

LP40 CONFINEMENT D'UNE PARTICULE ET QUANTIFICATION

5 avril 2020

MONNET Benjamin &

Niveau : L3

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 arguments simples permettant de donner des ordres de grandeur dans des domaines divers de la physique avant d'envisager des applications élaborées. 2013 : La justification des conditions aux limites est essentielle.

Bibliographie

- *Mécanique quantique 1 et 2*, **Aslangul** → Modèle de Bohr, puit infini et fini
- *Mécanique quantique*, **Basdevant** → puit fini, infini et ammoniac (mieux que Aslangul de mon point de vue)
- *Quantique, fondements et applications*, **Pérez, Carles et Pujol** → pleins de compléments intéressants pour la leçon. Permet d'éviter le Aslangul qui est un peu surchargé à mon goût...

Prérequis

- Equation aux dérivées partielles/ Schrödinger
- Mécanique du point
- Ondes
- Electromagnétisme

Expériences

- ☛ Spectre de l'atome d'hydrogène

Table des matières

1	Mise en évidence de la quantification	2
1.1	L'atome d'hydrogène	2
1.2	Modèle de Bohr	2
2	Origine quantique du confinement	3
2.1	Inégalité d'Heisenberg	3
2.2	Rappel de mécanique quantique ondulatoire	3
2.3	Le puit de potentiel infini, analogie avec la corde de Melde	4
3	Confinement observable	4
3.1	Puit de potentiel fini (si il y a le temps)	4
3.2	Les ions colorés	5

Introduction

1 Mise en évidence de la quantification

1.1 L'atome d'hydrogène

✦ Pérez



Spectre de l'hydrogène

✦ Sextant p217

⊖ 2 minutes

On utilise une lampe à hydrogène, une fente, une lentille et un PVD pour observer les raies de l'hydrogène

On remarque que les niveaux d'énergies sont quantifiés. Historiquement cela a été fait par William Huggins en 1881. Il fut le premier à remarquer la quantification des raies d'émission. Balmer trouva une suite logique pour les raies observées et Rydberg généralisa cette forme en 1885. Néanmoins, on ne sait pas d'où peut venir cette quantification a priori. La mécanique classique ne le met pas en avant.

Loi empirique de Balmer-Rydberg (1885) :

$$\frac{1}{\lambda} = R_y \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{p^2} \right)$$

R_y est la constante de Rydberg et vaut $10967758 m^{-1}$.



Nous allons dans un premier temps essayer d'utiliser ce résultat pour développer un modèle semi-classique.

1.2 Modèle de Bohr

✦ Basdevant, Aslangul, Pérez

Avec le modèle planétaire de Rutherford, on suppose que l'électron tourne autour du noyau à une distance R . Néanmoins, Larmor a démontré en 1897 qu'une charge q d'accélération \vec{a} émet un rayonnement donné par :

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

L'électron devrait donc perdre son énergie petit à petit et s'arrêter au bout d'environ $10^{-9} s$. La stabilité de la matière n'est donc pas assurée dans ce modèle. Pour essayer de palier à ce problème, Bohr a proposé une explication moyennant deux hypothèses :

- Il existe des orbites privilégiées pour lesquelles l'électron ne rayonne pas
- Deux niveaux d'énergie sont séparés par une énergie $h\nu$

Le principe fondamental de la dynamique sur l'électron donne :

$$m \frac{v^2}{R} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R^2}$$

En notant $E_C = \frac{1}{2}mv^2$ et $E_p = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R}$, on trouve donc $E = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 R} = -\frac{1}{2}mv^2$. Avec $L = mvR$ le moment cinétique, on trouve que l'énergie totale s'écrit :

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

En prenant en compte la loi empirique de Balmer-Rydberg (2ème hypothèse du modèle de Bohr), on se rend compte qu'obtenir une énergie quantifiée revient à quantifier le moment cinétique. En utilisant la quantification du moment cinétique $L_n = n\hbar$, on trouve alors :

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

L'énergie est alors bien quantifiée selon la formule proposée par Rydberg. On peut aussi montrer que les rayons accessibles pour l'électron sont eux-aussi quantifiés. Avec $Lv = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$ et $v^2 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 Rm}$:

$$R_n = n^2 a_0 \text{ avec } a_0 = \frac{\hbar^2}{m} \frac{4\pi\epsilon_0}{e^2}$$

↓ On a ici dû partir de la loi empirique de Balmer-Rydberg pour retrouver la quantification... on ne l'a donc pas montré. Pour cela, il va falloir utiliser le formalisme de la mécanique quantique.

