## I) Quantification de l'énergie.

## 1) Spectre de rais de l'hychogene.

Au coms du XIX siècle, on remorque que le spectre de l'obonne d'hydrogène n'est per continu mais est au contraire constitué d'une membre descret de raies.

En 1888 : Rydberg propose une bi phénomiendogique qui relie entre elles les différentes longueurs d'onde de cos raies:

$$\frac{1}{\lambda_{mp}} = R_y \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{p^2} \right) \qquad \text{N = numico de la série.}$$

$$p un m i u > m$$

Ry = constante de Rydberg = 1,697 × 10-7 m-1

Exemple: Visible: Série de Balmer (n = 2).

UV: Série de lyman (n = 1).

- => 6 m observe reels minus spectues de rais pour les autres alons
- Dehr perviont à englique cette formule en 1313 grace à son modèle de l'atome dons lequel les orbitales atomiques, et donc l'énege des élections est quart sièce.

### 2) Expérience de Franck et Hezz.

Expérience que a prouvé la quantification de l'énergie des

Stide avec le schema de l'expérience + la combre i = g(V).

### Explication disposition:

- -> Tube en vene contement de la vapour de merceur et 3 electrodes métalliques.
- ->. 1° électrode: filoment chauffi d'ai sont émis des é d'une vitelle négligeable.
  - potentiel ve qui permet d'accélerer + on les obschions (en contrôle danc désertement leur émagie).
  - o 3º électrode: elle pouve l de collecter les électrons our bout du tube. Son potentiel est légèreme l'inférieur à Vg.
- -> Principe: . En envoit des e plus on moins énergétique dons le teuhe un contrôle le bur énergée via Va
  - o les e vont subir des chocs avec les atomes de mercere: → si les chocs sont électiques, les e ont l'NRJ suffise le pour pervenir à la 3 électrode : en dévecte un couront.
  - aux alomes) les élections restal pièges an me de teche pes de

### -> Commentaire de la courbe:

- on voit que les électrons ne cédont de l'émergie duen atomes que pour des volours quantifices de leur énurgie.
- supérieure ou egale à une différence d'émergie entre 2 mireaux de la loure.
- De plus, l'alone se désexuite auseuite en émettant dons l'UV, se qui a ché élétecté
- des dons.

Trousitions: A ce étade, on peut se demender pourquoi on vient de pesser le soin à poiler de quentification de l'NRJ dons une lezon quei s'intitule "Confinement quantique".

Nous allais voir dons la portie suiva le que nous avons des à quelques outils pour répondre à celle question.

### I Quantification et consinement.

1) Approche classique: la corde de Melde.

Slide: Arec corde de Melde + formules

ensinement des ondes seur la longueur de les corde impliquent en quantification des vecteurs d'ondes et des modes propres.

=> Les modes propres sont discrets.

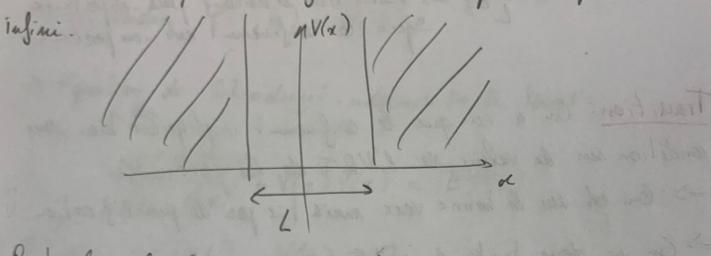
D'écédente, contravement avex exemples de la portie price dente, l'invergie d'un mode n'est per quon tifice, elle peut être quelconque puisepe elle dépend de l'emplite ede-

#### (3)

### 2) Inegalité d'Heisenderg.

Inigalilé de Hoisenday: Dx 40 > #

En considére une porticule confinée dons un puit de potentiel



· Particule confinée => Da < 6.

content dons les 2 directions: > = 0.

Ains: Sp > #

$$\Rightarrow \langle \rho^2 \rangle \geq \frac{h^2}{4L^2}$$

 $Gr \langle E \rangle = \frac{\langle p^2 \rangle}{2m}$  car V(x) = 0 dons le pleits.

$$=> \left|\langle E \rangle \geqslant \frac{t^2}{8mL^2}\right|$$

### • Commentaires:

- -> le confinement intendit des valuis d'énergie à la portiule: energie minimale.
- -> KES L' => Peskickion d'autent plus importate
  que le confineme t est importat

Transition: On a vu que le confineme l'impliquoit bien sune condétion sen la valeur de l'NRJ de la perticule. -> On est su la bonne voie mais tis per de quon tification.

-> On va dove traiter le problème de monière quontitative.

