

LP40 – CONFINEMENT D'UNE PARTICULE ET QUANTIFICATION DE L'ÉNERGIE

9 février 2017

Charles Paleo & Paleo Charles

I'm going to build a well. It's gonna be great.
DONALD T.

Niveau : Licence 2

Commentaires du jury

[2016] : Le lien entre le confinement et la quantification doit être explicité.

[2015] : Cette leçon peut être l'occasion de développer des arguments qualitatifs et des calculs simples permettant de donner des ordres de grandeur dans des domaines divers de la physique avant d'envisager des applications élaborées.

[2009, 2010] : Une justification physique des conditions aux limites adoptées est attendue.

[2008] : Le modèle de Bohr a maintenant une importance surtout historique. Il est évidemment possible de l'aborder mais il n'est pas un passage obligé pour aborder la quantification. L'interprétation des principaux résultats de la théorie quantique de l'atome d'hydrogène est primordiale

Bibliographie

- ↗ *Mécanique quantique I*, Aslangul → base + historique
- ↗ *Mécanique 1*, BFR, → modèle de Bohr
- ↗ *Mécanique quantique*, Basdevant et Dalibard → puits de potentiel et états liés, ammoniac (pas mal d'exemples dispo pour cette LP)
- ↗ *Mécanique quantique*, Feynman → atome d'hydrogène
- ↗ *Problèmes quantiques*, Basdevant et Dalibard → ions colorés (autres exemples disponibles)
- ↗ *Physique expérimentale*, Fruchart, Lidon, Thibierge, Champion, Le Diffon ("Jolidon") → Si on compte faire la manip de détermination de la constante de Rydberg

Prérequis

- mécanique quantique de lycée ($E = h\nu$ et partie 2.1)
- mécanique du point dont CFCC

Expériences

- ☛ Dispersion de la lumière émise par une lampe spectrale

Table des matières

1	Quantification	2
1.1	Mise en évidence expérimentale	2
1.2	Premières tentatives d'explications et limites	2
2	Du confinement à la quantification	4
2.1	Rappels de base de mécanique quantique	4
2.2	Particule dans un puits de potentiel infini	4
2.3	Particule dans un puits de potentiel fini	5
3	Applications à des systèmes réels	6
3.1	Retour à l'atome d'hydrogène	6
3.2	Ions colorés	8
3.3	La molécule d'ammoniac	8
3.4	Semi-conducteurs	10

Introduction

De manière classique, l'énergie d'un système peut prendre n'importe quelle valeur. Cependant, ce n'est absolument pas un comportement général de la matière et il est mis en défaut pour différents systèmes quantiques.

On s'intéresse ici à la quantification des niveaux d'énergie de la matière et à ses causes.

1 Quantification

1.1 Mise en évidence expérimentale

↪ Aslangul I p.157

En observant à l'aide d'un prisme le spectre d'émission d'une lampe à hydrogène, on remarque que ce spectre n'est pas continu mais constitué de raies, phénomène incompréhensible en physique classique. De même, en éclairant un gaz de dihydrogène, seule les raies complémentaires sont absorbées (spectre d'absorption). En prenant une autre lampe (He, Ne...), les raies ne sont pas les mêmes, elles sont caractéristiques de l'élément chimiques. Ces observations, réalisées en 1862 par Ångström mettent en évidence une quantification des échanges d'énergie.

En 1885, Balmer propose une loi phénoménologique des raies de l'hydrogène :

$$\lambda_p = B_a \frac{p^2}{p^2 - 4} \quad p = 3; 4; 5 \dots$$

$B_a \approx 365 \text{ nm}$, longueur d'onde de Balmer.

Cette loi, pour les raies dites de Balmer (toutes situées dans le visible), est généralisée par Rydberg en 1888 sous la forme :

$$\frac{1}{\lambda_{np}} = R_y \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{p^2} \right) \quad p = n + 1; n + 2; n + 3 \dots$$

$R_y \approx 109\,677 \text{ cm}^{-1}$, constante de Rydberg.

On définit alors plusieurs transitions suivant les valeurs de n (Lyman, Balmer, Paschen, Brackett, Pfund, Humphreys...). Puis une extension à d'autres atomes par Ritz (1908) :

Formule de Ritz

$$\frac{1}{\lambda_{np}} = \frac{1}{T_n} - \frac{1}{T_p} \quad (1)$$

Soit pour l'hydrogène : $T_n = R_y/n^2$.