2 Origine quantique du confinement

2.1 Inégalité d'Heisenberg

L'inégalité d'Heisenberg donne une borne minimale au produit entre l'incertitude fondamentale sur la position Δx et celle sur l'impulsion Δp :

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

Considérons le cas d'une particule libre. Son énergie minimale s'écrit :

$$E_{min} = \frac{(\Delta p)^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{8m(\Delta x)^2}$$

On voit donc déjà apparaître un lien fort entre confinement et énergie. On peut en particulier retrouver quelques ordres de grandeur :

- Echelle atomique : $\Delta x \approx 10^{-10}m \Rightarrow E_{min} \approx 10^{-19}J \approx 1eV$

2.2 Rappel de mécanique quantique ondulatoire

Une particule massive non relativiste suit l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + V\psi$$

$|\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3\vec{r}$ étant la probabilité de trouver la particule dans le volume infinitésimal $d^3\vec{r}$, on a la condition de normalisation :

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

On s'intéresse ici à la recherche d'une solution sous forme d'une onde stationnaire (par analogie avec le cours sur les ondes : milieu fini = ondes stationnaires). Cela revient à chercher la solution de l'équation aux valeurs propres :

$$E\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(x) + V\psi(x)$$

On sait que ψ est continue. Pour sa dérivée, on montre en intégrant l'équation précédente :

$$\psi'(x_0 + \epsilon) - \psi'(x_0 - \epsilon) = \frac{2m}{\hbar^2} \int_{x_0 - \epsilon}^{x_0 + \epsilon} (V(x) - E)\psi(x) dx$$

On a donc continuité de ψ lorsque le potentiel ne présente pas une marche infini.

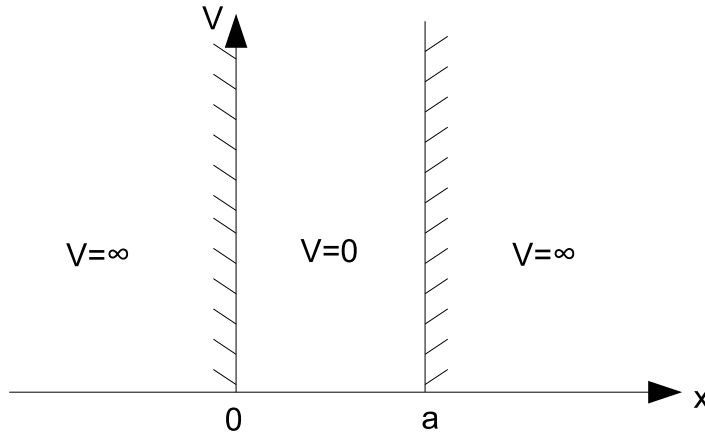
2.3 Le puit de potentiel infini, analogie avec la corde de Melde

✎ Basdevant

On se place ici à une seule dimension avec un puit infini de potentiel. On peut réécrire l'équation de Schrödinger :

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\psi(x) = 0$$

On considère un potentiel de la forme suivante :



On remarque alors que l'on a la même équation et les mêmes conditions limites que pour la corde de la melde avec cette fois $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$. On en déduit $kL = n\pi$ donc $\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$ avec la condition de normalisation. On trouve donc bien une énergie quantifiée :

$$E_n = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \text{ avec } n \in \mathbb{N}^*$$

L'analogie avec la corde de Melde peut être résumée dans le tableau suivant :

	Corde de Melde	Fonction d'onde
Solution stationnaire	$y(x, t) = f(x)g(t)$	$\phi(x, t) = \Psi(x) \exp(-iEt/\hbar)$
Équation d'onde	$f'' + kf = 0$	$\Psi'' + k\Psi = 0$
Vecteur d'onde	$k = \frac{\omega}{c}$	$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$
Conditions aux limites	$f(0) = f(L) = 0$	$\Psi(0) = \Psi(L) = 0$
Quantification	$k_n = \frac{n\pi}{L}$	$k_n = \frac{n\pi}{L}$

On voit bien que la quantification vient donc de l'aspect ondulatoire de la lumière.

