

LPOB Confinement quantique

Niveau : L3

1) Objectifs pédagogiques de la leçon :

L'objectif de cette leçon est de mettre en avant les conditions d'apparition d'effets quantiques dans un système de particules confinées, de montrer brièvement comment réaliser des confinements quantiques en pratique et de s'intéresser aux différentes applications modernes de ces phénomènes. Si le temps le permet, on pourra également présenter dans les grandes lignes les grandes idées de la théorie des bandes en matière condensée qui est une application très importante du confinement quantique. On pourra également élargir le propos au confinement de particules sans masse comme les photons en évoquant l'Effet Casimir.

→ /!\ Eviter à tout prix de tomber dans un « catalogue de calculs » en présentant tous les puits quantiques et en les résolvant tous les uns après les autres. Mieux vaut faire un puits simple au choix correctement et après présenter des applications.

2) Messages forts de la LP :

→ Comprendre les conditions d'apparition des effets quantiques dans un système de particules confinées.

→ Connaître les différents types de puits quantiques (carré, harmonique, double, périodique, etc...) qui sont responsables des phénomènes de confinements quantiques.

→ Montrer des phénomènes naturels que l'on peut expliquer en utilisant des puits quantiques et comment réaliser de telles puits expérimentalement.

→ Présenter les applications des puits quantiques naturels et artificiels.

3) Prérequis :

→ Théorie cinétique des gaz de L1 pour comprendre les conditions d'apparition d'effets de confinement quantique.

→ Mécanique analytique de L3 : Hamiltonien.

→ Mécanique quantique de L3 : Postulats fondamentaux, équation de Schrödinger, propagation libre, effet tunnel à travers une barrière de potentiel (au moins les grandes idées, pas forcément tous les calculs), modèle de l'atome d'hydrogène (pour évoquer le principe de CLOA pour chercher les bandes d'énergie dans un matériau, à garder uniquement si on pense avoir le temps d'évoquer la théorie des bandes).

4) Plan :

Introduction :

Mise en évidence du fait qu'on n'a pas nécessairement besoin des effets quantiques pour décrire un système de particules confinées. On explique brièvement l'importance de la notion de longueur d'onde thermique de De Broglie pour comprendre cela.

I) Apparition d'effets quantiques dans un système de particules confinées

Ne pas forcément passer trop de temps sur cette partie.

a) Longueur d'onde thermique de de Broglie

→ On considère un système de particules dans une boîte (gaz réel, gaz d'électron dans un métal, etc...) : à quelle condition doit-on utiliser la mécanique quantique pour décrire son comportement ?

→ Si la longueur d'onde de de Broglie (h/p) de toutes les particules du système est très petite devant celle du système, le caractère ondulatoire et donc le caractère quantique ne se fait pas sentir.

→ Pour estimer cette longueur d'onde, on suppose le système thermalisé et les particules non relativiste. Ainsi, pour une particule, on a :

$E_c = p^2 / 2m = 3/2 k_B T \sim k_B T$ (en ordre de grandeur).

→ Donc $p = \sqrt{m k_B T}$ et donc $\lambda = h / \sqrt{m k_B T} =$ longueur d'onde thermique de de Broglie pour une particule du gaz.

→ Apparition d'effets quantiques : $h / \sqrt{m k_B T} > L$ avec L la taille limitante typique du système.

b) Quelques ordres de grandeur

→ Pour de l'air à température ambiante, on a $\lambda \sim 0.05$ nm à comparer avec la distance typique entre 2 molécules d'air de l'ordre de $L \sim 5$ nm donc $\lambda \ll L \Rightarrow$ description purement classique possible.

→ Pour un électron dans un cristal parfait à température ambiante, on a $\lambda \sim 10$ nm à comparer avec la distance typique qui sépare 2 ions du réseau cristallin $L \sim 0.1$ nm (éviter d'écrire $1 \text{ \AA}$, je crois que le jury n'aime pas cette unité) donc $\lambda \gg L \Rightarrow$ le comportement des électrons dans un cristal ou dans la matière solide de manière plus générale doit être décrit quantiquement si on souhaite en comprendre toutes les subtilités.

II) Confinement quantique d'une particule dans un puits.

a) Puits carré infini

→ On développe ici le calcul d'un électron piégé dans un puits carré infini 1D pour obtenir l'expression de ses états propres et de ses énergies propres. (Cette partie calculatoire permet surtout de faire cocher au jury la case « calculs », il faut la faire proprement).

b) Les puits quantiques : intérêt et applications

→ On présente brièvement et qualitativement sur slides d'autres puits quantiques du plus simple au plus dur : carré fini, harmonique (dont j'ai mis toute la résolution sur slides en annexe en cas de questions mais on peut expliquer à l'élève qu'il le verra en TD), double carré, double harmonique.

