

CONTRÔLE NON CLASSANT DU COURS DE PHYSIQUE PHY 311

Mardi 4 juillet 2006, durée : 2 heures

Documents autorisés : cours, recueil de problèmes, copies des diapositives montrées en cours, énoncés et corrigés de PC, notes personnelles. Les parties 1,2,3 sont largement indépendantes et de difficulté croissante. La partie 4 ne peut être résolue qu'après la partie 3.

Les correcteurs seront sensibles à la présentation des copies. Les réponses aux questions qualitatives ne dépasseront pas dix lignes.

Le double puits quantique asymétrique

Un puits quantique est une structure cristalline obtenue par croissance de plusieurs couches de matériaux semi-conducteurs. Nous étudierons dans ce problème un des multiples dispositifs envisageables, le double puits asymétrique, représenté sur la figure 1. En appliquant un champ électrique sur ce dispositif, on peut modifier notablement la structure des niveaux quantiques du système, et contrôler ainsi la dynamique des électrons de conduction. Les applications potentielles concernent les détecteurs de lumière dans le moyen ou lointain infra-rouge, les lasers, et les dispositifs photo-voltaïques.

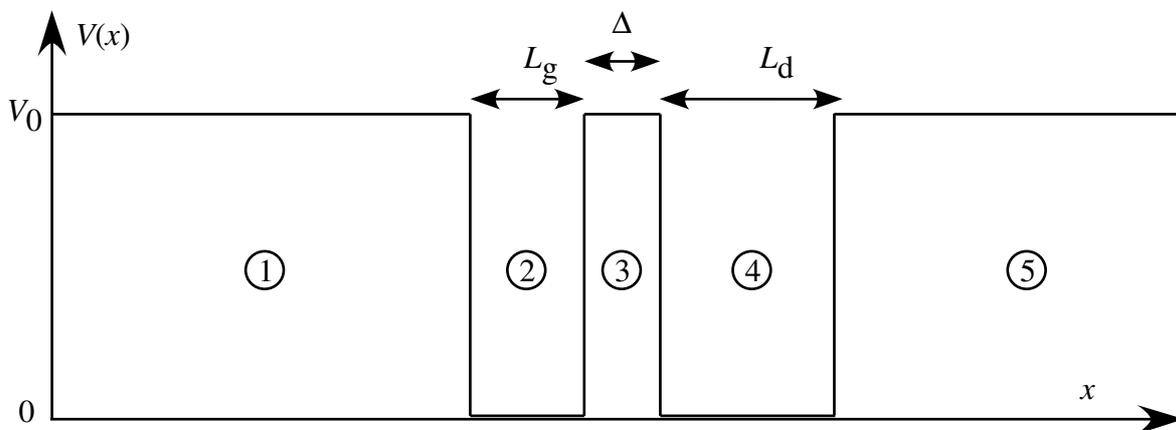


FIG. 1 – Double puits asymétrique représenté ici en absence de champ électrique extérieur. Le potentiel ressenti par un électron vaut $V(x) = V_0$ dans les régions 1,3,5, où l'échantillon est composé de AlGaAs. Ce potentiel vaut 0 dans les régions 2 et 4, composées de GaAs.

1 Structure des niveaux d'énergie en absence d'effet tunnel

On suppose dans cette partie que V_0 est infini. On admettra que le mouvement d'un électron au sein d'un semi-conducteur est régi par les mêmes lois que dans le vide, à condition de remplacer la masse par une « masse effective » qui a pour valeur $m = 6,1 \times 10^{-32}$ kg dans le semi-conducteur considéré ici. On rappelle la constante de Planck réduite $\hbar = 1,055 \times 10^{-34}$ J.s et la charge de l'électron $q = -1,6 \times 10^{-19}$ C.

