

**La science quantique**

**Une vision singulière**

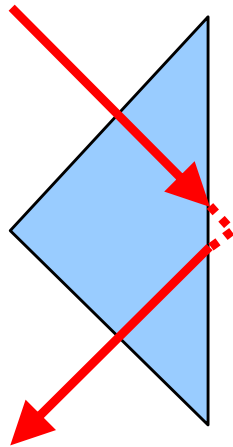
**IV) Puits de potentiel**

P.A. Besse

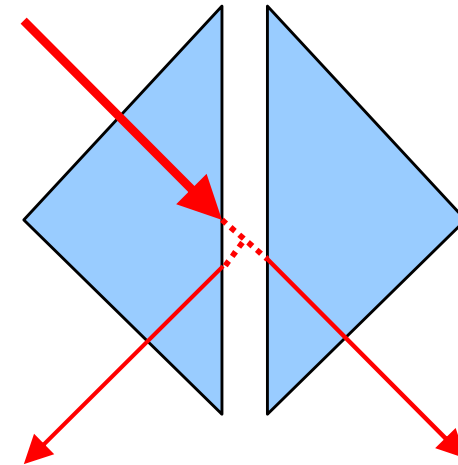
Réflexion et transmission

Effet tunnel

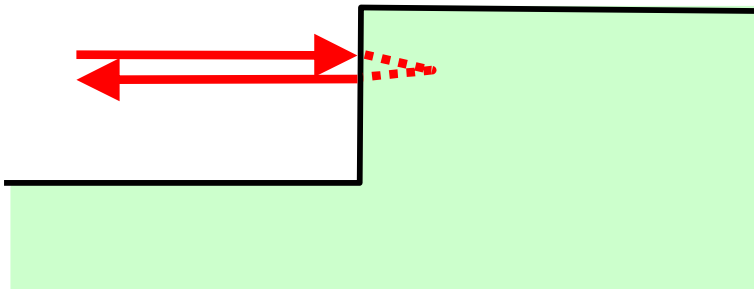
Réflexion totale



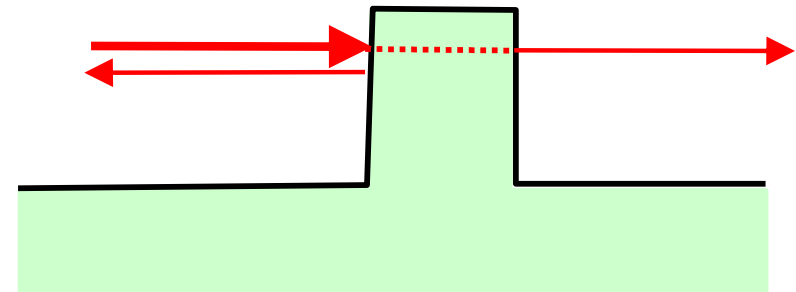
Réflexion frustrée



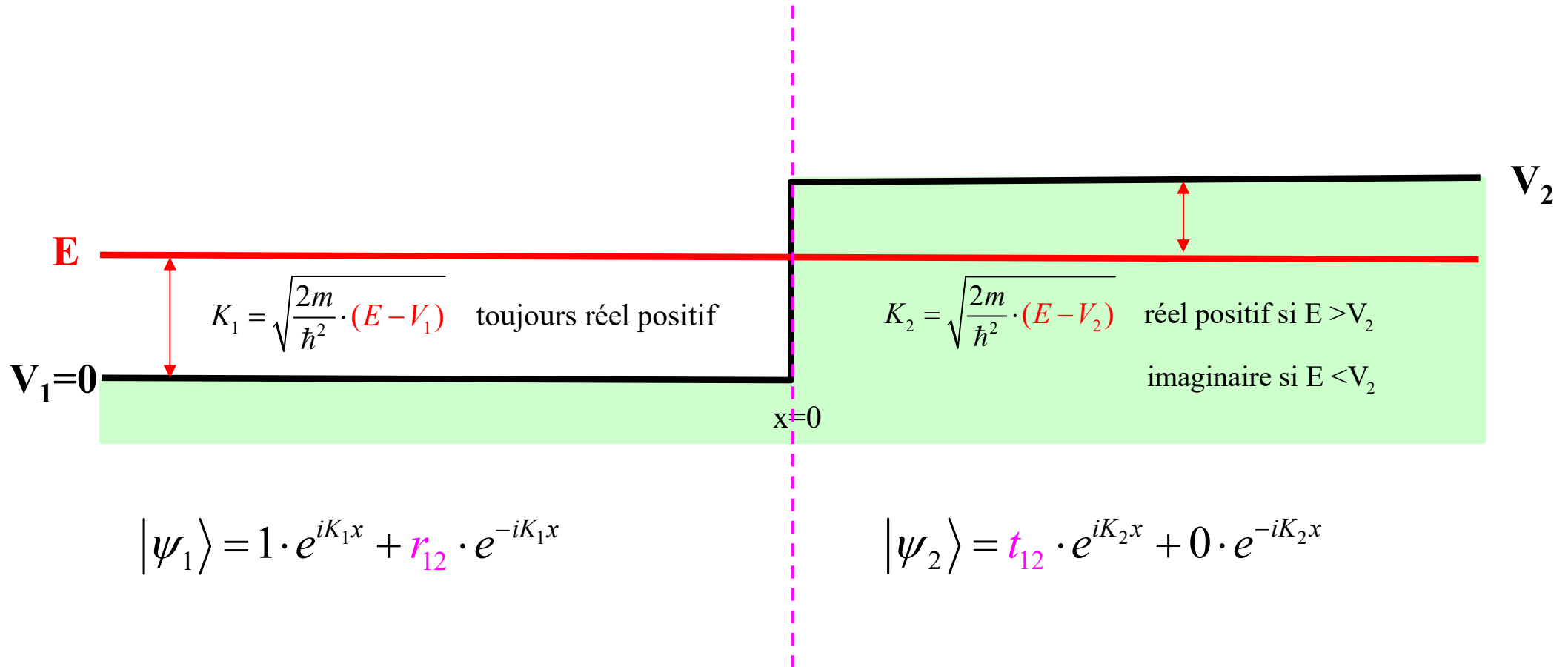
Step de potentiel



Effet tunnel

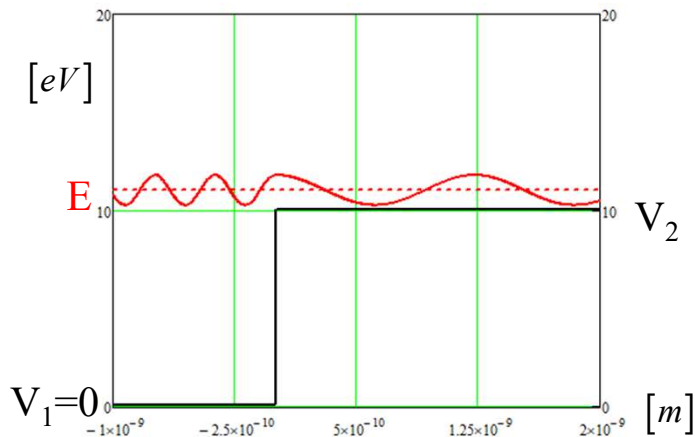
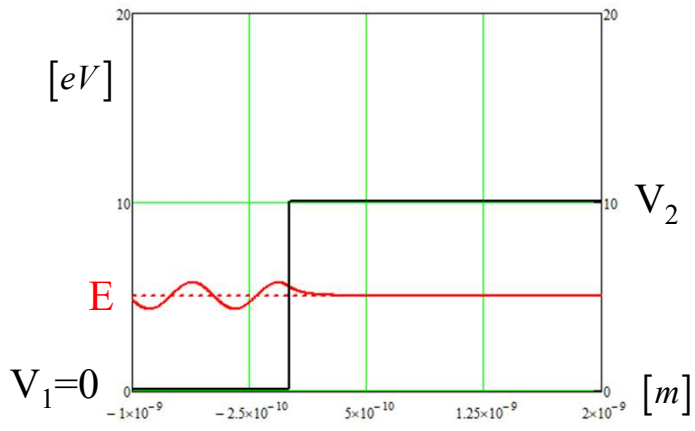


# Réflexion sur un step de potentiel



À l'interface, la fonction d'onde et sa dérivée sont continues\* → déterminer  $r_{12}$  et  $t_{12}$

\* Voir Cohen-Tannoudji Livre I p. 66.

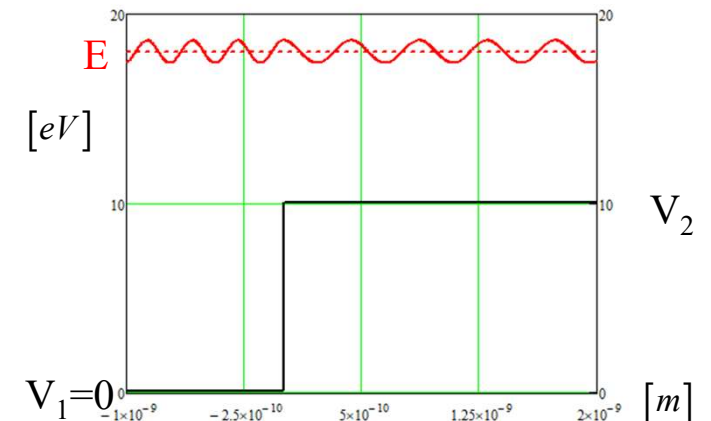
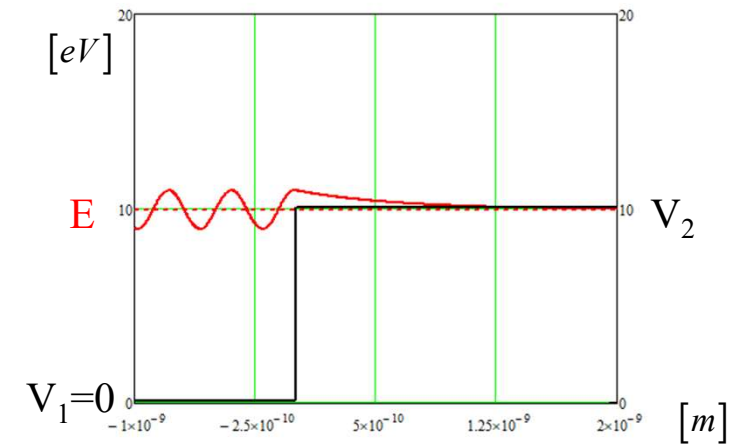


