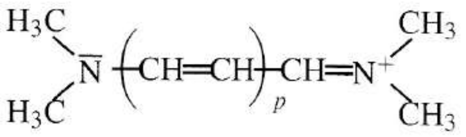
Exercice 1 : Emission d'un photon

Un électron est confiné dans un puits quantique formé d'une couche de GaAs (matériau semi-conducteur) prise en « sandwich » entre deux couches de GaAlAs. Pour déterminer les états stationnaires de l'électron, on considère une particule quantique de masse $m_e^\star = 0,067 m_e$ (où $m_e = 9,1 \times 10^{-31}$ kg est la masse de l'électron) évoluant dans un puits de potentiel infini, de largeur $a = 3,0$ nm.

On considère la transition du niveau d'énergie $n = 2$ au niveau d'énergie fondamental $n = 1$. Déterminer la longueur d'onde de la radiation émise lors de cette transition. La situer dans le spectre électromagnétique.

Exercice 2 : Colorants organiques et modèle de Kuhn

En 1949, Hans Kuhn proposa, pour calculer les propriétés électroniques d'une molécule présentant des liaisons conjuguées, comme celle représentée ci-dessous, d'oublier le squelette d'atomes de carbone, d'azote et d'hydrogène, et d'attribuer les propriétés optiques dans le domaine visible au seul nuage d'électrons π [32]. Dans le modèle simple, Kuhn propose que les N électrons π sont prisonniers d'un puits de potentiel infiniment profond, de longueur L.



1. La molécule représentée ci-dessus appartient à la famille des cyanines symétriques. En incluant les atomes d'azote qui font partie du chromophore, quel est, en fonction de p, le nombre N d'électrons délocalisés ? On note ℓ la longueur moyenne d'une liaison carbone-carbone ou carbone-azote. Dans son modèle, Kuhn propose $L = N\ell$.

2. En exploitant l'analogie avec la corde vibrante, retrouver les valeurs des différents niveaux d'énergie en fonction de $\hbar$, de la masse de l'électron m_e, de L. On introduira un nombre quantique entier n.

3. On admet que les électrons se répartissent dans les différents niveaux d'énergie en respectant les règles de Hund et de Pauli. Justifier que l'existence d'une bande d'absorption est due à une transition électronique entre le niveau d'énergie occupé le plus haut vers le niveau d'énergie libre le plus bas. Identifier ces deux niveaux.

4. En déduire l'expression de la longueur d'onde du rayonnement électromagnétique absorbé en fonction de m, c, de la constante de Planck h, de L et N.

5. Pour la famille des cyanines symétriques, les raies d'absorption ont été mesurées :

p	2	3	4	4	5
λ_0 (nm)	313	416	519	625	735

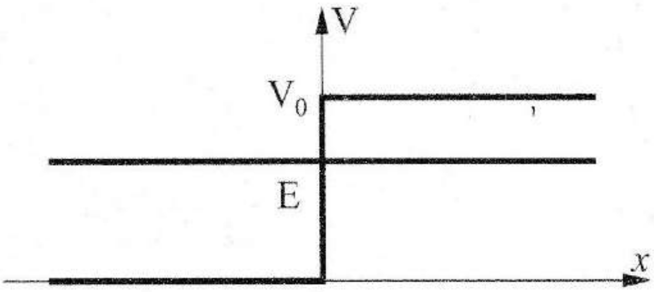
On donne $\ell = 0,139$ nm. Comparer ces valeurs expérimentales aux valeurs fournies par le modèle de Kuhn. Quelles peuvent être les origines des écarts constatés ?

