

Équation de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(r, t) + V(r) \cdot \Psi(r, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(r, t)}{\partial t} \quad \Rightarrow \quad \Psi(x, t)$$

Équation de Schrödinger indépendante du temps

$$\frac{d^2 \Phi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) \cdot \Phi(x) = 0$$

équation différentielle du 2nd ordre sans 2nd membre

$$H\Phi(x) = E\Phi(x) \quad H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(x) \quad \Rightarrow \quad \Phi(x)$$

Fonction d'onde

$$\Psi(x, t) = A \cdot \Phi(x) e^{-i\omega t}$$

$$E = h \nu = \hbar \omega$$

$$\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}, \quad \lambda = h/p$$

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

- On a vu précédemment qu'à une particule était associée une onde

➡ **longueur d'onde très petite à l'échelle macroscopique**

- Le caractère **quantique n'apparaît que** lorsque la longueur caractéristique associée au mouvement ($10r$) de la particule est petite ou de l'ordre de grandeur de λ

fentes d'Young de largeur a



$$10a \leq \lambda$$

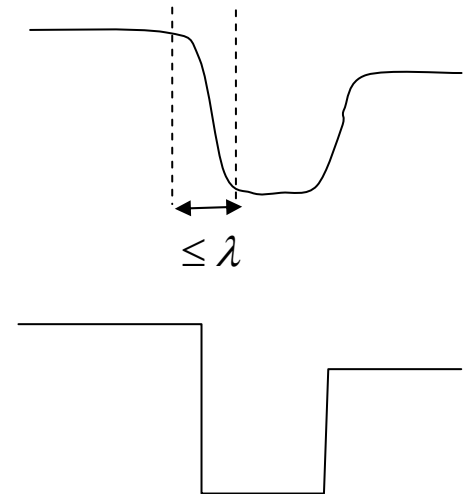
$$pa \leq h \Rightarrow \frac{pa}{h} \leq 1$$

| | m (kg) | v (m.s ⁻¹) | a (m) | $\lambda = h/p$ (m) | pa/h |
|----------------------------------|----------------------|--------------------------|-----------|---------------------|-----------|
| Homme passant une porte | 70 | 1 | 1 | $\sim 10^{-35}$ | 10^{35} |
| Globule rouge dans un capillaire | 10^{-16} | 0,1 | 10^{-4} | $\sim 10^{-16}$ | 10^{12} |
| Electron à travers une fente | $9,1 \cdot 10^{-31}$ | 10^3 | 10^{-6} | $\sim 10^{-6}$ | 1 |

- Pour **des systèmes macroscopiques**, l'approximation classique sera justifiée

Buts du chapitre II

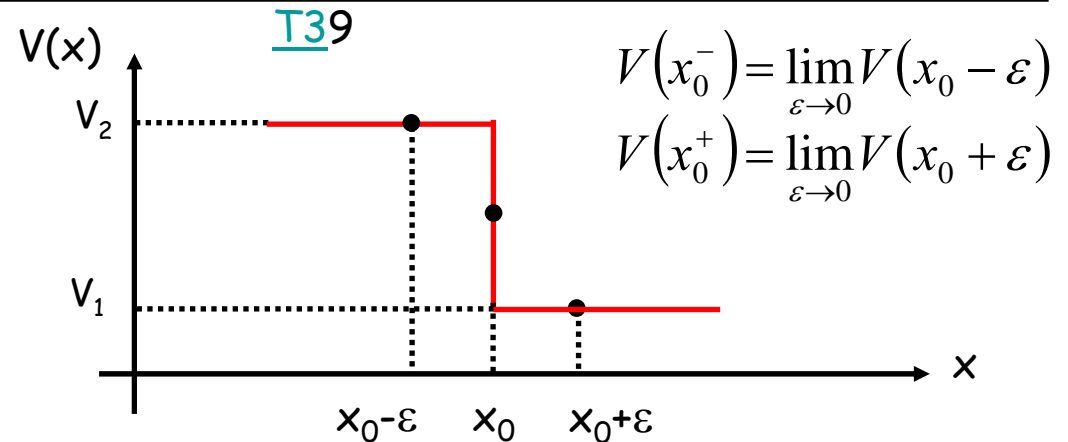
- Problèmes simples où l'environnement de la particule varie à l'échelle de λ
- Particule plongée dans un potentiel indépendant du temps et variable rapidement sur des longueurs comparables à λ



- Exemple typique : électron dans un solide (cf chap VII)

II.2.1. Potentiel discontinu en x_0 - discontinuité finie

On cherche à caractériser le comportement de Ψ au voisinage d'une discontinuité de V



On montre que

$$\frac{d\Phi}{dx}(x_0 + \varepsilon) - \frac{d\Phi}{dx}(x_0 - \varepsilon) \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0 \quad \text{donc} \quad \frac{d\Phi}{dx} \text{ est continue en } x_0$$

$$\Phi(x_0 + \varepsilon) - \Phi(x_0 - \varepsilon) \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0 \quad \text{donc} \quad \Phi \text{ est continue en } x_0$$

A retenir : dans le cas d'une **discontinuité finie** du potentiel V en x_0
la fonction d'onde Φ et sa dérivée Φ' **sont continues en x_0**

- Cas d'une discontinuité infinie du potentiel V au voisinage d'un point: Φ' est discontinue
 Φ reste continue

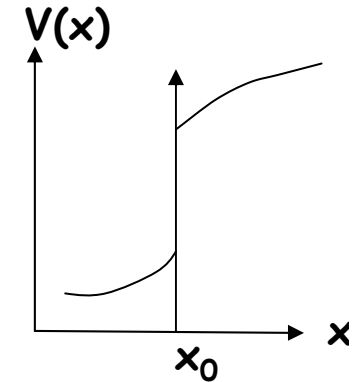
T40

Démonstration (Potentiel discontinu en x_0 mais fini)

- La fonction d'onde Φ doit vérifier $\frac{d^2\Phi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x))\Phi(x) = 0$ elle doit être donc dérivable $\rightarrow \Phi$ continue

- On l'intègre entre $x_0 - \varepsilon$ et $x_0 + \varepsilon$

$$\frac{d\Phi}{dx}(x_0 + \varepsilon) - \frac{d\Phi}{dx}(x_0 - \varepsilon) = \frac{2m}{\hbar^2} \int_{x_0 - \varepsilon}^{x_0 + \varepsilon} (V(x) - E)\Phi(x).dx$$



- Au voisinage de x_0 , le potentiel V et la fonction d'onde Φ **restent bornés** (pour s'assurer que la particule se trouve dans une région finie de l'espace) donc

$$\int_{x_0 - \varepsilon}^{x_0 + \varepsilon} (V(x) - E)\Phi(x).dx \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0$$

$$\frac{d\Phi}{dx}(x_0 + \varepsilon) - \frac{d\Phi}{dx}(x_0 - \varepsilon) \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0 \quad \text{donc} \quad \frac{d\Phi}{dx} \text{ est continue en } x_0$$

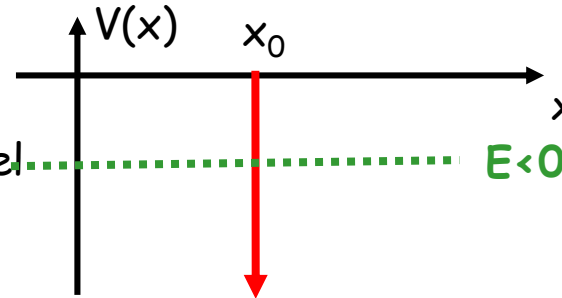
- La fonction d'onde Φ est également continue en x_0 (primitive d'une fonction continue)

T38

II.1.2. Potentiel discontinu en x_0 - discontinuité infinie

- On considère une particule de masse m d'énergie $E < 0$ dans un milieu où le potentiel est tel que $V(x) = -A\delta(x - x_0)$

(Limite d'une barrière ou un puits fini avec une hauteur qui tend vers l_∞ et une largeur qui tend vers 0).



T41



Paul Dirac

On montre que $\frac{d\Phi}{dx}(x_0 + \varepsilon) - \frac{d\Phi}{dx}(x_0 - \varepsilon) = -\frac{2mA}{\hbar^2}\Phi(x_0)$ donc $\frac{d\Phi}{dx}$ est discontinue en x_0

$\Phi(x_0 + \varepsilon) - \Phi(x_0 - \varepsilon) \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0$ donc Φ est continue en x_0

A retenir :

dans le cas d'une **discontinuité infinie** du potentiel V en x_0
seule la fonction d'onde Φ est continue en x_0
 il faut calculer la discontinuité de Φ' au cas par cas

T42

- La fonction d'onde Φ doit vérifier $\frac{d^2\Phi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x))\Phi(x) = 0$
- On intègre entre $x_0 - \varepsilon$ et $x_0 + \varepsilon$

$$\frac{d\Phi}{dx}(x_0 + \varepsilon) - \frac{d\Phi}{dx}(x_0 - \varepsilon) = \frac{2m}{\hbar^2} \left[\int_{x_0 - \varepsilon}^{x_0 + \varepsilon} -A\delta(x - x_0).\Phi(x).dx - \int_{x_0 - \varepsilon}^{x_0 + \varepsilon} E.\Phi(x).dx \right]$$

- Au voisinage de x_0 , $\Phi(x)$ **reste bornée** donc $\int_{x_0 - \varepsilon}^{x_0 + \varepsilon} E.\Phi(x).dx \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0$

Par définition : $\int_{x_0^-}^{x_0^+} \Psi(x)\delta(x - x_0)dx = \Psi(x_0)$

Donc $\int_{x_0 - \varepsilon}^{x_0 + \varepsilon} -A\delta(x - x_0).\Phi(x).dx = -A\Phi(x_0)$

Et $\frac{d\Phi}{dx}(x_0 + \varepsilon) - \frac{d\Phi}{dx}(x_0 - \varepsilon) = -\frac{2mA}{\hbar^2} \Phi(x_0)$ $\frac{d\Phi}{dx}$ est discontinue en x_0

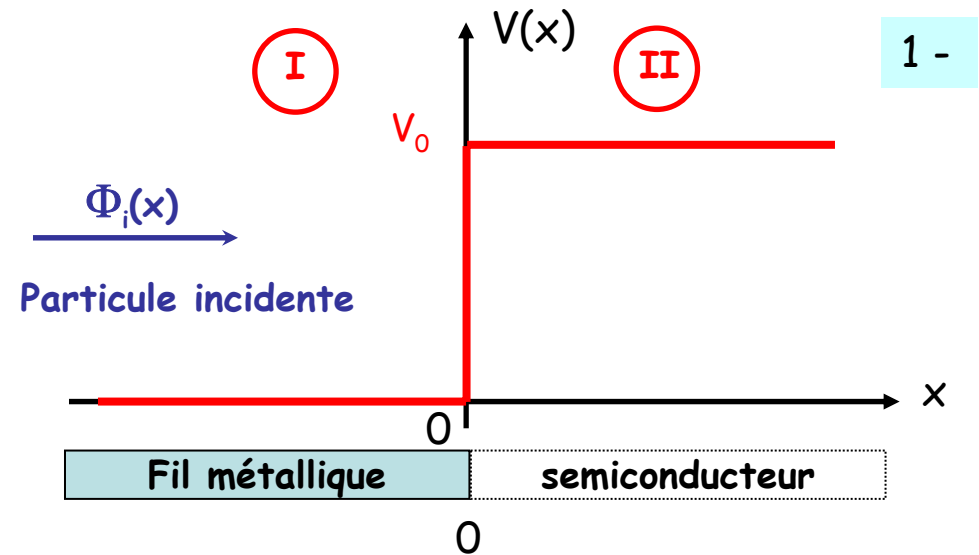
- La fonction d'onde Φ est continue en x_0

