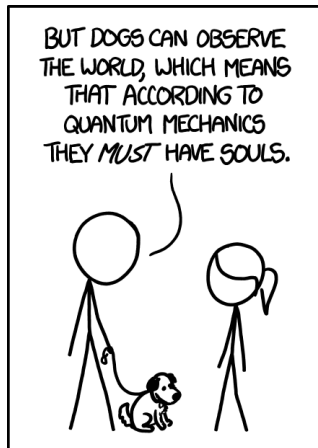


MPI* Physique

TD Physique Quantique

Quanton dans un potentiel



PROTIP: YOU CAN SAFELY
IGNORE ANY SENTENCE THAT
INCLUDES THE PHRASE
"ACCORDING TO
QUANTUM MECHANICS"

Olivier Caffier



1 Marche de potentiel

(CCINP MP 2021) On étudie un quanton de masse m et d'énergie $E > 0$, qui rencontre une marche de potentiel en $x = 0$ en venant de $-\infty$. La hauteur de la marche est $V_0 > 0$.

1. Donnez l'équation vérifiée par la fonction d'onde spatiale φ .
2. Résolvez-la dans les milieux $x < 0$ et $x > 0$.
3. Déterminez r et t , les coefficients de réflexion et de transmission en amplitude.
4. Par analogie avec les ondes électromagnétiques, vous admettez qu'il existe un *coefficient de réflexion en probabilité* $R = |r|^2$ et un *coefficient de transmission en probabilité* T tel que $R + T = 1$.

Application numérique pour $V_0 = 8E$. Commentez.

Données : $\hbar = 1,05.10^{-34}$ J.s; $m = 9,1.10^{-31}$ kg; $E = 1$ eV.

Corrigé :

1. On fait face à la situation suivante :

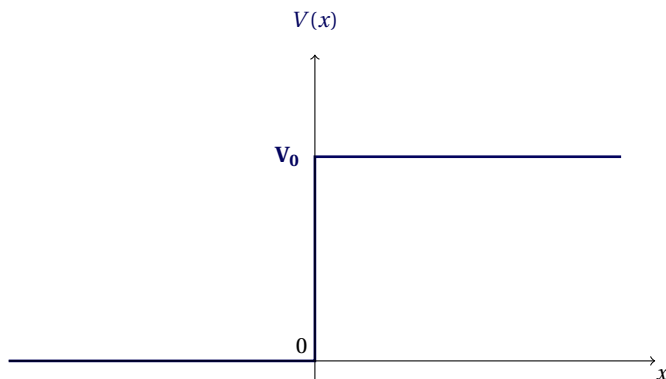


FIGURE 1 – Marche de potentiel étudiée

On se place dans le cas :

$$0 < E < V_0$$

L'équation de Schrödinger indépendante du temps nous donne deux équations pour les régions $[x < 0]$ et $[x > 0]$:

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m}\varphi''(x) = E\varphi(x) & (\text{pour } x < 0) \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\varphi''(x) + V_0\varphi(x) = E\varphi(x) & (\text{pour } x > 0) \end{cases}$$

2. On a donc

$$\begin{cases} \varphi(x < 0) &= A e^{ikx} + B e^{-ikx} \\ \varphi(x > 0) &= C e^{\beta x} + D e^{-\beta x} \end{cases}$$

Avec :

$$\begin{cases} k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \\ \beta = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} \end{cases}$$

On remarque que C est nécessairement nul sinon on aurait affaire à une divergence en $+\infty$. Ainsi, on revient à la fonction d'onde suivante :

$$\begin{cases} \psi(x < 0, t) &= A e^{i(kx - \omega t)} + B e^{-i(kx + \omega t)} \\ \psi(x > 0, t) &= D e^{-\beta x - i\omega t} \end{cases}$$

avec $A, B, D \in \mathbb{C}$.