Exercice 3 : Butée sur une marche de potentiel de hauteur supérieure à E

Une **marche de potentiel** ($0 \rightarrow V_0$) est un potentiel stationnaire (indépendant du temps) défini par

$$V(x) = \begin{cases} 0 \text{ pour } x < 0 \\ V_0 > 0 \text{ pour } x \geq 0 \end{cases}$$

Une particule incidente de masse m bute sur cette marche de potentiel, c'est-à-dire qu'elle se propage dans le sens des x croisants, en venant de $-\infty$, avec une énergie $E < V_0$.



a) Donner les solutions pour les termes spatiaux de la fonction d'onde $\varphi(x)$ pour les deux domaines $x < 0$ et $x > 0$, en fonction de 4 constantes d'intégration complexes, de la pulsation spatiale k et de l'épaissseur de peau δ définies par

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \text{ et } \delta = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m(V_0 - E)}}$$

b) En déduire les fonctions d'onde $\psi(x,t)$ dans les deux domaines et justifier que l'une des constantes d'intégration est nulle.

c) Écrire les relations de continuité en $x = 0$, en déduire deux relations entre les trois constantes restantes.

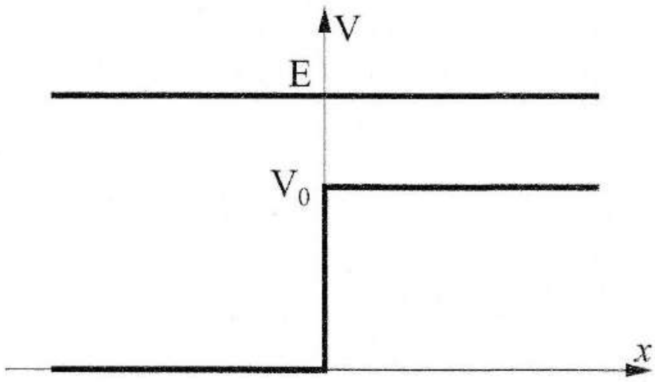
d) Exprimer la densité de probabilité dans le domaine $x > 0$. Pourquoi sa non-nullité est-elle un phénomène purement quantique ?

Exercice 4 : Réflexion et transmission sur une marche de potentiel de hauteur inférieure à E

Une **marche de potentiel** ($0 \rightarrow V_0$) est un potentiel stationnaire (indépendant du temps) défini par

$$V(x) = \begin{cases} 0 \text{ pour } x < 0 \\ V_0 > 0 \text{ pour } x \geq 0 \end{cases}$$

Une particule incidente de masse m aborde cette marche de potentiel, c'est-à-dire qu'elle se propage dans le sens des x croisants, en venant de $-\infty$, avec une énergie $E > V_0$.



a) Donner les solutions pour les termes spatiaux de la fonction d'onde $\varphi(x)$ pour les deux domaines $x < 0$ et $x > 0$, en fonction de 4 constantes d'intégration complexes et des pulsations spatiales

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m\mathrm{E}}{\hbar^2}} \text{ et } k_2 = \sqrt{\frac{2m(\mathrm{E}-\mathrm{V}_0)}{\hbar^2}}$$

b) En déduire les fonctions d'onde $\psi(x,t)$ dans les deux domaines et justifier que l'une des constantes d'intégration est nulle.

c) On définit les vecteurs densité de courant de probabilité associés aux trois termes restant, qu'on nomme respectivement

$$\vec{\mathrm{J}}_i,\ \vec{\mathrm{J}}_r \text{ et } \vec{\mathrm{J}}_t$$

pour incident, réfléchi et transmis. Exprimer ces trois vecteurs en fonction des trois constantes restantes.

d) En déduire les coefficients de réflexion et de transmission

$$\mathrm{R} = \frac{\|\vec{\mathrm{J}}_r\|}{\|\vec{\mathrm{J}}_i\|} \text{ et } \mathrm{T} = \frac{\|\vec{\mathrm{J}}_t\|}{\|\vec{\mathrm{J}}_i\|}$$

en fonction de k_1 et k_2.

e) Donner le sens physique de R et T, donner et interpréter la relation algébrique très simple qui les lie.

f) Calculer R et T si $\mathrm{V}_0 = \frac{\mathrm{E}}{2}$.

