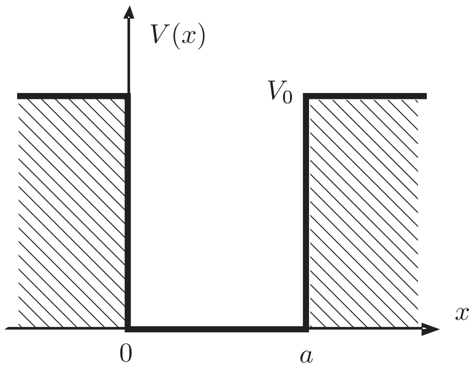
Travaux dirigés de physique quantique
PA101 - PC 2
Puits quantique carré

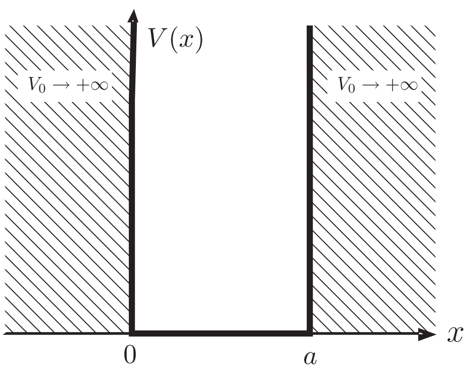
L'objectif de cette PC est de résoudre l'équation de Schrödinger dans le cas d'école, exemplaire, et simple du puits quantique carré *unidimensionnel*. Ce cas unidimensionnel correspond néanmoins à des situations physiques très réalistes. Les lasers des lecteurs/graveurs de DVD sont formés dans leur partie active de puits quantiques réalisés à partir de couches de semi-conducteurs où un électron voit des zones d'énergie potentielle constante essentiellement le long d'une *seule* direction de l'espace. On généralisera le problème à trois dimensions dans la dernière partie. On considère une particule de masse m décrite par la fonction d'onde $\psi(x,t)$ évoluant dans un champ de force conservatif dérivant de l'énergie potentielle $V(x)$ de la figure ci-contre.



1 Équation de Schrödinger unidimensionnelle (1D)

1. Écrire l'équation de Schrödinger à une dimension et expliquer physiquement sa signification ainsi que celle de la fonction d'onde $\psi(x,t)$.
2. Écrire l'équation de Schrödinger indépendante du temps. Les solutions $\varphi(x)$ sont les états stationnaires. Rappeler pourquoi résoudre cette dernière équation est équivalent à résoudre la première.
3. Quelle est la solution générale lorsque l'énergie potentielle $V(x) = V_0$ est constante ? Distinguer le résultat suivant la valeur de l'énergie E par rapport à l'énergie potentielle V_0.
4. Quelles sont les conditions aux limites, e.g. en $x = 0$, sur la fonction d'onde et ses dérivées pour une énergie potentielle discontinue ? On pourra intégrer utilement l'équation de Schrödinger sur un segment de longueur infinitésimale autour de l'interface en $x = 0$.
5. En considérant les conditions aux limites à l'infini, dessiner l'allure de la fonction d'onde pour le profil d'énergie potentielle de la première figure et une énergie $E < V_0$.

2 Cas du puits quantique avec une hauteur de barrière infinie

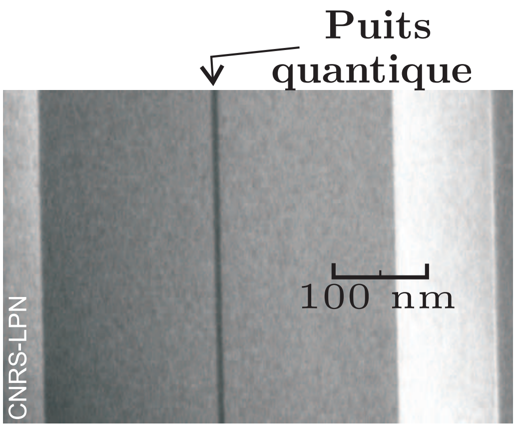


Pour simplifier la résolution on fait tendre la hauteur de barrière vers l'infini : $V_0 \to +\infty$

1. Que devient la fonction d'onde dans les barrières et les conditions aux limites en $x = 0$ et $x = a$?
2. Montrer que les conditions aux limites imposent une discrétisation du spectre d'énergie et donner ce spectre avec les fonctions d'onde normalisées correspondantes.
3. Dessiner le diagramme d'énergie et représenter les trois premières fonctions d'onde.

