

# Mécanique quantique

## TD 4: Particule dans un potentiel constant par morceaux

### 1 Puits quantiques

On s'intéresse au cas d'une particule d'énergie  $E$  piégée dans un puits de potentiel de hauteur  $V_0 > E$ . Ce puits est décrit par un potentiel constant par morceaux :

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x \in [0, L]; \\ V_0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (1)$$

1. Donner des exemples physiques de réalisations d'un puits quantique (non nécessairement carré).
2. Écrire l'équation aux valeurs propres vérifiée par une fonction propre  $\varphi(x)$  dans chaque région de l'espace.
3. Résoudre ces équations. On posera

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad \text{et} \quad K^2 = 2m(V_0 - E)/\hbar^2. \quad (2)$$

4. Quelles conditions vérifient la fonction d'onde aux points de raccordement  $x = -L/2$  et  $x = L/2$ ?<sup>1</sup> En déduire quatre équations sur les coefficients indéterminés de  $\psi$ .
5. Dans cette question, on se place dans le cas d'un puits infini ( $V_0 = \infty$ ). Donner l'expression de la fonction d'onde dans ce cas. Quelles sont les énergies  $E_n$  accessibles à la particule?

Résoudre le cas du puits fini peut être fastidieux, mais une propriété de symétrie du hamiltonien justifie qu'on puisse chercher les fonctions comme symétriques ou antisymétriques.

6. On s'intéresse aux états pairs. Montrer qu'un tel état d'énergie  $E$  vérifie

$$k \tan\left(\frac{kL}{2}\right) = K. \quad (3)$$

7. On pose  $u = kL/2$  et  $W = \frac{1}{2}\sqrt{K^2 + k^2}$ . Vérifier que  $W$  est indépendant de  $E$ . Trouver une équation implicite vérifiée par  $u$ .
8. Résoudre cette équation graphiquement. On superposera le résultat du puits infini.
9. Comparer les énergies dans les deux situations, et justifier qualitativement ce résultat grâce à l'inégalité d'Heisenberg.

### 2 Double puits quantique asymétrique

On s'intéresse maintenant au couplage entre deux puits carrés, mais qui peuvent être de largeur différentes (Fig. 1). On prendra dans la suite  $L_d = \frac{3}{2}L_g$ .

10. On se place d'abord dans le cas  $V_0 = \infty$ . Tracer le diagramme énergétique avec les six premiers niveaux du système. On notera  $\alpha = \hbar^2\pi^2/8mL_g^2$ . Préciser pour chaque niveau le puits dans lequel l'état est localisé.
  11. Quel champ électrique devrait-on appliquer sur le système pour que l'état fondamental soit dégénéré? On prendra  $L_g = 10\text{ nm}$  et  $\Delta = 3\text{ nm}$ .
  12. Décrire l'évolution du diagramme énergétique lorsqu'on passe d'un  $V_0$  infini à une valeur finie.
  13. La situation serait-elle la même si les deux puits étaient identiques? Dans le cas de puits identiques avec un couplage  $W$  des états fondamentaux, calculer la dynamique d'un état occupé par un électron, initialement dans le puits de gauche  $|\phi_1\rangle$ .
1. On pourrait justifier mathématiquement la réponse en intégrant l'équation aux valeurs propres vérifiée par  $\psi$  sur un petit intervalle centré sur une discontinuité de  $V(x)$ , avec l'hypothèse que  $\psi$  est  $C^2$  partout où  $V(x)$  est constant et que  $\psi$  est globalement bornée.

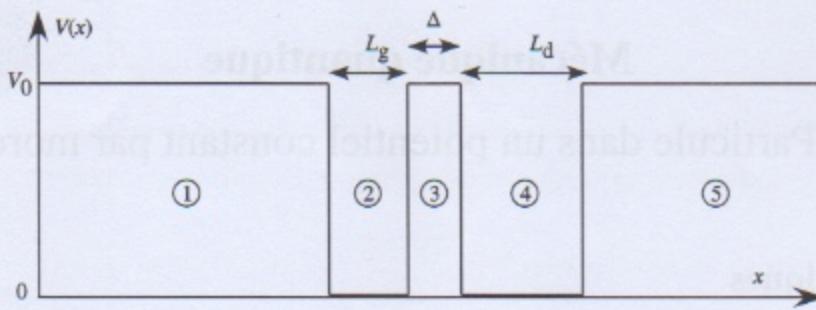


FIGURE 1 – Potentiel créé par un double puits quantique asymétrique.