$$r_{12} = \frac{K_1 - K_2}{K_1 + K_2}$$

$$t_{12} = \frac{2K_1}{K_1 + K_2}$$

$$R = |r_{12}|^2$$

$$T = 1 - R = \frac{K_2}{K_1} \cdot |t_{12}|^2$$



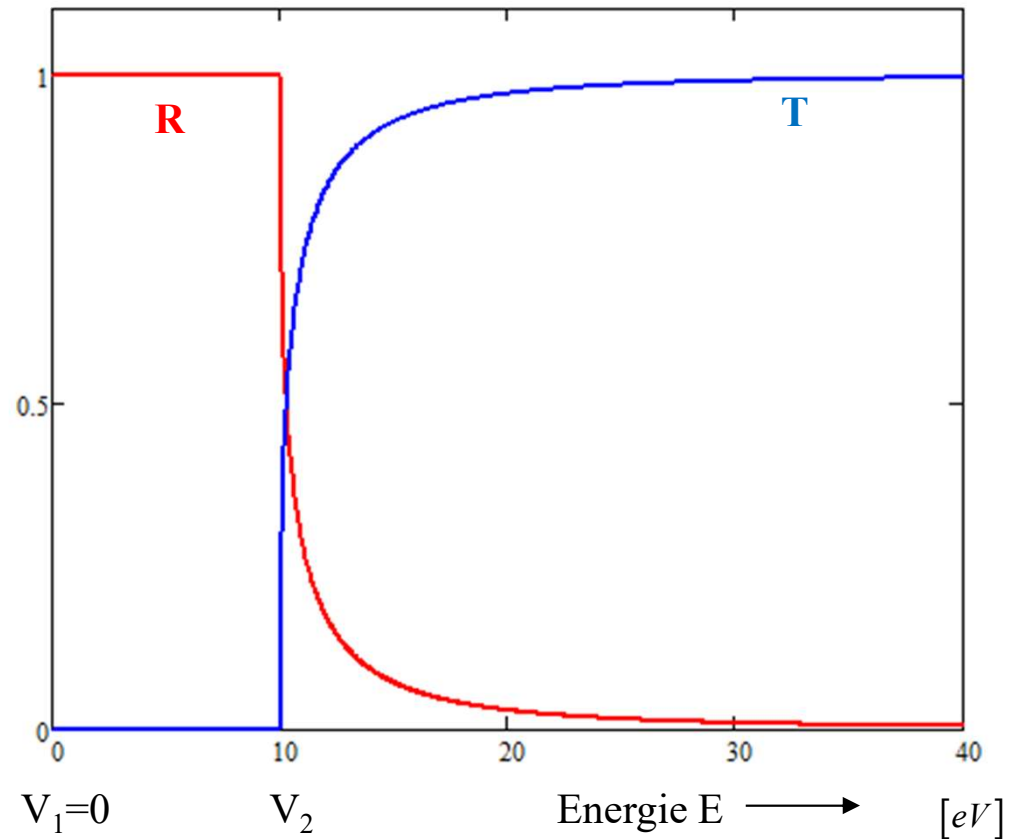
# Réflexion sur un step de potentiel

$$r_{12} = \frac{K_1 - K_2}{K_1 + K_2}$$

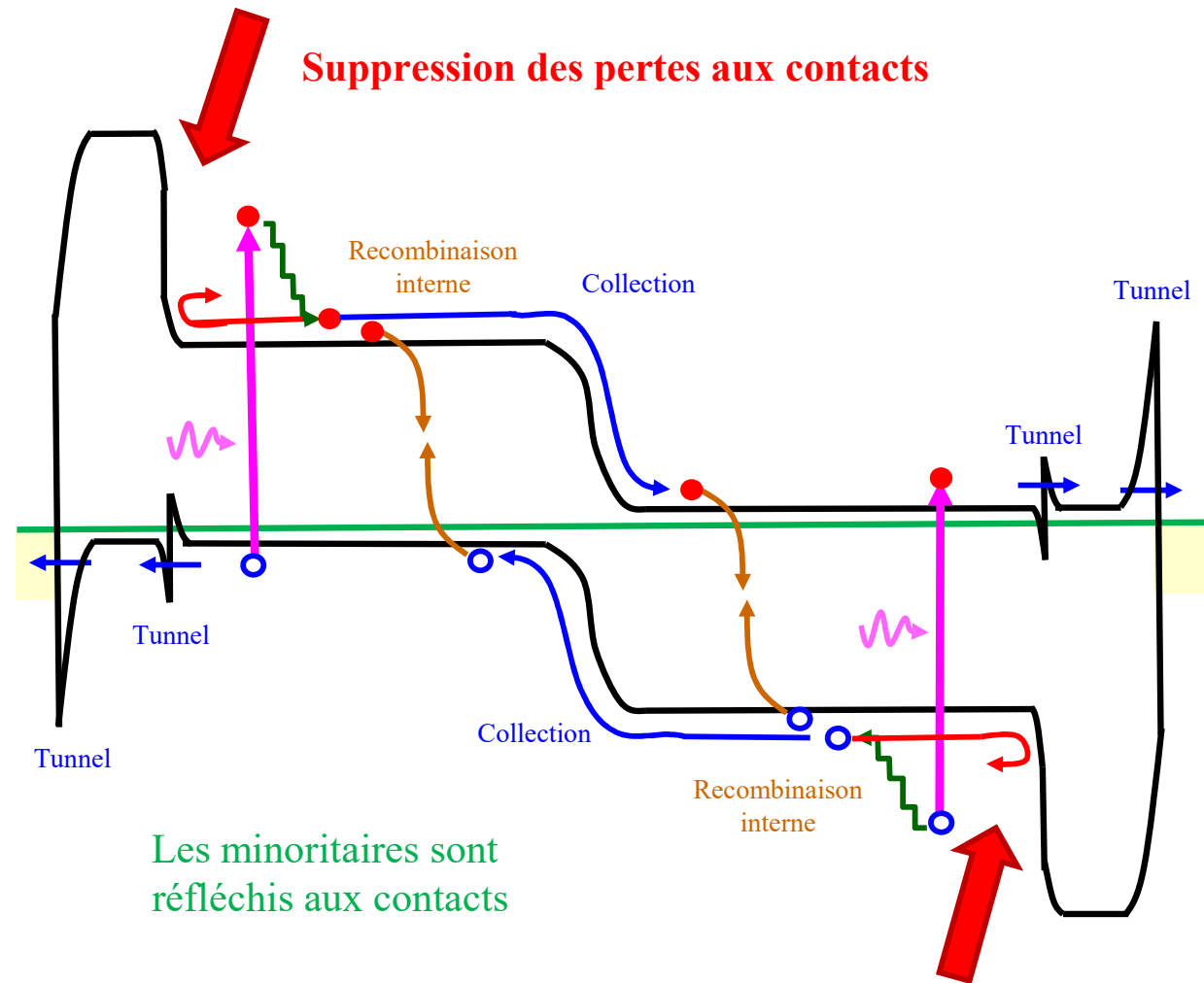
$$t_{12} = \frac{2K_1}{K_1 + K_2}$$

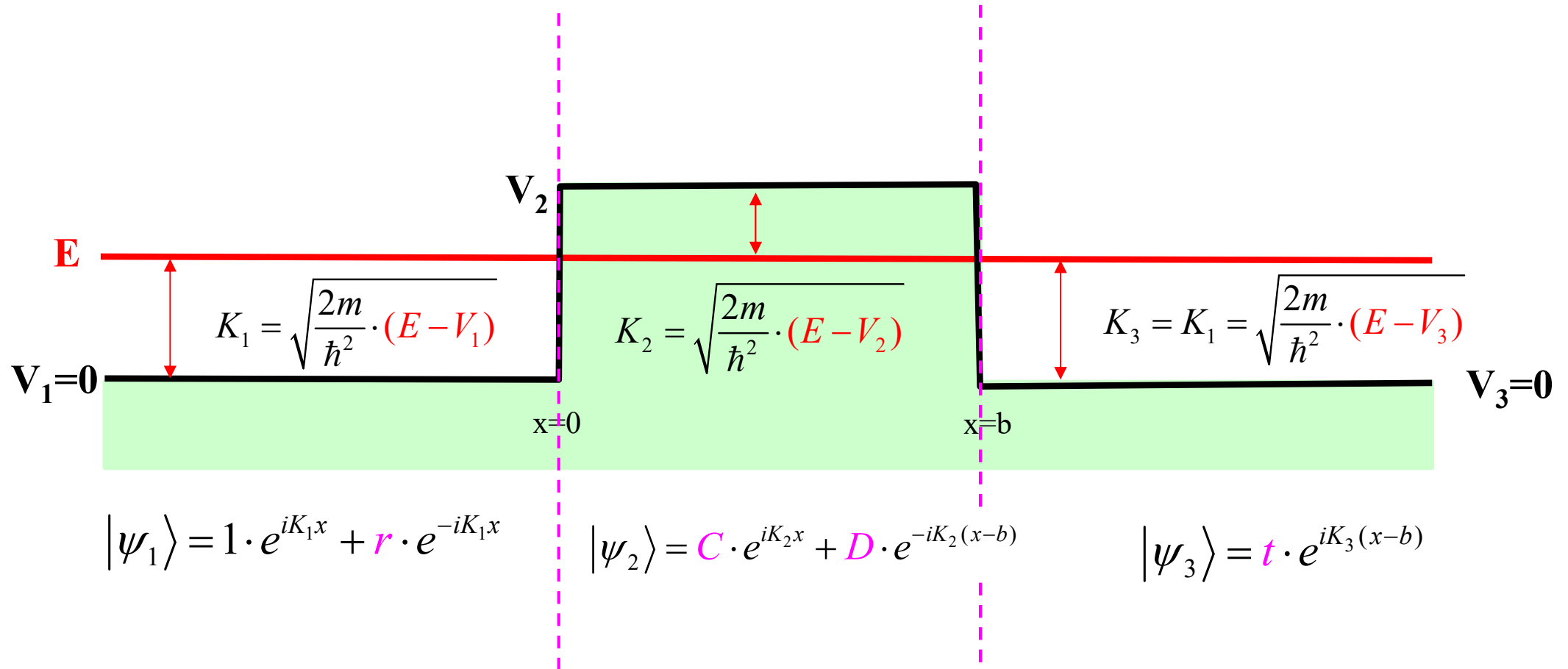
$$R = |r_{12}|^2$$

$$T = 1 - R$$



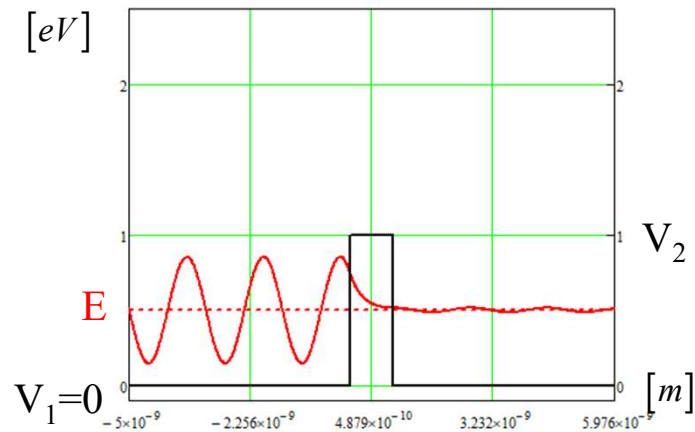
# Réflexion: cellule solaire hétérostructure réflexive





Aux interfaces, la fonction d'onde et sa dérivée sont continues → déterminer r et t



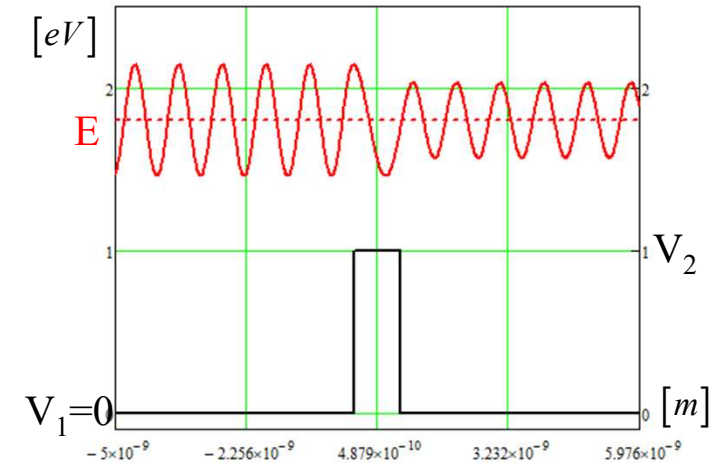
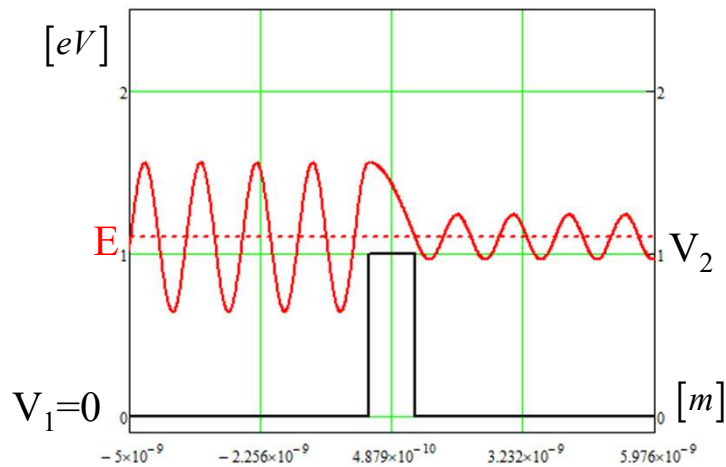
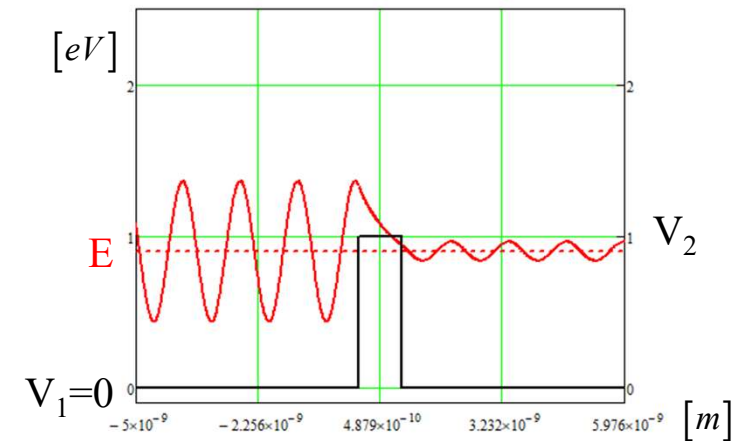


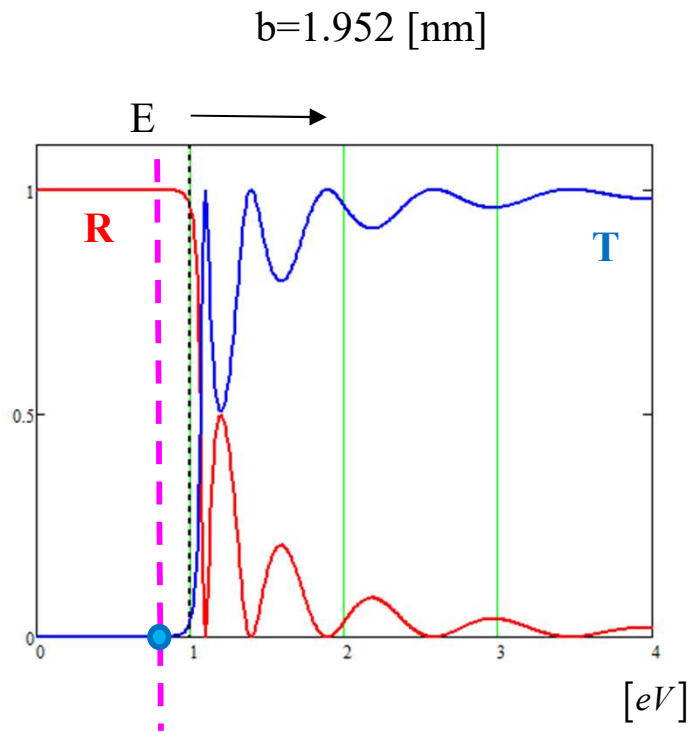
$$r_{12} = -r_{23} = \frac{K_1 - K_2}{K_1 + K_2}$$

$$r = \frac{r_{12} + r_{23} \cdot e^{2iK_2b}}{1 + r_{12} \cdot r_{23} \cdot e^{2iK_2b}}$$

