

# Séance IV

## Etats liés et de diffusion quantiques

Guillaume BATIGNE &  
Gines MARTINEZ  
Chercheurs Subatech

# Séance IV

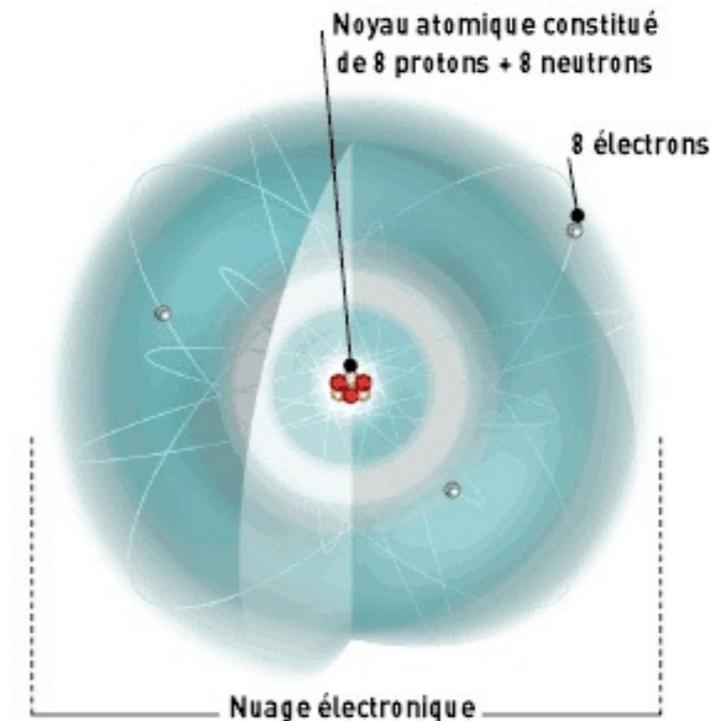
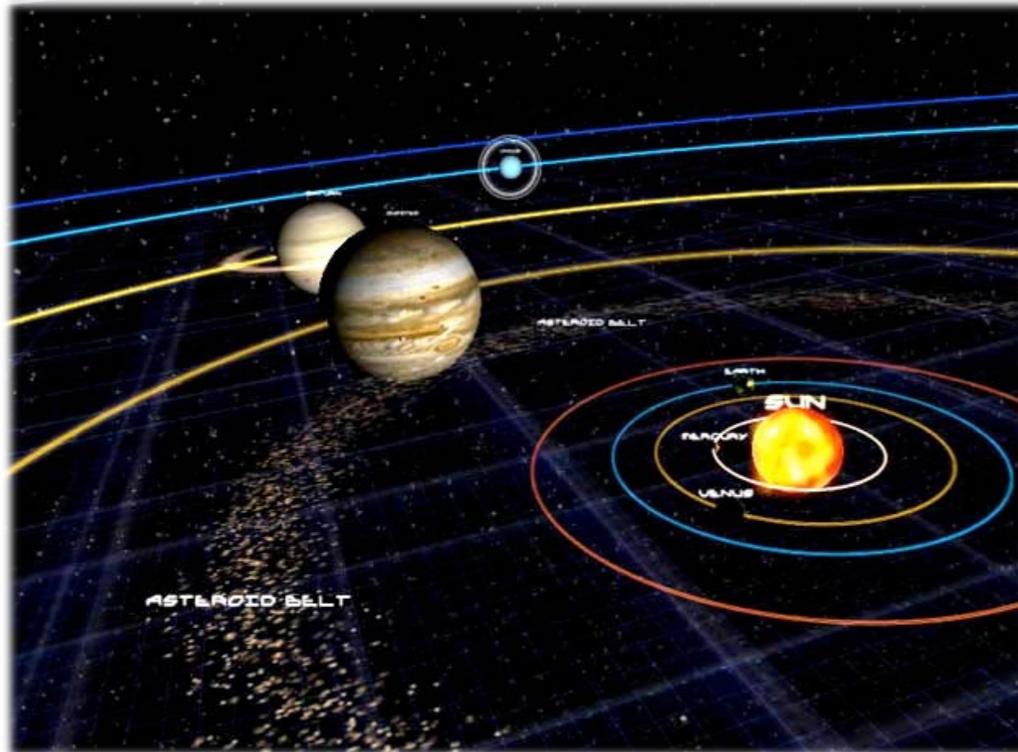
# Cours Magistral

Guillaume BATIGNE &  
Gines MARTINEZ  
Chercheurs Subatech

# Etat lié

## Définition :

Etat dans lequel le système occupe une région de l'espace de taille finie.  
Le système est confiné par un potentiel.



## En Mécanique Quantique :

Un état lié est stable si son énergie est inférieure à l'énergie potentielle à l'infini :  $E < V(\infty)$

Pour étudier un système, il faut résoudre l'équation de Schrödinger.

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{x}, t)}{\partial t} = \hat{H}(t) \psi(\vec{x}, t)$$

# Procédure de résolution (1/3)

## Hypothèses simplificatrices :

L'Hamiltonien est indépendant du temps : le système est constitué d'une particule soumise à un potentiel qui ne varie pas au cours du temps.

Particule mono-atomique sans spin : seuls les degrés de liberté de translation sont considérés.

Système unidimensionnel : la fonction d'onde ne dépend que de  $x$ .

## Résolution de la partie temporelle :

Expression de la fonction d'onde dans la base propre de  $\hat{H}$ :

$$\hat{H} |\psi_E\rangle = E |\psi_E\rangle$$

l'équation de Schrödinger donne :

$$|\psi_E(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E(t-t_0)} |\psi_E(t_0)\rangle$$

d'où

$$|\psi(t)\rangle = \int e^{-\frac{i}{\hbar}E(t-t_0)} \tilde{\psi}(E) |\psi_E(t_0)\rangle dE$$

$$|\psi(t)\rangle = \sum e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)} a_n |\psi_n\rangle$$

# Procédure de résolution (2/3)

Expression de l'Hamiltonien :

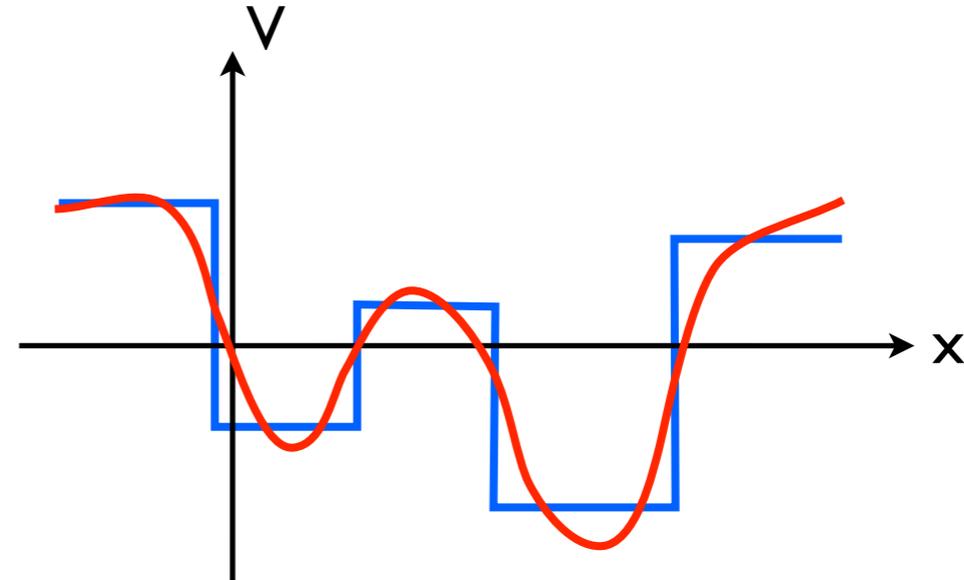
$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \hat{V}(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \hat{V}(x) \quad \text{Rappel : } \hat{P} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

Approximation du potentiel :

Potentiel continu par morceaux

$$V(x) \simeq V_n$$

Pour  $x \in [x_n; x_{n+1} [$



Résolution dans chaque domaine où  $V$  est constant :

L'équation aux valeurs propres de l'Hamiltonien devient :

$$\frac{\partial^2 \varphi_E(x)}{\partial x^2} = -\frac{2m(E - V_n)}{\hbar^2} \varphi_E(x)$$

Les solutions sont :

$$\text{Si } E \geq V_n, \varphi_{E,n}(x) = a_n^+ e^{ik_n x} + a_n^- e^{-ik_n x} \quad \text{avec } k_n = \frac{\sqrt{2m(E - V_n)}}{\hbar}$$

$$\text{Si } E < V_n, \varphi_{E,n}(x) = a_n^+ e^{K_n x} + a_n^- e^{-K_n x} \quad \text{avec } K_n = \frac{\sqrt{2m(V_n - E)}}{\hbar}$$

# Procédure de résolution (3/3)

Après avoir trouvé la forme de la fonction d'onde pour chaque domaine, il faut déterminer les constantes d'intégration :  $\{a_n^\pm\}$

## Conditions de raccordement :

L'impulsion ne peut devenir infinie subitement. Or  $\hat{P} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ ,  
d'où les conditions de raccordement :

La fonction d'onde et sa dérivée spatiale doivent être continues.

$$\varphi_{E,n}(x_n) = \varphi_{E,n-1}(x_n) \quad \text{et} \quad \frac{d\varphi_{E,n}(x_n)}{dx} = \frac{d\varphi_{E,n-1}(x_n)}{dx}$$

## Normalisation :

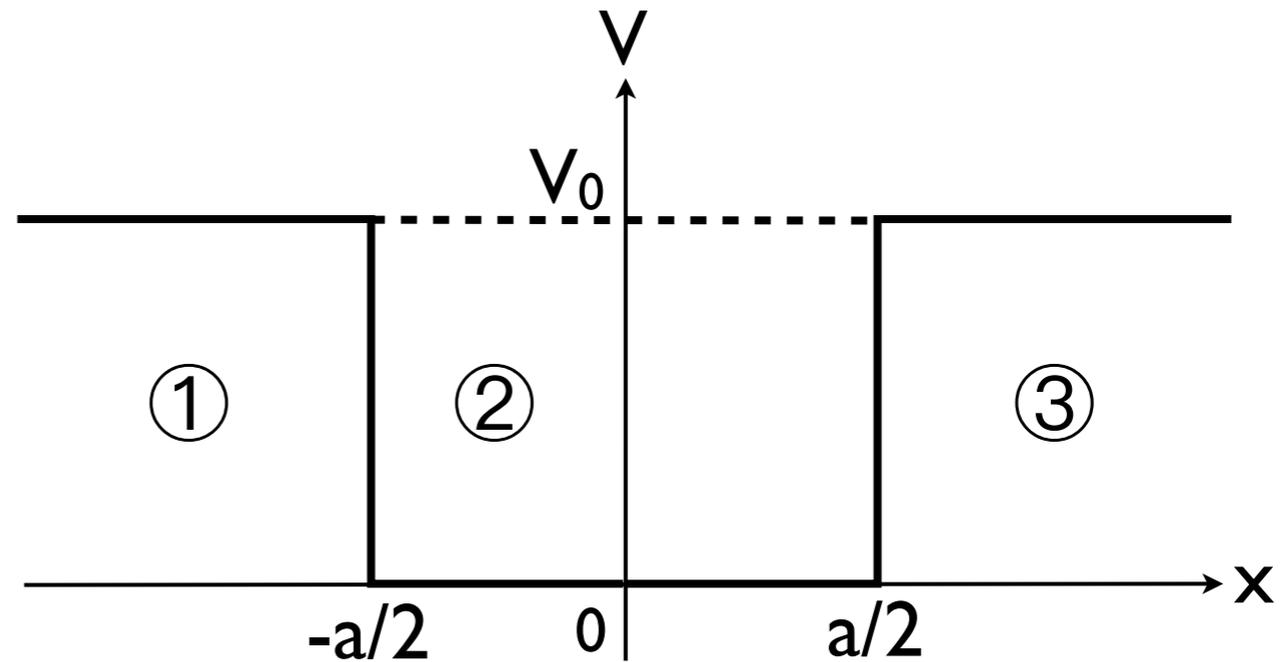
Une fonction d'onde est toujours définie à une constante (complexe) près.  
Pour relier plus facilement ses composantes à des probabilités, sa norme est fixée à l'unité :

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x, t)|^2 dx = 1 \Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \left| \sum_{E,n} \psi_E(0) \varphi_{E,n}(x) e^{-\frac{i}{\hbar} Et} \right|^2 dx = 1$$

# Application : Puits Carré

Forme du potentiel :

Puits de hauteur  $V_0$   
de largeur  $a$



Trois domaines :

- ①  $x < -a/2 : V(x) = V_0$
- ②  $|x| \leq a/2 : V(x) = 0$
- ③  $x > a/2 : V(x) = V_0$

Expression des états propres de l'Hamiltonien (cas où  $E < V_0$ ) :

D'après ce que nous avons vu précédemment :

$$\varphi_{E,1}(x) = a_1^+ e^{Kx} + \cancel{a_1^- e^{-Kx}}$$

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$\varphi_{E,2}(x) = a_2^+ e^{ikx} + a_2^- e^{-ikx}$$

avec

$$K = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

$$\varphi_{E,3}(x) = \cancel{a_3^+ e^{Kx}} + a_3^- e^{-Kx}$$

Mais  $a_1^- = a_3^+ = 0$ , sinon  $\varphi_{E,1}(-\infty) = +\infty$  et  $\varphi_{E,3}(+\infty) = +\infty$

# Application : Puits Carré

Utilisation de la symétrie du problème (comme souvent en physique) :

$V(x) = V(-x)$  donc la physique ne doit pas dépendre de l'orientation de l'axe.

