

## Particule quantique dans un potentiel

### Table des matières

<b>I Marche de potentiel</b>	<b>2</b>
I.1 Modèle et cadre d'application . . . . .	2
I.2 Cas d'une énergie de la particule incidente supérieure à celle de la marche : $E > V_0$ . . . . .	3
I.3 Cas d'une énergie de la particule incidente inférieure à celle de la marche : $E < V_0$ . . . . .	11
<b>II Barrière de potentiel et effet tunnel</b>	<b>16</b>
II.1 Modèle et cadre d'application . . . . .	16
II.2 Cas d'une énergie supérieure $E > V_0$ ou inférieure à la barrière $E < V_0$ . . . . .	16
II.3 Applications de l'effet tunnel . . . . .	22
a) Le microscope à effet tunnel (Bining-Rohrer - 1980) . . . . .	22
b) La radioactivité . . . . .	24
<b>III Puits de potentiel infini</b>	<b>25</b>
III.1 Modèle et cadre d'application . . . . .	25
III.2 Caractéristiques des états stationnaires . . . . .	26
III.3 Niveaux d'énergie . . . . .	27
III.4 Existence d'un état d'énergie minimale - énergie de confinement . . . . .	30
III.5 Dépendance des niveaux d'énergie vis à vis des paramètres . . . . .	32
III.6 Analogies et différences avec le cas de la corde de Melde et les guides d'onde . . . . .	34
III.7 États non stationnaires dans un puits infini . . . . .	35

### Introduction

Dans ce chapitre, on envisage le cas d'une particule en présence d'une force conservative<sup>1</sup> **indépendante du temps** dérivant d'une énergie potentielle  $V(x, y, z)$ . En se limitant à une approche unidimensionnelle, on pourra donc écrire<sup>2</sup>

$$\vec{F}(x) = -\overrightarrow{grad}(E_p) = -\frac{dV(x)}{dx}\vec{u}_x$$

Comme l'énergie potentielle est également indépendante du temps, on pourra rechercher les solutions de l'équation de Schrödinger sous la forme d'états stationnaires d'énergie  $E$  (on se limitera également au cas de particules non relativistes) :

$$\psi_{es}(x, t) = \varphi(x)e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \quad \text{où} \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + V(x)\varphi(x) = E\varphi(x)$$

1. On négligera l'influence de la particule quantique sur le milieu environnant.

2. On en déduit que lorsque le potentiel est constant, la particule est libre car  $\vec{F} = \vec{0}$ .

## Méthode

Afin de déterminer les propriétés des états en présence d'une interaction extérieure, on utilisera à chaque fois les étapes suivantes lors de la démarche d'analyse :

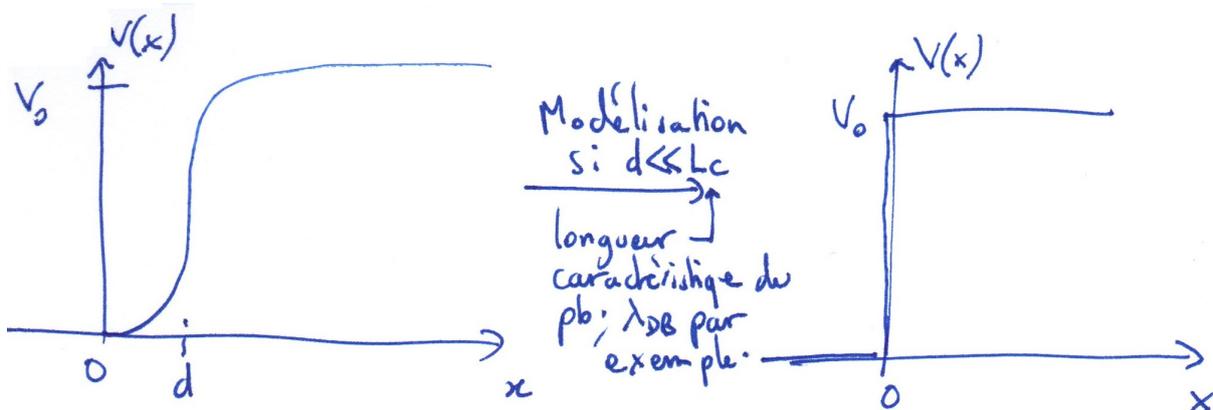
- $\alpha$ ) **Analyse classique** : prévision dans le cadre de la physique classique.
- $\beta$ ) **Caractéristique quantique des états stationnaires** : détermination des ondes de probabilité.
- $\gamma$ ) **Interprétation en terme de statistique quantique reposant sur une onde non localisée (onde plane)** : on pourra raisonner en considérant que  $|\psi(x, t)|^2$  ne représente plus seulement la densité de probabilité de présence d'un quanton à la position  $x$  mais aussi une *densité particulière* (comme dans le cas de la figure d'interférence des trous d'Young construite photon par photon).
- $\delta$ ) **Interprétation quantique reposant sur une onde localisée (paquet d'onde)** : cette dernière étape nécessitera de s'intéresser à une superposition d'ondes planes en s'appuyant sur des simulations numériques <sup>a</sup>.
- $\epsilon$ ) **Analogie optique** : on fera un parallèle avec les résultats obtenus en optique ondulatoire lorsque cela est possible.

<sup>a</sup>. On peut utiliser par exemples celles proposées à l'adresse :

<http://phet.colorado.edu/en/simulations/category/physics/quantum-phenomena>. On précise ici qu'on ne confondra pas ces simulations numériques avec des expériences ; elles ne font qu'illustrer le modèle théorique.

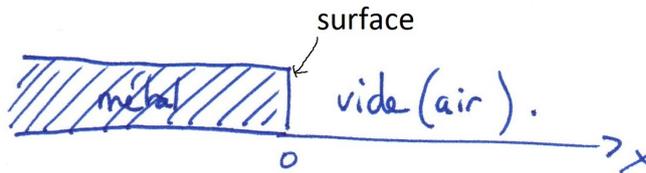
# I Marche de potentiel

## I.1 Modèle et cadre d'application

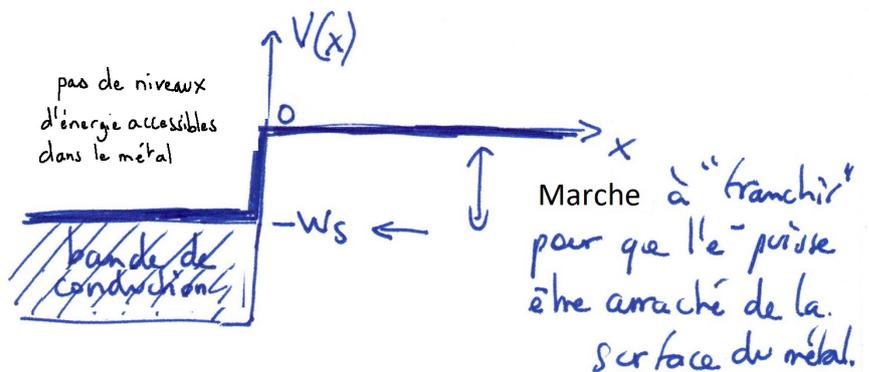


Exemple 1 : électron de conduction dans un métal près de sa surface

situation physique:

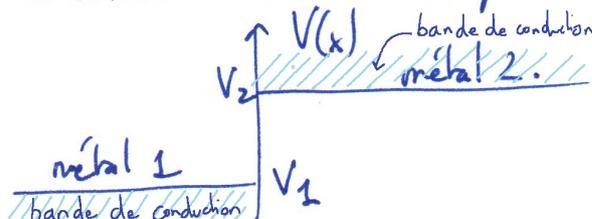


potentiel auquel sont soumis les  $e^-$  les plus susceptibles d'être arrachés de la surface par effet photoélectrique.



Dans l'effet photoélectrique, l'énergie qui permet à l'électron de franchir la marche de potentiel est fournie par une lumière incidente. Les électrons arrachés sont ensuite collectés grâce à une différence de potentiel.

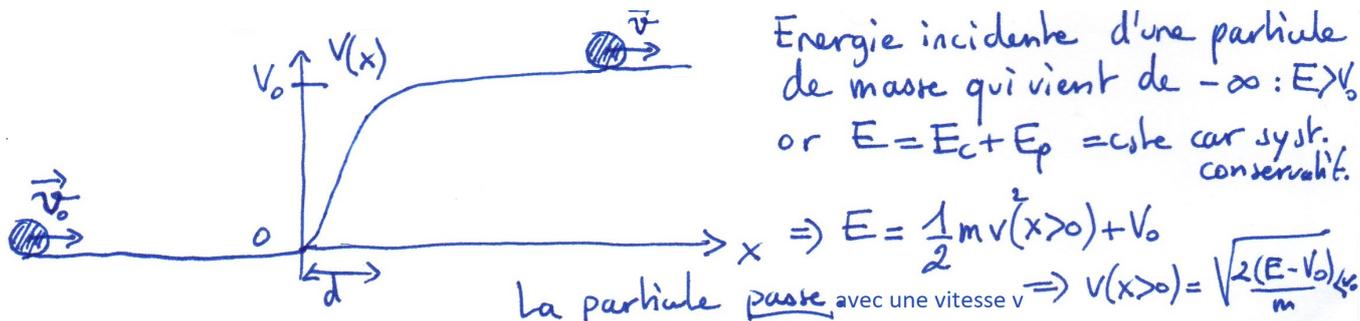
Exemple 2 : électron à l'interface entre 2 métaux différents ou entre 2 conducteurs à des potentiels différents.



Ce type de géométrie permet de modéliser le fonctionnement des diodes par exemple.

I.2 Cas d'une énergie de la particule incidente supérieure à celle de la marche :  $E > V_0$

α) Analyse pour une particule classique



Remarque

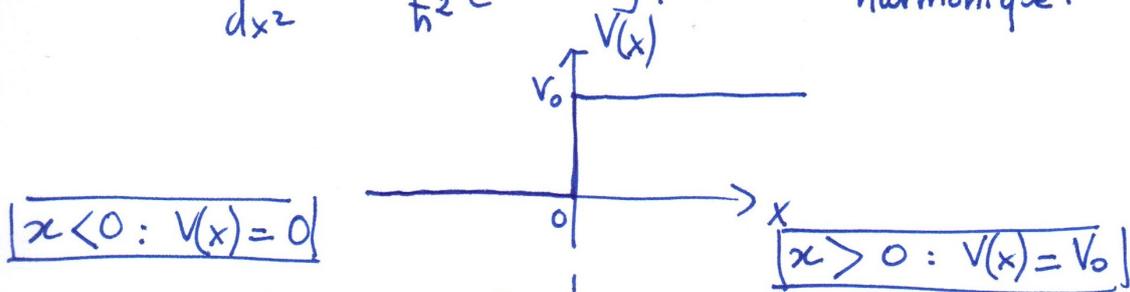
On notera qu'il sera inutile de chercher à retrouver la limite classique, en vertu du principe de correspondance, lorsque  $\hbar \rightarrow 0$  car la largeur du front montant ne serait plus très petite devant  $\lambda_{DB} = \frac{h}{p} = 0$ . Les calculs qui suivent ne s'appliquent donc pas dans cette limite.

β) Caractéristique quantique des états stationnaires et de la densité de probabilité

On cherche  $\Psi(x,t) = \psi(x) e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$  avec  $E > V_0$  et

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

soit  $\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x)]\psi(x) = 0$  oscillateur harmonique.



$\Rightarrow \psi(x < 0) = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}$   
 $\psi(x < 0) = A_1 e^{i(k_1 x - \frac{Et}{\hbar})}$   
 avec  $k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$

$\psi(x > 0) = A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x}$   
 $\psi(x < 0) = \dots$   
 $k_2 = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}} < k_1$

Le potentiel étant fini en tout point :

→  $\Psi(x)$  est continue en  $x=0$  :  $A_1 + B_1 = A_2 + B_2$  (1)

→  $\frac{d\Psi}{dx}$  ——— en  $x=0$  :  $k_1(A_1 - B_1) = k_2(A_2 - B_2)$  (2)

⇒ 4 inconnues  $A_1, B_1, A_2, B_2$ , et seulement 2 équations...

↳  $A_1$  peut être obtenue par normalisation du paquet d'onde

↳ on peut poser  $B_2=0$  car le quanton est incident depuis  $x=-\infty$  et que  $B_2$  est associé à une onde de probabilité venant de  $+\infty$  car  $\Psi_{B_2}(x,t) = B_2 e^{-\frac{i}{\hbar}(E t + k_2 x)}$

On peut résoudre en posant  $r$  et  $t$  les coefficients propagés selon  $\vec{O}_x$  de réflexion et de transmission en amplitude :

$$t = \frac{A_2}{A_1} \quad \text{et} \quad r = \frac{B_1}{A_1} \quad \text{or} \quad k_1(1) + (2) \Rightarrow 2k_1 A_1 = (k_1 + k_2) A_2$$

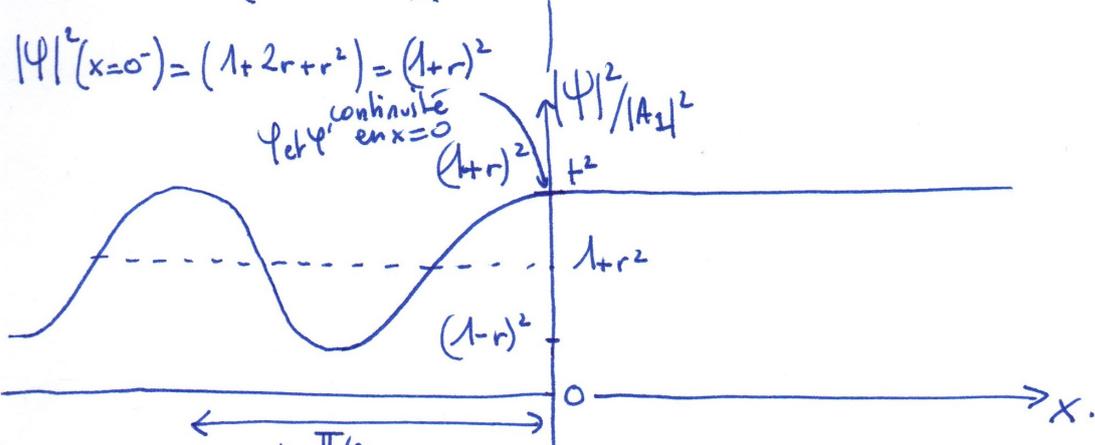
$$\Rightarrow \boxed{t = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}} \quad \text{et} \quad (1) \Rightarrow B_1 = A_2 - A_1 = \frac{2k_1 - k_2}{k_1 + k_2}$$

$$\Rightarrow \boxed{r = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}} < 1$$

On peut en déduire les densités de probabilités :

$$|\Psi(x < 0)|^2 = |\Psi(x < 0)|^2 = |A_1|^2 (1 + 2r \cos(2k_1 x) + r^2) \quad |\Psi(x > 0)|^2 = |\Psi(x > 0)|^2 = t^2 |A_1|^2$$

$$= |A_1|^2 (1 + r e^{-2ik_1 x} + r e^{2ik_1 x} + r^2)$$



longueur d'onde des oscillations de densité.  $\lambda = \pi/k_1$

On rappelle que cette densité de probabilité est indépendante du temps car il s'agit d'un état stationnaire.

$\gamma$ ) Interprétation en terme de statistique quantique (flux ininterrompu de particules - approche hydrodynamique)

Une onde (ou un <sup>flux de</sup> quansons) incidente  $A_1 e^{i(k_1 x - \omega t)}$  avec  $\omega = \frac{E}{\hbar}$  est partiellement réfléchi en  $x=0$ .

On voit donc que le résultat diffère de la situation classique puisque la densité de probabilité de présence pour  $x < 0$  est non nulle à tout instant, alors que  $E > V_0$  et que toutes les particules classiques passeront.

] effet purement quantique

Cette densité de présence oscille en fonction de la distance à la marche du fait des 2 ondes incidentes et réfléchies.

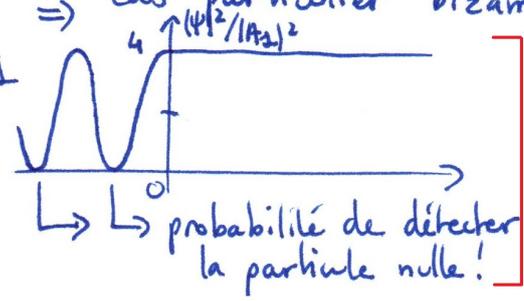
On parle ici d'interférences quantiques.