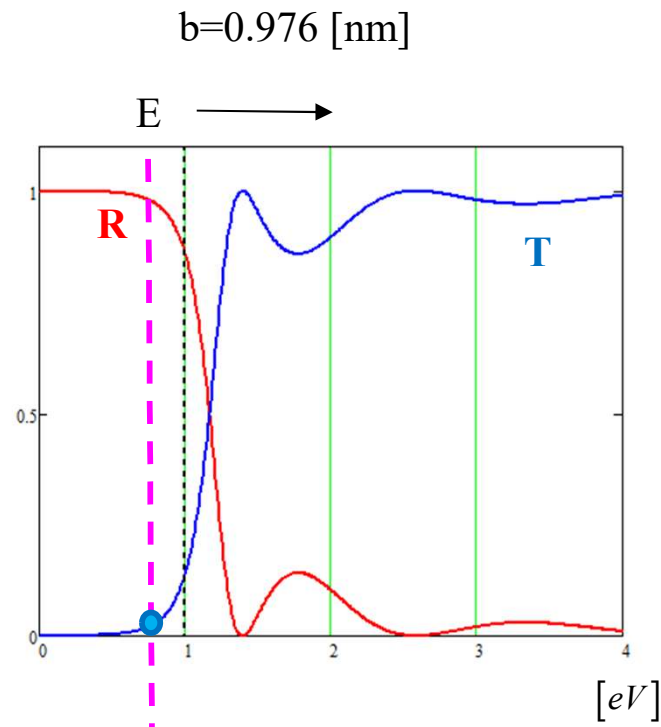
$$R = |r|^2$$

$$T = 1 - R$$

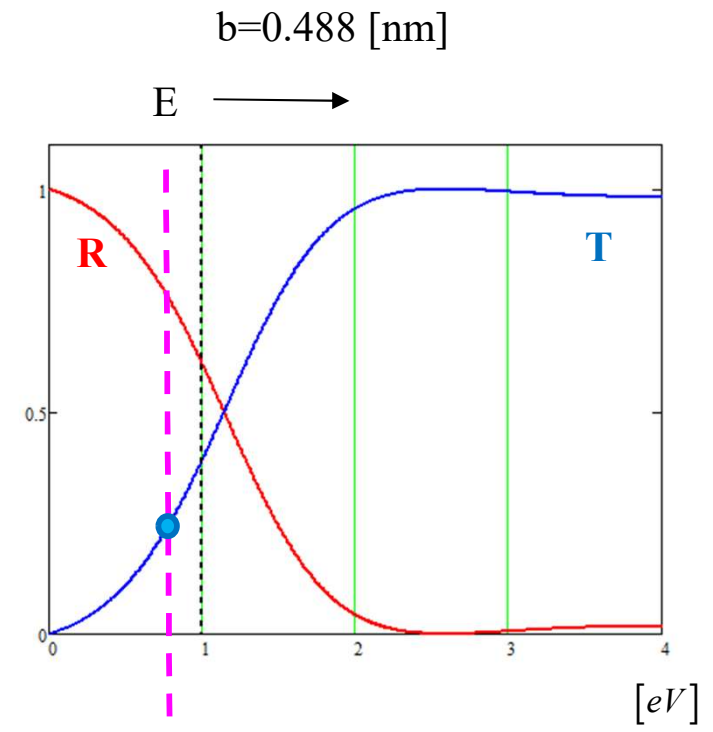




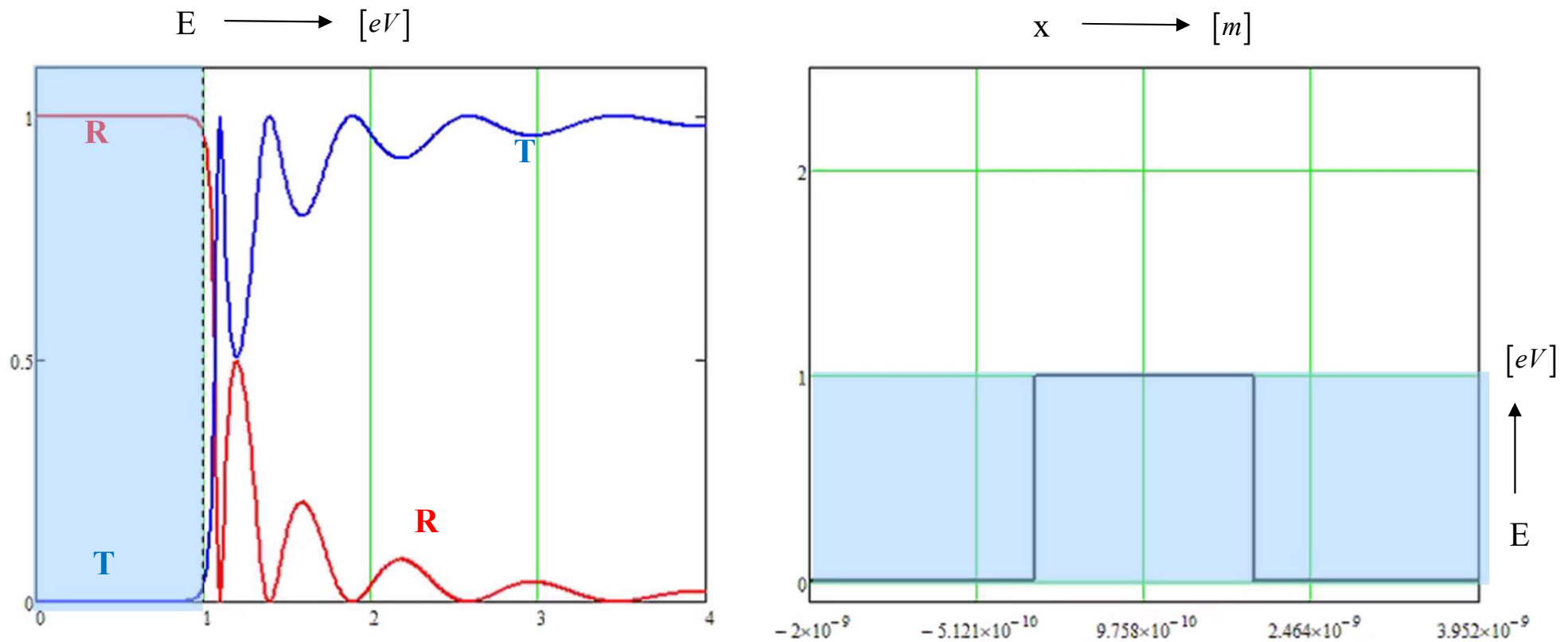
Barrière deux fois plus large



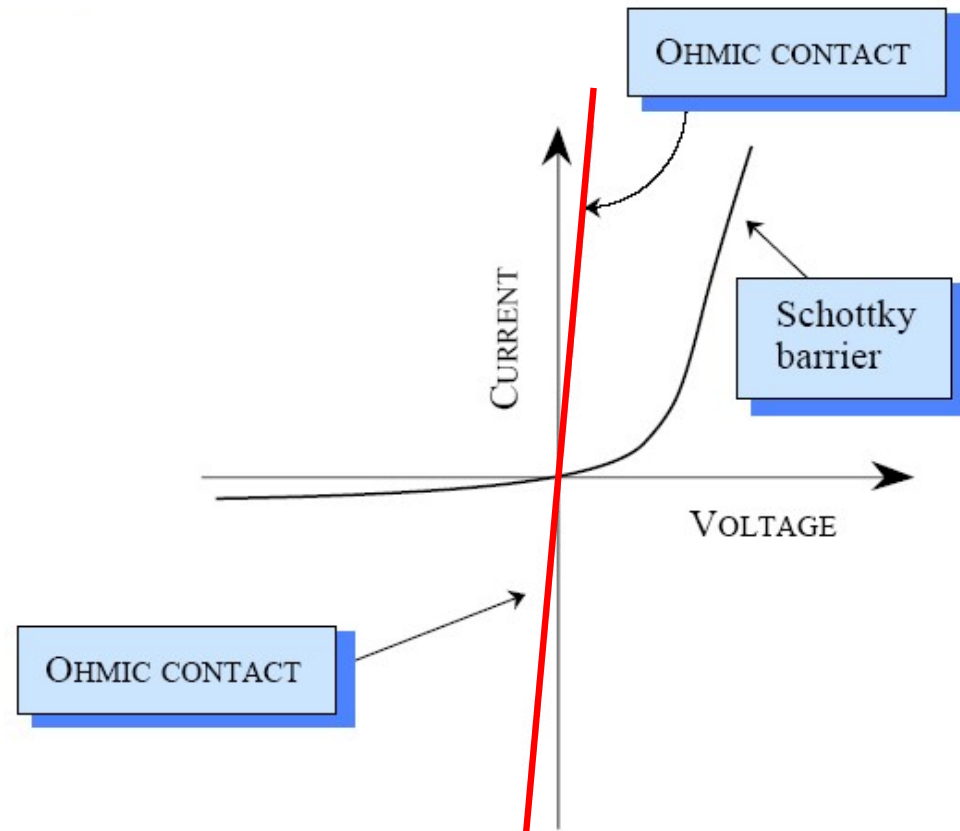
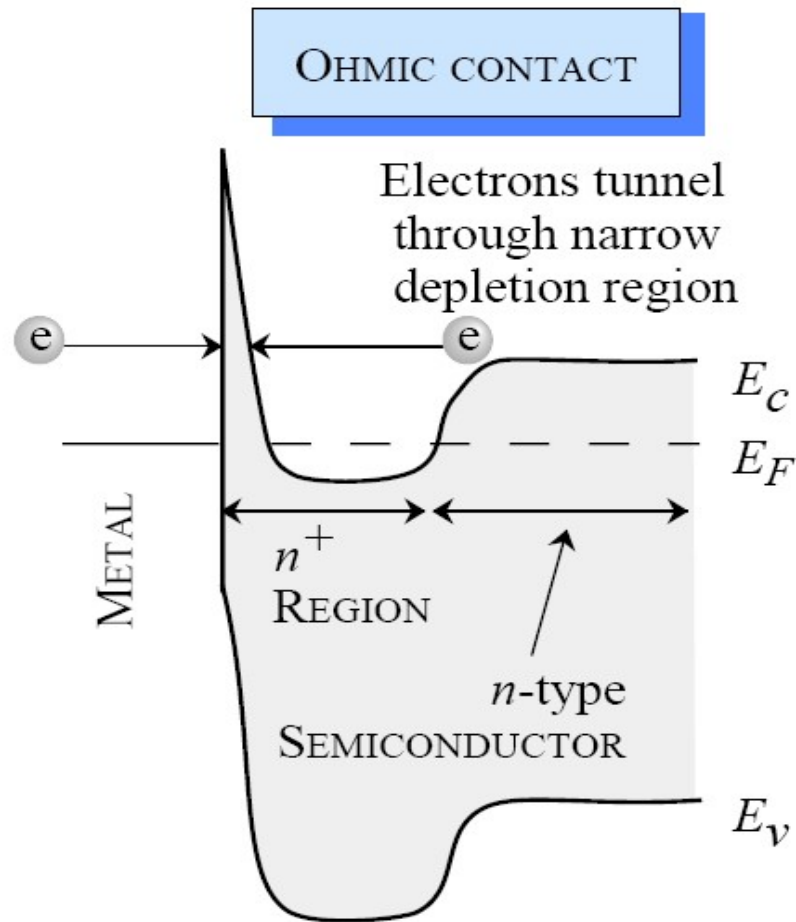
Barrière de référence



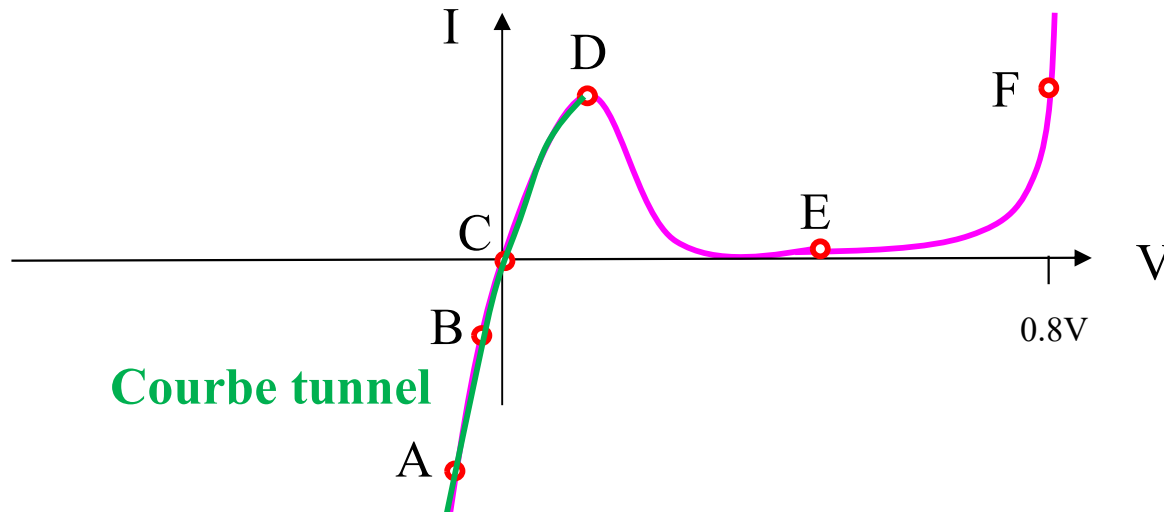
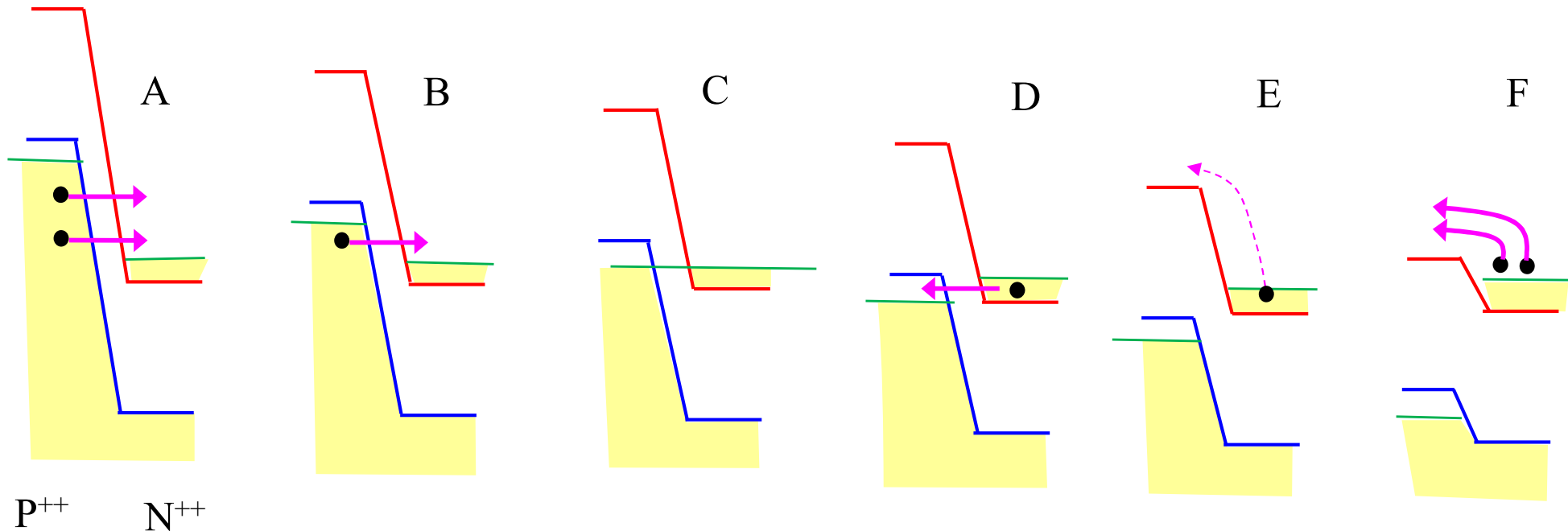
Barrière deux fois plus fine



# Effet tunnel (1) contact ohmique



J. Singh « *Semiconductor devices* »

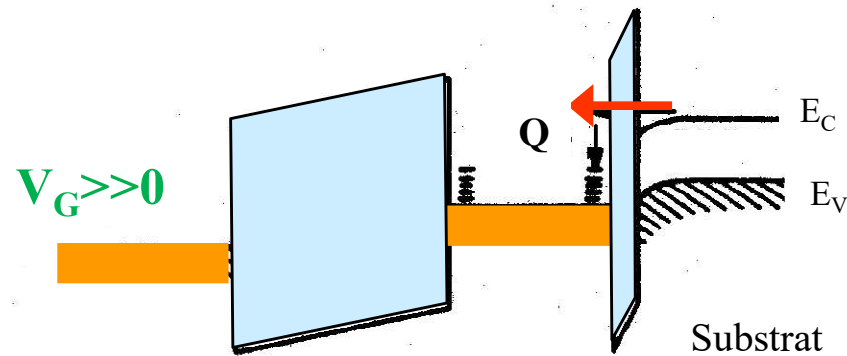


Courbe tunnel

FRONT

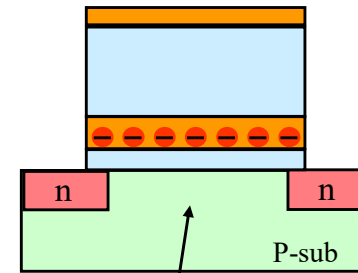


# Effet tunnel (5) floating gate memories

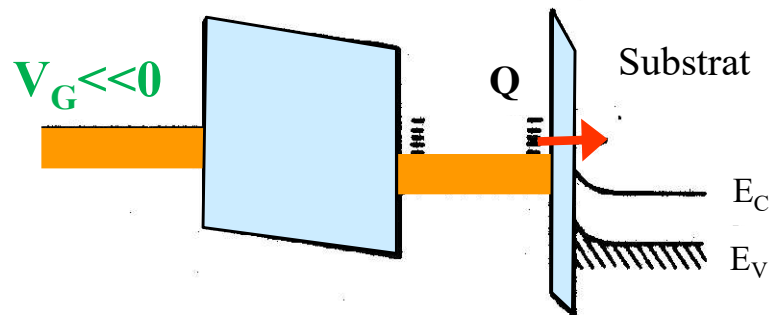


Écriture:  $V_G \gg 0$

“1” state

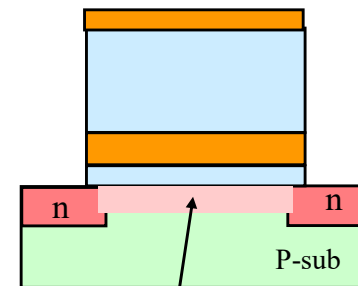


Pas de canal

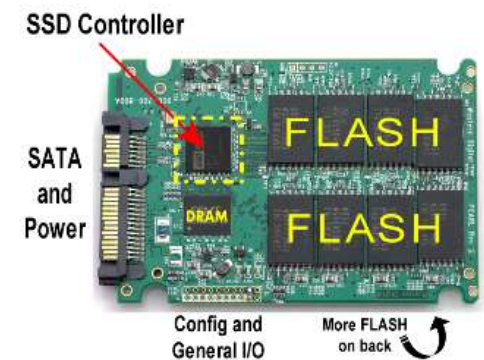


Effacer:  $V_G \ll 0$

“0” state

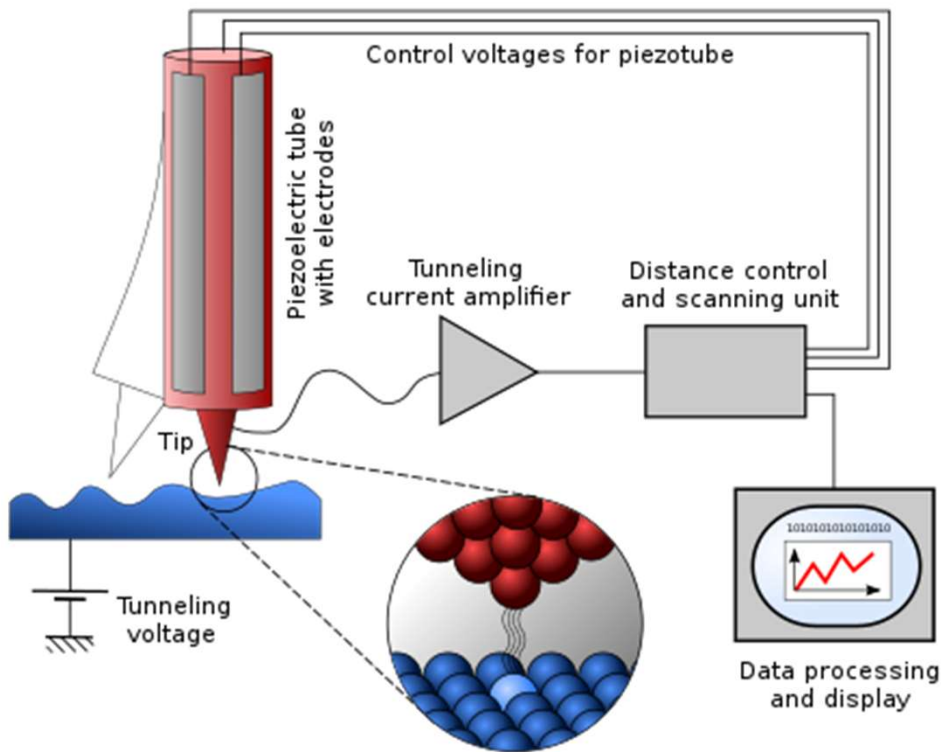


Canal n



S. Sze « *Physics of semiconductor devices* »

# Scanning tunnel microscope (STM)



[https://en.wikipedia.org/wiki/Scanning\\_tunneling\\_microscope](https://en.wikipedia.org/wiki/Scanning_tunneling_microscope)