- 1- Faire une représentation schématique du problème - Identifier les différentes régions où le potentiel change
- 2- Ecrire l'équation de Schrödinger dans chaque région
- 3- Identifier les cas :
 - Particule confinée dans une région finie de l'espace \Rightarrow Probabilité de présence nulle à l'infini = **état lié** \Rightarrow énergie quantifiée
 - Probabilité de présence non nulle à l'infini = **état non lié** \Rightarrow on s'intéresse plus à la réflexion et/ou transmission de l'onde (E n'est pas quantifiée)
- 4- Résoudre l'équation de Schrödinger dans chaque région $\Psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ ou $\Psi(x) = A \sin kx + B \cos kx$
- 5- Faire les simplifications qui découlent de la physique du problème
- 6- Ecrire les conditions de continuités à chaque changement de région
- 7- Déterminer les (n-1) inconnues en fonction de la dernière en résolvant le système
- 8- Pour les états non liés, déterminer les coefficients de réflexion et de transmission
- 9- Pour les états liés, obtenir la condition de quantification
- 10- Déterminer la dernière inconnue en appliquant la condition de normalisation

II.2.3. Marche de potentiel

On considère une particule provenant de gauche ($x < 0$) et rencontrant une marche de potentiel en $x = 0$

pour $x \leq 0$, $V = 0$, pour $x \geq 0$, $V = V_0$



2 - • équation de Schrödinger

$$\text{I} \quad \frac{d^2 \Phi_I(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \Phi_I(x) = 0$$

$$\text{on pose } k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$\text{II} \quad \frac{d^2 \Phi_{II}(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) \Phi_{II}(x) = 0$$

$$\text{on pose } k'^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0)$$

3 - état non lié \Rightarrow on s'intéressera à R et T, (**$T+R = 1$**)

- En physique classique : 2 cas possibles
 - si $E < V_0$ la particule est réfléchiée ($R = 1$, $T = 0$)
 - si $E > V_0$ la particule poursuit son chemin ($T = 1$, $R = 0$)

• En physique quantique

10

1^{er} cas : $E - V_0 > 0$

4 -
$$\begin{cases} \Phi_I(x) = A.e^{ikx} + B.e^{-ikx} \\ \Phi_{II}(x) = C.e^{ik'x} + D.e^{-ik'x} \end{cases}$$

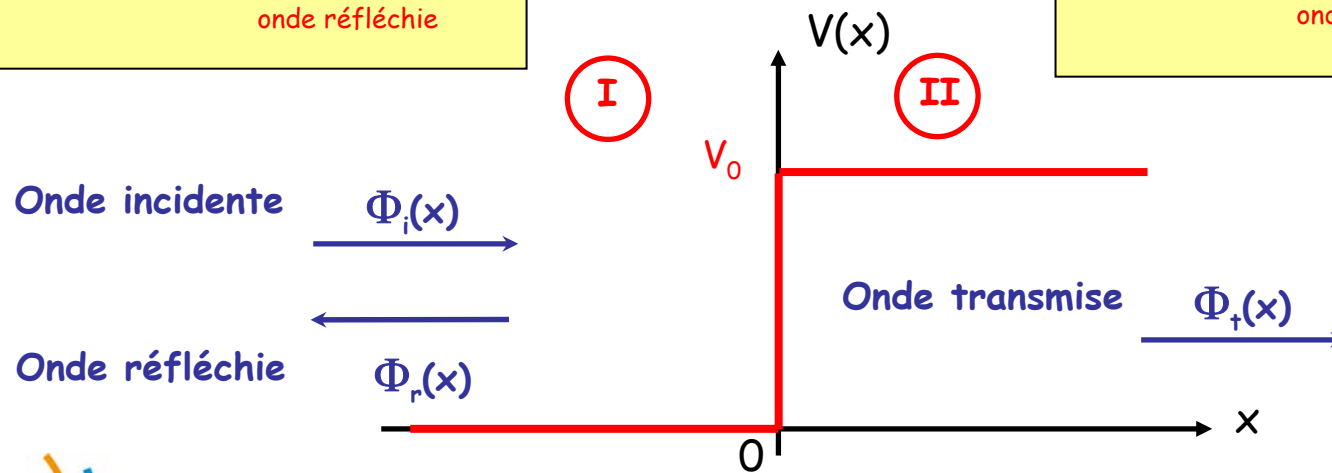
5 - *raison physique : laquelle ?*

6 -
$$\begin{cases} \Phi_I(0) = \Phi_{II}(0) \\ \Phi'_I(0) = \Phi'_{II}(0) \end{cases}$$

7 -
$$\begin{cases} B = \frac{k - k'}{k + k'} A \\ C = \frac{2k}{k + k'} A \end{cases}$$

$$\Phi_I(x) = \underbrace{A.e^{ikx}}_{\text{onde incidente}} + \underbrace{A.\frac{k - k'}{k + k'}.e^{-ikx}}_{\text{onde réfléchie}}$$

$$\Phi_{II}(x) = \underbrace{A.\frac{2k}{k + k'}.e^{ik'x}}_{\text{onde transmise}}$$



8 - Coefficients de réflexion et transmission ($T+R = 1$):

on définit le flux de probabilité de présence $F = v \cdot |\Phi(\mathbf{x})|^2$ (en s^{-1}) avec $v = \frac{\mathbf{p}}{m} = \frac{\hbar \mathbf{k}}{m}$ pour une onde progressive :

on définit $R = \frac{F_r}{F_i}$ à l'infini de l'infini

$$R = \frac{F_r}{F_i} = \frac{\frac{\hbar k}{m} |B|^2}{\frac{\hbar k}{m} |A|^2} = \left| \frac{B}{A} \right|^2$$

$$R = \left| \frac{k - k'}{k + k'} \right|^2$$

$$T = 1 - R = 1 - \left| \frac{k - k'}{k + k'} \right|^2 = \frac{4kk'}{|k + k'|^2}$$

~~$$T = \frac{F_t}{F_i} = \left| \frac{C}{A} \right|^2 = \left| \frac{2k}{k + k'} \right|^2 = \frac{4k^2}{|k + k'|^2}$$~~

$$T = \frac{F_t}{F_i} = \frac{\frac{\hbar k'}{m} |C|^2}{\frac{\hbar k}{m} |A|^2} = \frac{k'}{k} \left| \frac{C}{A} \right|^2 \Rightarrow T = \frac{k'}{k} \left| \frac{2k}{k + k'} \right|^2$$

➡ à la différence du cas classique, on constate que **$T \neq 1$ et $R \neq 0$ mais** ($R+T=1$)

➡ il y a une probabilité non nulle pour que la particule reste dans la région I

➡ on notera que la particule a une vitesse plus faible dans la région II après avoir franchi la marche de potentiel (... c'est logique !)

Si la particule se déplace de la droite vers la gauche quel est le coefficient de réflexion R' ???

$$k \rightarrow k'$$

$$k' \rightarrow k$$

$$R' = \left| \frac{k' - k}{k' + k} \right|^2 = R$$

Particule qui monte une marche = particule qui descend une marche

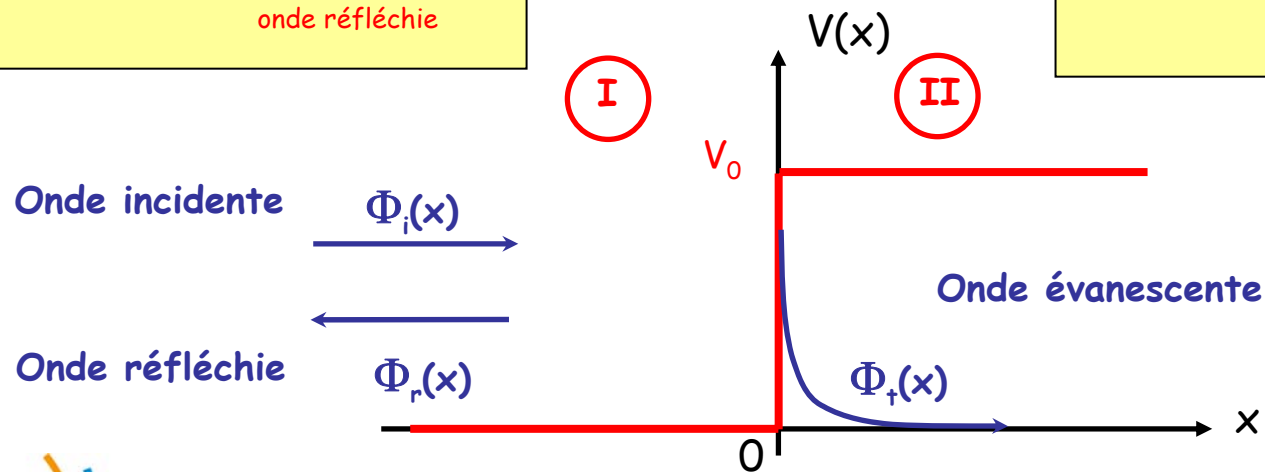
• On a dans ce cas $k'^2 < 0$

• On pose alors $k' = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}} = i\sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} = ik''$

$$\begin{cases} \Phi_I(x) = A' \cdot e^{ikx} + B' \cdot e^{-ikx} \\ \Phi_{II}(x) = C' \cdot e^{-k''x} + \cancel{D' \cdot e^{k''x}} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \Phi_I(0) = \Phi_{II}(0) \\ \Phi'_I(0) = \Phi'_{II}(0) \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} B' = \frac{k - ik''}{k + ik''} A' \\ C' = \frac{2k}{k + ik''} A' \end{cases}$$

$$\Phi_I(x) = \underbrace{A' \cdot e^{ikx}}_{\text{onde incidente}} + \underbrace{A' \cdot \frac{k - ik''}{k + ik''} \cdot e^{-ikx}}_{\text{onde réfléchie}}$$

$$\Phi_{II}(x) = \underbrace{A' \cdot \frac{2k}{k + ik''} \cdot e^{-k''x}}_{\text{onde évanescence}}$$



- Coefficients de réflexion et transmission :

$$R = \left| \frac{B'}{A'} \right|^2 = \left| \frac{k - ik''}{k + ik''} \right|^2 = 1 \quad \longrightarrow \quad \text{réflexion totale comme en classique}$$

$$T = 1 - R \Rightarrow T = 0 \quad \longrightarrow \quad \text{pas de propagation dans la région II}$$

- Analyse et commentaires :

- pas d'onde transmise dans la région II

- fonction d'onde non nulle dans la région II = **probabilité de présence non nulle**



contrairement au cas classique, la particule peut pénétrer dans le milieu II mais elle rebrousse chemin



II.2.3. Marche de potentiel - conclusion

Dans ce problème, on n'a pas une particule localisée dans l'espace mais un flux de particules provenant de la gauche : **on parle d'état de diffusion des particules.**

Lorsque l'on a une particule dans un état de diffusion, l'amplitude de l'onde incidente A reste indéterminée. Pour la déterminer, il faudrait étudier la source de particules.