1.1. Rappeler sans calcul les énergies propres dans un puits carré infini de largeur L .

1.2. En déduire les énergies propres dans le double puits asymétrique dans le cas $V_0 = \infty$.

1.3. Les largeurs des puits valent $L_g = 10$ nm et $L_d = 3L_g/2 = 15$ nm. Calculer en milli-électron-volt (meV) la position des 6 premiers niveaux d'énergie du système. Y a-t-il des niveaux d'énergie dégénérés? On précisera pour chaque niveau si l'électron est localisé dans le puits étroit (région 2) ou le puits large (région 4).

1.4. De quelle énergie faudrait-il abaisser ou monter l'énergie du fond du puits large (région 4) par rapport à celle du puits étroit (région 2) pour que le niveau fondamental du double puits soit dégénéré? On donnera le résultat sous forme littérale, puis en meV.

1.5. On cherche à réaliser ce déplacement relatif des fonds des deux puits par un champ électrique. Quel est l'ordre de grandeur du champ électrique F nécessaire, sachant que l'épaisseur de la barrière séparant les deux puits est $\Delta = 3$ nm?

NB. On ne demande pas ici de calcul quantitatif précis, mais seulement une estimation qualitative.

2 Prise en compte de l'effet tunnel en physique ondulatoire

On suppose dans cette partie que V_0 est fini et on s'intéresse aux états stationnaires d'énergie E inférieure à V_0 .

2.1. Rappeler la forme de l'équation de Schrödinger indépendante du temps dans chacune des 5 régions indiquées sur la figure 1. On posera $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ et $K = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$.

2.2. Indiquer la forme des solutions retenues sur chacun des cinq intervalles, sous forme de combinaisons linéaires de fonctions exponentielles (éventuellement complexes) de la variable x .

2.3. Rappeler le principe du raccordement des solutions aux frontières entre les différentes régions et expliquer l'origine de la quantification de l'énergie.

N.B. On ne cherchera pas à faire explicitement les calculs de raccordement qui sont relativement longs dans le cas qui nous intéresse ici.

2.4. La résolution numérique de la recherche des énergies dans le double puits donne les résultats indiqués dans la table 1. Comparer les valeurs obtenues aux prédictions de la question 1.3 et dessiner qualitativement l'allure des fonctions d'onde correspondantes.

| niveau | énergie (meV) |
|--------|---------------|
| 1 | 22 |
| 2 | 46 |
| 3 | 87 |
| 4 | 183 |
| 5 | 195 |
| 6 | 344 |

TAB. 1 – Niveaux d'énergie dans un double puits asymétrique avec $L_g = 10$ nm, $L_d = 15$ nm, $\Delta = 3$ nm, $V_0 = 1$ eV.

3 Champ électrique externe et mise à résonance des niveaux

On s'intéresse dans cette partie à la possibilité de favoriser l'oscillation tunnel entre les deux puits en appliquant un champ électrique. On utilise pour cela le formalisme de Dirac et on note respectivement $|\psi_g\rangle$ et $|\psi_d\rangle$ les états d'énergie minimale dans le puits gauche et le puits droit, quand le potentiel V_0 est infini. On note E_g et E_d les énergies correspondantes. On restreint l'analyse au sous-espace de dimension 2 de base $\{|\psi_g\rangle, |\psi_d\rangle\}$, car ce sont ces niveaux de basse énergie qui jouent un rôle important en pratique. On ne prendra donc pas en compte dans ce qui suit les niveaux excités de chaque puits.

