

Tutorat 1 : Le puits double

Corrigé (5 mai 2021)

G. Lang

LPEM (ESPCI Paris, Univ. PSL, CNRS, Sorbonne Univ.)



Licence : Creative Commons Attribution - Partage dans les Mêmes Conditions 4.0 International

En cas d'erreurs ou de coquilles : guillaume.lang@espci.psl.eu

Motivation

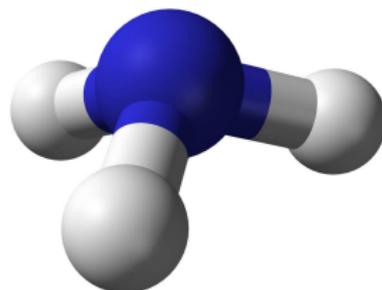
Potentiel utilisé ici :

- ▶ indépendant du temps
- ▶ unidimensionnel
- ▶ défini par morceaux



pertinence physique ?

Oui pour NH_3 .



2 positions équivalentes pour
l'atome d'azote
+
effet tunnel

Plan

Barrière tunnel

Puits infini

Deux puits infinis

Deux puits couplés

1 - Barrière tunnel

COEFFICIENT DE TRANSMISSION

$$T = \frac{\text{transmis dans III}}{\text{incident dans I}} \longrightarrow \text{Quels états dans chaque région de l'espace?}$$

À une dimension, pour un potentiel V ne dépendant pas du temps :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2}(x) + (V(x) - E)\varphi(x) = 0$$

Soit :

$$\text{Région I} \quad \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2}(x) = - \underbrace{\frac{2mE}{\hbar^2}}_{\alpha^2} \varphi(x) \quad \rightarrow \quad \varphi_{\text{I}}(x) = A_1 e^{i\alpha x} + A_1' e^{-i\alpha x}$$

$$\text{Région II} \quad \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2}(x) = - \underbrace{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}_{\beta^2} \varphi(x) \quad \rightarrow \quad \varphi_{\text{II}}(x) = B_2 e^{\beta x} + B_2' e^{-\beta x}$$

$$\text{Région III} \quad \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2}(x) = - \underbrace{\frac{2mE}{\hbar^2}}_{\alpha^2} \varphi(x) \quad \rightarrow \quad \varphi_{\text{III}}(x) = A_3 e^{i\alpha x} + \cancel{A_3' e^{-i\alpha x}}$$

1 - Barrière tunnel

Alors :

$$T = \left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2$$

Les conditions de continuité donnent :

$$x = 0 : \begin{cases} \varphi_{\text{I}}(0) = \varphi_{\text{II}}(0) \\ \varphi'_{\text{I}}(0) = \varphi'_{\text{II}}(0) \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} A_1 + A'_1 = B_2 + B'_2 & \text{(C1)} \\ i\alpha(A_1 - A'_1) = \beta(B_2 - B'_2) & \text{(C2)} \end{cases}$$

$$x = a : \begin{cases} \varphi_{\text{II}}(a) = \varphi_{\text{III}}(a) \\ \varphi'_{\text{II}}(a) = \varphi'_{\text{III}}(a) \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} B_2 e^{\beta a} + B'_2 e^{-\beta a} = A_3 e^{i\alpha a} & \text{(C3)} \\ \beta(B_2 e^{\beta a} - B'_2 e^{-\beta a}) = i\alpha A_3 e^{i\alpha a} & \text{(C4)} \end{cases}$$

1 - Barrière tunnel

Puis :

$$(C1) + \frac{(C2)}{i\alpha} \Leftrightarrow A_1 = \frac{B_2}{2} \left(1 + \frac{\beta}{i\alpha}\right) + \frac{B'_2}{2} \left(1 - \frac{\beta}{i\alpha}\right)$$

$$(C3) + \frac{(C4)}{\beta} \Leftrightarrow B_2 = \frac{A_3}{2} e^{i\alpha a} e^{-\beta a} \left(1 + \frac{i\alpha}{\beta}\right)$$

$$(C3) - \frac{(C4)}{\beta} \Leftrightarrow B'_2 = \frac{A_3}{2} e^{i\alpha a} e^{+\beta a} \left(1 - \frac{i\alpha}{\beta}\right)$$