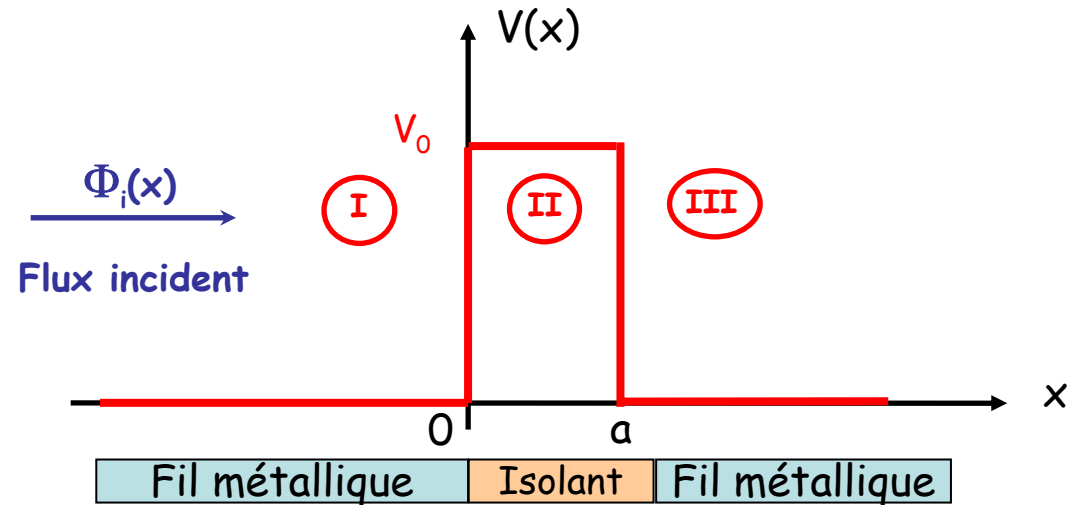
Dans ce problème, l'énergie E est un paramètre initial. On n'a trouvé aucune condition sur E donc toutes les valeurs sont autorisées. On admet que c'est toujours vrai dans un état de diffusion.

Dans un état de diffusion, toutes les valeurs de l'énergies E sont possibles : **il n'y a pas de quantification de l'énergie.**

II.2.4. Barrière de potentiel - Effet tunnel


16


- On considère un flux de particules provenant de gauche et rencontrant en $x = 0$ une barrière de potentiel de largeur a et de hauteur V_0



- On se place dans le cas où $E < V_0$ (franchissement interdit en mécanique classique)

1. ...et ça se croit intelligent !

2.  ule dans

3.  le coefficient lente.

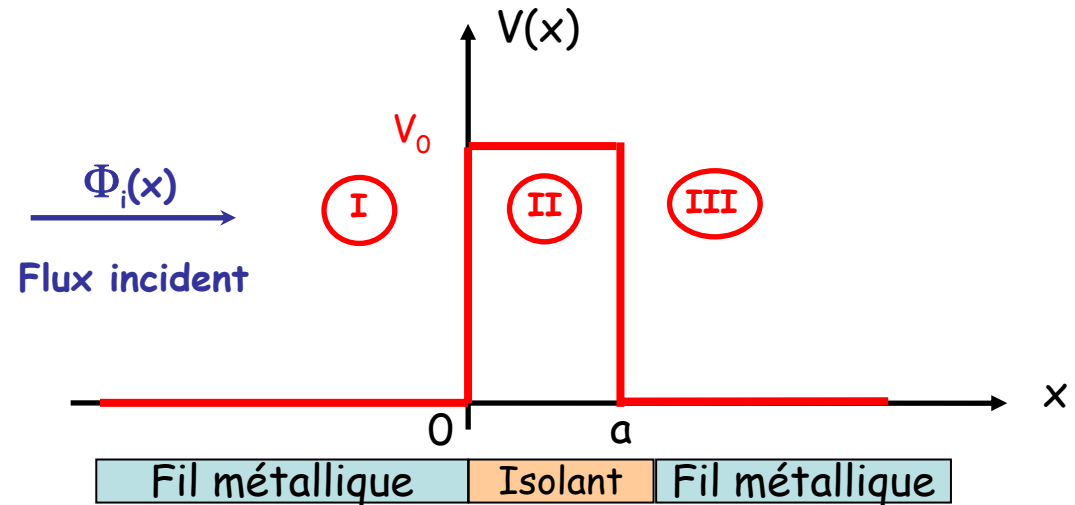
4. **Classique**

Application numérique : $E = 1 \text{ eV}$, $V_0 = 2E$, et a varie entre 0 et 1 nm.
Tracer T en fonction de a dans le cas d'un électron et dans le cas d'un proton.
Conclure.

II.2.4. Barrière de potentiel - Effet tunnel

17

- $E < V_0$



$$\textcircled{\text{I}} \quad \frac{d^2 \Phi_{\text{I}}(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \cdot \Phi_{\text{I}}(x) = 0$$

on pose $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

$$\textcircled{\text{II}} \quad \frac{d^2 \Phi_{\text{II}}(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) \Phi_{\text{II}}(x) = 0$$

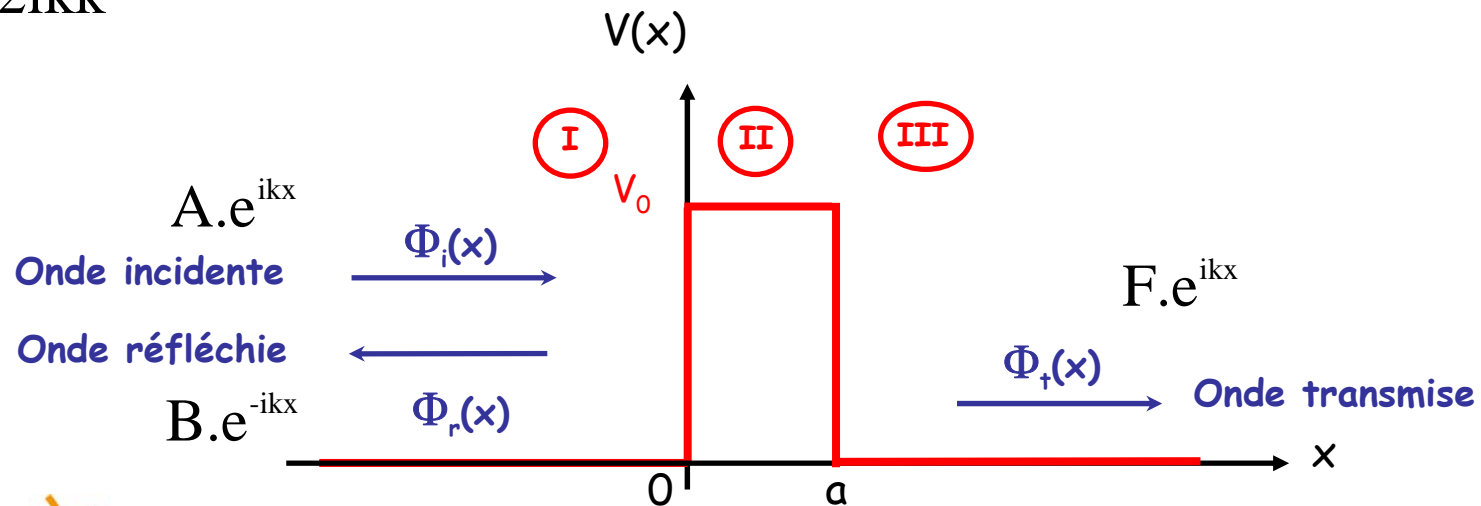
on pose $k'^2 = -k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)$

$$\textcircled{\text{III}} \quad \frac{d^2 \Phi_{\text{III}}(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \cdot \Phi_{\text{III}}(x) = 0$$

on pose $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

$$\left\{ \begin{array}{l} \Phi_I(x) = A.e^{ikx} + B.e^{-ikx} \\ \Phi_{II}(x) = C.e^{-k''x} + D.e^{k''x} \\ \Phi_{III}(x) = F.e^{ikx} + \cancel{G.e^{-ikx}} \end{array} \right. \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \Phi_I(0) = \Phi_{II}(0) \\ \Phi'_I(0) = \Phi'_{II}(0) \\ \Phi_{II}(a) = \Phi_{III}(a) \\ \Phi'_{II}(a) = \Phi'_{III}(a) \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{l} A = \left[\text{ch}(k''a) + \frac{k^2 - k''^2}{2ikk''} \text{sh}(k''a) \right] e^{ika} F \\ B = \frac{k''^2 + k^2}{2ikk''} \text{sh}(k''a).e^{ika} F \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} C = \frac{k'' - ik}{2k''} e^{(k'' + ik)a} F \\ D = \frac{k'' + ik}{2k''} e^{(ik - k'')a} F \end{array}$$



- Coefficients de réflexion et transmission : on définit comme dans le cas de la marche

$$R = \left| \frac{B}{A} \right|^2 = \frac{(k^2 + k'^2)^2 \operatorname{sh}^2(k''a)}{4k^2 k'^2 + (k^2 + k'^2)^2 \operatorname{sh}^2(k''a)} = \frac{1}{1 + \frac{4E(V_0 - E)}{V_0^2 \operatorname{sh}^2\left(\frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} a\right)}}$$

$$T = \left| \frac{F}{A} \right|^2 = \frac{4k^2 k'^2}{4k^2 k'^2 + (k^2 + k'^2)^2 \operatorname{sh}^2(k''a)} = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \operatorname{sh}^2\left(\frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} a\right)}$$

on a bien sûr $T + R = 1$

- Cas où $k''a \gg 1$:
(barrière épaisse) $T \approx \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} \cdot e^{-2k''a}$ décroissance très rapide du coefficient T
 $R \rightarrow 1$

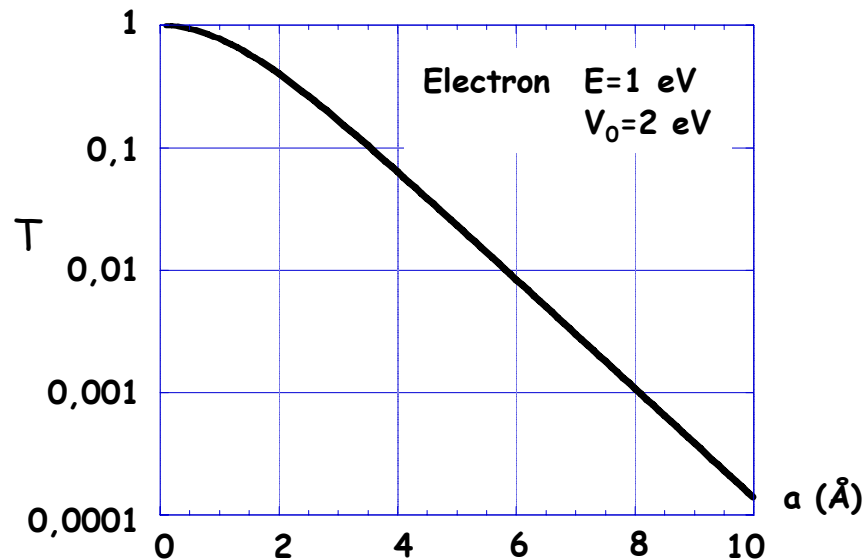
- Qu'appelle-t-on « effet tunnel » ?

