

LP00 – Titre

29 juin 2020

Laura Guislain & Pascal Wang

Niveau :

Commentaires du jury

Bibliographie

✎ *Le nom du livre, l'auteur*¹

→ Expliciter si besoin l'intérêt du livre dans la leçon et pour quelles parties il est utile.

Prérequis

Expériences

- mécanique du point : états liés, états de diffusion. ✎ Biréfringence du quartz
- Etats de diffusion en mécanique quantique.

Table des matières

1	Approche expérimentale de la quantification de l'énergie.	3
1.1	Observation des spectres et raies discrètes	3
1.2	Expérience de Franck et Hertz	3
2	Explication par le confinement	5
2.1	Approche ondulatoire	5
2.2	Puits infini	6
2.3	Influence de la forme du potentiel	7
3	Applications à des systèmes réels.	8
3.1	Ions colorés (Basdevant)	8
3.2	Atome d'hydrogène	8
3.3	Applications	8
4	Annexe	12
4.1	Applications	12

Préparation

Biblio : Demander la corde de Melde, le spectre de l'hydrogène Sanz p.1248, Basdevant p.77, Feynman p.398 et Cohen p.808, Basdevant p.204, Panorama de la Physique Modèle de Bohr bétonner.

Question : noms des séries du spectre de l'hydrogène (LBPBP), démarche de l'atome d'hydrogène, équation de Dirac (cf. Perez),

Introduction

Rappel Nous avons vu lors de précédentes leçons l'introduction de la dualité onde-particule pour la lumière et les particules. Les fondements de la mécanique quantique, tels que la notion de fonction d'onde et son équation d'évolution, ont été introduits pour décrire les expériences sans interprétation classique. Or "Quantique" supposerait quantification, pourtant on ne l'a pas vu apparaître dans les postulats.

Objectif Au cours de cette leçon nous allons voir en quoi la mécanique quantique permet aussi naturellement d'introduire la quantification de l'énergie observée expérimentalement. En effet, on a vu que les modes de résonance de la corde de Melde sont quantifiés. On a vu la dualité onde-corpuscule. On peut s'attendre à une quantification de l'énergie.

1 Approche expérimentale de la quantification de l'énergie.

1.1 Observation des spectres et raies discrètes

Raies spectrales Lorsqu'on observe le spectre d'une lampe spectrale, on a des raies définies de différentes couleurs, qui correspondent à des longueurs d'ondes précises, et non un continuum.

Raies de l'hydrogène/du mercure

On montre le spectre de la lampe hydrogène avec une feuille en plastique rayée, qui joue le rôle de réseau. On regarde en transmission : <https://youtu.be/oae5fa-f0S0?t=317>. On observe des raies discrètes. La raie la plus éloignée (rouge) est la raie α à 21 cm, très utilisée pour l'observation en astrophysique. On voit aussi la raie β et γ (de plus loin à plus proche)

Formule de Rydberg Les raies d'absorption sont de la forme. **On donne l'expression.** C'est la formule empirique de Rydberg, intervenir des nombres entiers. On a l'habitude de donner un nom à chaque série à n fixé. Pour les raies dans le visible, on a $n = 2$: c'est la série de Balmer (1885), dont les raies α, β et γ ont été observées dans la vidéo. Pour les hydrogénoïdes, il faut multiplier par Z^2 .

Interprétation On sait que les longueurs d'ondes observées correspondent à des transitions électroniques entre deux niveaux d'énergie. Les niveaux d'énergie correspondant sont : **On donne l'expression.**

↓ *Cependant, en toute rigueur, l'expérience montre la quantification des transitions énergétiques de l'hydrogène.*

1.2 Expérience de Franck et Hertz

Historique La notion de quantification va être appuyée par l'expérience de Franck et Hertz en 1914 (PN 1925), qui visait à étudier les rayons cathodiques et les décharges électriques dans les gaz raréfiés. Ils voulaient améliorer les tubes électroniques pour le perfectionnement du téléphone à longue distance.

Principe : triode Franck et Hertz envoient des électrons accélérés avec une énergie contrôlée E_d (**ODG**: qqes eV) sur une vapeur de mercure, en utilisant une triode est un dispositif électronique à trois électrodes, d'où le nom. La cathode émet des électrons excités thermiquement par chauffage du filament. L'anode est une plaque réceptrice qui peut les collecter : on mesure ainsi un courant I entre l'anode et la cathode. La troisième électrode est appelée grille : située près de la cathode, elle permet de contrôler le courant d'électrons émis par la cathode, puisque si elle est à un potentiel inférieur à la cathode, elle ralentit les électrons (le courant diminue), et inversement.

