Éléments de la mécanique quantique (L3) 28 mai 2014

durée : 2 heures *documents et calculatrices programmables interdits*

Exercice 1 : Moment cinétique (7 points)

On considère une particule microscopique de masse m subissant un potentiel $V(\vec{r})$. On s'intéressera au moment cinétique $\vec{L}$ (avec composantes L_x, L_y et L_z) de cette particule.

1) Rappeler les règles concernant les valeurs permises pour le nombre quantique ℓ associé à la valeur absolue d'un moment cinétique (L), ainsi que la gamme de valeurs possibles pour le nombre quantique m (associé à L_z) pour une valeur de ℓ donné. Quelles sont les valeurs propres de L^2 et L_z ?

2) Démontrer que le carré de la quantité de mouvement $\vec{p}$ et la composante L_x commutent, c'est-à-dire, que $\left[p^2, L_x\right] = 0$. (Les valeurs connues des commutateurs des composantes de $\vec{r}$ et $\vec{p}$ peuvent être utilisées sans démonstration.)

3) En utilisant le théorème d'Ehrenfest et le résultat de la question précédente, montrer que l'évolution temporelle de la valeur moyenne $\langle L_x \rangle$ est décrite par l'équation
$$\frac{d\langle L_x\rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar}\left\langle [V, L_x] \right\rangle \qquad .$$

4) Évaluer les commutateurs $[V, p_y]$ et $[V, p_z]$, puis en déduire l'identité suivante :
$$[V, L_x] = i\hbar \left\{ \vec{r} \wedge \left(\vec{\nabla} V\right) \right\}_x \qquad ,$$
où $\vec{\nabla} V$ est le gradient du potentiel et $\{\vec{v}\}_x$ dénote la composante selon l'axe x du vecteur $\vec{v}$.

5) On admettra sans démonstration que les équations impliqués dans l'évolution de $\langle L_y \rangle$ et $\langle L_z \rangle$ sont identiques à celles que l'on vient de dériver pour $\langle L_x \rangle$ (avec x remplacé par y et z, respectivement). En déduire que l'équation de mouvement de $\langle \vec{L} \rangle$ peut se mettre sous la forme
$$\frac{d\langle \vec{L}\rangle}{dt} = \langle \vec{N} \rangle \qquad .$$
Donner l'expression de $\vec{N}$. À quelle loi de la mécanique classique correspond la formule ainsi trouvée ? (justifier la réponse)

Exercice 2 : Puits quantiques de semiconducteurs (13 points)

Partie I – Puits quantique ultrafin

On considère un puits quantique de semiconducteurs constitué d'une mince couche de GaAs prise en sandwich entre deux couches de GaP. On peut modéliser cette structure par un puits de potentiel de profondeur V_b et de largeur a, voir figure 1.

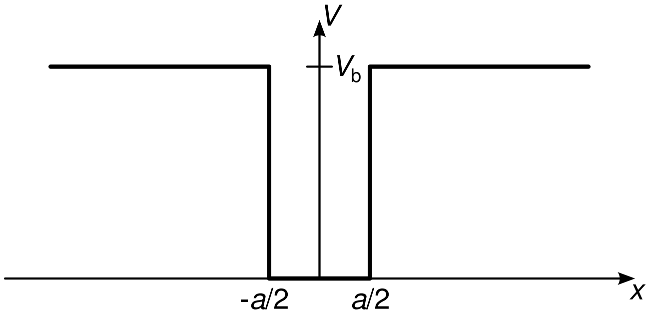

Figure 1 – Un puits de potentiel de profondeur V_b et de largeur a.

1) Rappeler l'équation de Schrödinger indépendante du temps à une dimension pour une particule de masse m évoluant dans un profil de potentiel $V(x)$.
2) Donner la forme générale des solutions de cette équation dans les différentes régions, pour des états d'énergie $E < V_\mathrm{b}$. On notera $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$ et $q = \sqrt{2m(V_\mathrm{b} - E)/\hbar^2}$.
3) Quelles sont les conditions aux limites ? En déduire que, si l'on cherche une solution paire, la condition suivante est imposée : $\tan(ka/2) = q/k$.
4) On pose $q_\mathrm{b} = \sqrt{2mV_\mathrm{b}/\hbar^2}$. Dans le cas d'un puits quantique ultrafin ($ka \ll 1$ et $q_\mathrm{b}a \ll 1$), montrer que q peut se mettre sous la forme : $q \approx \frac{1}{a}\left(\sqrt{1 + q_\mathrm{b}^2 a^2} - 1\right) \approx \frac{1}{2}q_\mathrm{b}^2 a$.
5) Dans les puits quantiques de semiconducteurs, la masse effective de l'électron dépend des matériaux. On s'intéresse à la quantité $\lambda = 1/q = \hbar^2/(mV_\mathrm{b}a)$. Compte tenu de l'expression des fonctions d'onde en dehors du puits, que représente la quantité λ ? Quels commentaires peut-on faire sur son expression ?
   Calculer λ lorsque $m = 0{,}02\,m_0$, où m_0 est la masse standard d'un électron. On donne $\hbar^2/m_0 = 7{,}62 \cdot 10^{-20}\,\mathrm{eV\,m^2}$, $V_\mathrm{b} = 0{,}8\,\mathrm{eV}$ et $a = 0{,}282\,\mathrm{nm}$.