2 possibilités :  $\varphi_E(x) = \pm \varphi_E(-x)$

Réécrire la fonction d'onde pour faire apparaître cette symétrie :

Pour rappel :  $e^{\pm i k x} = \cos(kx) \pm i \sin(kx)$

donc nous pouvons écrire :  $\varphi_{E,2}(x) = a_+ \cos(kx) + a_- \sin(kx)$

et nous avons toujours :  $\varphi_{E,1}(x) = a_1 e^{Kx}$  et  $\varphi_{E,3}(x) = a_3 e^{-Kx}$

Conditions de raccordement :

En  $x=-a/2$  :

$$a_1 e^{-Ka/2} = a_+ \cos(ka/2) - a_- \sin(ka/2) \quad \text{a)}$$

$$a_1 K e^{-Ka/2} = k (a_- \cos(ka/2) + a_+ \sin(ka/2)) \quad \text{b)}$$

En  $x=a/2$  :

$$a_3 e^{-Ka/2} = a_+ \cos(ka/2) + a_- \sin(ka/2) \quad \text{c)}$$

$$-a_3 K e^{-Ka/2} = k (a_- \cos(ka/2) - a_+ \sin(ka/2)) \quad \text{d)}$$

# Application : Puits Carré

Retour sur la symétrie du système :

Montrer que chaque état d'énergie possède une parité bien définie :

Parité positive = fonction d'onde paire

Parité négative = fonction d'onde impaire

b) x c) + a) x d)  $\Rightarrow$

$$k (a_+ a_- + (a_+^2 + a_-^2) \cos(ka/2) \sin(ka/2)) \\ + k (a_+ a_- - (a_+^2 + a_-^2) \cos(ka/2) \sin(ka/2)) = 0$$

d'où  $a_+ a_- = 0$  CQFD !

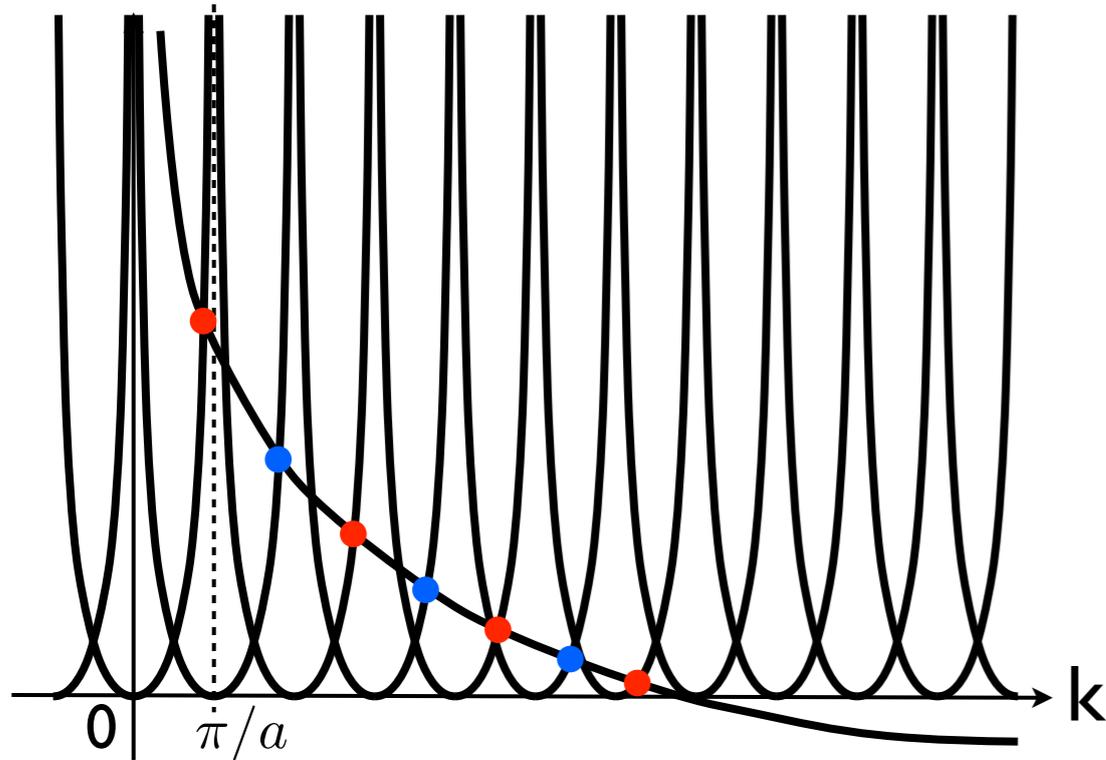
Trouver pour chaque parité la relation liant  $k$  et  $K$  :

Parité positive ( $a_+ \neq 0$  et  $a_- = 0$ ) : b) / a)  $\Rightarrow K = k \tan(ka/2)$

Parité négative ( $a_+ = 0$  et  $a_- \neq 0$ ) : c) / d)  $\Rightarrow k = -K \tan(ka/2)$

# Puits Carré : Solutions

Représentation graphique des deux relations :



**Parité positive** :  $K = k \tan(ka/2)$

$$\text{ou } \tan^2(ka/2) = \frac{V_0}{E} - 1 = \frac{2mV_0}{\hbar^2 k^2} - 1$$

$$\text{et } \tan(ka/2) \geq 0$$

**Parité négative** :  $k = -K \tan(ka/2)$

$$\text{ou } \frac{1}{\tan^2(ka/2)} = \frac{2mV_0}{\hbar^2 k^2} - 1$$

$$\text{et } \tan(ka/2) \leq 0$$

**Valeurs des énergies possibles :**

Nouveauté : l'énergie du système ne peut prendre que des valeurs discrètes

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}$$

⇒ L'énergie du système est **quantifiée**

La quantification est due aux conditions aux limites, c'est-à-dire au confinement.

# Puits carré : forme des fonctions d'onde

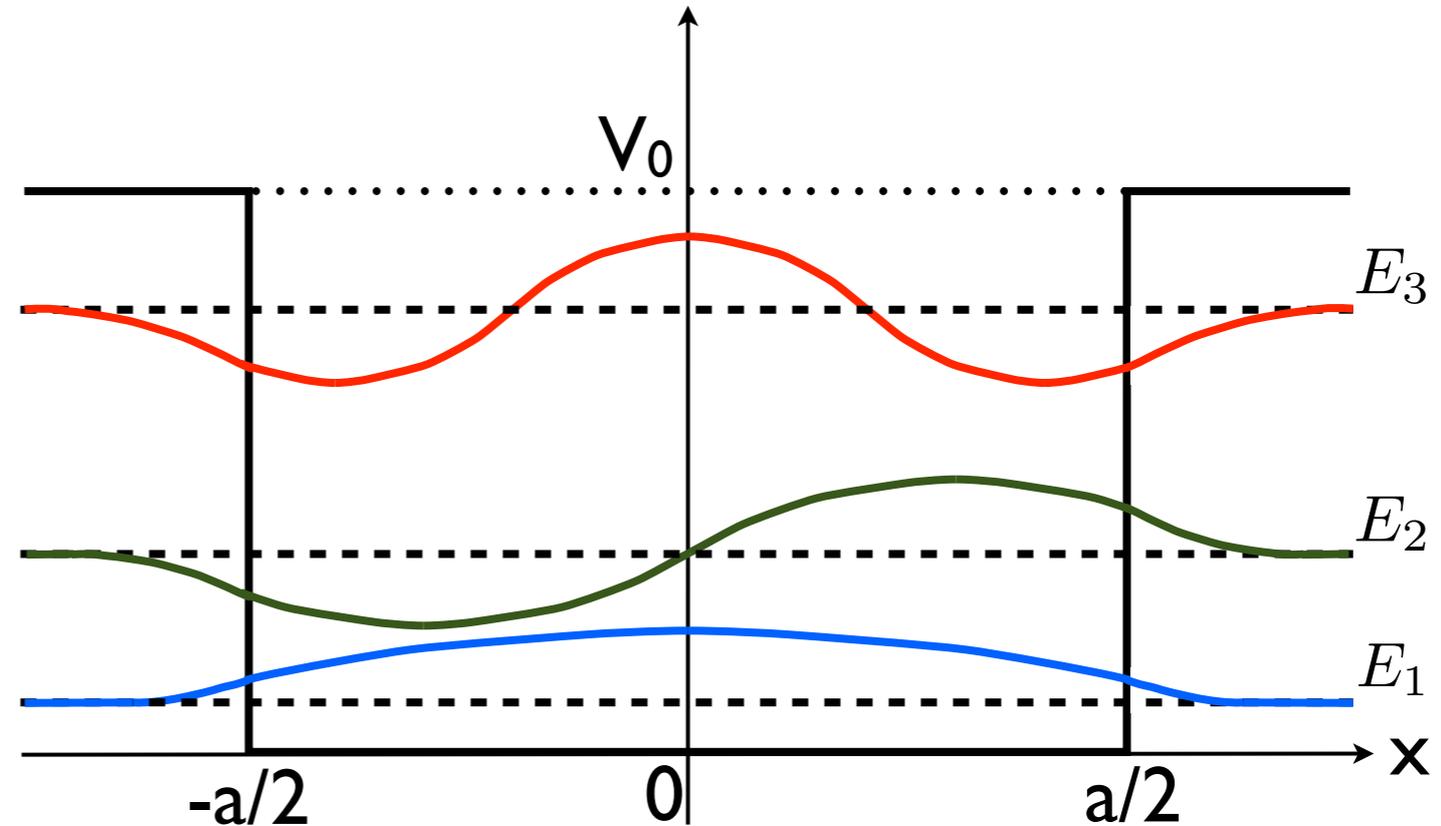
Si  $V_0$  possède une valeur finie :

Résultats plus ou moins identiques.  
Exception des domaines où  $E < V_0$ .

$$\varphi_{E_n}(|x| > a/2) \propto e^{-K_n|x|} \neq 0$$

Cela signifie que :

$$P(|x| > a/2) \propto e^{-2K_n|x|} \neq 0$$



Contrairement à la mécanique classique, il est possible de mesurer  
une particule dans une région où son énergie est inférieure au potentiel !

Nous verrons l'implication dans le chapitre suivant.

La longueur de pénétration vaut :  $L_n = 1/(2K_n)$

Ordre de grandeur : électron avec  $V_0 - E \sim 1eV$  donne

$$L = \frac{\hbar}{2\sqrt{2m(V_0 - E)}} \simeq 1\text{\AA}$$

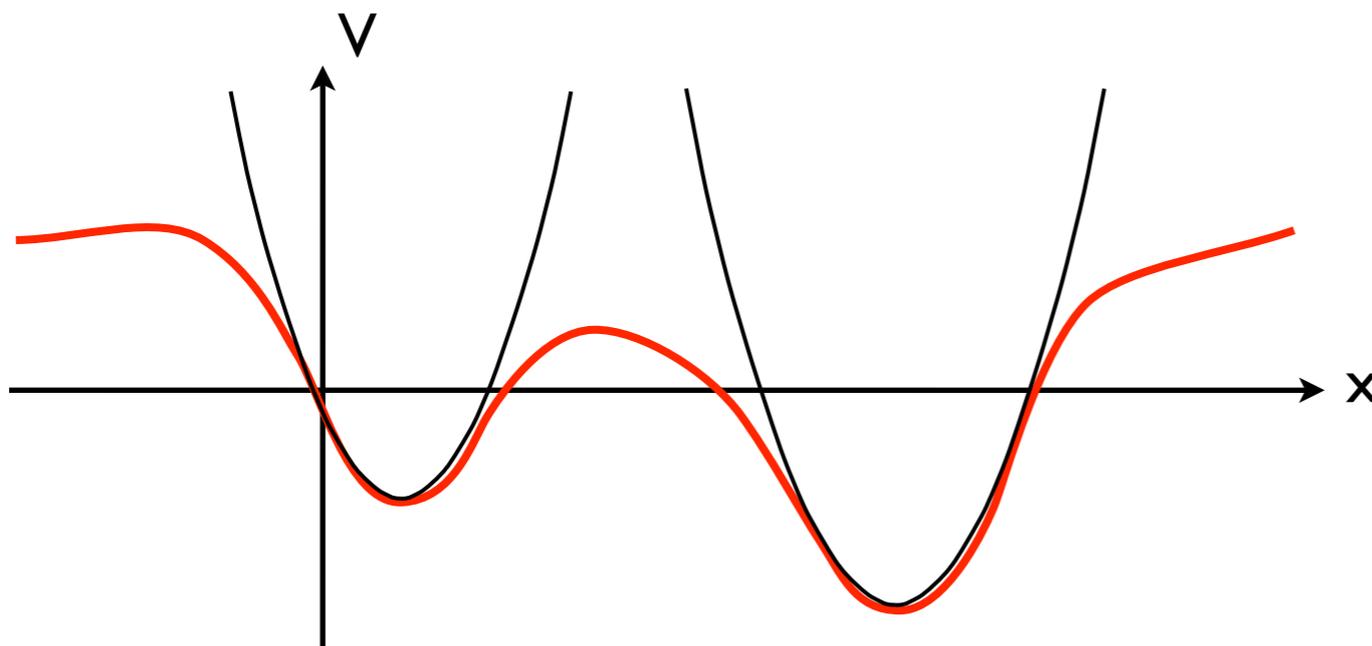
# Potentiel Harmonique

Forme de l'Hamiltonien :

