# LP40 - Confinement d’une particule et quantification d’énergie

Rapport jury : Cette leçon est une leçon de physique et ne doit donc pas se limiter à des calculs. Le lien entre le confinement et la quantification doit être explicité. 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. La justification des conditions aux limites est essentielle. Une justification physique des conditions aux limites adoptées est attendue. 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.

Niveau: Licence
Pré-requis: LC39, mécanique des ondes, opérateur hamiltonien, inégalité d'Heisenberg
Bibliographie:


[1] Marie-Noëlle SANZ et al. Physique tout-en-un PC-PC*. Dunod, 2016
[2] José-Philippe PEREZ, Robert CARLES et Olivier PUJOL. Quantique, fondements et applications. de boeck, 2013.
[3] Claude COHEN-TANNOUDJI, Bernard DIU et Franck LALOË. Mécanique quantique, tome 1. Hermann, 1997.
[4] Jean-Louis BASDEVANT. Mécanique quantique. Éd. de l’École polytechnique, 2001
http://romain.bel.free.fr/agregation/Lecons/LP60.pdf


→ Programme Python

Idées à faire passer : La quantification vient du confinement !

**Introduction:**
Certaines grandeurs varient continûment en physique et d’autres de manières discrètes. C’est en quantique où la notion de quantification de certaines grandeurs physiques est la plus visible. En effet, nous allons voir que l’énergie est une grandeur quantifiée si la particule formant le système étudié est confinée. Il n’est pas rare qu’en physique, les objets étudiés soient piégés dans un volume délimité par exemple les molécules d’une phase gazeuse ou liquide dans un récipient, les électrons de conduction dans l'échantillon conducteur. On sait réaliser aujourd’hui confinés dans des boîtes de taille nanométrique (boîte quantique). Comment modéliser le confinement d’une particule quantique ?

## I - Mise en évidence de la quantification

Les sources lumineuses à vapeur atomique n’émettent pas un spectre continu mais seulement sur certaines fréquences bien particulières. (Confirmer par l’expérience de Franck et Hertz). Balmer puis Ritz, ont établit des lois empirique permettant de décrire ce spectre discontinu. Interprétation en termes de photons : quantification des niveaux d’énergie.

Plusieurs modèles ont tentés d'expliquer cette quantification d'énergie atomique.
Modèle de Thomson (1903) : appelée aussi "modèle plum pudding". L'atome est composé d'électrons plongés dans une "soupe" de charge positive pour équilibrer la charge négative des électrons.

Modèle de Rutherford (1911): En 1908, Marsden et Geiger observèrent en bombardant des atomes d'or avec des particules alpha d'énergies environ égale à 4 MeV que certains particule alpha étaient fortement déviés contrairement à la théorie de Thomson qui ne prévoyait que de faibles déflexions. L'atome ne peut pas être "plein".
Pour expliquer ces expérience, Rutherford conçut un modèle planétaire dans lequel un noyau central positif contient l'essentiel de la masse et les électrons tournent autour du noyau sous l'effet de l'attraction coulombienne.
Mais ce modèle n'explique pas la stabilité de l'atome.

Modèle de Bohr (1913): Il conserve le modèle planétaire conçu par Rutherford, et ajoute les hypothèses suivantes:
-Électron ne peut se trouver que sur l'une des orbites circulaires de l'atome qui correspond à un niveau d'énergie donné de l'atome. Cette orbite est stable et l'électrons n'y rayonne aucune énergie (état stationnaire).
-Le niveau d'énergie le plus bas (niveau fondamental) correspond à l'orbite la plus proche du noyau. Plus n est grand, plus le rayon est de l'orbite est grand et plus l'énergie est élevée.
-L'électron émet et absorbe de l'énergie que lorsqu'il passe d'une orbite à une autre → énergie qu'il émet ou absorbe est quantifiée et correspond à un photon d'énergie égale à la différence entre les 2 niveaux.
-Bohr considère que le moment cinétique orbital **L** de l'électron est quantifié en se basant sur des résultats expérimentaux sur les raies, en appliquant le PFD on a $E_n = -13.6/n^2$ (eV)
Ce qui est en accord avec l'expérience.