Collection du courant La ddp accélératrice est inférieure au potentiel d'ionisation V_I des atomes de la vapeur et les électrons collectés sont exclusivement ceux émis par le filament par effet thermoélectronique. Le potentiel de la plaque est légèrement inférieur à celui de la grille, d'une quantité voisine de quelques dixièmes de volt :

$$V_P = V_g - \Delta V \quad (\Delta V > 0)$$

Les électrons pénètrent donc dans la vapeur avec une énergie cinétique $E_{cin,i}$, égale à $|e|V_g$, puis rencontrent la ddp ΔV qui les ralentit ; leur énergie cinétique finale, $E_{cin,f}$, s'ils parviennent à la plaque en subissant au plus des collisions élastiques, est maintenant : $E_{cin,f} = E_{cin,i} - |e|\Delta V$ (pas de collisions inélastiques) Clairement, pour que les électrons

puissent parvenir à la plaque - et donc contribuer à l'intensité dans le circuit extérieur -, leur énergie cinétique doit être suffisamment grande. Si un électron subit une collision inélastique avec un atome, son énergie cinétique à l'issue de cette collision est notablement réduite, d'une quantité précisément égale à l'énergie d'excitation interne de l'atome. L'électron peut même être immobilisé s'il avait avant la collision tout juste l'énergie cinétique nécessaire à l'excitation de l'atome ; en pareil cas, sa vitesse est nulle après la collision avec l'atome, et il repart en arrière sous l'effet de la contre-tension ΔV : il est alors perdu pour le courant dans le circuit extérieur.

Résultats Ils tracent ensuite l'intensité I récoltée en fonction de la tension appliquée, proportionnelle à l'énergie cinétique. On va raisonner en énergie

- Si $E_d < E_{seuil} = 4.9eV$. Les collisions sont élastiques car un atome de mercure est 400 000 fois plus massif qu'un électron et a une vitesse quadratique moyenne 400 fois plus petite (odg dans Cagnac). C'est le cas d'une collision d'un projectile léger avec une cible lourde quasi-stationnaire, qui résulte en une collision élastique : l'électron repart avec la même énergie cinétique. Quand on augmente l'énergie cinétique de départ, on augmente le courant récolté.
- Si $E_d = E_{seuil}$, on a une chute du courant : un nouveau phénomène apparaît. Les électrons effectue une collision inélastique avec un atome de la vapeur de mercure. L'électron cède de l'énergie à l'atome de mercure, qui peut ensuite se désexciter par émission d'un photon. Les électrons sont donc ralentis et atteignent moins l'autre plaque et donc le courant reçu plonge. *En réalité c'est plus compliqué : l'électron change de spin (exchange collision) et il peut y avoir capture de l'électron par l'atome Hg "par résonance" pour former un ion Hg^-*
- Si $E_d > E_{seuil}$, le courant augmente une nouvelle fois. On l'explique par le fait que les électrons perdent une énergie cinétique fixe E_{seuil} . L'énergie cinétique restante permet d'atteindre l'autre plaque.
- Si $E_d \sim 2E_{seuil}$, le courant diminue. On l'interprète par le fait que l'électron peut subir deux collisions inélastiques. Etc.
- Bonus : à haute énergie, on peut voir un courant d'ionisation.

Valeur du seuil, comparaison à la spectroscopie L'énergie du seuil correspond à la longueur d'onde $\lambda = 253.7$ nm, déjà connue par spectroscopie et mesurable pendant l'expérience lorsque la vapeur est excitée. Ils ont aussi observé d'autres raies. *En réalité, λ peut varier d'une expérience à l'autre autour d'une valeur centrale, à cause de la structure fine, cf. Hanne*

Conclusion Globalement, l'interprétation est cohérente avec l'idée suivant laquelle l'atome ne peut prendre à l'électron incident qu'une quantité donnée, finie, d'énergie. Dans les expériences de Franck et Hertz, le gaz était une vapeur de mercure et on trouve $V_0 = 4,9V$ alors que le potentiel d'ionisation du mercure V_I est voisin de $10,5V$. Sous l'effet des collisions inélastiques, l'intégrité de l'atome est préservée, celui-ci ne se décompose pas et passe seulement dans un état excité :

$$E_{\text{atome},f} = E_{\text{atome},i} + |e|V_0$$

Cette fois l'énergie cinétique de l'électron, qui prend des valeurs continues, ne peut pas échanger une quantité d'énergie inférieure à E_{seuil} à l'atome.

Ces résultats corroborent parfaitement que les niveaux d'énergie d'un atome sont quantifiés et que les raies de spectroscopie correspondent à des transitions entre ces niveaux d'énergie. La quantification ne fait plus aucun doute.

Bonus : allure de la courbe de résonance \neq **Hanne** L'espacement entre les pics de résonance peut varier selon la géométrie et la pression en vapeur de Hg du tube. En effet, plusieurs niveaux (en fait 3) de la structure fine de Hg autour de $E = 4.9eV$ peuvent être excités, avec des sections efficaces différentes. Ainsi, il y a plusieurs résonances qui ont lieu en même temps, l'espacement entre les pics peut varier de $\sim 0.1eV$.

Bonus : émission thermoélectronique L'origine physique de l'effet thermoélectronique est la suivante. Les électrons sont confinés au sein du métal constituant le filament et doivent recevoir une énergie W_S pour en sortir ; W_S est de l'ordre de quelques eV, c'est-à-dire 50 à 100 fois $k_B T$ à l'ambiante. D'un autre côté, en raison de l'agitation thermique, la vitesse (l'énergie) d'un électron donné fluctue rapidement au cours du temps et est distribuée suivant une certaine loi statistique. Il existe à tout instant des électrons dont l'énergie est grande : ce sont ceux qui, brièvement et de façon transitoire, se situent dans la queue haute énergie de la distribution. C'est en profitant sans tarder d'une telle fluctuation spontanée qu'un électron peut sortir du métal (il s'agit, presque au sens propre, d'une évaporation de la mer de Fermi). Cette chance de sortie est bien sûr d'autant plus grande que la température est élevée ; comme les probabilités à haute énergie ont une dépendance à peu près exponentielle par rapport à la température ($\simeq Ae^{-E/k_B T}$), une petite variation de température (d'un facteur 3 ou 4) donne des variations très importantes du taux d'émission

thermoélectronique. À l'ambiante, le nombre d'électrons ainsi émis est ridiculement petit ; à 2000K une température typique pour un filament (tout comme le corps noir, c'est à une telle température que le filament apparaît à peu près blanc brillant), ce taux devient assez grand - même si seules les queues de distribution sont efficaces - pour donner un courant mesurable.

