

# Physique quantique

Dans l'UF Physique Quantique et Statistique

3ème année IMACS

Pierre Renucci (cours)

Hélène Carrere/Benjamin Lassagne (TDs)

# Objectifs

**UF Nanophysique 2A : De l'Optique ondulatoire à la Photonique et aux Nanotechnologies**

## La physique quantique

Présentation des phénomènes expérimentaux dont l'interprétation a mené à l'introduction d'une nouvelle théorie: (rayonnement du corps noir, effet photoélectrique, diffraction des électrons par un cristal, spectre de l'hydrogène...)

## Formalisme de la fonction d'onde

Espace vectoriel des fonctions d'onde: opérateurs fonctionnels

Les postulats fondamentaux de la physique quantique

Etats stationnaires d'une particule dans un potentiel simple à une dimension (effet tunnel, microscope à effet tunnel)

Oscillateur harmonique et moment cinétique: Vibration et rotation des molécules

Atome d'hydrogène. Structure électronique de l'atome

Transitions entre niveaux

Orbitales moléculaires, bande d'énergie dans les solides

# Liens entre le cours de Nanophysique I et le cours de Physique quantique

**Physique quantique:** Approfondissement de notions vues dans le cours Nanophysique I  
Nouveaux éléments de théorie

## Nanophysique (2A)

## Physique quantique

● Espace des fonctions d'ondes  $\Psi(\mathbf{r})$



●

**Espace des états**

**Formalisme de Dirac (+général)**

- bras, ket, formalisme matriciel

Outils qui **simplifient** les calculs mathématiques:  
**généralisation**

- Cas particulier: la représentation «  $\mathbf{r}$  » et  
retour sur la fonction d'onde

● Les postulats de la mécanique quantique (Mesure...)

●

Principe de correspondance. Opérateurs **R** et **P**

● Dynamique des systèmes quantiques

(Equation de Schrödinger, Théorème d'Ehrenfest)