D'où :

$$\begin{aligned} \frac{A_1}{A_3} &= \frac{e^{i\alpha a}}{4} \left[e^{-\beta a} \left(1 + \frac{i\alpha}{\beta}\right) \left(1 + \frac{\beta}{i\alpha}\right) + e^{+\beta a} \left(1 - \frac{i\alpha}{\beta}\right) \left(1 - \frac{\beta}{i\alpha}\right) \right] \\ &= \frac{e^{i\alpha a}}{4} \left[e^{-\beta a} \left(2 + \frac{i\alpha}{\beta} + \frac{\beta}{i\alpha}\right) + e^{+\beta a} \left(2 - \frac{i\alpha}{\beta} - \frac{\beta}{i\alpha}\right) \right] \\ &= \frac{e^{i\alpha a}}{4} \left[4 \cosh(\beta a) - 2 \left(\frac{i\alpha}{\beta} + \frac{\beta}{i\alpha}\right) \sinh(\beta a) \right] \\ &= \frac{e^{i\alpha a}}{2} \left[2 \cosh(\beta a) + i \frac{\beta^2 - \alpha^2}{\alpha\beta} \sinh(\beta a) \right] \end{aligned}$$

1 - Barrière tunnel

Soit :

$$\begin{aligned} T^{-1} &= \left| \frac{A_1}{A_3} \right|^2 = \frac{1}{4} \left[4 \cosh^2(\beta a) + \left(\frac{\beta^2 - \alpha^2}{\alpha \beta} \right)^2 \sinh^2(\beta a) \right] \\ &= \cosh^2(\beta a) + \frac{1}{4} \left(\frac{\beta}{\alpha} - \frac{\alpha}{\beta} \right)^2 \sinh^2(\beta a) \end{aligned}$$

Avec $\cosh^2(x) = 1 + \sinh^2(x)$:

$$\begin{aligned} T &= \left[1 + \sinh^2(\beta a) \left(1 + \frac{1}{4} \left(\frac{\beta}{\alpha} - \frac{\alpha}{\beta} \right)^2 \right) \right]^{-1} \\ T &= \left[1 + \frac{\sinh^2(\beta a)}{4} \left(\frac{\beta}{\alpha} + \frac{\alpha}{\beta} \right)^2 \right]^{-1} \end{aligned}$$

On a : $\frac{\alpha}{\beta} = \sqrt{\frac{E}{V_0 - E}} = \sqrt{\frac{X}{1 - X}}$ soit : $\left(\frac{\beta}{\alpha} + \frac{\alpha}{\beta} \right)^2 = \frac{1}{X(1 - X)}$

Finalement :

$$T = \left[1 + \frac{\sinh^2(a/\lambda^*)}{4X(1 - X)} \right]^{-1}$$

1 - Barrière tunnel

LIMITE : LARGEUR DE BARRIÈRE FAIBLE

$$\frac{a}{\lambda^*} \ll 1$$

Alors :

$$\sinh^2\left(\frac{a}{\lambda^*}\right) \approx \frac{a^2}{\lambda^{*2}}$$

et :

$$\begin{aligned} T &\approx \left[1 + \frac{a^2}{4\lambda^{*2}X(1-X)} \right]^{-1} \\ &\approx 1 - \frac{a^2}{4\lambda^{*2}X(1-X)} \\ &\approx 1 - \frac{a^2\beta^2}{4X(1-X)} \\ T &\approx 1 - \frac{mV_0 a^2}{2\hbar^2 X} \end{aligned}$$