↓ Quelle est l'origine de cette quantification ? Des modèles semi-classiques ont été proposés, par Bohr notamment, mais on va donner une explication 100% quantique.

2 Explication par le confinement

2.1 Approche ondulatoire

Quantification en physique des ondes La quantification des niveaux d'énergie, ce n'est pas nouveau et ce n'est pas propre à la mécanique quantique. Cela se trouve dans la physique des ondes, notamment dans un phénomène ondulatoire déjà abordé : la corde de Melde.

Résonance de la corde de Melde

Régime libre Dans une leçon précédente, la corde de Melde a été étudiée.

Fixée à ses extrémités, on a mis en évidence des modes propres discrets, qui émergent des conditions aux limites. Les solutions sous forme de modes propres sont quantifiées.

On voit que le phénomène de quantification n'est en fait pas propre à la mécanique quantique mais se retrouve plus généralement dans la physique des ondes.

Résonance de la corde de Melde Vidéo : <https://www.youtube.com/watch?v=ondU01Cmw-s#t=0m6s> ❗ Ici, la corde de Melde est forcée, ce qui n'est pas le cas d'un atome. Si on le montre, il faut juste dire que la résonance permet de visualiser les modes propres mais que ces notions sont distinctes : l'un appartient au régime forcé et l'autre au régime libre.

Corde de Melde On rappelle les résultats de la corde de Melde en régime libre :

	Corde de Melde	Fonction d'onde
Solution en mode propre	$y(x, t) = f(x)e^{-i\omega t}$	$\phi(x, t) = \psi(x)e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$
Vecteur d'onde	$k^2 = \frac{\omega^2}{c^2}$	$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$
Equation du mode propre	$f'' + k^2 f = 0$	$\psi'' + k^2 \psi = 0$
Conditions aux limites	$f(0) = f(L) = 0$	$\psi(0) = \psi(L) = 0$
Vecteur d'onde quantifié	$k_n = \frac{n\pi}{L}, n \in \mathbb{N}^*$	$k_n = \frac{n\pi}{L}, n \in \mathbb{N}^*$
Forme du mode propre	$f_n(x) \propto \sin(k_n x)$	$\phi_n(x) \propto \sin(k_n x)$
Niveaux d'énergie	$E_n = \frac{n^2 T_0 \pi^2}{4L}$	$E_n = \frac{(n\pi\hbar)^2}{2mL^2}$

(1)

Mécanique quantique On a aussi vu dans une leçon précédente qu'une particule quantique est décrite par sa fonction d'onde. Similairement, lorsque certaines conditions limites sont imposées, on peut s'attendre à une discrétisation des modes propres, qui sont en fait les solutions de l'équation de Schrödinger stationnaire. Le spectre d'énergie, qui est aussi le spectre du Hamiltonien au sens de l'algèbre linéaire *i.e* ses valeurs propres sont alors discrets aussi.

Energie de confinement, ordre de grandeur de l'écart énergétique La quantification peut aussi sortir "naturellement" des relations de Heisenberg. On fixe Δx , cela nous donne l'ordre de grandeur pour Δp et donc pour l'énergie quantifiée). **ODG**: électron et noyau (voir plus loin). Energie de confinement. Stabilité de la matière.

Critère pour observer les raies discrètes Il faut que la longueur d'onde de De Broglie soit du même ordre de grandeur que le puits de confinement.

Message Si on connaît la description en fonction d'onde et la corde de Melde, la quantification ne doit pas surprendre.

↓ *On va modéliser cela plus précisément.*

2.2 Puits infini

Intérêt du puits infini On veut expliquer les raies discrètes des atomes. Pour l'atome d'hydrogène, le potentiel correspondant est un potentiel coulombien. **On fait un schéma.** Ce problème a la propriété remarquable d'être analytiquement résolvable. Pour éviter ces calculs et commencer par dégager des propriétés générales dues au confinement, on utilise une approximation, la plus simple possible : celle du puits infini.

