Mécanique Quantique

TD n°3 : Puits Quantiques

Par croissance épitaxiale d'alliages du type $Al_xGa_{1-x}As$, on peut réaliser des structures en couches controlées à l'échelle de la taille atomique.

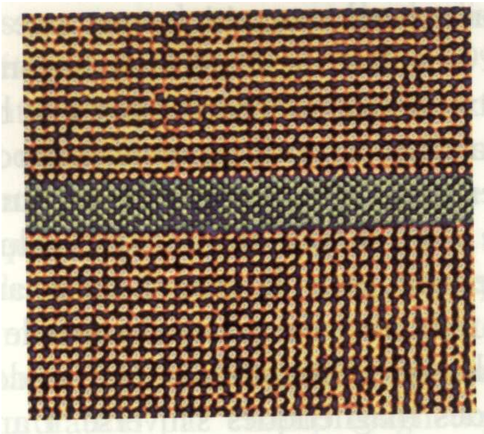

Figure 1: Exemple de structure obtenue par croissance epitaxiale.

On considère dans cet exercice un potentiel moyen électronique en forme de puits $V(z)$ (variant uniquement suivant la direction z), obtenu par cette technique, dans lequel évolue un électron décrit par la fonction d'onde $\psi(z,t)$.

On note $\psi_n(z,t)$, la fonction d'onde de l'état lié possédant n noeuds suivant z, et ϵ_n l'énergie associée. Le fond du puits a une énergie $-U_0 < 0$ et $\lim_{z\to\pm\infty} V(z) = 0$.

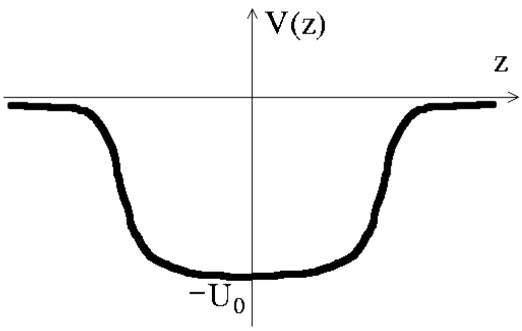

Figure 2: Allure schématique du potentiel moyen électronique.

Dans la suite, on adopte la notation : $\psi_n(z,t) = \phi_n(z)\exp\left(\dfrac{-i\epsilon_n t}{\hbar}\right)$.

1. **Quelques propriétés générales**

   (a) Dans le cas d'un état lié, quelle est la probabilité de présence de l'électron pour $z \to \pm\infty$. En déduire la forme asymptotique ($z \to \pm\infty$) de l'état ϕ_n.

   (b) Montrer que les $\{\phi_n(z)\}$ peuvent-être choisis réels.

(c) Pour quelle raison ne peut-on avoir d'état lié d'énergie inférieure à $-U_0$?

(d) Montrer que deux états d'énergies propres différentes sont orthogonaux

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^{\star}_{n_1}(z,t)\psi_{n_2}(z,t)dz = 0 \quad .$$

(e) On considère deux états stationnaires n_1, n_2, montrer que les fonctions d'ondes associées vérifient entre deux positions a et b:

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left[\phi_{n_1}\phi'_{n_2} - \phi'_{n_1}\phi_{n_2}\right]_a^b = (\epsilon_{n_1} - \epsilon_{n_2})\int_a^b \phi_{n_1}\phi_{n_2}dz \quad .$$

En choisissant pour les points a et b deux zéros successifs de ϕ_{n_1} ou de ϕ_{n_2}, montrer que $n_2 > n_1 \Longleftrightarrow \epsilon_{n_2} > \epsilon_{n_1}$.

(f) Montrer que pour un potentiel $V(z)$ pair, les fonctions d'ondes stationnaires pour des niveaux non dégénérés sont soit paires soit impaires.

2. **Modélisation**

On modélise le potentiel par un puits carré

$$V(z) = \begin{cases} -U_0 & \text{si} \quad |z| < \frac{a}{2} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad , \text{ et } U_0 = \frac{\hbar^2 K^2}{2m} > 0.$$

La profondeur du puits varie suivant l'alliage avec la loi $U_0 = 0,823 \times x$ eV. D'autre part, on peut montrer que l'effet du réseau cristallin se traduit par l'apparition d'une masse effective pour l'électron que l'on évalue ici avec $\dfrac{m}{m_e} \simeq 0.067$.

(a) On pose dans la suite $\hbar k_n = \sqrt{2m(\epsilon_n + U_0)}$. Montrer que les énergies propres des états pairs sont solutions de l'équation

$$\left|\cos\left(\frac{k_n a}{2}\right)\right| = \frac{k_n}{K} \quad \text{avec } \tan\left(\frac{k_n a}{2}\right) > 0 \quad ,$$

et que les énergies propres des états impairs sont déterminés par l'équation:

$$\left|\sin\left(\frac{k_n a}{2}\right)\right| = \frac{k_n}{K} \quad \text{avec } \tan\left(\frac{k_n a}{2}\right) < 0 \quad .$$

De quelle façon peut-on résoudre ces équations graphiquement ?

(b) Que doivent vérifier les paramètres a et U_0 pour que le système n'ait qu'un seul état lié ? Donner la fonction d'onde de l'état lié ($\psi_\alpha(z,t)$) et son énergie (ϵ_α) dans la limite $a \to 0$ lorsque $U_0 = \dfrac{\hbar^2}{ma\alpha}$. La dérivée logarithmique de cette fonction d'onde est-elle continue en tout point ? Retrouver l'état lié en raisonnant directement avec le potentiel limite:

$$V(z) = -\frac{\hbar^2}{m\alpha}\delta(z) \qquad .$$

(c) A quelle condition peut-on confondre les deux états de plus basse énergie du puits comme ceux d'un puits infiniment profond ?

(d) On se place dans cette dernière hypothèse et on désire construire un puits tel que la transition entre les deux premiers niveaux corresponde à la longueur d'onde $\lambda = 20\ \mu$m en vue de réaliser un detecteur dans l'infrarouge lointain. Quelle doit-être la largeur du puits ? (on pourra utiliser $\hbar c = 197,3$ kev nm et $m_e c^2 = 511$ kev).