● Notions de paquets d'ondes

● L'oscillateur harmonique à partir du formalisme des fonctions d'onde



●

● L'oscillateur harmonique: formalisme des opérateurs création et annihilation

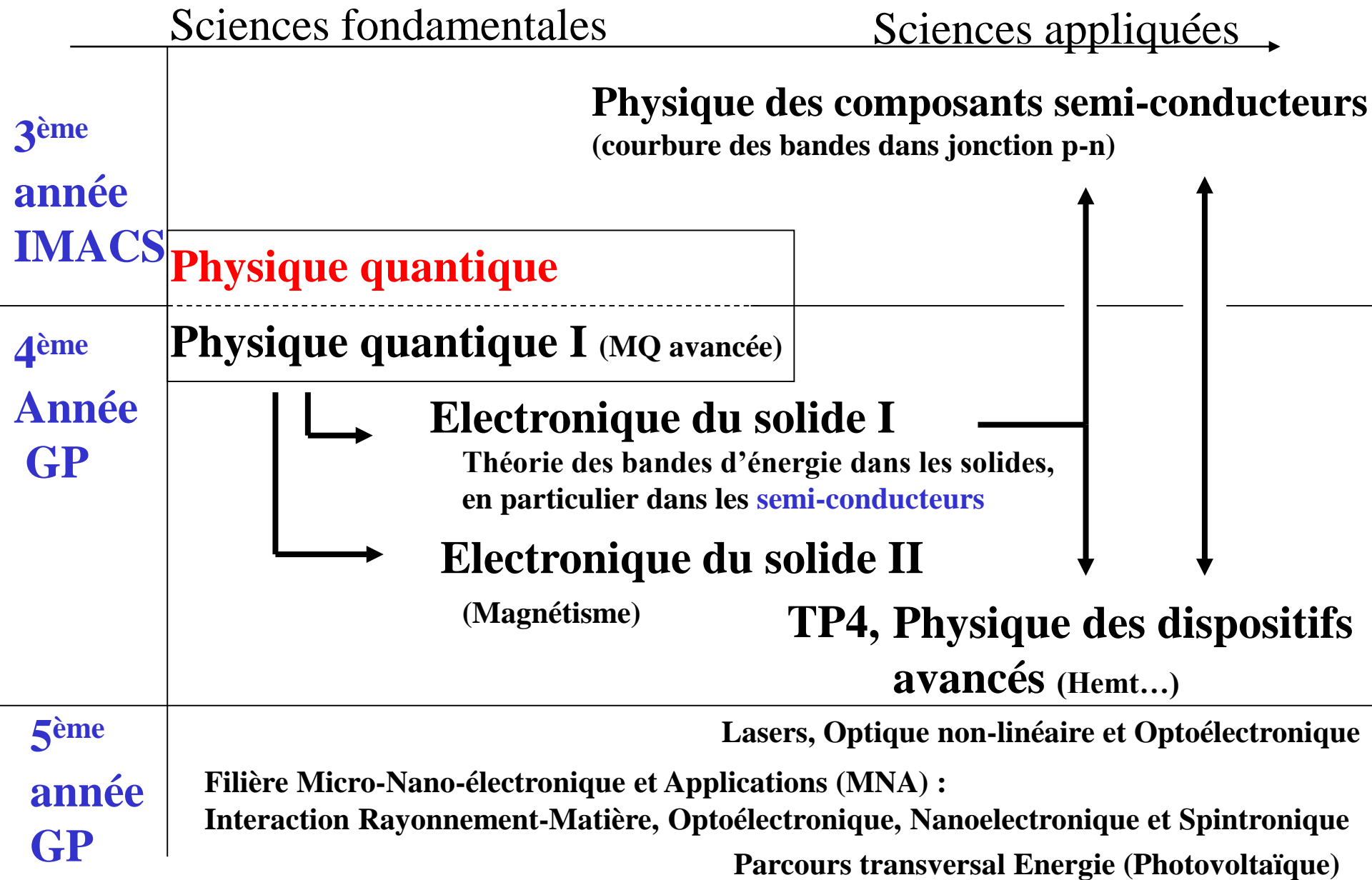
● Le moment cinétique



●

● Le moment cinétique introduit à partir des relations de commutation

# Le cours de physique quantique 3ème année IMACS : brique élémentaire dans le cursus de l'étudiant ingénieur au GP



# L'importance de la physique quantique

2



Description des propriétés physiques de la matière (électrique, optique, acoustique, mécanique, thermique) à partir de ses composants microscopiques  
(Rq: importance également de la MQ en Astrophysique)

## → Réalisations technologiques majeures du 20<sup>ème</sup> siècle

**Transistor (1948)** ( J. Bardeen, W. Brattain, J. Shockley, Bell laboratories prix Nobel 1954)

→ circuit intégré → Microprocesseur  
ordinateur personnel

**Laser (1960)** → télécommunications optiques → internet

[A. Shallow (\*\*) and C.H. Townes (\*), Bell laboratories et N. Bassov(\*), A. Prokhorov(\*), T. Maiman, C. Gould) (\* : prix Nobel 1964, \*\* : prix Nobel 1981)]

« En 2001, 30% du PNB des États-Unis reposait sur des produits issus des recherches en mécanique quantique » d'après M. Tegmark et J. A.Wheeler dans *L'actualité.com*, 30 mars 2006

→ **Futur** : Cryptographie quantique, Ordinateur quantique ?

## → Techniques de mesures et de caractérisations de matériaux basées sur des effets quantiques : nécessité d'une culture dans ce domaine

Microscope électronique à balayage ou transmission

Diffraction d'électrons, neutrons

Microscope à effet tunnel

Résonance Magnétique Nucléaire (RMN).....

## → Très hautes technologie (recherche et développement):

Conceptions de composants pour la microélectronique, l'optoélectronique (ingénierie de structure de bande pour les composants (Amplificateurs SOA..) et lasers semi-conducteurs : Alcatel, Sharp..) , les OLEDs (écrans souples, écrans de téléphone portable) l'électronique de spin (tête de lecture des disque durs, MRAM : Thalès), les horloges atomiques pour GPS..

→ A l'heure actuelle: recherche amont dans les laboratoires  
Futur : recherche et développement dans le domaine des **Nano-Technologies?**

## Rappel et compléments: le formalisme de la fonction d'onde

La base des « fonctions » de Dirac et la base des ondes planes

## Chapitre I : Espace des états - Formalisme de Dirac

Kets, bras, opérateurs hermitiques, observables. Les représentations.  
Cas de la représentation «  $\mathbf{r}$  » : retour sur la fonction d'onde

## Chapitre II : Les postulats et le principe de correspondance

La mesure. Le principe de décomposition spectrale. La réduction du paquet d'onde  
Les opérateurs  $\mathbf{R}$  et  $\mathbf{P}$

## Chapitre III : Dynamique des systèmes quantiques

L'équation de Schrödinger. Le théorème d'Ehrenfest.  
L'onde plane. Le paquet d'onde.

## Chapitre IV : L'oscillateur harmonique

Opérateurs création et annihilation

## Chapitre V : Le moment cinétique

Les relations de commutations. Les opérateurs « échelle »

C. Cohen-Tannoudji




B. Diu

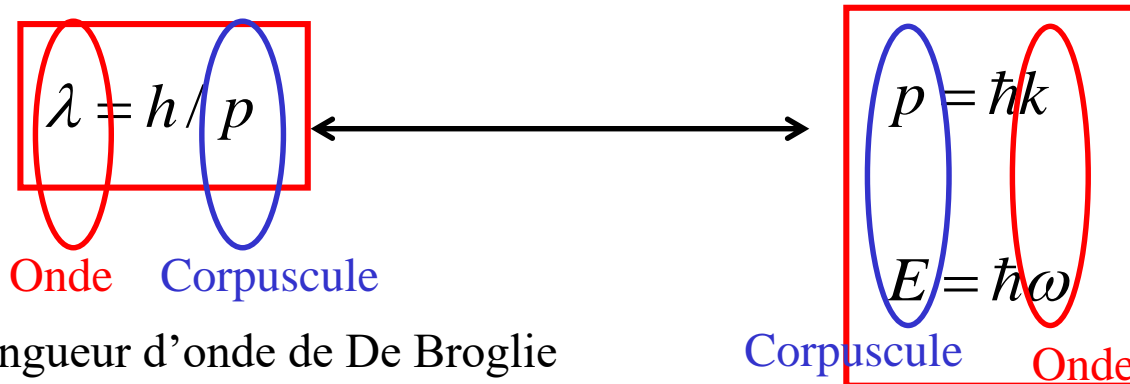
F. Laloe

**Bibliographie: Mécanique Quantique tome I : Claude Cohen-Tannoudji (Prix Nobel 1997), B. Diu, F. Laloe, Hermann**

## I) Rappels (voir cours Nanophysique )

- 1) Soit une particule  En physique quantique, le concept de trajectoire n'est plus valable: l'état de la particule n'est pas décrit par sa position  $\mathbf{r}$  et sa vitesse  $\mathbf{v}$  contrairement à ce qui se fait en Mécanique classique