### 3) Peute de potentiel insirui.

$$= 3 \text{ Gm (herche)} = V(\chi)$$

$$= 3 \text{ Gm (herche)} = V(\vec{r}, t) = Q(\chi) e^{-i\frac{\vec{r}}{\hbar}t}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2q(\alpha)}{d\alpha^2}+V(\alpha)Q(\alpha)=(EQ(\alpha))$$

$$= \frac{1}{2m} \frac{d^2 \mathcal{C}(n)}{dx^2} = \mathcal{E} \mathcal{C}(x)$$

## Conditions dux limites:

=> 
$$Q_n(\alpha) = A_n \sin(k_n \alpha)$$
 avec  $k_n = m \frac{\pi}{L}$ 

Insister sur le fait que, comme pour le cade de Melde, c'est les conditios lux limites, ie le consinement qui impliquent la quantification.

$$-\frac{h^2}{2m}\left(-kn^2/n\,\ell(\alpha)\right) = E_n\,\ell(\alpha)$$

Dou' 
$$\left[ \frac{E_{m} = -E_{m}}{2m} = \frac{t^{2} \ln^{2}}{2m} = \frac{t^{2} \pi^{2}}{2m L^{2}} m^{2} \right]$$
Commen varies:

#### Commen Poires:

- -> Energies quantifices: mu
- -> Propationnelles à n2
- A en facteur numérique près en a l'expression de Ez oblime per inégalité d'Heisenderg.

Slich (=> retour eur l'analogie.

# II Veus des sustemes quantiques réels.

1) Puils fini

Partiale confince: FLV V6x).

De monière analogue: on charch une solution stationnaire.

=> 
$$-\frac{\pi^2}{2m}\frac{d^2q(a)}{da^2}+(V(x)-E)q(a)=0$$

$$\exists d \oplus : -\frac{t^2}{2m} \frac{d^2 Q(\alpha)}{d \alpha^2} + (V_0 - E) Q(\alpha) = 0$$

=> 
$$\frac{d^2\ell(a)}{da^2} + q^2\ell(a) = 0$$
 | avec  $q = \sqrt{\frac{2m(\sqrt{6-\epsilon})}{k^2}}$ 

vec 
$$q = \sqrt{\frac{2m(V_6 - E)}{k^2}}$$

$$\frac{\text{(1)}}{dx^2} + h^2 \ell(x) = 0 \quad \text{avec } b = \sqrt{\frac{2mE}{h^2}}$$

### Conditions aux lémites

- -> continuité de l'(n).
- -> continue le de 4'(x) cor Vo est fini.

## Slide avec les solutions.

$$(hL)^{2} + (qL)^{2} = \frac{2m \text{ Vo}}{t^{2}}L^{2}$$

=> hes solutions acceptables doiret vinifica colle condition.

=> quantification.

#### Comme lovres:

- profond et plus en a d'émergies permises.
- Les fanctice d'ande déborde l de la boile.

## 2) Petour su l'atome d'hydrogène.

Pour un électron dons un potentiel Coulombien, l'émergre est:  $E_m = -\frac{E_H}{2m^2}$ 

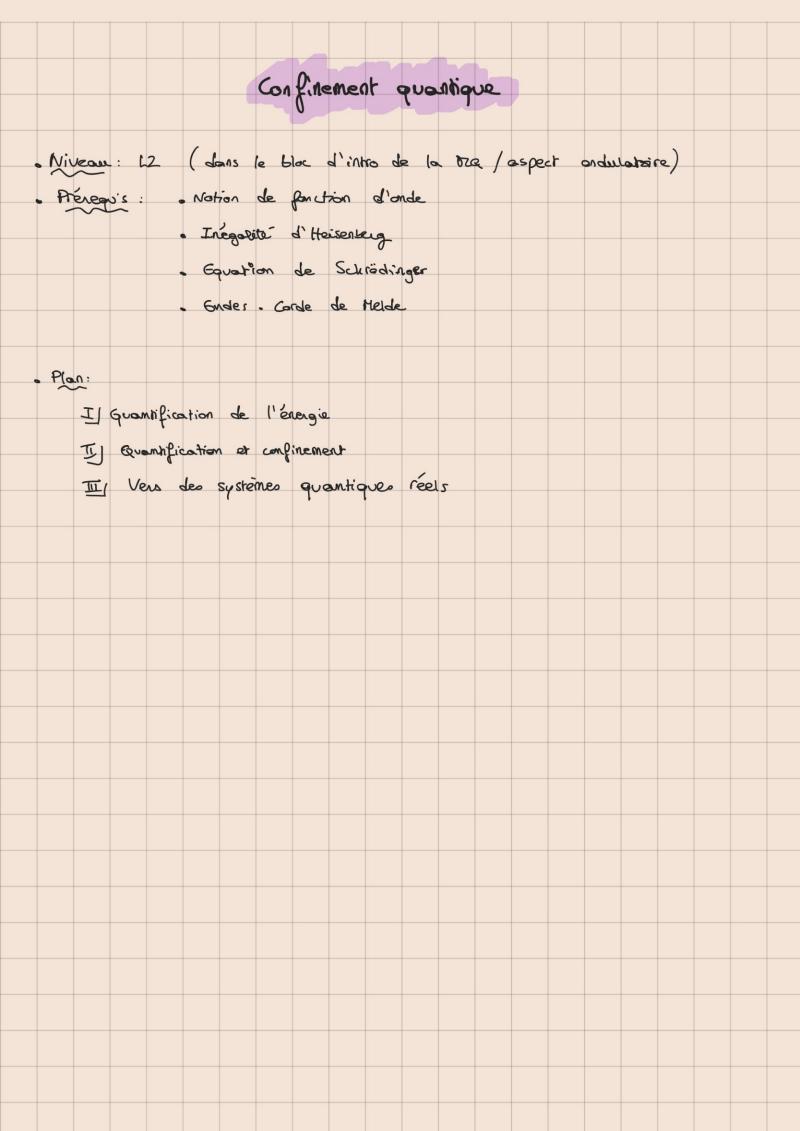
Avec  $E_{+} = \frac{m_{2}q^{4}}{\hbar^{2}(4\pi\xi_{0})^{2}} = 27,21eV$ 