Position du problème On considère un puits infini de largeur L **On fait un dessin.** **On écrit le potentiel, l'équation de Schrödinger stationnaire et la résolution, en justifiant les CL.** Le tout est sur fiche et dans un bouquin de prépa. ⚠ **L'énergie ne peut être négative car alors la fonction d'onde est somme de deux exponentielles et ne peut s'annuler deux fois aux bords.**

Bonus : le problème des conditions limites The Schrödinger equation does not fix the boundary condition for connecting $\psi(x)$ at the boundaries of the well; however, the requirement of not appearing the negative energy states forces us to impose some kind of boundary conditions The problem of setting proper boundary conditions can be solved by considering an infinite well as the limit of a finite well. Then the boundary condition obtained is the requirement of the continuity of $\psi(x)$ on both sides of the well. This is the conventional boundary condition shown on most textbooks. There are also other approaches from different considerations that put in boundary condition that is different from the conventional one. For instance, one may consider putting in the boundary condition by the requirement of hermiticity of the Hamiltonian defined in the interval of x , $[0, L]$. We may consider the boundary condition problem from the following point of view. As in the infinite square well model, the Schrödinger equation does not give us a guide on how to set the boundary conditions. Suppose that we don't put in boundary conditions on the two sides of the well, then what will we get? We would obtain a continuous energy spectrum, and more than that, we would also obtain negative energy states. This then gives us a reason that we need to set in proper boundary conditions for avoiding the negative energy states.

Tracé des solutions **On sort le code python et on place les niveaux visuellement au tableau**

Analogie avec la corde de Melde En fait, on a fait les mêmes calculs que celui de la corde de Melde **On revient sur le tableau d'analogie.** A même équations, mêmes solutions. On obtient des ventres et des noeuds de probabilité.

Différences La relation de dispersion $\omega = f(k)$ pour des ondes progressives qui n'est pas la même dans les deux cas.

- Pour la corde de Melde : $\omega = ck$ sans dispersion, linéaire.
- Pour le puits infini : $\omega = E/\hbar = \hbar k^2/2m$ quadratique, dispersion.

Une autre différence est que l'énergie que l'on peut mesurer pour une particule dans un puits quantique est quantifiée alors que pour la corde de Melde n'importe quelle énergie peut être mesurée.

Energie minimale On trouve une énergie minimale, compatible avec l'inégalité de Heisenberg.

Limite classique Avec une masse élevée, où on voit que les états liés ont des écarts énergétiques très faibles (en deça de nos appareils de mesure), donc on y est insensible.

Ordre de grandeur des écarts d'énergie Le modèle nous donne une différence entre les niveaux d'énergie qui vaut au minimum : $\pi^2 \hbar^2 / 2mL^2$ **ODG:** pour un électron autour d'un noyau $r_0 = 1$ angstrom, $\Delta E = 37$ eV. On trouve le bon odg ⚠ **L'application numérique est à vérifier.** pour proton dans un noyau : $r_0 = 1$ fm, $m = 1.67 \cdot 10^{-27}$ kg : $\Delta E = 51$ MeV, on retrouve l'ordre de grandeur des énergies mises en jeu lors de réactions nucléaires de fission ou de fusion.

Comparaison avec les spectres, limites La plus petite transition possible (donc la plus grande transition possible est celle donnée précédemment, qui donne un rayonnement de $\lambda = 33$ nm, alors que l'on a observé des franges visibles. De plus, on a vu que les raies étaient plus rapprochées lorsque l'on augmente la longueur d'onde, alors que ce modèle prédit l'inverse (λ en $1/n^2$). Donc le potentiel infini ne reproduit pas quantitativement les résultats de l'atome d'hydrogène.

Bonus : principe de correspondance En physique, le principe de correspondance, proposé la première fois par Niels Bohr en 1923, établit que le comportement quantique d'un système peut se réduire à un comportement de physique classique, quand les nombres quantiques mis en jeu sont très grands, ou quand la quantité d'action représentée par la constante de Planck peut être négligée devant l'action mise en œuvre dans le système. Par ailleurs, la moyenne du carré de la vitesse dans l'état n est telle que :

$$\frac{1}{2}m \langle v^2 \rangle_n = E_n \iff \langle v^2 \rangle_n = n^2 \pi^2 \frac{\hbar^2}{m^2 a^2}$$

d'où pour $n \gg 1$:

$$E_{n+1} - E_n \simeq \frac{\pi \hbar}{a} \sqrt{\langle v^2 \rangle_n} \iff \omega_{n+1} - \omega_n \simeq \frac{\pi}{a} \sqrt{\langle v^2 \rangle_n}$$

D'un autre côté, pour une particule classique confinée entre deux murs distants de a et ayant une vitesse v (celle-ci est constante en module), la période du mouvement est $T = 2a/v$, correspondant à une pulsation $\omega = \pi v/a$. (15.162) montre que la fréquence de Bohr associée à deux états adjacents, ou en tout cas très voisins, $|n - m| \ll n, m$, tend donc vers la (une) pulsation fondamentale du mouvement classique dans la limite des très grands nombres quantiques. Une fois encore, on retrouve bien l'idée maîtresse de Bohr (Principe de Correspondance).

↓ On a pris un puits infini, avec une discontinuité infinie, on va examiner numériquement le cas du puits fini pour être sûr que la quantification n'est pas due au choix particulier de conditions limites

2.3 Influence de la forme du potentiel

Puits fini La première modification à laquelle on peut penser est de rendre le puit de taille finie. Premièrement, les zones hors du puits deviennent accessibles à la particule, et les conditions aux limites changent.