3. Comme pour la réflexion métallique sous incidence normale, on pose les coefficients de réflexion et de transmission en amplitude suivants :

$$\begin{cases} r = \frac{B}{A} \\ t = \frac{D}{A} \end{cases}$$

Ce qui nous amène à finalement travailler avec le paramétrage suivant :

$$\begin{cases} \varphi(x < 0) &= A e^{ikx} + r A e^{-ikx} \\ \varphi(x > 0) &= t A e^{-\beta x} \end{cases}$$

V est continue sur \mathbb{R} sauf en 0 où il y a une discontinuité de première espèce. On pourra alors procéder (cf. chapitre 1) à **un raccordement C^1 de φ en 0** :

$$\begin{cases} \varphi(0^-) = \varphi(0^+) \\ \varphi'(0^-) = \varphi'(0^+) \end{cases}$$

Or :

$$\begin{aligned} \begin{cases} \varphi(0^-) = \varphi(0^+) \\ \varphi'(0^-) = \varphi'(0^+) \end{cases} &\implies \begin{cases} A + rA = tA \\ i k A - i k r A = -\beta t A \end{cases} \\ &\implies \begin{cases} 1 + r = t \\ i k (1 - r) = -\beta t \end{cases} \\ &\implies \begin{cases} r = \frac{k - i\beta}{k + i\beta} \\ t = \frac{2k}{k + i\beta} \end{cases} \end{aligned}$$

Finalement,

$$\begin{cases} r = \frac{k - i\beta}{k + i\beta} \\ t = \frac{2k}{k + i\beta} \end{cases}$$

et donc $|r| = 1 \implies r = e^{i\theta r}$ (déphasage à la réflexion).

4. On a

$$\begin{aligned} R &= |r|^2 \\ &= 1 \end{aligned}$$

On a donc **réflexion totale**¹, et donc $T = 0$:

$$R = 1 \text{ et } T = 0$$

Il n'y a donc pas d'application numérique à faire...

1. le commentaire en question...

2 Niveaux d'énergie du puits infini

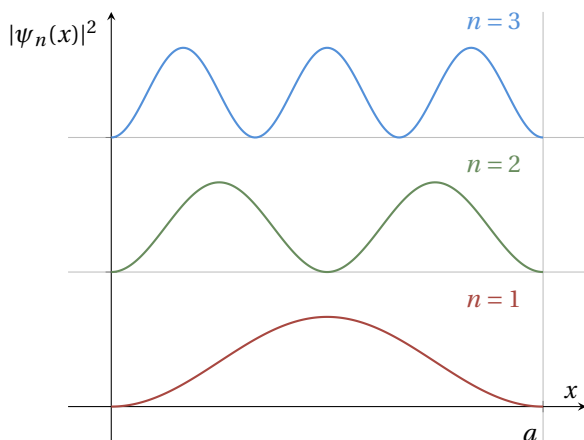
On considère un quanton de masse m confiné dans un puits de potentiel unidimensionnel de profondeur infinie et de largeur a .

1. Sans calcul, représentez l'allure de la fonction d'onde pour les trois premiers niveaux d'énergie du quanton.
2. Déduisez-en, dans chaque cas, l'expression de la longueur d'onde de De Broglie du quanton en fonction de a , \hbar et m , puis la valeur de l'énergie E correspondante.
3. En généralisant, retrouvez l'expression de l'énergie E_n du n^e niveau en fonction de n , a , \hbar et m .
4. Une couche de semi-conducteur GaAs est prise en sandwich entre deux couches de GaAlAs. Un électron du semi-conducteur est alors modélisé comme se trouvant dans le potentiel des questions précédentes.

Déterminez la longueur d'onde du rayonnement émis lorsqu'il se désexcite du premier état excité vers le fondamental avec $a = 3 \text{ nm}$. Vous prendrez pour masse la valeur $m^* = 0,067m$, avec $m = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$, cette valeur prenant en compte les interactions de l'électron avec le milieu.

Corrigé :

1. On a l'allure suivante² :



2. Ça se voit sur la figure mais reprenons la formule vue en cours :

$$\lambda_n = \frac{2a}{n}$$

2. en faisant l'analogie à la corde de guitare et en connaissant son cours...