Effet tunnel

L 'effet tunnel : évolution du coefficient T

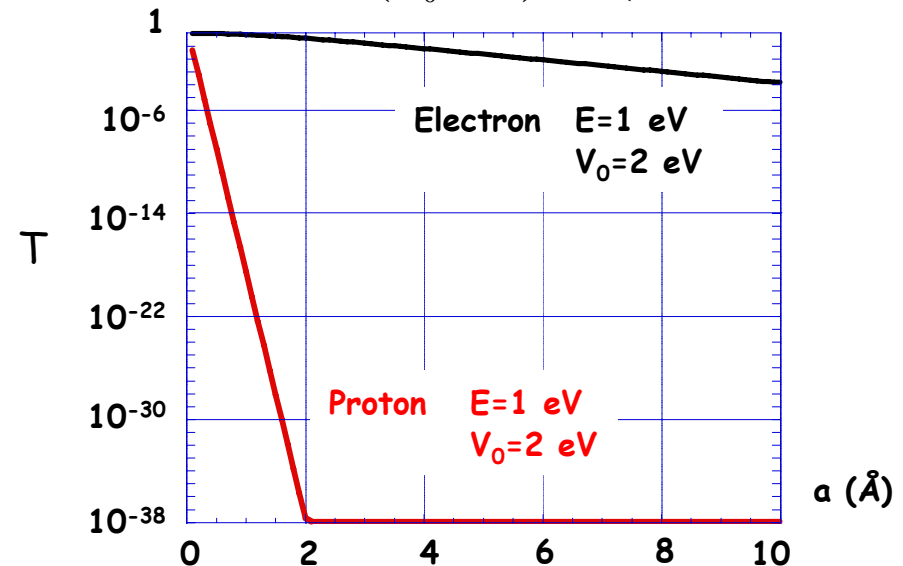
20

$$T = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \operatorname{sh}^2 \left(\frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} a \right)}$$



probabilité d'effet tunnel
importante pour l'électron ($m_e = 9,1 \times 10^{-31}$ kgr)

$$T = 0,78 \quad \text{pour} \quad a = 1 \text{ Å}$$

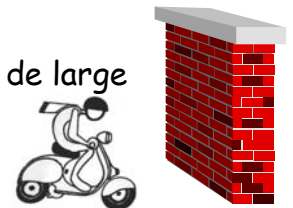


probabilité d'effet tunnel
négligeable pour le proton ($m_p = 1,67 \times 10^{-27}$ kgr)

$$T = 3 \cdot 10^{-19} \quad \text{pour} \quad a = 1 \text{ Å}$$

• Effet tunnel à l'échelle macroscopique

- personne sur un scooter ($m = 100$ kg) arrivant à $v = 10$ m/s sur un mur de $h = 10$ m de haut et $L = 1$ m de large
- calculer la probabilité pour que la personne franchisse le mur

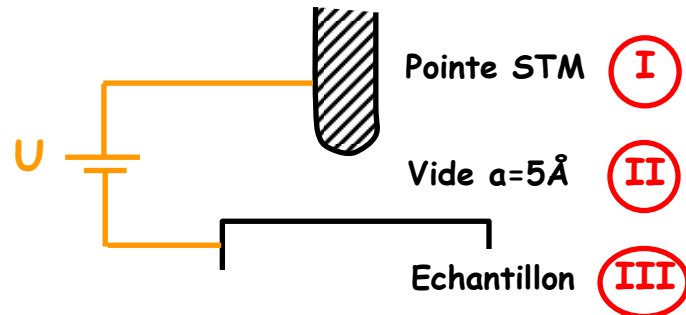


Application 1 : microscope à effet tunnel

21



• Schéma de principe :



STM : Scanning Tunneling Microscope
(Binnig-Rohrer : prix Nobel 1986)

Pointe métallique
(diamètre de qq \AA) :
tungstène, platine, or ...

- Le courant tunnel est l'image du coefficient T

$$T \propto e^{-2 \frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar^2} a} = e^{-2ka}$$

- Il dépend

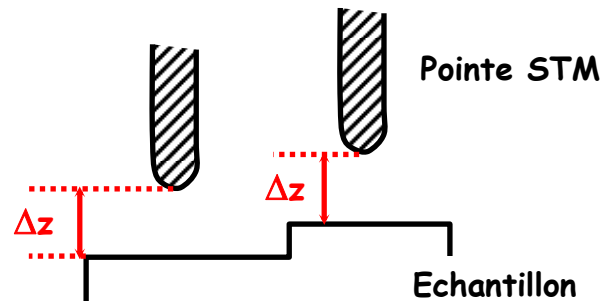
- du travail de sortie V_0 des électrons
- de la distance pointe-échantillon a
($\times 10$ quand on se rapproche de 0.1 nm)
- de la tension U appliquée

$$I_{\text{tunnel}} = A \cdot e^{-B \cdot \sqrt{V_0} \cdot a} \approx 1 \text{ nA}$$

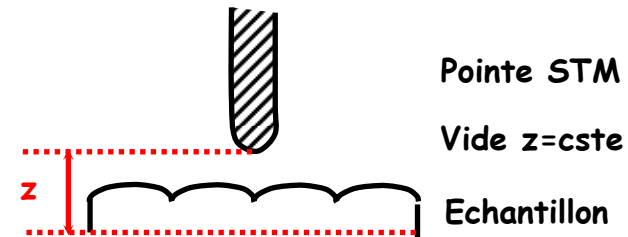
• Modes d'utilisation :

- mode topographique (mode courant constant)
- mode densité électronique ρ (étude de I-V : $I \propto \rho U$)

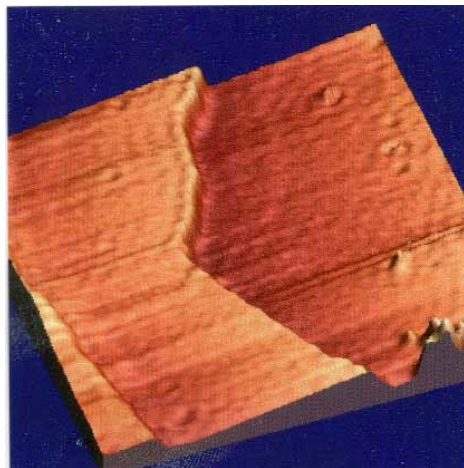
<http://nanomonde.minatec.inpg.fr>



- Mode I_{tunnel} constant
- Asservissement de position par I_{tunnel} (étude de la position de la pointe en Z)

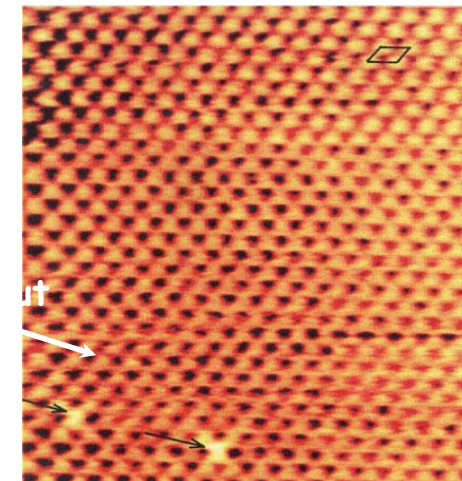
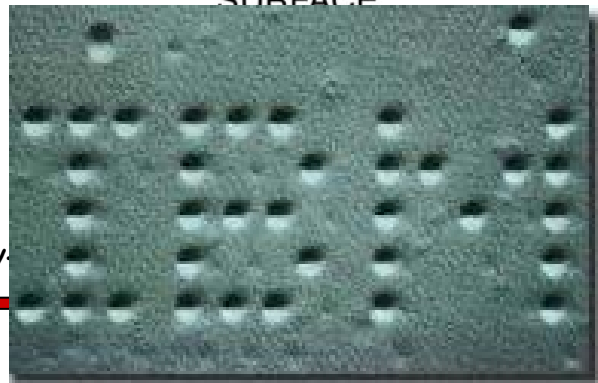
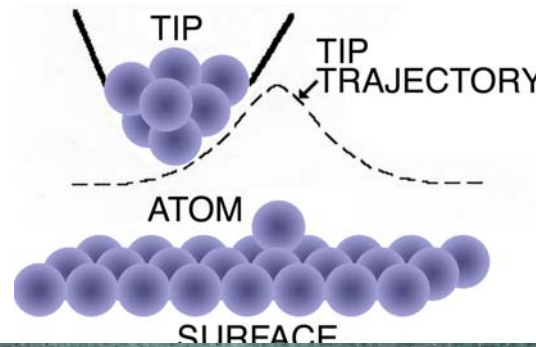


- Mode z constant (enregistrement des variations du courant tunnel)
- Contraste variable en fonction de I_{tunnel} (une variation de 1Å en surface conduit à une variation d'un ordre de grandeur du courant tunnel)



Surface d'un film Cu(111)