Conditions de continuité On a mis les conditions de continuité en prérequis mais on rappelle l'origine et on les commente quand même. ⚡ La continuité de la dérivée de la fonction d'onde ψ vient en intégrant l'équation de Schrödinger autour d'un point et peut s'interpréter en terme de continuité de la densité de courant de probabilité j . La continuité de ψ vient de la régularité de sa dérivée, ne peut avoir que des discontinuités finies (la primitive est toujours plus régulière). Cela implique la continuité de la densité de probabilité. Dans le cas contraire, la singularité de potentiel ferait disparaître partiellement la particule (le courant à gauche serait différent du courant à droite, il y aurait une fuite de probabilité). Comment comprendre la différence de condition limite pour la dérivée première de la fonction d'onde quand on a un puits fini et un puits infini ? ψ' est associé à $\hat{p}\psi$ donc à l'impulsion de la particule. Classiquement, la particule rebondit sur le mur : sa quantité de mouvement change abruptement, elle n'est pas continue. La fonction d'onde de la particule est alors non-nulle dans hors du puits. La particule est donc moins localisée, on s'attend à ce que l'énergie de la particule soit toujours quantifiée, mais plus faible.

Résultats On montre la résolution graphique si on a le temps, sinon juste un plot python. Le résultat est que pour un même nombre quantique, l'énergie est plus basse.

La quantification de l'énergie persiste même si le puits est fini. Ce n'était pas un artefact d'avoir pris un puits infini.

Cependant, les niveaux d'énergie quantifiés sont en nombre fini, contrairement à l'atome d'hydrogène.

Etats liés, états de diffusion Nous appellerons états liés de la particule, les états dont les fonction d'ondes satisfont à l'équation aux valeurs propres et sont de carré sommable (ce qui est indispensable pour que la fonction d'onde puisse réellement décrire l'état physique d'une particule). Ce sont donc des états stationnaires, pour lesquels la densité de probabilité de présence n'a de valeurs notables que dans une région limitée de l'espace. En effet, il faut que la densité de probabilité décroisse suffisamment pour que l'intégrale qui définit la convergence converge. Les états liés rappellent en quelque sorte les mouvements classiques où la particule oscille dans un puits sans jamais en sortir, c'est-à-dire ceux d'énergie E telle que $-V_0 < E < 0$ (cf. problème de Kepler). Si on relâche la condition de normalisabilité, il existe des solutions de l'équations aux valeurs propres pour un ensemble continu des valeurs d'énergie. Ces solutions, convenablement interprétées, correspondent aux états de diffusion. On pourrait les normaliser en faisant un paquet d'onde.

Potentiel harmonique Une autre modélisation serait celle qui lie élastiquement l'électron et le noyau, on a alors un potentiel harmonique $V(r) = 1/2 m \omega_0 r^2$ dépendant de la position. Là encore les énergies sont quantifiées, et valent $E_n = \hbar \omega (n + 1/2)$. Ils sont linéairement espacés, ce qui n'est pas le cas de l'atome d'hydrogène.

Atome d'hydrogène On le mentionne ici si on est en retard Mais les raies de l'atome d'hydrogène ne sont pas en nombre fini et sont en $1/n^2$. Pour obtenir ces résultats, il faut résoudre l'atome d'hydrogène. L'électron subit un potentiel coulombien On donne l'expression. La résolution complète de ce problème sera faite au début d'un module de L3 sur l'application de la Mécanique quantique à l'atome. On peut cependant donner les principaux résultats : on obtient là encore des niveaux d'énergie quantifiés, mais cette fois l'énergie s'écrit On donne l'expression. On retrouve bien les orbitales atomiques vues en chimie, et les transitions entre deux niveaux d'énergie peuvent être dans le visible : 655 nm pour la transition 2s à 3s. De plus, les niveaux d'énergie se resserrent bien quand on augmente n, on a donc une longueur d'onde minimale d'absorption puis des raies plus resserrées quand la longueur d'onde croît. La description de l'atome d'hydrogène est une grande réussite de la mécanique quantique, qui a contribué à confirmer les postulats de celle-ci dont l'équation de Schrödinger.

↓ La formule des énergies d'un spectre infini ne rend pas compte correctement des spectres observés. ??

3 Applications à des systèmes réels.

3.1 Ions colorés (Basdevant)

↪ ma fiche. Tout est sur ma fiche.

3.2 Atome d'hydrogène

Pierre angulaire de la physique atomique. Séparation des variables. Le confinement est assuré par un potentiel coulombien. Le potentiel effectif comprend un terme centrifuge qui dépend du moment cinétique (on se ramène à un problème unidimensionnel comme pour le problème de Kepler). Pour un court circuit, voir Vincent.

Bonus : le potentiel a une symétrie sphérique pourtant les harmoniques sphériques dépendent des angles ? You have to write the eigenstates with respect to some coordinate system, but the choice of such system is arbitrary. If the state $(n,l,m)=(2,1,1)$ (just for example) with respect to some arbitrary choice of axes is an eigenstate of the Hamiltonian, the state $(2,1,1)$ with respect to a rotated frame would also be an eigenstate (which is a superposition of the states $(2,1,-1)$, $(2,1,0)$, $(2,1,1)$ in the original coordinates). Bilan : le groupe de rotations laisse bien les solutions l'atome d'hydrogène invariant : il envoie une solution sur une autre. (à vérifier) C'est comme le problème à deux corps de Kepler, qui est à symétrie sphérique, pourtant les solutions comportent des ellipses, à symétrie non-sphérique. C'est l'ensemble des solutions qui est à symétrie sphérique.

