Physique générale : quantique, Corrigé 7

Assistants et tuteurs :

elena.acinapura@epfl.ch
sara.alvesdossantos@epfl.ch
felice.bordereau@epfl.ch
jeanne.bourgeois@epfl.ch
sofia.brizigotti@epfl.ch
thomas.chetaille@epfl.ch
marco.dimambro@epfl.ch
leo.goutte@epfl.ch
douaa.salah@epfl.ch
arianna.vigano@epfl.ch

Exercice 1 : Le puits de potentiel infini en deux dimensions

1. On remarque que le potentiel $U(x,y)$ peut s'écrire comme :

$$U(x,y) = U_x(x) + U_y(y) \tag{1}$$

L'équation de Schrödinger est donc

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,y)}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,y)}{\partial y^2} + U_x(x)\psi(x,y) + U_y(y)\psi(x,y) = E\psi(x,y)\,.$$

En remplaçant $\psi_{nl}(x,y) = \phi_n(x)\chi_l(y)$, on obtient :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\phi_n(x)}{\partial x^2} + U_x(x)\phi_n(x)\right)\chi_l(y) + \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\chi_l(y)}{\partial y^2} + U_y(y)\chi_l(y)\right)\phi_n(x) = E_{nl}\phi_n(x)\chi_l(y)\,.$$

Le terme dans les premières parenthèses est l'équation de Schrödinger en une dimension pour x. On sait qu'il est égal à $E_{x,n}\phi_n(x)$. De même, le terme entre les deuxièmes parenthèses est égal à $E_{y,l}\chi_l(y)$. On a donc $E_{x,n}\phi_n(x)\chi_l(y) + E_{y,l}\chi_l(y)\phi_n(x) = E_{nl}\phi_n(x)\chi_l(y)$ ce qui implique nécessairement $E_{n,l} = E_{x,n} + E_{y,l}$.
Nous avons ainsi prouvé que $\psi_{nl}(x,y) = \phi_n(x)\chi_l(y)$ sont états propres de l'équation de Schrödinger en deux dimensions pour le potentiel $U(x,y)$ donné, et nous avons calculé les valeurs propres $E_{n,l}$ associées.

2. Nous savons du cours que $E_{x,n} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL_x^2}n^2$ et $E_{y,l} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL_y^2}l^2$.
On cherche deux paires distinctes d'index (n_1,l_1) et (n_2,l_2) tels que $E_{n_1,l_1} = E_{n_2,l_2}$.
On a

$$\frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\left(\frac{n_1^2}{L_x^2} + \frac{l_1^2}{L_y^2}\right) = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\left(\frac{n_2^2}{L_x^2} + \frac{l_2^2}{L_y^2}\right)$$

qu'on doit résoudre pour $(n_1,l_1) \neq (n_2,l_2)$.
Nous avons :

$$\frac{1}{L_x^2}(n_1^2 - n_2^2) = \frac{1}{L_y^2}(l_2^2 - l_1^2)$$

Si on veut $l_1 \neq l_2$, alors il suffit de choisir :

$$L_x^2 = \frac{n_1^2 - n_2^2}{l_2^2 - l_1^2} L_y^2$$

à condition que $\frac{n_1^2-n_2^2}{l_2^2-l_1^2} > 0$. Par exemple, si on a $n_1 = 2$, $n_2 = 1$, $l_1 = 1$ et $l_2 = 3$, le puits avec $L_x = \sqrt{\frac{3}{8}} L_y$ sera caractérisé par $E_{2,1} = E_{1,3}$. On dit que deux états propres distincts avec la même valeur propre de l'énergie sont "dégénérés".

Exercice 2 : Électron dans un puits de potentiel en deux dimensions : 1

Cet exercice est un exercice type de mécanique quantique au sujet des puits de potentiel.