LIMITE : LARGEUR DE BARRIÈRE GRANDE

$$\frac{a}{\lambda^*} \gg 1$$

Alors :

$$\sinh^2\left(\frac{a}{\lambda^*}\right) = \frac{(e^{a/\lambda^*} - e^{-a/\lambda^*})^2}{4} \approx \frac{e^{2a/\lambda^*}}{4}$$

et :

$$\begin{aligned} T &\approx \left[1 + \frac{e^{2a/\lambda^*}}{16X(1-X)} \right]^{-1} \\ \ln T &\approx -\frac{2a}{\lambda^*} + \ln(16X(1-X)) \end{aligned}$$

$f(X) = 16X(1-X)$: max. en $X=0.5$
min. pour X petit/grand

$$\ln(f(0.5)) \approx 1.39$$

$$\ln(f(0.001 \text{ ou } 0.999)) \approx -4.14$$

$\Rightarrow \ln(f(X))$ négligeable pour $\frac{a}{\lambda^*} \gg \frac{4.14}{2} \approx 2$

1 - Barrière tunnel

APPLICATION : MICROSCOPE À EFFET TUNNEL

Barrière grande :

$$\ln T \approx -\frac{2a}{\lambda^*} + \ln(16X(1 - X))$$

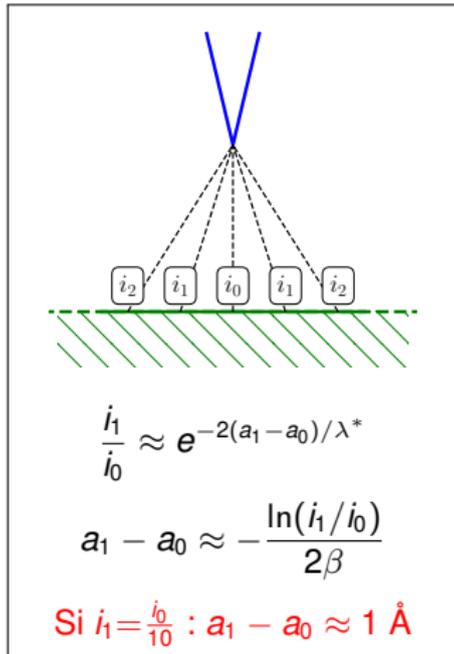
Identifions les grandeurs physiques :

- ▶ T : proportionnelle au courant I
- ▶ E : polarisation \rightarrow 50 meV (typique)
- ▶ V_0 : travail de sortie \rightarrow 5 eV (ex.)
- ▶ a : distance pointe - élément de surface

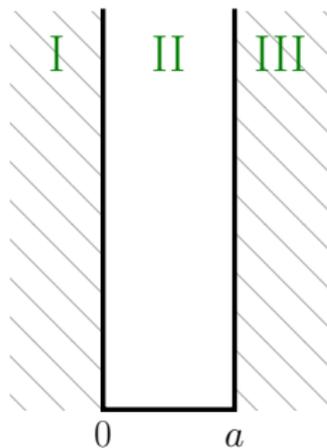
Alors $X=E/V_0=0.01$ et :

$$\ln T \approx -\frac{2a}{\lambda^*}$$

$$I \propto e^{-2a/\lambda^*}$$



2 - Puits infini



SOLUTIONS PAR RÉGION

▶ I, III : impénétrables $\rightarrow \varphi(x) = 0$

▶ II :

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

soit :

$$\varphi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

CONDITIONS DE CONTINUITÉ

$$\begin{cases} \varphi_I(0) = \varphi_{II}(0) \\ \varphi_{II}(a) = \varphi_{III}(a) \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} A + B = 0 \\ Ae^{ika} + Be^{-ika} = 0 \end{cases} \Leftrightarrow \sin(ka) = 0 \Leftrightarrow ka = n\pi \quad n \in \mathbb{N}^*$$

D'où les niveaux discrets : $E_n = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \quad (n \in \mathbb{N}^*)$

2 - Puits infini

Et pour les fonctions d'onde : $\varphi^n(x) = \underbrace{2iA}_C \sin(k_n x)$

Normalisons :

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} |\varphi(x)|^2 dx = C^2 \int_0^a \sin^2(k_n x) dx$$