<https://www.nanoscience.com/techniques/scanning-tunneling-microscopy/>

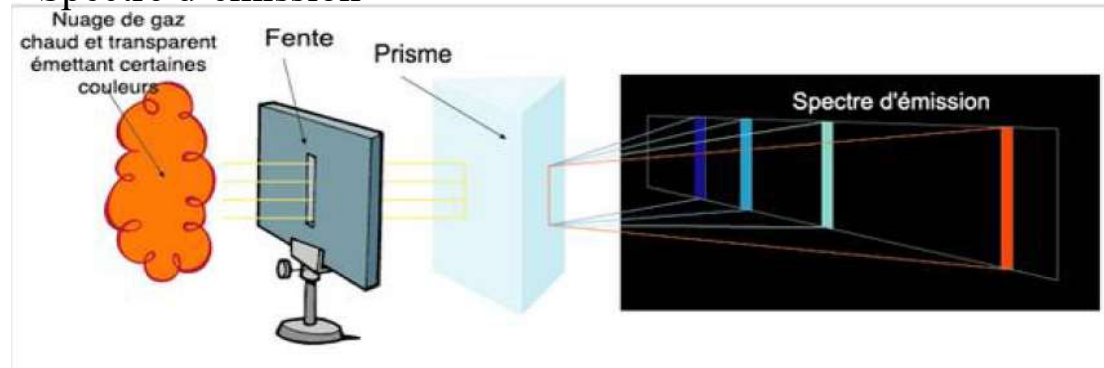


Puits de potentiel

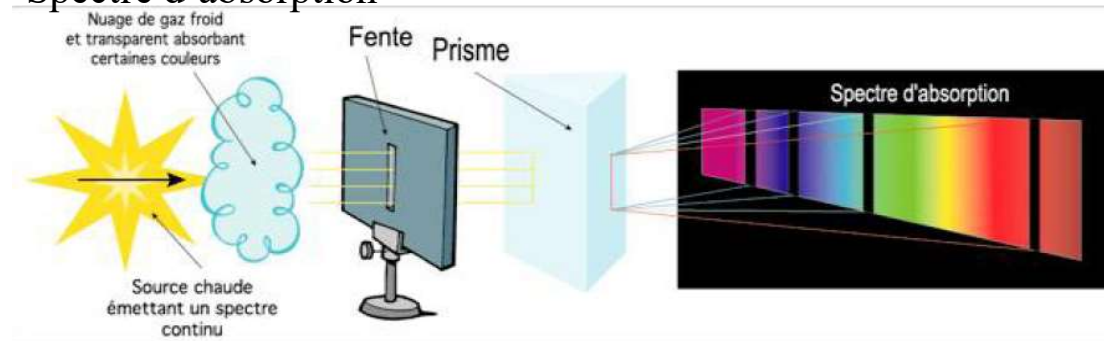
Atomes

# Spectres d'émission et d'absorption

## Spectre d'émission



## Spectre d'absorption

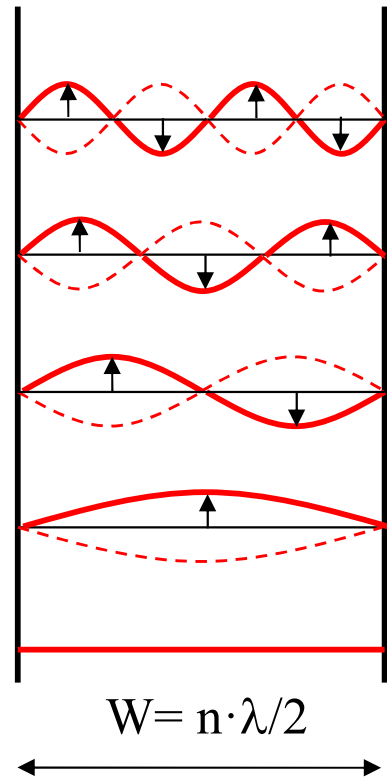


Les atomes ont des niveaux d'énergie discrets !



$$E = \frac{P^2}{2m} = \frac{\hbar^2 K^2}{2m}$$

$$E = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mW^2}$$



$n=$

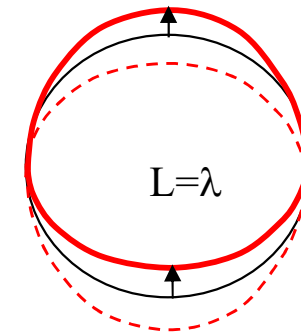
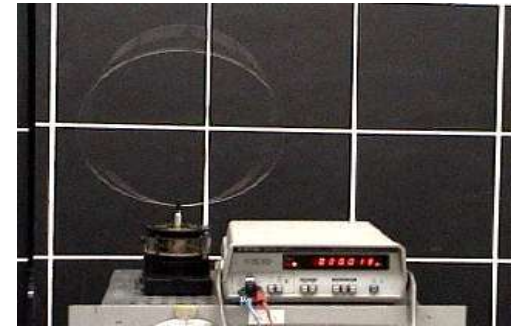
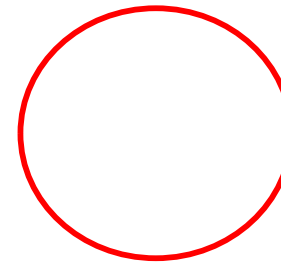
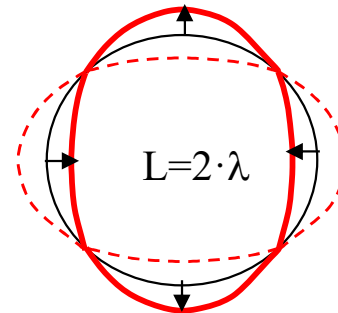
4

3

2

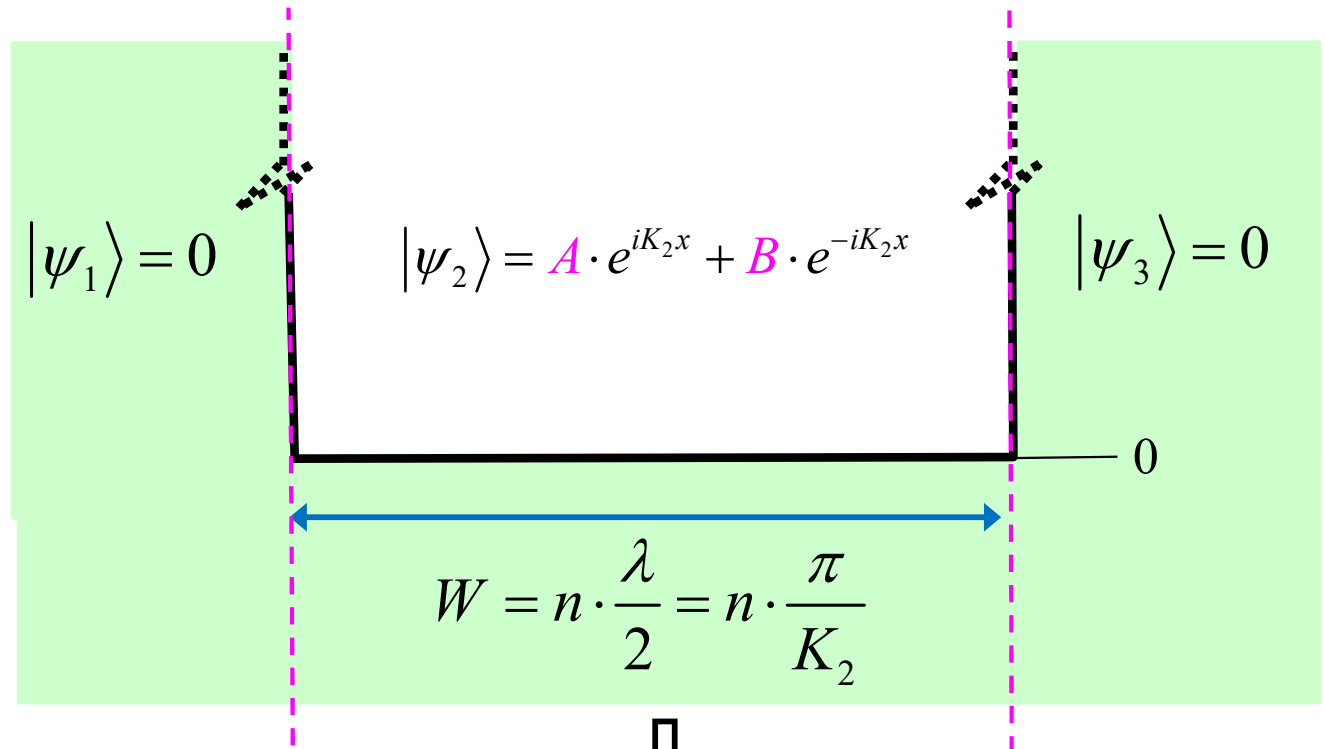
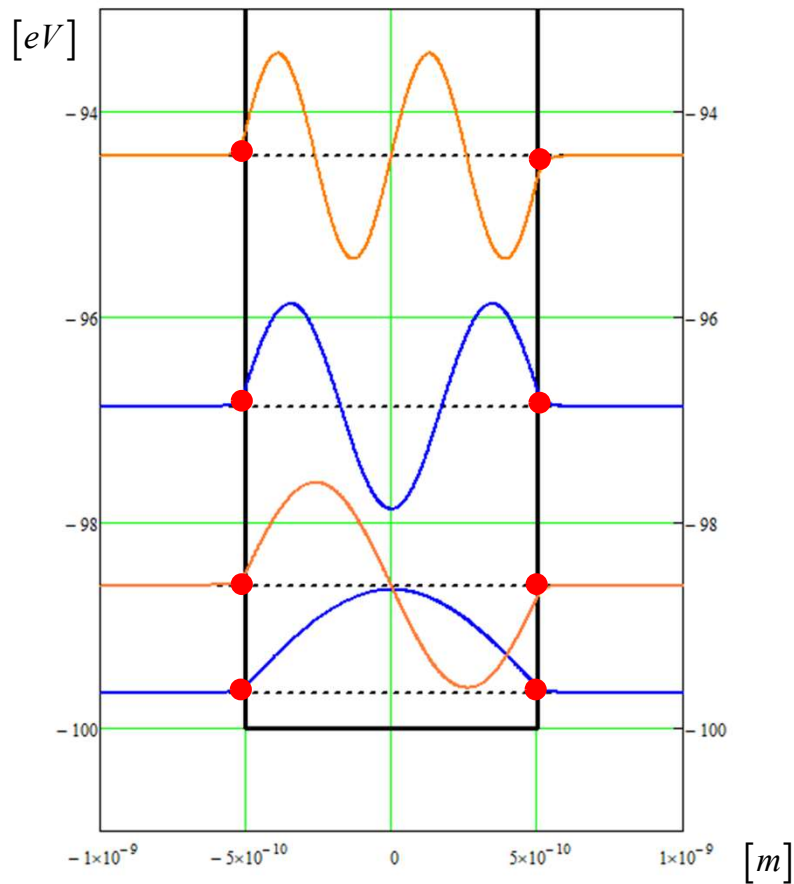
1

0



# Potentiel rectangulaire

# Puits quantique infini 1D



$$W = n \cdot \frac{\lambda}{2} = n \cdot \frac{\pi}{K_2}$$

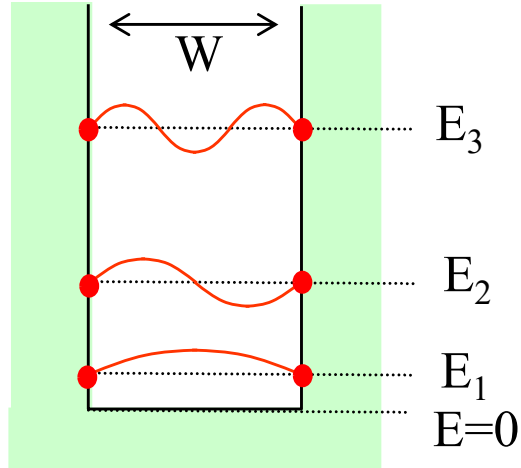


$$K_2 = n \cdot \frac{\pi}{W}$$

Points équidistants

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} K_2^2 = \left( \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m \cdot W^2} \right) \cdot n^2$$

## Puits infini



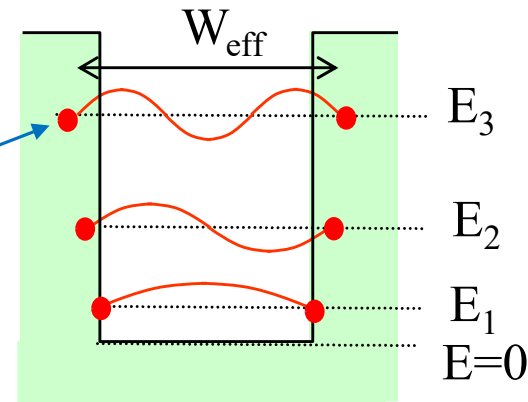
$$n \frac{\lambda}{2} = W$$

$$E_n = \frac{\hbar^2 K^2}{2m} = n^2 \cdot \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m W^2}$$

« Etats discrets »