On notera que ces oscillations de densité sont d'autant plus resserées que  $E$  est grand car  $\lambda_d = \frac{\pi}{k_1} = \frac{\pi \hbar}{\sqrt{2mE}} = \frac{\lambda_{DB}}{2}$   $\rightarrow$  longueur d'onde de De Broglie incidente.

Cas particuliers:

\* si  $E \gg V_0$ ,  $k_2 \approx k_1 \Rightarrow \begin{cases} t \rightarrow 1 \\ r \rightarrow 0 \end{cases} \Rightarrow$  la transmission est quasi-totale (logique ici)

\* si  $E \approx V_0$  avec  $E > V_0$ ,  $k_2 \rightarrow 0 \Rightarrow \begin{cases} t \rightarrow 2 \\ r \rightarrow 1 \end{cases} \Rightarrow$  cas particulier "bizarre"



] effet purement quantique

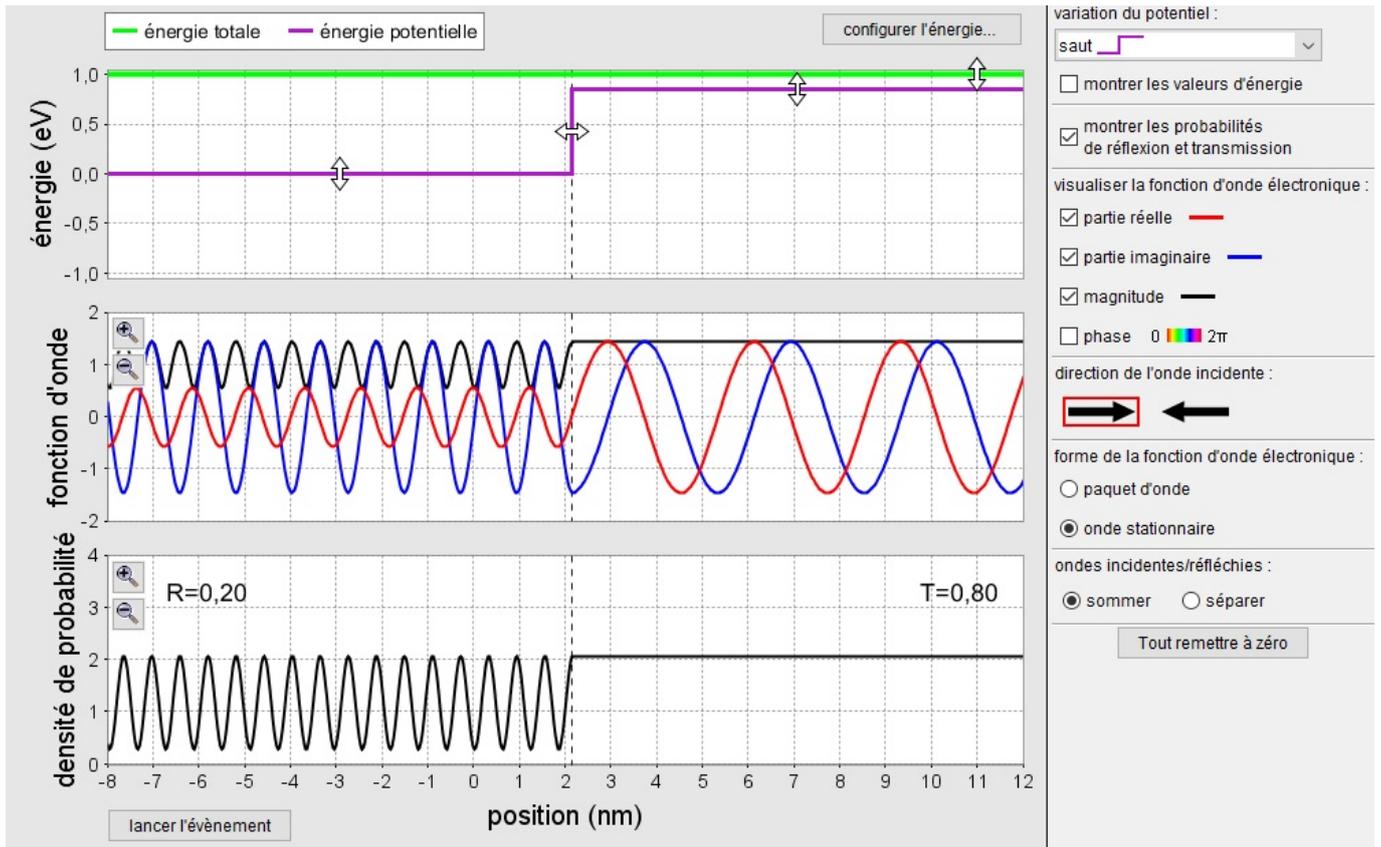


FIGURE 1 – État stationnaire dans le cas d’une marche de potentiel avec  $E > V_0$ . On constate que la densité de probabilité est indépendante du temps, contrairement aux parties réelles et imaginaires de la fonction d’onde. On voit la présence d’interférences quantiques avant la marche. On vérifie bien que la probabilité de transmission est d’autant plus grande que l’énergie  $E$  est grande devant  $V_0$ .

Afin d'interpréter plus simplement les résultats purement quantiques précédents, on peut également calculer les probabilités de réflexion  $R$  et de transmission  $T$  des particules quantiques sur la marche.

Nous avons obtenu :

$$\Psi(x,t) = A_1 e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \begin{cases} e^{ik_1x} + r e^{-ik_1x} & x \leq 0 \\ t e^{ik_2x} & x \geq 0 \end{cases}$$

On définit alors les probabilités de réflexion  $R$  et de transmission  $T$  par :

$$R = \frac{\|\vec{j}_r\|}{\|\vec{j}_i\|} \quad \text{et} \quad T = \frac{\|\vec{j}_t\|}{\|\vec{j}_i\|}$$

⚠ On rappelle que  $\vec{j} = \frac{\hbar}{m} \nabla \Psi^2$  n'est valable que pour une OPPH ou un paquet d'onde quasi-monochrom.  $\Rightarrow$  on ne peut l'appliquer à l'onde totale pour  $x \leq 0$ .

or 
$$\begin{cases} \vec{j}_i = |\Psi_i|^2 \frac{\hbar k_1}{m} \vec{u}_x \\ \vec{j}_r = -|\Psi_r|^2 \frac{\hbar k_1}{m} \vec{u}_x \\ \vec{j}_t = |\Psi_t|^2 \frac{\hbar k_2}{m} \vec{u}_x \end{cases}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} R = |r|^2 = \left( \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2 \\ T = |t|^2 \frac{k_2}{k_1} \end{cases} \quad \boxed{\Delta T \neq |t|^2} = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}$$

or  $k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$  et  $k_2 = \sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}}$

donc  $R = \left( \frac{\sqrt{E} - \sqrt{E-V_0}}{\sqrt{E} + \sqrt{E-V_0}} \right)^2 = \left( \frac{1 - \sqrt{1 - V_0/E}}{1 + \sqrt{1 - V_0/E}} \right)^2 < 1$  /  $R \neq 0$  pour  $E > V_0$

$T = \frac{4\sqrt{1 - V_0/E}}{(1 + \sqrt{1 - V_0/E})^2}$  (conservation du nombre de quanta :  $\frac{R}{R} + \frac{T}{T} = \frac{1}{1}$ )

Comme en électromagnétisme, on peut vérifier que  $R+T=1$  (la particule quantique est soit réfléchi, soit transmise).

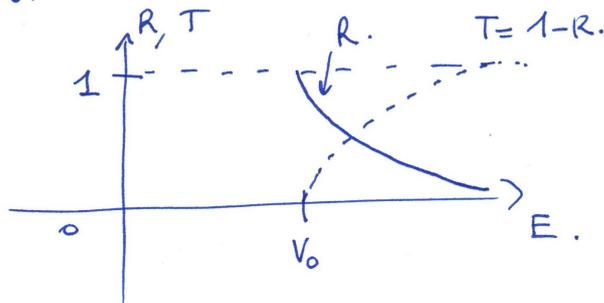
$$R+T = \frac{1 - 2\sqrt{1 - V_0/E} + (1 - V_0/E) + 4\sqrt{1 - V_0/E}}{(1 + \sqrt{1 - V_0/E})^2} = \frac{1 + 2\sqrt{1 - V_0/E} + (1 - V_0/E)}{(1 + \sqrt{1 - V_0/E})^2} = 1$$

effet purement quantique

$$R = \frac{1 - \sqrt{1 - V_0/E}}{1 + \sqrt{1 - V_0/E}}$$

$\begin{matrix} \nearrow E \rightarrow \infty & R \rightarrow 0 \\ \searrow E \rightarrow V_0^+ & R \rightarrow 1 \end{matrix}$

Cas  $E > V_0$ .



δ) Interprétation en terme de paquet d'onde

Un paquet d'onde représentant un quanton sera partiellement réfléchi et transmis par la barrière.



Montrer animation

On observe des oscillations quantiques très rapides au voisinage de la marche à cause des interférences entre les différentes ondes.

La conservation de la normalisation des probas implique:

$$R + T = 1 \quad (\text{la particule est soit réfléchi, soit transmise}).$$

$R \neq 0$  : purement quantique pour  $E > V_0$ .

⚠ La particule reste unique ici et ne se scinde pas en 2! Elle est soit réfléchi, soit transmise. Si elle est détectée avant la marche, elle ne le sera plus après... la détection modifie l'état de la particule; c'est la "réduction du paquet d'onde".

] effet purement quantique

Parler d'intrication réfléchi/transmis vivant/mort ) pas moyen de savoir avant de faire la mesure.

Remarque

Attention à la généralisation hâtive en considérant les systèmes macroscopiques comme des superpositions d'états quantiques, comme par exemple dans le fameux exemple du chat de Schrödinger. En effet, un tel "chat quantique", du fait de l'interaction avec son milieu environnant, perdrait quasi-instantanément ses propriétés d'intrication, c'est à dire de superposition d'état entre "chat vivant" et "chat mort", pour être projeté dans l'un des deux états. Seules des entités n'interagissant peu ou pas (vide poussé, températures proches du zéro absolu) avec le milieu extérieur pourront ainsi conserver leurs propriétés quantiques étonnantes. Nous reparlerons de cet effet appelé **décohérence quantique** à la toute fin du cours.

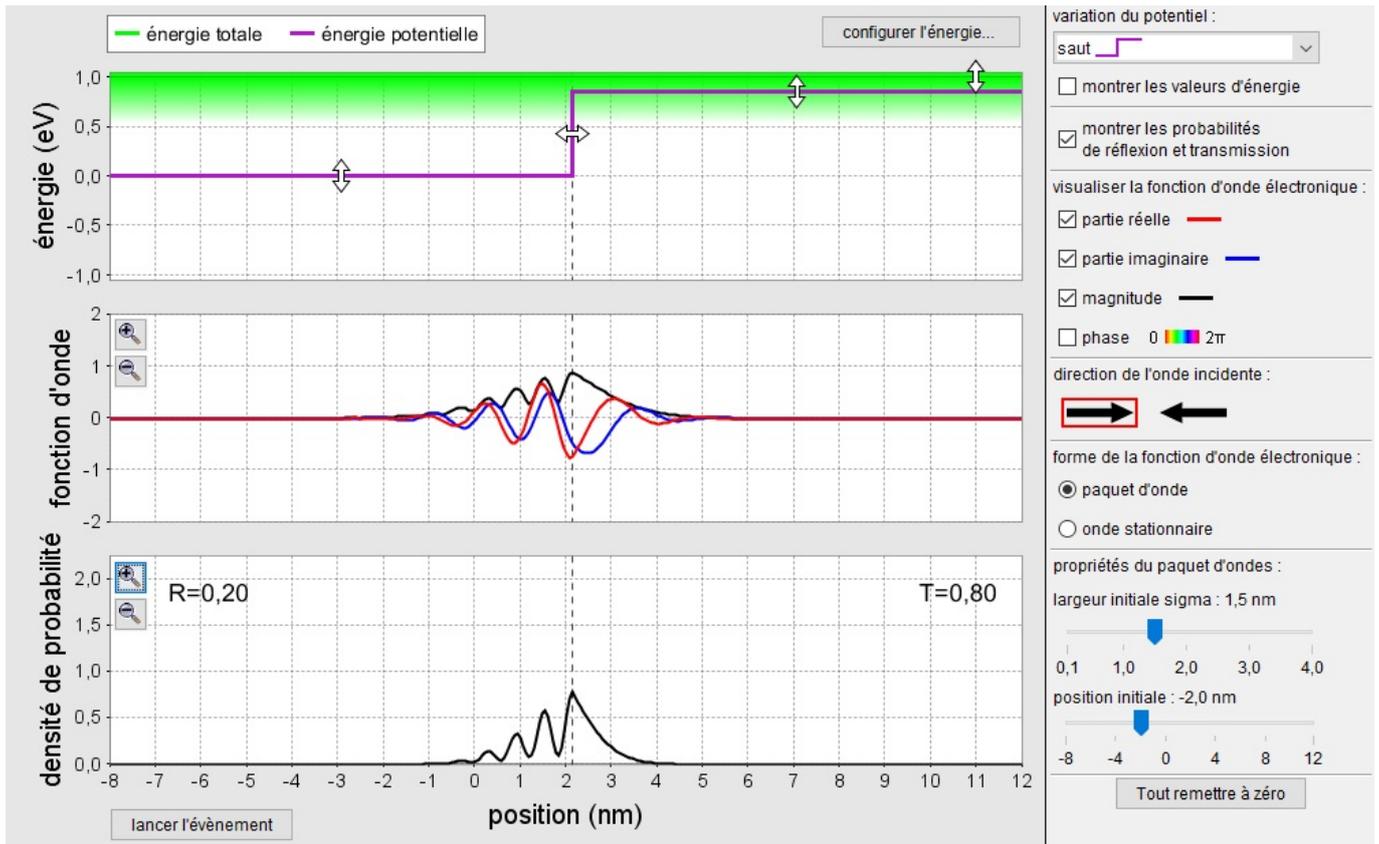


FIGURE 2 – Paquet d'onde incident dans le cas d'une marche de potentiel avec  $E > V_0$ . La densité de probabilité n'est plus indépendante du temps car le paquet d'onde correspond à une superposition d'états stationnaires qui se déphasent au cours du temps. On voit la présence d'interférences quantiques avant la marche. La réflexion partielle du quanton décrit par le paquet d'ondes ne signifie pas que l'on a une division d'une particule en deux particules, l'une étant réfléchiée et l'autre étant transmise : cette vision classique des choses est à abandonner. On a en fait une probabilité de mesure du quanton aussi bien à gauche qu'à droite de la marche de potentiel et seule une mesure effective permet d'accéder à l'information de position du quanton !

e) Analogie optique

Le flux de quanton (onde plane) est analogue à une OPPM incidente sur un milieu  $n_2$  depuis un milieu  $n_1$ , qui conduit à une onde incidente et une onde réfléchie avec :

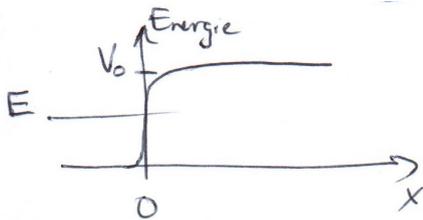
$$R_1 = n_1 k_0 = n_2 k_1 \quad T' = \frac{2n_1}{n_1 + n_2} \quad \text{et} \quad r' = \frac{n_1 - n_2}{n_1 + n_2} \quad \left( \begin{array}{l} \text{mêmes équations} \\ \text{coefficient de Fresnel sous} \\ \text{incidence normale} \end{array} \right)$$

On a également  $R+T=1$  avec  $R = \frac{\langle \Pi_r \rangle}{\langle \Pi_i \rangle}$  et  $T = \frac{\langle \Pi_t \rangle}{\langle \Pi_i \rangle}$

⚠ Différence majeure:  $\frac{\langle \Pi_r \rangle}{\langle \Pi_i \rangle}$  a un sens physique alors que  $\frac{\langle \Pi_t \rangle}{\langle \Pi_i \rangle}$  n'en a pas et seule  $\frac{\langle \Pi_t \rangle}{\langle \Pi_i \rangle}$  peut être interprétée.