Du fait de la quantification sur k_n :

$$\int_0^a \sin^2(k_n x) dx = \int_0^a \cos^2(k_n x) dx = \int_0^a (1 - \sin^2(k_n x)) dx$$

D'où :

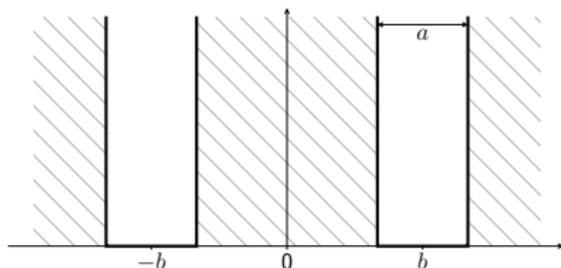
$$\int_0^a \sin^2(k_n x) dx = \frac{a}{2}$$

Soit :

$$\varphi^n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(k_n x)$$

Dérivée discontinue aux bords : OK!

3 - Deux puits infinis



PARTICULE DANS LE Puits DE GAUCHE

$\varphi_G^n(x)$ doit s'annuler en $-b \pm a/2$. D'où :

$$\varphi_G^n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \left(k_n \left(x + b + \frac{a}{2} \right) \right) \quad \text{pour } x \in \left[-b - \frac{a}{2}, -b + \frac{a}{2} \right]$$

et nulle ailleurs

PARTICULE DANS LE Puits DE DROITE

$\varphi_D^n(x)$ doit s'annuler en $b \pm a/2$. D'où :

$$\varphi_D^n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \left(k_n \left(x - b + \frac{a}{2} \right) \right) \quad \text{pour } x \in \left[b - \frac{a}{2}, b + \frac{a}{2} \right]$$

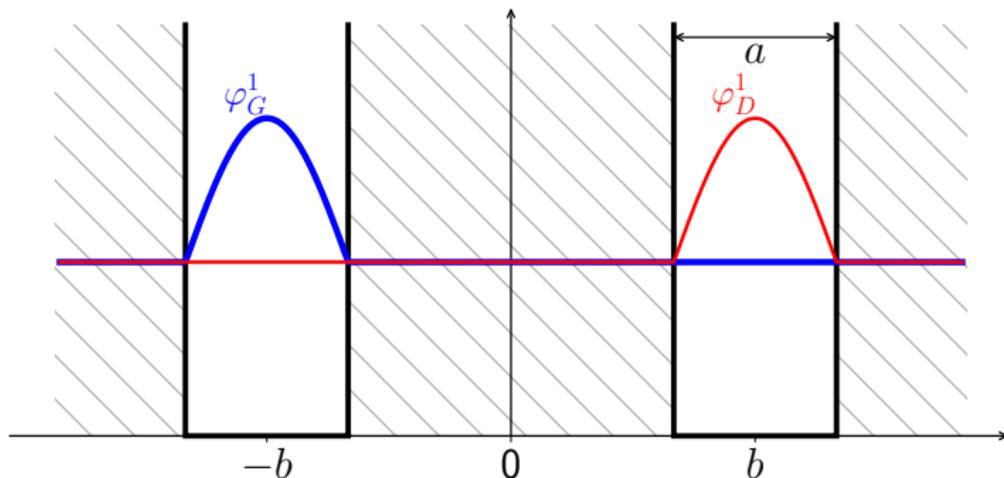
et nulle ailleurs

3 - Deux puits infinis

$$E_G^n = E_D^n = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \quad (n \in \mathbb{N}^*)$$

Chaque niveau est **doublement dégénéré**.

États stationnaires du double puits : l'ensemble des φ_G^n et φ_D^n .