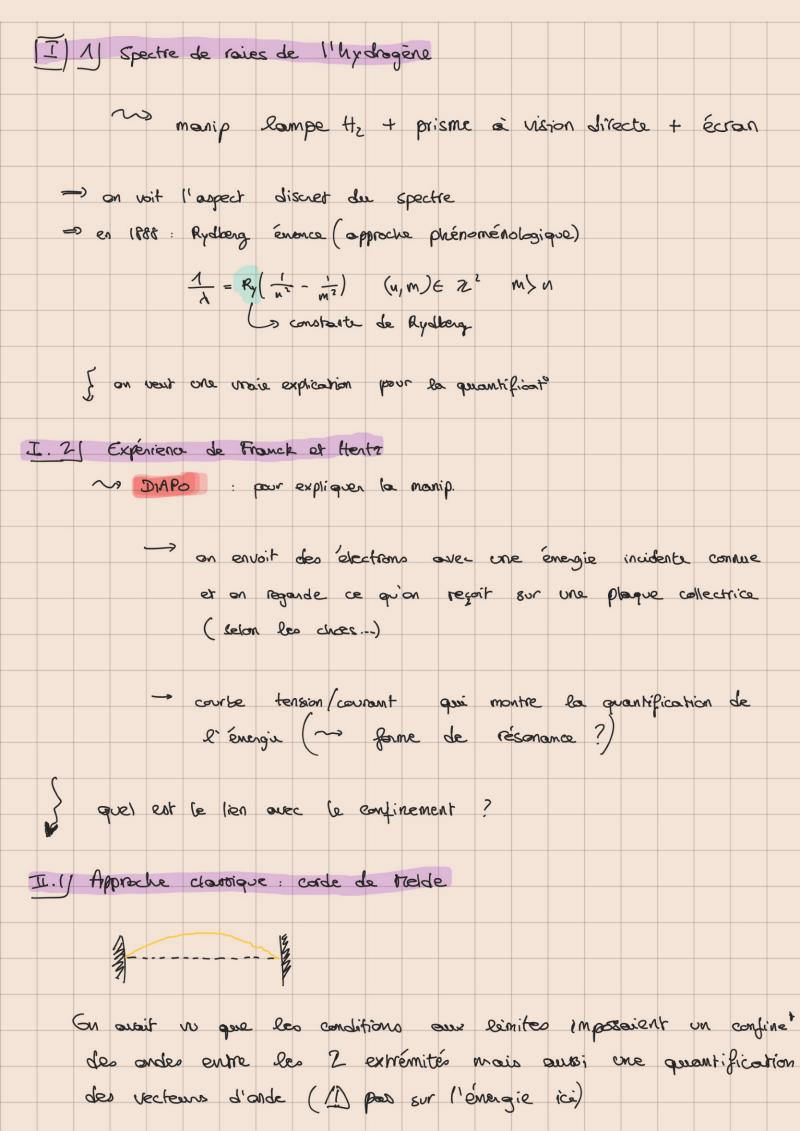
Si on prend 2 mireaux ? P abs.