Pour E_n , il suffit de reprendre l'équation de Schrödinger indépendante du temps :

$$\varphi_n''(x) + \frac{2mE_n}{\hbar^2} \varphi_n(x) = 0$$

Par *identification*³ :

$$k_n^2 = \frac{2mE_n}{\hbar^2}$$

or $k_n = \frac{2\pi}{\lambda_n}$, donc on trouve :

$$E_n = \frac{1}{2m} \left(\frac{\pi n \hbar}{a} \right)^2$$

3. Fait à la question précédente...

4. On a, d'après la formule de Planck-Einstein :

$$E_2 - E_1 = h\nu_{2 \rightarrow 1}$$

or, $\nu_{2 \rightarrow 1} = \frac{c}{\lambda_{2 \rightarrow 1}}$, donc :

$$\lambda_{2 \rightarrow 1} = \frac{hc}{E_2 - E_1}$$

Finalement,

$$\lambda_{2 \rightarrow 1} = \frac{4}{3} \frac{m^* a^2 c}{\pi \hbar} \simeq 3,3 \mu\text{m}$$

3. mot sacré

3 Rebond quantique

(TPE EIVP MP 2016) Un quanton d'énergie $E > 0$ arrive sur une *falaise de potentiel*, $0 \rightarrow V_0$ avec $V_0 < 0$.

1. Que prévoit la mécanique classique?
2. Donnez la forme générale de la solution en état stationnaire ainsi que les conditions de raccordement.
3. Calculez la probabilité qu'un quanton d'énergie $-V_0/2$ fasse demi-tour (autrement dit qu'il fasse un *rebond quantique*).

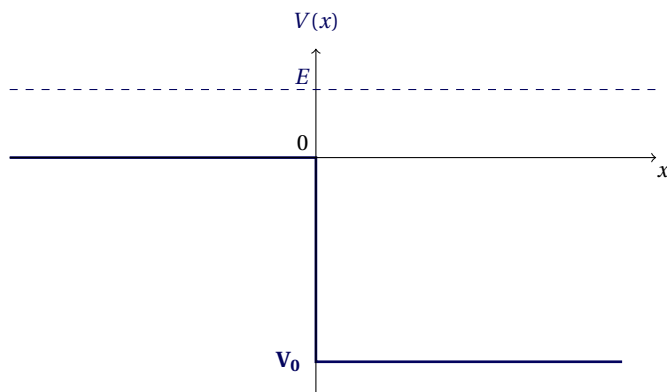


FIGURE 2 – La falaise étudiée.

Corrigé :

1. Ici, pas de zone interdite par la mécanique classique (E est systématiquement supérieure à V_0).
Néanmoins, on assiste à un phénomène assez rigolo, si on assimile cela à une falaise, la mécanique classique prévoit que le quanton continue tout droit⁴, sans tomber (ce qui va évidemment être contredit par les lois de la quantique).
2.
 - Pour la région $x < 0$: l'équation de Schrödinger nous donne comme d'habitude :

$$\varphi(x < 0) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

$$\text{avec } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

- Pour la région $x > 0$: L'équation de Schrödinger nous dit que

$$\varphi''(x) + \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} \varphi(x) = 0$$

4. tout x étant classiquement autorisé : si on vient de la gauche, on continuera le chemin entrepris...

On retrouve alors également un oscillateur harmonique :

$$\varphi(x > 0) = C e^{i\tilde{k}x} + D e^{-i\tilde{k}x}$$

$$\text{avec } \tilde{k} = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}}$$

On remarque que le terme en D représente une onde progressive venant de la droite, (ce qui serait donc la partie incidente du quanton par la droite). Or l'énoncé précise bien que ce quanton vient de la gauche, donc :

$$D = 0$$

Enfin, comme V ne présente qu'une discontinuité de 1^{ère} espèce, on va pouvoir procéder à un **raccordement \mathcal{C}^1 de φ** !

