

## Application du modèle de Bohr

Système: électron gravitant autour d'un noyau immobile

Référentiel: terrestre supposé galiléen.

Bilan des forces: interaction coulombienne

$$\vec{F}_{\text{el. p} \rightarrow \text{e}^-} = \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \vec{e}_r$$

on néglige l'attraction gravitationnelle

On applique le PFD:  $m_e \frac{d\vec{v}}{dt} = \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \vec{e}_r$

en coordonnées radiales  $\frac{d\vec{v}}{dt} = -\frac{v^2}{r} \vec{e}_r$

$$\text{En remplaçant: } \frac{m_e v^2}{r} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \Rightarrow m_e v^2 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

On écrit  $\|\vec{L}\|_n = n\hbar$

par définition  $\vec{L} = m_e \vec{r} \vec{v}$  i.e.  $m_e r^2 \dot{\varphi} = n\hbar$

en remplaçant:  $m_e \left( \frac{m_e v^2}{n} \right) r^2 = n^2 \hbar^2$

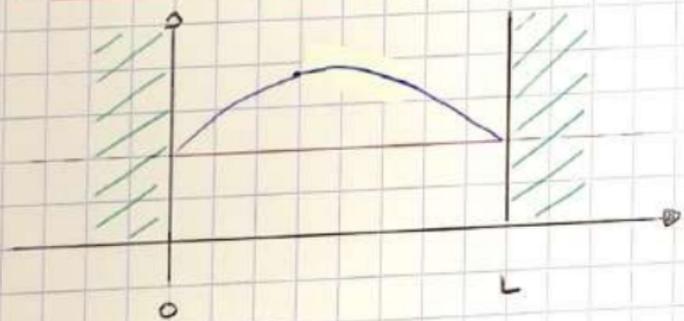
$$\text{ou } m_e \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \right) r^3 = n^2 \hbar^2 \Rightarrow r_n = \frac{n^2 \hbar^2 \times 4\pi\epsilon_0}{m_e e^2}$$

$$v_n = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 n \hbar}$$

# Mécanique quantique

## Particule dans un puits de potentiel

### 1. Particule dans un puits infini



analyse classique:

$E > V(x)$  : La particule peut évoluer librement dans  $[0, L]$  mais ne peut sortir des puits.

$f(x) = \frac{1}{L}$  : est uniforme ( $\int_0^L f(x) dx = 1$ ) EER

version quantique:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \Leftrightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0$$

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$\psi(x) = A \cos(kx) + B \sin(kx)$$

conditions limites:  $\psi(0) = \psi(0^+) = 0$  ;  $\psi(L) = 0$   
⊕ condition de normalisation

⚠ pas de condition  
sur  $\frac{d\psi}{dx}$

2 inconnues, 3 contraintes  $\Rightarrow$  on ne peut pas prendre n'importe quelle valeur de  $k \Rightarrow$  quantification de  $k$ .

$$\Psi(0) = 0 \Rightarrow A = 0 ; \Psi(L) = 0 \Rightarrow B \sin(kL) = 0$$

$$B \neq 0 \Rightarrow \sin(kL) = 0$$

normalisation  $\rightarrow$

$$\text{donc } \underline{k_n L = n\pi} \quad n \in \mathbb{N}^*$$

On a quantification des valeurs de  $k$  qui ne peut prendre qu'un nombre  $\infty$  mais dénombrable de valeurs  $\underline{k_n = \frac{n\pi}{L}}$ ,  $n \in \mathbb{N}^*$

$\rightarrow$  L'énergie de la particule ne peut prendre elle aussi qu'un nombre infini dénombrable de valeurs

$$E_n = \frac{\hbar k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2$$

$\rightarrow$  La fonction d'onde de l'état  $n$  est :

$$\Psi_n(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < 0 \text{ ou } x > L \\ B_n \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) & \text{si } x \in [0, L] \end{cases}$$

$$\int_0^L |\Psi_n(x)|^2 dx = 1 \Leftrightarrow |B_n|^2 \int_0^L dx \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) = 1$$

$$\Leftrightarrow \frac{|B_n|^2}{2} \int_0^L dx \left(1 - \cos\left(\frac{2n\pi x}{L}\right)\right) = 1$$

$$\Leftrightarrow \frac{|B_n|^2}{2} \left[ x - \sin\left(\frac{2n\pi x}{L}\right) \times \frac{L}{2n\pi} \right]_0^L = 1 \Leftrightarrow |B_n| = \underline{\sqrt{\frac{2}{L}}}$$