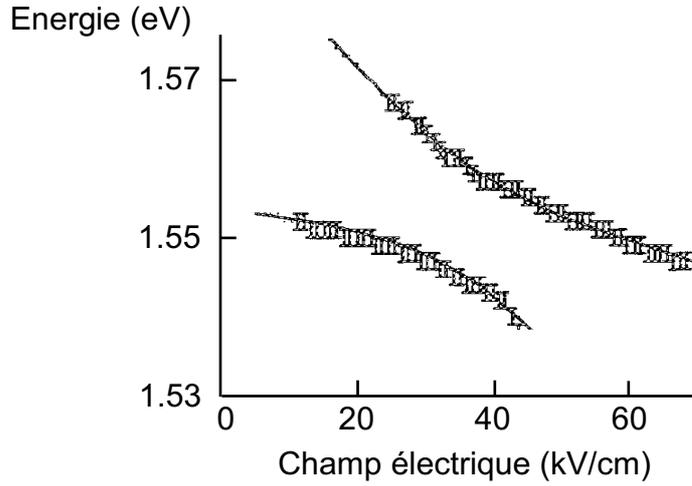


FIG. 2 – Variation des deux niveaux d'énergie les plus bas d'un double puits asymétrique, en fonction du champ électrique appliqué (J.E. Golub *et al.*, Appl. Phys. Lett. **53**, 2584 (1988)). L'échelle d'énergie verticale est définie à une constante additive près sans importance pour ce problème.

Pour V_0 infini et en l'absence de champ électrique appliqué, l'hamiltonien s'écrit dans la base $\{|\psi_g\rangle, |\psi_d\rangle\}$

$$\hat{H}_0 = \begin{pmatrix} E_g & 0 \\ 0 & E_d \end{pmatrix}.$$

Le couplage tunnel qui apparaît pour une valeur finie de V_0 s'écrit dans cette base :

$$\hat{V}_{\text{tun.}} = -J \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

3.1. On suppose que l'effet tunnel est faible ($J \ll |E_g - E_d|$) et on considère dans cette question le cas où aucun champ électrique externe n'est appliqué.

- Déterminer les énergies propres de l'hamiltonien $H_0 + V_{\text{tun.}}$ du double puits en fonction de E_g , E_d et J .
- Donner le développement de ces énergies propres à l'ordre 1 inclus en J .
- Quels sont les états propres de l'hamiltonien à l'ordre 0 en J ?
- L'effet tunnel peut-il jouer ici un rôle significatif? On comparera le résultat à celui d'un double puits symétrique, pour lequel $E_g = E_d$.

3.2. On applique maintenant un champ électrique F qui déplace de manière différente les positions des niveaux $|\psi_g\rangle$ et $|\psi_d\rangle$. On modélise ce champ par le couplage

$$\hat{V}_{\text{elec.}} = \begin{pmatrix} a_g F & 0 \\ 0 & a_d F \end{pmatrix},$$

où a_g et a_d sont des distances dépendant des caractéristiques du puits quantique ($a_g \neq a_d$). Déterminer les niveaux d'énergie du double puits et tracer qualitativement leur variation en fonction du champ appliqué F dans le cas $a_g < a_d < 0$.

Remarque : on aura intérêt à mettre l'hamiltonien total $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}_{\text{tun.}} + \hat{V}_{\text{elec.}}$ sous la forme

$$\hat{H} = \alpha \hat{1} + \beta \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix}, \quad (1)$$

où α , β et θ seront exprimés en fonction de J et des énergies \bar{E} et ΔE définies par :

$$\bar{E} = \frac{1}{2} (E_g + E_d + (a_g + a_d)F) \quad \Delta E = \frac{1}{2} (E_g - E_d + (a_g - a_d)F)$$

Le symbole $\hat{1}$ représente la matrice identité.

3.3. Quelle est la distance minimale entre les deux niveaux d'énergie quand on fait varier le champ électrique F ? Quels sont les états propres de l'hamiltonien \hat{H} dans ce cas?

3.4. Un résultat expérimental pour la mesure des deux niveaux les plus bas d'un double puits asymétrique est représenté sur la figure 2. Comparer ce résultat aux prédictions du modèle développé ci-dessus et extraire la valeur du coefficient tunnel J .

4 Oscillation dans le double puits et émission de rayonnement

Avec une impulsion laser convenablement choisie, on peut préparer les électrons de conduction dans le puits de gauche à un instant précis ($t = 0$). Si une oscillation des électrons se produit ensuite entre les deux puits, le dispositif se comporte comme une antenne et un champ électromagnétique est rayonné à la fréquence correspondante.