I.3 Cas d'une énergie de la particule incidente inférieure à celle de la marche :  $E < V_0$

a) Analyse pour une particule classique



Dans le cas d'une particule classique, la particule est toujours réfléchiée car  $E = \frac{1}{2}mv^2 + E_p = E_c + V_0$   
 ↑ conservation de l'énergie (force conservatrice)  
 imposerait une  $E_c < 0 \Rightarrow$  impossible.

β) Caractéristique quantique des états stationnaires et de la densité de probabilité

<p style="text-align: center;"><math>x \leq 0</math></p> $\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + E\psi = 0$ $\Rightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0 \text{ avec } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$	<p style="text-align: center;"><math>x \geq 0</math></p> $\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + (E - V_0)\psi = 0$ $\Rightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} - \left(\frac{\delta}{\hbar}\right)^2 \psi = 0 \text{ avec } \frac{\delta}{\hbar} = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$
--	--

$\psi(x) = A_1 e^{ikx} + A_1' e^{-ikx}$ $\psi(x,t) = A_1 e^{-\frac{i(Et - kx)}{\hbar}} + A_1' e^{-\frac{i(Et + kx)}{\hbar}}$ <p>Idem avec <math>k \leftrightarrow k_1</math>  <math>E &gt; V_0</math>.</p>	$\psi(x) = A_2 e^{-\frac{x}{\delta}} + A_2' e^{+\frac{x}{\delta}}$ <p>ne diverge pas car <math>-\infty</math> non accessible ici.  <math>  \psi  ^2</math> divergerait en <math>+\infty</math>.  <math>\Rightarrow A_2' = 0</math> car sinon <math>  \psi  ^2</math> divergerait en <math>+\infty</math>.  <math>\psi(x) = A_2 e^{ik_2 x}</math>  <b>ONDE EVANESCENTE</b></p>
--	---

$\Rightarrow$  analogue au cas  $E > V_0$  en remplaçant  $ik_2$  par  $-\frac{\delta}{\hbar}$ , soit  $k_2$  par  $i\frac{\delta}{\hbar}$ .

$\Rightarrow \left| \frac{r}{t} = \frac{A_1'}{A_1} = \frac{k - i\delta/\hbar}{k + i\delta/\hbar} \right| \text{ et } \left| \frac{t}{r} = \frac{A_2}{A_1} = \frac{2k}{k + i\delta/\hbar} \right| \quad \triangle r \text{ et } t \in \mathbb{C} \text{ cette fois-ci.}$

$$\boxed{x \leq 0}$$

On pose  $\underline{r} = \frac{k - i/\delta}{k + i/\delta} = \frac{1 - \frac{i}{k\delta}}{1 + \frac{i}{k\delta}} = e^{-i\theta}$

module 1  
et argument  $< 0$

donc  $\theta = -\text{Arg}(\underline{r}) = -\text{Arg}\left(1 - \frac{i}{k\delta}\right) + \text{Arg}\left(1 + \frac{i}{k\delta}\right)$

$$= 2 \arctan\left(\frac{1}{k\delta}\right)$$

$$\theta = 2 \arctan\left(\sqrt{\frac{V_0}{E} - 1}\right)$$

Enfinement:  $\Psi(x,t) = A_1 e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \left[ e^{ikx} + e^{-i(kx + \theta)} \right]$

$$= \Psi_i(x,t) + \Psi_r(x,t)$$

avec  $\Psi_r(x,t) = A_1 e^{-i\left[\frac{E}{\hbar}(t + \frac{\theta\hbar}{E}) + kx\right]}$ : la valeur de  $\Psi_r(x,t)$  à l'instant  $t$  possède une phase qui correspond à une évolution pendant  $\Delta t = \frac{\theta\hbar}{E}$  supplémentaire.  
La réflexion s'accompagne donc d'un retard.

On peut en déduire les densités de probabilité.

$$|\Psi(x,t)|^2 = |A_1|^2 \left( e^{ikx} + e^{-ikx - i\theta} \right) \left( e^{-ikx} + e^{ikx + i\theta} \right)$$

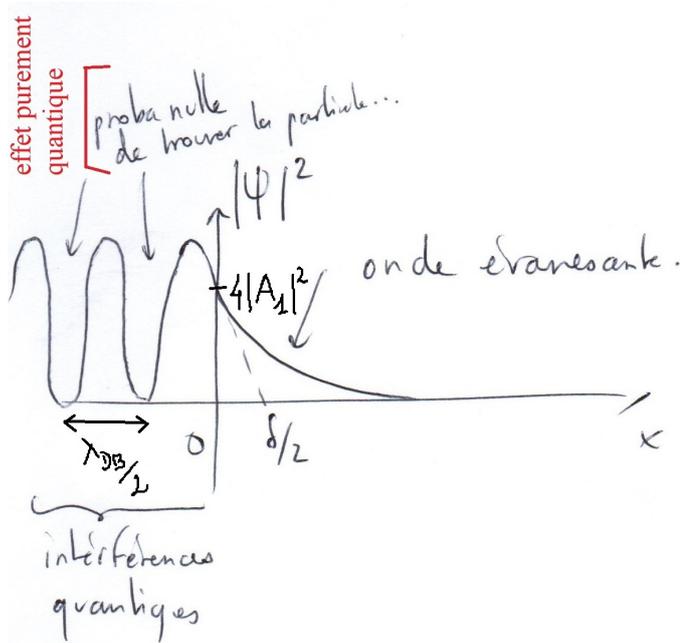
$$= |A_1|^2 \left[ 2 + \underbrace{e^{-i(kx + \theta)} + e^{i(2kx + \theta)}}_{2 \cos(2kx + \theta)} \right]$$

$$|\Psi(x,t)|^2 = 2|A_1|^2 \left[ 1 + \underbrace{\cos(2kx + \theta)} \right]$$

$\exists$  interférences  
graniques.  
d'interfrange  $\frac{\lambda_1}{2} = \frac{\lambda_{DB}}{2}$

$$|\Psi|^2 = |A_1|^2 |H|^2 e^{-\frac{2x}{\delta}}$$

$$\frac{4}{1 + \frac{1}{(k\delta)^2}} = \frac{4}{1 + \frac{V_0 - E}{E}} = \frac{4E}{V_0}$$



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

profondeur de pénétration analogue à l'effet de peau

γ) Interprétation en terme de statistique quantique (flux ininterrompu de particules - approche hydrodynamique)

On retrouve à nouveau des positions pour lesquelles la probabilité de détecter des particules est nulle à cause du phénomène d'interférences quantiques.

Pour  $x > 0$ , on obtient  $|\Psi(x, t)|^2 \neq 0$ , ce qui signifie qu'il existe une probabilité non nulle de détecter des particules transmises.

effet purement quantique

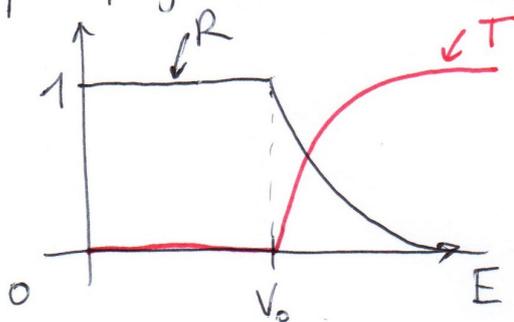
Remarque

|| Attention : ces particules sont détectables, mais elles ne se propagent pas pour autant !  
C'est un effet purement quantique ici !

On peut maintenant calculer les probabilités de réflexion  $R$  et de transmission  $T$  des particules quantiques sur la marche.

$$R = \frac{\|\vec{j}_r\|}{\|\vec{j}_i\|} = |r|^2 = \left| \frac{k - i/\delta}{k + i/\delta} \right|^2 = \boxed{1} \Rightarrow \text{il y a réflexion totale, comme en classique.}$$

$T$  ne peut être défini ici à partir de  $\vec{j}_+$  car l'onde n'est pas progressive mais évanescence. Comme  $R + T = 1 \Rightarrow \boxed{T = 0}$



Cependant,  $\exists$  proba non nulle de détecter une part car  $|\psi| \neq 0$  pour  $x > 0$ .

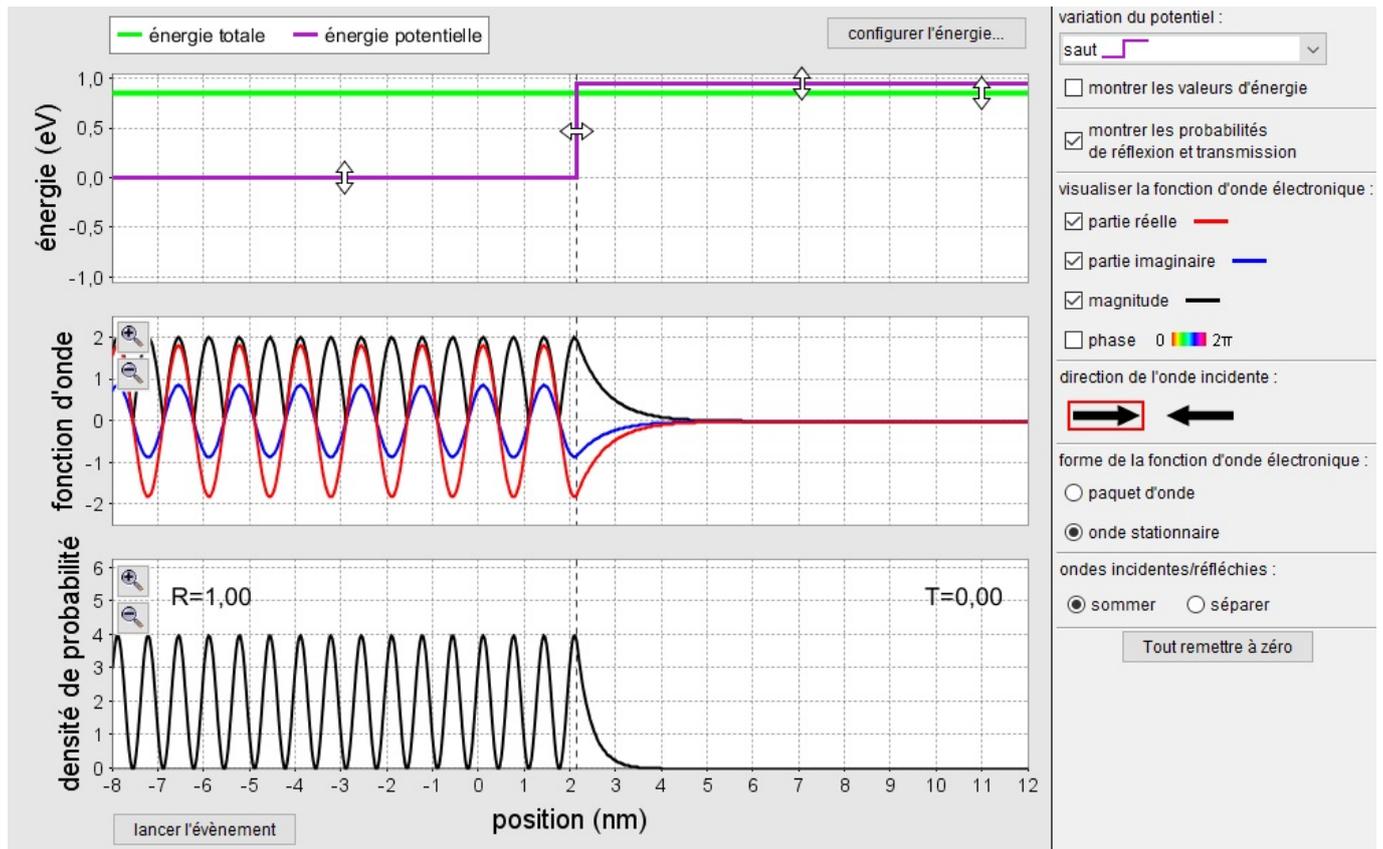


FIGURE 3 – État stationnaire dans le cas d’une marche de potentiel avec  $E < V_0$ . On voit toujours la présence d’interférences quantiques avant la marche. On constate qu’il existe une onde évanescente dans la marche, dont la distance caractéristique de pénétration augmente lorsque l’écart entre  $V_0$  et  $E$  diminue. Bien que la fonction d’onde soit non nulle à l’intérieur de la marche, la probabilité de transmission est toujours nulle et  $T = 0$ .

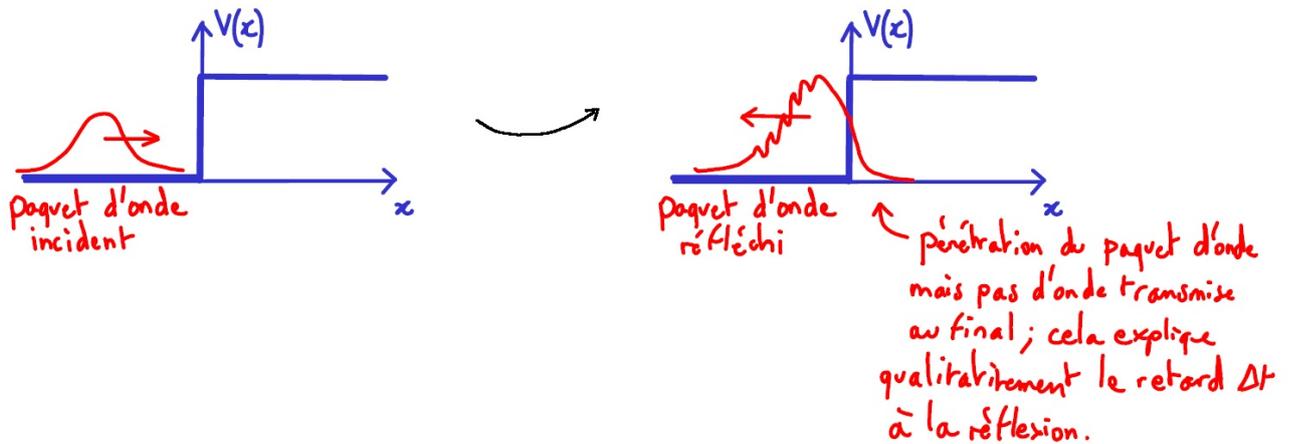
δ) Interprétation en terme de paquet d’onde

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

$\hbar$  : → quantique  
 $\delta \nearrow$  si  $m \downarrow \Rightarrow$  quantique aussi;  
 $\delta \nearrow$  si  $E$  proche de  $V_0$  . cohérent } à montrer avec simulation

Animation : ne pas prendre un paquet d’onde trop picé pour ne pas voir le “beug” : sinon un paquet d’onde se propage dans les  $x > 0$ .  
 largeur initiale 2,0 nm.  $V_0 = 1\text{eV}$   
 en  $x = -\delta \text{ nm}$  au début.  $E = 0,5\text{eV}$

Le paquet d'onde est réfléchi par la marche intégralement. Cependant, il pénètre légèrement dans la marche sur une distance  $\Delta x \approx \frac{\delta}{2}$  avant de faire "demi-tour".

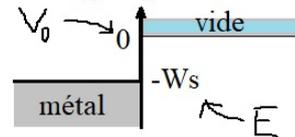


Exemple

On considère un électron de conduction dans un bloc de cuivre en conditions usuelles. Estimer la distance caractéristique de sortie  $\delta$  possible de l'électron de ce bloc. Commenter. On pourra exploiter le fait que l'étude de l'effet photoélectrique pour le cuivre donne accès à la longueur d'onde seuil d'émission photoélectronique  $\lambda_s = 0,29\mu m$ .

On peut grossièrement considérer que l'électron de conduction se dirigeant vers la surface du bloc de cuivre pour en sortir voit une marche de potentiel de valeur d'énergie  $V_0$ . Bien sûr, sans l'effet photoélectrique et en conditions usuelles, l'énergie  $E$  de l'électron est inférieure à  $V_0$  et on peut estimer  $V_0 - E$  sachant que cela doit correspondre à l'énergie lumineuse seuil de l'effet photoélectrique :

$$V_0 - E = \frac{hc}{\lambda_s}$$



donc

$$\delta = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}} = \sqrt{\frac{\hbar \lambda_s}{8\pi^2 m c}} \approx 10^{-10} \text{ m}$$

Cette distance est déjà très faible avec un électron, et sera donc totalement négligeable avec une particule macroscopique.