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{1}{2}k\hat{X}^2 = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{X}^2$$

avec  $\omega \equiv \sqrt{\frac{k}{m}}$  pulsation propre de l'oscillateur

**Intérêt :** Approximation d'un potentiel autour d'une position d'équilibre.



$$\hat{H} |\psi_E\rangle = E |\psi_E\rangle ?$$

1. Traitement analytique :  
solution d'une équation différentielle
2. Traitement algèbre d'opérateurs

# Opérateur construction/destruction du OH

$$\alpha \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \text{ et } \xi \equiv \alpha x \quad \longrightarrow \quad \hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2} \left( -\frac{d^2}{d\xi^2} + \xi^2 \right)$$

$$\hat{a} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \xi + \frac{d}{d\xi} \right) \quad \hat{a}^\dagger \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \xi - \frac{d}{d\xi} \right) \quad \hat{N} \equiv \hat{a}^\dagger \hat{a}$$

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2} \left( \hat{N} + \frac{1}{2} \right) \quad [\hat{a}^\dagger \hat{a}] = I \quad [\hat{N}, \hat{a}] = -\hat{a} \quad [\hat{N}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger$$

Supposons qu'une valeur propre de  $\hat{N}$  est  $\mu$  avec un état propre  $|\mu\rangle$  :

$$\hat{N}|\mu\rangle = \mu|\mu\rangle$$

I)  $\hat{N}\hat{a}^\dagger|\mu\rangle = ([\hat{N}, \hat{a}^\dagger] + \hat{a}^\dagger\hat{N})|\mu\rangle = (\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{N})|\mu\rangle = (\mu + 1)\hat{a}^\dagger|\mu\rangle$

II)  $\hat{N}\hat{a}|\mu\rangle = ([\hat{N}, \hat{a}] + \hat{a}\hat{N})|\mu\rangle = (-\hat{a} + \hat{a}\hat{N})|\mu\rangle = (\mu - 1)\hat{a}|\mu\rangle$

III)  $0 \leq \|\hat{a}|\mu\rangle\|^2 = \langle \hat{a}\mu | \hat{a}\mu \rangle = \langle \mu | \hat{N} | \mu \rangle = \mu \langle \mu | \mu \rangle = \mu \begin{cases} \hat{a}|\mu\rangle = \sqrt{\mu}|\mu - 1\rangle \\ \hat{a}^\dagger|\mu\rangle = \sqrt{\mu + 1}|\mu + 1\rangle \end{cases}$

$\mu$  est un entier positif : 1,2,3..., et donc  $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$

# Etats propres du OH

Pour l'état fondamentale  $|0\rangle$  :

$$\hat{a}|0\rangle = 0$$

$$\hat{a} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \xi + \frac{d}{d\xi} \right)$$

$$\xi\phi_0(\xi) + \frac{d\phi_0(\xi)}{d\xi} = 0$$

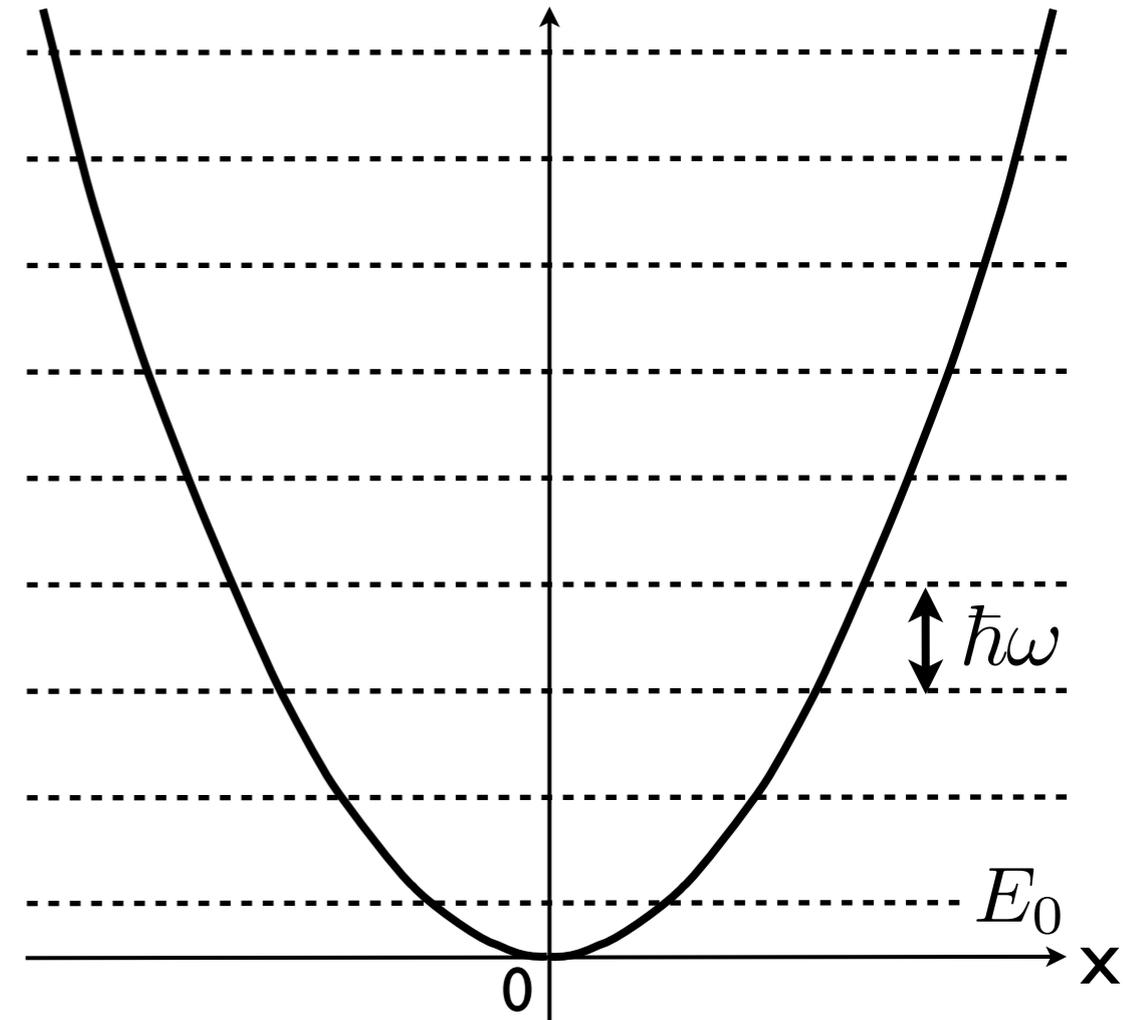
$$\phi_0(\xi) = ce^{-\xi^2/2}$$

$$\phi_0(x) = \left( \frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-\frac{1}{2} \frac{m\omega}{\hbar} x^2}$$

$$|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{\mu+1}} \hat{a}^\dagger |0\rangle = \hat{a}^\dagger |0\rangle$$

$$\phi_1(\xi) = \xi\phi_0(x) - \frac{d\phi_0(\xi)}{d\xi} = \left( \frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} 2xe^{-\frac{1}{2} \frac{m\omega}{\hbar} x^2}$$

# Potentiel Harmonique



Quantification de l'énergie :

Valeurs possibles :  $E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega$

Fait remarquable (et général à tout potentiel) :

Energie du niveau fondamental :

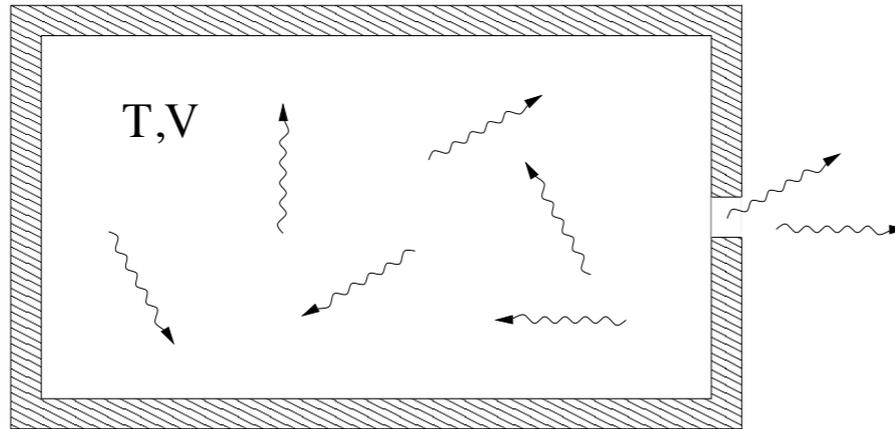
$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega \neq 0 \text{ non classique ; même chose pour le puits carré.}$$

Raison : **Principe d'incertitude**  $\Delta x \Delta p \gtrsim \hbar/2$

# Corps Noir (1/2)

**Corps Noir** : Objet qui émet sous forme E-M toute l'énergie qu'il reçoit  
**Ex corps presque noir** : Soleil (énergie Nucléaire/Gravitation).

**Modélisation :**



**Enceinte Thermalisée**  
**Parois réfléchissantes**  
**Percée d'un trou**

**Mécanique (Statistique) Classique** : Problème de divergence Ultra-Violette

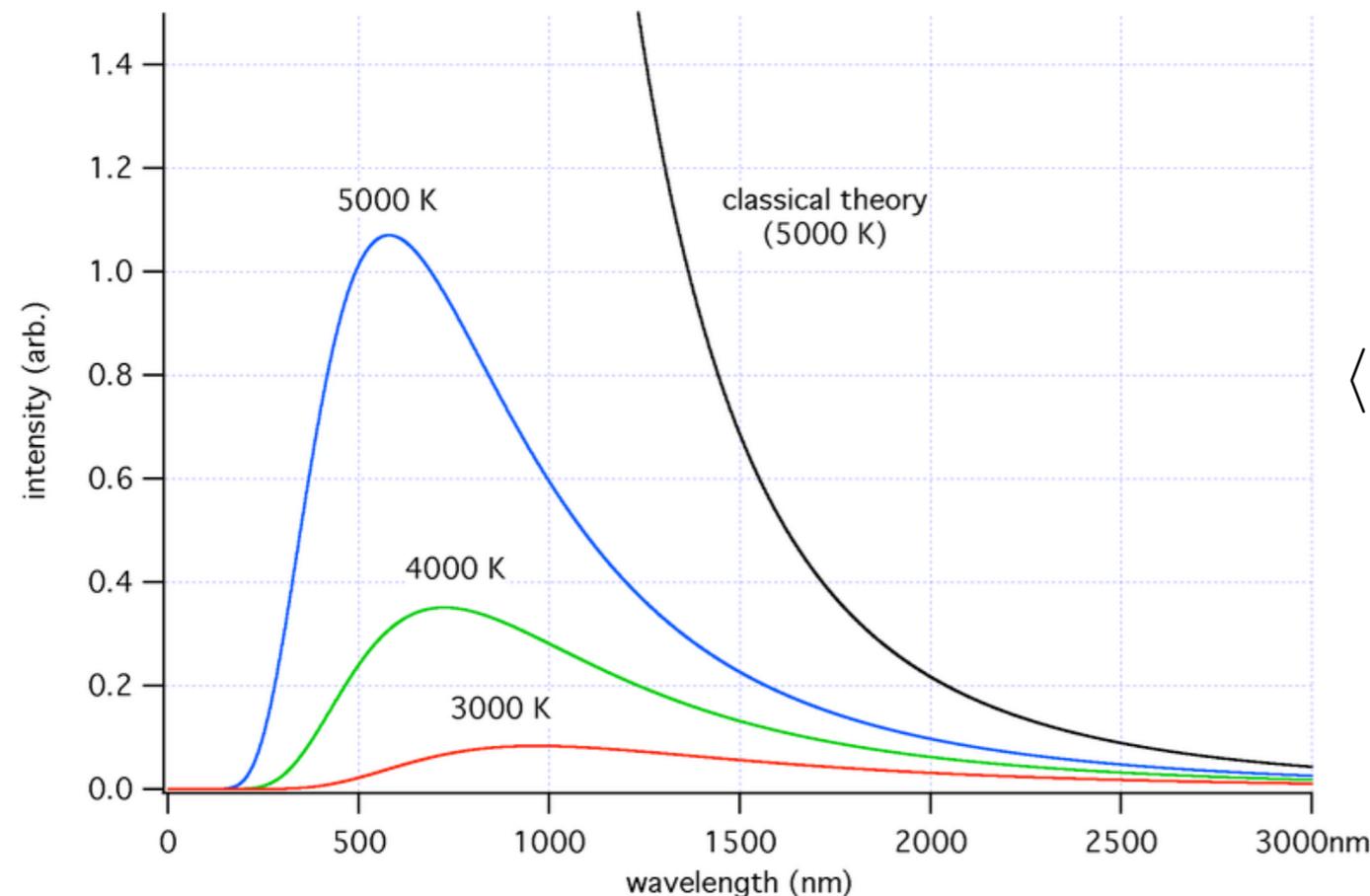
Aucun lien  $E / \nu$

Contribution de chaque état ( $\vec{k}$ )  
à l'énergie (Physique Statistique) :

$$\langle E \rangle_{\nu} = \left( \int_0^{\infty} E e^{-\frac{E}{k_B T}} dE \right) / \left( \int_0^{\infty} e^{-\frac{E}{k_B T}} dE \right) = k_B T$$