1. On nous dit tout d'abord que la fonction d'onde bidimensionnelle est donnée par le produit de fonctions d'onde unidimensionnelles. Nous allons donc tout simplement multiplier deux fonctions d'onde unidimensionnelles avec des constantes C_n^x et C_l^y déterminées par les conditions de normalisation. n et l sont tous deux des nombres entiers. On a d'après le cours pour chacune des fonctions d'onde unidimensionnelles :

$$\psi_n(x) = C_n^x \sin(k_x x) = \sqrt{\frac{2}{L_x}} \sin\left(\frac{\pi n}{L_x} x\right),$$
$$\psi_l(x) = C_l^y \sin(k_y y) = \sqrt{\frac{2}{L_y}} \sin\left(\frac{\pi l}{L_y} y\right).$$

Avec $L_x = 2L$ et $L_y = 3L$, il vient simplement

$$\psi_{nl}(x, y) = \psi_n(x)\psi_l(y) = \sqrt{\frac{2}{3}} \frac{1}{L} \sin\left(\frac{\pi n}{2L} x\right) \sin\left(\frac{\pi l}{3L} y\right). \tag{2}$$

Les projections des quantités de mouvement des électrons sur les axes (Ox) et (Oy) sont données par

$$p_x = \frac{h}{\lambda_{x,n}} \quad \text{et} \quad p_y = \frac{h}{\lambda_{y,l}},$$

avec

$$\lambda_{x,n} = \frac{2L_x}{n} = \frac{4L}{n} \quad \text{et} \quad \lambda_{y,l} = \frac{2L_y}{l} = \frac{6L}{l}.$$

La quantité de mouvement totale vaut donc

$$\vec{p} = p_x \vec{e}_x + p_y \vec{e}_y \Longrightarrow p^2 = p_x^2 + p_y^2.$$

L'énergie totale est donc

$$E_{nl} = \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2}{8mL^2} \left(\frac{n^2}{4} + \frac{l^2}{9}\right), \tag{3}$$

où m est la masse de l'électron.

$$\begin{aligned}
\text{pour } n = 1, l = 1 &\Longrightarrow \frac{n^2}{4} + \frac{l^2}{9} = 0.36\,,\\
\text{pour } n = 2, l = 1 &\Longrightarrow \frac{n^2}{4} + \frac{l^2}{9} = 1.11\,,\\
\text{pour } n = 3, l = 1 &\Longrightarrow \frac{n^2}{4} + \frac{l^2}{9} = 2.36\,,\\
\text{pour } n = 1, l = 2 &\Longrightarrow \frac{n^2}{4} + \frac{l^2}{9} = 0.69\,,\\
\text{pour } n = 1, l = 3 &\Longrightarrow \frac{n^2}{4} + \frac{l^2}{9} = 1.25\,,\\
\text{pour } n = 1, l = 4 &\Longrightarrow \frac{n^2}{4} + \frac{l^2}{9} = 2.78\,,\\
\text{pour } n = 2, l = 2 &\Longrightarrow \frac{n^2}{4} + \frac{l^2}{9} = 1.44\,.
\end{aligned}$$

Les cinq premiers niveaux d'énergie de l'électron sont donc donnés par

$$\begin{aligned}
E_0 &= E_{11}\,,\\
E_1 &= E_{12}\,,\\
E_2 &= E_{21}\,,\\
E_3 &= E_{13}\,,\\
E_4 &= E_{22}\,.
\end{aligned}$$

2. On nous demande de calculer des probabilités pour l'état fondamental, donc pour $n = 1$ et $l = 1$:

$$\psi_{11}(x, y) = \sqrt{\frac{2}{3}}\frac{1}{L} \sin\left(\frac{\pi}{2L}x\right) \sin\left(\frac{\pi}{3L}y\right).$$

La probabilité de trouver la particule dans l'intervalle $I_x \times I_y$ est

$$\mathcal{P}_{I_x,I_y} = \iint_{(x,y)\in I_x\times I_y} |\psi_{11}(x, y)|^2 \,\mathrm{d}x\mathrm{d}y\,.$$