## Puits fini

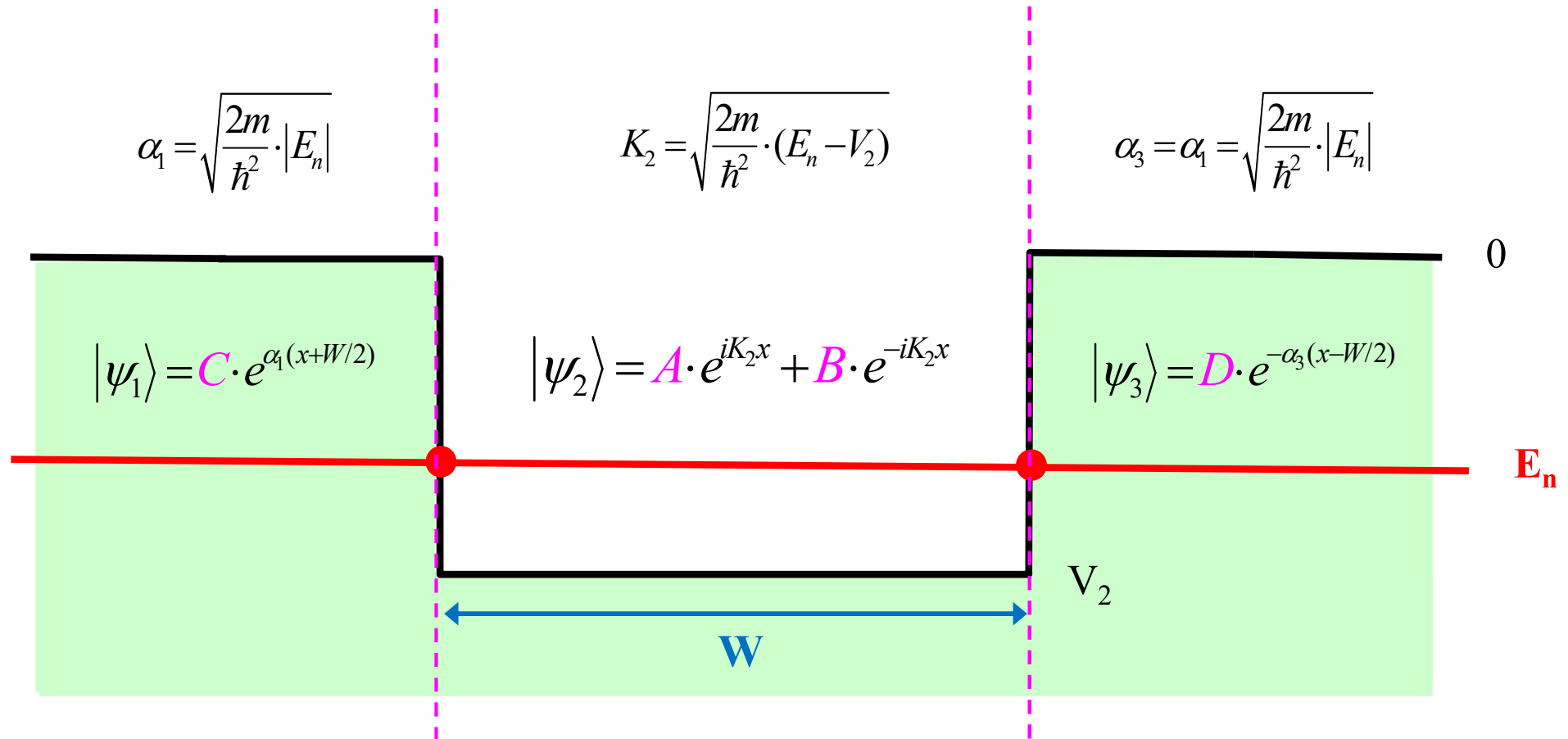
Ondes évanescentes



Pénétration latérale  
surtout pour états supérieurs

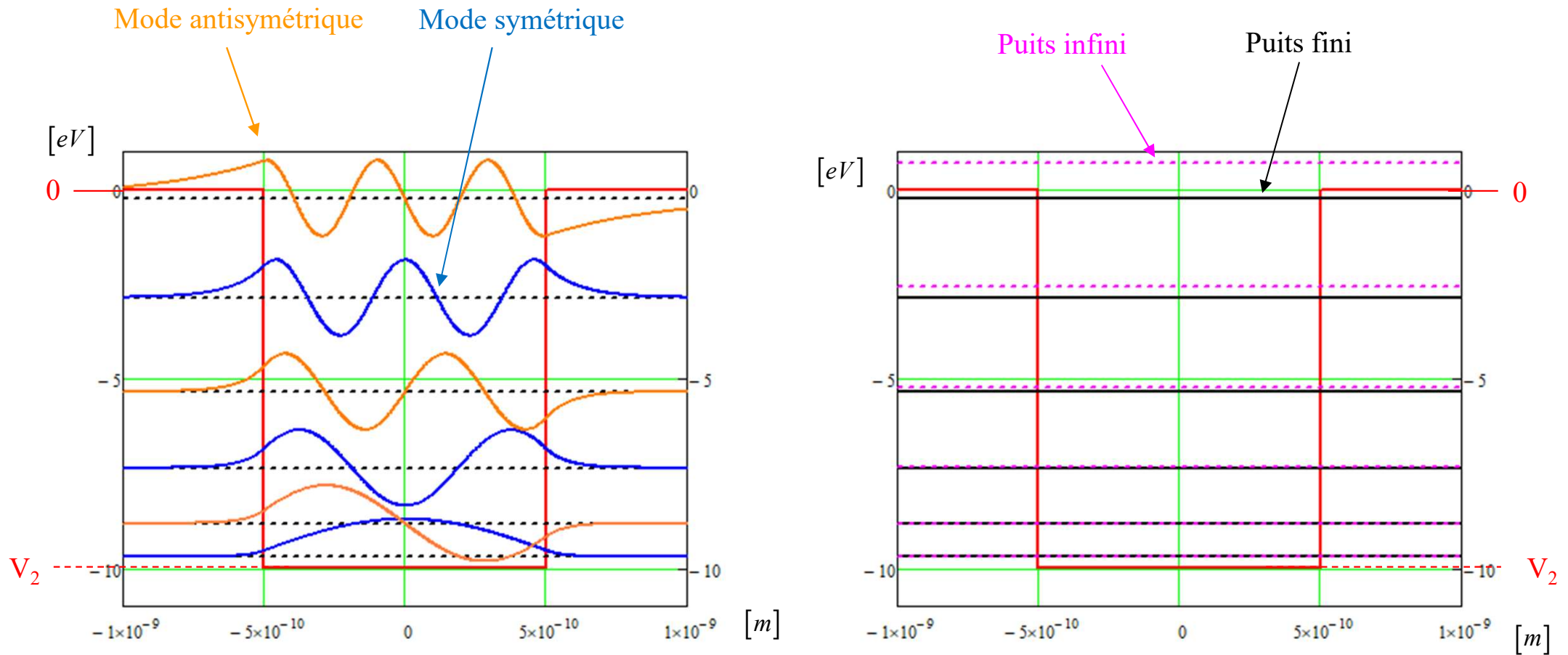
$$E_n \cong n^2 \cdot \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m W_{eff}^2}$$

# Puits quantique fini, 1D



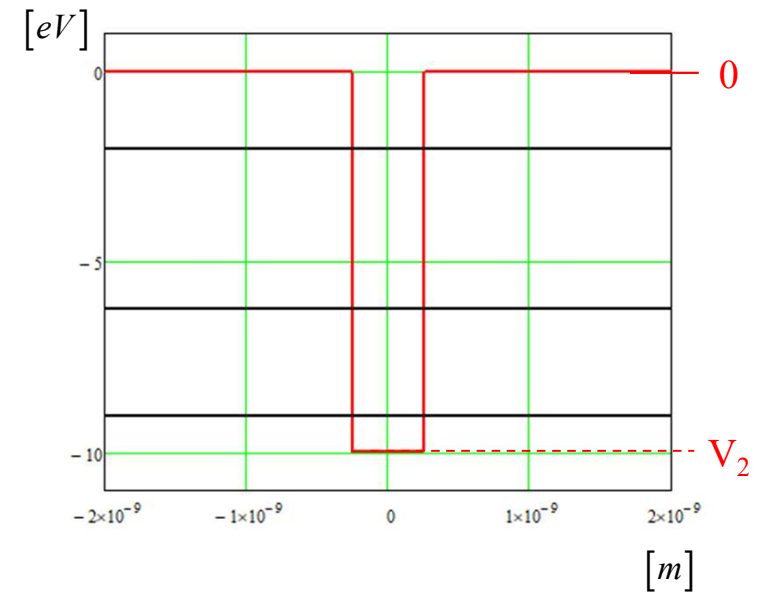
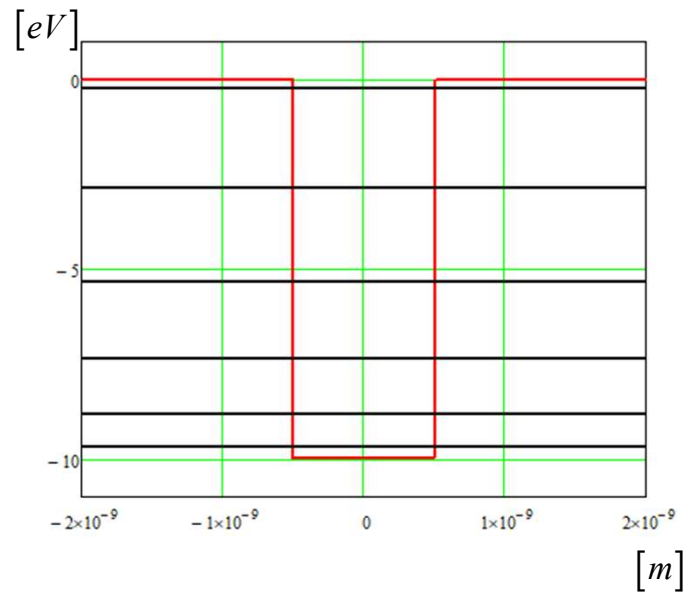
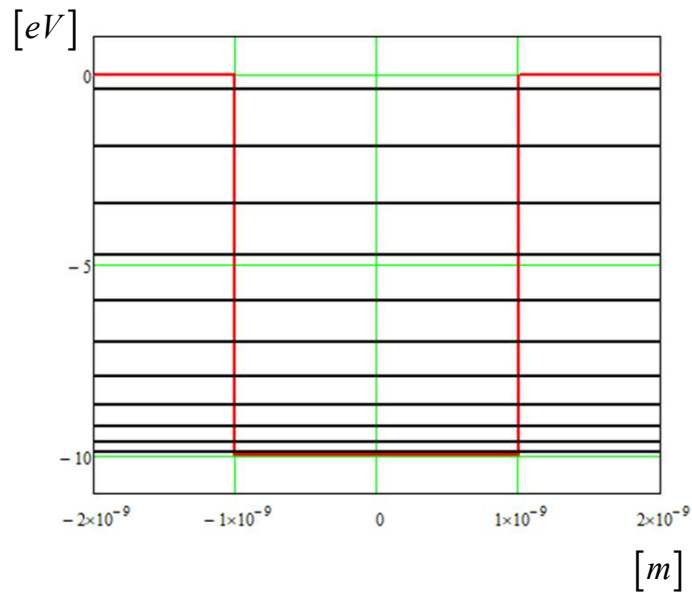
Aux interfaces, la fonction d'onde et sa dérivée sont continues  
 → déterminer A,B,C,D et  $E_n$

# Puits de potentiel





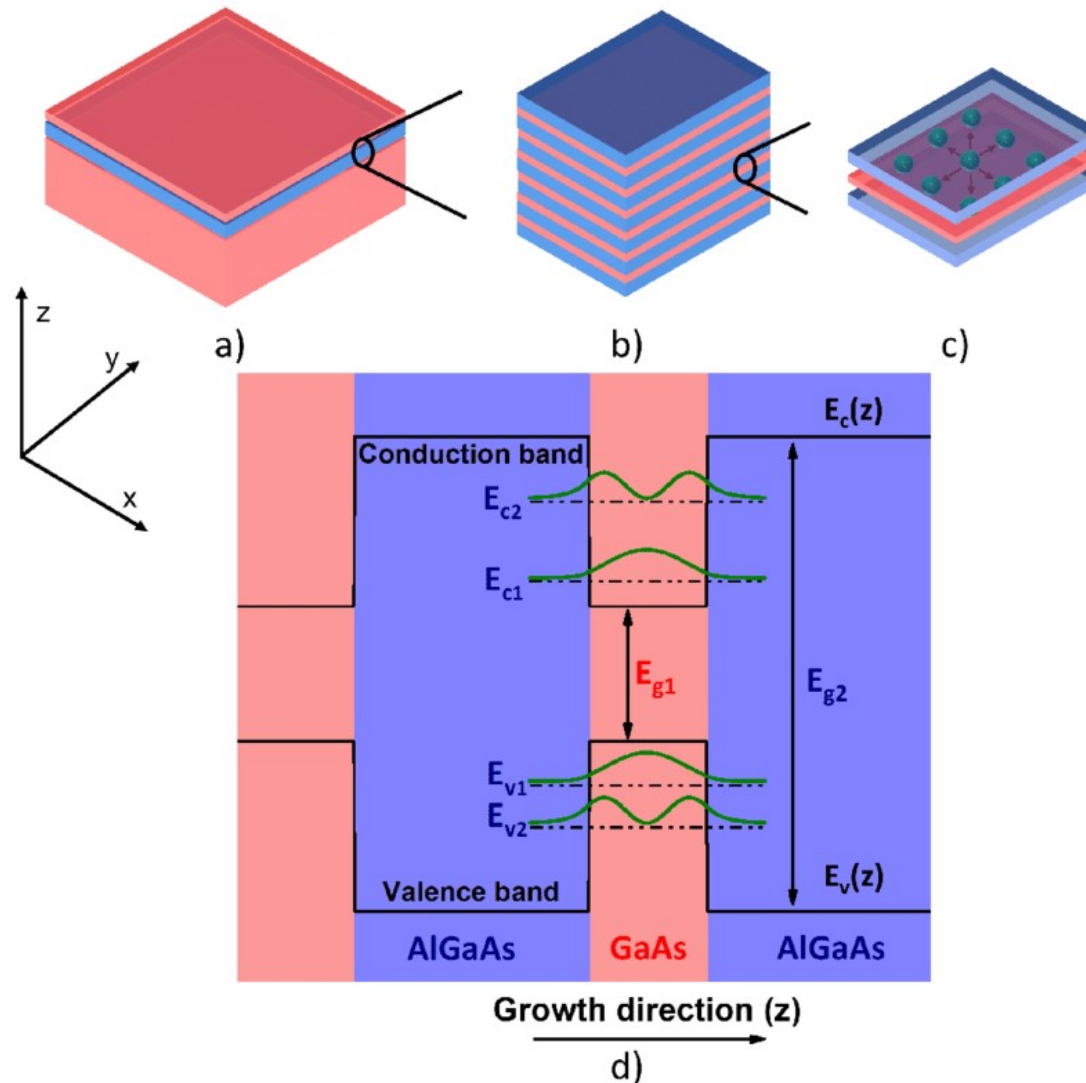
# Puits de potentiel



$$E_n - V_2 \approx n^2 \cdot \frac{1}{W_{eff}^2}$$

# Quantum Wells

[https://www.researchgate.net/publication/348894632\\_Mid-Infrared\\_Intersubband\\_Polaritonic\\_Devices](https://www.researchgate.net/publication/348894632_Mid-Infrared_Intersubband_Polaritonic_Devices)