On utilisera dans cette partie le formalisme de Dirac présenté à la partie précédente. Les expériences sont menées sur un dispositif voisin de celui étudié dans la partie 3, mais correspondant à une valeur numérique différente du coefficient tunnel J .

4.1. On souhaite maximiser l'amplitude du champ électromagnétique rayonné. Quelle est la configuration optimale pour les états propres de l'hamiltonien \hat{H} ? Pour trouver cette condition, on pourra s'intéresser à la partie oscillante de la valeur moyenne de l'opérateur dipole \hat{d} , qui a pour états propres $|\psi_d\rangle$ et $|\psi_g\rangle$ avec les valeurs propres $+d_0$ et $-d_0$.

4.2. Un résultat expérimental montrant ce champ électromagnétique rayonné en fonction du temps est indiqué sur la figure 3. Les auteurs de cette figure ont ajusté le champ électrique statique F pour maximiser l'amplitude du champ rayonné. Déduire de cette figure la valeur du coefficient tunnel J pour le double puits utilisé. On ne cherchera pas à expliquer l'amortissement des oscillations observé expérimentalement.

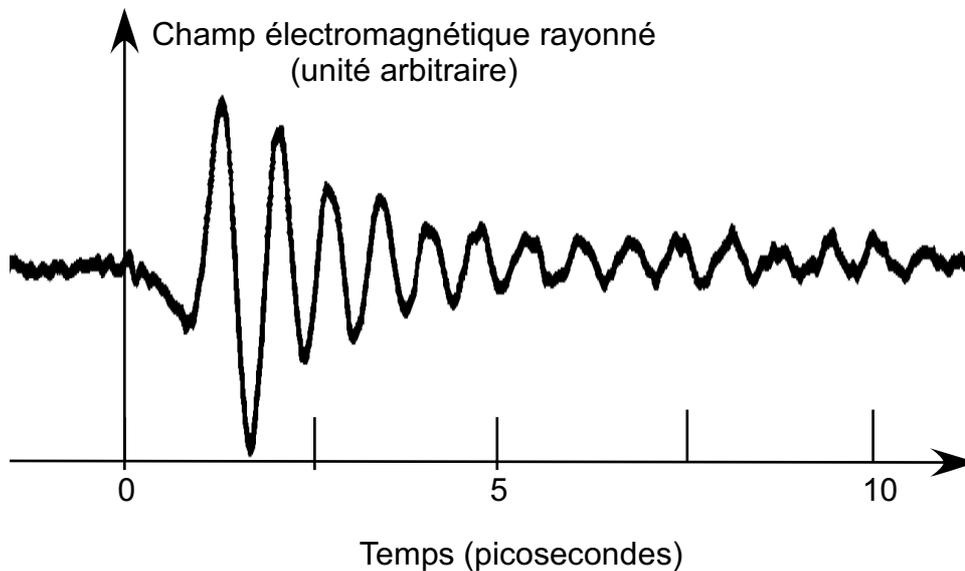


FIG. 3 – Champ électromagnétique rayonné, après préparation à $t = 0$ des électrons dans le puits gauche. 1 picoseconde = 10^{-12} seconde (H.G. Roskos *et al.*, Phys. Rev. Lett. **68**, 2216 (1992)).

Corrigé

1 Structure des niveaux d'énergie en absence d'effet tunnel

1.1. $E_n = n^2 E_1$ avec $E_1 = \hbar^2 \pi^2 / (2mL^2)$ et $n = 1, 2, \dots$

1.2. En absence de couplage tunnel, une base d'états propres possibles est formée par la réunion des états propres du puits gauche, d'énergie $E_{g,n} = n^2 \hbar^2 \pi^2 / (2mL_g^2)$, et du puits droit, d'énergie $E_{d,n} = n^2 \hbar^2 \pi^2 / (2mL_d^2)$.