Ce raccordement s'exprime alors :

$$\begin{cases} \varphi(x = 0^-) = \varphi(x = 0^+) \\ \varphi'(x = 0^-) = \varphi'(x = 0^+) \end{cases}$$

Ce qui se traduit donc par :

$$\begin{cases} A + B = C \\ A - B = \frac{\tilde{k}}{k} C \end{cases}$$

D'où :

$$\begin{cases} A + B = C \\ A - B = \sqrt{1 - \frac{V_0}{E}} C \end{cases}$$

3. La densité de probabilité de présence est définie de la sorte :

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

On va donc sommer⁵ ces densités pour obtenir la proba voulue :

$$\begin{aligned} P_{\text{gauche}} &= \int_{\mathbb{R}_-} dP \\ &= \int_{-\infty}^0 (A^2 + B^2 + 2AB \cos(kx)) dx \end{aligned}$$

On reconnaît une formule de Fresnel! Elle est due aux interférences entre les parties incidente et réfléchie du quanton.

De plus, on a clairement une intégrale divergente. Cette fonction d'onde n'est donc

5. sommer, intégrer, tout est pareil de toute façon...

pas normalisable, la loi de probabilité n'est pas définie : on n'a donc pas de réponse pour cette question.

Maintenant, si on avait pris un paquet d'ondes, peut-être que l'intégrale aurait pu être normalisable⁶, mais ici ce n'est pas le cas.

Après, qualitativement quand même, on peut dire que si $B \neq 0$, alors la proba de réflexion est sûrement non nulle, donc le quanton va sûrement *rebondir sur un trou* (ce qui n'est donc pas compatible avec la prévision classique de la première question).

6. En définitive, le choix de la fonction d'onde est bien trop simple.

4 États non stationnaires du puits infini

Un quanton de masse m est confiné dans un puits de potentiel infini localisé sur l'intervalle $x \in [0, a]$. On rappelle l'expression de la fonction d'onde spatiale associée à un état stationnaire d'énergie E_n donnée :

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(n \frac{\pi x}{a}) \text{ avec } n \in \mathbb{N}^* \quad (1)$$

1. Description d'un état stationnaire.

- (a) Exprimez E_n . En posant $E_1 = \hbar\omega_0$. Déduisez-en E_n en fonction de n, \hbar et ω_0 .
- (b) Donnez l'expression de la fonction d'onde $\psi_n(x, t)$ du quanton avec la convention $\psi(x, t=0) = \varphi_n(x)$.

2. Description d'un état non stationnaire.

Le quanton est maintenant dans un état de superposition décrit par la fonction d'onde $\psi(x, t)$ telle que :

$$\psi(x, t=0) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_1(x) + \varphi_2(x)) \quad (2)$$

- (a) Donnez l'expression de $\psi(x, t)$ pour $t > 0$.
- (b) On définit les deux états suivants :

$$\varphi_g(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_1(x) + \varphi_2(x)) \quad (3)$$

$$\varphi_d(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_1(x) - \varphi_2(x)) \quad (4)$$

Tracez les densités de probabilité de présence associées aux états $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_g, \varphi_d$. Commentez.

- (c) Exprimez $\psi(x, t)$ en fonction de $\varphi_g(x)$ et $\varphi_d(x)$.
Déduisez-en l'expression de la densité de probabilité de présence du quanton dans cet état. Montrez qu'elle oscille à une fréquence ν que vous exprimerez en fonction de h et ω_0 puis en fonction de E_1, E_2 et h .

Corrigé :

- 1. (a) Comme dans le cours, en ré-injectant l'expression de φ_n dans l'équation de Schrödinger indépendante du temps, on trouve :

$$E_n = \frac{1}{2m} \left(\frac{n\pi\hbar}{a} \right)^2$$

Dès lors,

$$E_1 = \hbar\omega_0 = \frac{1}{2m} \left(\frac{\pi\hbar}{a} \right)^2$$

On en déduit alors que :

$$\omega_0 = \frac{\hbar \pi^2}{2ma^2}$$

Et donc finalement,

$$\forall n \in \mathbb{N}^*, E_n = n^2 \hbar \omega_0$$

(b) On obtient immédiatement :

$$\psi_n(x, t) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(n \frac{\pi x}{a}\right) e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t} = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(n \frac{\pi x}{a}\right) e^{-in^2 \omega_0 t}$$