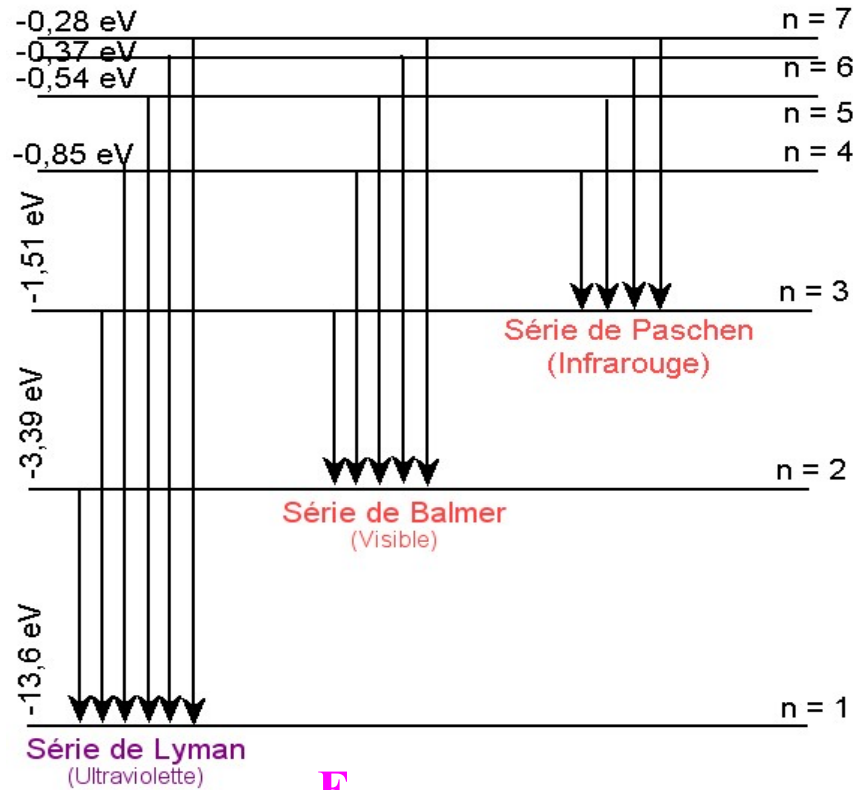


## 2D electron gas

- $K_z$  discret
- $K_x$  et  $K_y$  continus

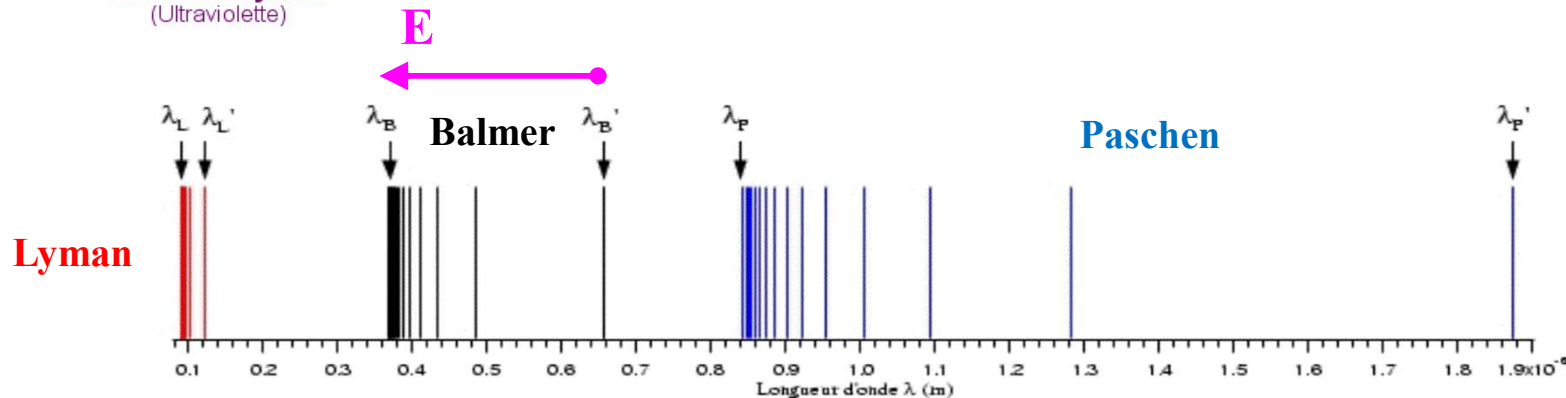
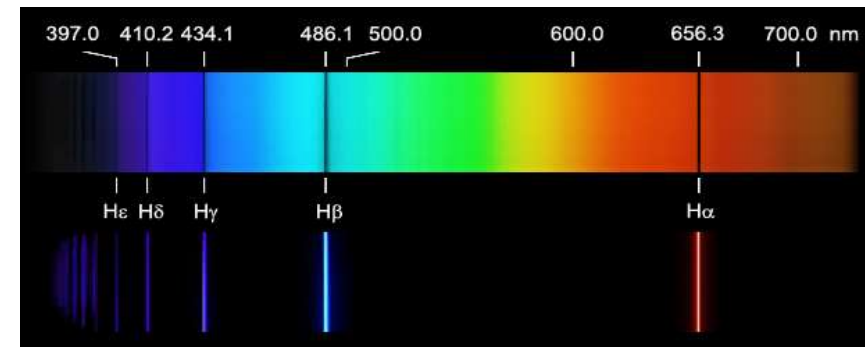
# Potentiel de Coulomb et Atome d'hydrogène

# Spectre de l'hydrogène



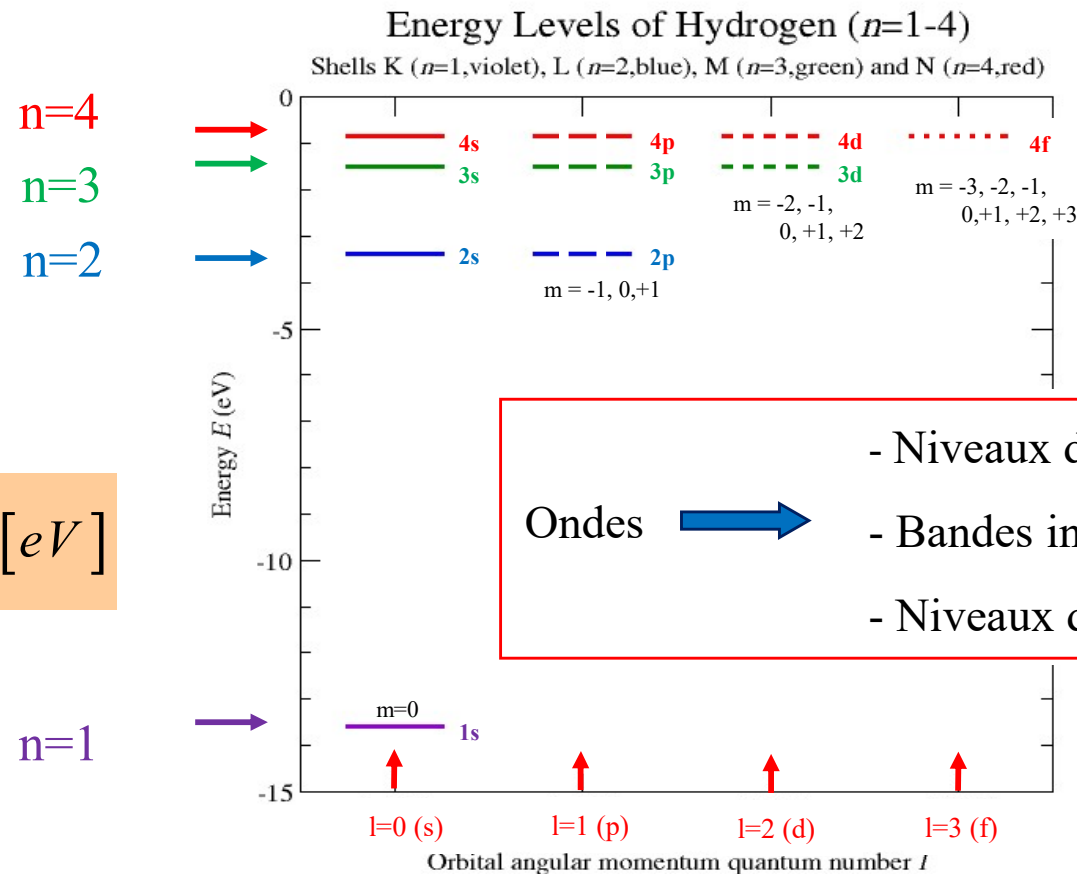
<http://physiquereussite.fr/latome2/spectre-hydrogene-balmer/>

## Série de Balmer en visible



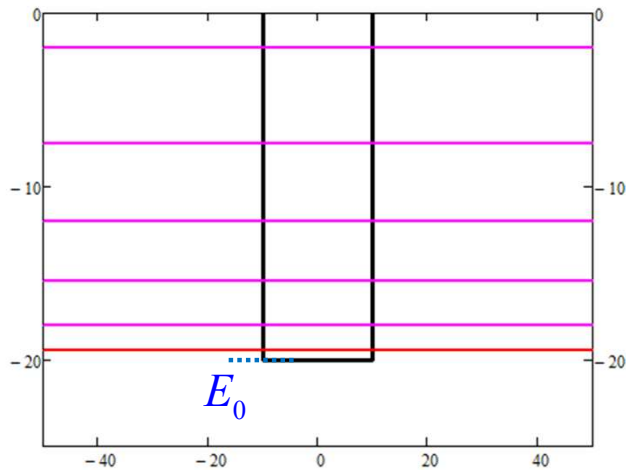
# Niveaux d'énergie de l'hydrogène

$$E_n = -13.6 \cdot \frac{1}{n^2} \quad [eV]$$



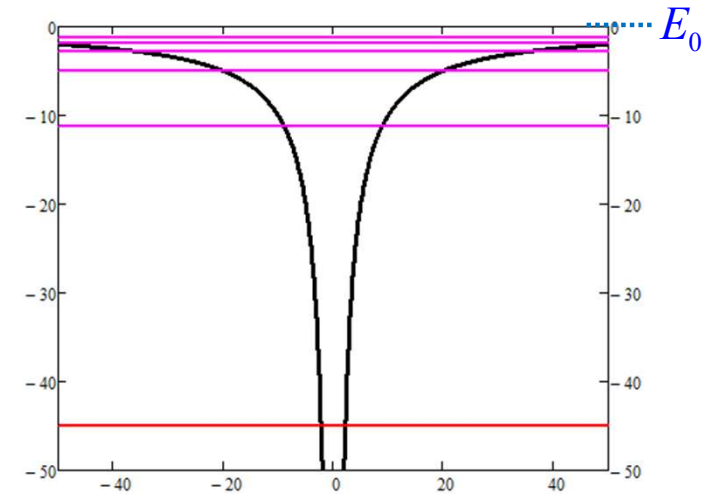
[http://en.wikipedia.org/wiki/Laplace-Runge-Lenz\\_vector](http://en.wikipedia.org/wiki/Laplace-Runge-Lenz_vector)

## Potentiel rectangulaire



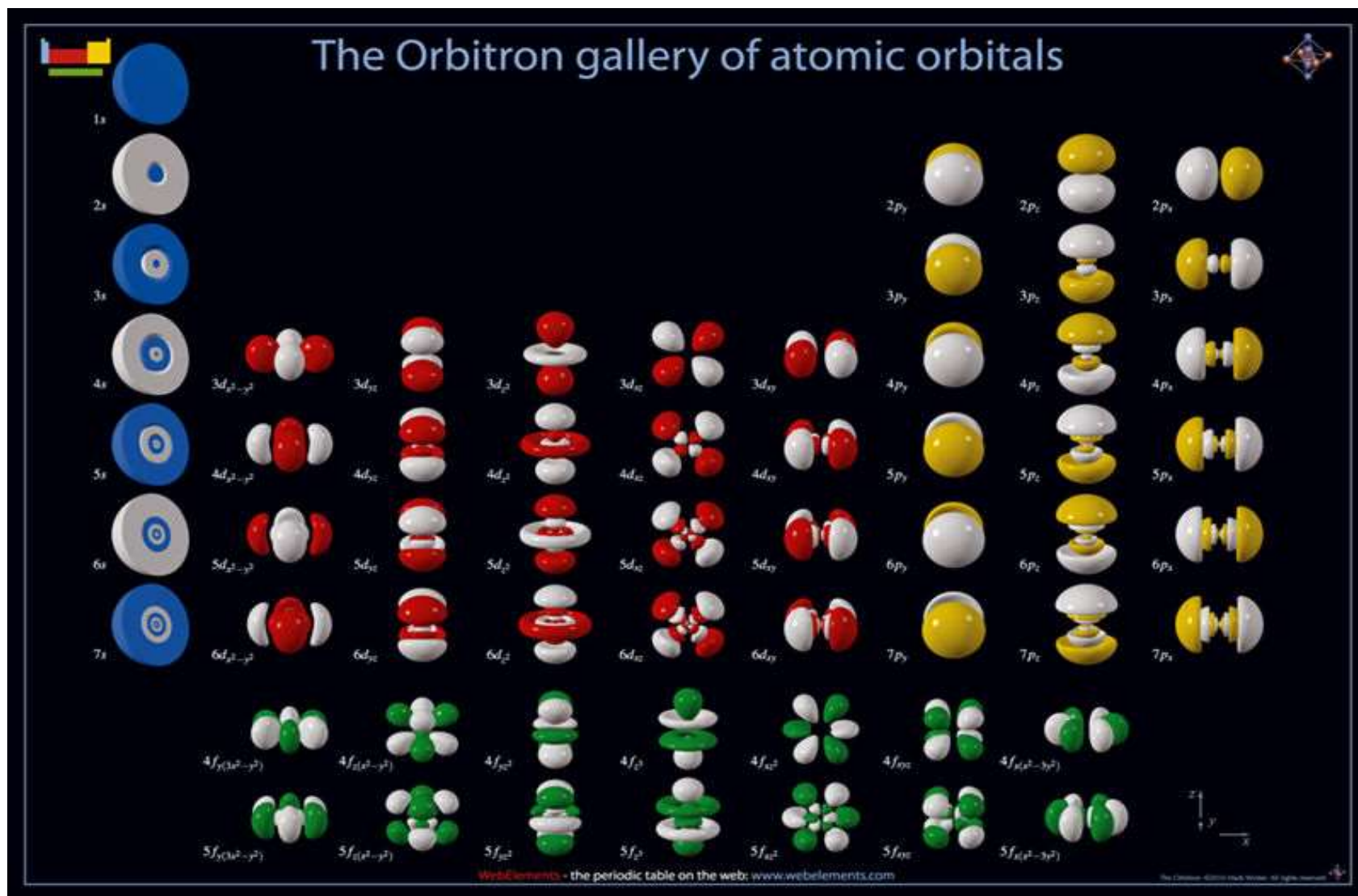
$$E_n - E_0 \approx \frac{n^2}{W^2}$$

## Potentiel en 1/r



$$E_n - E_0 \approx -\frac{1}{n^2}$$

# Orbitales atomiques



[www.webelements.com/shop/](http://www.webelements.com/shop/)

# Potentiel quadratique et Oscillateur harmonique



## Vibrations cristallines («phonons»):

Oscillations de l'énergie cinétique à l'énergie potentielle

$$H = \frac{1}{2m} P^2 + \frac{\kappa}{2} X^2$$

## Ondes électromagnétiques («photons»):

Oscillations de l'énergie du champ E et celle du champ B

$$H = \frac{\epsilon_0}{2} |E|^2 + \frac{1}{2\mu_0} |B|^2$$

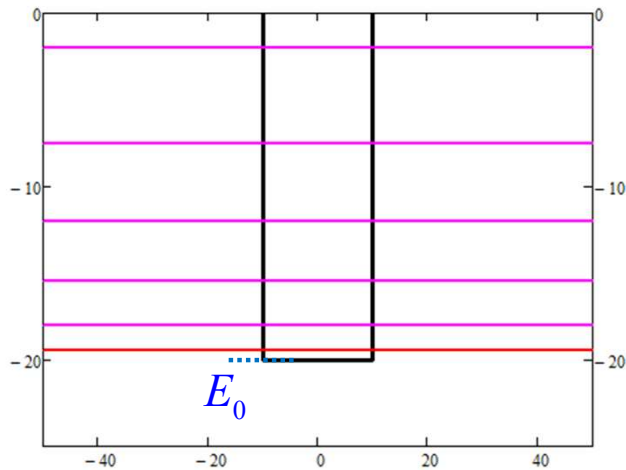
## Résonateurs LC:

Oscillations de l'énergie dans la capacité et celle dans l'inductance

$$H = \left( \frac{1}{2C} Q^2 \right) + \left( \frac{1}{2L} \phi^2 \right)$$

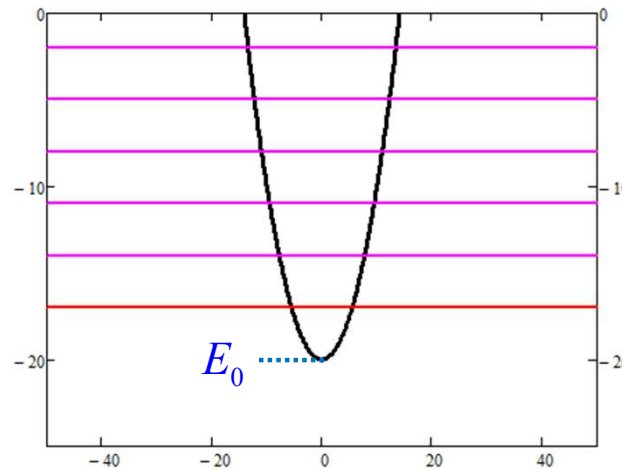
# Formes du potentiel

## Potentiel rectangulaire



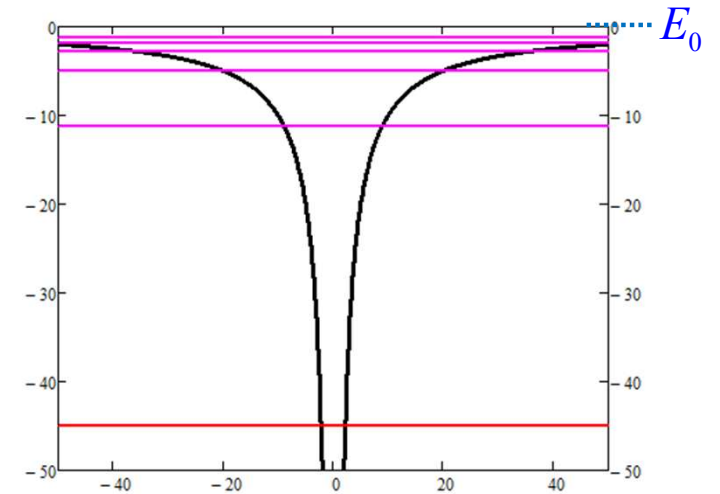
$$E_n - E_0 \approx n^2$$

## Potentiel quadratique



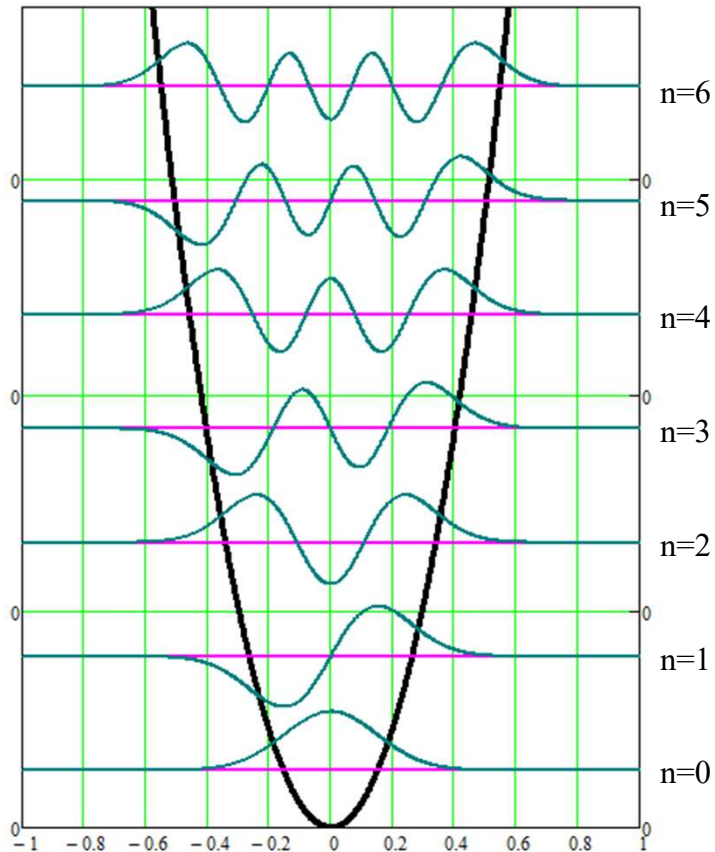
$$E_n - E_0 \approx n$$

## Potentiel en 1/r



$$E_n - E_0 \approx -\frac{1}{n^2}$$

## Modes propres de l'équation de Schroedinger:



$$i\hbar \cdot \frac{\partial}{\partial t} |\psi_n\rangle = E_n \cdot |\psi_n\rangle = \frac{\hbar\omega}{2} \cdot (\mathbf{P}^2 + \mathbf{Q}^2) \cdot |\psi_n\rangle$$

Energie  
cinétique



Energie  
potentielle

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

$$|\psi_n\rangle = A_n \cdot e^{-\frac{Q^2}{2}} \cdot H_n(Q)$$

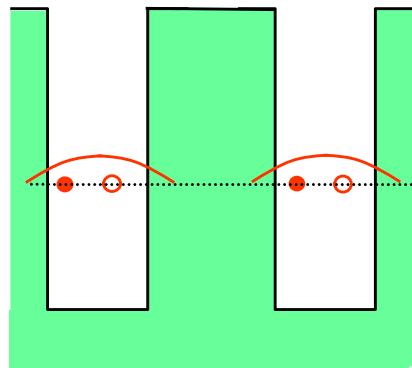
Polynômes  
Hermite

Couplage de puits

Molécules

# Deux atomes: états liants et anti-liants

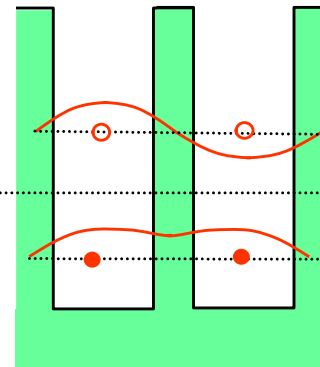
Deux atomes séparés  
avec 1 électron chacun



Hybridation



Deux atomes proches  
avec 1 électron chacun

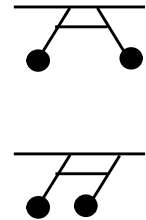


$E_2$

Anti-liant

$E_1$

Liant



Deux états identiques:

- localisés
- deux spins possibles par état
- un électron dans chaque puits

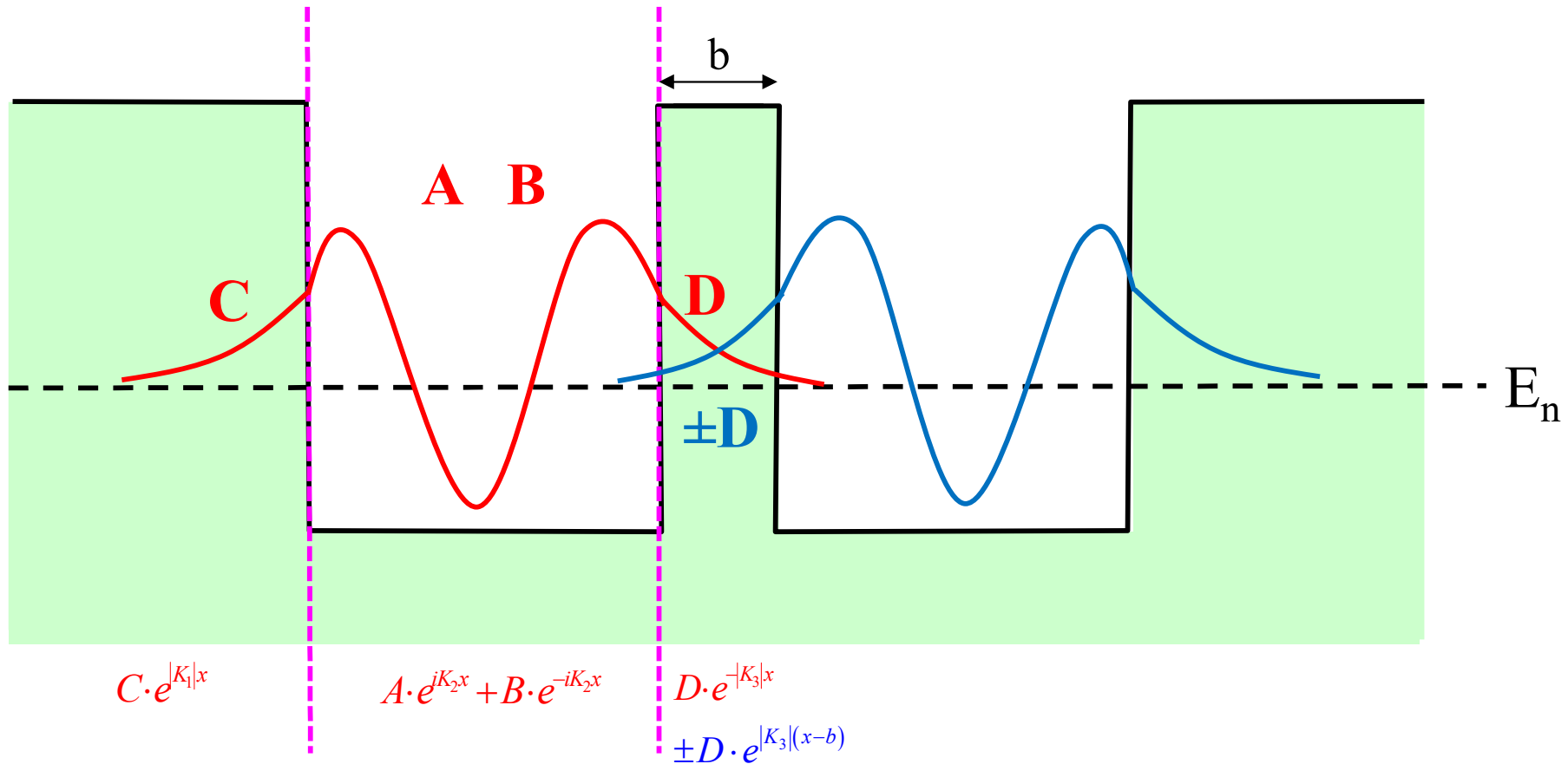
Etat « liant »:

- énergie profonde, occupé par un électron de chaque atome.

Etat « anti-liant »:

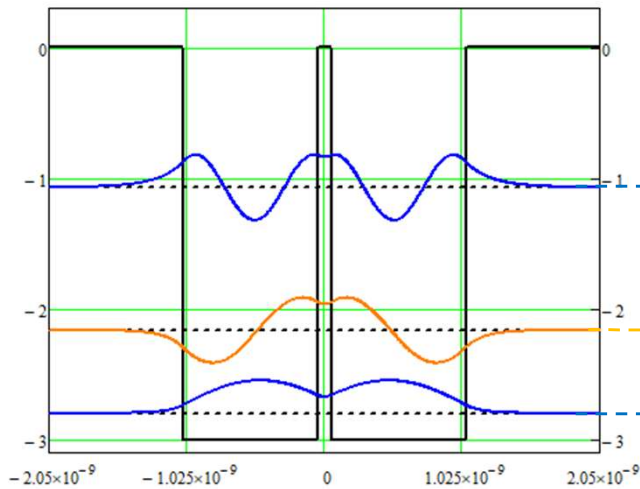
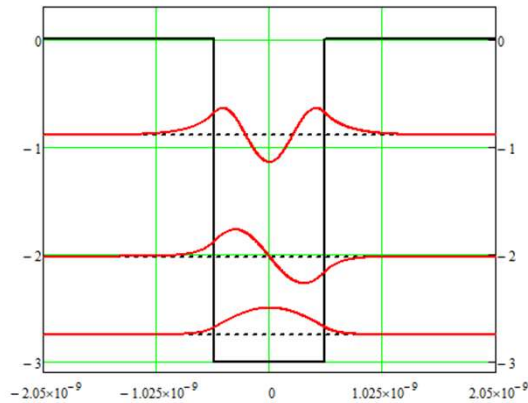
- énergie supérieure, libre à basse température

# Calcul des fonctions d'ondes et des énergies pour deux puits couplés

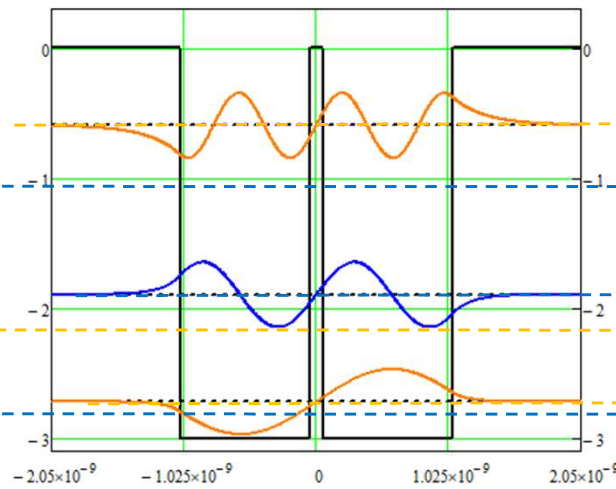


Aux interfaces, la fonction d'onde et sa dérivée sont continues  
→ déterminer  $A, B, C, D$  et  $E_n$

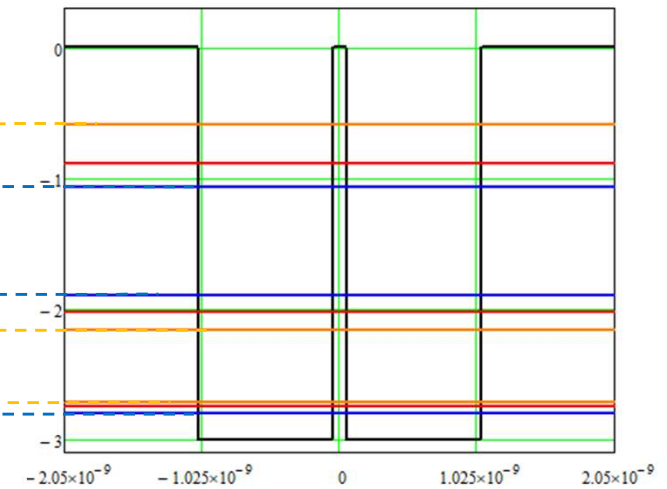
# Double puits: couplage fort



Modes symétriques

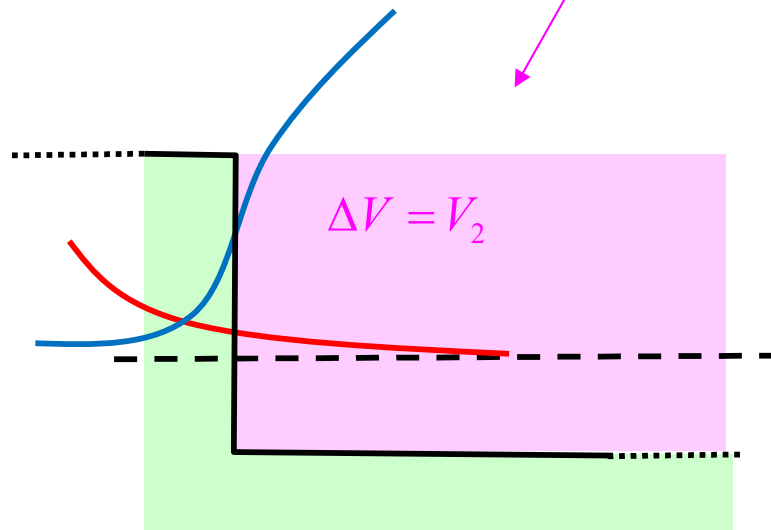
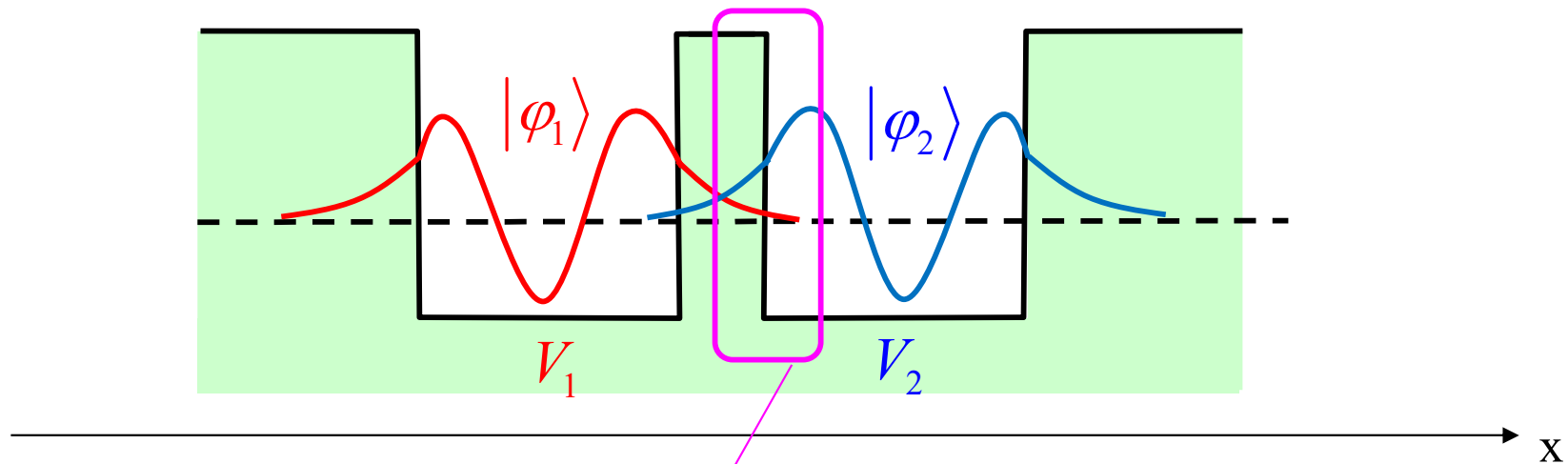