Exercice 5 : Conservation locale de la densité de probabilité

En électromagnétisme, on a vu que l'équation locale de conservation de la charge totale contenue dans un volume donné d'un conducteur s'écrit $\frac{\partial \rho(M,t)}{\partial t} + \mathrm{div}(\vec{j}) = 0$ où $\rho(M,t)$ est la densité volumique de charge au point M à l'instant t et $\vec{j}$ le vecteur densité volumique de courant. Ce qui donne, pour un problème à une dimension suivant l'axe (Ox), avec $\vec{j} = j\vec{e_x}$: $\frac{\partial}{\partial t}\rho(x,t) + \frac{\partial}{\partial x} j = 0$. En mécanique quantique, la probabilité totale de trouver la particule dans un volume donné doit être aussi conservée. On va voir dans cet exercice que cela conduit à une relation analogue à celle trouvée en électromagnétisme pour la conservation de la charge, ce qui permet d'obtenir l'expression de $\vec{J}$.

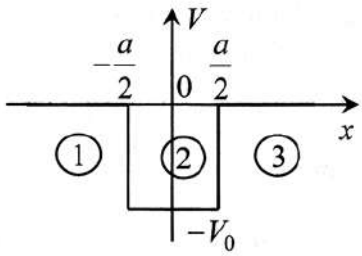
1. En combinant l'équation de Schrödinger à une dimension et son expression complexe conjuguée, retrouver l'équation locale de conservation de la probabilité, reliant la densité de probabilité ρ à la densité de courant de probabilité $\vec{J}$ dont on donnera l'expression.

2. En utilisant la relation de dispersion de l'onde plane $\hbar\omega = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m}$, exprimer le vecteur densité de courant de probabilité $\vec{J}(x,t)$ en fonction de $\vec{k}$ (retrouver le résultat du cours) puis en fonction de la vitesse de groupe $\overrightarrow{V_g} = \dfrac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k}$ associée au paquet d'ondes décrivant la particule.

3. Proposer une analogie entre mécanique quantique et électromagnétisme dans ce contexte.

Exercice 6 : (*) Diffusion par un potentiel attractif, effet Ramsauer

On considère un flux de particules monénergétiques d'énergie E, incidente depuis $x \to -\infty$, se propageant suivant les x croissants, arrivant dans la zone d'action d'un potentiel donné par $V(x) = -V_0 = cte$ (où $V_0 > 0$) pour $x \in [-a/2, a/2]$ (dans la zone (2)) et $V(x) = 0$ partout ailleurs (zones (1) et (3)). On considère le cas où $E > 0$.



1. Proposer une situation physique associée au modèle décrit ci-dessus.

2. Donner la forme des fonctions d'onde dans les trois domaines considérés.

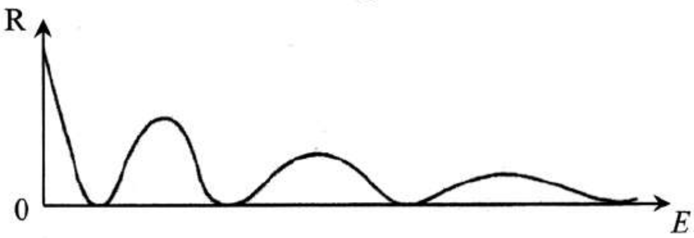
3. En écrivant les conditions de raccordement, écrire les quatre relations liant les constantes d'intégration intervenant dans l'écriture des fonctions d'onde.

4. Donner, en utilisant des densités de courant de probabilité dont on précisera l'expression, l'expression des coefficients de réflexion R et de transmission T.