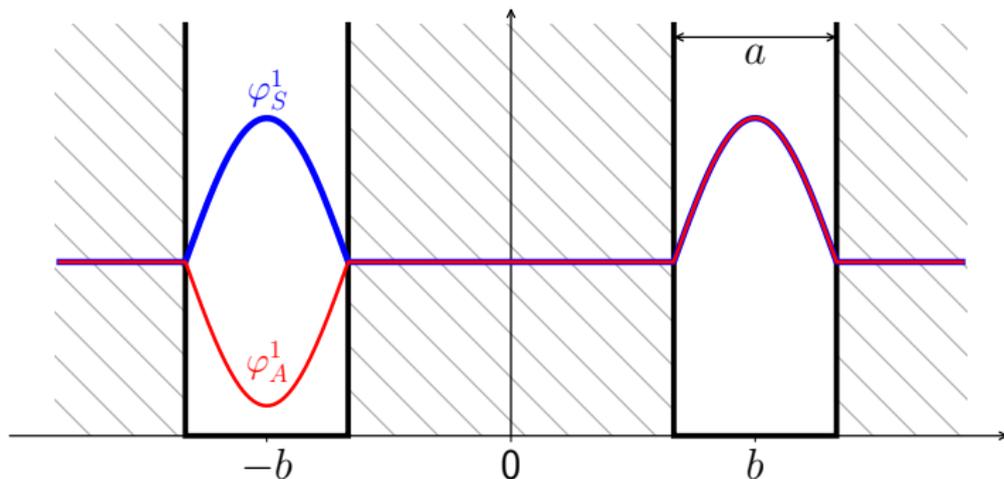


3 - Deux puits infinis

À n donné, φ_G^n et φ_D^n sont des états stationnaires de même énergie E^n .

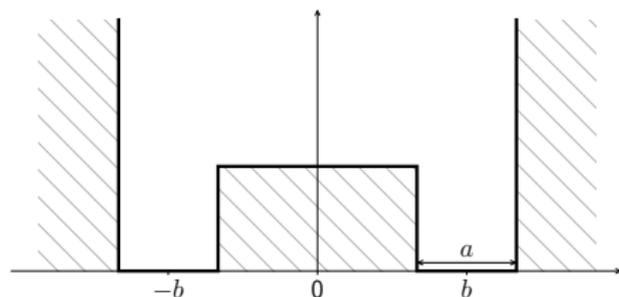
Toute combinaison linéaire est donc un état stationnaire d'énergie E^n :

$$E_S^1 = E_A^1 = E^1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$



Toute fonction d'onde d'énergie E^n peut s'écrire comme C.L. de φ_G^n et φ_D^n ou comme C.L. de φ_S^n et φ_A^n .

4 - Deux puits couplés



SOLUTIONS À L'INTÉRIEUR DES PUIITS

cf. énoncé

SOLUTIONS DANS LA BARRIÈRE

L'équation de Schrödinger donne :

$$\chi^n(x) = Be^{Kx} + B'e^{-Kx} \quad \text{avec} \quad K = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$$