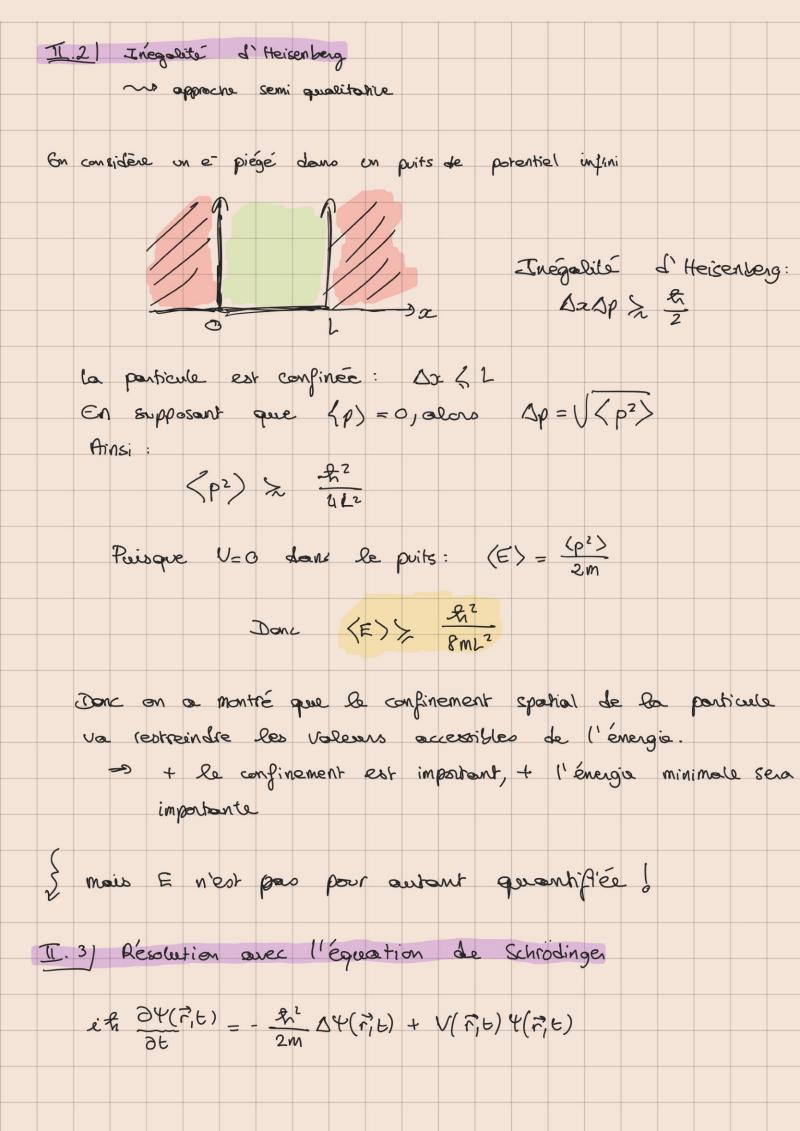
 $\Delta E = E_p - E_m = \frac{E_H}{2!} \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{p^2} \right)$ 

Puis en utilisent DE = he on obtint:

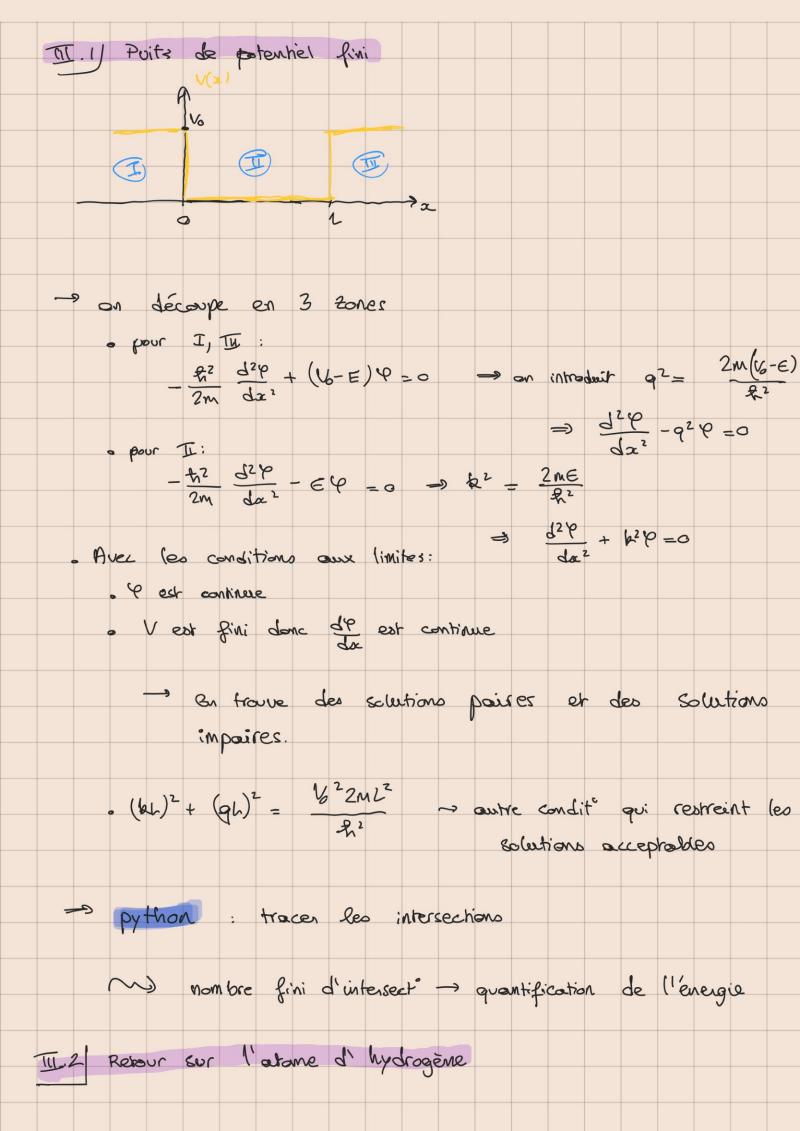
$$\frac{1}{\lambda} = \frac{\left(\frac{1}{2hc}\right)\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{p^2}\right)}{1}$$