**⇒ Energie totale émise infinie !!!!**

$$E_{tot} \propto 4\pi \int_0^{\infty} k_B T \nu^2 d\nu = +\infty$$



# Corps Noir (2/2)

## Mécanique (Statistique) Quantique :

**Hypothèse de Planck** : Pour une fréquence donnée, l'échange d'énergie ne peut se faire que par paquets (quanta), multiples entiers de  $h\nu$ .  
 $h = \text{hilfskonstante (constante d'aide !)}$

⇒ **Echange d'énergie quantifiée**

## Distribution statistique des photons :

$$\nu^2 \rightarrow \frac{\nu^2 \sum_{n=0}^{\infty} n e^{-\frac{n h \nu}{k_B T}}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{n h \nu}{k_B T}}} = \frac{\nu^2}{e^{\frac{h \nu}{k_B T}} - 1}$$

## Loi de Stefan-Boltzmann :

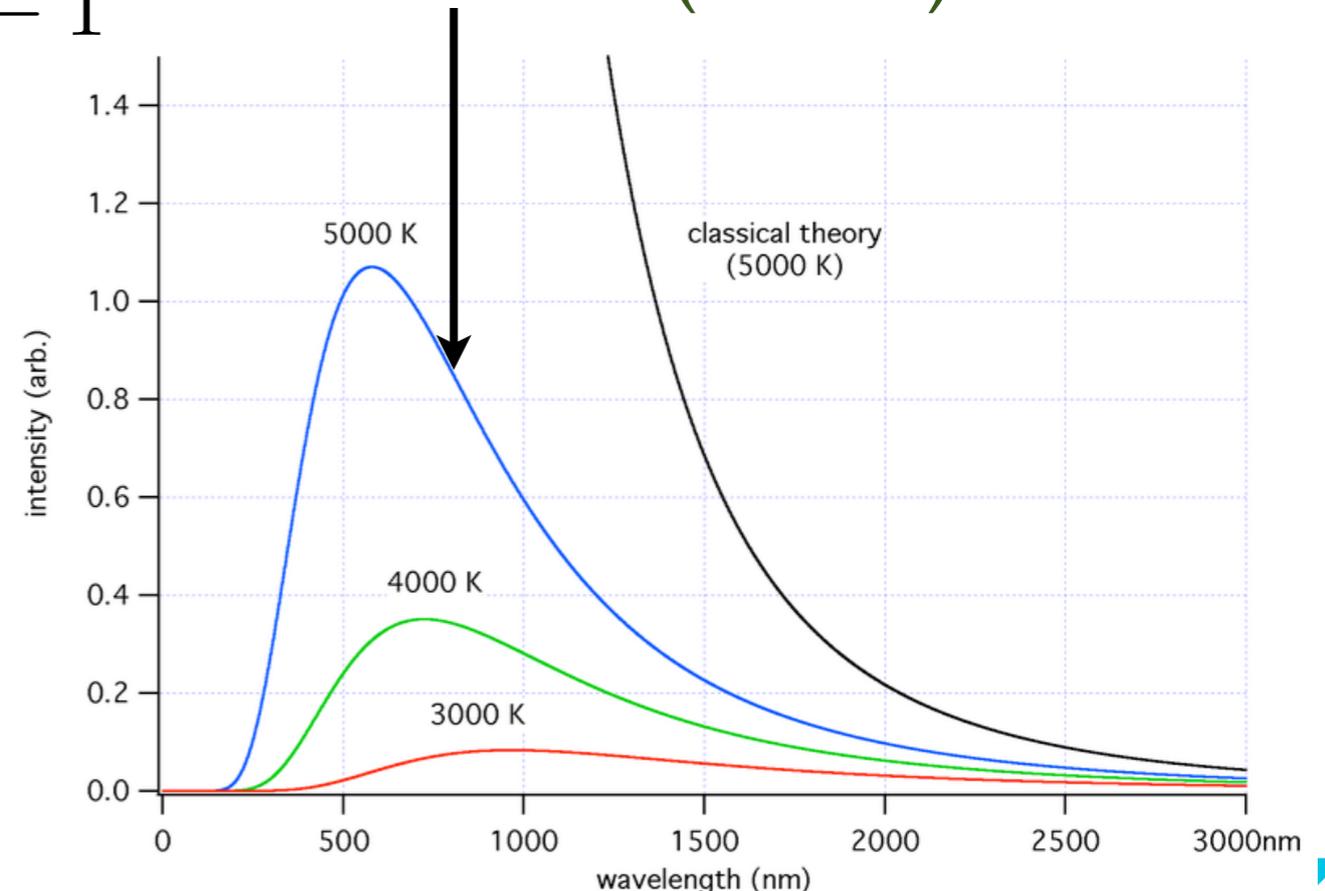
$$P = \frac{2\pi S}{c^2} \int_0^{\infty} \frac{h\nu^3 d\nu}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1} = S\sigma T^4$$

## Loi de Wien :

$$\lambda_{max} T = \frac{hc}{4,965 k_B}$$

**Soleil (T=5800K) ⇒  $\lambda_{max} = 500 \text{ nm}$  (vert-bleu)**

## Distribution de Bose-Einstein (bosons)



# Etat de diffusion : Normalisation

## Etat de diffusion :

Par opposition à un état lié, un état de diffusion correspond à un système qui n'est pas confiné dans une région de l'espace.

⇒ la fonction d'onde peut être non nulle dans plusieurs régions de l'espace ⇒ 2 cas de figures

### 1) Système localisé dans l'espace :

Pas de problème de normalisation (cf. états liés)

Taille du système fini donc l'impulsion n'est pas parfaitement connue

⇒ le système peut être décrit par un paquet d'ondes (planes)

### 2) Système non localisé dans l'espace (au moins dans une direction) :

Exemple : faisceau de particules

L'impulsion peut être très bien connue

⇒ le système peut être décrit par une onde plane monochromatique (en première approximation)

**Mais l'intégrale de la norme de la fonction d'onde diverge !**

⇒ Il faut trouver un autre moyen de normalisation

# Flux de particules

Caractéristiques d'un faisceau :

Direction, focalisation, énergie et **flux** (ou courant)

⇒ Normalisation peut être effectuée sur la valeur du flux

Relation de conservation du nombre de particules (cas unidimensionnel) :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div} j = 0 \text{ avec } \rho(x) = |\psi(x)|^2$$
$$\text{donc } \frac{\partial \rho(x)}{\partial t} = \frac{\partial \psi^*(x)}{\partial t} \psi(x) + \psi^*(x) \frac{\partial \psi(x)}{\partial t}$$

Equation de Schrödinger d'une particule libre ( $V(x)=0$ )

$$\text{d'où } \frac{\partial \rho(x)}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} \left( \psi^*(x) \frac{\hbar^2 \hat{\Delta} \psi(x)}{2m} - \frac{\hbar^2 \hat{\Delta} \psi^*(x)}{2m} \psi(x) \right)$$
$$\text{donc } \frac{\partial \rho(x)}{\partial t} = \nabla \left( \frac{i\hbar}{2m} \{ \psi^*(x) \nabla \psi(x) - \psi(x) \nabla \psi^*(x) \} \right)$$

$$\text{par identification : } j(x) = \frac{-i\hbar}{2m} (\psi^*(x) \nabla \psi(x) - \psi(x) \nabla \psi^*(x))$$

$$\text{Onde plane : } \psi(x) = a e^{ikx} \Rightarrow j(x) = |a|^2 \frac{\hbar k}{m} = |a|^2 \frac{p}{m} = |a|^2 v$$

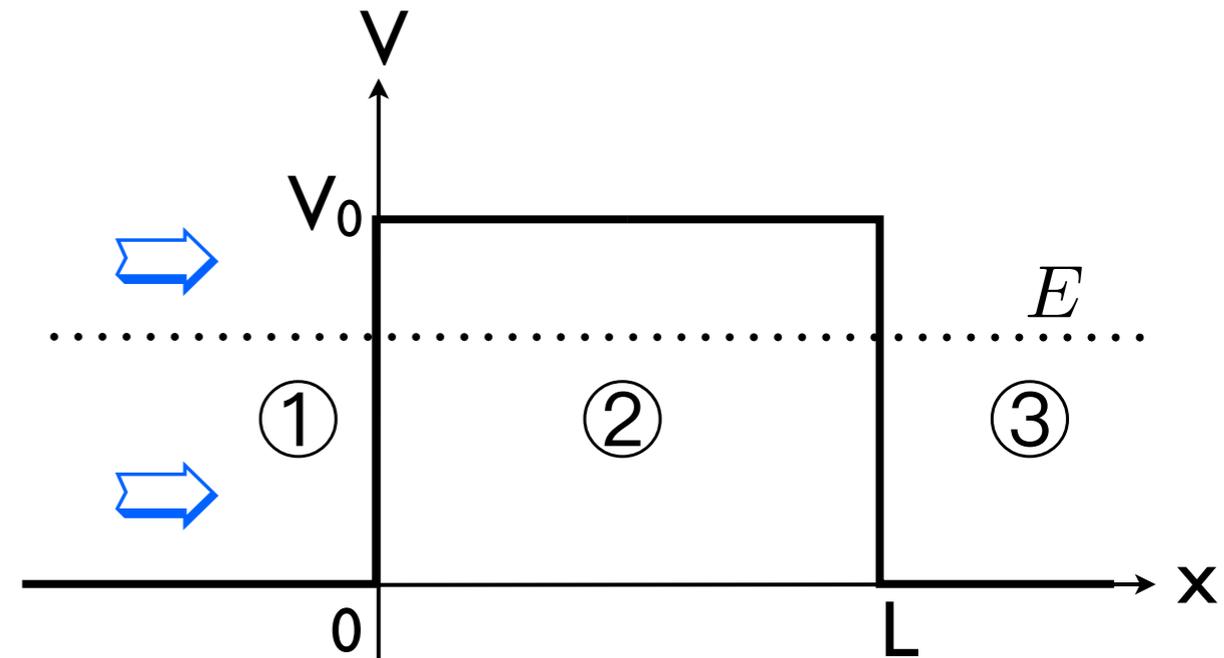
# Marche de Potentiel

## Définition du Système :

Hypothèses identiques au cas du puits de potentiel (Hamiltonien indépendant du temps, particules mono-atomiques et sans spin et système unidimensionnel).

Flux de particules arrivant de  $x=-\infty$

Pas de source à  $x=+\infty$



## Etude du cas $0 < E < V_0$ (d'autres cas seront vu ultérieurement)

Nous allons étudier les états propres d'énergie (i.e.  $E$  fixée).

Procédure identique à celle utilisée pour le puits de potentiel.