3.3 Applications

↪ Basdevant p.85, Ngo, physique des semi-conducteurs, Panorama de la physique, hétérostructure, semi-conducteurs, Atomes artificiels, paul trap, quantum dot, qubit.

Puits de potentiel avec des semi-conducteurs La grande diversité des matériaux semi-conducteurs permet de concevoir et de réaliser des hétérostructures aux propriétés originales. Pour cela on exploite la discontinuité de bande interdite à l'interface entre deux semi-conducteurs. Lorsqu'on passe d'un matériau à l'autre, l'énergie des extrema des bandes de conduction et de valence change. En accolant deux semi-conducteurs, il est alors possible de rencontrer la situation où un électron pourra se propager dans un matériau et pas dans l'autre : une barrière de potentiel pour l'électron a été créée. De même, une couche d'un petit matériau de petite bande interdite entre deux couches d'un matériau de plus grande bande interdite constitue un puits de potentiel qui confine les électrons.

Exemple : sandwich de semi-conducteurs Pour plus de détails : Un puits quantique consiste en une structure d'AsGa, de largeur a , prise entre deux couches de Ga $1-x$ Al x As avec $x \sim 0.3 - 0.35$. Cette valeur de x permet d'avoir une barrière importante pour l'hétéro-jonction. Ce couple de semi-conducteur permet donc de réaliser des interfaces abruptes et ainsi de réaliser des structures d'empilement assez complexes. *Commentaire des figures de wikipedia sur diaporama (i) A heterostructure made from semiconductors AlGaAs (large band-gap) and GaAs (smaller band-gap) in a quantum well configuration. In the central GaAs region of length d , the conduction band energy is lower, and the valence band energy is higher. Therefore both electrons and holes can be confined in the GaAs region. (ii) The band structure diagram in a quantum well of GaAs in between AlGaAs. An electron in the conduction band or a hole in the valence band can be confined in the potential well created in the structure. The available states in the wells are sketched in the figure. These are 'particle-in-a-box like states.*

Application : émission de photons uniques The development of quantum cryptography and linear optic quantum computations relies on a nonclassical light source capable of emitting either a single photon or a pair of entangled single photons on demand at a defined frequency with high external quantum efficiency. Self-organized single quantum dots (QDs) grown by epitaxial techniques are promising candidates for creation of the single-photon sources, because of their small emission linewidth, fast radiative decay time, high and stable quantum efficiency, and ability to be integrated with electronic devices

Condition de confinement Si l'épaisseur du puits est de l'ordre de la longueur d'onde de de Broglie des électrons, les effets de confinement quantiques sont significatifs par exemple par rapport à l'énergie thermique. Dans une structure à puits quantique, les effets de confinement déterminent l'énergie de bande interdite et peuvent être adaptés en combinant différents matériaux et différents épaisseurs de couches.

Laser à semi-conducteur La longueur d'onde d'émission des lasers à puits quantiques, maintenant présents dans tous les lecteurs de CD ou DVD, est fixée de cette manière. Dans ces lasers, la discontinuité d'indice optique entre deux matériaux différents est également exploitée pour confiner les photons et augmenter le gain optique du matériau.

Message https://fr.wikipedia.org/wiki/Laser_%C3%A0_cascade_quantique Dans un laser à semi-conducteur classique, la longueur d'onde de transition est celle correspondant au gap et est caractéristique du matériau. Dans un laser à puits quantique, la longueur d'onde est donnée par les niveau d'énergie du puits donc de la géométrie du sandwich de semi-conducteurs.

Conclusion

La quantification n'est pas intrinsèquement quantique, mais plus intrinsèquement ondulatoire.

Ouverture :

- Vers la physique des solides. Commenter le fait qu'élargir le puits abaisse les niveaux d'énergie par délocalisation. Solides : on délocalise les électrons au maximum. Ouvrir vers l'effet tunnel qui couple les puits entre eux.
- ouverture sur les applications. puits quantiques (ngo), semi-conducteurs, quantum dots, propriétés optiques, atomes artificiels : en matière condensée, c'est un système où un défaut ou une nano-structure permet de confiner des électrons (ou des paires électrons-trou) de façon contrôlée pour obtenir des transitions optiques discrètes à la longueur d'onde désirée. nano laser : <https://www.refletsdelaphysique.fr/articles/refdp/pdf/2010/04/refdp201021p26.pdf>

Rappels sur la fonction d'onde. Molécule d'ammoniac à l'oral. Atome H à l'oral : avec les nombres quantiques, montrer les eq sans les résoudre.

Compléments/Questions

Expériences de démonstration de la quantification des niveaux :

- résonance optique avec le sodium
- ionisation d'une vapeur atomique avec des électrons accélérés : on récolte les électrons émis. Expériences de Lenard (1902), réalisé avec un triode. Caractéristique $I(V)$ (due aux électrons émis par l'ionisation) ne décolle qu'après une tension seuil.
- spectroscopie
-

Triode une triode, composée d'une cathode, d'une anode réceptrice, et d'une grille placée entre les deux, le tout dans un tube dans lequel on a fait le vide.

La cathode est un filament incandescent ou une plaque chauffée par un tel filament. Le chauffage de la cathode confère suffisamment d'énergie à ses électrons pour leur permettre de se libérer du support et former un nuage électronique autour de la cathode. On parle d'émission cathodique.