Solution symétrique : $\chi_S^n(x) = \chi_S^n(-x) \Leftrightarrow B = B'$

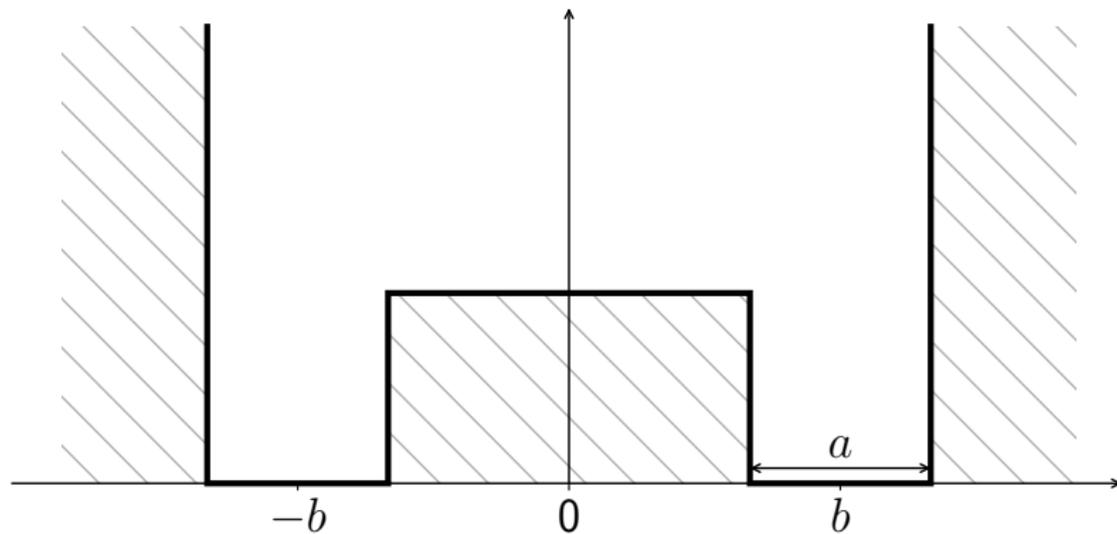
$$\chi_S^n(x) = C \cosh(Kx)$$

Solution antisymétrique : $\chi_A^n(x) = -\chi_A^n(-x) \Leftrightarrow B = -B'$

$$\chi_A^n(x) = C \sinh(Kx)$$

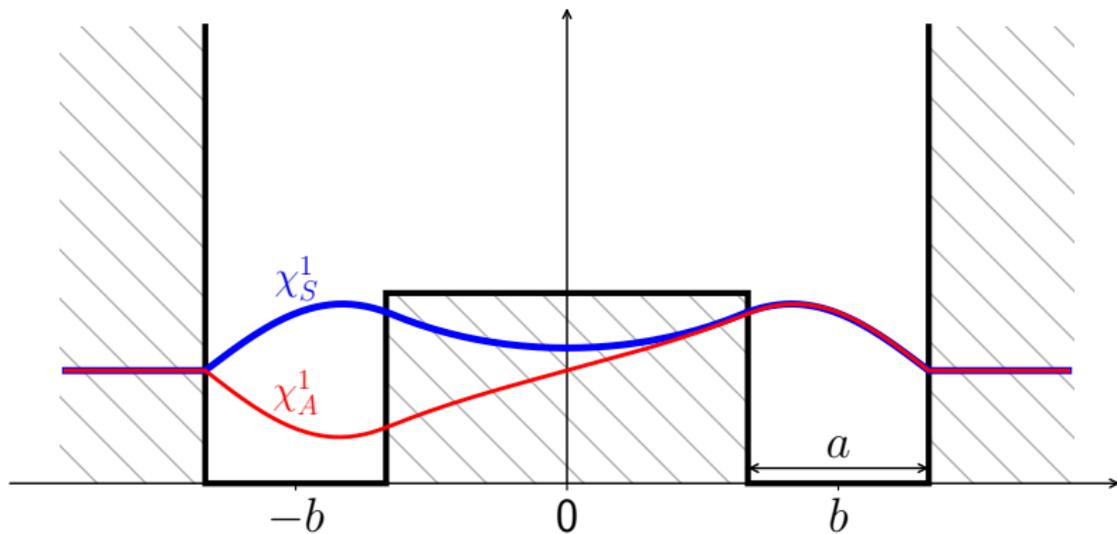
4 - Deux puits couplés

En se restreignant à $n = 1$:

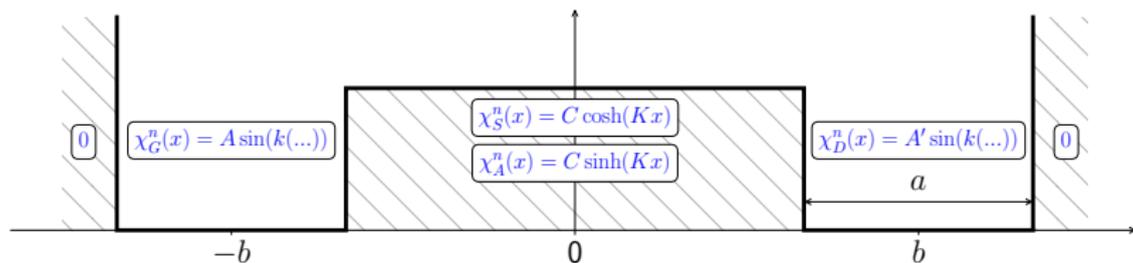


4 - Deux puits couplés

En se restreignant à $n = 1$:



4 - Deux puits couplés



Examinons la continuité en $x = -b + \frac{a}{2} \dots$

CAS SYMÉTRIQUE

$$\begin{cases} A \sin(ka) = B \cosh\left(K\left(-b + \frac{a}{2}\right)\right) \\ Ak \cos(ka) = BK \sinh\left(K\left(-b + \frac{a}{2}\right)\right) \end{cases}$$

$$\Rightarrow \tan(ka) = \frac{k}{K} \operatorname{cotanh}\left(K\left(-b + \frac{a}{2}\right)\right) \Rightarrow \tan(ka) = -\frac{k}{K} \operatorname{cotanh}\left(K\left(b - \frac{a}{2}\right)\right)$$

CAS ANTISYMMÉTRIQUE

$$\begin{cases} -A \sin(ka) = B \sinh\left(K\left(-b + \frac{a}{2}\right)\right) \\ -Ak \cos(ka) = BK \cosh\left(K\left(-b + \frac{a}{2}\right)\right) \end{cases}$$

$$\Rightarrow \tan(ka) = \frac{k}{K} \tanh\left(K\left(-b + \frac{a}{2}\right)\right) \Rightarrow \tan(ka) = -\frac{k}{K} \tanh\left(K\left(b - \frac{a}{2}\right)\right)$$

4 - Deux puits couplés

$$E \ll V_0 : K \approx \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} \quad \text{et}$$

$$\underbrace{K}_{\text{hauteur}} \underbrace{\Delta}_{\text{largeur}} \gg 1 \quad (\text{vérifié dans NH}_3)$$

CAS SYMÉTRIQUE

$$\begin{aligned} \operatorname{cotanh} \left(K \left(b - \frac{a}{2} \right) \right) &= \operatorname{cotanh} \left(\frac{K\Delta}{2} \right) \\ &= \frac{e^{\frac{K\Delta}{2}} + e^{-\frac{K\Delta}{2}}}{e^{\frac{K\Delta}{2}} - e^{-\frac{K\Delta}{2}}} \\ &= \frac{1 + e^{-K\Delta}}{1 - e^{-K\Delta}} \\ &\approx \left(1 + e^{-K\Delta} \right)^2 \\ &\approx 1 + 2e^{-K\Delta} \end{aligned}$$

Soit :

$$\tan(ka) \approx -\frac{k}{K} \left(1 + 2e^{-K\Delta} \right)$$

CAS ANTISYMMÉTRIQUE

$$\begin{aligned} \tanh \left(K \left(b - \frac{a}{2} \right) \right) &= \tanh \left(\frac{K\Delta}{2} \right) \\ &= \frac{e^{\frac{K\Delta}{2}} - e^{-\frac{K\Delta}{2}}}{e^{\frac{K\Delta}{2}} + e^{-\frac{K\Delta}{2}}} \\ &= \frac{1 - e^{-K\Delta}}{1 + e^{-K\Delta}} \\ &\approx \left(1 - e^{-K\Delta} \right)^2 \\ &\approx 1 - 2e^{-K\Delta} \end{aligned}$$

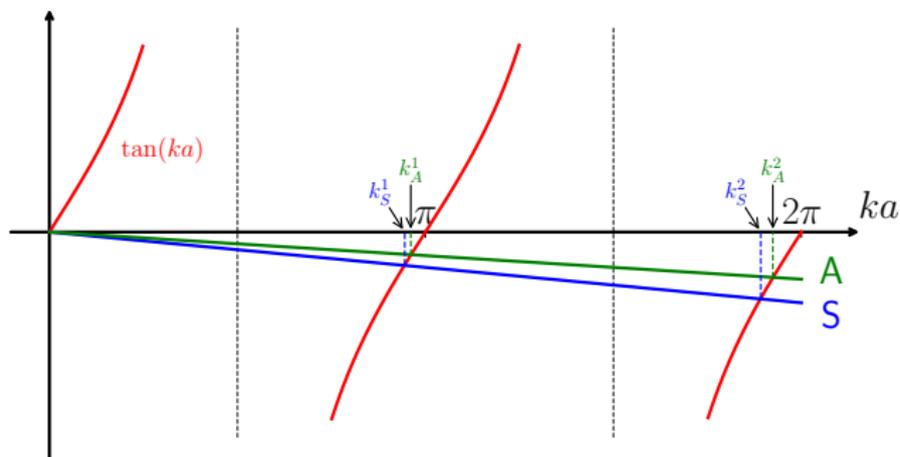
Soit :