1.2 Premières tentatives d'explications et limites

↪ Aslangul I p.158 & BFR Méca I p.256

Situation au début des années 1910 : À la suite de l'expérience de Rutherford (1909), le modèle de l'atome de Perrin (*planétaire*) a été retenu aux dépens de celui de Thomson (*plum pudding*).

Problèmes :

- Les travaux de Larmor en 1897 ont démontré qu'une charge q d'accélération \vec{a} émet un rayonnement électromagnétique de puissance rayonnée donnée par la formule de Larmor :

Formule de Larmor

$$P = \frac{q^2 a^2}{6\pi\epsilon_0 c^3}$$

L'électron perd donc de l'énergie et devrait donc ralentir puis s'écraser sur le noyau (en environ 10^{-8} s).

- De plus, ce modèle ne rend pas compte des quantifications des échanges de photons.

Modèle de Bohr (1913) : Partant du modèle planétaire de Perrin, Bohr applique une quantification *ad-hoc* à la mécanique classique. Il émet pour cela deux hypothèses :

- Il existe des orbites privilégiées pour lesquelles l'électron en mouvement ne rayonne pas.
- L'émission ou l'absorption de lumière par l'atome se fait par échanges de photons permettant à l'électron de passer d'une énergie E_i à E_f correspondant à différentes orbites successives. Ces photons ont une énergie $h\nu$ soit : $E_i = E_f + h\nu$ pour l'émission et $E_i + h\nu = E_f$ pour l'absorption.

L'énergie étant quantifiée, le moment cinétique et le rayon de son orbite le sont également. La compensation de l'accélération tangentielle par la force de Coulomb donne :

$$m \frac{v^2}{R} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R^2} \quad \Leftrightarrow \quad mv^2 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R} \quad \Leftrightarrow \quad 2E_{cin} = -E_{pot} \quad (2)$$

Or $E = E_{cin} + E_{pot}$ donc $E = -E_{cin} = E_{pot}/2$.

Le moment cinétique est constant (CFCC) : $L = mvR$. Avec l'équation 2 : $Lv = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$, d'où :

$$E = -E_{cin} = -\frac{1}{2}m \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 L} \right)^2$$

Avec la deuxième hypothèse de Bohr et la formule de Ritz (équation 1), cette relation devient, pour l'hydrogène :

$$E_n - E_p = \frac{hc}{\lambda_{np}} = hcR_y \left(\frac{1}{p^2} - \frac{1}{n^2} \right) = \frac{m}{2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \left(\frac{1}{L_p^2} - \frac{1}{L_n^2} \right)$$

Soit :

Quantification du moment cinétique

$$L_n = n \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \sqrt{\frac{m}{2hcR_y}} = n\hbar$$

La valeur mesurée expérimentalement de R_y permet d'estimer le terme $\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \sqrt{\frac{m}{2hcR_y}} \approx 0,16h \approx \hbar$ ce qui suppose la quantification du moment cinétique $L_n = n\hbar$ et donc des orbites disponibles pour les électrons :

Orbites et rayon de Bohr

$$R_n = n^2 a_0 \quad \text{avec} \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{m} \left(\frac{4\pi\epsilon_0}{e^2} \right)^2 \approx 52,9 \text{ pm} \quad \text{rayon de Bohr}$$

Et l'énergie d'un électron sur une orbite R_n est donc :

$$E_n = -\frac{1}{n^2} \frac{me^4}{8h^2\epsilon_0^2}$$

Remarques :

- Si l'on souhaite prendre en compte l'entraînement du noyau de masse M : $\frac{1}{\lambda_{np}} = R_y \left[\frac{1}{1+m/M} \right] \left(\frac{1}{p^2} - \frac{1}{n^2} \right)$.
- On peut également introduire la constante de structure fine $\alpha = \frac{e^2}{2\epsilon_0 hc} \approx \frac{1}{137}$, constante fondamentale de grande importance en électrodynamique.

Problèmes :

- La quantification ne repose que sur le besoin de justifier la formule de Ritz.
- Pour une absorption ou une émission d'un photon, l'électron passe instantanément d'une orbite à une autre, impliquant une vitesse infinie.