### 3 Marche de potentiel

On revient au cas plus simple où le potentiel  $V(x)$  est simplement une marche d'escalier (fonction de Heaviside), telle que

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < 0 \\ V_0 & \text{si } x > 0 \end{cases} \quad (4)$$

#### 3.1 États stationnaires

14. Donner la forme générale des solutions  $\varphi(x)$  en séparant les cas  $E > V_0$  et  $E < V_0$ . On introduira des notations équivalentes à l'exercice précédent (en particulier  $k$ ,  $K$  et  $K_0^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}$ ).

##### 3.1.1 Cas $E > V_0$

15. Calculer les coefficients de réflexion et de transmission en amplitude  $r$  et  $t$ .  
 16. Rappeler la définition des coefficients en intensité, et les calculer, toujours dans le cas  $E > V_0$ . Donner un équivalent optique de cette situation.

##### 3.1.2 Cas $E < V_0$

17. On se place dans le cas  $E < V_0$ . Calculer à nouveau les coefficients de réflexion en amplitude et en intensité.  
 18. Montrer que le rapport des amplitudes des ondes incidente  $A_i(k)$  et réfléchie  $A_r(k)$  au vecteur d'onde  $k$  peut s'écrire

$$\frac{A_r(k)}{A_i(k)} = e^{-2i\theta(k)} \quad \text{avec} \quad \tan \theta(k) = \sqrt{\frac{K_0^2}{k^2} - 1}. \quad (5)$$

#### 3.2 Bonus : Étude dynamique d'un paquet d'onde

Les états stationnaires, bien que fonctions propres du hamiltonien, ne sont pas des états physiques, puisqu'ils ne sont pas normalisables. Une particule est représentée par un paquet d'onde, superposition linéaire de tels états stationnaires centrée sur un vecteur d'onde  $k_0$  incident, et d'élargissement  $\Delta k \ll k_0$ . Une particule incidente arrive sur la marche de potentiel de la gauche vers la droite.

##### 3.2.1 Cas $k_0 + \Delta k \leq K_0$

Dans cette situation, toutes les OPPH composant le paquet d'onde sont dans le cas  $E < V_0$ .

19. À partir des résultats de la partie précédente, écrire la fonction d'onde du paquet d'onde  $\psi(x, 0)$  puis  $\psi(x, t)$  pour tout  $x < 0$  comme la somme de deux intégrales sur  $k$ .  
 20. Calculer la vitesse de groupe des deux paquets d'ondes.  
 21. Calculer la position de chaque paquet d'onde en fonction du temps. Que remarquez-vous ? Proposer une explication physique de ce résultat.

### 3.2.2 Cas $k_0 - \Delta k \geq K_0$

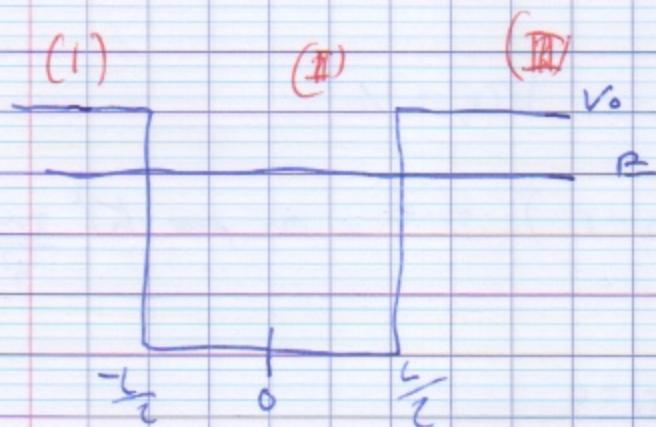
Dans cette situation, toutes les OPPH composant le paquet d'onde vérifient  $E > V_0$ .