L'application d'une différence de potentiel entre cathode et anode accélère ces électrons (négatifs) vers l'anode (positive) et forme un courant de quelques milliampères dans le circuit.

L'interposition d'une grille entre les deux électrodes permet, en modulant son potentiel, de favoriser ou restreindre ce passage des électrons. L'énorme intérêt de cette disposition est qu'une petite variation de potentiel sur la grille

provoque une grosse variation du courant récolté par l'anode : c'est le principe de l'amplification. En jouant sur les caractéristiques géométriques de la lampe, on peut ajuster ce facteur d'amplification (le gain).

Modèle de Bohr Bohr regroupe l'idée d'Einstein que la lumière est constituée de photons et le principe de Ritz que les longueurs d'onde observées sur les spectres sont reliés à des termes spectraux. Il suppose qu'un électron décrit des orbites circulaires de rayon r autour du noyau fixe de charge opposée à celle de l'électron : $-e$. Il suppose qu'il existe des orbites privilégiées pour lesquelles l'électron en mouvement ne rayonne pas, ces orbites vérifient la condition de quantification du moment cinétique $\sigma_z = n\hbar$ (moment cinétique de l'électron en O). Il suppose aussi que l'électron rayonne (perd de l'énergie) que lors du passage d'une orbite à l'autre (émission/absorption de lumière). Ses limites sont qu'il est phénoménologique (n'explique pas pourquoi il existe des orbites stationnaires privilégiées), il ne marche pas pour l'Hélium, ne prédit pas des phénomènes tels que l'effet Zeeman anormal (?). De plus, la notion de trajectoire n'a pas de sens, seulement densités de probabilité de présence dans tout l'espace.

Passage

Plan

Questions

- Comment choisir la bonne forme de potentiel ? Est-ce qu'on peut revenir sur l'interprétation physique des conditions limites ?
- Comment faire comprendre à un élève la différence de condition limite pour la dérivée première de la fonction d'onde quand on a un puits fini et un puits infini ? ψ' est associé à $\hat{p}\psi$ donc à l'impulsion de la particule. Classiquement, la particule rebondit sur le mur : sa quantité de mouvement change abruptement, elle n'est pas continue.
- Pourquoi l'expression de l'énergie donnée par le puits infini ne donne pas la bonne tendance pour les raies du spectre de l'hydrogène ? Quelles sont les séries associées au spectre de l'hydrogène ?
- Réexpliquer la stabilité de la matière à l'aide de l'inégalité de Heisenberg.
- Pour résoudre le puit fini vous avez dit que comme le potentiel est symétrique, la densité de probabilité est symétrique et donc ψ est soit symétrique, soit antisymétrique, mais cette condition sur ψ est plus forte que celle sur la densité. Comment s'en sortir ?
- Pour expliquer la radioactivité beta, quelle taille de puits prendre pour l'électron ? Quelle énergie de liaison obtient-on ?
- **Pour l'atome d'hydrogène, vous avez dit que l'on considérait une symétrie sphérique mais pour les harmoniques sphériques, on obtient des fonctions qui dépendent de θ .** (Si par exemple on excite de manière isotrope un électron dans l'orbitale 1s (qui respecte la symétrie sphérique) vers la 2p, alors l'électron excité se retrouve dans une combinaison des harmoniques sphériques Y_{10} , Y_{11} , Y_{1-1} qui conserve la symétrie sphérique. Mais généralement, l'absorption d'un photon est non isotrope et envoie l'électron sur une seule des harmoniques sphériques de 2p.)
- Comment interpréter physiquement les conditions aux limites de la fonction d'onde ? (J'ai donné très sommairement l'explication à l'aide de la conservation du courant de probabilité et ça a semblé suffire).
- Vous avez dit que l'énergie de la particule ne peut pas être plus basse que le minimum du potentiel, pourquoi ? Il y a une explication dans le Aslangul si la fonction d'onde est réelle, je l'ai donnée. Oui, mais est-ce que la fonction d'onde est nécessairement réelle ? Non, elle peut être complexe. Et dans ce cas ? (apparemment dans ce cas on peut avoir une énergie plus basse que le minimum du potentiel mais il faut réinterpréter la fonction d'onde). Vous avez déjà entendu parler de l'équation de Dirac ? Qu'est-ce que ça implique l'équation de Dirac ?
- Rappeler la notion d'état lié et d'état de diffusion. C'est une notion de mécanique classique. On trace un potentiel type Morse, si l'énergie est en dessous du seuil, comme l'énergie cinétique est positive, la particule ne peut se trouver que sur un domaine limité. Sinon, dans l'état de diffusion la particule peut aller en $+\infty$.
- Peut-on avoir une quantification pour des états de diffusion ? Non c'est le confinement qui est à l'origine de la diffusion. Pourquoi ?
- Montrer qu'une particule dans un confinement sur une distance a a une énergie de confinement.