! Ces modèles ne sont donc pas satisfaisants. Il faut donc chercher l'origine de cette quantification.



2 Du confinement à la quantification

2.1 Rappels de base de mécanique quantique

À une particule d'impulsion p , on associe une longueur d'onde :

Longueur d'onde de De Broglie

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

À une particule massive non relativiste est associée une fonction d'onde ψ qui vérifie l'équation de Schrödinger :

Equation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(\vec{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}, t) \right] \psi(\vec{r}, t)$$

Le terme entre crochets correspondant à l'observable associée à l'énergie de la particule : le hamiltonien H .

Le module carré de cette fonction d'onde est relié à une probabilité de présence de la particule, normalisée sur le volume accessible à la particule D :

Probabilité

$$dP = |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3\vec{r} \quad \int_D |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3\vec{r} = 1$$

Toute amélioration de la précision de mesure de la position d'une particule se traduit par une moindre précision de mesure de sa vitesse (et vice-versa) :

Principe d'incertitude de Heisenberg

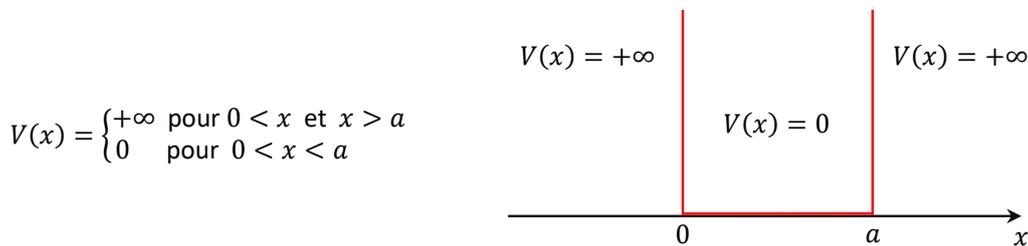
$$\Delta x \Delta p_x \geq \hbar/2$$

2.2 Particule dans un puits de potentiel infini

Aslangul I p.521

Afin d'expliquer l'origine de cette quantification, nous nous intéressons ici à une particule dans un puits de potentiel continu par morceaux. Ceci constitue donc un modèle où le potentiel varie rapidement sur une longueur d'onde très inférieure à la longueur d'onde de De Broglie de la particule.

Le potentiel étudié est le puits de potentiel infini à une dimension :



L'étude est faite en régime stationnaire : $\psi = \psi(x)$, l'équation de Schrödinger donne :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' + V\psi = E\psi \quad \Leftrightarrow \quad \psi'' + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V]\psi = 0$$

Soit, pour $0 < x < a$:

$$\psi(x) = A \cos\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} x\right) + B \sin\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} x\right)$$

Les singularités de la fonction d'onde, si elles sont possibles mathématiquement, ne sont pas physiquement acceptables : l'intégrale de son module carré sur tout intervalle doit être finie puisque reliée à la probabilité d'y trouver la particule. On en déduit donc les conditions aux limites $\psi(0) = \psi(a) = 0$, qui imposent $A = 0$ et $\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}a = n\pi$, d'où :

Energie d'une particule dans un puits 1D infini de longueur a

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \quad n \in \mathbb{N}^* \tag{3}$$

Remarques :

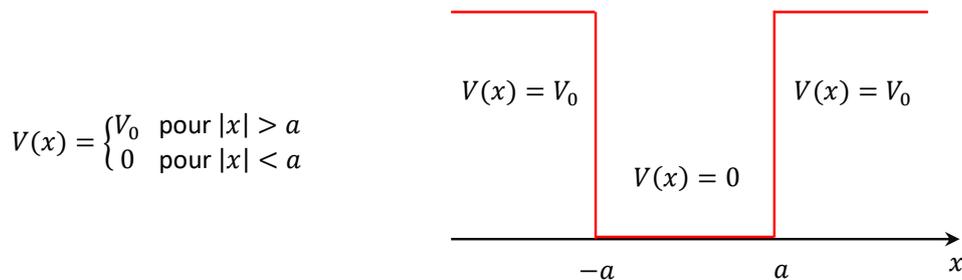
- D'après l'interprétation du module carré de la fonction d'onde comme une probabilité de présence, la fonction d'onde ne peut pas être identiquement nulle. L'état de plus basse énergie est donc obtenu pour $n = 1$, soit une énergie non nulle. Ceci nous amène au principe d'incertitude de Heisenberg : la particule étant astreinte à se déplacer dans une région finie, la variance de sa position est majorée, donc (d'après ce principe) la variance de sa quantité de mouvement est non nulle. La particule possède donc une certaine quantité d'énergie qui augmente quand la longueur a de la boîte diminue.
- Ce comportement de la fonction d'onde ψ est similaire à celui de la hauteur y de la corde de Melde, où les nœuds de la corde correspondrait à une probabilité nulle de trouver la particule.
- La quantification de l'énergie apparaît donc comme une conséquence de la continuité de ψ et du confinement de la particule.