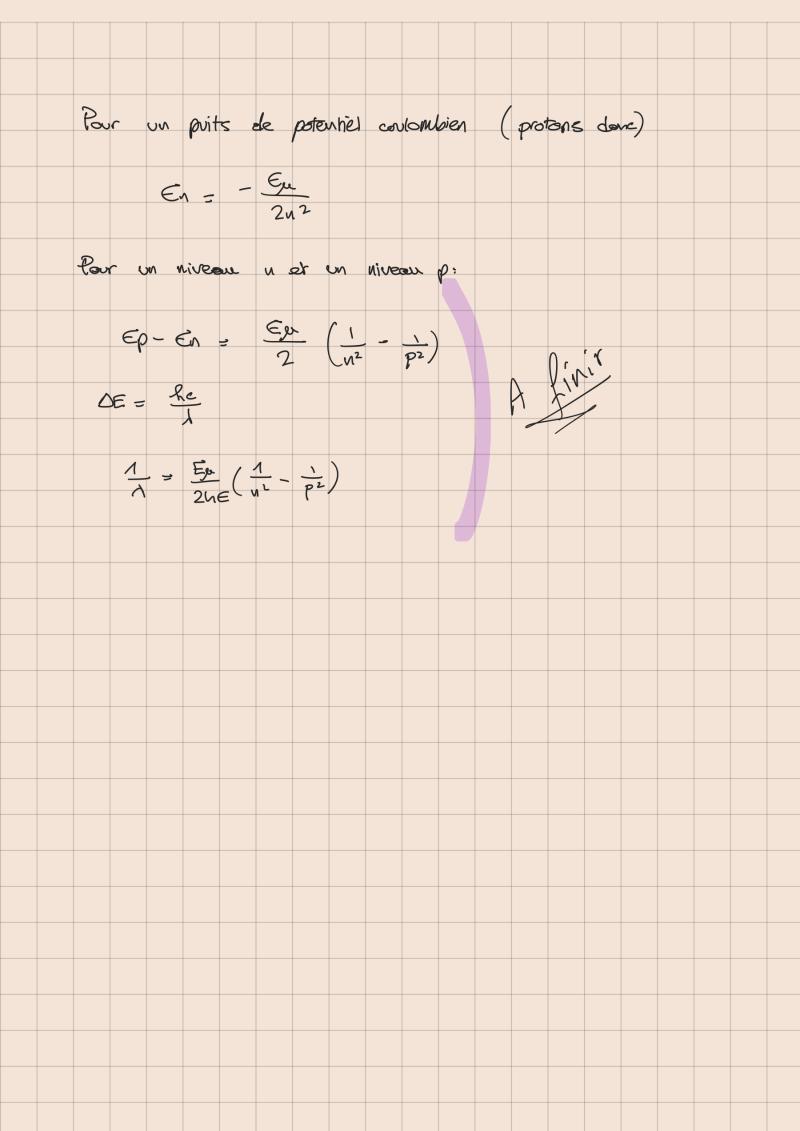






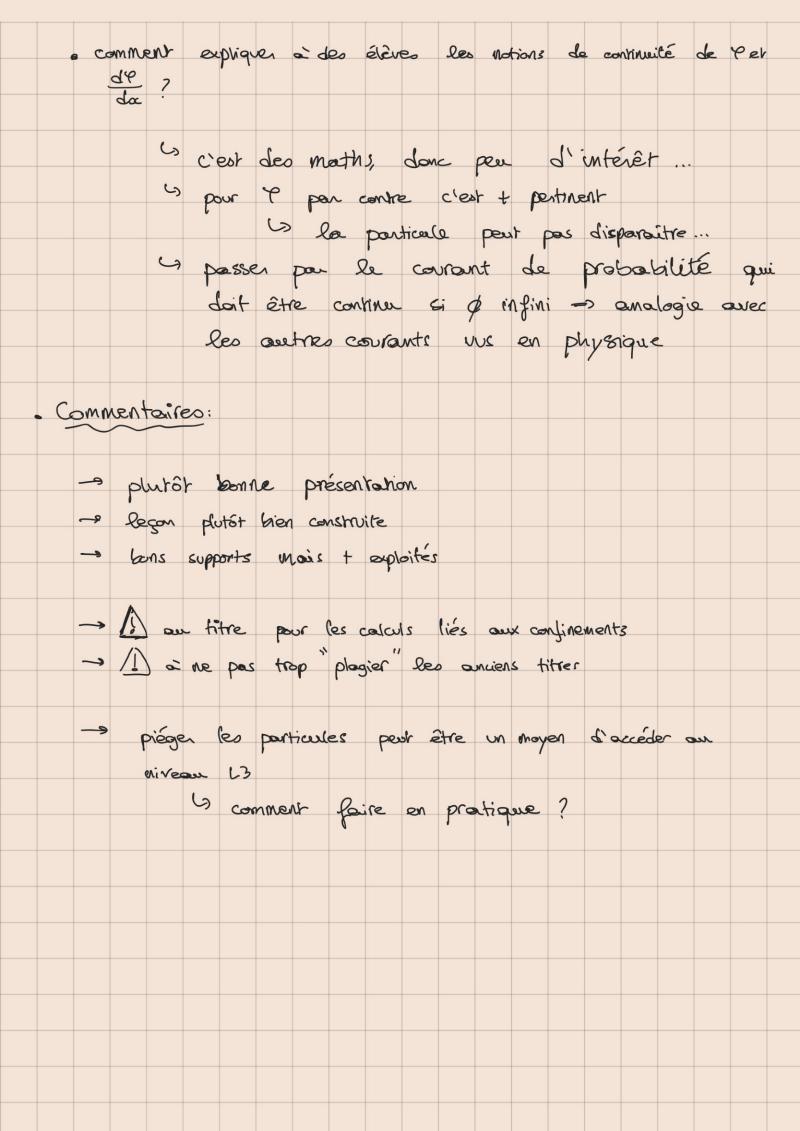
Ici,  $V(\hat{r},t) = V(x) \rightarrow 1D$  on considére les solute stationnaires P(x)  $\Rightarrow -\frac{47}{2m} \frac{d^2 P}{dx^2} + V(x)P(x) = E P(x)$ Br V(x) = 0 dans le puits, donc :1 vient:  $-\frac{2}{2m}\frac{d^{2}\varphi(x)}{dx^{2}}=\varepsilon\varphi(x)$ Et oux limites: - le potentiel est infini donc P(2) = 0 en detrons du puits - 9(x) dit être continue Donc  $P(x) = A_n \sin(k_n x)$  ower  $k_n = n \frac{\pi}{k_n}$ La quantification appoint 2 en introduir cette solute dans l'éq. de Schrödingen pour obremir la relation de dispension  $E = E_1 = \frac{t^2 k_1^2}{2mL^2} = \frac{2k_1^2 \pi^2}{2mL^2} N^2$ Commentaires: · énergie quantifiée o X v²: les niveaux s'ébignent les uns des autres . A on facteur rumérique près, on retrouve l'énergie minimale obtenue par l'apporache semi-classique Donc on vient de voir que si potentiel virfini, on a bien confinement = quantification mais pour les outres potentiels?





6.	veohia	<b>~</b> 4 O :																		
`				800		_				1.0:	, •			0			F.			
•	poe									ntific		9	ve	la	Con	fines	w, (			
		ر	•	cau	con!	finen	nent	<b>3</b> )	qua	urfice	ما									
		C	->	S) (	que	Cen	gine.	m <sup>k</sup> ,	trop	pe	b u	e 8	ens	ph	y क्षांवर	۹				