Dualité Onde-corpuscule: **on peut associer une onde à cette particule!!**



$\lambda$  longueur d'onde de De Broglie

$h$  constante de Planck  $h=6,6262 \cdot 10^{-34}$  J.s

Corpuscule (blue) / Onde (red)



Louis De Broglie,  
France (1892-1987)  
Prix Nobel 1929

$\psi(\mathbf{r}, t)$  fonction d'onde associée à la particule :  
décrit complètement l'état de la particule à l'instant  $t$

Elle est de carré sommable :  $\iiint_{R^3} |\psi(\mathbf{r})|^2 d^3 r$  est finie

$\psi(\mathbf{r})$  appartient à l'espace des fonctions d'onde  $F$ . C'est un espace vectoriel.  
 $F$  est un sous espace de l'espace de Hilbert  $L^2$  des fonctions de carré sommable



Si  $\psi(\mathbf{r}, t)$  est normée, c'est-à-dire si  $\iiint_{R^3} |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3 r = 1$

$dP = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3 r$  est égal à la probabilité à l'instant  $t$  de trouver la particule dans le volume  $d^3 r$  entourant le point  $M$  défini par  $\mathbf{OM} = \mathbf{r}$

$\psi(\mathbf{r}, t)$  est l'amplitude de probabilité de présence de la particule

$|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$  est la densité de probabilité de présence

$\iiint_{R^3} |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3 r = 1 \rightarrow$  La somme des probabilités vaut 1

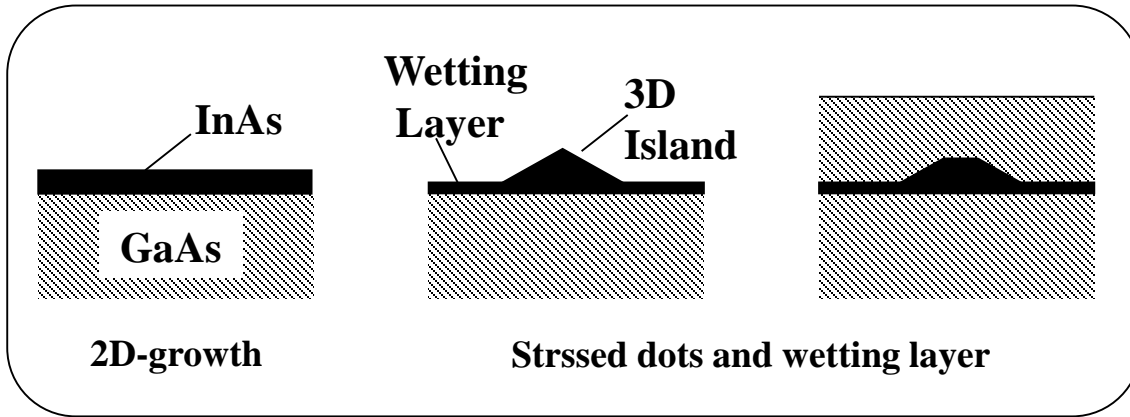
2) L'évolution de la fonction d'onde avec le temps est régie par **l'équation de Schrödinger**

$$i\hbar \frac{d\psi(\mathbf{r}, t)}{dt} = \hat{H}\psi(\mathbf{r}, t) \quad \text{avec} \quad \hat{H}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\psi + V(\mathbf{r}, t).\psi$$

# En pratique, comment visualiser la densité de probabilité de présence $|\psi(\mathbf{r})|^2$ ?

Exemple:

le système étudié: l'électron confiné dans une boîte quantique semiconductrice



Croissance de type Stransky Krastanov

Désaccord de maille entre InAs et GaAs: ~ 7%

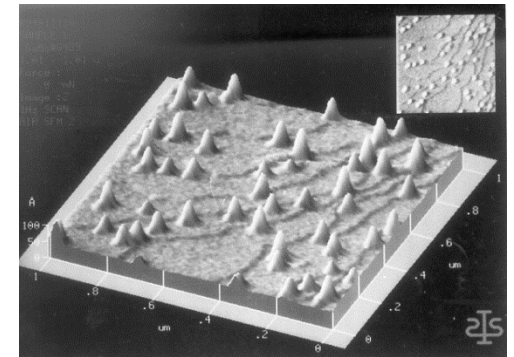


Image Microscope à Force Atomique (AFM), CNET

hauteur ~ 6 nm  
diamètre ~ 20 nm

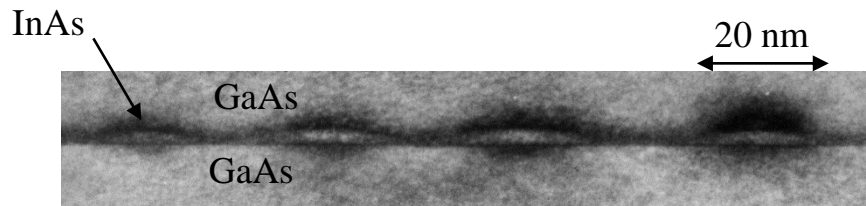
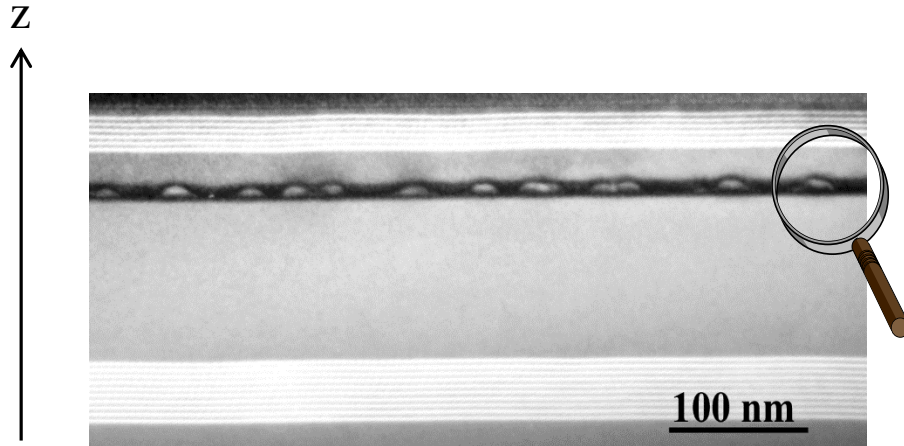


Image Microscope Electronique à Transmission (TEM), A. Ponchet, Toulouse (1995)

# Boîtes quantiques



*Image Microscope Electronique à Transmission (TEM)*

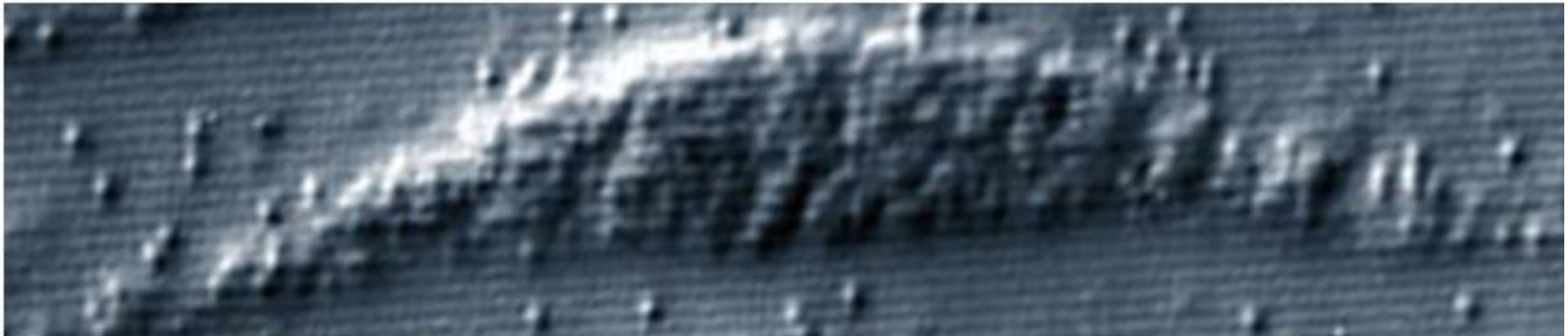
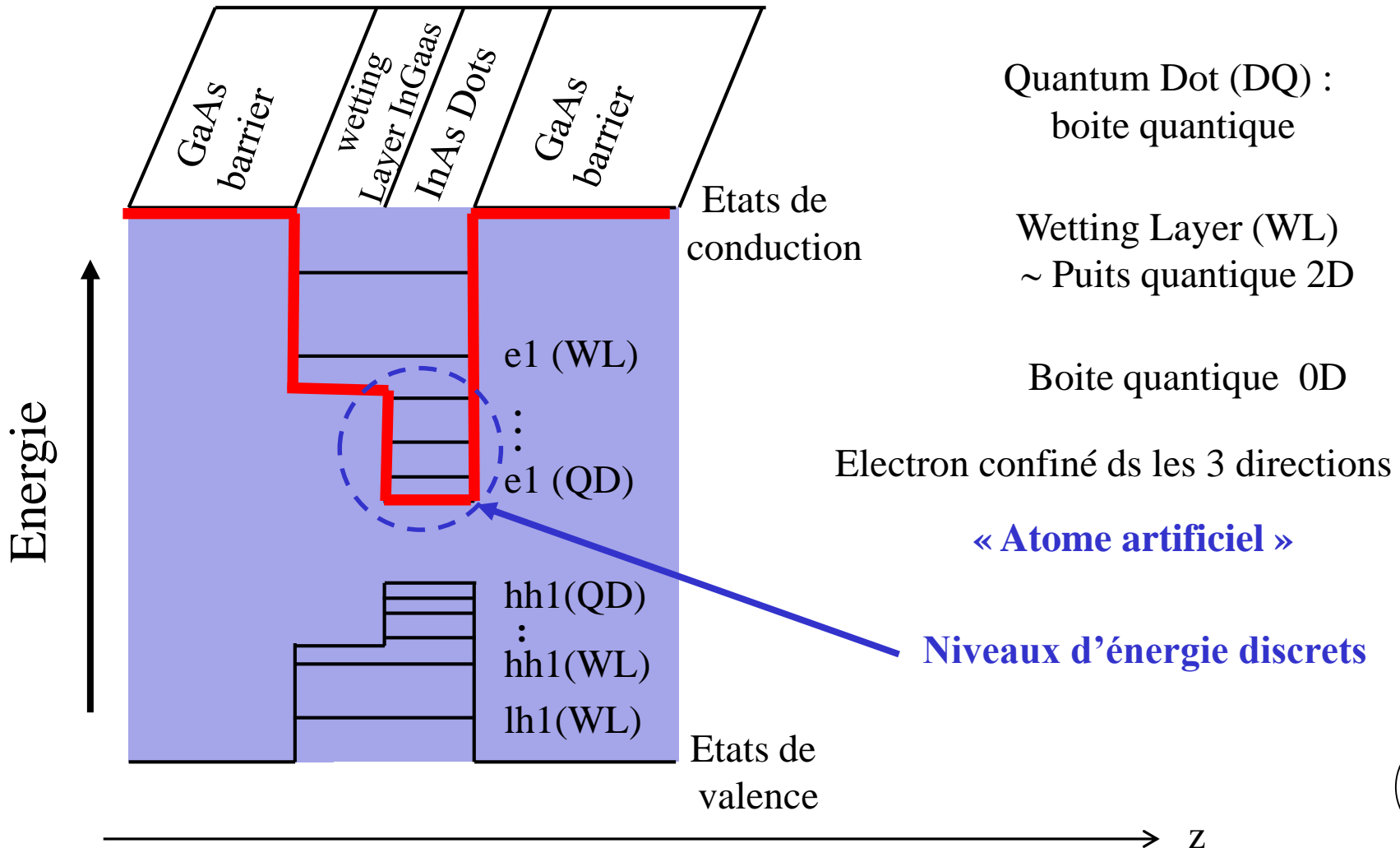