5. On obtient, par un calcul qui n'est pas demandé :

$$\mathrm{R} = \frac{\left(\dfrac{k_0^2}{2kK}\right)^2 \sin^2(ka)}{1 + \left(\dfrac{k_0^2}{2kK}\right)^2 \sin^2(ka)} \quad \text{et} \quad \mathrm{T} = \frac{1}{1 + \left(\dfrac{k_0^2}{2kK}\right)^2 \sin^2(ka)} \quad \text{où on a posé } k_0^2 = 2mV_0/\hbar^2 .$$

L'allure du coefficient R en fonction de l'énergie E est la suivante :

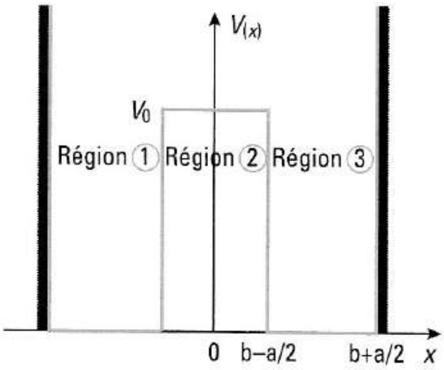


Ramsauer (1921) a montré expérimentalement que pour certaines valeurs de l'énergie E d'un faisceau monoénergétique d'électrons de basse énergie, certains gaz rares (Hélium, Néon ou Argon) sont parfaitement transparents.

a) Proposer une justification de l'idée de modéliser un atome de gaz rare par un centre diffusif en forme de puits plat fini.

b) Identifier sur le graphique ci-dessus les zones de transparence et écrire les conditions correspondantes liant k à a. Proposer ainsi une interprétation de l'effet Ramsauer en termes d'interférence entre les ondes de De Broglie associées aux électrons. On pourra s'appuyer sur une analogie optique avec les réflexions multiples dans une lame.

Exercice 7 : (*) Oscillations par effet tunnel dans un puits double



On considère une particule se déplaçant dans le puits de potentiel symétrique (quand $x \leftrightarrow -x$) représenté sur la figure ci-contre. On appelle V_0 la hauteur de la barrière centrale, a la largeur du puits et b l'abscisse du centre de celui-ci. On considère que l'énergie de la particule est telle que $0 < E < V_0$. On pose : $k_0 = \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar}$, $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$, $\kappa = \sqrt{k_0^2 - k^2}$ et $l = 2b - a$.

❶ Décrire qualitativement le comportement de la particule dans ce potentiel.

❷ Montrer que la symétrie du problème implique que les fonctions d'onde sont soit paires $\phi(-x) = \phi(x)$, soit impaires $\phi(-x) = -\phi(x)$.

❸ Quelles sont les conditions de raccordement exploitables dans ce problème ? Les écrire.

❹ Écrire les fonctions d'onde dans les régions suivantes : $0 < x < b - a/2$ et $b - a/2 < x < b + a/2$. Faut-il considérer la région des x négatifs ?

❺ Montrer que suivant la parité considérée pour la fonction d'onde, la condition de quantification de l'énergie s'écrit :

$$\frac{\kappa}{k}\tan(ka) = -\coth\frac{\kappa l}{2} \quad \text{ou} \quad \frac{\kappa}{k}\tan(ka) = -\tanh\frac{\kappa l}{2}.$$

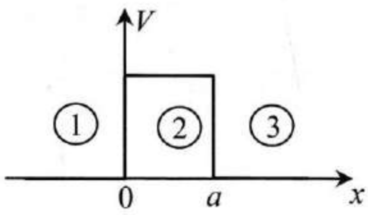
❻ Déterminer la forme des fonctions d'onde paires $\phi_S(x)$ et impaires $\phi_A(x)$ associées aux énergies E_S et E_A.

❼ On place le système dans un état décrit par la fonction d'onde :

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\phi_A(x)e^{-\frac{iE_A t}{\hbar}} + \phi_S(x)e^{-\frac{iE_S t}{\hbar}}\right).$$

Prévoir le comportement du système et donner l'expression de la fréquence d'oscillation au travers de la barrière de potentiel.