<http://www.cea.fr/var/cea/storage/static/>

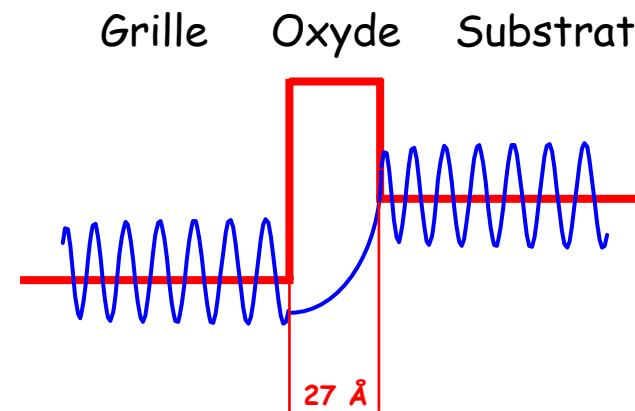
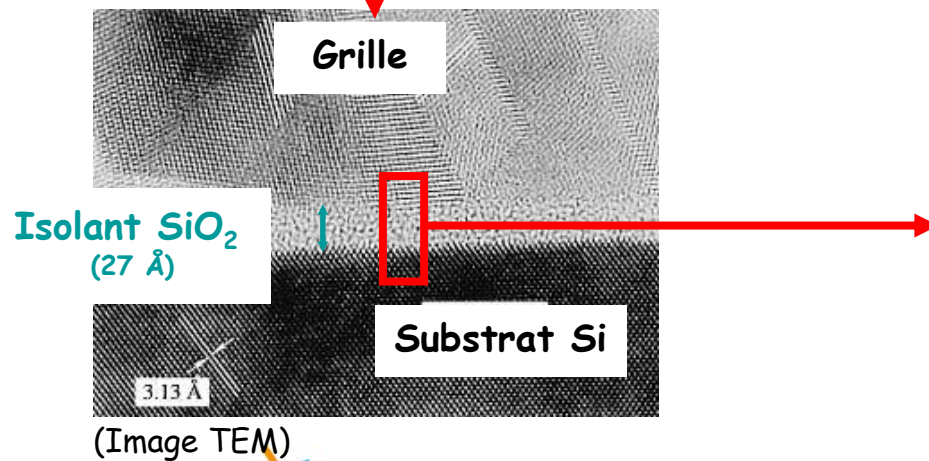
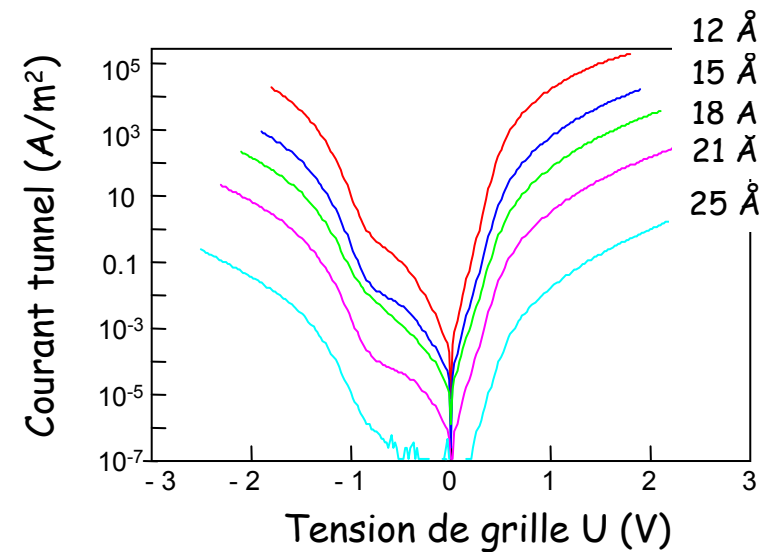
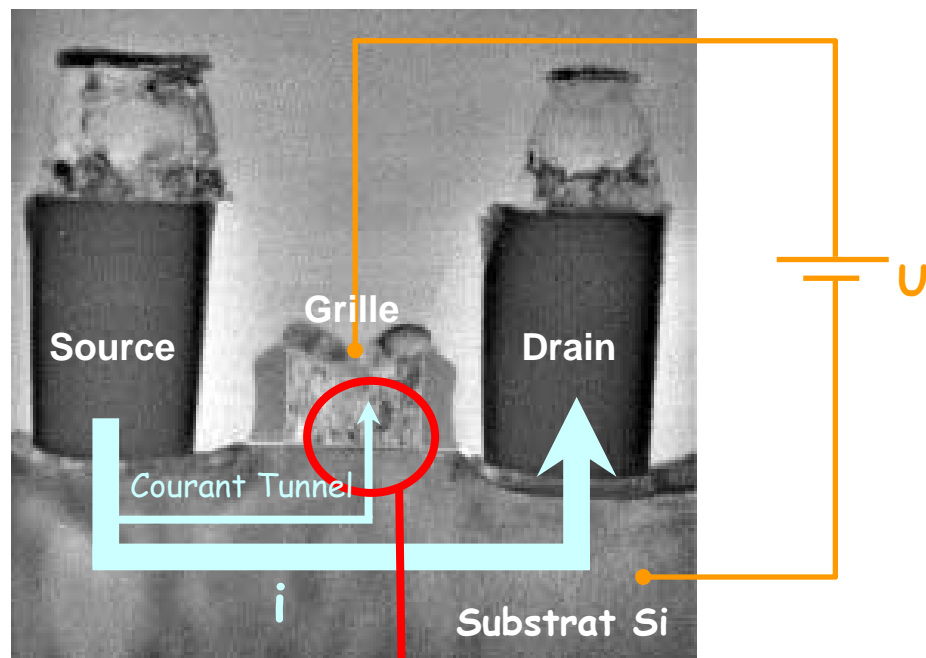


Surface d'un monocristal NbSe₂

k.htm

Application 2 : courant tunnel dans les transistors (courant parasite)

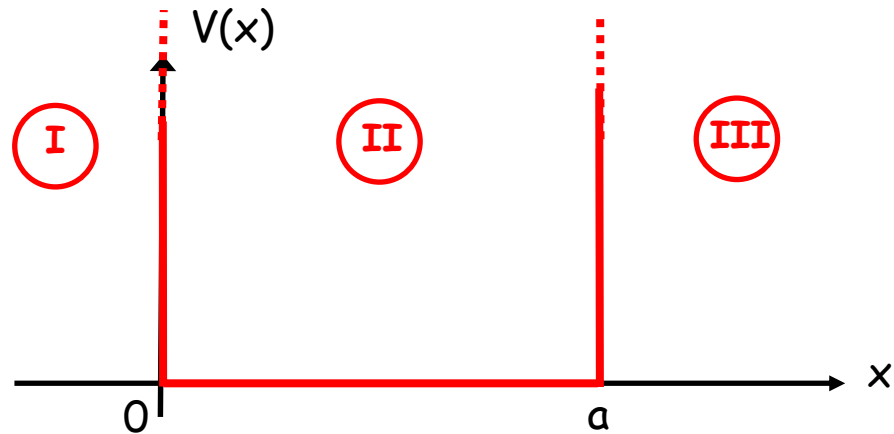
23



II.3.1. Puits infini

(particule confinée dans une région finie de l'espace - boîte quantique)

- On considère une particule d'énergie E dans un puits de potentiel infini



- Equation de Schrödinger dans les 3 régions :

$$\text{I} \quad \frac{d^2\Phi_I(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) \Phi_I(x) = 0 \quad \Rightarrow \quad \Phi_I(x) = 0 \quad \text{car } V_0 = \infty$$

$$\text{II} \quad \frac{d^2\Phi_{II}(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \Phi_{II}(x) = 0 \quad \text{on pose : } k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$\text{III} \quad \frac{d^2\Phi_{III}(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) \Phi_{III}(x) = 0 \quad \Rightarrow \quad \Phi_{III}(x) = 0 \quad \text{car } V_0 = \infty$$

on a : $\Phi_{II}(x) = A.e^{ikx} + B.e^{-ikx}$

• Conditions de continuité :

$$\left\{ \begin{array}{l} \Phi_I(0) = \Phi_{II}(0) = 0 \\ \Phi_{II}(a) = \Phi_{III}(a) = 0 \end{array} \right. \iff \Phi_{II}(0) = \Phi_{II}(a) = 0 \iff \left\{ \begin{array}{l} A + B = 0 \\ A.(e^{ika} - e^{-ika}) = 0 \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{l} A = -B \\ A.(e^{ika} - e^{-ika}) = 0 \end{array} \right.$$

Condition sur les coefficients de Φ_{II}

$$\Phi_{II}(x) = 2iA.\sin(kx)$$

FONDAMENTAL!

Condition sur les valeurs de k ... donc de E

• Quantification de l'énergie :

$$A.(e^{ika} - e^{-ika}) = 0 \iff 2iA.\sin(ka) = 0 \iff \sin(ka) = 0 \quad \text{car } A \neq 0$$

$$\iff ka = n\pi \quad (n \text{ entier non nul}) \quad \text{Pourquoi ?}$$

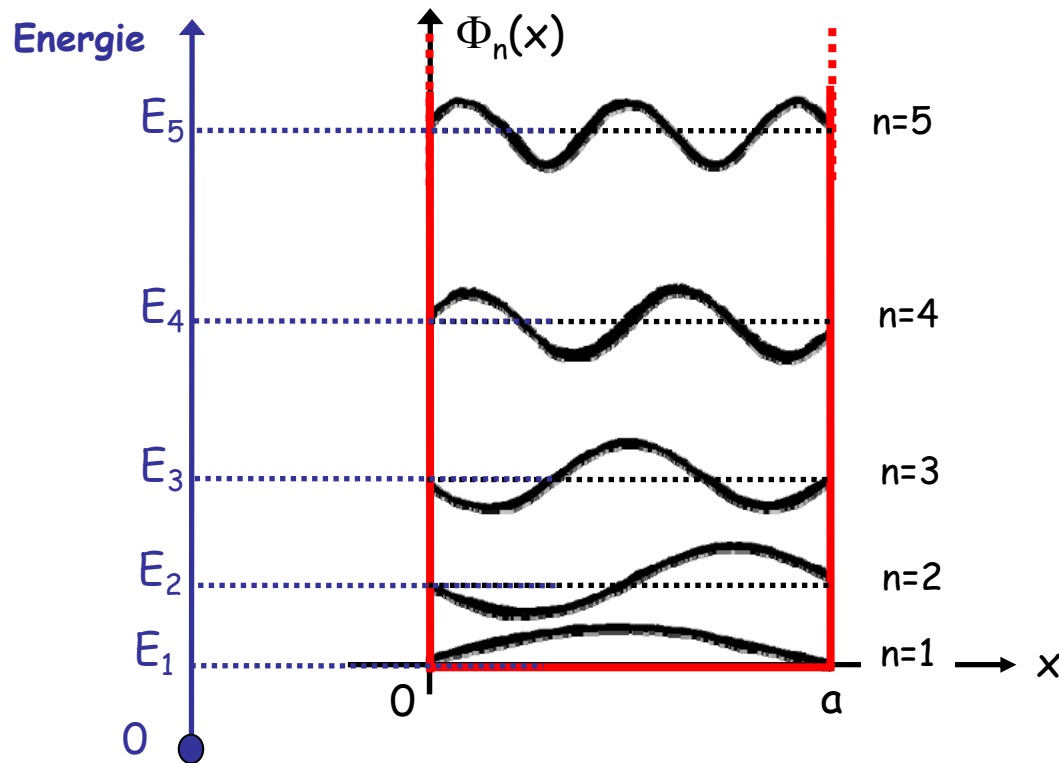
$$\iff E_n = n^2 \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \left(\frac{\pi}{a} \right)^2$$

Energie quantifiée

Relation de dispersion

Spectre d'énergie et fonctions d'ondes

- L'énergie d'une particule dans un puits infini ne peut varier **que de manière discrète**.



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

$$|\Phi_{n,n}(x)| = \sqrt{\frac{2}{a}} \cdot \left| \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \right|$$

(après normalisation)

T71

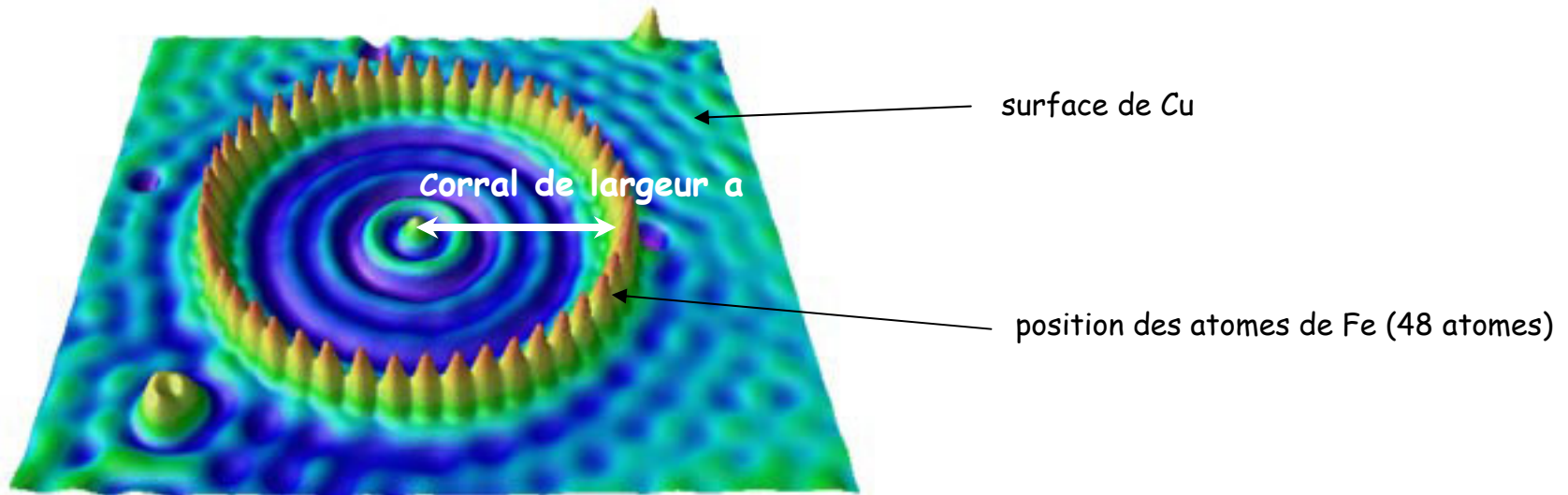
• Analyse et commentaires :