22. Écrire la fonction d'onde  $\psi(x, t)$  comme une somme de trois paquets d'ondes.
23. Calculer leur position moyenne en fonction du temps. Comparer votre résultat à la sous-partie précédente.
24. Un développement limité au premier ordre de  $\sqrt{k^2 - K_0^2}$  permet de comparer le paquet d'onde incident au paquet d'onde transmis (on posera  $q_0 = \sqrt{k_0^2 - K_0^2}$ ). Montrer que le paquet d'onde transmis est plus condensé dans l'espace réel, et que son amplitude est plus grande que celle du paquet d'onde incident.

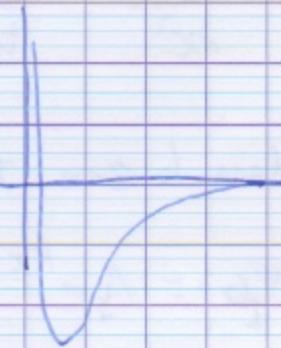
TD 4b

TD 4b : particule dans un potentiel constant par morceaux

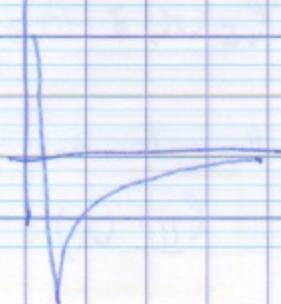
1) Particule quantique (Exercice 1)

1) particule d'énergie  $E$  piégé dans un  $\mu\text{m}^2$  de largeur  $V_0 > E$ 

exemples physiques de réactions : un électron sortant d'un proton ressemble à un puit.



- Une interface de semi-conducteur. (c'est l'interface on a une diff de potentiel chimique.)



- part carée pour 2 semi-conducteurs avec des segs différents.

2) Équation de Schrödinger stationnaire:

$\Psi(x, t) = \psi(x) \cdot \chi(t)$  ceci est vrai pour les états stationnaires.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

Par I et III  $V(x) = V_0$

$$\Rightarrow -\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} = 0 \quad \text{on pose } k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)$$

Par II  $V(x) = 0$

$$-\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - \frac{2mE}{\hbar^2} = 0 \quad \text{on pose } k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

3) dans la zone I:  $k^2 > 0$

$\psi_I(x) = A_I e^{kx} + B_I e^{-kx}$  or dans la zone I on peut aller à  $x = -\infty$   
donc  $\psi_I(-\infty)$  existe dans gte  $\psi_I$  dispe.  
 $\Rightarrow B_I = 0$

$$\psi_I(x) \approx A_I e^{kx}$$

Dans la zone III, si on suit le raisonnement,

$$\psi_{III}(x) = B_{III} e^{-kx}$$

2

Tonqyb

- dans la zone II  $k^2 > 0 \Rightarrow$  solutions complexes!

$$\psi(x) = A_{\text{II}} e^{ikx} + B_{\text{II}} e^{-ikx}$$

4) en  $x = -\frac{L}{2}$ :

$$A_{\text{I}} e^{-k\frac{L}{2}} = A_{\text{II}} e^{-ik\frac{L}{2}} + B_{\text{II}} e^{+ik\frac{L}{2}}$$

$$\text{or } \alpha = \frac{L}{2}$$

$$(E) \quad B_{\text{III}} e^{-k\frac{L}{2}} = A_{\text{II}} e^{ik\frac{L}{2}} + B_{\text{II}} e^{-ik\frac{L}{2}}$$

continuité de la dérivée

$$A_{\text{I}} k e^{-\frac{kL}{2}} = i A_{\text{II}} k e^{-ik\frac{L}{2}} - i B_{\text{II}} k e^{+ik\frac{L}{2}}$$

$$-B_{\text{III}} K e^{-\frac{kL}{2}} = i A_{\text{II}} k e^{ik\frac{L}{2}} - i B_{\text{II}} k e^{-ik\frac{L}{2}}$$

5) Si  $V_0 = +\infty$   $\psi_{\text{I}}(x) = \psi_{\text{III}}(x) = 0$

en effet l'énergie potentielle de l'atome est  $\int V(x) |\psi(x)|^2 dx$

- si  $V = +\infty$  nécessairement  $|V(x)|^2 = 0 \Rightarrow \psi(x) = 0$ , si non on aurait une énergie potentielle infinie!