① Confinement et quantification : énergie toujours quantifiée  
 $\rightarrow \neq$  particules classiques  $\rightarrow$  cf. Franck-Hertz

② Énergie des fondamentaux :  $E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}$   $\leftarrow$  symétrique, énergie fondamentale  $> 0$ , conséquence des confinement, principe d'indétermination de Heisenberg.  $E_{\text{min}}$

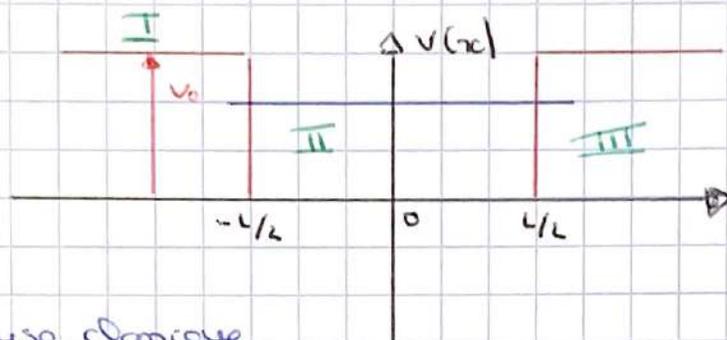
$$\Delta x \Delta p \simeq \hbar \Rightarrow \Delta p \simeq \frac{\hbar}{L} \leftarrow \text{ordre de grandeur de l'impulsion}$$

$\frac{\Delta p^2}{2m}$  : énergie cinétique typique minimale

$$E_c = \frac{\hbar^2}{2mL^2}$$

quand  $n^2$ , nb de niveaux  $(n+1)$ ,  $\rightarrow$  mail pour voitures.

## 2. Particule dans un puits fini



### analyse classique

- $0 < E < V_0$ : La particule ne peut pas sortir du puits (état lié)
- $E > V_0$ : La particule peut être dans tout l'espace (état de diffusion)

### version quantique

$$\text{II: } \frac{d^2\psi}{dx^2} + k_{II}^2\psi = 0 \quad k_{II} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$\text{I/III: } -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V_0\psi = E\psi$$

$$\Leftrightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} + \underbrace{2m(E-V_0)}_{\hbar^2} \psi = 0 \quad \Leftrightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} - k_I^2\psi = 0$$

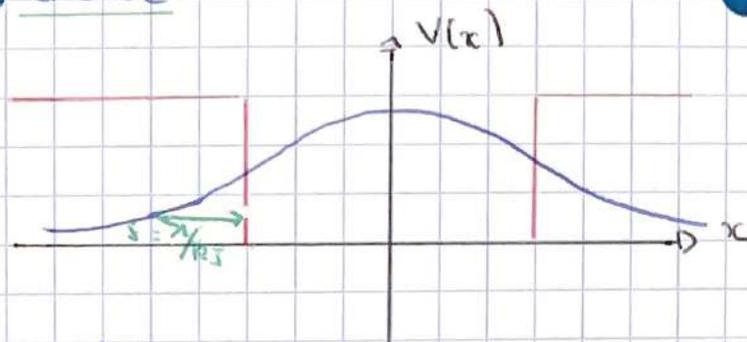
$$\psi(x) = \begin{cases} A_I e^{k_I x} + B_I e^{-k_I x} & x < -\frac{L}{2} \\ A_{II} \cos(k_{II} x) + B_{II} \sin(k_{II} x) & -\frac{L}{2} < x < \frac{L}{2} \\ A_{III} e^{k_I x} + B_{III} e^{-k_I x} & x > \frac{L}{2} \end{cases}$$

$$\psi(x \rightarrow \pm\infty) = 0 \text{ (normalisation)} \Rightarrow B_I = A_{III} = 0$$

$$\begin{cases} \psi(-\frac{L}{2}) = \psi(-\frac{L}{2}) \\ \psi(\frac{L}{2}) = \psi(\frac{L}{2}) \\ \frac{d\psi}{dx}(\frac{L}{2}) = \frac{d\psi}{dx}(\frac{L}{2}) \\ \frac{d\psi}{dx}(-\frac{L}{2}) = \frac{d\psi}{dx}(-\frac{L}{2}) \end{cases}$$

4 inconnues, 5 contraintes  
 $\Rightarrow$  quantification de l'énergie

## Fonction d'onde



état fondamental d'énergie  $E_1 < E_1^{(0)}$  et de fonction d'onde sym.