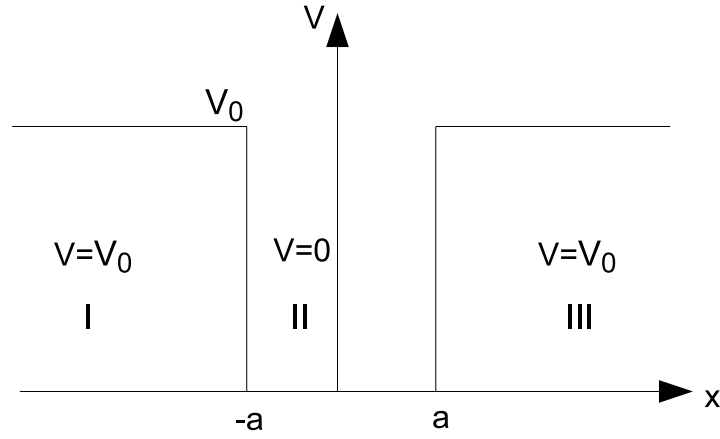
↓
Un potentiel infini n'existe pas. On va donc s'intéresser au cas plus réel du puit de potentiel fini

3 Confinement observable

3.1 Puit de potentiel fini (si il y a le temps)

La forme du potentiel est maintenant la suivante :

On remarque alors que l'on doit distinguer trois cas :



- $E > V_0$. On parle alors d'état de diffusion : la particule peut aller de partout et les solutions sont sinusoïdales. Nous ne nous intéresserons pas à ce type d'onde ici.
- $E < V_0$. On parle d'états liés : la particule va se retrouver confinée.

Pour $E < V_0$: On rappelle que l'on a

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + (E - V(x))\psi = 0$$

En posant $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ et $K = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$, on peut distinguer 3 zones :

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

La condition de normalisation de l'état donne : $B_I = 0 = A_{III}$ donc :

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

Les conditions de continuité de ψ et de $\frac{\partial \psi}{\partial x}$ donnent :

En $x = -a$:

$$A_I e^{-Ka} = A_{II} \cos(ka) - B_{II} \sin(ka) \quad \text{et} \quad KA_I e^{-Ka} = A_{II} k \sin(ka) + B_{II} k \cos(ka)$$

En $x = a$:

$$A_{II} \cos(ka) + B_{II} \sin(ka) = B_{III} e^{-Ka} \quad \text{et} \quad -A_{II} k \sin(ka) + B_{II} k \cos(ka) = -KB_{III} e^{-Ka}$$

Le potentiel étant symétrique, le principe de Curie nous permet de se limiter aux fonctions symétriques ou anti-symétriques (donc paires et impaires).

Cela nous permet d'obtenir les deux cas suivant :

$$k \tan(ka) = K \quad \text{avec} \quad k^2 a^2 + K^2 a^2 = \frac{2ma^2 V_0}{\hbar^2}$$

$$k \cot(ka) = -K \quad \text{avec} \quad k^2 a^2 + K^2 a^2 = \frac{2ma^2 V_0}{\hbar^2}$$

Les points respectant ses relations donnent les états liés possibles dans le puit fini. On peut remarquer que plus l'énergie V_0 augmente, plus on a d'états possibles. Ce résultat est attendu : on tend vers le cas du puit infini.

3.2 Les ions colorés

♣ Basdevant, problèmes quantiques

Certaines molécules ont des longues chaînes carbonnées de doubles liaisons conjuguées, ce qui permet une délocalisation des électrons. Intéressons nous un peu à ce problème. On s'intéresse à un ion avec une chaîne de n doubles liaisons (donc de n électrons) donc de formule $(C_n H_{n+2})^2$. Les électrons se baladent donc sur une largeur $L_n = n * d$. Les niveaux d'énergies d'un électron sont :

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

L'énergie fondamentale vaut donc :

$$E_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{mL_n^2} \sum_1^{(n+1)/2} k^2 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{24mL_n^2} (n+1)(n+2)(n+3)$$

Celle du premier énergie excité :

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

La transition entre ces deux énergies se fait donc à une longueur d'onde

$$\lambda = \frac{8d^2 mc}{h} \frac{n^2}{n+2}$$

On obtient alors les résultats suivants :

	n=9	n=11	n=13
λ_n expérimental	470 nm	600 nm	730 nm
λ_n calculé	476 nm	603 nm	728 nm

Questions

-

Remarques

-