3 Interprétation physique

1. Quelle est l'énergie la plus basse pour la particule confinée ?
2. Quelle est la différence avec la solution du problème classique ? Montrer que cela est une conséquence directe de la relation d'incertitude de Heisenberg.
3. Discuter la signification physique de la fonction d'onde.
4. Comment évolue temporellement l'un des états stationnaires ? Justifier l'appellation d'état stationnaire.
5. Comment évolue une superposition quelconque de deux états stationnaires d'énergies différentes ?

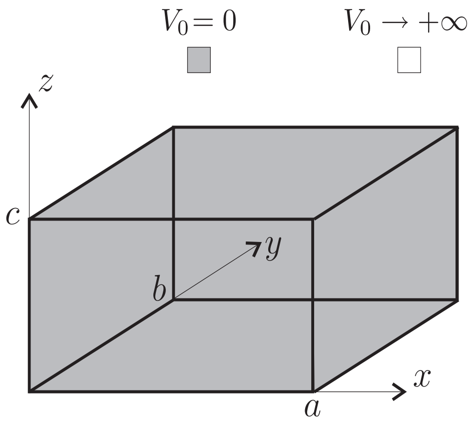


Puits quantique de semi-conducteurs : images en microscopie électronique en transmission de couches minces GaAs/GaAlAs

4 Généralisation au cas tridimensionnel (3D) de la boîte quantique

Le cas du puits quantique tridimensionnel correspond aussi à des situations physiques réalistes comme les centres colorés (cf autre PC) ou les nanostructures de semi-conducteurs. Il permet souvent de rendre compte de l'essentiel de la physique en jeu. On considèrera la fonction d'onde $\varphi(x, y, z)$ et l'énergie potentielle $V(x, y, z)$ avec des hauteurs de barrière infinies :

$$V(x, y, z) = \begin{cases} 0 \text{ dans le pavé } [0, a] \times [0, b] \times [0, c] \\ \infty \text{ sinon} \end{cases}$$



1. Écrire l'équation de Schrödinger indépendante du temps et les nouvelles conditions aux limites.
2. Peut-on fabriquer des solutions à partir du cas unidimensionnel et si oui lesquelles ?
3. Pour une boîte cubique $a = b = c$ donner la dégénérescence des trois premiers niveaux d'énergie.

Travaux dirigés de physique quantique
PA101 - PC 2
Puits quantique carré - Correction

1.1. L'équation de Schrödinger est l'équation fondamentale de la mécanique quantique. Elle remplace l'équation fondamentale de la dynamique $\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \mathbf{F}$ utilisée en mécanique classique pour déterminer le couple $(\mathbf{r}, \mathbf{p})$. Pour une particule de masse m, l'équation de Schrödinger s'écrit en dimension 1 :

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(x,t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right)\psi(x,t)$$

Elle décrit l'évolution temporelle de la fonction d'onde $\psi(x,t)$. Si on connaît la fonction d'onde à un instant donné, on la connaît à tout instant ultérieur de façon certaine. La fonction d'onde est le pendant pour la mécanique quantique du couple position-impulsion (x,p) de la physique classique et contient toute l'information sur le système. La fonction d'onde donne la densité de probabilité de présence $\rho(x,t) = |\psi(x,t)|^2$de la particule à l'abscisse x et à l'instant t c'est-à-dire la probabilité élémentaire $dP = \rho(x,t)\,dx$ de trouver la particule en x à dx près. La fonction d'onde est toujours définie à un facteur de phase près (facteur de phase $= \exp(i\alpha)$, $\alpha \in \mathbb{R}$).

Pour tout état physique, on doit avoir

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x,t)|^2 \; dx = 1$$

À partir de $\psi(x,t)$ on peut calculer toutes les quantités physiques utiles comme par exemple la position moyenne sur l'axe des x

$$\langle X \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x\,|\psi(x,t)|^2 \; dx$$

.