Image Microscopie à Effet Tunnel (STM). D. Bruls and P. M. Koenraad - Eindhoven University of Technology, Netherlands

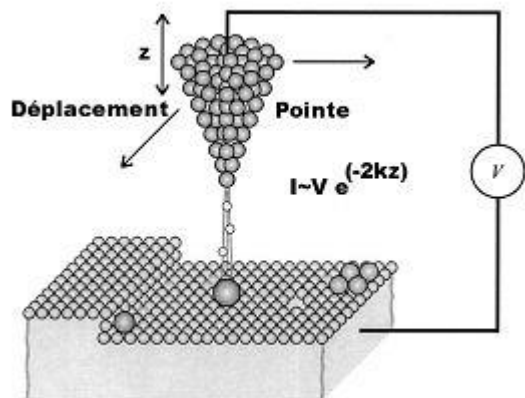
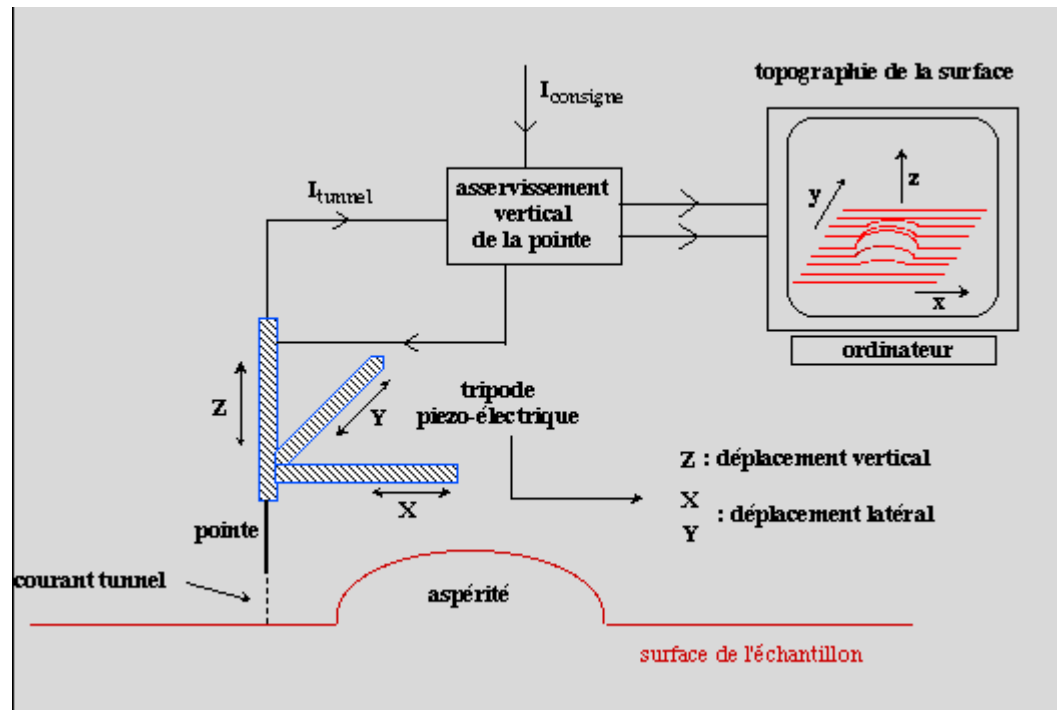
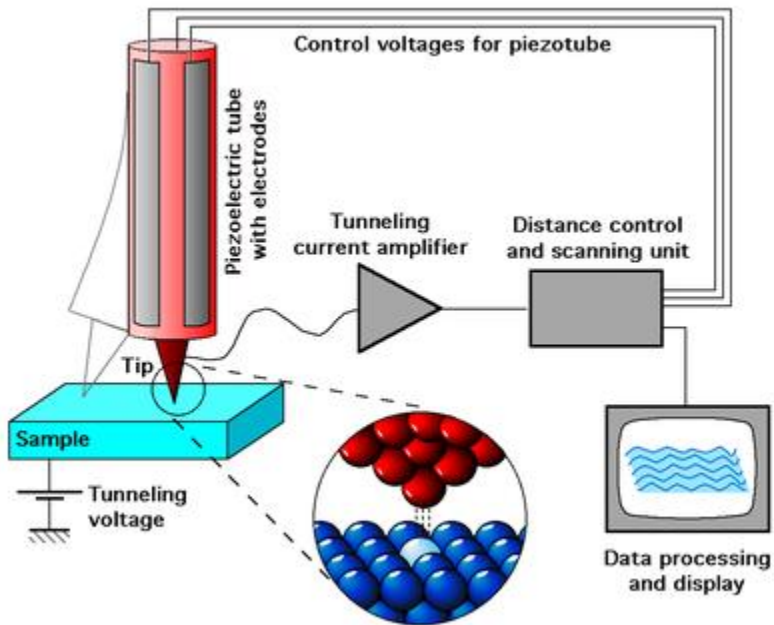
# L'électron de conduction dans une boîte quantique

