entier et E_0 est la plus petite valeur possible de E que l'on déterminera.

4. En utilisant le fait que la particule se trouve forcément entre 0 et L , déterminer complètement l'expression de $\Psi(x)$. On rappelle que la probabilité dP de trouver la particule entre x et $x+dx$ est :

$$dP = |\Psi(x)|^2 dx$$

Et que $2 \sin^2 \alpha = 1 - \cos(2\alpha)$.

Exercice N° 8 : Électron dans un puit infini

Considérez un électron ($m_e c^2 = 511 \text{ keV}$) confiné dans un puit infini de largeur $a \approx 24.0 \times 10^{-10} \text{ m}$. L'électron se trouve dans le troisième niveau excité, pour lequel $n = 4$.

A. Écrivez la fonction d'onde en termes de x et a .

B. Tracez un schéma de la densité de probabilité $|\psi_4(x)|^2$.

C. Quelles positions, en m , sont les plus probables?

D. Quelle est la probabilité de trouver l'électron entre $x = 0$ et $x = a/8$? (Indice Plutôt que de calculer une intégrale, utilisez le schéma en partie B.)

E. Quelles sont les énergies des niveaux $n = 1, 2, 3, 4$, en eV ?

F. Si l'électron passe du niveau $n = 4$ au niveau $n = 1$, quelle est la longueur d'onde du photon émis lors de cette transition?

Exercice N° 9 : Puits infini à trois dimensions

Une particule de masse m est dans une boîte dont les côtés ont des longueurs données par a , b et c . L'énergie de cette particule est donnée par la relation :

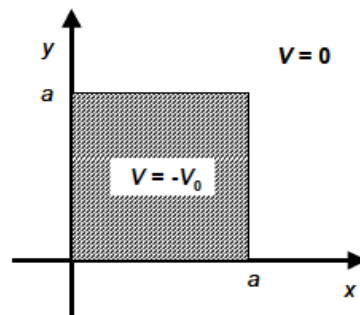
$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2} \right)$$

A. Quelle est l'énergie du niveau fondamental, en termes de m , a , b , et c ?

B. Si $a = 2b = 4c$, quel est le degré de dégénérescence (c.-à-d. le nombre d'états différents ayant la même énergie) des cinq plus bas niveaux d'énergie?

Exercice N° 10

Considérons un « barreau » ou « fil » nanoscopique de section carrée, $a = 2 \text{ nm}$ dans les directions x et y et d'une longueur de 1 cm suivant l'axe z . Ce « fil » quantique peut être considéré comme un puits de potentiel bi-dimensionnel de profondeur infinie tel que le potentiel $V = -V_0$ (avec $V_0 \rightarrow \infty$) pour $0 \leq x, y \leq a$ et $V = 0$ pour $x, y < 0$ ou $x, y > a$ (voir la figure ci-dessous).



Pour rappel, la masse au repos de l'électron $m_e = 9.109 \cdot 10^{-31}$ kg, sa charge $e = 1.602 \cdot 10^{-19}$ C et la constante de Planck $\hbar = 6.626 \cdot 10^{-34}$ J.s.

A. Ecrivez l'équation de Schrödinger indépendante du temps pour un électron lié au puits de potentiel d'énergie, E , telle que $-V_0 < E < 0$.

B. Résolvez cette équation et proposez une forme générale pour les fonctions d'onde de cet électron.

C. Quelles sont les conditions aux limites et de normalisation à appliquer pour déterminer la forme analytique exacte de ces fonctions d'onde et la valeur des constantes d'intégration ?

D. En utilisant les conditions aux limites, déterminez l'expression générale des fonctions d'onde à une constante d'intégration près.

E. Quelle est l'expression de l'énergie totale, E , de cet électron lié au puits de potentiel ?

Considérons que l'électron se situe sur le quatrième niveau d'énergie permis, les niveaux étant « classés » en fonction de la valeur croissante de leur énergie par rapport au bas du puits de potentiel.

F. Quelle est la valeur de l'énergie de cet électron en prenant le bas du puits comme niveau de référence pour l'énergie ?

G. Quel est le degré de dégénérescence de ce niveau d'énergie ? Justifiez votre réponse.

H. En quelles coordonnées (x, y) , la probabilité de présence d'un électron situé sur ce 4^{ème} niveau est-elle maximale ? Justifiez votre réponse.

I. La composante suivant l'axe z de l'impulsion, p_z , est-elle quantifiée ?