

**Physique quantique**  
**Mars 2011**  
**(durée 1h)**

**I) Question de cours: (5 pts)**

- 1 - Rappeler les hypothèses du modèle de Bohr, ce qu'il permet d'expliquer et quelles en sont ses limites.
- 2 - Quelle est la signification physique de la fonction d'onde associée à une particule ? Pourquoi est-elle nécessairement de carré sommable ?
- 3 - Qu'est-ce que l'Hamiltonien d'un système quantique ?

**II) (15pts)**

**LES NANOPARTICULES**

**PARTICULE DANS UN Puits DE POTENTIEL INFINI A TROIS DIMENSIONS**

Une particule de masse  $m_e$  est placée dans une boîte cubique (puits de potentiel à 3 dimensions) de côté  $a$ . Elle est libre de se mouvoir dans cette boîte mais ne peut en sortir, le potentiel  $V(x, y, z)$  étant infini à l'extérieur.

L'Hamiltonien  $H$  à l'intérieur de la boîte a pour expression  $H = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \left[ \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right]$

- 1.1 Ecrire l'équation de Schrödinger des états stationnaires
- 1.2 Vérifier que la fonction :

$$\psi_{mnp}(x, y, z) = A \sin\left(\frac{m\pi}{a} x\right) \sin\left(\frac{n\pi}{a} y\right) \sin\left(\frac{p\pi}{a} z\right),$$

où  $m, n, p$  sont des entiers strictement positifs, est fonction propre de  $H$ . En déduire la valeur propre associée  $E_{mnp}$ .

- 1.3 Quelles sont les expressions analytiques des deux niveaux d'énergie les plus bas  $E'$  et  $E''$  de ce puits de potentiel.
- 1.4 Indiquer la dégénérescence de chacun de ces niveaux.

**APPLICATION AUX NANOPARTICULES METALLIQUES**

Nous décrivons ici les propriétés des électrons confinés au sein de nanoparticules métalliques cubiques. Nous considérerons le cas des électrons quasi-libres du métal dont la masse est similaire à celle des électrons libres ( $m = 9,1 \cdot 10^{-31}$  kg).

- 1.5 Utiliser la relation établie au précédemment pour calculer en électron-volt, la valeur numérique de l'écart  $\Delta E = E'' - E'$  pour des électrons confinés au sein d'une nanoparticule cubique de côté  $a = 10$  nm et pour une particule de côté 2 nm.

- 1.6 En raison du confinement, les niveaux d'énergie des électrons sont modifiés par rapport au métal massif. Cet effet peut avoir pour conséquence de faire passer la nanoparticule d'un état conducteur vers un état d'isolant électrique à condition que la séparation entre les niveaux quantiques  $\Delta E$  soit plus grande que l'agitation thermique des électrons. L'énergie associée à l'agitation thermique est donnée par  $\overline{E}(T) = k_B T$ . Calculer cette énergie en eV pour la température ambiante  $T=300$  K.
- 1.7 Comparez  $\Delta E$  et  $\overline{E}(T)$ , et indiquez si les nanoparticules cubiques de 10 nm et 2 nm présentent un caractère conducteur ou isolant à la température de 300K.

**Données :**

Masse des électrons  $m_e = 9,1 \cdot 10^{-31}$  kg, charge élémentaire  $e = 1,6 \cdot 10^{-19}$  C

Constante de Planck  $h = 6,626 \cdot 10^{-34}$  J.s

Constante de Boltzmann  $k_B = 1,38 \cdot 10^{-23}$  J.K<sup>-1</sup>

Vitesse de la lumière  $c = 3 \cdot 10^8$  ms<sup>-1</sup>