1.2. L'équation de Schrödinger indépendante du temps s'écrit :

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

L'ensemble des énergies E_n et des états stationnaires $\varphi_n(x)$ solutions forment les valeurs propres et les états propres de l'opérateur Hamiltonien

$$\widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$$

tels que

$$\widehat{H}\varphi_n = E_n\varphi_n$$

L'opérateur $\widehat{H}$ est une observable c'est-à-dire un opérateur hermitique (auto-adjoint $\widehat{H}^\dagger = \widehat{H}$) qui *est* diagonalisable dans une base orthonormée et à valeurs propres réelles. La recherche des états stationnaires et de leur énergie revient à diagonaliser l'opérateur $\widehat{H}$. On connaît l'évolution temporelle de tout état stationnaire puisque, pour eux, c'est très simple :

$$i\hbar\frac{\partial \psi_n}{\partial t} = H\psi_n = E_n\psi_n$$

les conditions initiales $\psi_n(x,0) = \varphi_n(x)$ permettent d'obtenir la solution

$$\psi_n(x,t) = \varphi_n(x)\exp\left(-i\frac{E_n t}{\hbar}\right)$$

L'équation de Schrödinger étant linéaire, si on connaît la fonction d'onde à l'instant initial à travers sa décomposition sur les états stationnaires,

$$\psi_n(x,0) = \sum_n a_n \varphi_n(x) \quad \text{avec } a_n \in \mathbb{C}$$

on la connaît à tout instant ultérieur sans effectuer aucun calcul

$$\psi_n(x,t) = \sum_n a_n \varphi_n(x) \exp\left(-i\frac{E_n t}{\hbar}\right)$$

C'est une des raisons pour lesquelles on cherche souvent à calculer les états stationnaires indépendants du temps au lieu de résoudre directement l'équation de Schrödinger temporelle.

1.3. À une dimension la solution de l'équation :

$$\varphi''(x) = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}\varphi(x)$$

est en général une combinaison de sinus ou d'exponentielles :

$$\varphi(x) = \begin{cases} \alpha\sin(kx) + \beta\cos(kx) & \text{Si } E > V_0 \\ \gamma\exp(-kx) + \delta\exp(kx) & \text{Si } E < V_0 \end{cases} \qquad \text{avec } k = \frac{2m\sqrt{|V_0 - E|}}{\hbar^2}$$

Les constantes $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ sont des nombres complexes déterminés par les conditions aux limites. Le cas très particulier $E = V_0$ ne présente pas d'intérêt physique.

1.4. D'abord la fonction d'onde est *toujours* continue. Cela provient de l'équation de Schrödinger. Si la fonction d'onde était discontinue elle pourrait s'écrire (localement) comme la somme d'une fonction continue $f(x)$ et d'une fonction saut de Heaviside $\theta(x)$: $\varphi(x) = f(x) + \lambda\theta(x)$. L'équation de Schrödinger indépendante du temps ferait intervenir alors, au sens des distributions, d'un côté la dérivée d'une distribution de Dirac ($\theta'' = \delta'$) et de l'autre une distribution qui n'en contient pas, ce qui n'est possible que si $\lambda = 0$.

La fonction d'onde est toujours continue

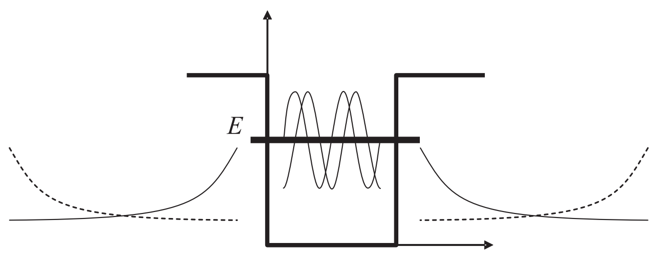
Ensuite la dérivée de la fonction d'onde est continue *si* le saut d'énergie potentielle reste fini. Cela se voit en intégrant l'équation de Schrödinger autour du point de discontinuité (e.g. $x = 0$) :

$$\varphi'(\varepsilon) - \varphi'(-\varepsilon) = \frac{2m}{\hbar^2}\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} (V(x) - E)\,\varphi(x)\,\mathrm{d}x$$

Si le saut d'énergie potentielle est infini, rien ne dit que la dérivée soit continue, ce que l'on va voir dans la suite.

On peut aussi démontrer ce résultat en utilisant les distributions, voir MA102 !

1.5 Graphiquement on a quelque chose comme cela



Les composantes en pointillés (exponentielles divergentes) ne sont pas physiquement admissibles pour conserver une fonction d'onde de norme finie.