Partie II – Double puits – modèle des liaisons fortes – effet Stark

On s'intéresse au cas de deux puits quantiques en interaction, leurs centres étant distants de d, voir figure 2.

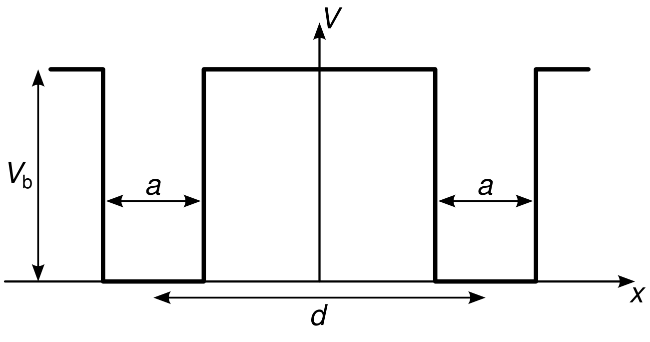

Figure 2 – Deux puits de potentiel séparés par une distance de d. On positionnera l'origine de l'axe x au milieu entre les deux puits.

On considère qu'un puits isolé ne présente qu'un seul niveau d'énergie E_0. Dans la base des deux états « électron dans le puits 1 (gauche) » et « électron dans le puits 2 (droite) », notée $\{|1\rangle, |2\rangle\}$, le hamiltonien du système s'écrit

$$\begin{pmatrix} E_0 & -V_\mathrm{c} \\ -V_\mathrm{c} & E_0 \end{pmatrix} \qquad ,$$

où les termes V_c traduisent le couplage entre les puits dans un modèle de « liaisons fortes ».

6) Démontrer que les états propres d'énergies associées E_s et E_a à préciser sont

$$\left|\psi_\mathrm{s}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(\left|1\right\rangle + \left|2\right\rangle\Big) \qquad \text{et} \qquad \left|\psi_\mathrm{a}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(\left|1\right\rangle - \left|2\right\rangle\Big) \qquad .$$

7) Que dire sur la dégénérescence des niveaux ?

8) On place maintenant l'ensemble dans un champ électrostatique $\vec{F} = F_x\vec{e}_x$ uniforme dirigé selon l'axe x. Rappeler l'expression de l'énergie potentielle électrostatique d'un électron plongé dans ce champ. En déduire l'opérateur énergie potentielle V et montrer que dans la base $\big\{|1\rangle, |2\rangle\big\}$ il peut se mettre sous la forme

$$V = \begin{pmatrix} V_0 - \Delta & 0 \\ 0 & V_0 + \Delta \end{pmatrix} \qquad ,$$

où V_0 désigne l'énergie potentielle électrostatique en $x = 0$. On admettra que la distance entre les deux puits justifie les approximations $\langle 1|2\rangle = 0$ et $\langle 2|1\rangle = 0$. Donner l'expression de Δ.

9) Déterminer les éléments de matrice de V dans la base $\big\{|\psi_\mathrm{s}\rangle, |\psi_\mathrm{a}\rangle\big\}$. En déduire la perturbation des énergies au premier ordre. Que peut-on dire sur l'écart des niveaux ?

10) **Question bonus :** Quels sont les états perturbés au premier ordre, de la forme :

$$\left|\psi'_{\substack{\mathrm{s}\\\mathrm{a}}}\right\rangle = \left|\psi_{\substack{\mathrm{s}\\\mathrm{a}}}\right\rangle \pm \alpha \left|\psi_{\substack{\mathrm{a}\\\mathrm{s}}}\right\rangle$$

Ces états sont-ils normés ? On s'intéresse à l'état $|\psi'_\mathrm{s}\rangle$; quelle est la probabilité de trouver l'électron dans le puits 1 ? dans le puits 2 ? Conclure.

(20 points au total plus 2 points bonus)