

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

5 avril 2020

CAETANO Frédéric & 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

- | | |
|--|--|
| ♣ <i>Mécanique quantique 1 et 2</i> , Aslangul | → Modèle de Bohr, puit infini et fini |
| ♣ <i>Mécanique quantique</i> , Basdevant | → puit fini, infini et ammoniac (mieux que Aslangul de mon point de vue) |
| ♣ <i>Quantique, fondements et applications</i> , 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

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 Le confinement : un résultat de l'aspect ondulatoire des particules

2.1 Rappel de mécanique quantique

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 :

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

2.2 Solutions stationnaires et continuité

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 :

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

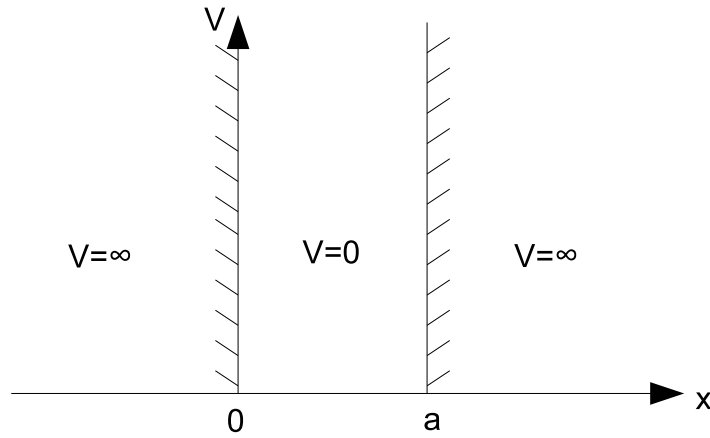
On considère un potentiel de la forme suivante :

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 :

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



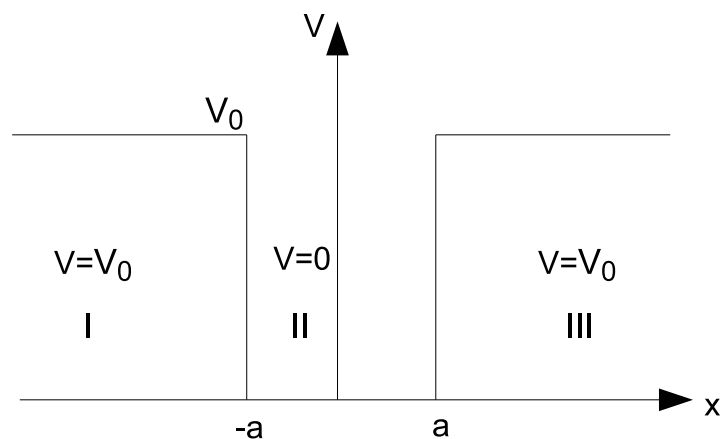
	Corde de Melde	Fonction d'onde
Solution stationnaire	$y(x, t) = f(x)g(t)$	$\phi(x, t) = \Psi(x) \exp(-iEt/\hbar)$
Équation d'onde	$f'' + kf = 0$	$\Psi'' + k\Psi = 0$
Vecteur d'onde	$k = \frac{\omega}{c}$	$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$
Conditions aux limites	$f(0) = f(L) = 0$	$\Psi(0) = \Psi(L) = 0$
Quantification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



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

2.4 Puit de potentiel fini

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 $x = -a$:

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

En $x = a$:

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

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 Applications

3.1 Retour à l'atome d'hydrogène

✦ Un mélange entre le Aslangul, le Basdevant et des cours de M1

On avait étudié dans la première partie un modèle semi-classique de l'atome d'hydrogène. On va maintenant utiliser l'équation de Schrödinger pour trouver les solutions. L'équation vérifiée par la partie spatiale de la fonction d'onde s'écrit :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{\hat{L}^2}{2m_e r^2} + V(r) \right) \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r})$$

Nous utiliserons ici les notations suivantes :

$$\begin{aligned} \psi_{l,m}(\vec{r}) &= R_l(r) Y_{l,m}(\theta, \phi) \\ \hat{L}^2 \psi_{l,m}(\vec{r}) &= l(l+1) \hbar^2 \psi_{l,m}(\vec{r}) \\ \hat{L}_z \psi_{l,m}(\vec{r}) &= m \hbar \psi_{l,m}(\vec{r}) \end{aligned}$$

En injectant cela dans l'équation, on va :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2m_e r^2} + V(r) \right) R_l(r) = E R_l(r)$$

On écrira le potentiel électrostatique sous la forme $V(r) = -\frac{k}{r}$. On adimensionne l'équation de Schrödinger en posant $\rho = \frac{mk}{\hbar^2} r = \frac{r}{a_0}$ et $\epsilon = \frac{\hbar^2}{2mk^2} E$. On trouve alors :

$$\left(-\frac{1}{2} \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{l(l+1)}{2\rho^2} - \frac{1}{\rho} \right) \rho R_l(\rho) = \epsilon \rho R_l(\rho)$$

On pose ensuite $\epsilon = -\alpha^2$, $r' = \alpha \rho$ et $\rho R_l(\rho) = v(\rho)$ ce qui donne :

$$\left(\frac{d^2}{dr'^2} - \frac{l(l+1)}{r'^2} + \frac{2}{\alpha r'} - 1 \right) v(r') = 0$$

On suppose alors que la solution s'écrit de la forme $v(r') = r'^{l+1} e^{-r'} w(r')$ et on développe $w(r')$ en série entière. On trouve après calcul la relation suivante entre les coefficients :

$$c_{p+1} = -2 \frac{\frac{1}{\alpha} - l - 1 - p}{(p+1)(p+2l+2)} c_p$$

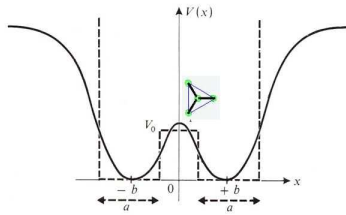
Si on regarde pour p grand, on a : $c_{p+1} = \frac{2}{r'} c_p$. On a donc le comportement de $e^{2r'}$ et donc $v(r') \approx e^{l+1} e^{r'}$. On veut que notre état soit normalisé. On en conclut qu'il existe un p_0 entier tel que :

$$\frac{1}{\alpha} = l + 1 + p_0 = n \in N^*$$

On retrouve donc bien les niveaux d'énergies trouvés avec le modèle classique sous la forme :

$$E = -\frac{E_0}{n^2}$$

3.2 Molécule d'ammoniac



Le potentiel réel suivant la coordonnée d'inversion (ligne continue) peut être modélisé par un double puit (ligne pointillée). Les puits sont de largeur a et sont centrés en $+b$ et $-b$.

On s'intéresse maintenant à la molécule d'ammoniac. Elle peut présenter deux configurations : la molécule d'ammoniac est à gauche ou à droite du plan formé par les atomes d'hydrogènes. On observe donc un potentiel de la forme d'un double puit. On va simplifier la forme exacte afin de pouvoir déterminer analytiquement des solutions.

On se limite au cas $E < V_0$. On garde les valeurs de k et K précédentes.

Dans la région de gauche : $\psi(x) = \pm A \sin(k(b + a/2 + x))$ afin que $\psi(-b - a/2) = 0$

Dans la région centrale : $\psi(x) = B \cosh(Kx)$ pour la solution symétrique et $\psi(x) = B \sinh(Kx)$ pour la solution anti-symétrique.

Avec les conditions de continuité de ψ et $\frac{\partial \psi}{\partial x}$, on obtient une condition pour chaque solution :

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

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

Conclusion