↓ Ce modèle n'est pas réaliste : c'est le signe de $E - V$ qui va déterminer si on a affaire à un état lié ou un état de diffusion.

2.3 Particule dans un puits de potentiel fini

↗ Méca q, Basdevant p.85

Le potentiel est le suivant :



On a toujours :

$$\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V]\psi = 0$$

Si $E > V_0$: états sont dits *de diffusion*. L'équation de Schrödinger indépendante du temps présente des solutions pour un ensemble continu de valeurs d'énergie $E > V_0$. Ce sont des ondes planes puisque V est constant quand $x \rightarrow \infty$. Elles ne sont donc pas de carré sommable et on doit donc considérer des paquets d'ondes pour afin d'obtenir des état physiques.

Si $E < V_0$: On pose $k = \hbar^{-1}\sqrt{2mE}$ et $K = \hbar^{-1}\sqrt{2m(V_0 - E)}$.

Trois cas se présentent :

- $x < -a$: $\psi_I(x) = A_I e^{Kx} + B_I e^{-Kx}$
- $-a < x < a$: $\psi_{II}(x) = A_{II} \cos(kx) + B_{II} \sin(kx)$
- $a < x$: $\psi_{III}(x) = A_{III} e^{Kx} + B_{III} e^{-Kx}$

Continuité de ψ en $\pm a$:

$$\begin{aligned} A_I e^{-Ka} &= A_{II} \cos(ka) - B_{II} \sin(ka) \\ B_{III} e^{-Ka} &= A_{II} \cos(ka) + B_{II} \sin(ka) \end{aligned}$$

Continuité de ψ' en $\pm a$:

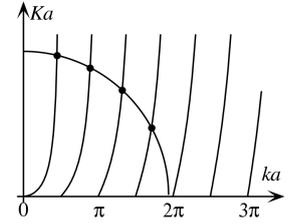
$$\begin{aligned} A_I K e^{-Ka} &= A_{II} k \sin(ka) + B_{II} k \cos(ka) \\ -B_{III} K e^{-Ka} &= -A_{II} k \sin(ka) + B_{II} k \cos(ka) \end{aligned}$$

Deux types de solutions :

$$\begin{aligned} \text{Paires : } B_{II} = 0 \text{ et } A_I = B_{III} & \quad k \tan(ka) = K \\ \text{Impaires : } A_{II} = 0 \text{ et } A_I = -B_{III} & \quad k \cot(ka) = -K \end{aligned}$$

$$k^2 a^2 + K^2 a^2 = \frac{2ma^2 V_0}{\hbar^2} = \text{cste}$$

Ces états sont dits *liés*. Leur nombre augmente avec V_0 .



Ordres de grandeur :

force nucléaire : $a \sim 10^{-15}$ m ; semi-conducteurs (cf partie 3.4) : $a \sim 5$ nm ; potentiel attractif d'un pulsar : $a \sim 10$ km pour une masse voisine de celle du Soleil

↓ Ces modèles simples nous ont permis de mettre en évidence le lien entre confinement et quantification. Intéressons-nous maintenant à des systèmes réels.