- Une fonction d'onde c'est complexe, pourquoi on a le droit de la tracer ? Ici elle est réelle on la trace. Sinon on trace le module au carré.
- Pas de quantification en mécanique classique mais on a tracé une analogie avec la corde de Melde. Expliquer ? En fait on a trouvé la quantification de modes pour des ondes.
- C'est quoi un modèle semi-classique ? Mécanique classique + règles phénoménologiques d'origine quantique.
- Exemple en physique de système qui a une solution symétrique ou antisymétrique ? Bifurcation fourche : flambage d'une poutre.
- Différence entre l'aléatoire de la physique classique et l'aléatoire de la physique quantique ? L'équation fondamentale de la MQ est déterministe pour ψ mais c'est la mesure qui introduit l'aléatoire.
- Du coup une fonction d'onde pour un problème symétrique est-elle nécessairement symétrique ou antisymétrique ? Les états propres oui mais une solution est une CL générale.
- Comment expliquer la quantification induite par le confinement à un élève de collège ? Comme une corde de guitare qui est fixée à ses extrémités, en la pinçant, seules certaines fréquences sont sélectionnées.
- Analogie entre une cavité résonante électromagnétique et un puits infini ? Le champ électrique est la fonction d'onde, l'énergie électromagnétique $|E|^2$ est la densité de probabilité $|\psi|^2$, le vecteur de Poynting est le courant de probabilité. En moyenne, le vecteur de Poynting est nul. En mécanique quantique, le courant de probabilité est nul. On a la même équation de conservation $\partial_t \rho + \text{div} \vec{j} = 0$.
- D'où vient la quantification du moment cinétique ? Confinement angulaire : les conditions périodiques entre 0 et 2π induisent une quantification.
- Apparemment dans ce cas on peut avoir une énergie plus basse que le minimum du potentiel mais il faut réinterpréter la fonction d'onde ?
- . Vous avez déjà entendu parler de l'équation de Dirac ? Qu'est-ce que ça implique l'équation de Dirac ?
- Pourquoi peut-on résoudre l'équation de Schrödinger stationnaire ? Si le potentiel ne dépend pas du temps, on peut séparer les variables.
- **Réexpliquer la stabilité de la matière à l'aide de l'inégalité de Heisenberg. Pour résoudre le puit fini vous avez dit que comme le potentiel est symétrique, la densité de probabilité est symétrique et donc ψ est soit symétrique, soit antisymétrique, mais cette condition sur ψ est plus forte que celle sur la densité. Comment s'en sortir ? Pour expliquer la radioactivité beta, quelle taille de puit prendre pour l'électron ? Quelle énergie de liaison obtient-on ? Pour l'atome d'hydrogène, vous avez dit que l'on considérait une symétrie sphérique mais pour les harmoniques sphériques, on obtient des fonctions qui dépendent de theta. (Si par exemple on excite de manière isotrope un électron dans l'orbitale 1s (qui respecte la symétrie sphérique) vers la 2p, alors l'électron excité se retrouve dans une combinaison des harmoniques sphériques Y10, Y11, Y1-1 qui conserve la symétrie sphérique. Mais généralement, l'absorption d'un photon est non isotrope et envoie l'électron sur une seule des harmoniques sphériques de 2p.) Comment interpréter physiquement les conditions aux limites de la fonction d'onde ? (J'ai donné très sommairement l'explication à l'aide de la conservation du courant de probabilité et ça a semblé suffire).**
- Vous avez dit que l'énergie de la particule ne peut pas être plus basse que le minimum du potentiel, pourquoi ? Il y a une explication dans le Aslangul si la fonction d'onde est réelle, je l'ai donnée. Oui, mais est-ce que la fonction d'onde est nécessairement réelle ? Non, elle peut être complexe. Et dans ce cas ? (apparemment dans ce cas on peut avoir une énergie plus basse que le minimum du potentiel mais il faut réinterpréter la fonction d'onde). Vous avez déjà entendu parler de l'équation de Dirac ? Qu'est-ce que ça implique l'équation de Dirac ?
- Pouvait-on prévoir le fait que les solutions se répartissent en solutions paires et impaires ? Que se passe-t-il si le puits de potentiel n'est pas indépendant du temps ? Que se passe-t-il pour une particule dont l'énergie initiale est supérieure à celle du « haut » du puits ? Pouvait-on prévoir l'ordre de grandeur de l'énergie du premier niveau quantifié ? Est-ce que ces phénomènes sont purement quantiques ? Est-ce que le modèle d'un puits fini est bien adapté à l'atome d'hydrogène ?
- Retrouver la quantification du modèle de Bohr à partir de la relation de De Broglie. Détailler le calcul de la constante de normalisation de la fonction d'onde dans le puits de potentiel infini ; quels changements apporter si on tient compte de la masse finie du noyau ? Retrouver la distance

moyenne entre électron et noyau pour l'orbitale 1s. Expliquer comment apparait la quantification lors de la résolution de l'atome d'hydrogène. Connaissez-vous d'autres potentiels avec une quantification? Expliquez la valeur limite de la série de Balmer, qu'est-ce qui se passe si le puits n'est plus infini?

- **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?**

Commentaires

On peut faire la corde de Melde en vrai. Il y a eu quelques imprécisions sur la continuité de la fonction d'onde, je n'ai pas été assez rigoureuse sur la justification des conditions aux limites (qui sont le coeur de la leçon). Applications.

4 Annexe

p 101 du dalibard beaucoup de références!

4.1 Applications

Approximation des potentiels coulombiens atomiques. Sandwich de AlGaAs-GaAs-AlGaAs. Optoélectronique.