- la condition de quantification correspond à $a = \frac{n\pi}{k} = n \frac{\lambda}{2}$
- la largeur du puits contient un nb entier de demi-longueur d'onde
- phénomène d'**ondes stationnaires réfléchies en $x=0$ et $x=a$**

II.3.2. Application: confinement des e^- de conduction

27

- nanostructures épitaxiées dans un semi-conducteur (InAs/GaAs), nanodots de Si dans la Silice (sources de photons ou détecteurs) → **cryptographie quantique**, diodes lasers à base de boîtes quantiques → **meilleure efficacité radiative**)...
- Le corral quantique
 - problème physique associé au puits de hauteur infinie
 - électrons de conduction d'un film de Cu confinés dans un corral d'atomes de Fe



Atomes de Fe posés sur la surface d'un film de Cu

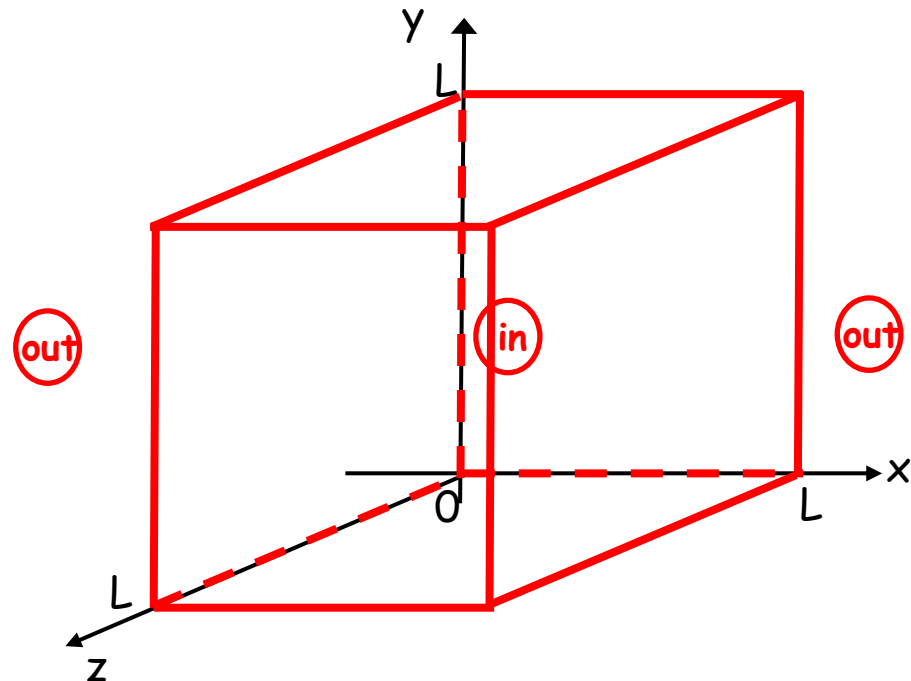
- ➡ les atomes de Fe jouent le rôle de potentiel infini pour les électrons de conduction
- ➡ visualisation des modes stationnaires entre les atomes de Fe

Electrons libres enfermés dans une «boîte»

Soit un cristal de taille finie. Prenons un cristal cubique de taille L pour simplifier.

Dans la boîte : $V(x, y, z) = 0$

En dehors de la boîte : $V(x, y, z) = \infty$



Equation de Schrödinger dans la boîte :

(in)
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \Phi(x, y, z)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Phi(x, y, z)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Phi(x, y, z)}{\partial z^2} \right) = E \cdot \Phi(x, y, z)$$

II.3.3. Puits de potentiel infini à 3D

Hamiltonien séparable

L'Hamiltonien précédent est à variables séparables :

$$H = H_x + H_y + H_z$$

avec $H_x = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$ (idem en y et en z)

On peut alors chercher des solutions sous la forme :

$$\Phi(x, y, z) = \Phi_x(x) \cdot \Phi_y(y) \cdot \Phi_z(z)$$

avec $H_x \Phi_x(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Phi_x(x)}{\partial x^2} = E_x \Phi_x$ (idem en y et en z)

Alors Φ solution de l'équation de Schrödinger $H\Phi = E\Phi$ avec

$$E = E_x + E_y + E_z$$

II.3.3. Puits de potentiel infini à 3D

Application au Puits carré infini à 3 dimensions

D'après les résultats du paragraphe **II.3.1. (T64)**, on a :

$$\Phi_{x,n_x}(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cdot \sin\left(\frac{n_x \pi}{L} x\right) \quad E_{n_x} = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} \quad k_x = \frac{n_x \pi}{L} \quad \text{avec } n_x = 1, 2, 3, \dots$$

(idem en y et en z) :

Ainsi les états stationnaires à 3D sont :

$$\Phi(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{L^3}} \sin \frac{n_x \pi x}{L} \sin \frac{n_y \pi y}{L} \sin \frac{n_z \pi z}{L}$$

avec la relation de dispersion :

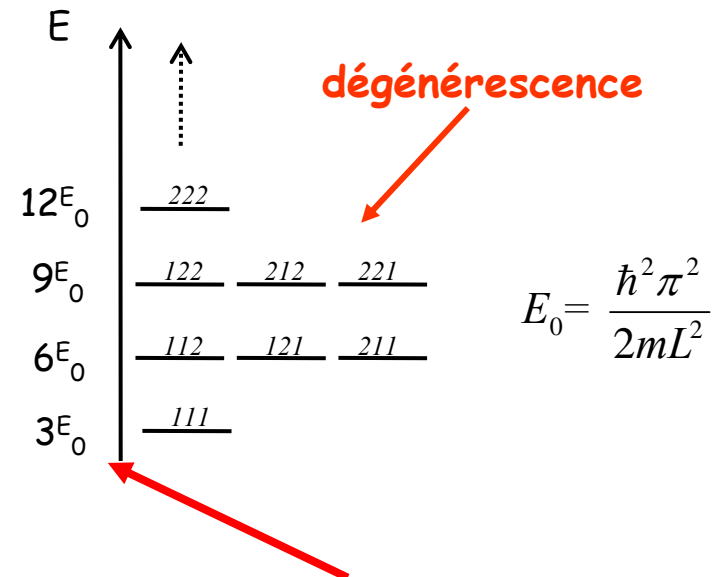
$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) = E_0 (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

$$\vec{k} = (k_x, k_y, k_z) = \frac{\pi}{L} (n_x, n_y, n_z)$$

et $E_0 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}$

Niveaux d'énergie - Niveau de Fermi

| Energie de l'état | (n_x, n_y, n_z) |
|-------------------|---------------------------------|
| $12E_0$ | $(2, 2, 2)$ |
| $9E_0$ | $(1, 2, 2) (2, 1, 2) (2, 2, 1)$ |
| $6E_0$ | $(1, 1, 2) (1, 2, 1) (2, 1, 1)$ |
| $3E_0$ | $(1, 1, 1)$ |



Connaissant les niveaux d'énergie, on peut trouver *l'état fondamental* du cristal :

- N e- à répartir,
- on remplit les niveaux de plus basses énergie (état fondamental)
- on ne peut placer que 2 e- par niveau (principe d'exclusion de Pauli)

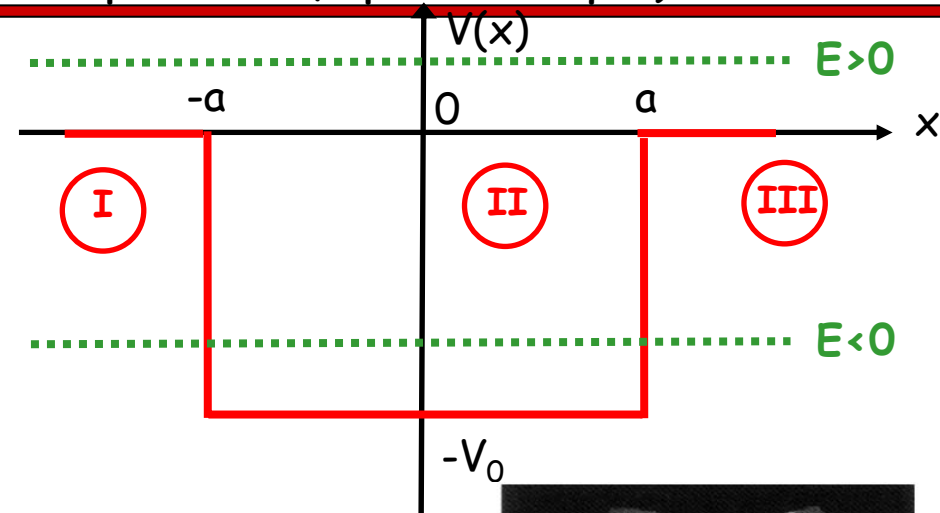
Cela permet d'en déduire les propriétés du matériau étudié : elles dépendent pour beaucoup du niveau occupé de plus haute énergie appelé *niveau de Fermi* (à $T=0K$).

A suivre ...

II.3.4. Puits de potentiel fini

(une hétéro structure de semi-conducteurs : HEMT pour les RF, optoélectronique)

- On considère une particule venant de gauche de masse m et d'énergie E et un puits de potentiel fini

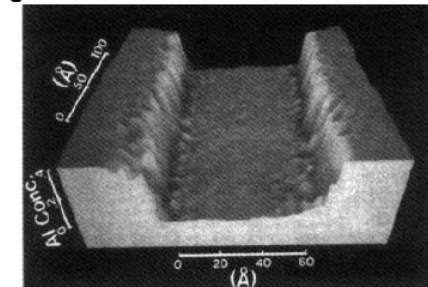


- 1^{er} cas: Etats de diffusion $E > 0$

- exprimer les solutions au problème
- calculer le coefficient de transmission du puits

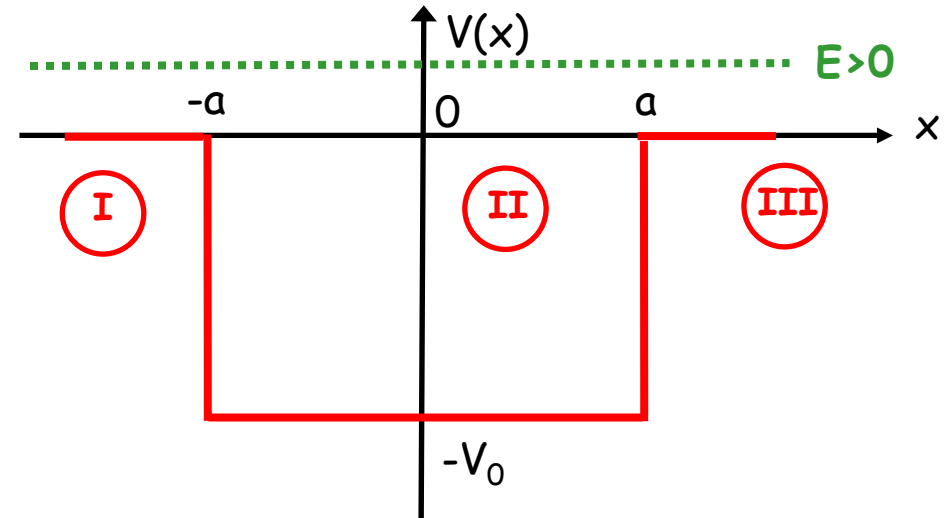
- 2^{ème} cas: Etats liés $-V_0 < E < 0$