Exercice 8 : (**) Barrière de potentiel, effet tunnel



On considère un flux de particules monénergétiques d'énergie E, incidente depuis $x \to -\infty$, se propageant suivant les x croissants, arrivant dans la zone d'action d'un potentiel donné par $V(x) = V_0 > 0$ pour $x \in [0, a]$ (dans la zone (2)) et $V(x) = 0$ partout ailleurs (zones (1) et (3)).

1. On considère le cas $E < V_0$. Donner la forme des fonctions d'onde dans les trois domaines considérés. On posera $k = \dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ et $q = \dfrac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$.

2. En écrivant les conditions de raccordement, montrer que :

$$A_1 = A_3 e^{ika}\left[\mathrm{ch}(qa) + \frac{i}{2}\left(\frac{q}{k} - \frac{k}{q}\right)\mathrm{sh}(qa)\right].$$

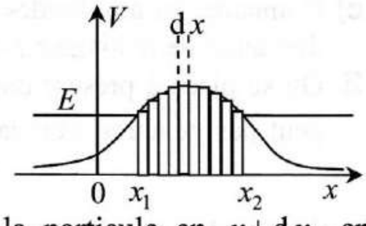
On rappelle que $\mathrm{ch}(x) = \dfrac{e^x + e^{-x}}{2}$ et $\mathrm{sh}(x) = \dfrac{e^x - e^{-x}}{2}$.

3. a) En utilisant des densités de courant de probabilité dont on précisera l'expression et le sens physique, montrer que l'expression du coefficient de transmission de la barrière noté T se met sous la forme $\mathrm{T} = \dfrac{1}{1 + \dfrac{1}{4}\left(\dfrac{q}{k} + \dfrac{k}{q}\right)^2 \mathrm{sh}^2(qa)}$. Il sera plus aisé d'exprimer d'abord 1/T puis, en utilisant la relation $\mathrm{ch}^2(x) - \mathrm{sh}^2(x) = 1$, d'en déduire T.

b) Dans le cas où $qa \gg 1$ et $\lambda \gg a$, donner l'expression approchée de T. À quelle situation physique correspond cette approximation ? Discuter alors la nature de l'onde dans la barrière de potentiel (zone (2)). Pourquoi parle-t-on d'effet tunnel pour décrire cet effet purement quantique ? Quelle est l'ordre de grandeur de la portée de l'onde de matière dans la zone (2) ?

c) Évaluer numériquement l'ordre de grandeur de la portée de l'onde dans la zone (2), pour un électron d'énergie $E = 1\,\mathrm{eV}$, avec $V_0 = 2\,\mathrm{eV}$ et $a = 10^{-10}\,\mathrm{m}$. On revient à l'expression de T donnée au 3.a) mais l'approximation $qa \gg 1$ n'est plus valable. Évaluer T pour cet électron, discuter dans ce cas la probabilité de présence de la particule derrière la barrière. Reprendre le calcul pour un proton dont la masse est environ 1840 fois celle de l'électron, commenter.

4. Dans le cas d'une barrière épaisse de forme quelconque, on décompose cette barrière en une succession de barrières rectangulaires d'épaisseur infinitésimale $\mathrm{d}x$, pour lesquelles on pose $q(x) = \dfrac{\sqrt{2m(V(x) - E)}}{\hbar}$.



Dans l'hypothèse où la barrière entre x et $x + \mathrm{d}x$ a un simple effet d'atténuation de la probabilité P de présence de la particule, exprimer la probabilité de présence $P(x + \mathrm{d}x)$ de la particule en $x + \mathrm{d}x$, en fonction de celle $P(x)$ en x, de $q(x)$ et $\mathrm{d}x$. En écrivant le coefficient de transmission sous la forme d'un rapport de probabilité, en déduire une expression approchée du coefficient de transmission T de la barrière, sous forme d'une intégrale dépendant de son profil $V(x)$.