	<i>•</i>					-	_	-		mck										
				(914										•						
	• •					1	\ <u></u>	0	0	1 - 2										
•	cnt	•							Bo											
			S	N'es	cpliqu	ve	bon	(e	s tr	ans:	how	હ	nhe	nix	reau	×				
×		sur	k	Sch	réma	ç	en hic	ule	C	nlin	ée,	Pou	19U0	<b>\</b>	avoir	r {	Pair	Un	PES N	r
										cule		U	,				3		'	
											•									
				@-pl	pecr	<b>⊘</b> ∧	an le	นอาเรา	<u> </u>											
•	•	لعام	tion	Sha	work	noir	ne :	در و	est s	pubi?	7	UR	in/e1	lt S	totic	eonne.	ire?			
			4	di	æ	છીવર	ution		२००३	fo	me	d'	end	e f	)(an	e	puis	9	عد	
				Q.	2 1°	node	عام	est	Ste	hion	انھ	e								
	, cr	ifiqu	رو							ein										
		(										•								
		. (			·	9,	٩			١٠.		· ·	0.1			0	7			
	Co)	nseq	SOUGO!	2 (	de	0	2	Non	Cox	ntines	2 و	ภ .	bre	NDE	( ()	ngini	-			
			()	<b>o</b> vi	->						_						r c	3 0	^	
						4	ehor	2	(=	véril	Pien)									
			4	fo	rce	de	ra	die	hon	(	part	rices	و مو	vi '	POUS	sent	2s	es g	arsi s	
				U																
	M	esur	es.	<b>UNE</b>	De	ntic	ماي	6										ysiqu	e 7	
																	Γ';	/ - 7		
				90	: ندو	the	7	Oniu	el											
	po	ur																انوى		
			C	<b>'</b>	andit°	00.	المعا	Rimit	les	péri	adia	re	Pou	<b>N</b>	la	Po	utie	OMO	guloni	re
																		iale		
							A				,	'		•						