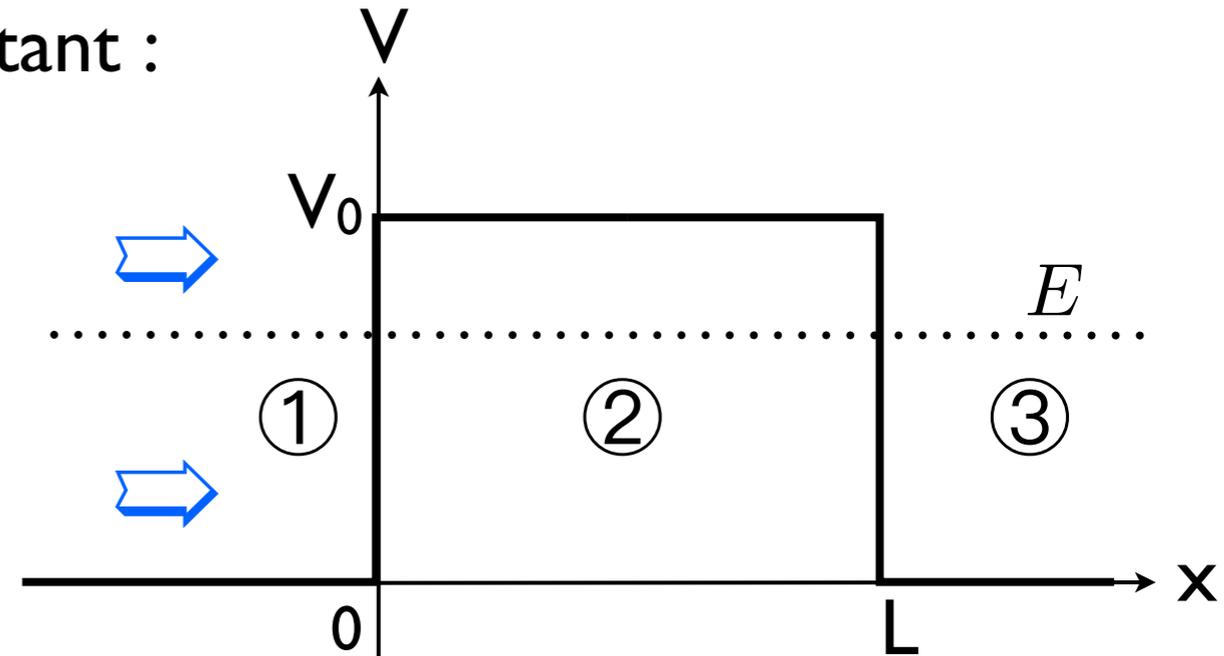
- Recherche des états propres de l'Hamiltonien pour chaque domaine
- Résolution de l'équation de Schrödinger
- Conditions de raccordement
- Et éventuellement normalisation des fonctions d'onde.

# Résolution de l'équation de Schrödinger

Expression des états propres de l'Hamiltonien :  $\{\varphi_{E,i}(x)\}$

Pour chaque domaine où  $V(x)$  est constant :

$$\hat{H}\varphi_{E,i}(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi_{E,i}(x)}{dx^2} + V_i\varphi_{E,i}(x) = E\varphi_{E,i}(x)$$



Les solutions sont :

$$\begin{aligned} \varphi_{E,1}(x) &= a_1 e^{ikx} + a'_1 e^{-ikx} \\ \varphi_{E,2}(x) &= a_2 e^{Kx} + a'_2 e^{-Kx} \\ \varphi_{E,3}(x) &= a_3 e^{ikx} + \cancel{a'_3 e^{-ikx}} \end{aligned} \quad \text{avec } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \text{ et } K = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

Pas de source à  $x=+\infty$

Solutions de l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{\partial \psi_{E,i}(x,t)}{\partial t} = E\psi_{E,i}(x,t) \quad \text{avec } \psi_{E,i}(x,0) = \varphi_{E,i}(x) \quad \Leftrightarrow \quad \psi_{E,i}(x,t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \varphi_{E,i}(x) = e^{-i\omega t} \varphi_{E,i}(x)$$

$$\text{d'où } \psi_{E,1(3)}(x,t) = a_{1(3)} e^{-i(\omega t - kx)} + a'_{1(3)} e^{-i(\omega t + kx)}$$

Onde Plane Progressive  $x \nearrow$

OPP  $x \searrow$

# Calcul des amplitudes

Conditions de raccordement en  $x=0$  :

$$a_1 + a'_1 = a_2 + a'_2 \quad \text{ou} \quad \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ ik & -ik \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a'_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ K & -K \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_2 \\ a'_2 \end{pmatrix}$$

Conditions de raccordement en  $x=L$  :

$$\begin{aligned} a_2 e^{KL} + a'_2 e^{-KL} &= a_3 e^{ikL} \\ K a_2 e^{KL} - K a'_2 e^{-KL} &= ik a_3 e^{ikL} \end{aligned}$$

$$\text{ou} \quad \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ K & -K \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{KL} & 0 \\ 0 & e^{-KL} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_2 \\ a'_2 \end{pmatrix} = a_3 e^{ikL} \begin{pmatrix} 1 \\ ik \end{pmatrix}$$

Par la suite, nous allons étudier les coefficients de transmission et de réflexion :

$$T = \frac{j_3}{j_1} = \frac{|a_3|^2}{|a_1|^2} \quad \text{et} \quad R = \frac{j'_1}{j_1} = \frac{|a'_1|^2}{|a_1|^2} \Rightarrow \text{il faut exprimer } a_1 \text{ et } a'_1 \text{ en fonction de } a_3$$

$$\text{donc : } \begin{pmatrix} a_1 \\ a'_1 \end{pmatrix} = \frac{a_3 e^{ikL}}{2ikK} \begin{pmatrix} ik(-K+ik)e^{-KL} + (K+ik)e^{KL} \\ -K(K+ik)e^{-KL} + (K-ik)e^{KL} \end{pmatrix}$$

et

$$\text{ou } \begin{pmatrix} a_2 \\ a'_2 \end{pmatrix} = \frac{a_3 e^{ikL}}{2ikK} \begin{pmatrix} (k^2 - K^2) \cosh(KL) + (k^2 + K^2) \sinh(KL) \\ (K^2 + k^2) \sinh(KL) + ik(K^2 - k^2) \cosh(KL) \end{pmatrix}$$

# Coefficients de Transmission et de Réflexion

Quelle est la question ? Dans le cas des états de diffusion, il n'y a pas de barrière ?  
Calculer les coefficients de transmission et de réflexion ? quantification de l'énergie.

Transmission : rapport entre courant initial et courant pour  $x > L$

$$T = \frac{j_3}{j_1} = \frac{|a_3|^2}{|a_1|^2} = \frac{1}{\cosh^2(KL) + \frac{(K^2 - k^2)^2}{4k^2 K^2} \sinh^2(KL)}$$

On peut aisément montrer que le coefficient de réflexion vaut :

$$R = \frac{j'_1}{j_1} = \frac{|a'_1|^2}{|a_1|^2} = 1 - T \quad (\text{conservation du nombre de particules})$$

$T \neq 0$  est typiquement quantique pour  $E < V_0$  : Effet Tunnel

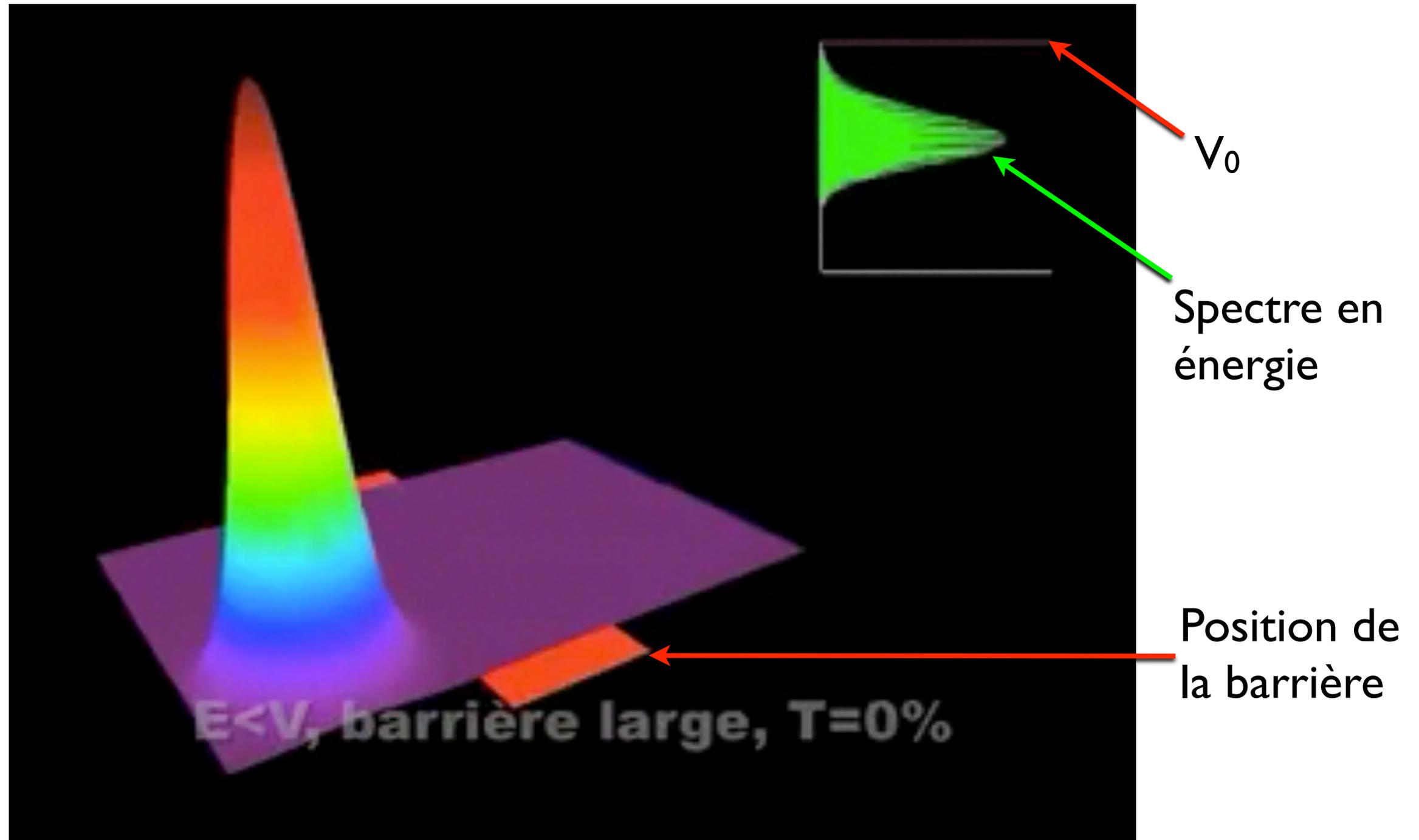
Comment varie  $T$  avec les différents paramètres du problème ?

$$\text{NB : } T = \frac{1}{1 + \frac{(K^2 + k^2)^2}{4k^2 K^2} \sinh^2(KL)} = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \sinh^2(KL)}$$

Barrière large et/ou haute :  $T(KL \gg 1) \simeq \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-2KL} \rightarrow 0$

Barrière fine et/ou faible :  $T(KL \rightarrow 0) \rightarrow 1$       Longueur de pénétration :  $1/(2K)$

# Propagation d'un quanton ( $E < V_0$ )

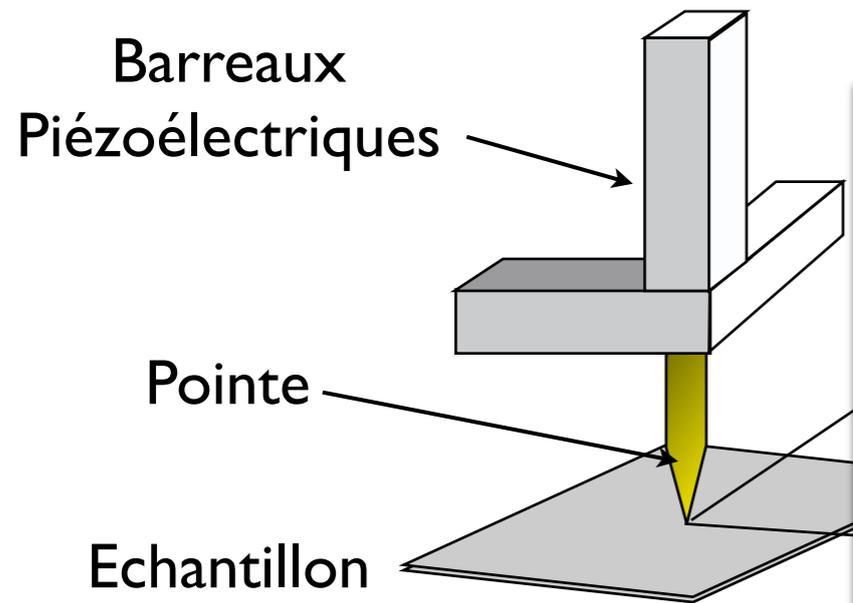


Barrière large :  $L \gg \frac{1}{2K}$

Barrière fine :  $L \ll \frac{1}{2K}$

# A parte : Microscope à Effet Tunnel

Structure d'un microscope à effet tunnel :