$$\Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \psi_{\text{II}}(-\frac{L}{2}) = 0 \\ \psi_{\text{II}}(\frac{L}{2}) = 0 \end{array} \right. \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} A_{\text{I}} e^{-ik\frac{L}{2}} + B_{\text{II}} e^{ik\frac{L}{2}} = 0 \\ A_{\text{II}} e^{-ik\frac{L}{2}} + B_{\text{III}} e^{ik\frac{L}{2}} = 0 \end{array} \right. \quad (1)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} A_{\text{I}} e^{-ik\frac{L}{2}} + B_{\text{II}} e^{ik\frac{L}{2}} = 0 \\ A_{\text{II}} e^{-ik\frac{L}{2}} + B_{\text{III}} e^{ik\frac{L}{2}} = 0 \end{array} \right. \quad (2)$$

soit on peut (1) - (2)

$$A_2 \left( e^{-ik\frac{L}{2}} - e^{ik\frac{L}{2}} \right) + B_2 \left( e^{ik\frac{L}{2}} - e^{-ik\frac{L}{2}} \right) = 0$$

$$-A_2 \sin\left(\frac{kL}{2}\right) + B_2 \sin\left(\frac{kL}{2}\right) = 0$$

Ceci est  $\rightarrow$  vérifié si :  $B_2 = +A_2$  ou  $\sin\left(\frac{kL}{2}\right) = 0$   $A_2 \neq B_2$   
plus long.  
que la correction, correction.

$$\begin{cases} A_2 = -B_2 e^{ikL} \\ -B_2 e^{i\frac{3}{2}kL} + B_2 e^{-ik\frac{L}{2}} = 0 \end{cases}$$
$$\Rightarrow B_2 e^{ik\frac{L}{2}} \left( e^{-ikL} - e^{ikL} \right) = 0$$

$$\Rightarrow \sin kL = 0$$

$$\Phi(x) = -B_2 \left( e^{ikL} e^{ikx} - e^{-ikx} \right)$$

$$\Phi(x) = -2i B_2 e^{ik\frac{L}{2}} \sin\left(kx + \frac{kL}{2}\right)$$

Calcul des Energies

$$\sin kL = 0 \Leftrightarrow kL = n\pi$$

$$\text{E}) E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Rightarrow E_n = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2m L^2}$$

TDM Q4b

rq: tout les états liés peuvent être représentés sous forme de réelles.

6 On cherche une fonction porte !

$$\Rightarrow \Psi(-x) = \Psi(x)$$

alors:  $A_2 = B_{\text{II}}$  et  $A_{\text{I}} = B_{\text{I}}$

On va faire une résolution graphique.

On a un système  
(à partir d'E))  
avec nos conditions

$$\begin{cases} A_1 \exp(-k\frac{L}{c}) = 2A_2 \cos(k\frac{L}{c}) & (\text{a}) \\ kA_1 \exp(-k\frac{L}{c}) = 2kA_2 \sin(k\frac{L}{c}) & (\text{b}) \end{cases}$$

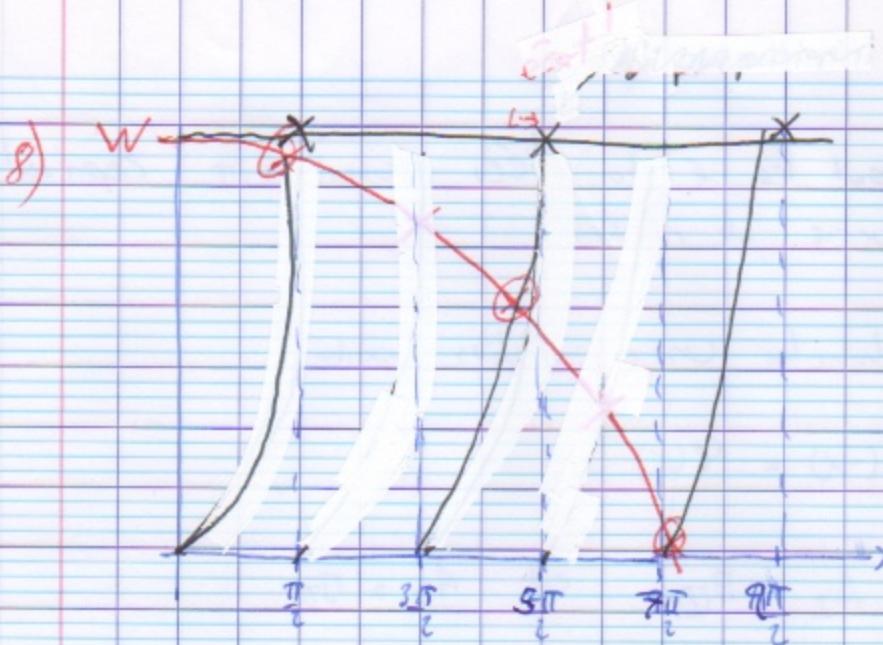
alors  $\frac{(\text{b})}{(\text{a})} \Rightarrow k = h \tan\left(k\frac{L}{c}\right)$  (c)