1.3. L'état d'énergie le plus bas correspond au fondamental du puits le plus large. En raison du choix $3L_g = 2L_d$, le deuxième niveau du puits étroit coïncide avec le troisième niveau du puits large. Ce niveau est dégénéré. Les résultats pour les 6 premiers niveaux sont :

| niveau | énergie (meV) | disposition |
|--------|---------------|--------------------|
| 1 | 25 | droit ($n = 1$) |
| 2 | 56 | gauche ($n = 1$) |
| 3 | 100 | droit ($n = 2$) |
| 4 | 225 | gauche ($n = 2$) |
| 5 | 225 | droit ($n = 3$) |
| 6 | 400 | droit ($n = 4$) |

1.4. Il faut monter l'énergie du puits large (ou abaisser l'énergie du puits étroit) de

$$\Delta E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{1}{L_g^2} - \frac{1}{L_d^2} \right) = 56 \text{ meV} - 25 \text{ meV} = 31 \text{ meV}.$$

1.5. Dans un champ électrique F , la différence d'énergie potentielle pour une charge q entre deux points séparés par une distance ℓ vaut $\Delta U = qF\ell$. Ici, les centres des deux puits sont séparés de $\ell = \Delta + (L_g + L_d)/2 = 15.5 \text{ nm}$. Le champ F nécessaire est donc de l'ordre de $\Delta E / (q\ell) = 2 \times 10^6 \text{ V/m}$. On retrouve bien l'ordre de grandeur des champs qui vont intervenir dans la suite, de quelques dizaines de kV/cm.

Note : il ne s'agit ici que d'un ordre de grandeur. En présence d'un champ électrique, le potentiel n'est plus uniforme au fond d'un puits, mais varie linéairement avec la position. La résolution exacte de l'équation de Schrödinger dans chaque puits fait intervenir des fonctions d'Airy et les niveaux d'énergie n'ont plus d'expression analytique simple en fonction des paramètres du problème.

2 Prise en compte de l'effet tunnel en physique ondulatoire

2.1. Régions 1,3,5 : $\psi'' - K^2\psi = 0$. Régions 2 et 4 : $\psi'' + k^2\psi = 0$.

2.2. Si on élimine les solutions divergeant exponentiellement en $\pm\infty$, on arrive aux expressions suivantes :

| Région | forme de la fonction |
|----------|--|
| Région 1 | $\psi(x) = A e^{Kx}$ |
| Région 2 | $\psi(x) = B_1 e^{ikx} + B_2 e^{-ikx}$ |
| Région 3 | $\psi(x) = C_1 e^{Kx} + C_2 e^{-Kx}$ |
| Région 4 | $\psi(x) = D_1 e^{ikx} + D_2 e^{-ikx}$ |
| Région 5 | $\psi(x) = G e^{-Kx}$ |

soit 8 coefficients à déterminer.

2.3. La continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée aux quatre zones frontières donnent 8 relations linéaires entre ces coefficients. Par exemple, on trouve à la frontière 1-2, qu'on prend par convention en $x = 0$:

$$A = B_1 + B_2 \qquad KA = ik(B_1 - B_2)$$

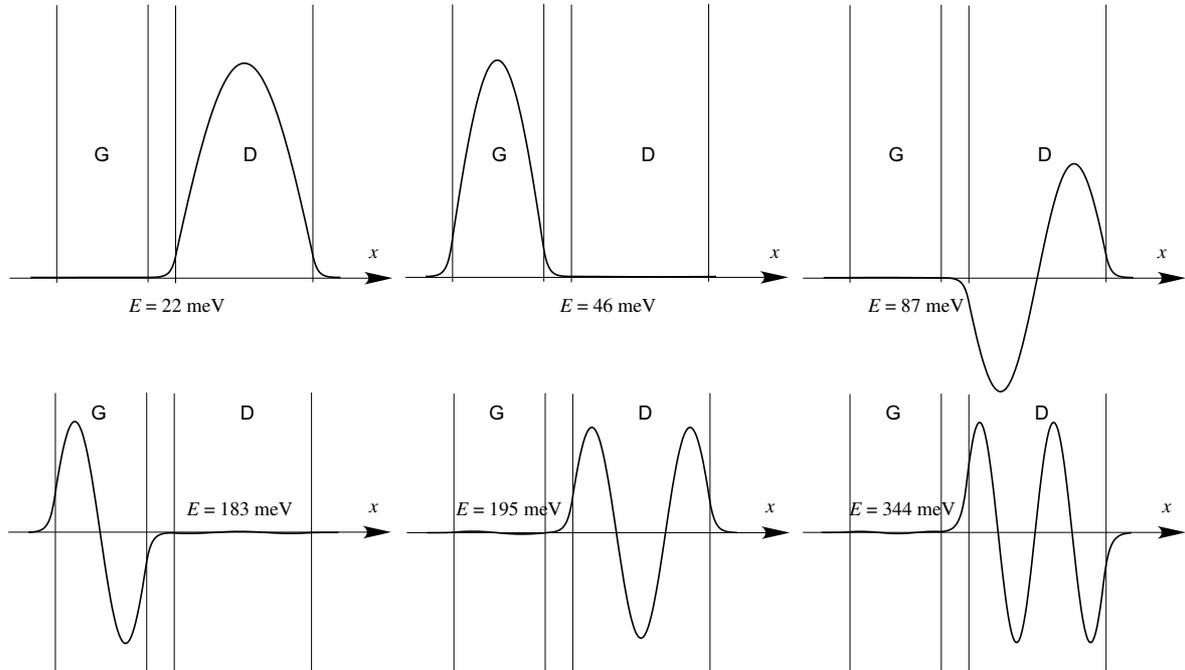


FIG. 4 – Les 6 premiers états propres (non normalisés) dans le double puits asymétrique.

En général, le déterminant du système 8×8 est non nul et la seule solution du système est la fonction nulle $A = B_1 = \dots = G = 0$. Ce n'est que pour des valeurs discrètes de l'énergie que le déterminant s'annule. On trouve alors une famille de solutions toutes proportionnelles entre elles, et on choisit une solution de norme 1, ce qui fixe l'ensemble des coefficients (à une phase globale près).

2.4. On retrouve des valeurs comparables à celles de la première partie. Ces valeurs sont légèrement inférieures en raison du caractère fini de V_0 , qui autorise une probabilité de présence non nulle de la particule dans les régions classiquement interdites. Les états propres de l'hamiltonien sont représentés sur le figure 4.

La dégénérescence trouvée précédemment entre les niveaux 4 et 5 est levée, et deux raisons peuvent *a priori* être invoquées :

- le couplage tunnel entre les deux niveaux gauche et droit ; si c'est l'effet dominant, les états propres de l'hamiltonien auront chacun une probabilité de présence significative à gauche et à droite.
 - l'effet de pénétration dans la zone interdite, qui n'a pas exactement le même effet sur les niveaux du puits large et sur ceux du puits étroit ; si c'est l'effet dominant, les états propres de l'hamiltonien seront localisés respectivement dans le puits de gauche et le puits de droite.
- Il est difficile de prédire quel est l'effet qui domine sans faire de calcul explicite, ce qui n'était pas demandé dans l'énoncé. La détermination numérique des états propres de l'hamiltonien et leur représentation graphique (cf. fig. 4) permet de lever l'ambiguïté : on trouve que c'est le second phénomène qui domine, car les états propres de l'hamiltonien correspondant aux niveaux 4 et 5 sont localisés à gauche et à droite, respectivement.