3 Applications à des systèmes réels

3.1 Retour à l'atome d'hydrogène

↗ Feynman chapitre 19.1

Le potentiel est ici le potentiel de Coulomb :

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{e'^2}{r}$$

Grâce à $m \ll M$, l'équation de Schrödinger donne (en stationnaire) :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e'^2}{r} \right] \psi = E\psi$$

On ne s'intéresse ici qu'aux solutions à symétrie sphérique : $\psi = \psi(r)$

$$\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (r\psi) = -\frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{e'^2}{r} \right) \psi$$

En adimensionnant : $r = \frac{\hbar^2}{me'^2} \rho$ et $E = \frac{me'^4}{2\hbar^2} \epsilon$

$$\frac{d^2(\rho\psi)}{d\rho^2} = -\left(\epsilon + \frac{2}{\rho} \right) \rho\psi \quad \Leftrightarrow \quad \frac{d^2 f}{d\rho^2} = -\left(\epsilon + \frac{2}{\rho} \right) f \quad f = \rho\psi$$

On cherche des solutions de la forme $f(\rho) = e^{-\alpha\rho} g(\rho)$:

$$\frac{d^2 g}{d\rho^2} - 2\alpha \frac{dg}{d\rho} + \left(\frac{2}{\rho} + \epsilon + \alpha^2 \right) g = 0$$

Résolution :

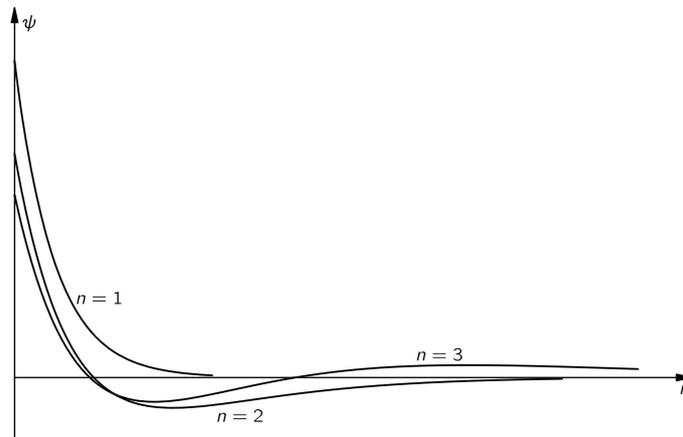
- on choisit $\alpha^2 = -\epsilon$
- on réalise un développement en série entière : $g(\rho) = \sum_{k=1}^{\infty} a_k \rho^k$
- on égalise les coefficients deux à deux : $a_{k+1} = \frac{2(\alpha k - 1)}{k(k+1)} a_k$

- loin du noyau, les termes les plus hauts sont les plus importants $a_{k+1} \approx \frac{2\alpha}{k} a_k \approx \frac{(2\alpha)^k}{k!}$, il s'agit des coefficients de $e^{2\alpha\rho}$
- problème : la fonction d'onde croît exponentiellement quand ρ augmente. Il faut donc $\alpha = 1/k$, ce qui donne donc $-\epsilon = 1/k^2$
- en réintroduisant les grandeurs dimensionnées, on obtient donc $E_n \approx -13,6/n^2$

Les fonctions d'onde obtenues sont donc, pour a_1 donné¹ :

Fonctions d'onde sphériques de l'atome d'hydrogène

$$\psi_n = \frac{e^{-\rho/n}}{\rho} \sum_{k=1}^n a_{k,n} \rho^k \qquad a_{k+1,n} = \frac{2(k/n - 1)}{k(k + 1)} a_{k,n}$$



Trois premières fonctions d'onde $\psi_n(r)$ de l'atome d'hydrogène.

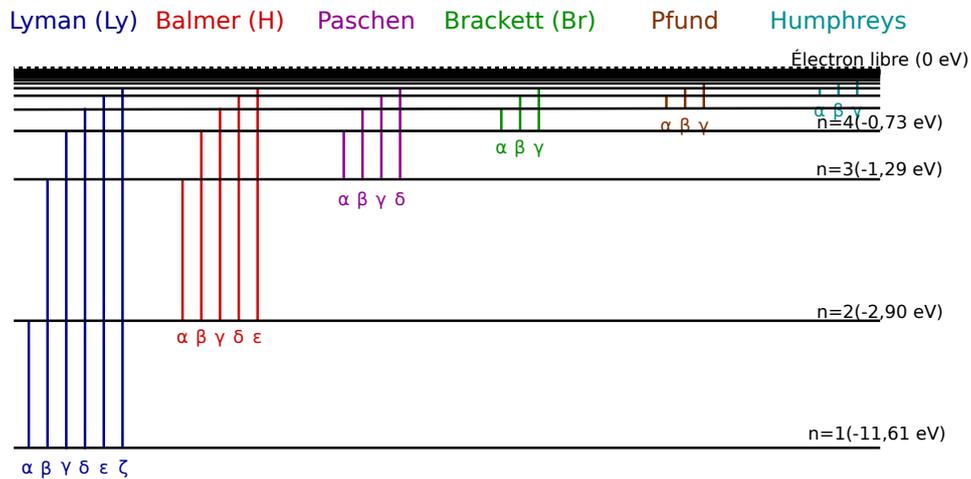


Schéma des transitions de l'hydrogène.