ε) Analogie optique

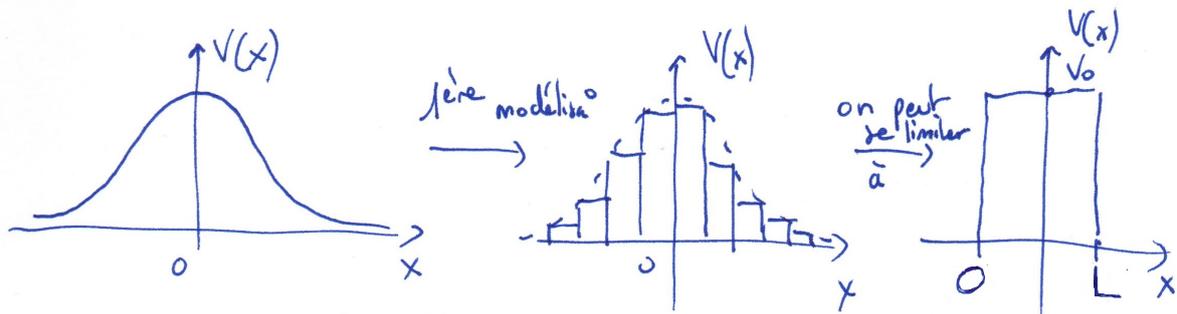
cf réflexion sur un plasma avec  $\omega < \omega_p$  ( $k^2 = \frac{\omega^2 - \omega_p^2}{c^2} < 0$ )  
 $\hookrightarrow \exists$  indice complexe  $\underline{n}$

Transition : On notera que là encore, il n'y a aucune condition de quantification imposée sur les vecteurs d'onde ou sur l'énergie, et le spectre est donc toujours continu<sup>3</sup>.

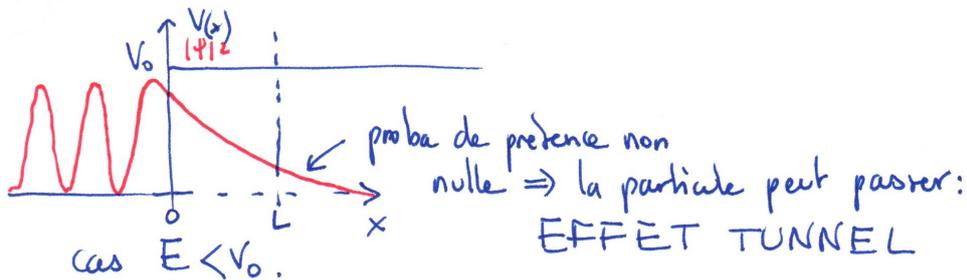
3. Ceci est analogue au cas de la corde de Melde : tant que celle-ci n'est attachée que d'un côté, il n'y a pas apparition de modes propres.

## II Barrière de potentiel et effet tunnel

### II.1 Modèle et cadre d'application



Barrière = marche d'extension limitée.

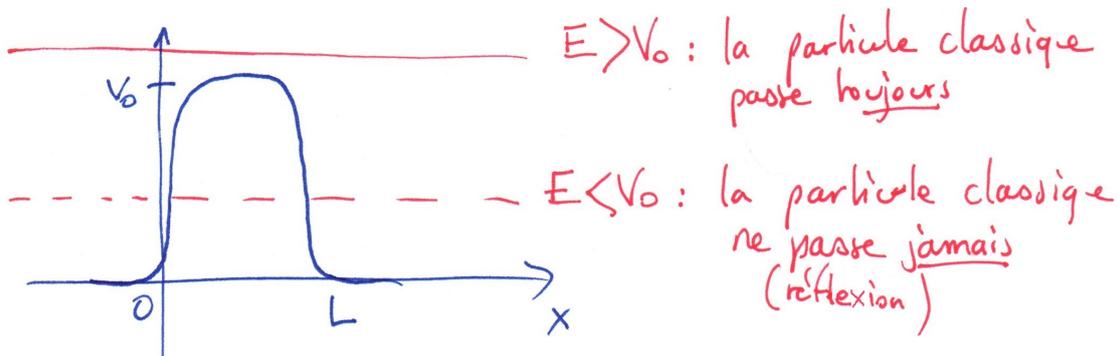


Applications (revues après):

- $\rightarrow$  microscope à effet tunnel
- $\rightarrow$  interprétation de la radioactivité  $\alpha$ .
- $\rightarrow$  ... + bcp d'autres + complexes (fusion, émission froide...)  
diodes mémoires flash...

### II.2 Cas d'une énergie supérieure $E > V_0$ ou inférieure à la barrière $E < V_0$

$\alpha$ ) Analyse pour une particule classique





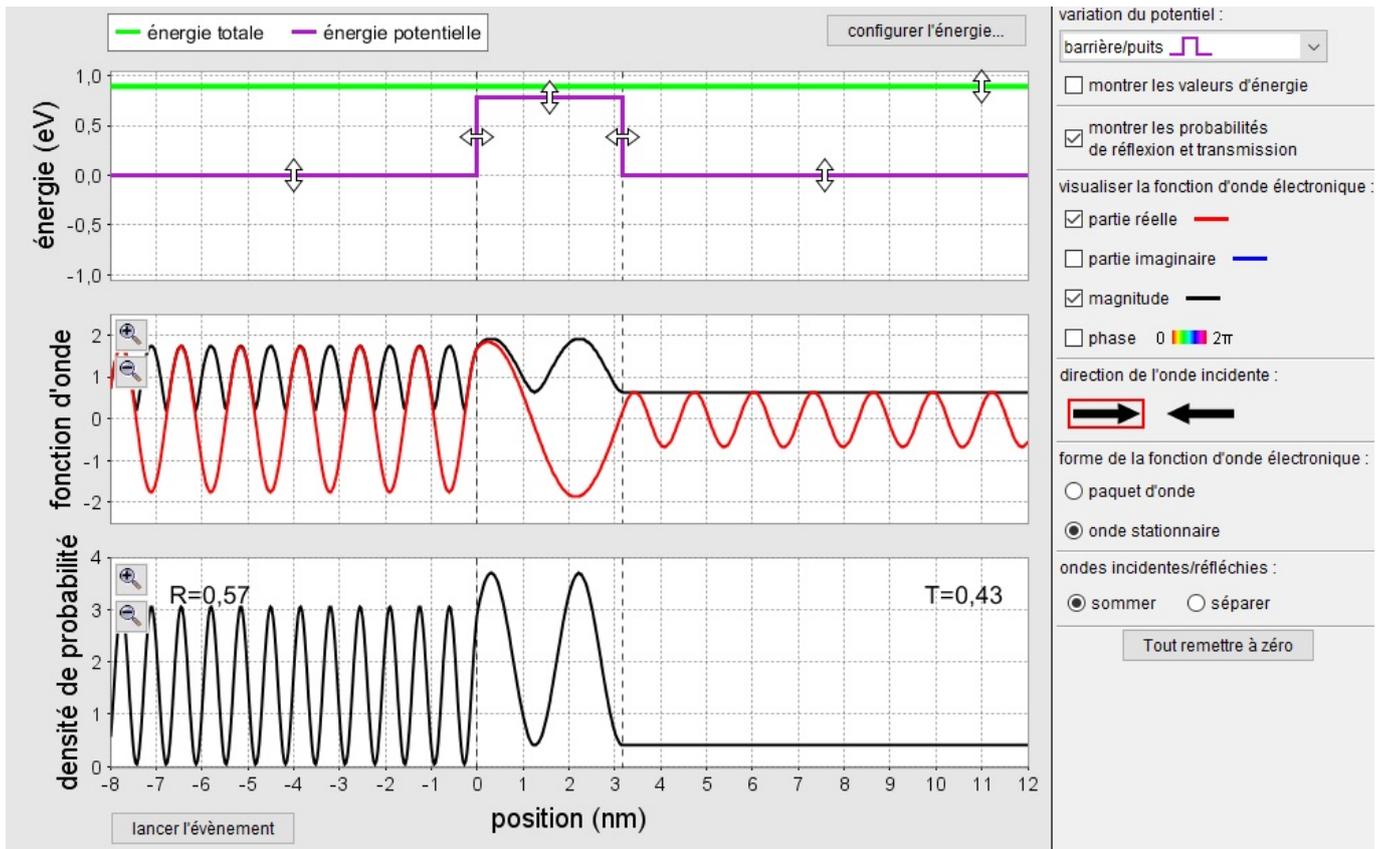


FIGURE 4 – État stationnaire dans le cas d’une barrière de potentiel avec  $E > V_0$ . Toutes les particules ne sont pas transmises contrairement au cas classique. On notera la présence d’interférences quantiques dans la barrière car il existe une réflexion en  $x = L$  sur la face de sortie de la barrière.

effet purement quantique

\* Si  $E < V_0$

Il y a toujours une probabilité non nulle de détecter la particule après la barrière :  $T \neq 0$  (ce n’était pas le cas dans la marche pour laquelle on avait  $T=0$ ).

T reste cependant faible et dépend de L et E :

D’après la simulation :  $T \uparrow$  si  $\left\{ \begin{array}{l} L \downarrow \\ E \uparrow \text{ (se rapproche de } V_0 \text{ par valeur inf.)} \end{array} \right.$

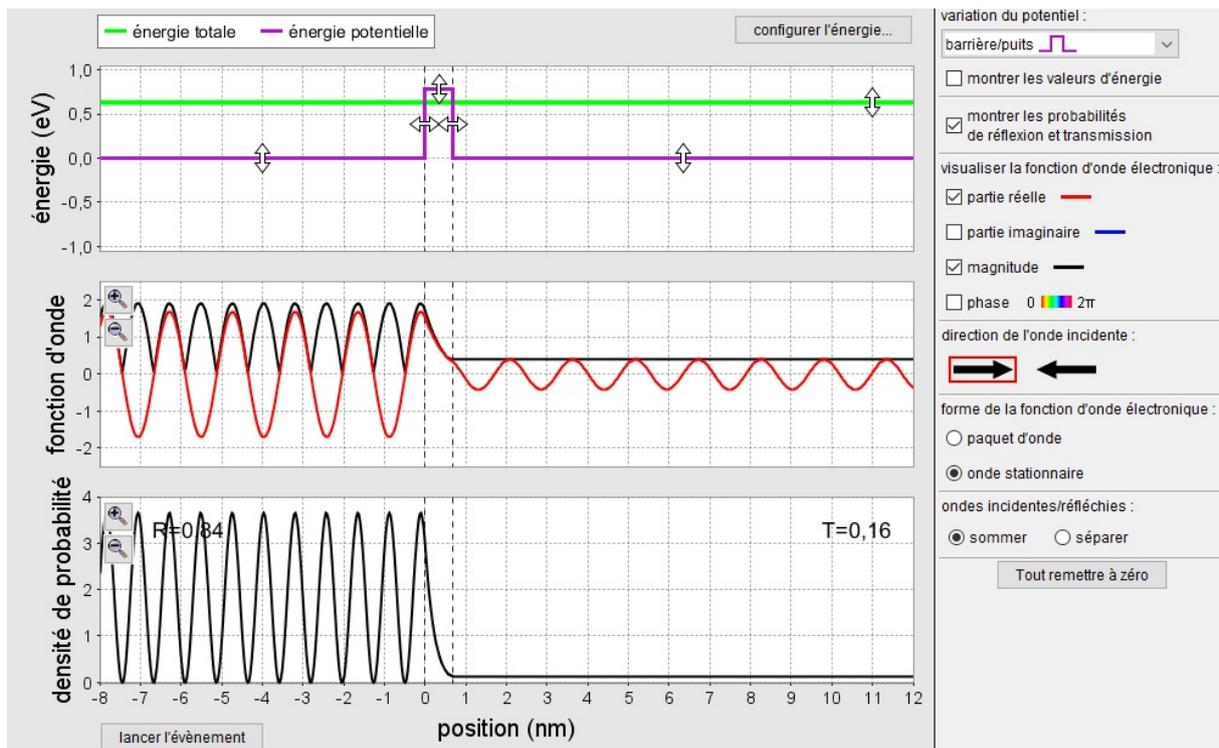


FIGURE 5 – État stationnaire dans le cas d’une barrière de potentiel avec  $E < V_0$ . Il est possible de détecter des particules derrière la barrière, et  $T \neq 0$ . On parle ici d’effet tunnel. On voit que cet effet ne peut avoir lieu que lorsque la barrière est étroite et que l’énergie  $E$  n’est pas trop faible par rapport à  $V_0$ .

\* Retrouvons ce résultat dans un cas simplifié; celui de la barrière épaisse, c'est à dire  $L \gg \delta$  avec  $\delta = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0-E)}}$   
 condition souvent vérifiée (cf exemple précédent avec  $e^-$ )

Dans ce cas, dans la barrière,  $\psi_2(x) \simeq A_2 e^{-\frac{x}{\delta}} + B_2 e^{\frac{x}{\delta}}$   
 $\simeq 0$  car sinon diverge en  $x=L$

Et par continuité en  $x=L$  à la sortie de la barrière:  
 $\psi_3(x=L) = \psi_2(x=L) \Rightarrow A_3 e^{ikL} = A_2 e^{-\frac{L}{\delta}} \Rightarrow |A_3| = |A_2| e^{-\frac{L}{\delta}}$

or  $T = \frac{\|\vec{j}_3\|}{\|\vec{j}_1\|} = \frac{|\psi_3|^2 \hbar k / 2m}{|\psi_1|^2 \hbar k / 2m} = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2} = \frac{|A_2|^2 e^{-\frac{2L}{\delta}}}{|A_1|^2} \simeq e^{-\frac{2L}{\delta}}$   
 facteur de l'ordre de l'unité (admis)

On retrouve bien les résultats obtenus avec la simulation:  
 $T \simeq e^{-\frac{2L}{\delta}}$  si  $\left\{ \begin{array}{l} L \downarrow \\ \delta \uparrow \Rightarrow (V_0 - E) \downarrow \Rightarrow E \uparrow \end{array} \right.$

δ) *Interprétation en terme de paquet d'onde*

A l'aide de la simulation, on voit que la particule a une probabilité non nulle de passer la barrière.

Rq : Ⓢ On peut interpréter l'effet tunnel comme un effet "saut-maton" grâce aux fluctuations d'énergie de la particule ( $\Delta E \Delta t \sim \hbar$ ).

Ⓣ Dans le cas où l'énergie  $E$  de la particule incidente est distribuée en dessous de la barrière, le quanton ne passe pas. L'effet tunnel est finalement intuitif ici car il ne se produit pas.

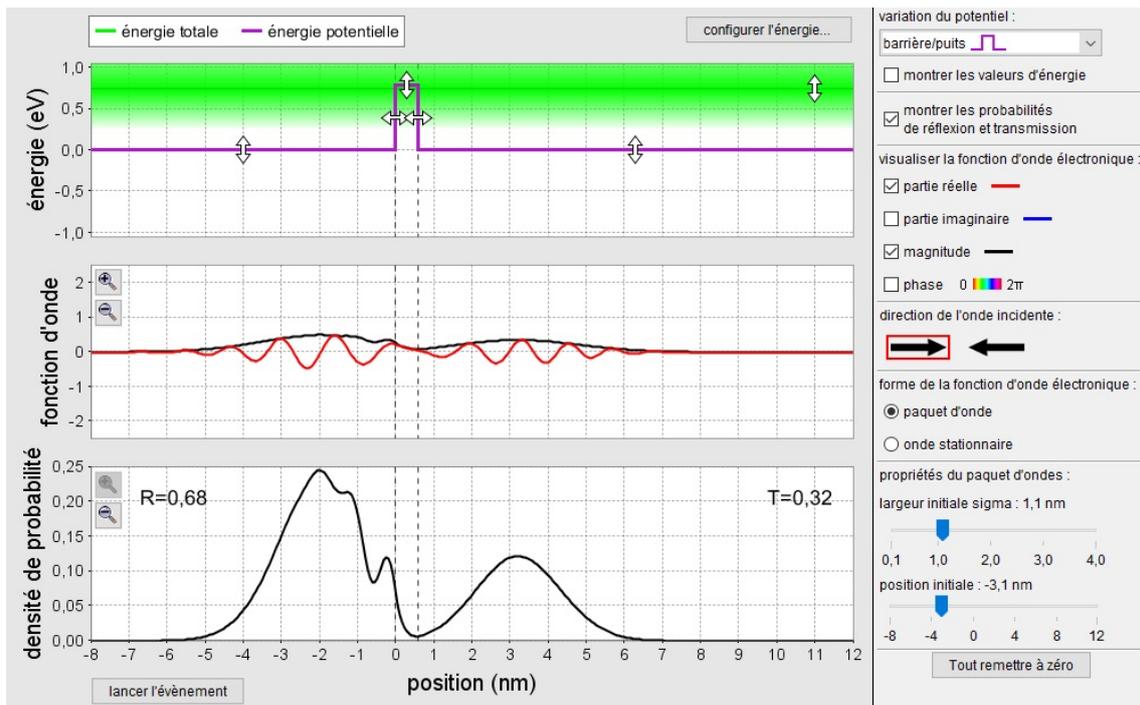


FIGURE 6 – Paquet d'onde incident sur une barrière de potentiel avec  $E < V_0$ . On voit ici qu'une partie du paquet d'onde a été transmis derrière la barrière par effet tunnel. On notera que l'énergie du paquet d'onde n'est pas parfaitement définie car elle est distribuée autour de la valeur  $E$ . On peut ainsi interpréter de manière très simple l'effet tunnel par le fait que la partie la plus énergétique du spectre est passée au dessus de la barrière.