	pour u	n pui	ts	réel	· ç	quel	داه	- ρα	est ,	buer	L.	a t	empe	Éate	ne?	,		
						•			eco)	î l								
	que																	
	*						ON_	éla	t di	Perif	)							
	commen									v		7						
		0				<i>J</i>												
	si j	'ai	UN	mate	rion	31	), (	em (Me	ent	je f	Pais	UN	Pie	ege	10	?		
																	n le	ngue
									æhite									
-	en p	rohic	que	?				1140										
	(	n éq	oi too	rie														
		له د	حالحہ	de	es 11	réte	Xe											
	امعا	ON	p	uits	01	0 ?												
		C <sub>3</sub>	défo	tree	da	n s	la	w	حااد	(0	sin U	ارته	UN	aton	R	99Pa	4	
																120		
	boold						atom	e l	t 0	nt u	s/ve	lone	eur ?					
		Cs	effer	- D=	pple													
		4	ma	entag	ge o	2ptiqu	je											
		Ca	cha	cs c	ens	la	lan	npe										
		Ŋ	shru	cture	. h.	yperf	ina	-> þ	سيخو	ארנ	Min	/eau	×					
	, pour											ent	EM	4 .	excit	és/é	nis?	
		4	émis	Ssion	pe	an c	ter	fh	ermo	ioniq	ھ							
									SA.									
	o que																	
		G	la													Vo ?		
									ର୍ଚ୍ଚ					êne	-			
				S	UN	de	pho	esay	ge	ap	Dave	ait						



#### LP40 - Confinement d'une particule et quantification de l'énergie

Correcteurs : Lucile Sanchez & Benjamin Besga (benjamin.besga@ens-lyon.fr)

F. POLLET

#### Extraits des commentaires du jury

2017 : Cette leçon est une leçon de physique et ne doit donc pas se limiter à des calculs.

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.

2013 : Confinement de l'électron et quantification de l'énergie. Exemples.

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.

#### Points importants

Le message de la leçon qui est que le confinement d'une particule quantique conduit à une quantification de son énergie doit apparaître clairement et représente le fil conducteur de la leçon.

Une progression envisagée consiste à partir de l'observation de la quantification (spectre de l'hydrogène par exemple), de comprendre la quantification des solutions à l'aide d'une analogie classique (corde de Melde), et d'un calcul quantique (comme le puits infini). Il est intéressant de revenir à la quantification de l'énergie observée au départ (en développant par exemple la théorie quantique de l'atome d'hydrogène) avant d'ouvrir la leçon sur des applications récentes (utilisation du confinement pour désigner les propriétés optiques de boîtes ou puits quantiques par exemple).

#### Remarques sur la leçon présentée

La leçon était bien présentée et le choix des sujets abordés cohérents. L'utilisation des transparents était satisfaisante et les calculs bien menés. Un travail supplémentaire sur les transitions permettrait de suivre le fil conducteur observation de la quantification  $\rightarrow$  explication par le confinement  $\rightarrow$  applications. La leçon telle que prévue initialement était cependant trop longue :

- 1. Mise en évidence de la quantification (spectres de raies, modèle de Bohr, exp. de Franck et Hertz)
- 2. Origine de la quantification : le confinement (états liés / de diffusion, condition aux limites de la fonction d'onde, le puits de potentiel infini, puits de potentiel fini)
- 3. Applications (ions moléculaires colorés, atome d'hydrogène)

Il est difficile de traiter tous ces sujets correctement et des choix doivent être faits.

#### Première partie

La présentation de spectres de raies est intéressante (on peut ajouter les spectres d'absorption), elle motive l'intérêt de la leçon. Commencer la leçon par une petite expérience permettant de visualiser directement le spectre obtenu avec une lampe à hydrogène serait un vrai plus.

Le modèle de Bohr prend beaucoup de temps, si vous choisissez de le traiter il faut l'introduire correctement et ensuite en expliquer les limitations. Il peut être intéressant de se contenter d'un point de vu purement empirique dans la première partie, en mentionnant simplement la formule de Rydberg.

La présentation de l'expérience de Franck et Hertz était claire (description du montage expérimental un peu rapide), le message fort étant que la quantification de l'énergie dans les systèmes atomiques ne fait plus aucun doute!

#### Deuxième partie

La transition doit se faire sur la recherche de l'origine de la quantification. L'analogie avec la physique des ondes trouve naturellement sa place ici. La discussion des états de diffusion autour d'un potentiel de type Lennard-Jones est un peu artificielle et n'est pas centrale dans cette leçon. Une particule dans un puits de potentiel infini est parfaitement adapté pour introduire la notion de confinement, et mener les calculs au tableau.

La discussion des conditions aux limites a été bien réalisée, elle n'est cependant pas très motivée en arrivant avant l'exemple du puits infini, et peut être réalisée pendant le calcul du puits infini.

L'analogie avec la corde de Melde est importante et a été correctement traitée, en précisant bien la différence fondamentale qu'en mécanique quantique la grandeur physique est la densité de probabilité  $|\psi|^2$ . Il faut ensuite insister d'avantage sur la quantification des solutions pour la corde, et la quantification de l'énergie dans le cas quantique.

Le calcul d'une particule dans un puits quantique infini a été très bien mené, il est impératif de discuter les résultats de ce dernier (énergie de confinement non nul pour le fondamental, dépendance avec la largeur du puits la masse de la particule,...). Il est aussi intéressant de placer les niveaux d'énergie sur un diagramme au tableau pour insister visuellement sur la quantification.