- résoudre l'équation de Schrödinger en prenant en compte la symétrie du problème
- déterminer les relations de quantification et les résoudre graphiquement
- exprimer les solutions
- représenter les niveaux d'énergie et les solutions dans le puits



Sandwich de Al Ga As – Ga As – Al Ga As

$E > 0 \Rightarrow$ états non liés



$$\frac{d^2\Phi_I(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \cdot \Phi_I(x) = 0$$

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

$$\Phi_I(x) = A \cdot e^{ikx} + B \cdot e^{-ikx}$$

$$\frac{d^2\Phi_{II}(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E + V_0) \cdot \Phi_{II}(x) = 0$$

$$k'^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E + V_0) \quad \Phi_{II}(x) = C \cdot e^{ik'x} + D \cdot e^{-ik'x}$$

$$\frac{d^2\Phi_{III}(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \cdot \Phi_{III}(x) = 0$$

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

$$\Phi_{III}(x) = F \cdot e^{ikx} + \cancel{G \cdot e^{-ikx}}$$

Conditions de continuité :

$$\begin{array}{l}
 \Phi_I(-a) = \Phi_{II}(-a) \\
 \Phi'_I(-a) = \Phi'_{II}(-a) \\
 \\
 \Phi_{II}(a) = \Phi_{III}(a) \\
 \Phi'_{II}(a) = \Phi'_{III}(a)
 \end{array}
 \Rightarrow
 \left\{
 \begin{array}{l}
 A.e^{-ika} + B.e^{ika} = C.e^{-ik'a} + D.e^{ik'a} \quad (1) \\
 ikA.e^{-ika} - ikB.e^{ika} = ik'C.e^{-ik'a} - ik'D.e^{ik'a} \quad (2) \\
 C.e^{ik'a} + D.e^{-ik'a} = F.e^{ika} \quad (3) \\
 ik'C.e^{ik'a} - ik'D.e^{-ik'a} = ikF.e^{ika} \quad (4)
 \end{array}
 \right.$$

$$(1) \times (ik) + (2) \Rightarrow 2ikA.e^{-ika} = iC.e^{-ik'a}(k + k') + iD.e^{ik'a}(k - k')$$

$$(1) \times (ik) - (2) \Rightarrow 2ikB.e^{ika} = iC.e^{-ik'a}(k - k') + iD.e^{ik'a}(k + k')$$

$$(3) \times (ik') + (4) \Rightarrow 2ik'C.e^{ik'a} = iF.e^{ika}(k + k') \Rightarrow C = \frac{(k + k')}{2k'} e^{i(k-k')a} F$$

$$(3) \times (ik') - (4) \Rightarrow 2ik'D.e^{-ik'a} = iF.e^{ika}(k' - k) \Rightarrow D = \frac{(k' - k)}{2k'} e^{i(k+k')a} F$$

Donc :

$$A = \frac{1}{2kk'} e^{2ika} \left[2kk' \cos 2k'a - i(k^2 + k'^2) \sin 2k'a \right] F$$

$$B = i \frac{(k'^2 - k^2)}{2kk'} \sin(2k'a) F$$

$$C = \frac{(k + k')}{2k'} e^{i(k-k')a} F$$

$$D = \frac{(k' - k)}{2k'} e^{i(k+k')a} F$$

$$A = \frac{1}{2kk'} e^{2ika} \left[2kk' \cos 2k'a - i(k^2 + k'^2) \sin 2k'a \right] F$$

$$T = \left| \frac{F}{A} \right|^2 = \left| \frac{2kk'}{2kk' \cos 2k'a - i(k^2 + k'^2) \sin 2k'a} \right|^2$$

$$T = \frac{4k^2 k'^2}{4k^2 k'^2 \cos^2 2k'a + (k^2 + k'^2)^2 \sin^2 2k'a}$$

$$T = \frac{4k^2 k'^2}{4k^2 k'^2 + (k^2 - k'^2)^2 \sin^2 2k'a} \Rightarrow T = \frac{1}{1 + \underbrace{\left[\frac{k^2 - k'^2}{2kk'} \sin(2k'a) \right]^2}_{f(k, k', a)}}$$

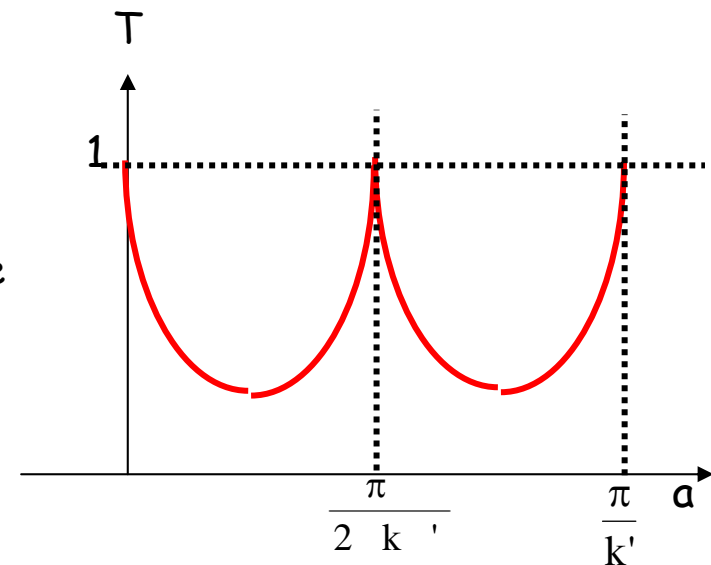
$$T = \frac{1}{1 + \left(\frac{k^2 - k'^2}{2kk'} \right)^2 \sin^2 2k'a}$$

Pour que $T = 1$
(transparence) il faut que :

$$2k'a = \pi n \Rightarrow a = \frac{n\pi}{2k'}$$

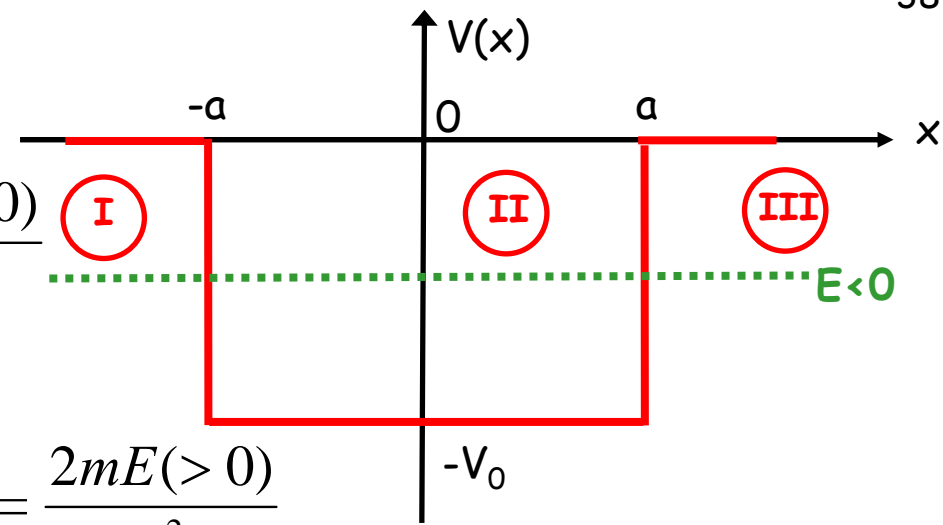
$$T = \frac{1}{1 + \frac{\hbar^4 V_0^2}{16m^2 E^2 (E + V_0)^2} \sin^2 2 \frac{\sqrt{2m(E + V_0)}}{\hbar} a}$$

Donc, si $E \rightarrow \infty$, $T \rightarrow 1$, l'influence du puit est négligeable



$$-V_0 < E < 0$$

38

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d^2\Phi_I(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \cdot \Phi_I(x) = 0 \\ \frac{d^2\Phi_{III}(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \cdot \Phi_{III}(x) = 0 \end{array} \right. \quad \left\{ \begin{array}{l} k'^2 = \frac{2mE(<0)}{\hbar^2} \\ k'' = ik \Rightarrow k^2 = \frac{2mE(>0)}{\hbar^2} \end{array} \right.$$


$$\frac{d^2\Phi_{II}(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E + V_0) \cdot \Phi_{II}(x) = 0 \quad k'^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E + V_0), \quad E < 0$$

$$\Phi_I(x) = \cancel{A'e^{-kx}} + B'e^{kx}$$

$$\Phi_{II}(x) = C'e^{ik'x} + D'e^{-ik'x}$$

$$\Phi_{III}(x) = E'e^{-kx} + \cancel{F'e^{kx}}$$

Signification physique :

la particule est « *coincée* »
dans le puits

soit

Comme le problème est symétrique par rapport à zéro : la fonction a la même valeur à x et à $-x$ à un facteur e^{id} près : $\Phi(-x) = e^{\text{id}}\Phi(x)$

$$\Phi(-x) = e^{\text{id}}\Phi(x)$$

Changement de variable : $u = -x$

$$\Phi(u) = e^{\text{id}}\Phi(-u) \Rightarrow \Phi(u) = e^{\text{id}}e^{\text{id}}\Phi(u) = e^{2\text{id}}\Phi(u) \Rightarrow e^{2\text{id}} = 1 \Rightarrow e^{\text{id}} = \pm 1$$

Donc :

$$\Phi(x) = \Phi(-x) \quad \text{Fonction paire : par ex : } \cos(x)$$

$$\Phi(x) = -\Phi(-x) \quad \text{Fonction impaire : par ex : } \sin(x)$$

$$\Phi_{\text{II}}(x) = C'\cos(k'x) \quad \text{ou :} \quad \Phi_{\text{II}}(x) = D'\sin(k'x)$$

$$\Phi_{\text{I}}(x) = B'e^{kx}$$

$$\Phi_{\text{III}}(x) = E'e^{-kx}$$

Conditions de continuité :

$$\left. \begin{aligned} \Phi_{II}(a) &= \Phi_{III}(a) \Rightarrow C' \cos(k'a) = E' e^{-ka} \\ \Phi_{II}'(a) &= \Phi_{III}'(a) \Rightarrow -k' C' \sin(k'a) = -k E' e^{-ka} \end{aligned} \right\} \Rightarrow -\frac{\cos(k'a)}{k' \sin(k'a)} = -\frac{1}{k} \Rightarrow \boxed{\frac{k}{k'} = \tan(k'a)}$$

$$\left. \begin{aligned} \Phi_{II}(a) &= \Phi_{III}(a) \Rightarrow D' \sin(k'a) = E' e^{-ka} \\ \Phi_{II}'(a) &= \Phi_{III}'(a) \Rightarrow k' D' \cos(k'a) = -k E' e^{-ka} \end{aligned} \right\} \Rightarrow \frac{\sin(k'a)}{k' \cos(k'a)} = -\frac{1}{k} \Rightarrow \boxed{\frac{k}{k'} = -\cot(k'a)}$$