$$\tan(ka) \approx -\frac{k}{K} \left(1 - 2e^{-K\Delta} \right)$$

4 - Deux puits couplés

Cas symétrique : $\tan(ka) \approx - \underbrace{\frac{1}{Ka} (1 + 2e^{-K\Delta})}_{\varepsilon_S} \times ka$

Cas antisymétrique : $\tan(ka) \approx - \underbrace{\frac{1}{Ka} (1 - 2e^{-K\Delta})}_{\varepsilon_A} \times ka$



$$\left. \begin{array}{l} E \ll V_0 \Rightarrow k \ll K \\ K\Delta \gg 1 \end{array} \right\} \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} |\tan(ka)| \ll 1 \\ \tan(ka) < 0 \end{array} \right. \Rightarrow \text{ka proche de } n\pi \text{ par valeurs négatives}$$

4 - Deux puits couplés

$$\left. \begin{array}{l} \tan(ka - \pi) \sim \frac{ka - \pi}{\pi} \\ \tan(ka - \pi) = \tan(ka) \end{array} \right\} \Rightarrow ka - \pi \approx -\varepsilon_{S/A} ka \Rightarrow k_{S/A} \approx \frac{\pi}{a(1 + \varepsilon_{S/A})}$$

ÉNERGIES

$$E_{S/A}^1 = \frac{\hbar^2 k_{S/A}^2}{2m} = \underbrace{\frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}}_{E^1} \frac{1}{(1 + \varepsilon_{S/A})^2} < E^1$$

$$\frac{E_S^1 + E_A^1}{2} \approx \frac{E^1}{2} \left(\frac{1}{1 + 2\varepsilon_S} + \frac{1}{1 + 2\varepsilon_A} \right) \approx E^1(1 - \varepsilon_S - \varepsilon_A) = E^1 \left(1 - \frac{2}{Ka} \right)$$

$$E_A^1 - E_S^1 \approx E^1 \left(\frac{1}{1 + 2\varepsilon_A} - \frac{1}{1 + 2\varepsilon_S} \right) \approx 2E^1(\varepsilon_S - \varepsilon_A) = \frac{\hbar^2 \pi^2}{ma^2} \frac{4e^{-K\Delta}}{Ka}$$

4 - Deux puits couplés

INVERSION DE LA MOLÉCULE D'AMMONIAC

$$\Psi(x, t = 0) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\chi_S^1(x) + \chi_A^1(x)) \quad \longrightarrow \quad \text{« atome d'azote à droite »}$$

$E_S^1 \neq E_A^1 \Rightarrow \Psi$ n'est pas un état stationnaire.

$$\begin{aligned}\Psi(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(e^{-\frac{i}{\hbar} E_S t} \chi_S^1(x) + e^{-\frac{i}{\hbar} E_A t} \chi_A^1(x) \right) \\ &= \frac{e^{-\frac{i}{\hbar} E_S t}}{\sqrt{2}} \left(\chi_S^1(x) + e^{-\frac{i}{\hbar} (E_A - E_S) t} \chi_A^1(x) \right) \\ &= \frac{e^{-\frac{i}{\hbar} E_S t}}{\sqrt{2}} \left(\chi_S^1(x) + e^{-i\omega t} \chi_A^1(x) \right)\end{aligned}$$

oscillation à la pulsation ω

Pour $2A = 10^{-4}$ eV :

$$\nu \approx 24 \text{ GHz}$$