Gap (InAs) < Gap (GaAs) →

L'électron de conduction voit un potentiel de confinement effectif (en rouge)



# La technique de mesure: le microscope à effet tunnel (Scanning Tunnel Microscope STM)



➔ Mode topographique:  $I=cste, V=cste, z$  varie

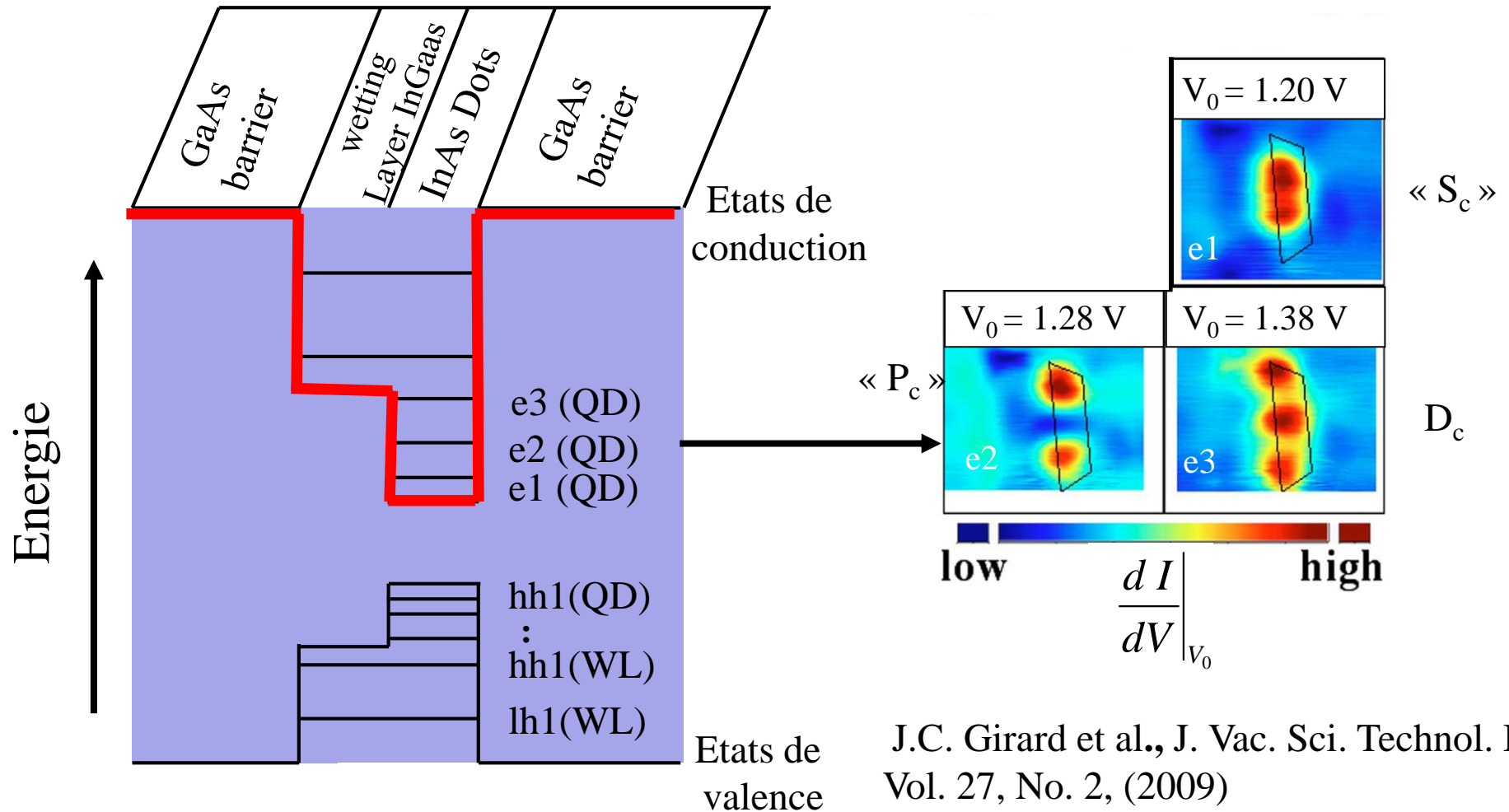
➔ Mode spectroscopie  $z=cste$

$$\left. \frac{dI}{dV} \right|_{V_0}(\mathbf{r}) \sim \alpha |\psi(\mathbf{r})|^2$$