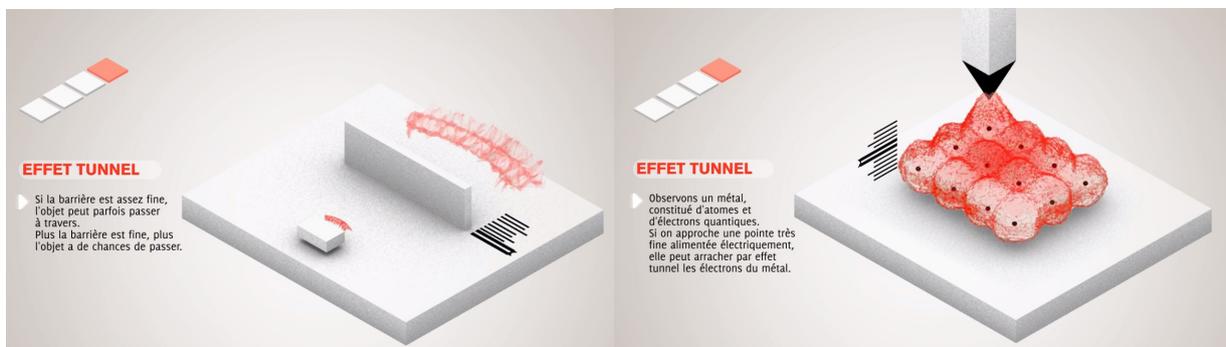
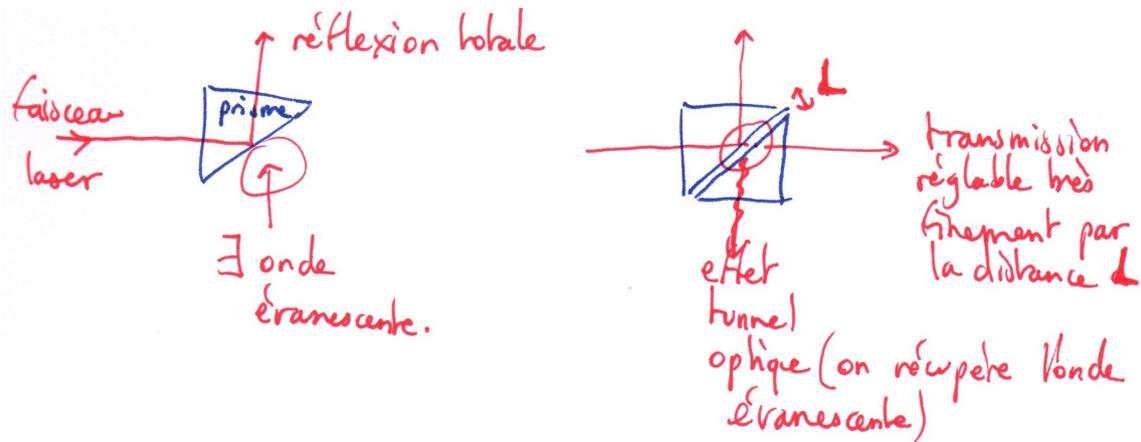


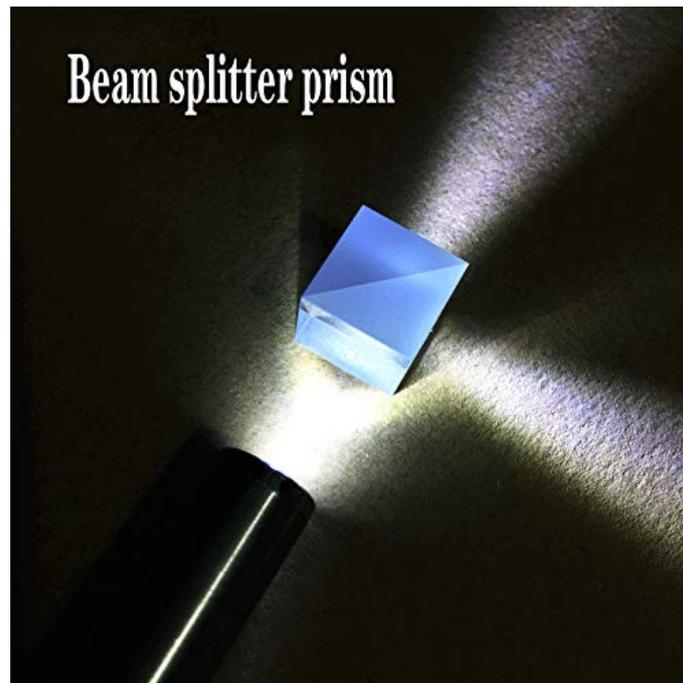
FIGURE 7 – Illustration de l'effet tunnel sur le site disponible à l'adresse : <https://toutestquantique.fr/tunnel/>. À gauche : paquet d'onde transmis au travers d'une barrière fine. À droite : schématisation d'un microscope à effet tunnel.

ε) Analogie optique

On peut faire l'analogie entre l'effet tunnel et la "réflexion totale frustrée", encore appelée effet tunnel classique.

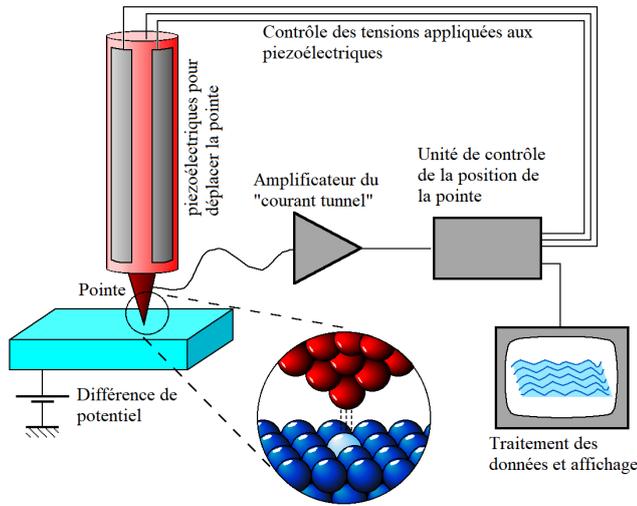


Ce type d'expérience est illustré par la figure ci-dessous, et peut également être réalisé avec des ondes centimétriques (dans ce cas, les deux prismes sont en paraffine et la distance qui les sépare est de l'ordre du centimètre).

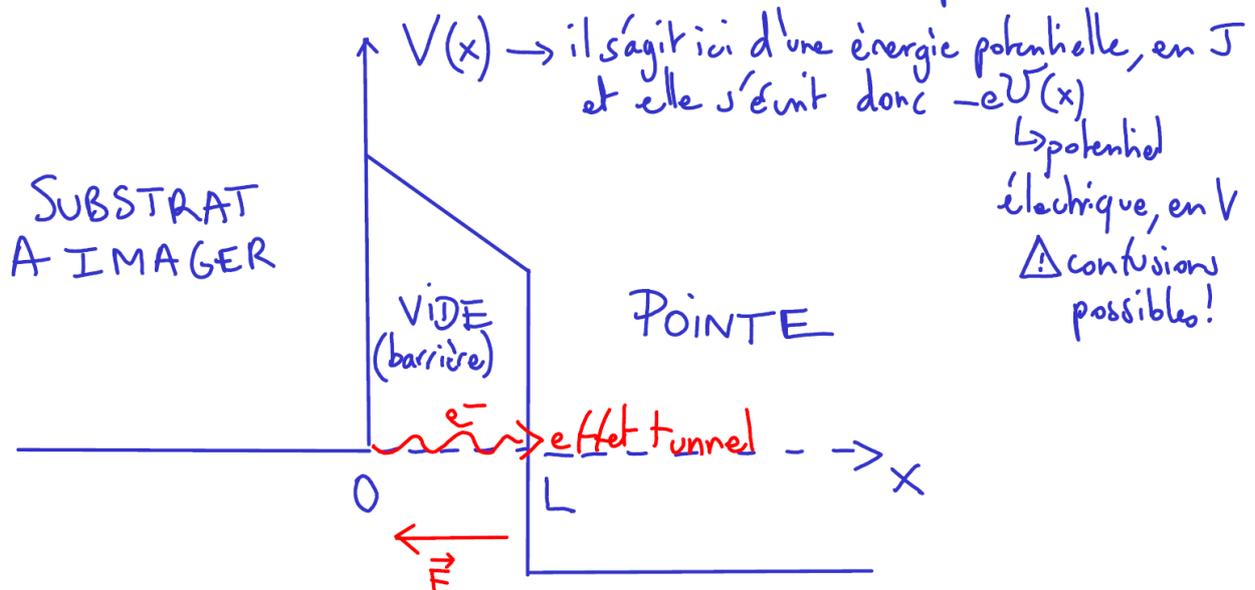


### II.3 Applications de l'effet tunnel

#### a) Le microscope à effet tunnel (Bining-Rohrer - 1980)

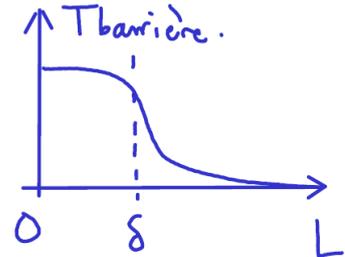


Ce type de microscope est appelé "microscope à effet tunnel" (STM pour "scanning tunnel microscope") car des électrons peuvent passer par effet tunnel entre un substrat conducteur et une pointe métallique sous l'effet d'une différence de potentiel. Le potentiel étant élevé dans le vide, et plus bas dans les conducteurs, l'électron traverse donc une barrière de potentiel.



En pratique, on mesure le courant  $i$  qui traverse la barrière (celui-ci est proportionnel à  $T_{\text{barrière}}$ , la probabilité pour les  $e^-$  de traverser la barrière) pour différentes positions de la pointe, déplacée très finement avec des piézoélectriques.

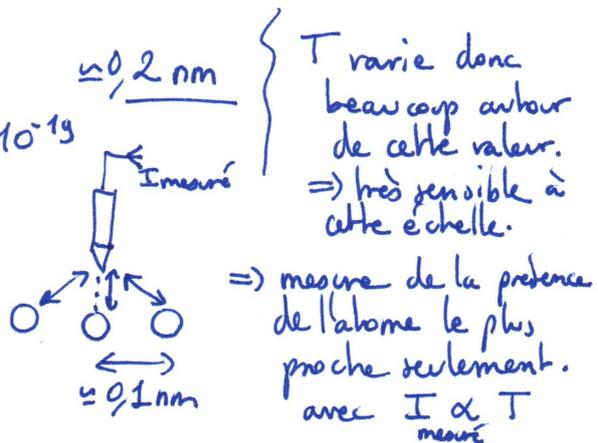
La pointe est terminée par un seul atome, de sorte que la résolution est extrêmement fine autour de la distance  $L \approx \delta$  car  $T_{\text{barrière}}$  varie beaucoup autour de cette valeur



Ordres de grandeur :

$$\delta = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}} \approx \frac{6,63 \cdot 10^{-34}}{2\pi \sqrt{2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-32} \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}}} \approx 0,2 \text{ nm}$$

↑  
m'électron      ↘  $\approx 1 \text{ eV}$



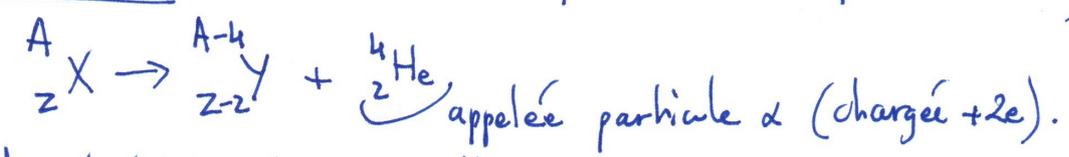
On peut comparer la résolution du microscope à effet tunnel à d'autres types de microscopes :

- $\rightarrow$  Microscope optique : limité par  $\lambda$  par la diffraction :  $\approx 1 \mu\text{m}$
- $\rightarrow$  Microscope électronique : "  $\lambda_{\text{DB}}$  des  $e^-$   $\approx 1 \text{ nm}$
- $\rightarrow$  Microscope à force atomique (champ proche, comme STM)  $\approx 1 \text{ \AA}$

b) La radioactivité

Certains noyaux comme  ${}^{238}_{92}\text{U}$  sont instables et émettent des particules ou rayonnement. On distingue 3 principaux types de radioactivité: (par ordre de découverte - du + facile à détecter au + difficile):

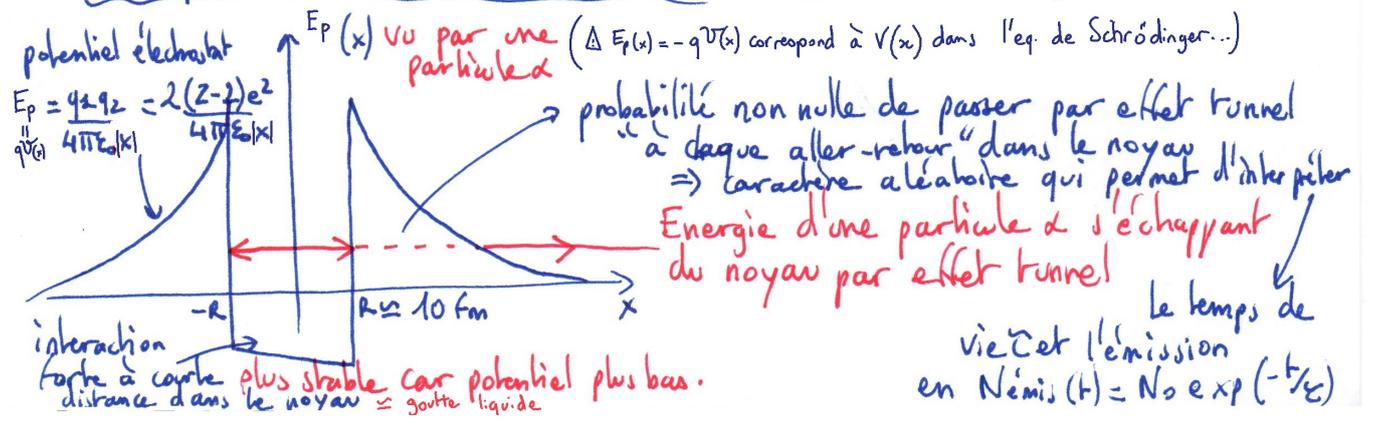
→ Radioactivité  $\alpha$ : émission de noyaux d'He (2 protons + 2 neutrons)



→ Radioactivité  $\beta$ : émission d' $e^-$  ou de positron  $\beta^+$

→ Radioactivité  $\gamma$ : émission de rayonnement électromagnétique très énergétique (rayons  $\gamma$ ).