- Ce type d'équation est dite : **transcendante**. Elle relie de façon *implicite* l'énergie de la particule à la profondeur V_0 du potentiel. Seules certaines valeurs de l'énergie sont possibles.
- Elle ne peut pas être résolue analytiquement mais seulement graphiquement ou numériquement

Ou bien

$$\Phi_I(\mathbf{x}) = \mathbf{B}'e^{k\mathbf{x}}$$

$$\Phi_{II}(\mathbf{x}) = \mathbf{C}'e^{ik'\mathbf{x}} + \mathbf{D}'e^{-ik'\mathbf{x}} \quad \text{conditions de continuit  :}$$

$$\Phi_{III}(\mathbf{x}) = \mathbf{E}'e^{-k\mathbf{x}}$$

$$\Phi_I(-\mathbf{a}) = \Phi_{II}(-\mathbf{a})$$

$$\Phi_I'(-\mathbf{a}) = \Phi_{II}'(-\mathbf{a})$$

$$\Phi_{II}(\mathbf{a}) = \Phi_{III}(\mathbf{a})$$

$$\Phi_{II}'(\mathbf{a}) = \Phi_{III}'(\mathbf{a})$$

$$C'e^{-ik'a} + D'e^{ik'a} = B'e^{-ka} \quad (1)$$

$$ik'C'e^{-ik'a} - ik'D'e^{ik'a} = kB'e^{-ka} \quad (2)$$

$$C'e^{ik'a} + D'e^{-ik'a} = E'e^{-ka} \quad (3)$$

$$ik'C'e^{ik'a} - ik'D'e^{-ik'a} = -kE'e^{-ka} \quad (4)$$

(1), (2)

$$\left. \begin{aligned} C' &= \frac{1}{2} e^{ik'a} e^{-k'a} \left(1 - \frac{ik}{k'} \right) B' \\ D' &= \frac{1}{2} e^{-ik'a} e^{-ka} \left(1 + \frac{ik}{k'} \right) B' \end{aligned} \right\} \frac{C'}{D'} = e^{2ik'a} \frac{(k' - ik)}{(k' + ik)}$$

(3), (4)

$$\Rightarrow e^{4ik'a} = \frac{(k' + ik)^2}{(k' - ik)^2}$$

$$\left. \begin{aligned} C' &= \frac{1}{2} e^{-ik'a} e^{-ka} \left(1 + \frac{ik}{k'} \right) E' \\ D' &= \frac{1}{2} e^{ik'a} e^{-ka} \left(1 - \frac{ik}{k'} \right) E' \end{aligned} \right\} \frac{C'}{D'} = e^{-2ik'a} \frac{(k' + ik)}{(k' - ik)}$$

$$e^{4ik'a} = \frac{(k' + ik)^2}{(k' - ik)^2} \quad \Rightarrow \quad \frac{(k' + ik)}{(k' - ik)} = e^{2ik'a} \quad \text{ou} \quad \frac{(k' + ik)}{(k' - ik)} = -e^{2ik'a}$$

$$\frac{(k' + ik)}{(k' - ik)} = e^{2ik'a} \Rightarrow \boxed{\frac{k}{k'} = \tan k'a}$$

$$\frac{(k' + ik)}{(k' - ik)} = -e^{2ik'a} \Rightarrow \boxed{\frac{k}{k'} = -\cot k'a}$$

- Ce type d'équation est dite : **transcendante**. Elle relie de façon *implicite* l'énergie de la particule à la profondeur V_0 du potentiel. Seules certaines valeurs de l'énergie sont possibles.
- Elle ne peut pas être résolue analytiquement. On peut utiliser soit une **approche numérique** (méthode itérative), ou, **une approche graphique**.

- La solution graphique est la plus souvent utilisée

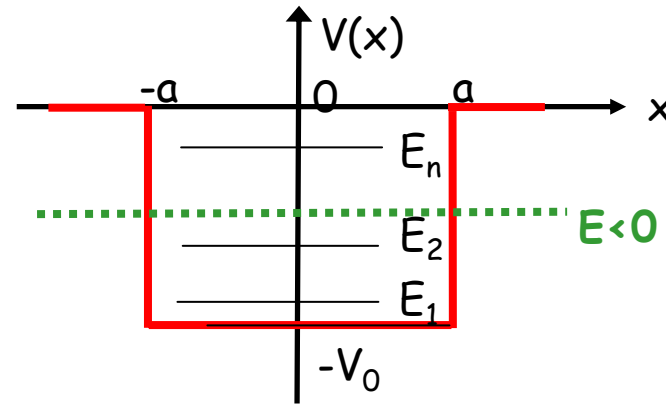
$$\frac{k}{k'} = \tan k' a$$

Chacun des membres de cette équation est une fonction de l'énergie. Il suffit de les tracer séparément et de considérer les points d'intersection (= solutions cherchées).

$$\left. \begin{aligned} k'^2 &= \frac{2m}{\hbar^2} (E + V_0), \quad E + V_0 > 0 \\ k^2 &= \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad E > 0 \\ k_0^2 &= \frac{2m}{\hbar^2} V_0 \end{aligned} \right\} \Rightarrow k'^2 = -k^2 + k_0^2 \Rightarrow k^2 = k_0^2 - k'^2$$

$$\frac{k}{k'} = \tan k' a \Rightarrow \underbrace{\frac{\sqrt{k_0^2 - k'^2}}{k'}}_{Y_1} = \underbrace{\tan k' a}_{Y_2}$$

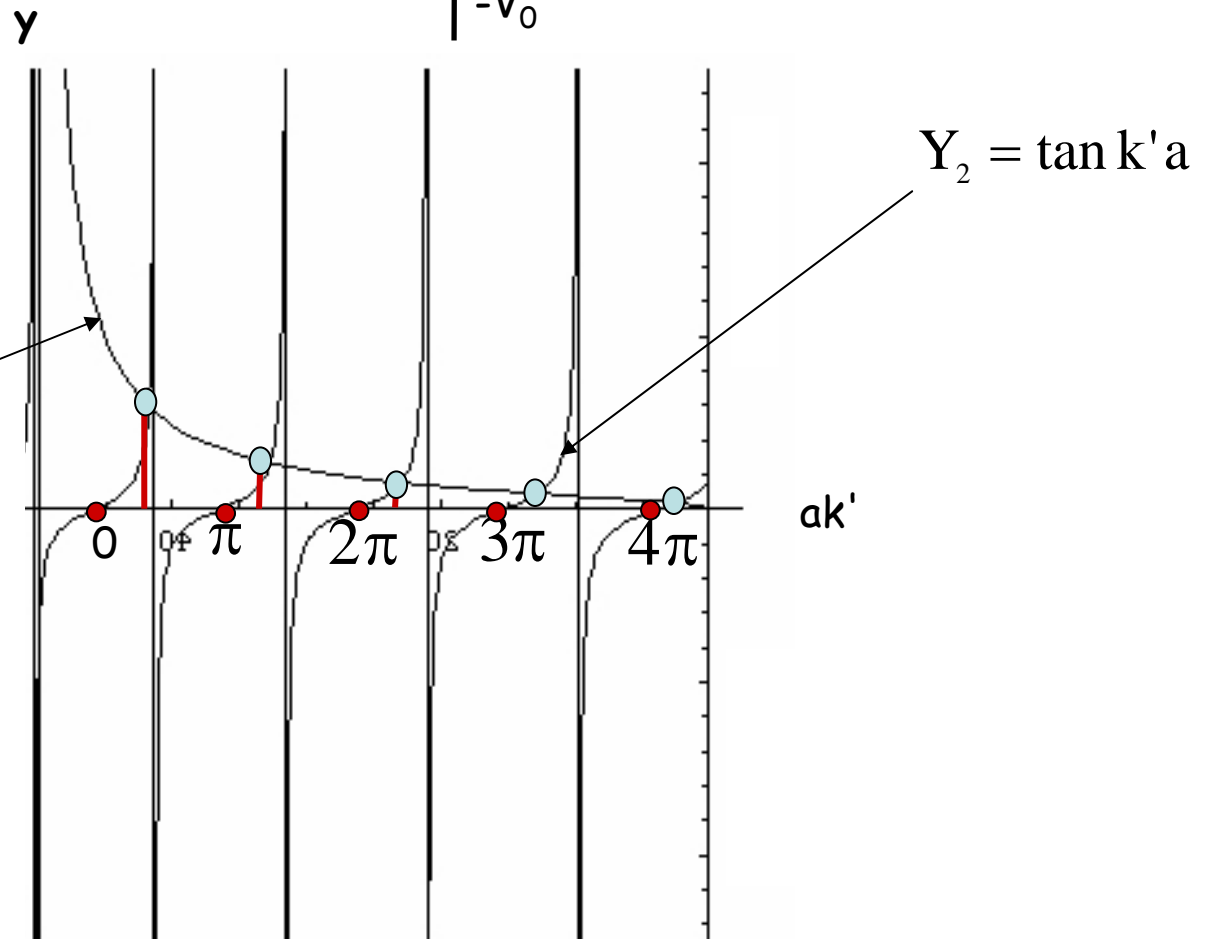
$$\underbrace{\frac{k}{k'}}_{Y_1} = \frac{a\sqrt{k_0^2 - k'^2}}{ak'} = \underbrace{\tan k'a}_{Y_2}$$

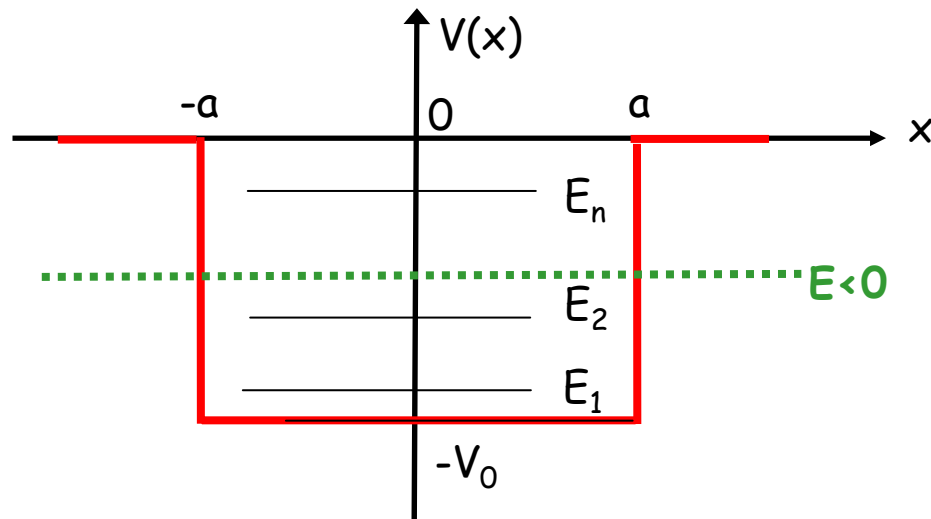


$$Y_1 = \frac{a\sqrt{k_0^2 - k'^2}}{ak'}$$

$$k'^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E + V_0)$$

L'énergie est donc quantifiée





Si V_0 varie le nb de solutions sera différent.

Si le puits devient très profond ($-V_0 \rightarrow \infty$) on retrouve les mêmes résultats que dans le cas du puits infini.