# STM sur boîte quantique unique

11

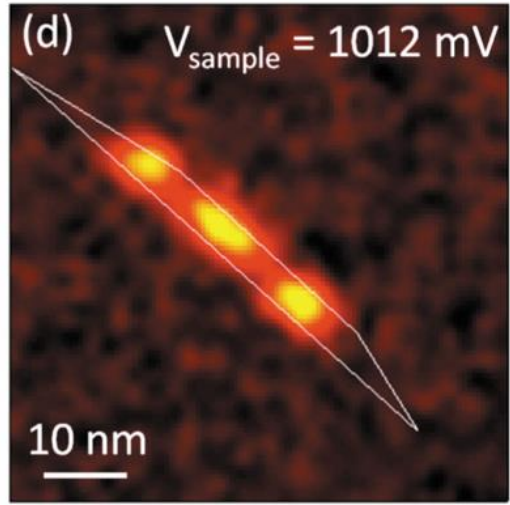
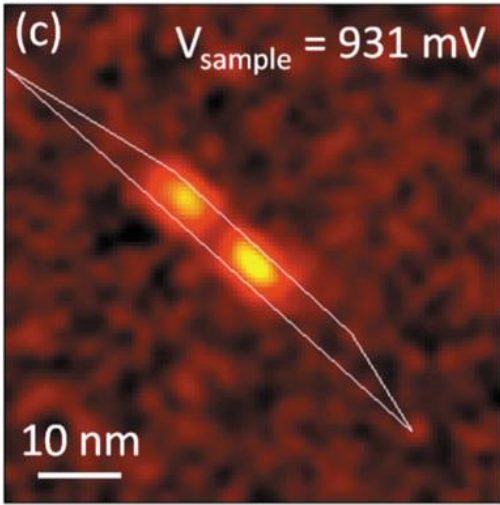
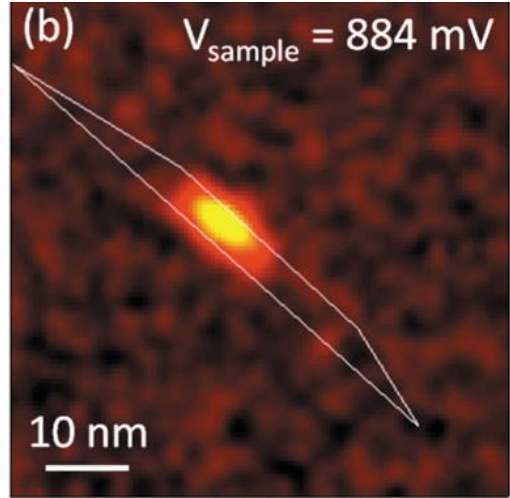
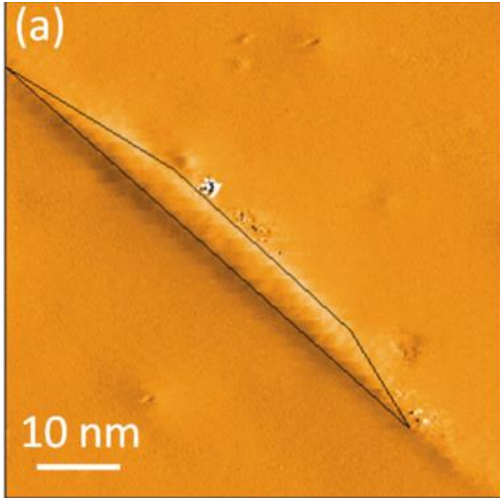
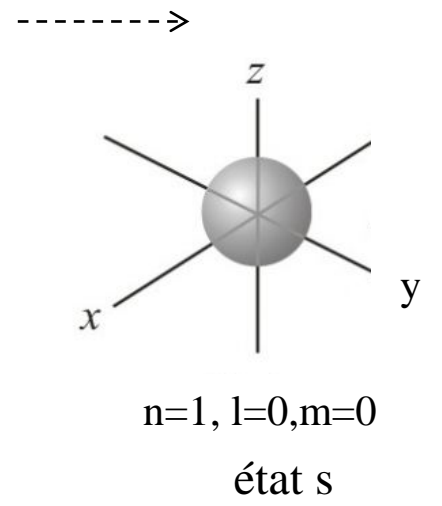
Boîte quantique InAs/GaAs