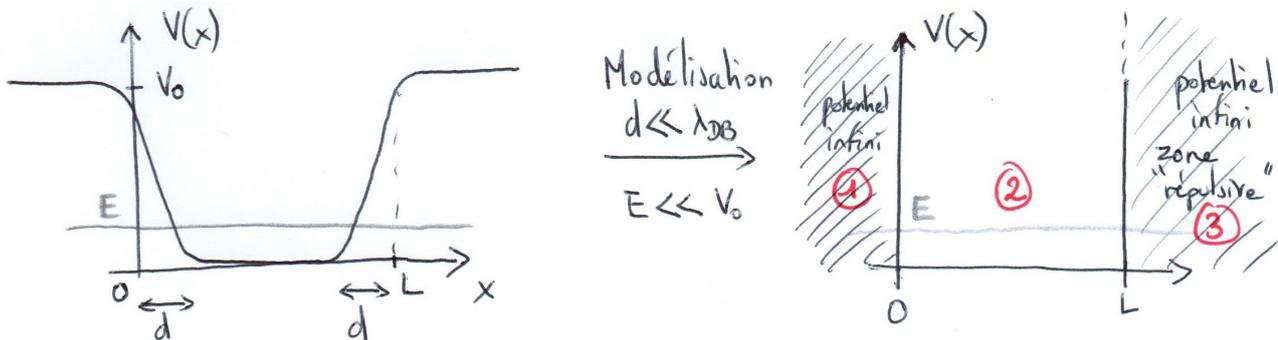
Interprétation avec l'effet tunnel (Gamov-1928)



Pour l'uranium  ${}^{238}_{92}\text{U}$ ,  $\tau = 4.5$  milliard d'années, donc la probabilité de désintégration très est faible : une chance sur deux en 4.5 milliards d'années! Or un gramme d'Uranium contient  $2.5 \times 10^{21}$  noyaux d'uranium, et il s'en désintègre environ 10 000 par seconde, une proportion infime, mais mesurable.

### III Puits de potentiel infini

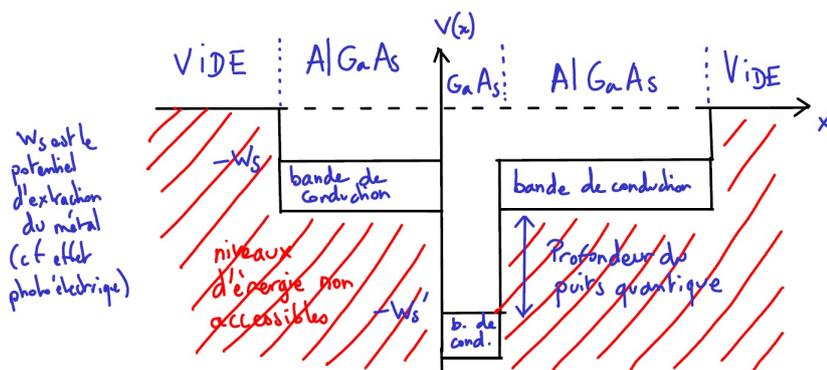
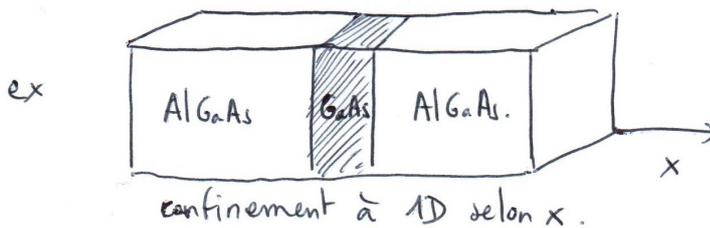
#### III.1 Modèle et cadre d'application



Cas classique: la particule reste dans le puits.

Exemples d'application du puits quantique:

→  $e^-$  confiné dans un conducteur entre 2 isolants ou 2 semi-conducteurs (transistors, lasers...)



→ Autres exemples de confinement à 2D ou 3D.  $\rightarrow$  quantum dot. "boîtes quantiques" ou  $e^-$  dans une nanoparticule (creux après)  $e^-$  dans une barrière d'atomes de Fer.



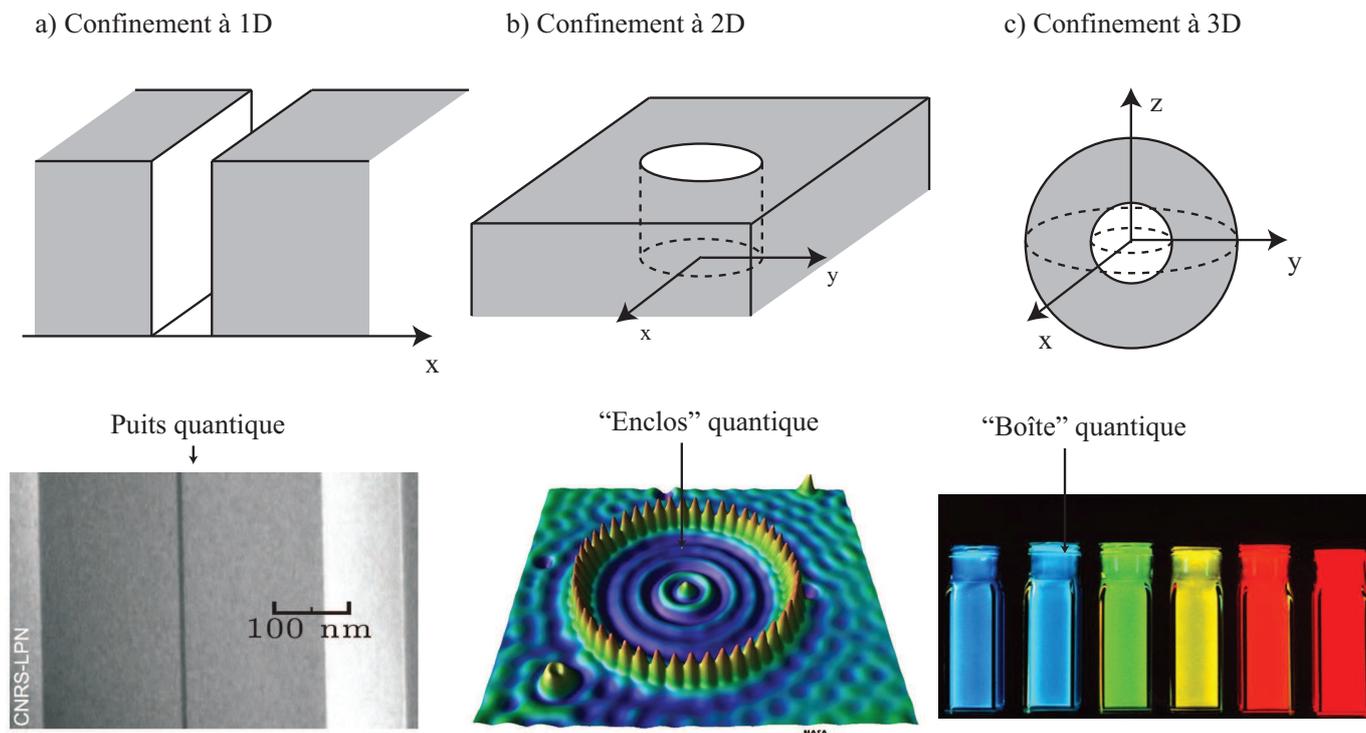


FIGURE 8 – a) Puits quantique de semi-conducteurs AlGaAs/GaAs/AlGaAs (microscope électronique). b) Atomes de Fer agencés en cercle sur une surface de Cuivre et délimitant un "enclos" quantique piégeant des électrons dont les propriétés ondulatoires sont visibles comme des ondes à la surface de l'eau (STM). c) Boîtes quantiques créées en piégeant les électrons d'un nanocrystal de CdSe dans une enveloppe de ZnO. Celles-ci jouent le rôle d'"atomes artificiels" rayonnant à différentes longueurs d'onde en fonction de leur taille.

### III.2 Caractéristiques des états stationnaires

\* Dans les zones ① et ③,  $V \rightarrow \infty$ , donc  $\Psi = 0$  (zones interdites, répulsives)  
 $\Rightarrow$  impossibilité de détecter une particule

\* Dans la zone ②,  $\Rightarrow$  comme  $V$  est indépendant du temps,  $\vec{F} = -\frac{dV}{dx} \vec{u}_x$  diverge  
 on recherche les états stationnaires:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} + 0 \times \Psi = E\Psi \quad \Rightarrow \quad \frac{d^2\Psi}{dx^2} + \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right) \Psi = 0 \quad \left. \begin{array}{l} \uparrow V=0 \text{ dans le puits} \\ \text{idem au cas de la} \\ \text{particule libre} \end{array} \right\}$$

$$\Psi_2(x) = \left( \underset{\text{OPPH}(+)}{A' e^{ikx}} + \underset{\text{OPPH}(-)}{B' e^{-ikx}} \right) = A \sin(kx) + B \cos(kx) \quad \left. \begin{array}{l} \rightarrow k \text{ est réel car} \\ E > 0 \end{array} \right\}$$

$\exists$  2 inconnues (A, B) et 3 équations :

- $\rightarrow$  normalisation
- $\rightarrow$  continuité de  $\Psi$  en  $x=0$  :  $\Psi(0)=0$

(pas de continuité de  $\frac{d\Psi}{dx}$  en  $x=0$  et  $x=L$  car le potentiel y est non borné)  
 en  $x=L$  :  $\Psi(L)=0$

Il existe donc une équation "en trop", qui conduit à une quantification de l'énergie (on notera qu'il n'y avait pas de conditions de quantification dans la marche ou la barrière, et que  $\begin{cases} E > 0 \\ \text{ou } E - V_0 > 0 \end{cases}$  était la seule contrainte sur l'énergie).

Déterminons  $\Psi(x)$ :

$$CL: \begin{cases} \Psi(0) = 0 = B \\ \Psi(L) = 0 = A \sin(kL) \Rightarrow kL = n\pi; \text{ les vecteurs d'onde} \\ \text{sont donc quantifiés } k_n = \frac{n\pi}{L}, \text{ soit } \frac{2\pi L}{\lambda_n} = \frac{n\pi}{L} \text{ et } \boxed{\lambda_n = \frac{2L}{n}} \end{cases}$$

$$\boxed{\Psi_n(x) = A_n \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)} \text{ fonction propre du mode } n. \quad \text{cf corde de Melde.}$$

On peut utiliser la condition de normalisation pour déterminer  $A_n$ :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi|^2 dx = 1 \Rightarrow \int_0^L |\Psi|^2 dx = A_n^2 \int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx = 1$$

$$\text{or } \int_0^L \sin^2\left(\frac{\pi n x}{L}\right) dx = \int_0^L \left[ \frac{1 - \cos\left(\frac{2\pi n x}{L}\right)}{2} \right] dx = \frac{L}{2} - \frac{1}{2} \left[ \frac{L}{2n\pi} \sin\left(\frac{2n\pi x}{L}\right) \right]_0^L$$

$$\text{donc } A_n^2 \frac{L}{2} = 1 \text{ et finalement } A_n = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

$$\text{et } \boxed{\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)}$$

$\hookrightarrow n \in \mathbb{N}^*$  (sinon  $n=0: \Psi=0$ )

Dans le cas général, la particule sera dans un état correspondant à une CL des fonctions propres, qui constituent une

base orthonormale (cf particule libre):  $\Psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \Psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}$

### III.3 Niveaux d'énergie

On peut calculer les énergies à partir des relations  $\begin{cases} k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \\ k_n = \frac{n\pi}{L} \end{cases}$  donc les énergies sont quantifiées et:

$$\boxed{E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{n^2 \hbar^2 \pi^2}{2mL^2}} \text{ avec } n \in \mathbb{N}^*; E_{\min} = E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \neq 0$$

Vérifions qu'il s'agit bien du même résultat que celui calculé en MPSI:

$$E_{\text{particule dans le puits}} = E_c + E_p = \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2}{2m \lambda_{DB}^2} \quad \text{or} \quad \lambda_{DB,n} = \frac{2L}{n}$$

$\uparrow$  dans le puits      $\uparrow$  De Broglie      $\uparrow$  par analogie avec la corde de Melde.

Donc les énergies sont également quantifiées et:

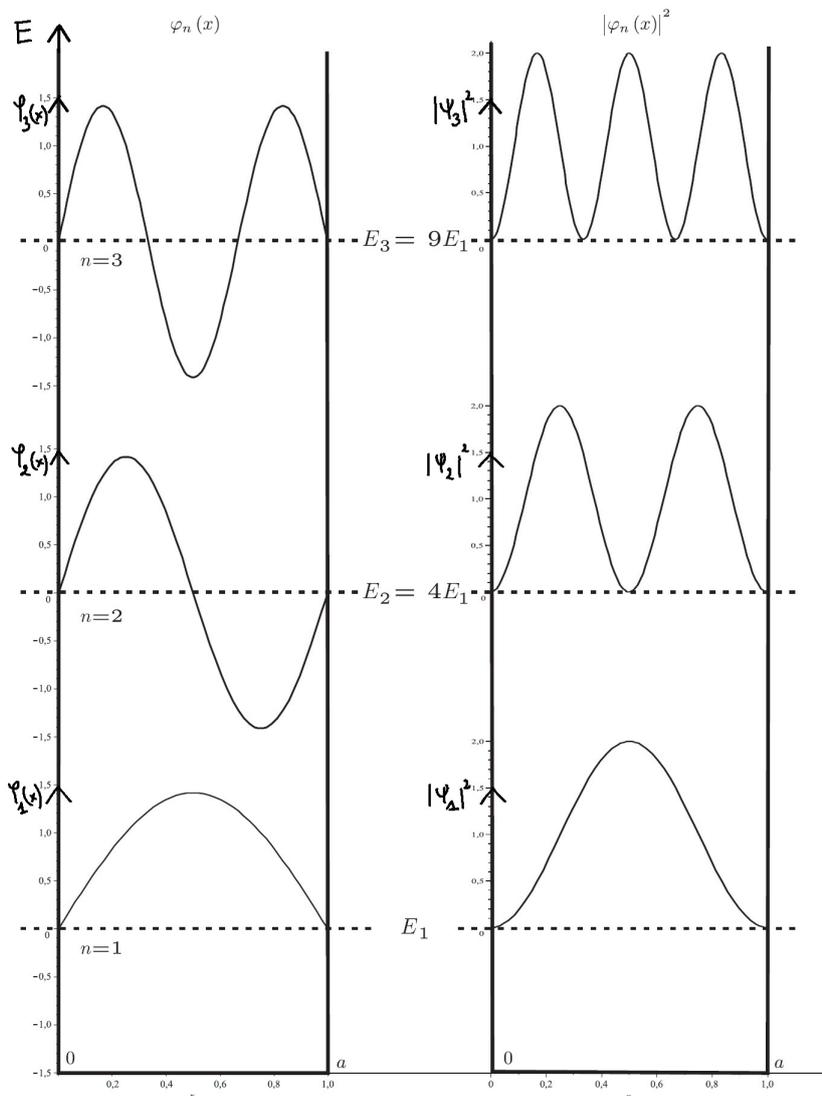
$$E_n = \frac{n^2 h^2}{2m(2L)^2} = \frac{n^2 \hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \quad \text{on retrouve bien le même résultat}$$

$\uparrow$   $\hbar = h/2\pi$

On obtient un spectre discret en énergie, indexé par le nombre quantique n

$$\Psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \quad |\Psi|^2 = |\Psi(x)|^2 = \frac{2}{L} \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

$\uparrow$  état stationnaire



On retiendra un résultat général observé ici dans un cas particulier : plus une fonction d'onde présente de nœuds, plus l'énergie correspondante est élevée.