2. (a) On a directement :

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1(x, t) + \psi_2(x, t))$$

D'où :

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\omega_0 t} (\varphi_1(x) + e^{-3\omega_0 t} \varphi_2(x))$$

(b) On a les figures suivantes :

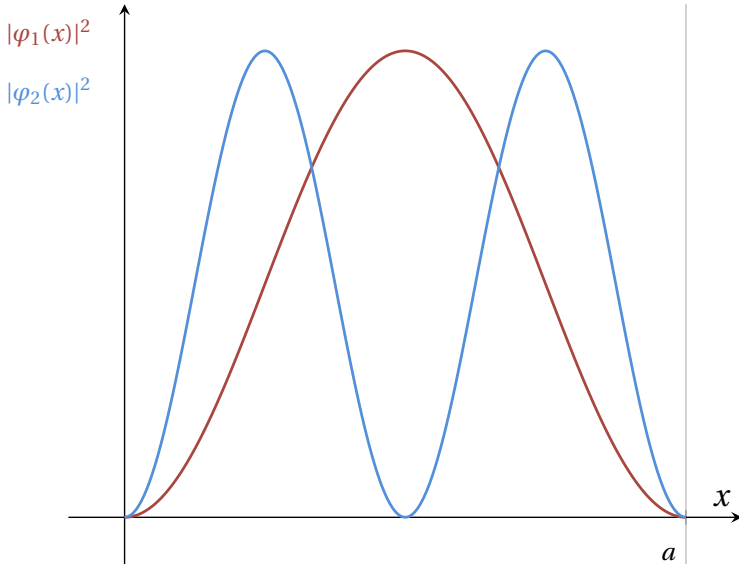


FIGURE 3 – Tracé de $|\varphi_g(x)|^2$ et de $|\varphi_d(x)|^2$

No comment...

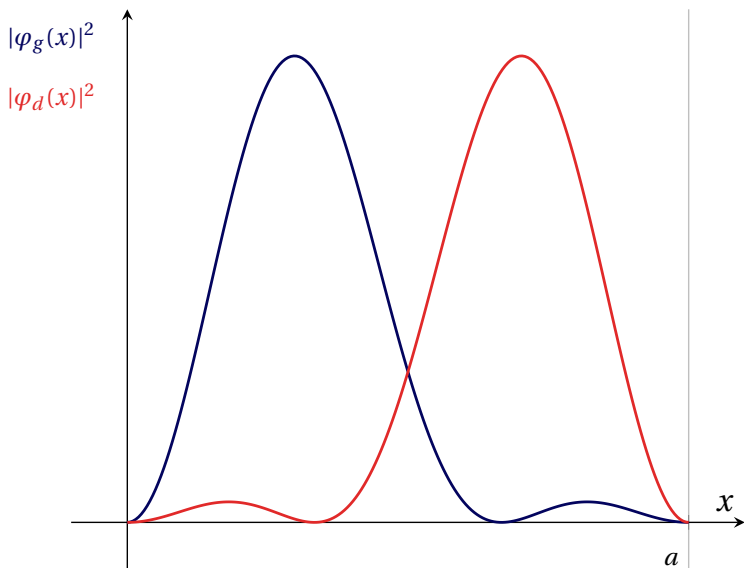


FIGURE 4 – Tracé de $|\varphi_g(x)|^2$ et de $|\varphi_d(x)|^2$

(c) On a une formule d'interférence de Fresnel temporelle :

$$|\psi|^2 = \frac{1}{2} (|\psi_g(x)|^2 + |\psi_d(x)|^2) + \frac{1}{2} (|\psi_g(x)|^2 - |\psi_d(x)|^2) \cos(3\omega_0 t)$$

On trouve alors une oscillation de fréquence

$$\nu = \frac{E_2 - E_1}{h}$$