3 Champ électrique externe et mise à résonance des niveaux

3.1. (a) Pour déterminer les valeurs propres de la matrice

$$\hat{H}_0 + \hat{V} = \begin{pmatrix} E_g & -J \\ -J & E_d \end{pmatrix}$$

on calcule son polynôme caractéristique

$$P(E) = E^2 - E(E_g + E_d) + E_g E_d - J^2$$

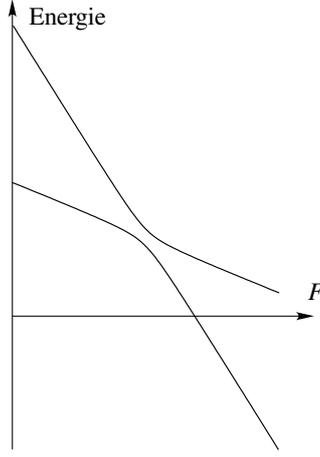


FIG. 5 – Variation des énergies propres avec le champ électrique appliqué F (tracé pour $a_g = 4a_d$).

dont les racines sont

$$E_{\pm} = \frac{1}{2} \left(E_g + E_d \pm \sqrt{(E_g - E_d)^2 + 4J^2} \right) .$$

(b) A l'ordre 1 en J , les valeurs propres ne dépendent pas de J et sont $E = E_g$ et $E = E_d$.

(c) Les vecteurs propres sont à l'ordre zéro en J égaux respectivement à $|\psi_g\rangle$ et $|\psi_d\rangle$.

(d) Quand J est petit devant la différence d'énergie $|E_g - E_d|$ entre niveaux, l'effet tunnel entre ces niveaux joue donc un rôle négligeable. La situation est très différente du double puits symétrique pour lequel $E_g = E_d$ et pour lequel les états propres du problème sont toujours les états « complètement mélangés » : $(|\psi_g\rangle \pm |\psi_d\rangle)/\sqrt{2}$.

3.2. Posons comme indiqué dans l'énoncé

$$\bar{E} = \frac{1}{2} (E_g + E_d + (a_g + a_d)F) \quad \Delta E = \frac{1}{2} (E_g - E_d + (a_g - a_d)F)$$

On trouve alors l'expression indiquée pour \hat{H} en prenant :

$$\alpha = \bar{E} \quad \beta = \sqrt{\Delta E^2 + J^2} \quad \cos \theta = \frac{\Delta E}{\sqrt{\Delta E^2 + J^2}} \quad \sin \theta = \frac{-J}{\sqrt{\Delta E^2 + J^2}}$$

Les niveaux d'énergie sont

$$E_{\pm} = \alpha \pm \beta = \bar{E} \pm \sqrt{\Delta E^2 + J^2}$$

et le tracé de leur variation avec F , représenté sur la figure 5, correspond à deux branches d'hyperbole.

3.3. L'écart minimal entre les deux niveaux d'énergie est obtenu pour $\sqrt{\Delta E^2 + J^2}$ minimal, c'est-à-dire $\Delta E = 0$. Cette situation correspond à la mise à résonance des deux puits :

$$E_g + a_g F = E_d + a_d F .$$

Dans ce cas, $\theta = -\pi/2$ et les états propres de \hat{H} sont

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_g\rangle + |\psi_d\rangle) : \text{niveau fondamental} \quad \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_g\rangle - |\psi_d\rangle) : \text{premier niveau excité}$$

L'écart entre les énergies de ces deux niveaux est $2J$.

3.4. On retrouve bien la variation en branches d'hyperbole attendue. L'écart minimal entre les deux branches d'hyperbole est de 14 meV, ce qui donne $J = 14/2 = 7$ meV. Cette valeur est notablement plus faible que les écarts entre niveaux d'énergie dans un puits (plusieurs dizaines de meV), ce qui justifie de restreindre notre étude au niveau fondamental de chaque puits.