7) on pose  $W = \frac{\sqrt{k^2 + h^2}}{2} = \frac{\sqrt{z^2 V_0}}{2 \sqrt{t^2}}$  ↳ indépendant de E

$$(\text{c}) \Rightarrow \frac{2}{L} \cdot \mu \tan(\mu) = k \Rightarrow \mu \tan(\mu) = \frac{Lk}{2}$$

$$\text{or } k = \sqrt{\left(\frac{2W}{L}\right)^2 - h^2} \quad \text{alors: } \mu \tan \mu = \sqrt{W^2 - \mu^2}$$

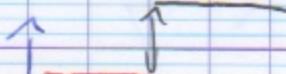
On peut s'orienter pour la résolution graphique.



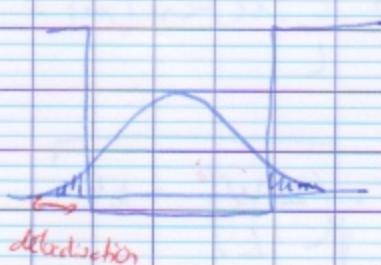
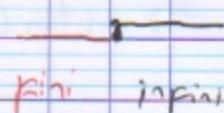
→  $m$  est un  $\rightarrow$  plus  $m$  est grand, plus tôt on croise le point  $X$

$$-\sqrt{W^2 - m^2} \leftarrow \text{eq. d'un cercle!}$$

a) Ecart entre point fini et infini:



cette différence vient de:



On délocalise la particule un peu plus ce qui absorbe l'énergie de rotation!

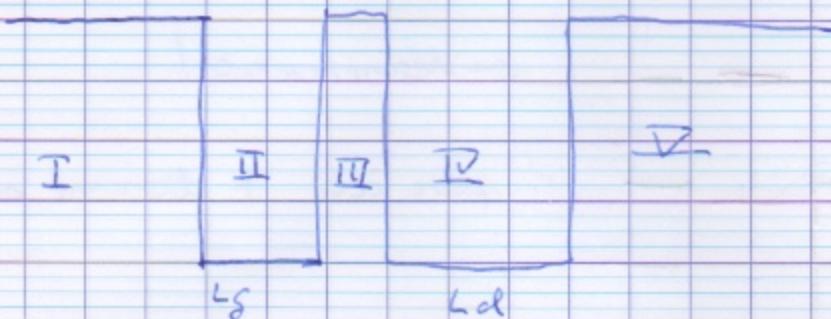
G

4

J

TMO 4b

## Exercice 2 Double puits quantique symétrique



$$L_d = \frac{3}{2} L_g$$

10 on a trouvé que  $E_n = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2mL^2}$

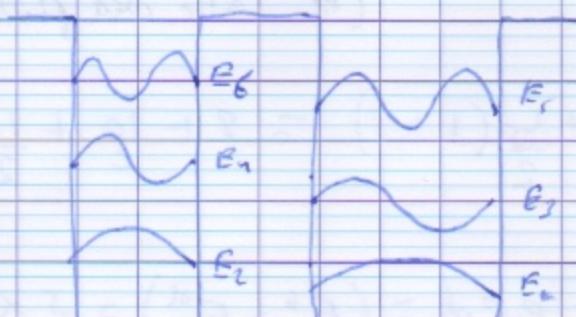
donc  $E_1$  sera sur IV ou  $L_d > L_g$