La probabilité de trouver l'électron dans le quadrant $0 \leq x \leq L$, $0 \leq y \leq 3L/2$ est donc

$$\mathcal{P}_1 = \frac{2}{3L^2} \int_{y=0}^{\frac{3L}{2}} \int_{x=0}^{L} \sin^2\left(\frac{\pi x}{2L}\right) \sin^2\left(\frac{\pi y}{3L}\right) \,\mathrm{d}x\mathrm{d}y\,.$$

Les deux intégrales peuvent se calculer séparément

$$\int_0^L \sin^2\left(\frac{\pi x}{2L}\right) \,\mathrm{d}x = \int_0^L \frac{1}{2}\left[1 - \cos\left(\frac{\pi x}{L}\right)\right] \,\mathrm{d}x = \frac{L}{2} - \left[\frac{L}{2\pi}\sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)\right]_0^L = \frac{L}{2}\,,$$

et de la même manière

$$\int_0^{\frac{3L}{2}} \sin^2\left(\frac{\pi y}{3L}\right) \,\mathrm{d}y = \frac{3L}{4}\,.$$

Donc finalement la probabilité est

$$\mathcal{P}_1 = \frac{2}{3L^2}\left(\frac{L}{2}\frac{3L}{4}\right) = \frac{1}{4}\,.$$

3. Pour trouver la probabilité que l'électron se trouve dans le ruban $L \leq y \leq 3L/2$ il faut tout d'abord réaliser qu'on ne met pas de condition sur la position en x ce qui signifie que l'intégrale sur x nous donne 1. La probabilité est donc simplement

$$\begin{aligned}\mathcal{P}_2 &= \frac{2}{3L}\int_L^{\frac{3L}{2}} \sin^2\left(\frac{\pi y}{3L}\right) \mathrm{d}y = \frac{2}{3L}\int_L^{\frac{3L}{2}} \frac{1}{2}\left[1-\cos\left(\frac{2\pi y}{3L}\right)\right] \mathrm{d}y \\ &= \frac{2}{3L}\left\{\frac{L}{4} - \frac{1}{2}\left[\frac{3L}{2\pi}\sin\left(\frac{2\pi y}{3L}\right)\right]_L^{\frac{3L}{2}}\right\} = \frac{1}{6} + \frac{\sqrt{3}}{4\pi} \approx 0.304\,.\end{aligned}$$

Exercice 3 : Électron dans un puits de potentiel en deux dimensions : 2

1. D'après l'énoncé, nous avons une énergie de la forme

$$E_{nl} = A\left(n^2 + 2l^2\right)\,, \tag{4}$$

avec $A = 1$ meV. L'énergie pour une particule dans un puits bidimensionnel est

$$E_{nl} = \frac{h^2}{8mL_x^2}n^2 + \frac{h^2}{8mL_y^2}l^2 = \frac{h^2}{8m}\left(\frac{n^2}{L_x^2} + \frac{l^2}{L_y^2}\right)\,.$$

Le terme en n^2 dans l'équation Eq. (4) est isolé ; il faut faire de même avec la formule générale :

$$E_{nl} = \frac{h^2}{8mL_x^2}\left(n^2 + \frac{L_x^2}{L_y^2}l^2\right)\,.$$

Nous pouvons désormais identifier les constantes :

$$\begin{aligned}\frac{h^2}{8mL_x^2} = A &\Longrightarrow L_x = \sqrt{\frac{h^2}{8mA}}\,,\\ \frac{L_x^2}{L_y^2} = 2 &\Longrightarrow L_y = \sqrt{\frac{h^2}{16mA}}\,,\end{aligned}$$

soit donc après application numérique

$$L_x = 19.4 \text{ nm} \quad \text{et} \quad L_y = 13.7 \text{ nm}. \tag{5}$$

2. On procède comme dans l'exercice précédent :

$$\begin{aligned}&\text{pour } n=1, l=1 \Longrightarrow n^2+2l^2 = 3\,,\\ &\text{pour } n=2, l=1 \Longrightarrow n^2+2l^2 = 6\,,\\ &\text{pour } n=1, l=2 \Longrightarrow n^2+2l^2 = 9\,,\\ &\text{pour } n=2, l=2 \Longrightarrow n^2+2l^2 = 12\,,\\ &\text{pour } n=3, l=1 \Longrightarrow n^2+2l^2 = 11\,.\end{aligned}$$