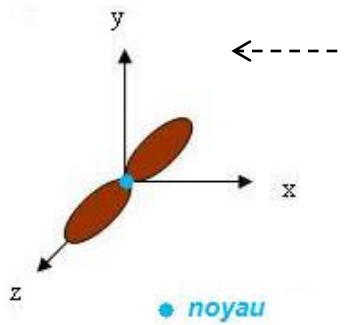


# Autre exemple: Boîtes quantiques InAs/InP

Orbitales de l'atome d'hydrogène



n=2, l=1 m=+-1



état p<sub>z</sub>

### 3) Le produit scalaire

$$\text{soit } (\varphi(\mathbf{r}), \psi(\mathbf{r})) \in F^2 \quad \langle \varphi(\mathbf{r}), \psi(\mathbf{r}) \rangle = \int_{R^3} \varphi(\mathbf{r})^* \psi(\mathbf{r}) d^3r \quad \langle \varphi(\mathbf{r}), \psi(\mathbf{r}) \rangle \in C$$

### 4) Bases orthonormées discrètes dans F

$$- \{u_i(\mathbf{r})\}_{i \in N} \text{ base orthonormée} \quad \langle u_i(\mathbf{r}), u_j(\mathbf{r}) \rangle = \int_{R^3} u_i^*(\mathbf{r}) u_j(\mathbf{r}) d^3r = \delta_{ij}$$

- Expression d'une fonction d'onde. Composantes

$$\forall \psi(\mathbf{r}), \text{ on peut écrire } \psi(\mathbf{r}) = \sum_i c_i u_i(\mathbf{r}) \text{ avec } c_i \in C \quad c_i = \langle u_i(\mathbf{r}), \psi(\mathbf{r}) \rangle$$

- Expression du produit scalaire et de la norme en fonction des composantes

$$\text{soit } \varphi(\mathbf{r}) = \sum_i b_i u_i(\mathbf{r}) \text{ et } \psi(\mathbf{r}) = \sum_j c_j u_j(\mathbf{r}),$$

$$\langle \varphi(\mathbf{r}), \psi(\mathbf{r}) \rangle = \sum_i b_i^* c_i$$

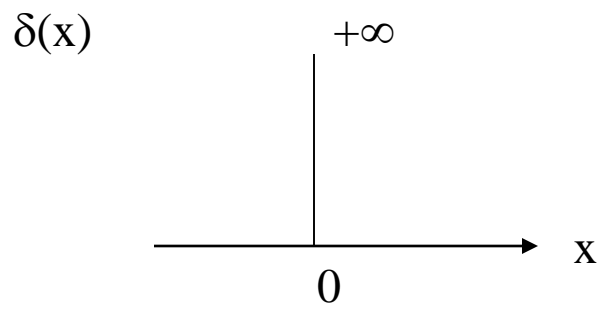
$$|\varphi(\mathbf{r})| = \sqrt{\langle \varphi(\mathbf{r}), \varphi(\mathbf{r}) \rangle} = \sqrt{\sum_i |b_i|^2}$$



## II) Compléments

### 1) Un outils mathématique utile : la « fonction » (en réalité distribution) de Dirac

« fonction » infinie en 0 et nulle partout ailleurs



$\delta(\mathbf{r})$  en 3D

$\delta(\mathbf{r})$  est telle que:

$$\int_{R^3} \delta(\mathbf{r}) d^3r = 1$$

à 1D  $\int_{R^3} \delta(x) dx = 1$   $\xrightarrow{\quad} [x]^{-1}$

à 3D  $\int_{R^3} \delta(\mathbf{r}) d^3r = 1$   $\xrightarrow{\quad} [r^3]^{-1}$

**Propriétés:**

$$\int_{R^3} \delta(\mathbf{r}) f(\mathbf{r}) d^3 r = f(0)$$

$$\int_{R^3} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) f(\mathbf{r}) d^3 r = f(\mathbf{r}_0)$$

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) = \delta(\mathbf{r}_0 - \mathbf{r})$$

$$\delta(ax) = \frac{1}{|a|} \delta(x)$$

**2) Bases orthonormées continues : 1 exemple important**

$$\{u_\alpha(\mathbf{r})\}_{\alpha \in R} \quad \text{base orthonormée} \quad \alpha \text{ continu}$$

**La base des fonctions de Dirac ( $\notin \mathbf{F}$ )**

$$\xi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$$

$\mathbf{r}_0$  joue le rôle d'indice continu

**Orthogonalité:**

$$\int_{R^3} \xi_{\mathbf{r}_0}^*(\mathbf{r}) \xi_{\mathbf{r}'_0}(\mathbf{r}) d^3r = \int_{R^3} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'_0) d^3r = \delta(\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}'_0)$$

La fonction de Dirac remplace le symbole de Kronecker utilisé pour les bases discrètes

**Composantes d'une fonction d'onde dans la base des fonctions de Dirac:**

$$\psi(\mathbf{r}) = \int_{R^3} c_{\mathbf{r}_0} \xi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r}) d^3r_0 \quad \text{base discrète } \sum_i \Leftrightarrow \text{base continue } \int_{R^3} d^3r_0$$

$$c_{\mathbf{r}_0} = \left\langle \xi_{\mathbf{r}_0}, \psi(\mathbf{r}) \right\rangle = \int_{R^3} \psi(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) d^3r = \psi(\mathbf{r}_0)$$

$$c_{\mathbf{r}_0} = \psi(\mathbf{r}_0)$$

$$\psi(\mathbf{r}) = \int_{R^3} \psi(\mathbf{r}_0) \xi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r}) d^3r_0$$