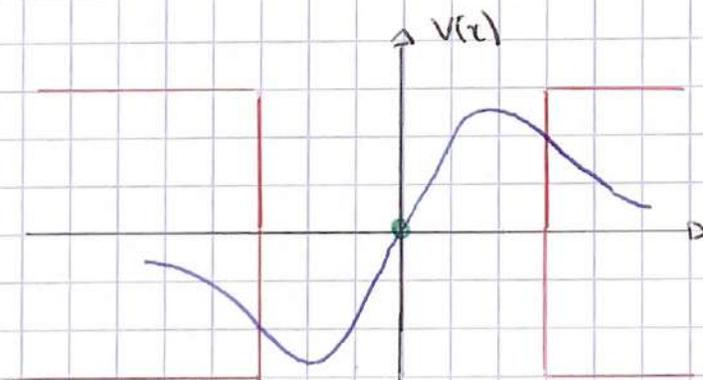
$$\delta = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E_1)}}$$

se fait quoi si les puits ont  $\delta$ .

La proba. de présence est  $\neq 0$  en dehors des puits (onde de matière évanescence).  $\delta$  est l'og. de l'épaisseur de peau.

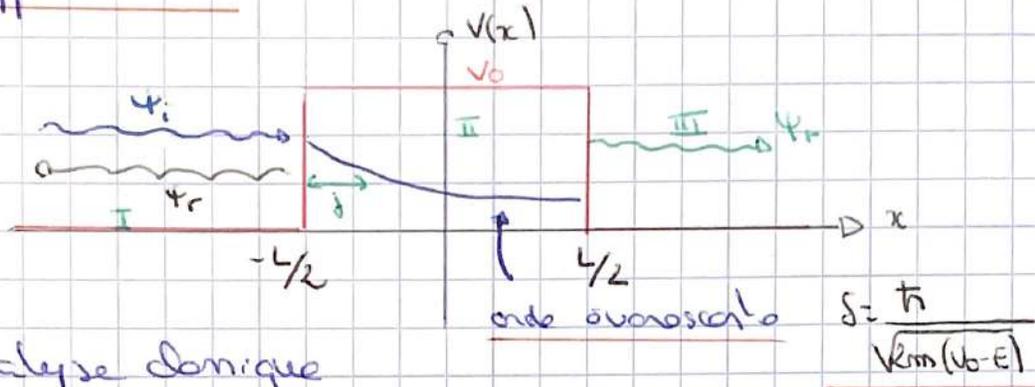
$$L_{\text{eff}} \approx L + 2\delta$$

$$E_c = \frac{\hbar^2}{2mL_{\text{eff}}^2} = \frac{\hbar^2}{2m(L + 2\delta)^2} = \frac{\hbar^2}{2mL^2} \left(1 - \frac{4\delta}{L}\right)$$



• 1 nœud : énergie plus haute.

### 3. Effet tunnel



analyse classique

- $E < V_0$ : la particule rebondit sur la barrière
- $E > V_0$ : la particule peut franchir la barrière et évoluer dans tout l'espace.

version quantique:

I / III :  $\frac{d^2\psi}{dx^2} + k_I^2\psi = 0$        $k_I = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$

II :  $\frac{d^2\psi}{dx^2} - k_{II}^2\psi = 0$        $k_{II} = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$

conditions limites:  $\psi$  et  $\frac{d\psi}{dx}$  continues en  $\pm \frac{L}{2}$        $E < V_0$

$$\psi(x) = \begin{cases} A_I e^{ik_I x} + B_I e^{-ik_I x} & x < -\frac{L}{2} \\ A_{II} \cosh(k_{II} x) + B_{II} \sinh(k_{II} x) & -\frac{L}{2} < x < \frac{L}{2} \\ A_{III} e^{ik_I x} + B_{III} e^{-ik_I x} & x > \frac{L}{2} \end{cases}$$