Les trois premiers niveaux d'énergie sont donc

$$\begin{aligned}E_0 &= E_{11} = 3A\,,\\ E_1 &= E_{21} = 6A\,,\\ E_2 &= E_{12} = 9A\,.\end{aligned}$$

3. Pour passer du premier au deuxième niveau il faut fournir l'énergie

$$\Delta E = E_1 - E_0 = 3A$$

à l'électron. Le photon doit donc apporter cette énergie. Lorsqu'un électron absorbe un photon (effet photoélectrique), il s'approprie l'intégralité de son énergie. Le photon doit donc avoir une longueur d'onde correspondant exactement à l'énergie $E = E_1 - E_0$, qui est réliée à la longueur d'onde par

$$E = \frac{hc}{\lambda},$$

ce qui donne finalement une longueur d'onde de

$$\lambda = \frac{hc}{\Delta E} = 0.41 \text{ mm}. \tag{6}$$

Exercice 4 : Puits de potentiel infini avec paroi mobile

1. L'équilibre est obtenu par minimisation de l'énergie du système. Calculons-la. Notons dans un premier temps la position de la paroi par x. L'énergie de l'état fondamental de la première particule est donnée par

$$E_1 = \frac{h^2}{8mx^2}.$$

De la même façon, la particule qui occupe l'état avec le nombre quantique 2 a une énergie

$$E_2 = \frac{4h^2}{8m\left(L-x\right)^2}.$$

L'énergie totale est simplement la somme de ces deux énergies

$$E = E_1 + E_2 = \frac{h^2}{8mx^2} + \frac{4h^2}{8m\left(L-x\right)^2}.$$

La position à l'équilibre x_{eq} est obtenue en trouvant le minimum de l'énergie qui est tel que

$$\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}x}(x_{\text{eq}}) = 0 = -\frac{2h^2}{8mx_{\text{eq}}^3} + \frac{8h^2}{8m\left(L-x_{\text{eq}}\right)^3} \Longrightarrow 4x_{\text{eq}}^3 = \left(L-x_{\text{eq}}\right)^3 \Longrightarrow x_{\text{eq}} = \frac{L}{1+\sqrt[3]{4}}. \tag{7}$$

2. L'énergie totale du système lorsqu'il se trouve à l'équilibre est

$$E_{\text{eq}} = E(x_{\text{eq}}) = \frac{h^2}{8mL^2}\left[\left(1+\sqrt[3]{4}\right)^2 + 4\left(1+\frac{1}{\sqrt[3]{4}}\right)^2\right]. \tag{8}$$

3. L'application numérique pour $L = 5$ nm donne

$$x = 1.93 \text{ nm} \quad \text{et} \quad E = 4.18 \times 10^{-20} \text{ J} = 0.26 \text{ eV}. \tag{9}$$

Exercice 5 : Question de type examen

La fonction d'onde, qui satisfait l'équation de Schrödinger pour le potentiel $V(x)$ soumis à la particule, est l'expression 3.

Le potentiel est infini pour des valeurs $x < 0$, ainsi la fonction d'onde doit satisfaire la condition $\psi(0) = 0$. Les propositions 2. et 4. sont donc à exclure, en raison du cosinus utilisé dans ces expressions. Par ailleurs, bien que $V_{II} > V_I$, la particule a probabilité non nulle d'être mesurée à la position $x = L$. Ainsi, la fonction d'onde $\psi(L) \neq 0$. La solution de ce problème a donc la forme de la fonction d'onde 3.

Il est à noter que si $V_{II} = \infty$, la particule serait alors piégée dans un puits de potentiel infini. Dans ce cas, c'est la fonction d'onde 1. qui serait solution de l'équation de Schrödinger.