Modes asymétriques



Energies

# Théorie des perturbations



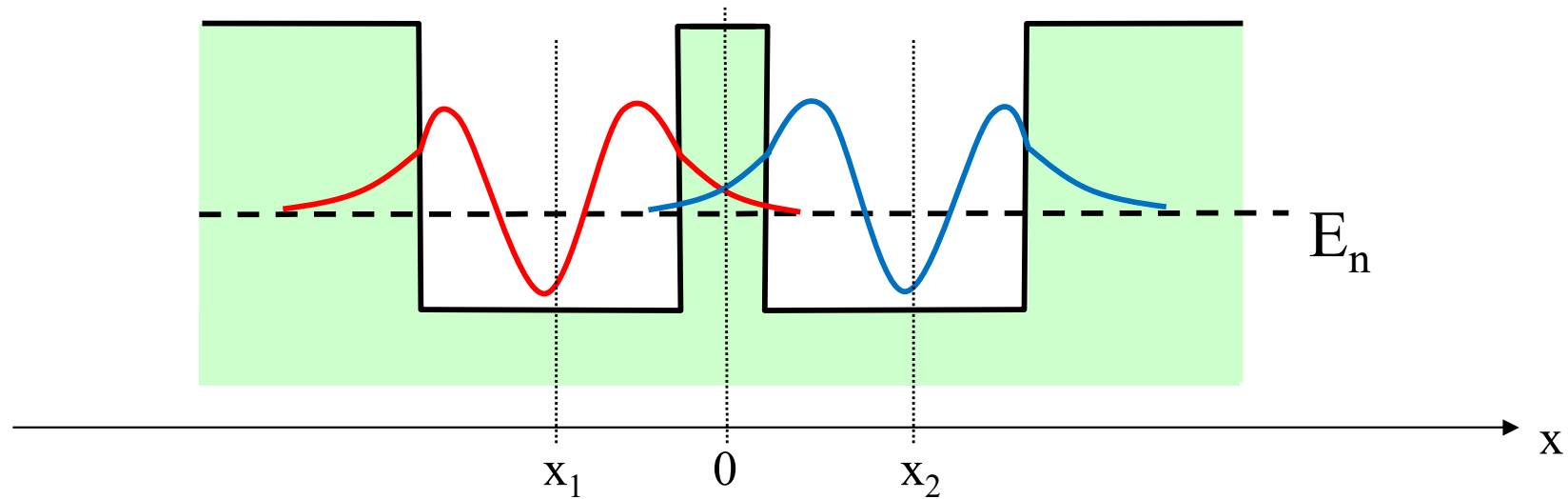
$$T_{12} = \langle \phi_1 | E_0 + \Delta V | \phi_2 \rangle$$

$$T_{11} = \langle \phi_1 | \Delta V | \phi_1 \rangle \ll T_{12}$$

$$H = \begin{pmatrix} E_0 + T_{11} & T_{12} \\ T_{12}^* & E_0 + T_{11} \end{pmatrix}$$



# Deux puits couplés



$$|\psi(x, t)\rangle \cong \begin{pmatrix} \alpha_1(t) \\ \alpha_2(t) \end{pmatrix} \begin{matrix} \leftarrow \langle \varphi(x - x_1) | \psi(x, t) \rangle & \text{«puits de gauche»} \\ \leftarrow \langle \varphi(x - x_2) | \psi(x, t) \rangle & \text{«puits de droite»} \end{matrix}$$

Théorie des modes couplés:

$$i\hbar \cdot \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{E} & -T \\ -T & \bar{E} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix}$$

Théorie des modes couplés:

$$i\hbar \cdot \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{E} & -T \\ -T & \bar{E} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix}$$

«puits de gauche»

«puits de droite»

**1) Déterminer les modes globaux normés du système et leurs énergies  $E_n$  (fréquences  $\omega_n$ )**

Mode symétrique:

$$E_S = \bar{E} - T$$

$$|\varphi_S\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Mode anti-symétrique:

$$E_A = \bar{E} + T$$

$$|\varphi_A\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

**2) Projeter le mode d'entrée (au temps  $t=0$ ) sur ces modes globaux  
(produit scalaire entre le mode d'entrée et chaque mode global)**

Input  $t=0$ :

$$|\psi^{in}\rangle = \beta_S^{in} |\varphi_S\rangle + \beta_A^{in} |\varphi_A\rangle$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \beta_S^{in} \equiv \langle \varphi_S(x) | \psi^{in}(x) \rangle \\ \beta_A^{in} \equiv \langle \varphi_A(x) | \psi^{in}(x) \rangle \end{array} \right.$$

**3) Propager chaque mode global dans le temps  $t>0$   
avec sa fréquence propre  $\omega_n$**

Propagation:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\frac{E_S}{\hbar}t} \cdot \beta_S^{in} |\varphi_S\rangle + e^{-i\frac{E_A}{\hbar}t} \cdot \beta_A^{in} |\varphi_A\rangle$$

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\frac{E_S+E_A}{2\hbar}t} \cdot \left( e^{-i\frac{\Delta E}{2\hbar}t} \cdot \beta_S^{in} |\varphi_S\rangle + e^{i\frac{\Delta E}{2\hbar}t} \cdot \beta_A^{in} |\varphi_A\rangle \right)$$

$$\Delta E \equiv E_S - E_A = -2T$$

# Pendules couplés: battements

Probabilité «Gauche»:

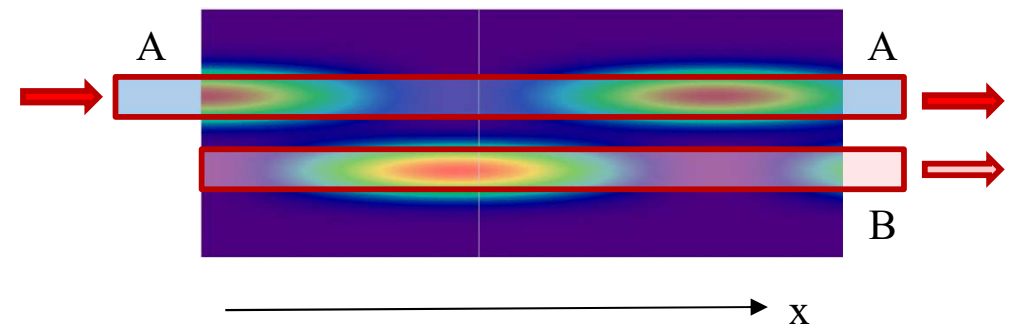
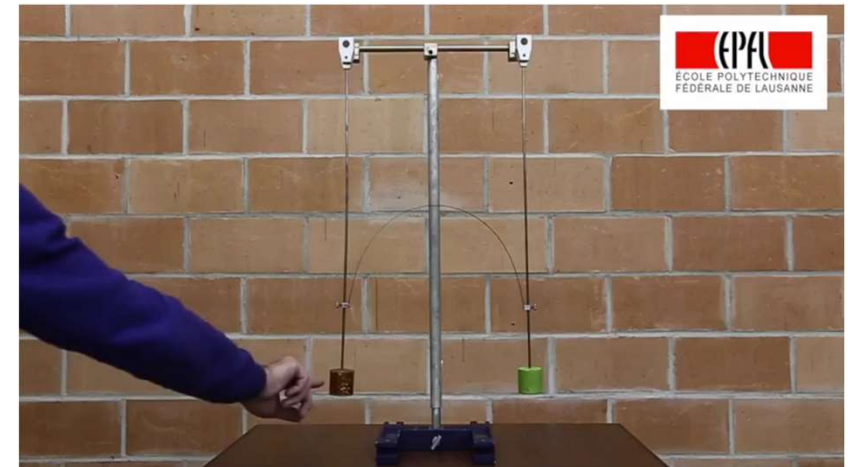
$$P_G(t) = \left| \langle (1,0) | \psi^{out} \rangle \right|^2 = \cos^2 \left( \frac{\Delta E}{2\hbar} \tau \right)$$

Probabilité «Droite»:

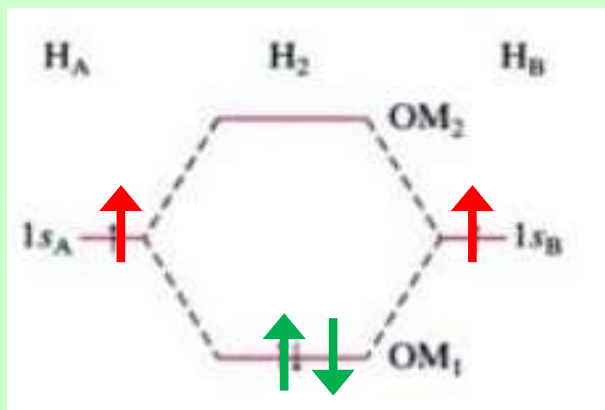
$$P_D(t) = \left| \langle (0,1) | \psi^{out} \rangle \right|^2 = \sin^2 \left( \frac{\Delta E}{2\hbar} \tau \right)$$

$$\Delta E \equiv E_S - E_A = -2T$$

<https://www.youtube.com/watch?v=aFacOh9hW9U>

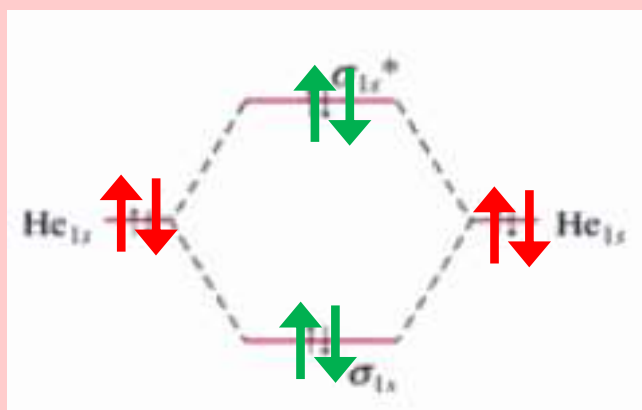


## Molécule $H_2$



**$H_2$  stable car  
énergie plus petite**

## Molécule $He_2$



**$He_2$  instable car  
énergie égale**

Anti-liant



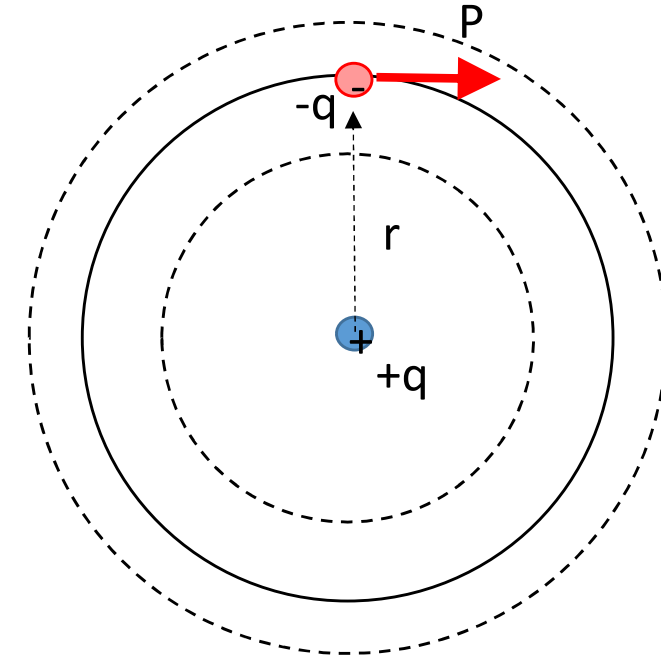
Liant

## Exercice 4.1: Atome de Bohr

A) Considérez l'électron comme une **particule classique** et

utilisez le potentiel de Coulomb  $E_{pot} = -\left(\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0}\right) \cdot \frac{1}{r}$

- 1) Reliez la vitesse et le rayon pour une orbite circulaire stable en équilibrant la force électrique et la force centrifuge.
- 2) Pour ces orbites classiques stables exprimez l'énergie cinétique et l'énergie totale de l'électron en fonction du rayon



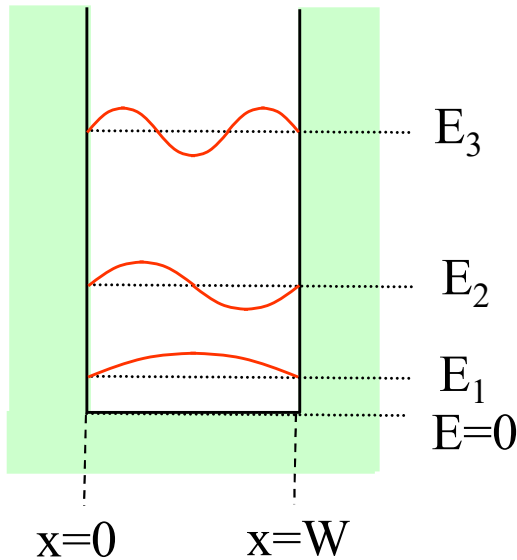
B) Considérez l'électron comme une **onde quantique**

- 3) Reliez le vecteur d'onde au rayon pour une orbite stable
- 4) Exprimez l'énergie cinétique en fonction du rayon

C) Considérez l'électron à la fois comme une **particule classique** et comme une **onde quantique**

- 5) Déterminez l'énergie totale quantifiée.

## Exercice 4.3: Evolution temporelle dans un potentiel rectangulaire



$$E_n = \frac{\hbar^2 K^2}{2m} = n^2 \cdot \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m W^2}$$

$$\varphi_n(x) \approx \sin\left(n \cdot \pi \cdot \frac{x}{W}\right)$$

Un électron est localisé dans un puit de potentiel rectangulaire de largeur  $W=18\mu\text{m}$  et de profondeur infinie.

Au temps  $t=0$ , sa fonction d'onde est centrée à  $x=W/2$  et elle a la forme:

$$\psi(t=0) \approx e^{-\left(\frac{x-W/2}{a}\right)^2} \quad \text{avec} \quad a = 1\mu\text{m}$$

Nous définissons le temps caractéristique par  $t_c \equiv \frac{\pi \cdot \hbar}{E_2 - E_1}$

**1) Décrivez les étapes nécessaires pour simuler l'évolution temporelle de cet électron.**

2) Simulez la fonction d'onde de cet électron aux temps

$$t = \frac{1}{N} \cdot \frac{3}{4} t_c \quad \text{avec } N=1, 2, 3, 4 \text{ et } 5$$



Considérez un atome de lithium (Li)  
avec trois électrons sur deux niveaux d'énergie.  
Dessinez le schéma d'énergie de la cellule Li-Li  
contenant deux atomes Li.