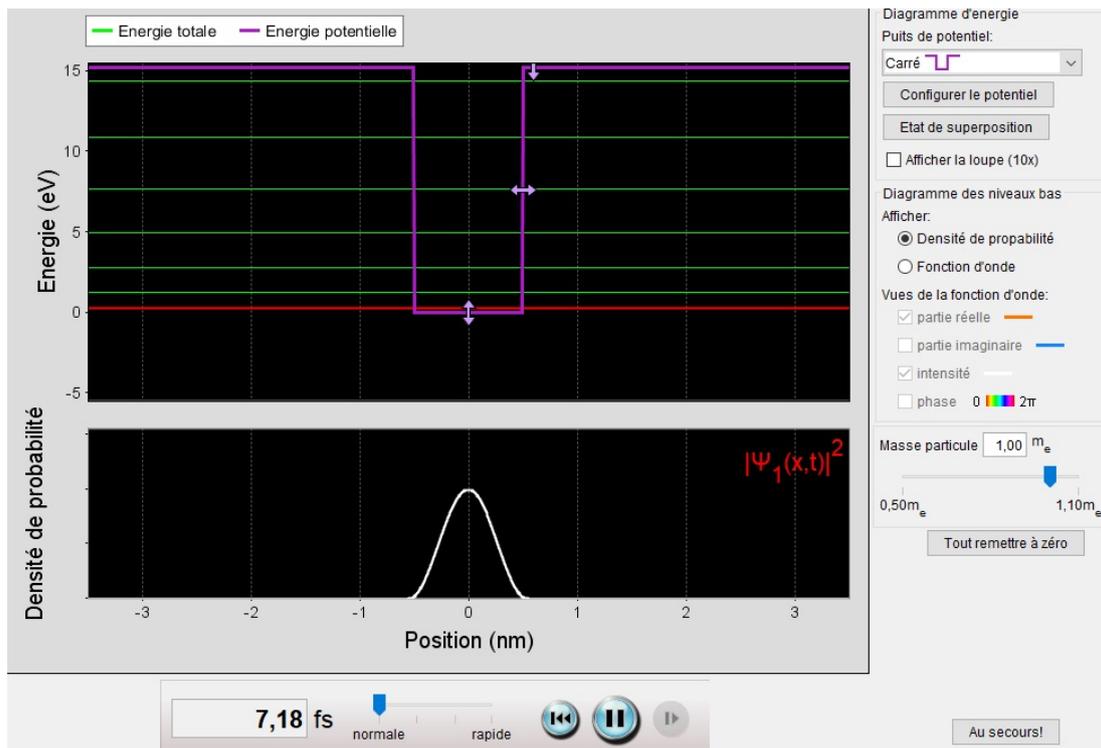


FIGURE 9 – Simulation numérique des états dans un puits quantique disponible à l'adresse : <https://phet.colorado.edu/fr/simulation/bound-states>. On y retrouve que les niveaux d'énergie s'éloignent en  $n^2$  à la différence de ceux de l'atome d'hydrogène qui sont en  $1/n^2$ . On notera que le temps d'évolution du bas de la figure peut se retrouver en posant  $e^{-iEt/\hbar} = e^{-it/\tau}$  avec  $\tau = \hbar/E \simeq 10^{-34}/10^{-19} \simeq 10^{-15} s$ .

Cas particulier du puits fini :

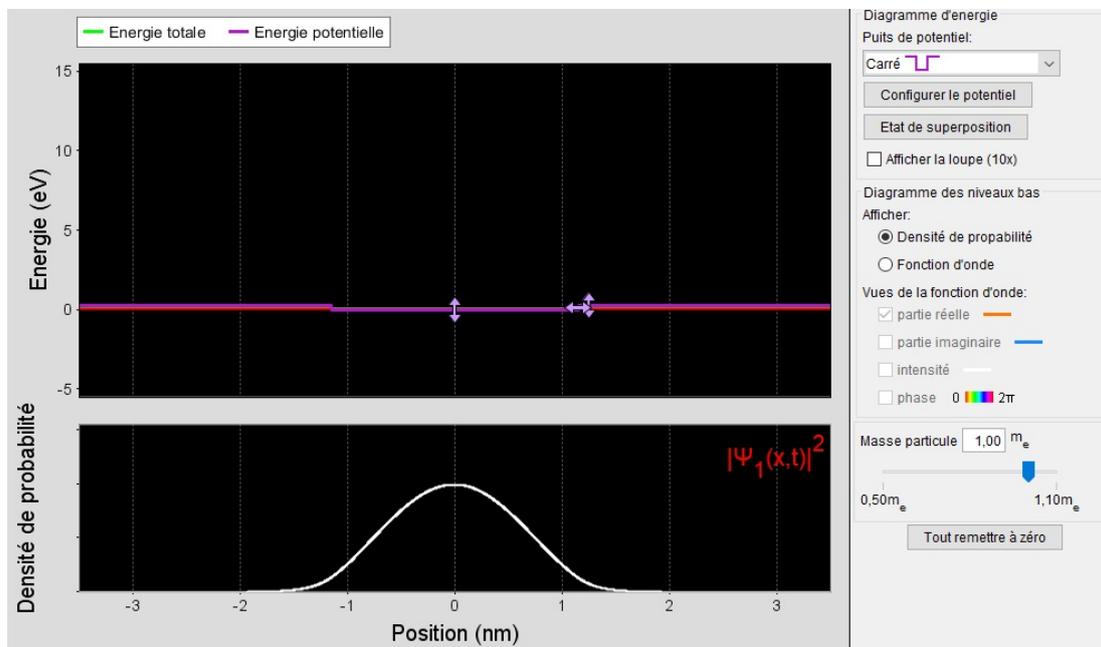


FIGURE 10 – Puits fini. On voit que lorsque la profondeur du puits diminue, il apparaît des ondes évanescentes de chaque côté du puits, augmentant ainsi fictivement la largeur du puits. On notera la discontinuité de  $d\varphi/dx$  lorsque le potentiel en bord de puits n'est pas infini.

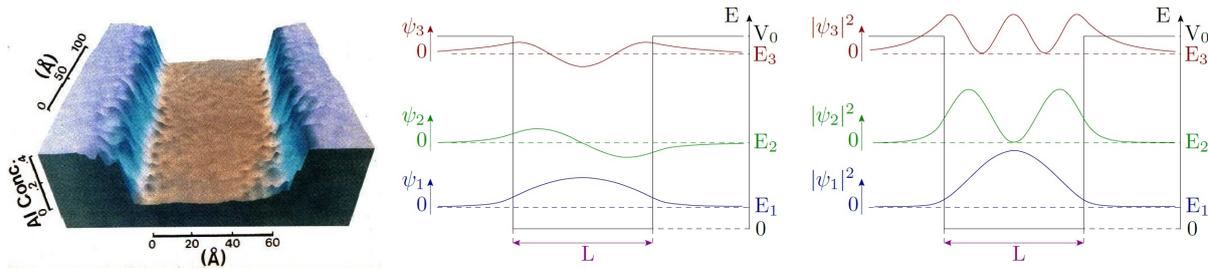


FIGURE 11 – Puits fini. Représentation des parties spatiales  $\varphi_n(x)$  de la fonction d'onde des états stationnaires (c'est à dire aussi  $\psi_n(x, t = 0)$ ), et de la densité de probabilité. On notera que dans cet exemple, seuls certains états ont des énergies quantifiées, et que ces états "débordent" à l'extérieur du puits sous la forme d'ondes évanescentes sur une distance  $\delta$  (voir cas de la marche avec  $E < V_0$ ).

### III.4 Existence d'un état d'énergie minimale - énergie de confinement

Si l'énergie minimale d'une particule dans un puits infini était nulle, on aurait  $|\psi_0(x)|^2 = 0$  dans tout le puits. On tombe sur une contradiction car cela signifierait qu'il n'y a pas de particule dans le puits. Cherchons une interprétation de l'existence de ce minimum d'énergie.

Montrons que le fait que l'énergie minimale d'une particule dans un puits soit non nulle :  $E_{\min} = E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \neq 0$  peut s'interpréter avec l'inégalité de Heisenberg  $\Delta p_x \Delta x \gtrsim \frac{\hbar}{2}$ .

→  $\Delta p_x^2 = \langle p_x^2 \rangle - \langle p_x \rangle^2$ , or pour un puits symétrique  $\langle p_x \rangle = 0$  (car  $\Delta \langle x \rangle \neq 0$  ici et vaut  $\frac{L}{2}$ )  
 puisque la fonction propre correspond à la superposition de 2 ondes contra-propageantes  
 $\Psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(k_n x) = \sqrt{\frac{2}{L}} x \frac{1}{2i} [e^{ik_n x} - e^{-ik_n x}]$   
 $\Psi(x, t) = \Psi(x) e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} = \sqrt{\frac{2}{L}} \frac{1}{2i} [e^{i(k_n x - \frac{E_n t}{\hbar})} - e^{-i(k_n x + \frac{E_n t}{\hbar})}]$

Donc d'après l'inégalité de Heisenberg:  $\langle p_x^2 \rangle \gtrsim \left(\frac{\hbar}{2\Delta x}\right)^2$

et donc  $\langle E_{\text{particule}} \rangle = \langle E_c + E_{\text{p}} \rangle = \langle E_c \rangle + \frac{\langle p_x^2 \rangle}{2m} \gtrsim \frac{\hbar^2}{8m \Delta x^2}$   
 énergie moyenne

→ Par ailleurs  $\Delta x^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$  avec  $\langle x^2 \rangle = \int_0^L x^2 |\Psi|^2 dx = \frac{4L^2}{\pi^2}$   
 Le calcul conduit à  $\Delta x \approx L$  (confinement)  $\langle x \rangle = \int_0^L x |\Psi|^2 dx = 0$

Même le calcul exact ne conduit pas à la bonne expression, donc on ne le fait pas...

donc  $E \gtrsim \frac{\hbar^2}{8mL^2}$  (au lieu de  $\frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}$ ; accord qualitatif)

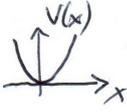
On retiendra :  $E_{\min} \approx \frac{\hbar^2}{mL^2}$  → énergie de confinement (ou de localisation)

Plus on cherche à confiner une particule, plus les énergies mises en jeu sont importantes. La physique de l'infiniment petit est donc également la physique des hautes énergies (ELHC colossale; idem pour  $E_{\text{fusion}}$  pour ITER).

### Remarque

Dans le cas d'un puits fini, on s'attend à un léger abaissement des niveaux d'énergie puisque la taille sur laquelle sont confinées les particules peut être assimilée grossièrement à  $L' = L + 2\delta$ , avec  $\delta \ll L$ .

Remarque: Ce résultat n'est pas spécifique au puits infini et se généralise à tout confinement dans un potentiel.

Dans le cas de l'oscillateur harmonique quantique 

$E_{\text{min}} = \frac{\hbar\omega}{2} \neq 0$  (cf exercice 1 du TD26)  
 $E = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$  et ex 10 du TD24

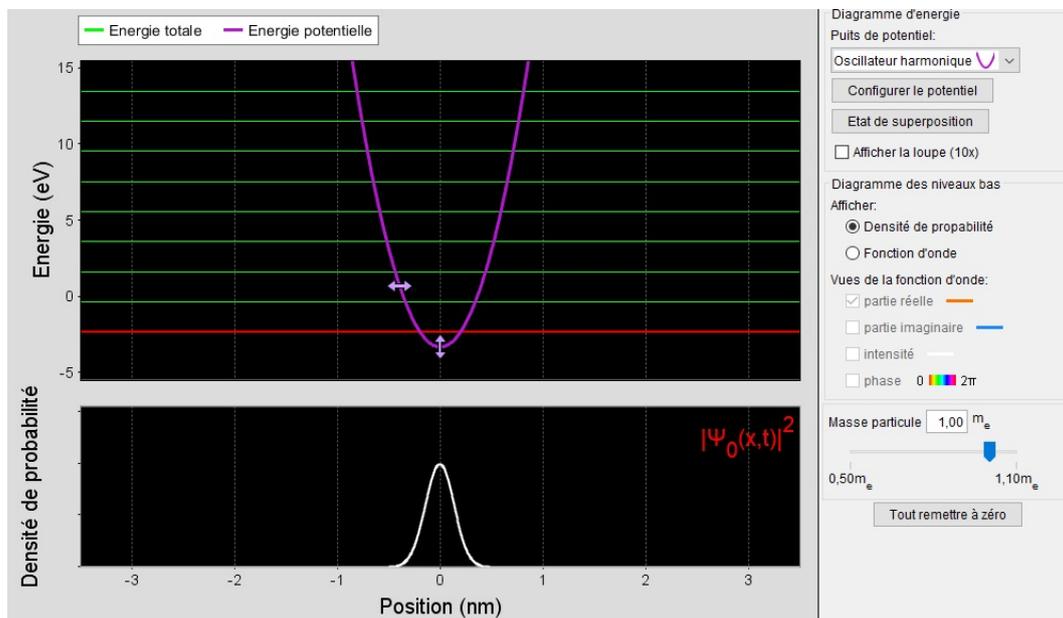


FIGURE 12 – Simulation numérique des états dans un puits harmonique. On constate, comme dans le puits infini, que l'énergie minimale d'une particule est non nulle à cause du confinement spatial. On notera qu'on retrouve bien la répartition des niveaux d'énergie déjà évoquée lors de la résolution du modèle quantique d'Einstein de la capacité calorifique des solides :  $E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right)$ .

III.5 Dépendance des niveaux d'énergie vis à vis des paramètres

On a obtenu :  $E_n = \frac{n^2 \hbar^2 \pi^2}{2mL^2}$

Commentons les dépendances de  $E_n$  avec  $L, n$  et  $m$ , en complétant avec la simulation numérique "Etats quantiques liés" disponible à l'adresse : <https://phet.colorado.edu/fr/simulation/board-states>

\* Influence de L :

- si  $L$  est petit,  $E_{min}$  est grand, comme expliqué précédemment
- si  $L$  est petit, la différence entre les niveaux d'énergie est plus importante et le système devient "très quantique".

On le vérifie avec l'animation en faisant varier  $L$  (rendre le puits le plus  $\infty$  possible et montrer les densités de probabilité et fonctions d'ondes)  
 ↳ temps typique d'évolution

$\tau = \frac{1}{\nu} = \frac{h}{E} = \frac{6 \cdot 10^{-34}}{10^{-19}} \approx 6 \cdot 10^{-15} \text{ s} \approx \text{fs} \rightarrow$  explique le défilement en bas.

↳ Montrer aussi l'influence du puits fini avec ondes évanescentes sur les bords. et que  $E \uparrow \Rightarrow$  variation plus rapide de  $\psi$ .

\* Influence de n :

- plus  $n$  augmente, plus  $\psi$  et  $|\psi|^2$  oscillent  $\Rightarrow$  densité quasiment uniforme pour  $n$  très grand

en effet :  $P_n(x) = |\psi_n|^2 = |\psi_n|^2 = \frac{2}{L} \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \approx \frac{1}{L}$   
 ↑ état stationnaire  
 ↑ probabilité de se retrouver en  $x$  pour l'état propre  $\psi_n$

↳  $\approx 1/2$  car oscillations très nombreuses comme  $\langle \rangle$

- on retrouve donc bien la limite classique, pour laquelle la densité de probabilité de trouver la particule entre 0 et  $L$  est uniforme:

$\int_0^L p(x) dx = 1 \Rightarrow p_0 \int_0^L dx = p_0 L = 1 \Rightarrow p_0 = \frac{1}{L}$  cohérent.

On retrouve le principe de correspondance de Bohr  $n \uparrow \leftrightarrow$  classique

\* Influence de m :

- plus  $m$  est petit, plus  $E_1$  est grand et plus les niveaux d'énergie sont séparés, donc "plus c'est quantique". (idem  $L$ ).

On le vérifie avec la simulation

On le vérifie avec l'animation

Expérience avec boîtes quantiques:  nanoparticules (CdSe) ZnO  
Fluorescence (émission à une longueur d'onde ≠)

Questions: 1) Quelles sont les nanoparticules les plus petites?

$L \downarrow \Rightarrow \Delta E_{\text{entre 2 niveaux d'énergie}} \uparrow \Rightarrow \nu \uparrow \Rightarrow \lambda \downarrow$  donc les plus petites sont bleues ou vertes et les rouges sont les plus grosses.  
 $\Delta E = h\nu$   
 $\nu = \frac{c}{\lambda}$

2) Quelle est la taille typique de ces nanoparticules?

$\Delta E \approx 1\text{eV}$  pour le visible  $\Rightarrow L \approx 1\text{nm}$  lorsque  $E_2 - E_1 \approx 1\text{eV}$

3) Pourquoi éclairer avec du bleu/de l'UV? <sup>Simulation</sup>

Plus compliqué, mais il faut au moins exciter le premier niveau  $\Rightarrow$  besoin de plus d'énergie

4) A quoi ça sert?