Manip possible : Raies de l'hydrogène

Détermination expérimentale des raies de Balmer et de la constante de Rydberg (lampe spectrale Balmer P1.15) cf *Jolidon* p.352

1. a_1 est généralement choisi par normalisation.

3.2 Ions colorés

➤ Problèmes q, Basdevant p.151

Certains pigments sont constitués d'ions moléculaires linéaires le long desquels les électrons se déplacent librement. Nous considérons ici un ion moléculaire linéaire de formule $(C_nH_{n+2})^-$ avec n impair (obtenu à partir de molécules de polyéthylène à nombre pair d'atomes de carbone en enlevant un groupement $(CH)^+$). Les $n + 1$ électrons π sont donc délocalisés dans toute la molécule :



La distance C-C étant de $d = 140$ pm, on suppose que les électrons délocalisés se déplacent indépendamment les uns des autres dans un puits de potentiel 1D infini de longueur $L_n = nd$:

$$V(x) = \begin{cases} +\infty & \text{si } x < 0 \text{ ou } x > L_n \\ 0 & \text{si } 0 \leq x \leq L_n \end{cases}$$

Les niveaux d'énergie des électrons de cet ion sont donnés par l'équation 3 :

$$\epsilon_k = \frac{\pi^2 \hbar^2 k^2}{2mL_n^2}$$

Ce qui donne un niveau d'énergie du fondamental² (en tenant compte du principe de Pauli) :

$$E_0 = \sum_{k=1}^{(n+1)/2} \epsilon_k = \frac{\pi^2 \hbar^2}{24mL_n^2} (n+1)(n+2)(n+3)$$

Et un premier état excité :

$$E_1 = E_0 + \frac{\pi^2 \hbar^2}{8mL_n^2} [(n+3)^2 - (n+1)^2]$$

Soit une énergie de transition :

$$h\nu = E_1 - E_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL_n^2} (n+2)$$

Donnant une longueur d'onde :

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{2mcL_n^2}{\pi^2 \hbar^2 (n+2)} = \frac{8mcd^2}{h^2} \frac{n^2}{n+2}$$

	n=9	n=11	n=13
λ tabulé (nm)	470	600	730
λ modèle (nm)	476	602	728

Remarques :

- Pour $n \leq 7$, les ions sont non colorés car dans l'UV et pour $n \geq 15$ dans l'IR.
- Le puits de potentiel infini est une approximation raisonnable puisque les électrons sont délocalisés sur toute la molécule mais ne peuvent pas en sortir. On devrait en toute rigueur choisir $L_n = (n-1)d + 2b$ où b représente les effets de bords.

3.3 La molécule d'ammoniac

➤ Méca q, Basdevant p.92

La molécule d'ammoniac NH_3 a la forme d'une pyramide dont l'atome d'azote occupe le sommet et les trois atomes d'hydrogène la base. Son énergie potentielle peut être approximée par un puits double à une dimension. Soit P le plan des trois hydrogènes, D la perpendiculaire à P passant par l'atome d'azote et, sur D , x l'abscisse de P par rapport à l'azote pris comme origine.

Dans le potentiel figure 1b, qui reproduit les caractéristiques qualitatives de $V(x)$, nous étudions le mouvement quantique d'une "particule" représentant le mouvement collectif des 3 H, en supposant qu'ils restent dans le même

2. $\sum_{k=1}^n k^2 = n(n+1)(2n+1)/6$

plan. La masse m de la particule est $3m_H$.