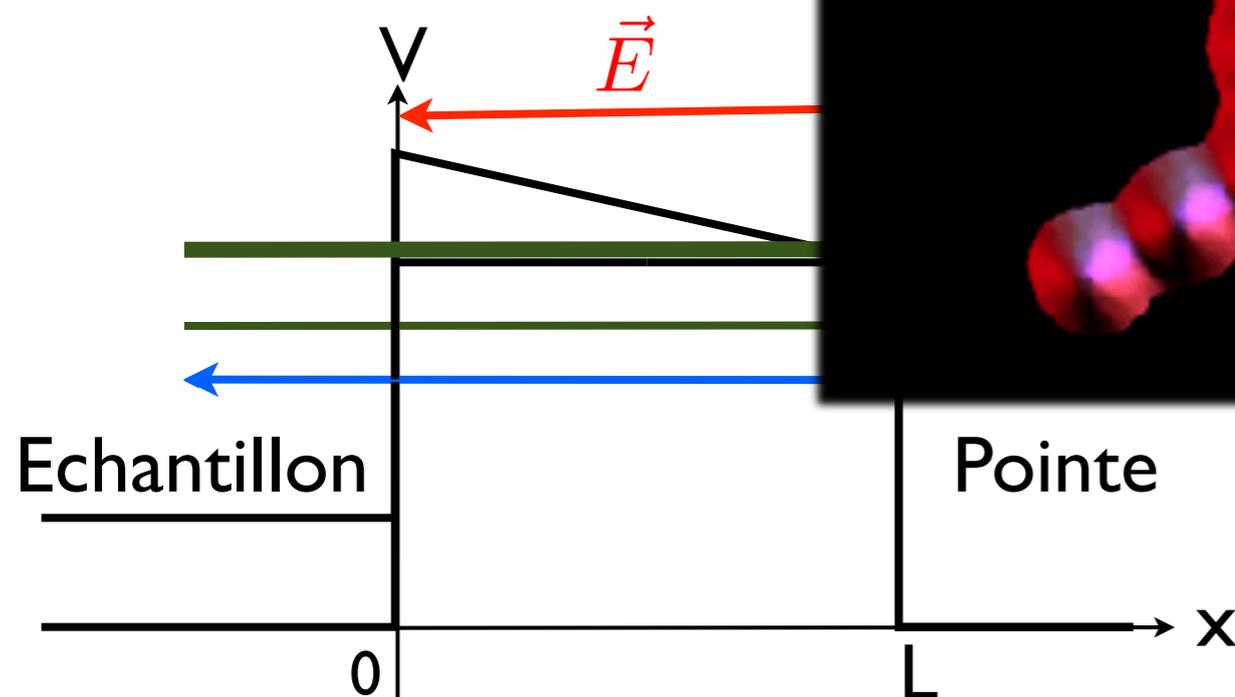
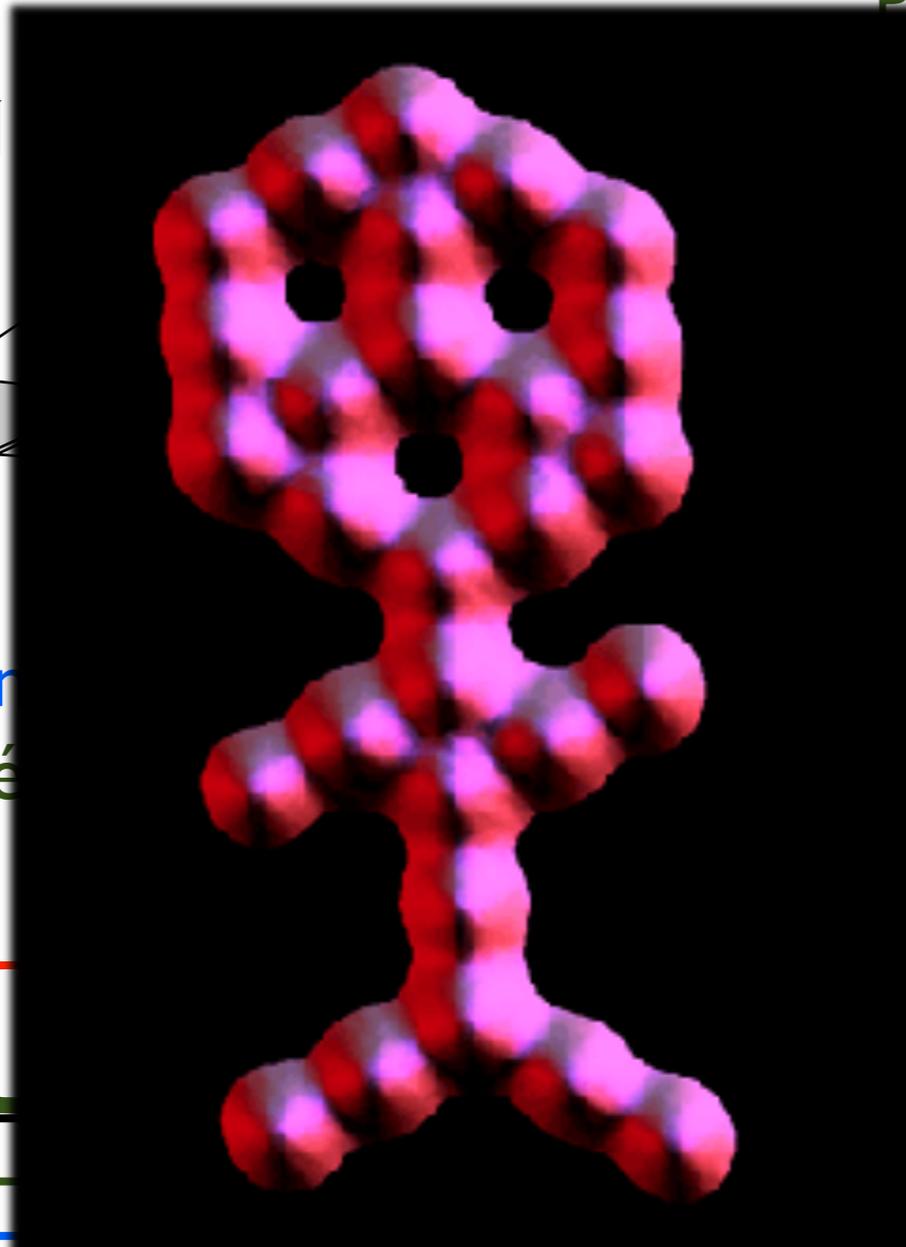


Piézoélectrique :

Contrôle de la position par la tension appliquée (déformation du matériau en fonction de la tension)

Principe de fonctionnement

Potentiel perçu par les électrons



et l'absence de ponts moléculaires  
à l'échelle nanométrique dans  
ces conditions

$$P_{E \rightarrow P} \gg P_{P \rightarrow E}$$

apparition d'un courant

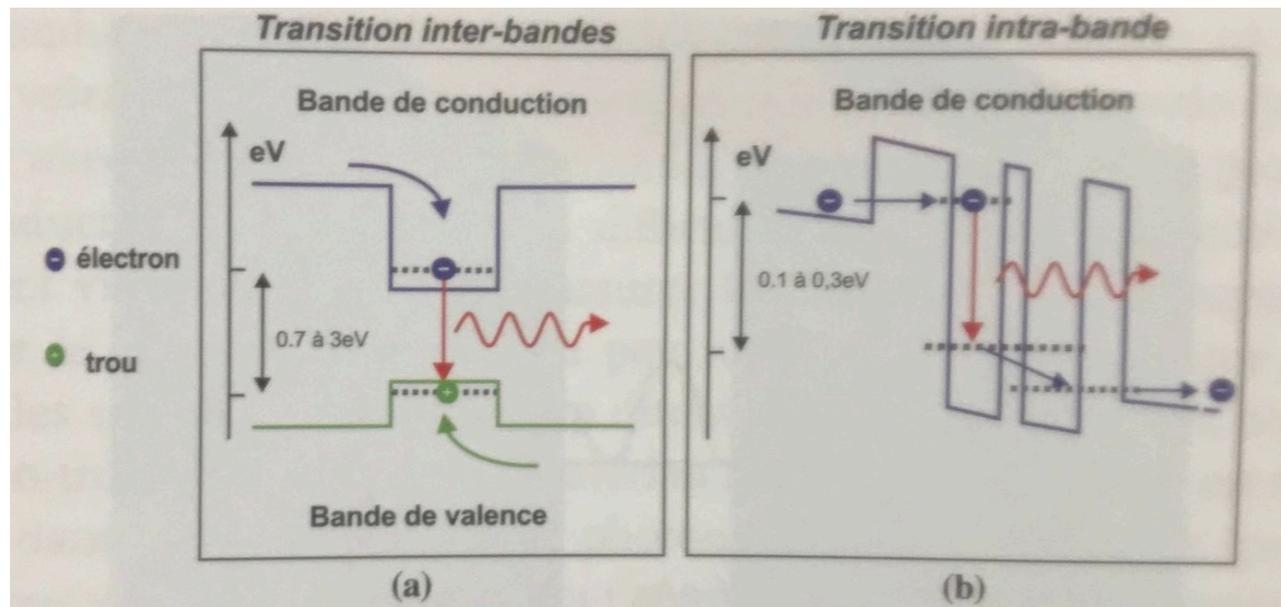
Asservissement de ce courant par les piézoélectriques pour déduire la hauteur de la surface.

# Séance IV

## Travaux Dirigés

Guillaume BATIGNE &  
Gines MARTINEZ  
Chercheurs Subatech

# Hétérostructures et LED



Le monde Quantique  
Michel Le Bellac  
EDP Sciences

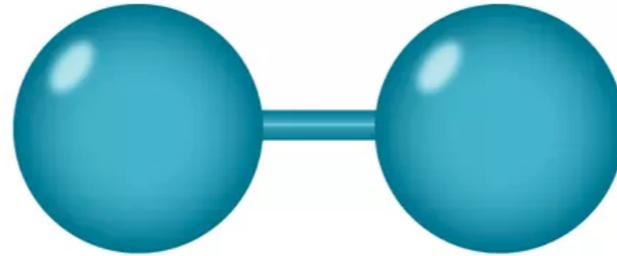
Les dépôts de couche mono-atomiques successives sur un substrat, permet la fabrication en laboratoire de structure de quelques dizaine de couches atomiques (comme arsénure de gallium) prise en sandwich entre deux tranches de semi-conducteurs.

La couche GaAs se comporte comme un puit quantique que nous pouvons considérer comme un puit carrée, et où les électrons vont se trouver dans des états quantiques avec de niveau d'énergie discrets, et la transition entre eux génère des photons avec une longueur d'onde, qu'aujourd'hui peut être ajusté à la demande.

Pour une profondeur du puit de 1 eV dans le GaAs et une épaisseur de 10 nm, combien d'états quantiques sont possibles et quelle est les longueurs d'onde des photons émis?

# Vibration d'une molécule diatomique

A particle consisting  
of two atoms



diatomic molecule

La constante  $k$  de potentiel harmonique autour de la position d'équilibre d'une molécule diatomique est de  $1000 \text{ J/m}^2$

Quelle est l'énergie du niveau fondamental?

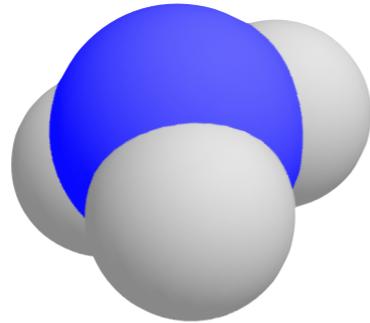
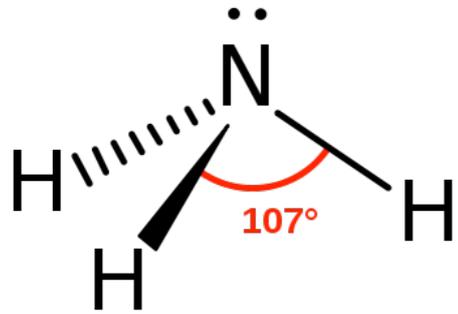
A quelle température l'état de vibration de la molécule se trouve dans l'état fondamental?

Quel est la longueur du photon émis par la décroissance entre l'états de vibration  $|1\rangle \rightarrow |0\rangle$  ?