→ A chaque fois qu'on présente un puits, on montre son intérêt et ses applications. Par exemple, pour le puits carré fini, on montre qu'il permet de décrire de manière simple l'interaction forte entre les nucléons ce qui permet à Gamow de créer un premier modèle pour expliquer la radioactivité alpha par exemple, on montre également qu'on est en mesure d'en créer en empilant des couches de semi-conducteurs et qu'en contrôlant la taille et la forme de ces couches de créer des lasers.

A ce stade, on devrait atteindre 40 min => cf Conclusion.

Pour les plus rapides :

III) Confinement d'un électron dans un cristal parfait

Cf le début du cours d'Emmanuelle Delporte. Dans les grandes lignes :

a) Hamiltonien, théorème de Bloch et conditions BVK

→ Objectif : on cherche les états propres et les énergies propres d'un électron dans un cristal parfait.

→ Modélisation du Hamiltonien avec un potentiel périodique.

→ Enoncé du théorème de Bloch.

→ Conditions aux limites périodiques de Born-Von-Karman (BVK)

b) Obtention de la relation de dispersion 1D à 1 atome par maille

→ On se restreint à 1D et on suppose une « chaîne » de mailles avec 1 ion (1 proton pour simplifier) dans chaque maille.

→ Comment trouver les $\Phi_{nk}(x)$?

→ Avec les conditions BVK, on montre déjà que les k sont quantifiés.

→ La physique atomique nous donne les états propres de la fonction d'onde électronique : orbitales atomiques => on cherche les Φ_{nk} sous la forme d'une combinaison linéaire des états propres de l'atome d'hydrogène (en l'occurrence au

début juste Φ_{1k} en faisant une CLOA des Φ_{1s}).

→ On résout en utilisant le théorème de Bloch et on obtient les Φ_{1k} .

→ On cherche ensuite les énergies propres en supposant que les interactions entre les OA n'ont lieu qu'entre premiers voisins dans le Hamiltonien.

→ On trouve $E_{1k} = -\alpha - 2\gamma \cos(2\pi m/N)$

→ On trace alors le graphe E en fonction de m (et pas de k attention pour mettre en avant la quantification y compris dans la bande et que les niveaux sont très proches les uns des autres dans celle-ci).

→ On met en avant la notion de bande d'énergie.

c) Structure de bandes

→ On élargit en présentant diverses structures de bandes sur slides.

Conclusion :

Si vous êtes lent comme moi, vous pouvez ouvrir sur la théorie des bandes ou sur l'Effet Casimir (confinement du vide électromagnétique).

Si vous êtes une fusée, vous pouvez ouvrir juste sur l'Effet Casimir (confinement du vide électromagnétique).

5) Bibliographie :

→ Pour retrouver rapidement les calculs des différents puits quantiques : Wikipédia est votre ami !

→ Pour le modèle de Gamow, vous avez la *LP41 : Effet Tunnel* de Maccary Romain de l'année dernière.

→ Pour les calculs de la partie III), le cours d'Emmanuelle Delporte donne tout ce qu'il faut savoir. Attention à ne pas en mettre trop quand même (on s'adresse à des L3).

6) Questions:

→ *A quoi correspond le double puits de la molécule d'ammoniac ?* Forme du potentiel créé par les interactions électrostatiques entre les 3 H et N.

→ *Autour d'une position d'équilibre stable donnée, peut-on toujours se ramener à un oscillateur harmonique?* NON, si l'ordre 2 du DL du potentiel est nul autour de la position d'équilibre, il faut pousser jusqu'à l'ordre 4 au moins mais du coup, on n'a plus un oscillateur harmonique!

→ *Différence entre puits carré fini et puits carré infini concernant la fonction d'onde?* La condition d'annulation de la fonction d'onde sur les bords du puits n'est plus strictement vérifiée dans le cas du puits fini (elle « bave » un peu hors du puits).

→ *Pourquoi le cas $\Phi=0$ quand on utilise les CL (au lieu de quantifier les k) est idiot dans le calcul du puits quantique infini?* Impossibilité de réaliser la normalisation de la fonction d'onde.

→ *Est-ce qu'un système quantique a nécessairement un spectre discret ?* Non, cf la propagation libre typiquement.

→ *Dans un espace libre, pourquoi les ondes planes sont les bonnes solutions à considérer ?* Tout simplement car elles vérifient la conservation de l'impulsion (ben oui, on a : une OP = une impulsion) associée à l'invariance par translation dans l'espace du problème.