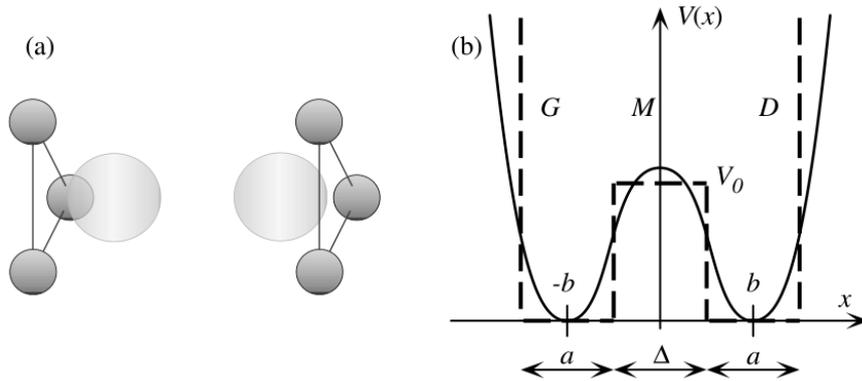


FIGURE 1 – (a) Configurations possibles de la molécule d'ammoniac; (b) Potentiel décrivant le retournement de la molécule (trait plein : réel, pointillés : approximation). $\Delta = 2b - a$.

En ce limitant au cas $E < V_0$ (la "particule" reste dans l'un des deux puits, sans retournement), les fonctions d'onde doivent s'annuler en $x = \pm(b \pm a/2)$:

- région G : $\psi(x) = \pm \lambda \sin[k(b + a/2 + x)]$
- région M : $\begin{cases} \psi(x) = \mu \cosh(Kx) & \text{solution symétrique} \\ \psi(x) = \mu \sinh(Kx) & \text{solution antisymétrique} \end{cases}$
- région D : $\psi(x) = \lambda \sin[k(b + a/2 - x)]$

Avec $K = \hbar^{-1} \sqrt{2m(V_0 - E)}$ et $k = \hbar^{-1} \sqrt{2mE}$.

La continuité de ψ et ψ' impose :

$$\tan(ka) = -\frac{k}{K} \coth[K(b - a/2)] \text{ pour une solution symétrique } \psi_S$$

$$\tan(ka) = -\frac{k}{K} \tanh[K(b - a/2)] \text{ pour une solution antisymétrique } \psi_A$$

Simplification des calculs : On suppose $E \ll V_0$ (donc $K \approx \hbar^{-1} \sqrt{2mV_0} \gg k$) et $K\Delta \gg 1$ ($\Delta = 2b - a$).

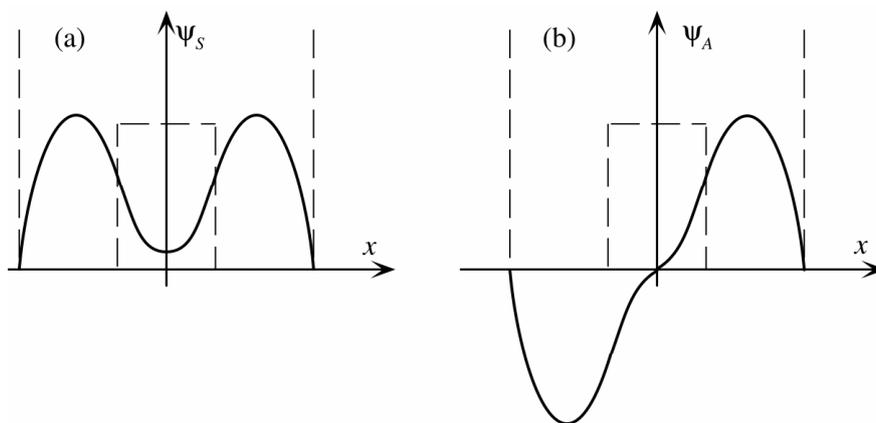


FIGURE 2 – Solution symétrique (a) et antisymétrique (b) de plus basse énergie dans le puits double modélisant la molécule d'ammoniac.

Hypothèses vérifiées pour NH₃. Dans ce cas :

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

+ correspondant à ψ_S et $-\psi_A$. Les valeurs possibles de ka sont obtenues par construction graphique : intersection des arcs successifs $y = \tan(ka)$ avec les deux droites $y = -\epsilon_{A,S}ka$. Ces intersections sont situées vers $ka \sim \pi$. Avec :

$$\epsilon_{S,A} = \frac{1}{Ka} (1 \pm 2e^{-K\Delta}) \quad (4)$$

Ces valeurs sont proches et telles que $\epsilon_A < \epsilon_S \ll 1$ car $ka \sim \pi$.