# Chapitre III+IV : Exercice

## De la molécule d'ammoniac à la structure en bandes

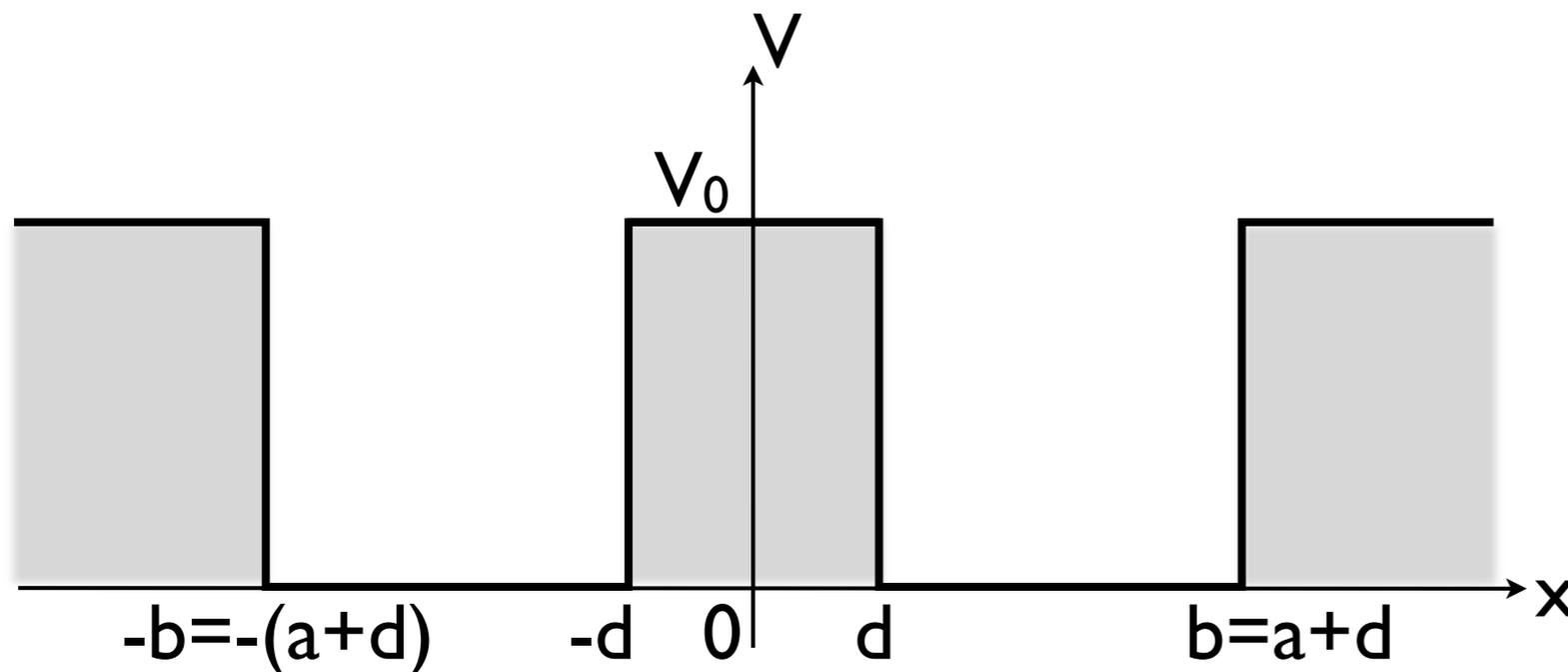
Ammoniac :  $\text{NH}_3$



**Particularité** : l'atome d'azote peut se trouver d'un côté ou de l'autre du plan défini par les atomes d'hydrogène.

Potentiel perçu par l'atome d'azote :

En première approximation : *Double Puits Carré Unidimensionnel*



$a$  : largeur des puits

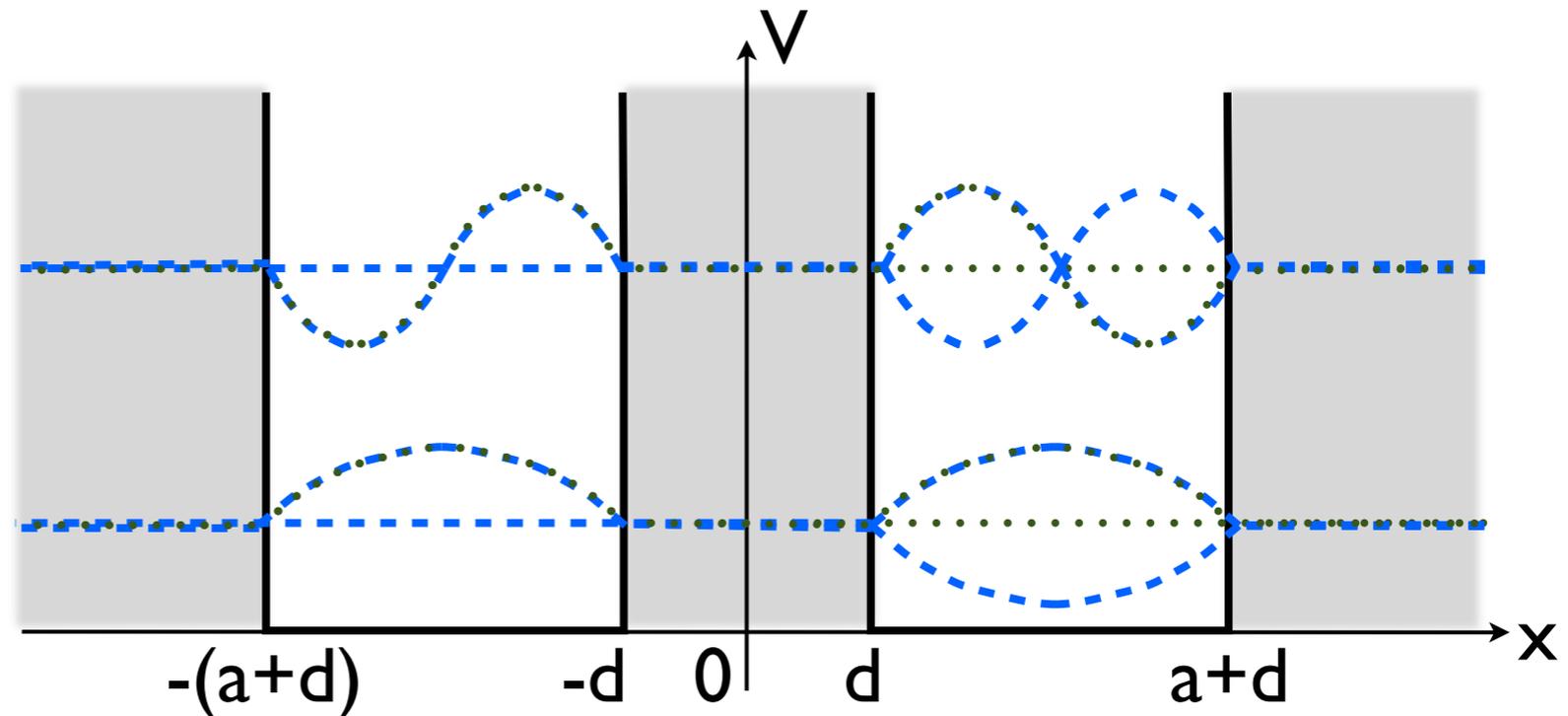
$2d$  : distance entre puits

$V_0$  : hauteur des puits

Le potentiel doit être symétrique par rapport au plan d'H ( $x=0$ )

# Exercice : Cas $V_0 = +\infty$

Forme du potentiel :  
Juxtaposition de  
2 puits infinis



Fonctions d'ondes propres de l'Hamiltonien du système :

La particule peut se trouver dans l'un des deux puits (gauche ou droit).

⇒ Une base possible est :  $\{ |\psi_{E_i,g}\rangle, |\psi_{E_i,d}\rangle \}$  (F-O du puits simple)

Trouver une autre base qui respecte la symétrie du problème :

$|\psi_{E_i,g}\rangle$  et  $|\psi_{E_i,d}\rangle$  ne sont pas états propres de l'opérateur parité :

En revanche, la base  $\{ |\psi_{E_i,s}\rangle, |\psi_{E_i,a}\rangle \}$  l'est avec :

$$\hat{P}|\psi(x)\rangle = |\psi(-x)\rangle$$

$$|\psi_{E_i,s/a}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_{E_i,g}\rangle \pm |\psi_{E_i,d}\rangle)$$

Les états d'énergie sont dégénérés d'ordre 2 :  $E_i^g = E_i^d$  et  $E_i^s = E_i^a$

# Exercice : Cas $V_0 = +\infty$ (suite)

Pourquoi la distance entre les deux puits n'intervient pas ?

Parce que les fonctions d'onde sont rigoureusement nulles pour  $-d < x < d$   
Pas de fonction d'onde de type évanescente.

Quelle est la probabilité de mesurer une particule dans l'un des deux puits ?

Fonction d'onde la plus générale :  $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_{E_i,g}\rangle + e^{i\theta} |\psi_{E_i,d}\rangle)$   
car aucune position n'est privilégiée d'où :  $P_{g,d} = |\langle \psi_{g,d} | \psi \rangle|^2 = 1/2$

Une fois cette mesure faite, que donne une mesure ultérieure ? Expliquer.

D'après le 5ème postulat, la fonction d'onde est réduite après la mesure :

$$|\psi\rangle \rightarrow |\psi_g\rangle \text{ ou } |\psi_d\rangle$$

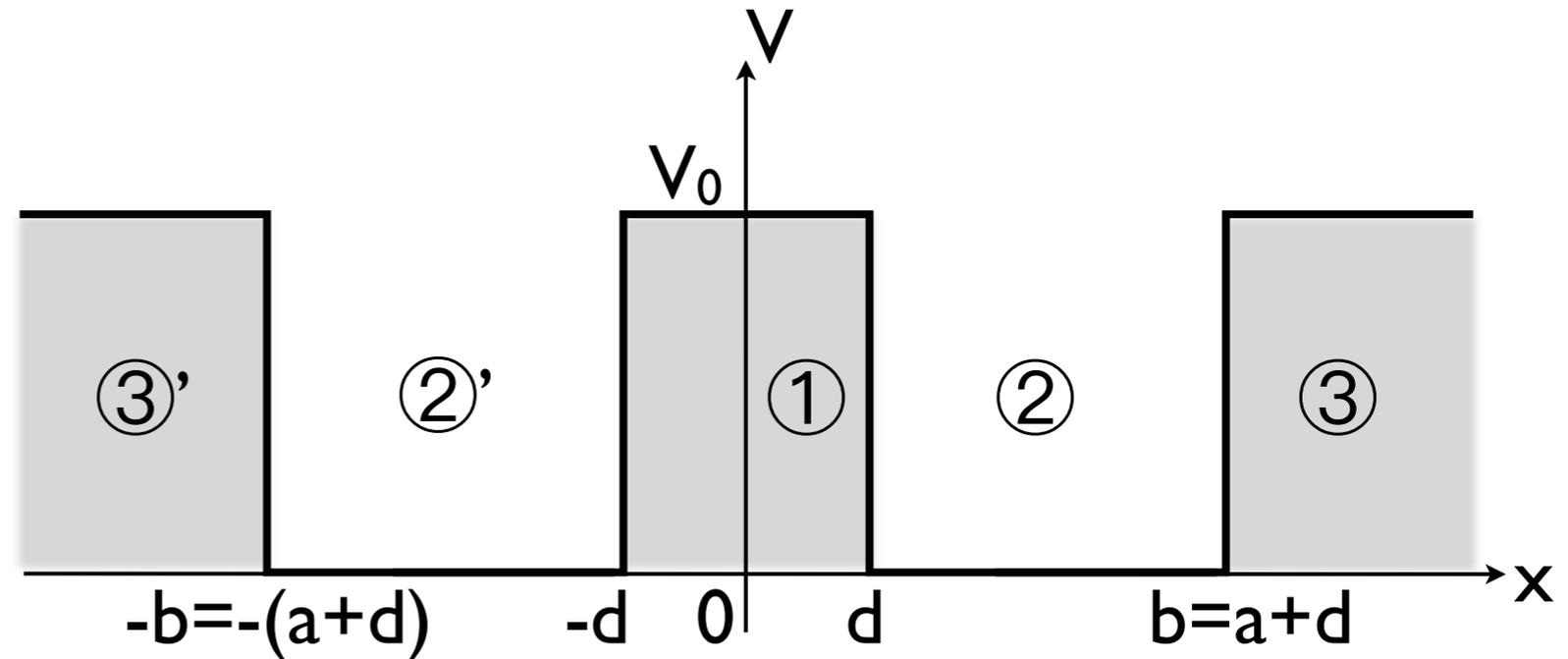
⇒ Une fois la particule mesurée dans un puits, elle y reste.

Raison : la fonction d'onde est nulle en dehors du puits  
car le potentiel entre les 2 puits est infini donc  
aucun effet tunnel ne peut se produire.