- pourquoi  $-\frac{L}{2} < x < \frac{L}{2}$

La particule arrive de  $-\infty$  donc  $B_{III} = 0$ . 5 inconnues, 5 contraintes.  $\Rightarrow$  pas de quantification.

$$\psi(x,t) = \psi(x) e^{-i\frac{E}{\hbar}t} = \psi(x) e^{-i\omega t}$$

$$\psi_i(x,t) = A_I e^{i(k_I x - \omega t)}$$

$$\psi_r(x,t) = B_I e^{-i(k_I x + \omega t)}$$

$$\psi_t(x,t) = A_{III} e^{i(k_I x - \omega t)}$$

Il y a une probabilité de présence non nulle de la particule de l'autre côté. Elle a traversé par effet tunnel.

R: ● coeff. de réflexion en probabilité ●  
T: ● coeff. de transmission en probabilité ●

$$\underline{R + T = 1}$$

$$\underline{R = \frac{\|J_r\|}{\|J_i\|} = \frac{|\Psi_r|^2}{|\Psi_i|^2} = \frac{|B_i|^2}{|A_i|^2}}$$

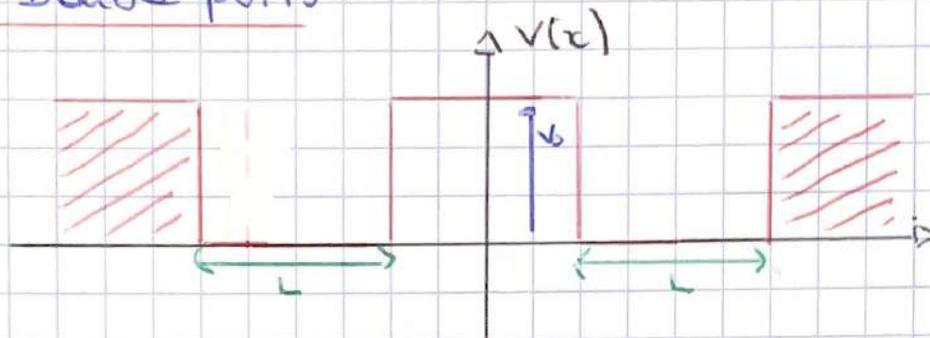
$$\underline{T = \frac{\|J_t\|}{\|J_i\|} = \frac{|\Psi_t|^2}{|\Psi_i|^2} = \frac{|A_{tr}|^2}{|A_i|^2}}$$

Dans l'hypothèse de la barrière épaisse  $L \gg \delta$

$$\underline{T = \frac{16(V_0 - E)E}{V_0^2} e^{-2\gamma L}}$$

$$\underline{\Delta x \approx \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}} \approx \delta}$$

## 4. Double puits



### Double puits $\infty$

$V_0 \rightarrow +\infty$  : la part est confinée dans un seul puits.

→ Les 2 puits sont indépendants

→  $E_n^{(0)} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2}$  est doublement dégénérée  $\Psi_n^{(01)} / \Psi_n^{(02)}$

$$\Psi_n^{(1)} = \frac{\Psi_n^{(01)}(x) + \Psi_n^{(02)}(x)}{\sqrt{2}} \quad \Psi_n^{(2)} = \frac{\Psi_n^{(01)}(x) - \Psi_n^{(02)}(x)}{\sqrt{2}}$$

↓  
sym.

↓  
anti-sym.

### Double puits fini

$V_0 < +\infty, D < +\infty$

onde évanescente dans la barrière :  $L_{\text{eff}} = L + \delta$

$$\delta = \frac{\pi}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}$$

↗ des énergies par rapport au cas  $\infty$

• Effet tunnel : particule dans les deux puits en même temps → il existe un état d'énergie  $<$  à celle du fondamental des puits  $\infty$ .

→ potentiel pair : fonction d'onde sym. ou anti-sym.