$E_2$  sera sur II

⋮

$\overline{E} = E_{\text{impair}}$  et  $\overline{E} = E_{\text{pair}}$ .

donc :



$$E_1 = \alpha \left(\frac{3}{2}\right)^2$$

$$E_2 = \alpha$$

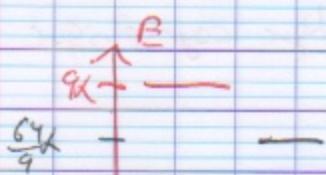
$$E_3 = \frac{16}{9} \alpha$$

$$E_4 = 4\alpha$$

$$E_5 = 4\alpha$$

$$E_6 = 9\alpha$$

11) Correction:



$\frac{q_A}{q_B}$  ~~q\_B~~  $\leftarrow$  déséquivalence!

$\frac{q_A}{q_B}$  ~~q\_B~~  $\leftarrow$  faire ceci + diagramme petit dernière!

$\frac{q_A}{q_B}$   $\leftarrow$

sache droite

1) On veut amener l'effet fondamental gauche et droite au n<sup>o</sup> niveau.

$\Rightarrow$  il faut donner une énergie  $\Delta E = \frac{5}{9} \alpha$

On applique un champ  $E$ :

$$E_p = e \cdot V = e \cdot B \cdot d \quad \text{car } E = -B \cdot d \cdot V! \Rightarrow F \cdot d = B \cdot d \cdot \Delta V$$

distance entre les puits

(ex. centre des puits)

$$d = \Delta + \frac{L_s}{2} (1 + \beta) = 3 + \frac{10}{2} + \frac{15}{2} \approx 15 \text{ mm}$$

$$\text{On veut } eEd = (E_i^g - E_i^d) = \frac{5}{9} \alpha$$

$$E = \frac{5 \cdot h^2 \pi^2}{2 \cdot L_s^2 \cdot q_{ed}} \approx 10^5 \text{ V} \cdot \text{m}^{-1} \approx \text{kV} \cdot \text{cm}^{-1}$$

**S**

TDMQ 4b

C'est un champ qui peut s'appliquer raisonnablement (200 V/mm 1 cm)  
pour tension  
recrochage

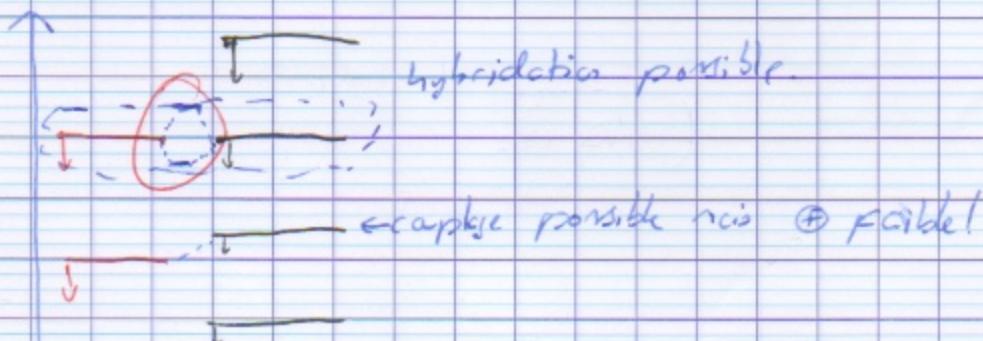
12) On passe à un potentiel fini

Il y a 2 effets qui vont apparaître :

1) Globallement  $E \downarrow$  car la délocalisation des fonctions d'onde peut augmenter car elle peut pénétrer un peu sur le barrièr.

Toutes les énergies diminuent mais pas forcément de la même valeur.

2) Effet tunnel  $\Rightarrow$  capture des 2 parts !



13) Si les 2 puits sont identiques  $\Rightarrow$  coupler sur les deux les murs

On oscille entre les 2 puits.  $\Rightarrow$   $T = \frac{2\pi}{\sqrt{\omega_w - \omega_B}}$