Enfin, le calcul du puits fini n'est pas forcément nécessaire à ce stade et peut être mené plus tard si l'on traite par exemple le cas des ions moléculaires colorés.

#### Troisième partie

La détermination de la couleur des ions moléculaires à partir de la largeur du puits est intéressante et a été globalement bien présenté (un peu trop rapidement). Cependant comme seule application c'est un peu dommage.

La théorie quantique de l'atome d'hydrogène est la pierre angulaire de la physique atomique (et même moléculaire), de plus, sa présentation permet de reboucler avec les spectres présentés en introduction. Le confinement est assuré par un potentiel (coulombien) différent des puits considérés précédemment. Un traitement précis de ce calcul et de ses conséquences est surement un gros point positif dans cette leçon. Il est plus facile de commencer la troisième partie avec l'atome d'hydrogène, et de finir sur une seconde application. La transition pour la troisième partie peut alors être que la formule de l'énergie d'une particule dans un puits infinis ne rend pas compte correctement des spectres observés.

On peut ensuite considérer les boîtes ou puits quantiques semi-conducteurs comme une dernière application qui illustre parfaitement la notion de confinement et sa conséquence sur les niveaux d'énergie. La notion d'atome artificiel en général décrit un système de matière condensé dans lequel un défaut ou une nano-structure permet de confiner des électrons (ou des paires électrons-trous) de façon contrôlée pour obtenir des transitions optiques discrètes à la longueur d'onde désirée. Une discussion sur les puits quantiques semi-conducteurs peut par exemple être trouvée dans  $Ng\hat{o}$ , Physique des semi-conducteurs et Basdevant et Dalibard, Mécanique quantique p. 85. Pour aller plus loin voici un lien vers un article du BUP  $n^{\circ}927$  sur les nano-lasers :

https://www.refletsdelaphysique.fr/articles/refdp/pdf/2010/04/refdp201021p26.pdf

#### Questions complémentaires

- Pourquoi le courant mesuré dans l'expérience de Franck et Hertz augmente t-il globalement avec le potentiel de grille? On collecte des électrons qui n'ont pas interagi avec les atomes, et à grand potentiel on peut même avoir un courant du à l'ionisation des atomes. Est il possible de voir d'autre transition de l'atome de mercure que celle à 4,9 eV? Oui, à priori il est possible de voir d'autre transitions et dans l'expérience historique Franck et Hertz ont aussi mis en évidence une seconde transition.
- Pourquoi on passe de l'équation de Schrödinger à l'équation indépendante du temps? Il faut bien justifier que l'on cherche des solutions stationnaires car le potentiel ne dépend pas du temps (séparation des variables).
- Est-il possible d'avoir un état de diffusion normalisé? Oui, bien sûr, en formant un paquet d'onde.
- Peut on mesurer la particule dans la barrière de potentiel d'un puits de hauteur finie? Oui (onde évanescente).
- Dans le cas des ions colorés, combien d'électrons sont considérés dans la description ? La description à l'aide d'une la barrière infinie est elle justifiée ?

#### LP 40 : Confinement de l'électron et quantification de l'énergie. Exemples Compte-rendu de correction G. Laibe - D. Kuzzay (10/02/2017)

Commentaire général : à revoir, beaucoup d'erreurs pendant la leçon et les questions (l'expérience de Rutherford ne se fait pas avec des neutrons, a = mv^2/r n'est pas lié au caractère conservatif du champ de force, la relation de Heisenberg n'est pas liée à la mesure...). Manque général de précision au tableau, dans le vocabulaire et la présentation des expériences. Les modèles et conclusions des exemples doivent être discutés. Imprécisions liées à l'approche « historique » de la leçon (ex : il n'est pas évident à priori de relier le spectre de la lumière émise par une lampe spectrale et la quantification des niveaux d'énergie, cf la leçon).

**Structure :** deux points à aborder : 1) le niveau du fondamental est plus bas pour une région de confinement plus large (stabilisation par déconfinement) — utiliser Heisenberg pour les ordres de grandeurs, exemples et 2) le spectre des niveaux d'énergie est discret (faire le lien avec l'émission lumineuse). Il est possible de partir de l'équation de Schrödinger et d'interpréter les expériences historiques à la fin de la leçon.

Questions: lien entre la courbe i(V) et le spectre de la lumière émise dans l'expéreince de Franck et Hertz, conditions de continuité de la fonction d'onde aux bords, lien entre les symétries du potentiel et celles de la fonction d'onde, hypothèses sous-jacentes de la corde de Melde, réflexion dans le cas E>V0 (propriété ondulatoire et lien avec l'optique), niveaux d'energie dans l'atome de d'hydrogène réel (avec et sans champ B), spectre de l'oscillateur harmonique, dégenerescence particulière du spectre de l'atome d'hydrogène du à l'invariance du vecteur de Runge-Lenz, exemples de stabilisation par délocalisation (mésomérie, benzène), atome vs noyau (ordres de grandeur), processus d'élargissement des raies.