4 Oscillation dans le double puits et émission de rayonnement

4.1. Pour avoir une oscillation importante entre les deux puits, il faut que les états propres de l'hamiltonien soient des combinaisons linéaires de $|\psi_g\rangle$ et $|\psi_d\rangle$ avec des poids comparables, ce qui impose de travailler près de la résonance dégagée précédemment : $E_g + a_g F = E_d + a_d F$. Si c'est bien le cas, un électron initialement préparé dans le puits de gauche se trouvera avec certitude dans le puits de droite au bout d'une demi-période, puis de nouveau dans le puits de gauche au bout d'une période, et ainsi de suite. L'amplitude du dipole moyen est alors maximale, égale à $2d_0$. Comme l'amplitude du champ rayonné par un dipole oscillant est proportionnelle à l'amplitude de l'oscillation du dipole, ceci garantit que le champ électromagnétique rayonné sera lui aussi maximal.

Si on n'est pas au voisinage de la résonance, les états propres de \hat{H} sont à peu près égaux à $|\psi_g\rangle$ et $|\psi_d\rangle$: un électron préparé initialement dans le puits de gauche y restera et aucun champ appréciable ne sera rayonné.

Remarque. Bien que cela ne soit pas explicitement demandé dans l'énoncé, on peut mener des calculs plus quantitatifs pour cette question en procédant de la manière suivante :

1. Les états propres de l'hamiltonien sont

$$|\phi_+\rangle = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) \\ \sin(\theta/2) \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad |\phi_-\rangle = \begin{pmatrix} -\sin(\theta/2) \\ \cos(\theta/2) \end{pmatrix}$$

2. L'état initial s'écrit

$$|\psi(0)\rangle = |\psi_g\rangle = \cos(\theta/2)|\phi_+\rangle - \sin(\theta/2)|\phi_-\rangle$$

et son évolution est

$$|\psi(t)\rangle = \cos(\theta/2)e^{-i(\alpha+\beta)t/\hbar}|\phi_+\rangle - \sin(\theta/2)e^{-i(\alpha-\beta)t/\hbar}|\phi_-\rangle .$$

3. Le dipole moyen vaut $\langle d \rangle(t) = \langle \psi(t) | \hat{d} | \psi(t) \rangle$ et un calcul long, mais sans réelle difficulté, conduit à :

$$\langle d \rangle(t) = d_0 (\cos^2 \theta + \sin^2 \theta \cos(2\beta t)) .$$

4. Pour maximiser la partie oscillante du dipole moyen, il faut choisir $\sin^2 \theta = 1$, ce qui revient à se placer à résonance, auquel cas $\beta = J$.

4.2. Supposons qu'on se place à résonance. L'écart d'énergie entre les deux états propres $|\psi_\pm\rangle$ de l'hamiltonien vaut $2J$ et l'état initial

$$|\psi(0)\rangle = |\psi_g\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_+\rangle + |\psi_-\rangle)$$

va évoluer en

$$|\psi(t)\rangle = e^{i\Phi(t)} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(e^{-iJt/\hbar} |\psi_+\rangle + e^{+iJt/\hbar} |\psi_-\rangle \right)$$

où $\Phi(t)$ est une phase globale sans importance ici. La période de l'oscillation de l'électron est $T = \pi\hbar/J$ et c'est également la période du champ rayonné. On mesure une période du champ de 0,7 ps, ce qui correspond à $J = 3$ meV.

Remarque. Des structures à puits quantiques similaires à celle étudiée dans ce problème ont été récemment réalisées afin de produire un rayonnement laser dans le domaine de l'infrarouge lointain. La conception de ces structures doit être soigneusement étudiée afin d'assurer un dépeuplement efficace du niveau inférieur rendant possible une inversion de population. Le premier dispositif laser à puits quantiques ayant fonctionné dans le domaine de l'infrarouge lointain reposait ainsi sur une structure périodique, chaque période étant constituée d'un ensemble de sept puits quantiques couplés par effet tunnel. Le tout est placé dans un champ électrique statique de plusieurs kV par cm [R. Kohler *et al.*, Terahertz semiconductor-heterostructure laser, Nature **417**, 156-159 (2002)].