- utilisés comme marqueurs biologiques (souris, mais pb de toxicité pour l'instant)
- utilisés comme source de lumière monochromatique (écrans de tableaux de bord d'avion de chasse avec <sup>LED</sup> aucune émission dans l'IR).
- encre de couleur adaptable  $\rightarrow$  Ecrans ordinateurs : meilleure résolution
- ⋮

What is Color IQ Quantum Dot Technology



**Typical LCD Display**

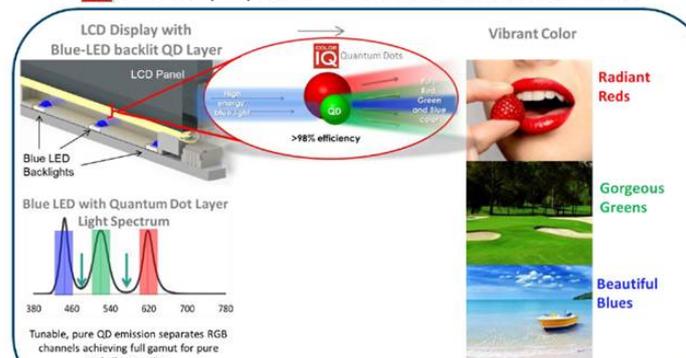
Typical LCD Display with White-LED backlights  $\rightarrow$  Typical Color



Leakage between RGB channels limit color gamut coverage

**Color IQ LCD Display with Color IQ Quantum Dot Tech**

LCD Display with Blue-LED backlight QD Layer  $\rightarrow$  Vibrant Color



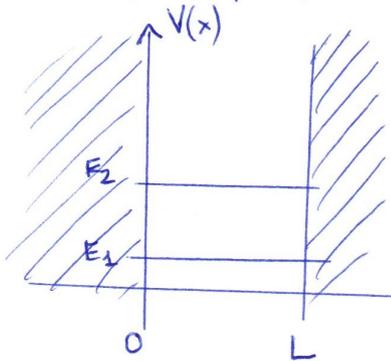
Tunable, pure QD emission separates RGB channels achieving full gamut for pure and vibrant colors

III.6 Analogies et différences avec le cas de la corde de Melde et les guides d'onde

	Corde de Melde (pas d'amortissement)	Guide d'onde (métal parfait)	Puits quantique infini
Schéma			
Grandeur oscillante	points de la corde	champ électrique	fonction d'onde ⚠ Pas de vibration de la particule dans le puits.
Expression des modes/fonctions propres	$y_n(x,t) = A_n \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \cos(\omega t)$	$\vec{E}_n(x,z,t) = E_0 \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \cos(\omega t - k_z z)$	$\Psi(x,t) = \Psi_0 \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} + EC$
Equation d'onde	D'Alembert linéaire	D'Alembert linéaire	Schrödinger linéaire + EC
C.L.	$y(0) = y(L) = 0$ corde attachée	$\vec{E}(x=0) = \vec{E}(x=L) = \vec{0}$ métal parfait	$\Psi(x=0) = \Psi(x=L) = 0$ Zones interdites hors du puits + normalisation
Vecteur d'onde quantifié?	oui : $k_n = \frac{n\pi}{L}$	Non $\rightarrow k_x : k_n = \frac{n\pi}{L}$ quantifié $\rightarrow k_z$ non quantifié	oui $k_n = \frac{n\pi}{L}$
Energie quantifiée?	non (dépend des C.I.)	non (dépend des C.I.)	oui : $E_n = \frac{n^2 \hbar^2 \pi^2}{2mL^2}$
Dispersion?	non : $k_n = \frac{\omega}{c}$ $v_\varphi = c = \sqrt{\frac{T}{\mu}}$	oui $k_n^2 = \frac{\omega^2}{c^2} - \frac{n^2 \pi^2}{L^2}$ $v_\varphi = \frac{\omega}{k_n}$ dépend de $\omega$ . (cf plasma)	oui $\omega = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}$ $v_\varphi = \frac{\omega}{k_n} = \frac{\hbar^2 k_n}{m}$

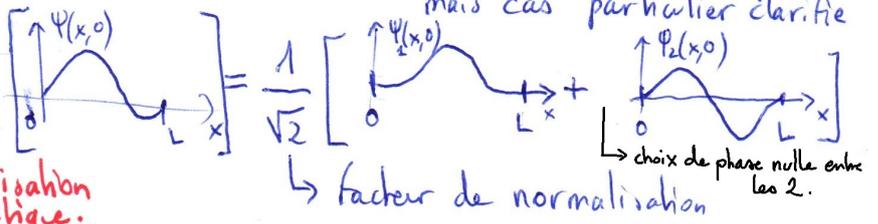
### III.7 États non stationnaires dans un puits infini

On envisage la superposition de 2 états stationnaires dans un puits infini. On "prépare", à l'aide d'une impulsion laser sur une boîte quantique par exemple, l'état suivant à  $t=0$ :



$$\Psi(x, t=0) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\Psi_1(x, t=0) + \Psi_2(x, t=0)]$$

on aurait pu prendre d'autres coefficients et d'autres fonctions propres, mais cas particulier clarifié



Montrer animation avec superposition → normalisation automatique.

$$\int |\Psi(x, t=0)|^2 dx = \frac{1}{2} \int [|\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2 + \Psi_1^* \Psi_2 + \Psi_2^* \Psi_1] dx = \frac{1}{2} [1 + 1 + 0] = 1$$

[Normal car  $\{\Psi_n(x, t)\}$  = base orthonormée des états dans le puits] orthonormalité des fonctions  $\sin(nx)$

Quand on retire la pause dans l'animation, on voit que  $|\Psi(x, t)|^2$  dépend du temps ⇒ la superposition n'est plus un état stationnaire.

Montrons le, sachant que pour les états stationnaires  $\Psi_n(x, t) = e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}} \varphi_n(x)$

donc  $\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\Psi_1(x, t) + \Psi_2(x, t)] = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_1(x) e^{-i \frac{E_1 t}{\hbar}} + \varphi_2(x) e^{-i \frac{E_2 t}{\hbar}}]$

d'après la linéarité de Schrödinger

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i \frac{E_1 t}{\hbar}} [\varphi_1(x) + \varphi_2(x) e^{-i \frac{(E_2 - E_1) t}{\hbar}}]$$

$$\text{et } |\Psi(x, t)|^2 = \frac{1}{2} [\varphi_1(x)^2 + \varphi_2(x)^2 + \varphi_1(x) \varphi_2(x) \underbrace{[e^{-i \frac{(E_2 - E_1) t}{\hbar}} + e^{i \frac{(E_2 - E_1) t}{\hbar}}]}_{2 \cos(\frac{E_2 - E_1}{\hbar} t)}]$$

⇒ état non stationnaire

∃ oscillations à la fréquence  $\nu = \frac{E_2 - E_1}{h}$

terme dépendant du temps

Il n'est pas surprenant de trouver un état non stationnaire avec une superposition d'états stationnaires : c'est déjà ce que nous avons utilisé avec le paquet d'onde qui peut se propager grâce à cet effet.

Essayons maintenant de donner une interprétation de cette dépendance temporelle en utilisant une simulation numérique. On commence par prendre la même superposition d'états initiale que dans le calcul ci-dessus, et on observe l'évolution de la densité de probabilité au cours du temps : on constate que la densité de particule oscille entre deux états bien distincts : un quanton localisé dans la partie gauche du puits (comme à  $t = 0$ ), et un quanton localisé dans la partie droite du puits. Ces états correspondent à une superposition des deux premiers états stationnaires :

$$\Psi_g(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\Psi_1(x, t) + \Psi_2(x, t)]$$

$$\Psi_d(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\Psi_1(x, t) - \Psi_2(x, t)]$$

On peut montrer simplement que la fréquence d'oscillation entre les deux états est la même que précédemment et  $\nu = \frac{E_2 - E_1}{h}$ .

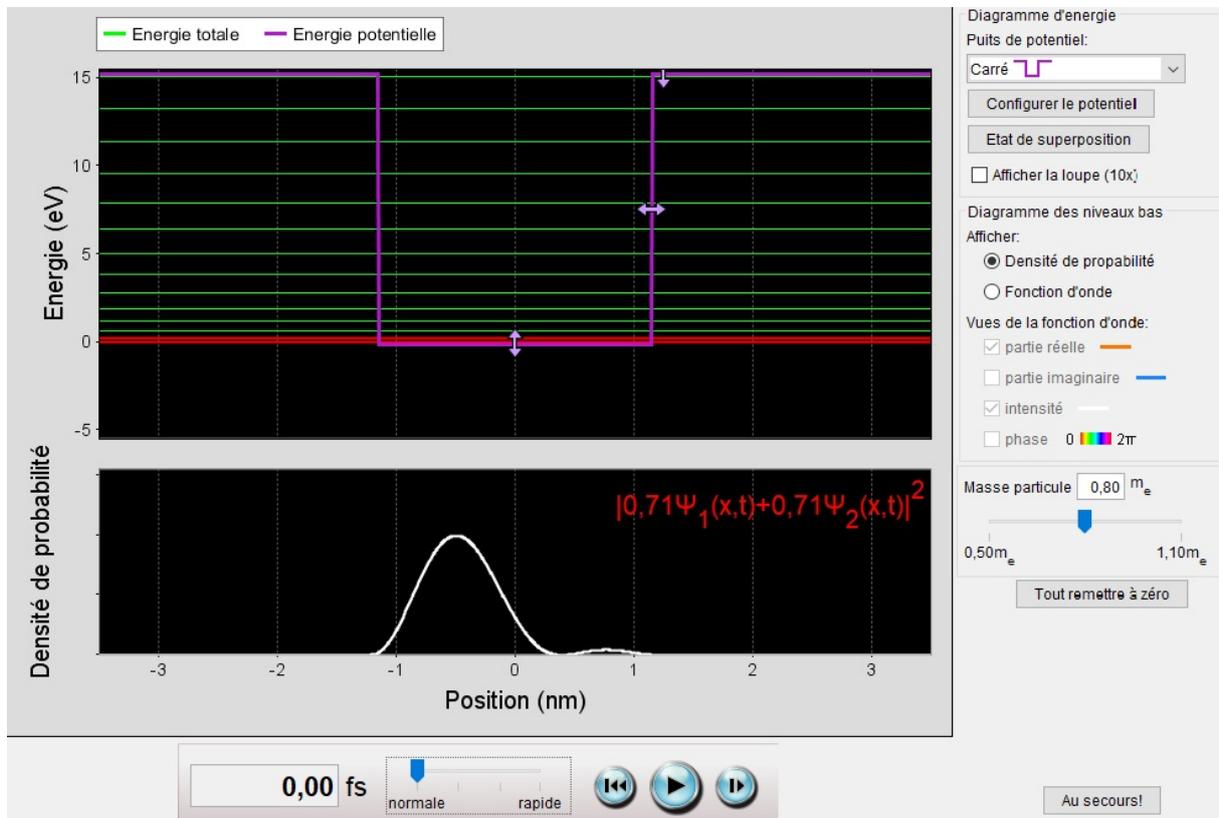


FIGURE 13 – Simulation numérique de l'évolution temporelle d'une superposition d'états stationnaires :  $\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\Psi_1(x, t) + \Psi_2(x, t)]$ . À  $t = 0$ , la particule est "dans la partie gauche du puits", comme le montre sa densité de probabilité de présence. On constate que la particule oscille ensuite entre les états "gauche" et "droite" à la fréquence  $\nu = \frac{E_2 - E_1}{h}$ .

Imaginons maintenant que nous répétons un grand nombre de fois une expérience de mesure de position du quanton dans la partie gauche du puits, en décalant à chaque fois le temps auquel la mesure est effectuée par rapport à la préparation de la même superposition quantique initiale.

On s'attend alors à observer les résultats de la figure ci-contre, analogue, toutes proportions gardées, aux oscillations de Rabi dans un atome à deux niveaux (voir vidéo ci-dessous).

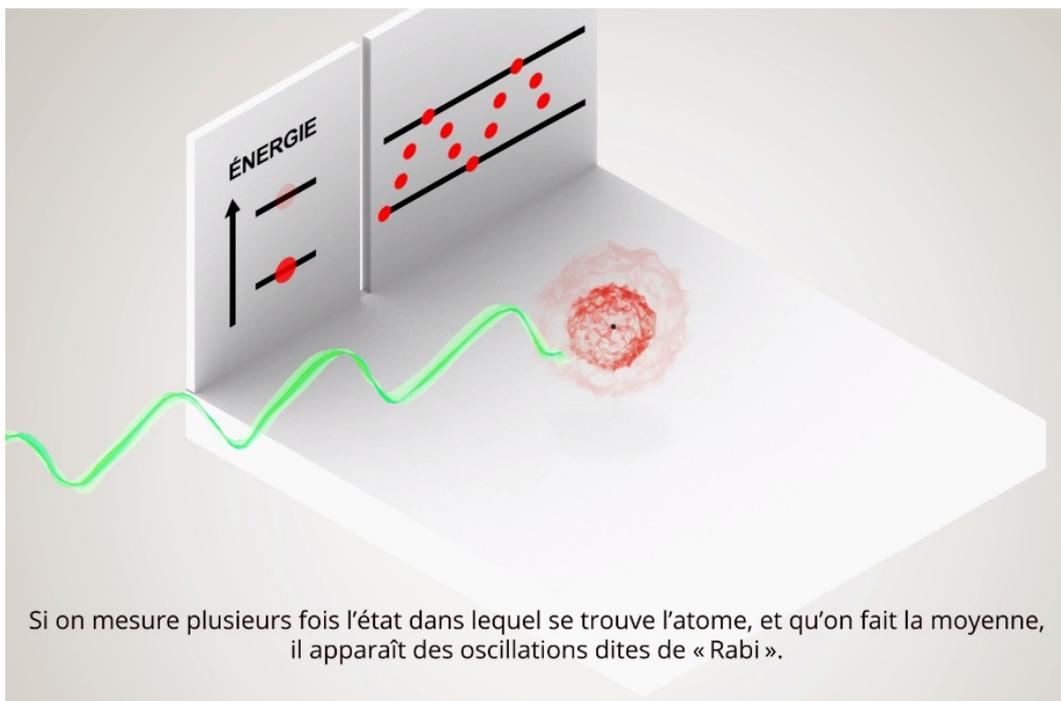
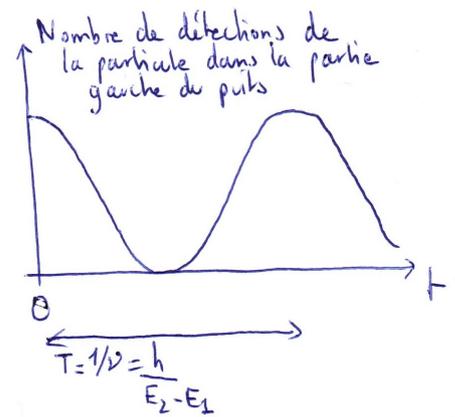


FIGURE 14 – Superposition quantique d'états. Animation disponible à l'adresse : <https://toutestquantique.fr/superposition/>. On peut mesurer les états "au repos" et "excité" d'un atome lors de son évolution à partir d'une superposition quantique préparée initialement entre les deux états. On constate bien une "oscillation de Rabi" entre ces deux états. Néanmoins, pour les systèmes en interaction avec l'extérieur, on constate également qu'il existe un fort phénomène de "décohérence quantique" détruisant très rapidement la superposition d'états.

## Conclusion

Nous avons présenté ici les grandes lignes du formalisme permettant de décrire en particulier l'effet tunnel et la quantification des énergies dans un puits quantique. On notera que les notions introduites ici permettent de comprendre d'autres phénomènes plus complexes comme les oscillations de la molécule d'ammoniac entre ses deux configurations dans le MASER grâce à un modèle de double puits couplés par effet tunnel (voir exercice correspondant dans le TD26), ou le laser à cascade quantique, dans lequel on exploite le fait qu'un électron puisse passer d'un puits à un autre par effet tunnel et émettre un rayonnement réglable en fonction de la largeur du puits et de la différence de potentiel appliqué.

Néanmoins, ce formalisme dit "de Schrödinger", plus simple à appréhender dans un premier temps, se révèle trop lourd à manipuler pour des problèmes plus complexes, dans lesquels le formalisme dit "de Dirac", plus mathématique, lui est préféré.