# Puits de Potentiel finis

Trouver les états propres de l'Hamiltonien en prenant en compte la symétrie du système :

F-O symétriques ou anti-symétriques



Comme nous l'avons déjà vu dans les cas précédents :

$$\begin{aligned} \varphi_{E,1}(x) &= a_1 e^{Kx} + a'_1 e^{-Kx} \\ \varphi_{E,2}(x) &= a_2 e^{ikx} + a'_2 e^{-ikx} \\ \varphi_{E,3}(x) &= a'_3 e^{-Kx} \end{aligned} \quad \text{avec}$$

$$\begin{aligned} k &= \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \\ K &= \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \end{aligned}$$

Suivant la parité de la fonction d'onde, nous pouvons écrire :

$$\begin{aligned} \varphi_{E,1}^s(x) &= a_s \cosh(Kx) & \varphi_{E,1}^a(x) &= a_a \sinh(Kx) \\ \varphi_{E,2}^s(x) &= a_2^s e^{ikx} + a_2'^s e^{-ikx} & \varphi_{E,2}^a(x) &= a_2^a e^{ikx} + a_2'^a e^{-ikx} \\ \varphi_{E,3}^s(x) &= a_3'^s e^{-Kx} & \varphi_{E,3}^a(x) &= a_3'^a e^{-Kx} \end{aligned}$$

avec évidemment :  $\varphi_{E,i}^s(-x) = \varphi_{E,i}^s(x)$  et  $\varphi_{E,i}^a(-x) = -\varphi_{E,i}^a(x)$

# Puits de Potentiel finis : Quantification (1/3)

Dans le cas des fonctions d'onde symétriques, trouvez la relation de quantification

Conditions de raccordement en  $x=d$  :

$$a_s \cosh(Kd) = a_2^s e^{ikd} + a_2'^s e^{-ikd}$$

$$K a_s \sinh(Kd) = ik (a_2^s e^{ikd} - a_2'^s e^{-ikd})$$

$$\text{ou } a_s \begin{pmatrix} \cosh(Kd) \\ K \sinh(Kd) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ ik & -ik \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ikd} & 0 \\ 0 & e^{-ikd} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_2^s \\ a_2'^s \end{pmatrix}$$

Conditions de raccordement en  $x=b$  :

$$a_2^s e^{ikb} + a_2'^s e^{-ikb} = a_3^s e^{-Kb}$$

$$ik (a_2^s e^{ikb} - a_2'^s e^{-ikb}) = -K a_3^s e^{-Kb}$$

$$\text{ou } \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ ik & -ik \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ikb} & 0 \\ 0 & e^{-ikb} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_2^s \\ a_2'^s \end{pmatrix} = a_3^s e^{-Kb} \begin{pmatrix} 1 \\ -K \end{pmatrix}$$

Nous en déduisons que :  $a_s \begin{pmatrix} \cosh(Kd) \\ K \sinh(Kd) \end{pmatrix} = a_3^s e^{-Kb} \begin{pmatrix} \cos(ka) + \frac{K}{k} \sin(ka) \\ k \sin(ka) - K \cos(ka) \end{pmatrix}$

Donc la relation de quantification pour les états pairs est :

$$\frac{K}{k} \tanh(Kd) = \frac{k \tan(ka) - K}{k + K \tan(ka)}$$

# Puits de Potentiel finis : Quantification (2/3)

Faire de même pour les fonctions d'onde anti-symétriques :

Conditions de raccordement en  $x=d$  :

$$a_a \sinh(Kd) = a_2^a e^{ikd} + a_2'^a e^{-ikd}$$

$$K a_a \cosh(Kd) = ik (a_2^a e^{ikd} - a_2'^a e^{-ikd})$$

$$\text{ou } a_a \begin{pmatrix} \sinh(Kd) \\ K \cosh(Kd) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ ik & -ik \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ikd} & 0 \\ 0 & e^{-ikd} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_2^a \\ a_2'^a \end{pmatrix}$$

⇒ il suffit d'invertir  $\cosh$  et  $\sinh$  d'où la relation de quantification :

$$\frac{k}{K} \tanh(Kd) = \frac{k + K \tan(ka)}{k \tan(ka) - K}$$

Étudiez le cas où  $Kd=0$  :

Les relations de quantification deviennent :

$$\begin{aligned} k \tan(ka) &= K \\ K \tan(ka) &= -k \end{aligned} \Rightarrow \text{Celles d'un puits carré de largeur } 2a$$

Normal car dans ce cas, la barrière de potentiel centrale devient transparente (cf. Effet Tunnel). Donc,  $Kd=0$  équivaut à éliminer du problème la zone  $-d < x < d$

# Puits de Potentiel finis : Quantification (3/3)

Etudiez le cas où  $Kd=+\infty$  :

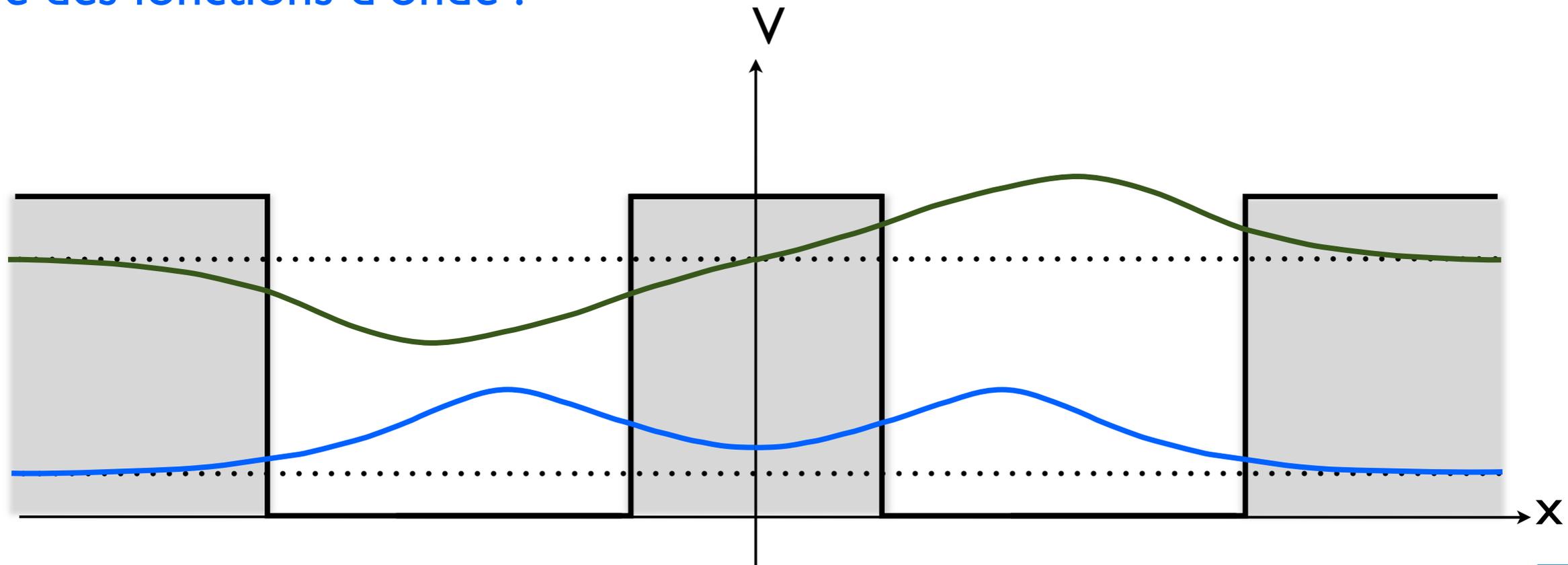
Les relations de quantification deviennent toutes les deux :

$$\tan(ka) = \frac{2kK}{k^2 - K^2} = \frac{2 \tan(ka/2)}{1 - \tan^2(ka/2)} \quad \Rightarrow \quad \text{2 relations de quantification d'un puits de largeur } a.$$

$\Rightarrow$  Les niveaux d'énergie ont un degré de dégénérescence de 2, c'est-à-dire équivalent au double puits infini.

Normal car  $Kd=+\infty$  signifie que la barrière de potentiel centrale est infranchissable (longueur de pénétration  $\ll$  distance entre puits).

Forme des fonctions d'onde :

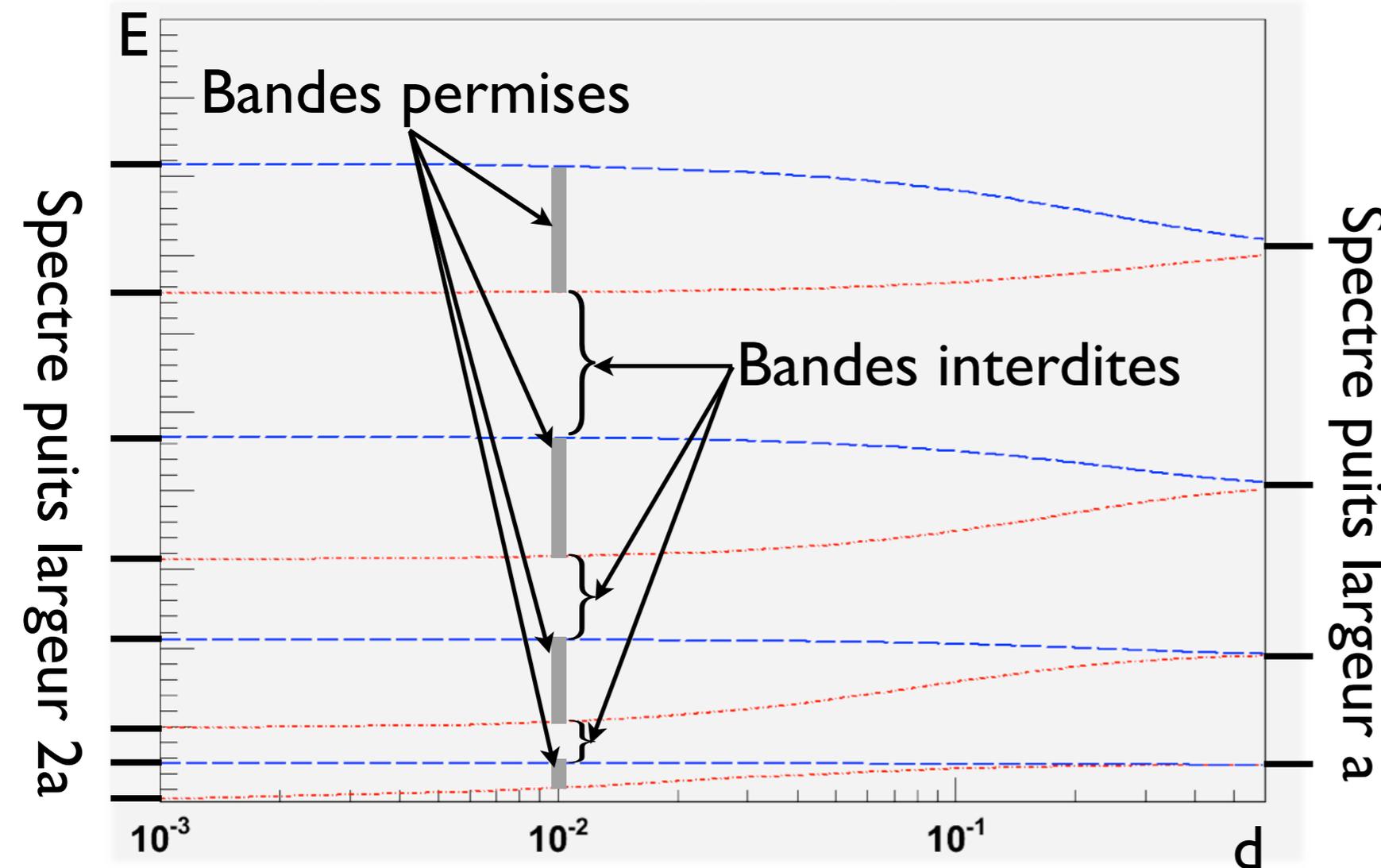


# Spectre en énergie

La résolution des relations de quantification donne les solutions suivantes :

Parité positive (F-O symétriques)

Parité négative (F-O anti-symétriques)



Les états symétriques sont plus liants que les états anti-symétriques.

Le rapprochement des puits lève la dégénérescence ( $2 \rightarrow 1$ ).

Spectre en énergie des électrons dans un cristal :  $2 \rightarrow \mathcal{N}_a$  puits

Les niveaux discrets sont tellement rapprochés qu'ils sont considérés comme continus.

Apparition d'une structure en bandes permises et interdites

⇒ métaux, isolants et semi-conducteurs.

# Evolution temporelle

A  $t=0$ , l'atome d'azote est mesuré dans le puits de gauche. Quel sera le résultat de la mesure de sa position pour  $t>0$  ?

Indication :  $\Delta E = E_a - E_s \simeq 0,1 \text{ meV} \ll k_B T \simeq 25 \text{ meV}$

Les états propres de l'Hamiltonien sont  $|\psi_{E_s}\rangle$  et  $|\psi_{E_a}\rangle$ . Or les états propres de la mesure de la position sont  $|\psi_g\rangle$  et  $|\psi_d\rangle$ .

D'après l'indication et le cas du double puits infini, nous pouvons écrire :

$$|\psi(t=0)\rangle = |\psi_g\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_{E_s}\rangle + |\psi_{E_a}\rangle)$$

L'équation de Schrödinger donne :

$$i\hbar \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} = \frac{i\hbar}{\sqrt{2}} \left( \frac{\partial A_s(t)}{\partial t} e^{-iE_s t/\hbar} |\psi_{E_s}\rangle + \frac{\partial A_a(t)}{\partial t} e^{iE_a t/\hbar} |\psi_{E_a}\rangle \right)$$

Dans la base des états propres de position :

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i(E_s+E_a)t/(2\hbar)} \frac{1}{\sqrt{2}} (A_s(t) |\psi_{E_s}\rangle + A_a(t) |\psi_{E_a}\rangle)$$

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i(E_s+E_a)t/(2\hbar)} [\cos(\omega t) |\psi_g\rangle + i \sin(\omega t) |\psi_d\rangle] \text{ avec } \omega = \frac{\Delta E}{2\hbar}$$

$$\text{d'où } P_g(t) = |\langle \psi_g | \psi(t) \rangle|^2 = \cos^2(\omega t)$$

⇒ l'atome d'azote oscille d'un côté à l'autre du plan des 3 H avec une fréquence  $\nu \simeq 24 \text{ GHz}$