Niveaux d'énergie : Soient k_S et k_A les deux valeurs, voisines, de k correspondant aux deux premiers états propres ψ_S et ψ_A de plus faible énergie.

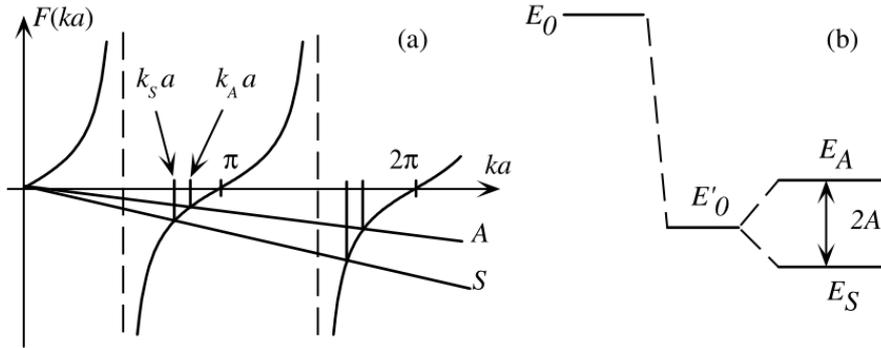


FIGURE 3 – (a) Détermination graphique des niveaux d'énergie dans le double puits; (b) on voit que les deux premiers niveaux d'énergie sont abaissés par rapport à l'énergie du fondamental d'un puits simple G ou D ($E_0 \rightarrow E'_0$), et qu'il y a un "clivage tunnel" entre ces deux niveaux ($E'_0 \rightarrow E_A$ et E_S).

La construction graphique (figure 3) montre que :

- Les deux quantités k_S et k_A sont légèrement inférieures à π/a , valeur du premier nombre d'onde pour le puits G (ou le puits D) de largeur a , supposé infiniment profond.
- La quantité k_S est légèrement inférieure à k_A ; par conséquent les énergies respectives des deux niveaux les plus bas : $E_{S,A} = \hbar^2 k_{S,A}^2 / (2m)$ avec $E_S < E_A$.

Dans notre approximation :

$$k_S \sim \frac{\pi}{a(1 + \epsilon_S)} \quad k_A \sim \frac{\pi}{a(1 + \epsilon_A)}$$

On obtient une énergie moyenne :

$$E'_0 = \frac{E_A + E_S}{2} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \left(1 - \frac{2}{Ka} \right)$$

On obtient pour le clivage $E_A - E_S$ des niveaux d'énergie :

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

Les situations représentées en figure 1 sont donc des combinaisons linéaires des états ψ_S et ψ_A :

$$\psi_G = \frac{\psi_S - \psi_A}{\sqrt{2}} \quad \psi_D = \frac{\psi_S + \psi_A}{\sqrt{2}}$$

La fréquence d'inversion de la molécule est donnée par $\bar{\omega} = E_A - E_S$ soit à l'émission et l'absorption de photons de fréquence $\nu \sim 24$ GHz ($\lambda \sim 1,25$ cm). Cette fréquence constitue une "empreinte digitale" de l'ammoniac. C'est grâce à elle que l'on détecte la présence de cette molécule dans le milieu interstellaire.

3.4 Semi-conducteurs

➤ Méca q, Basdevant p.85

Dans les technologies modernes de microélectronique, les potentiels carrés permettent la description d'un électron de conduction qui bouge dans un semi-conducteur comme GaAs : celui-ci "ressent" un potentiel uniforme à l'échelle

du pas du réseau cristallin. La valeur de ce potentiel dépend de la composition du semi-conducteur.

Dans des "sandwichs" de couches minces alternées de semi-conducteurs (GaAs et GaAlAs), on crée des puits quantiques d'une largeur de 2 à 5 nm. Le confinement quantique des électrons dans ces domaines laisse entrevoir des développements sans précédents en électronique et dans les composants d'ordinateurs. Ces composants sont également très prometteurs en opto-électronique ; les transitions entre niveaux électroniques ($\Delta E \sim 50$ à 200 meV) sont situées dans l'infrarouge.

Conclusion

La quantification provient donc du confinement des particules et des conditions aux limites de la fonction d'onde. Cela nous a permis d'expliquer le spectre de l'hydrogène autrement que de manière empirique.

Remarques & Commentaires