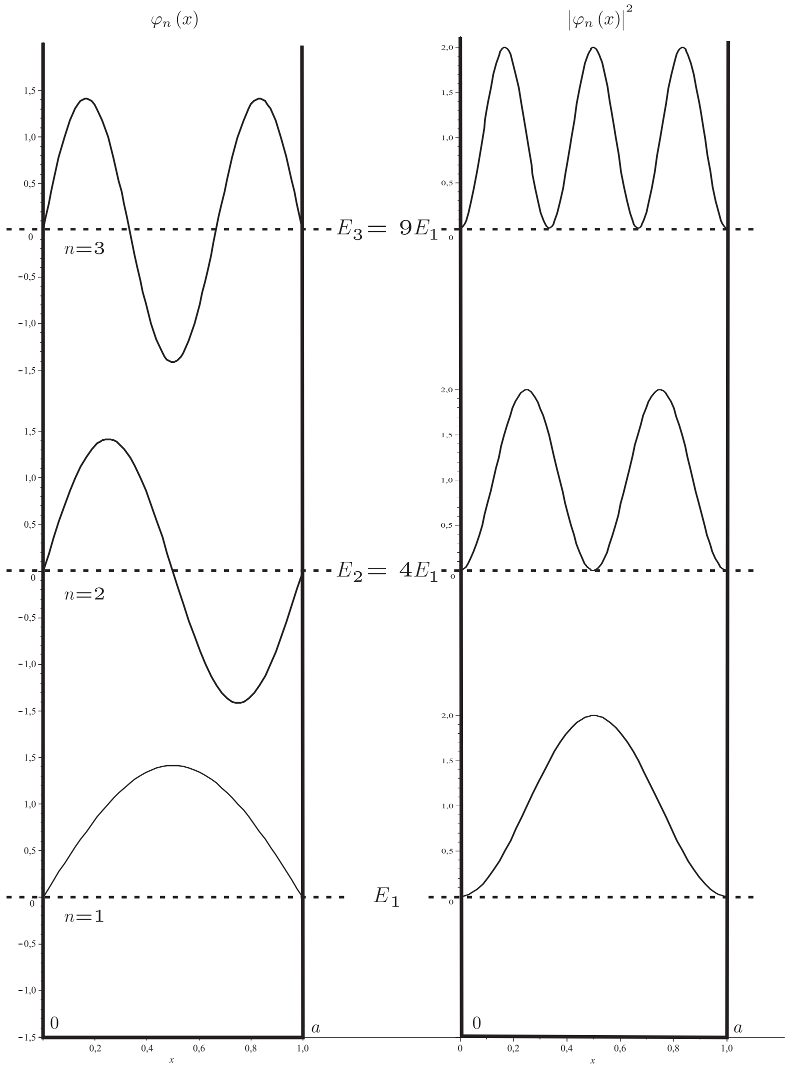
2.1 Lorsque V_0 tend vers l'infini la fonction d'onde tend vers 0 dans les barrières. On a alors $\varphi(0) = \varphi(a) = 0$. La dérivée de φ à l'origine et en $x = a$ est alors nécessairement discontinue.

2.2 On a alors nécessairement $\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(k_n x)$ avec $k_n = \dfrac{n\pi}{a}$ où n est un entier strictement positif. L'énergie est donc un nombre réel (!) et est strictement positive :

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2}{a^2} n^2$$

Noter que si on avait gardé des hauteurs de barrière finies l'énergie serait également discrétisée de la même manière, mais avec une valeur non analytique.

2.3 On représente à gauche la fonction $\varphi_n(x)$ pour $n = 1, 2$ et 3 et à droite son module carré ...



3.1 Le spectre des énergies est donc discret, ce qui est classiquement choquant, mais normal en physique quantique. Plus fort, l'énergie la plus petite physiquement accessible n'est pas nulle :

$$E_1 = E_a = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2}{a^2}$$

3.2 En physique classique, toutes les énergies positives ou nulles seraient solutions. Que l'énergie du niveau fondamental soit non nulle est une conséquence du principe d'incertitude de Heisenberg $\Delta x \Delta p \geq$

$\hbar/2$. La localisation de la particule sur une distance Δx de l'ordre d'une fraction de la largeur du puits d'énergie potentielle conduit nécessairement à une dispersion de son impulsion Δp non nulle qui produit de l'énergie cinétique.

Plus précisément l'énergie moyenne du système $\left\langle \frac{p^2}{2m} + V \right\rangle$ dans l'état considéré est la somme de l'énergie cinétique moyenne $\left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle$ et de l'énergie potentielle moyenne $\langle V \rangle$ qui est nulle ici. La fonction d'onde étant réelle le moment cinétique moyen $\langle p \rangle$ est nul. L'énergie totale moyenne se résume donc à $\frac{\Delta p^2}{2m}$compte tenu de la définition $\Delta p^2 = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2$. Pour $\Delta x \sim 0.2a$, ce qui n'est pas très loin du calcul exact pour ϕ_1, on retrouve à peu près l'expression de E_1.

3.3 La fonction d'onde correspond à la densité de probabilité de présence de la particule.

3.4 Comme indiqué dans la question 1.2, l'état stationnaire $\varphi_n(x)$ évolue temporellement avec un facteur de phase donné par l'énergie :

$$\psi_n(x,t) = \varphi_n(x) \exp\left(-i\frac{E_n t}{\hbar}\right)$$

La densité de probabilité de présence (le module au carré) est donc stationnaire d'où le nom.

3.5 De façon très générale, si à l'instant initial la fonction d'onde est

$$\psi(x,0) = \alpha\, \varphi_n(x) + \beta\, \varphi_p(x)$$

alors à tout instant ultérieur on a directement

$$\psi(x,t) = \alpha\, \varphi_n(x)\, e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} + \beta\, \varphi_p(x)\, e^{-\frac{iE_p t}{\hbar}}$$

La densité de probabilité de présence est donc

$$\rho(t) = |\psi(t)|^2 = |\alpha|^2\ |\varphi_n|^2 + |\beta|^2\ |\varphi_p|^2 + 2Re\ \left(\alpha\beta^* \varphi_n \varphi_p^* e^{-\frac{i(E_n - E_p)t}{\hbar}}\right)$$

qui n'est plus stationnaire si $E_n - E_p \neq 0$.

4.1. Il s'agit de l'équation de Schrödinger en dimension 3. On l'écrit directement

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + V(x,y,z)\right] \varphi(x,y,z) = E\ \varphi(x,y,z)$$

L'énergie potentielle étant à variables séparables ici (elle est nulle...) $V(x,y,z) = V_x(x) + V_y(y) + V_z(z)$, on peut écrire l'équation de Schrödinger indépendante du temps sous la forme :

$$(H_x + H_y + H_z)\, \varphi(x,y,z) = E\varphi(x,y,z)$$

où chaque Hamiltonien H_i correspond à celui du cas unidimensionnel.

De même que dans le cas unidimensionnel, la fonction d'onde s'annule dans les zones d'espace d'énergie potentielle infinie, notamment au bord de la boîte quantique.

4.2 Si on fabrique la fonction $\varphi(x,y,z) = \varphi_x(x)\varphi_y(y)\varphi_z(z)$ à partir des solutions du cas unidimensionnel, on s'aperçoit qu'elles sont solutions avec les énergies $E = E_x + E_y + E_z$. On peut aussi chercher des solutions sous la forme séparée et on retombe pour chaque composante sur les solutions du cas unidimensionnel. Ainsi les fonctions d'onde

$$\varphi_{n,p,q}(x,y,z) = \sqrt{\frac{8}{abc}} \sin\left(n\frac{\pi}{a}x\right) \sin\left(p\frac{\pi}{b}y\right) \sin\left(q\frac{\pi}{c}z\right)$$

sont-elles solutions avec les énergies :

$$E_{n,p,q} = \frac{\hbar^2}{2m}\pi^2\left(\frac{n^2}{a^2}+\frac{p^2}{b^2}+\frac{q^2}{c^2}\right)$$

où n,p et q sont trois entiers quelconques strictement positifs.

Ayant trouvé ainsi une base de décomposition de Fourier pour les fonctions s'annulant au bord de la boîte quantique, on a en fait toutes les solutions. On peut également voir l'ensemble de ces solutions comme une base de l'espace $\mathbb{E}$ des fonctions $f\,(x,y,z)$ s'annulant au bord de la boîte quantique, formé par le produit tensoriel de trois espaces $\mathcal{E}_x$, $\mathcal{E}_y$ et $\mathcal{E}_z$ dont on a des bases.

4.3 Il suffit de déterminer les valeurs des entiers n, p et q qui donnent la même valeur de l'énergie

Niveau (n,p,q)	Énergie	Dégénérescence
(1,1,1)	$3E_a$	1
(2,1,1) (1,2,1) (1,1,2)	$6E_a$	3
(2,2,1) (2,1,2) (1,2,2)	$9E_a$	3