*Limites du modèle:*
-Le modèle de Bohr reproduit bien les spectres de raies des espèces atomiques à un seul électron mais échoue pour les atomes et ions polyélectroniques.
-Le modèle est celui d'un électron en mouvement accéléré (la vitesse de l'électron est constante en module mais change de direction). Toutes les observations dans le domaine des propriétés des charges électriques montrent qu'une telle charge en mouvement accéléré devrait émettre de l'énergie sous forme d'ondes électromagnétiques. Si l'électron de l'atome était vraiment une charge ponctuelle en rotation autour du noyau, l'atome devrait émettre de la lumière jusqu'à ce que l'électron tombe finalement dans le noyau!

La physique quantique s'impose alors comme une nécessité pour l'étude de la physique atomique, car la physique classique ne suffit pas.

## II - Confinement et quantification

### 1) Modèle simple : le puits infini

[1] [4]
-Modélisation d'un puits infiniment profond (approche unidimensionnelle). La particule quantique est supposée soumise à un champ de force qui dérive du potentiel modélisé par

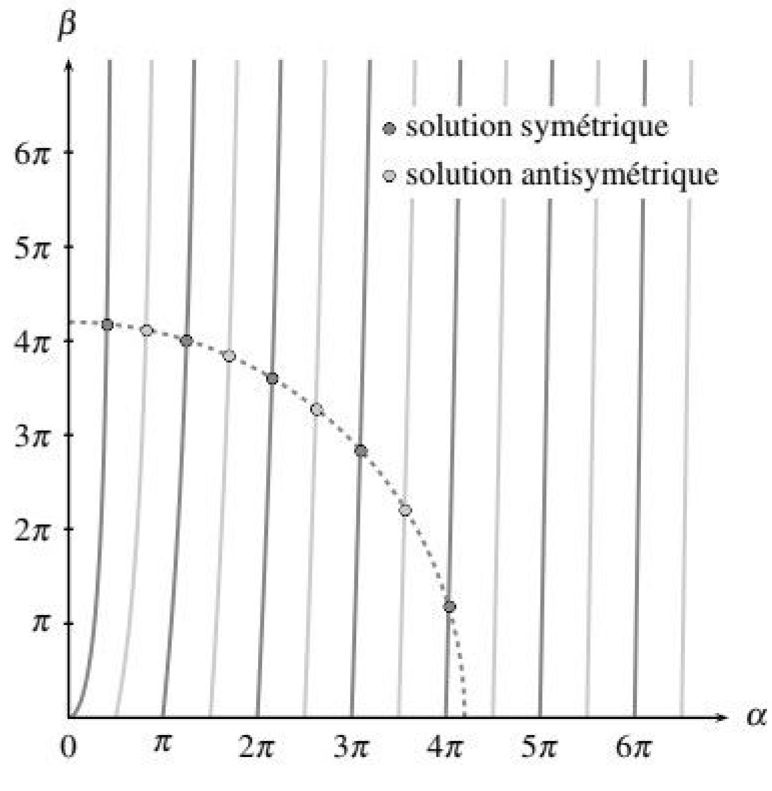
un puits de potentiel (si l'énergie de la particule E< $V_o$ du puits et lorsque le potentiel varie rapidement à l'échelle de la longueur d'onde de de Broglie).
-On admet que la fonction d'onde ψ est continue.
-Résolution Schrödinger indépendant du temps: cas E ≤ 0 inintéressant : fonction d'onde nulle, cas E > 0: normalisation, énergies quantifiées.
-Remarque : on garde unique n>0 (n nombre quantique principal) et on constate que la densité de probabilité de présence possède bien les mêmes symétries que le potentiel → propriété importante : les propriétés de symétrie du potentiel se retrouvent dans la fonction d'onde propre.
De plus elle est nulle à l'extérieur du puit, la particule quantique ne peut pas sortir du puit → état liée de la particule quantique.
-Montrer les premiers modes propres/ niveaux d'énergies. Niveaux d'énergie en n² : aux grands n, l'écart relatif est en 2/n et on retrouve des niveaux de plus en plus proches.
Remarque : Alors qu'une particule classique piégée dans un puits de potentiel infiniment profond peut avoir une énergie arbitrairement petite, nous constatons que l'énergie d'une particule quantique ne peut pas être inférieure au niveau d'énergie fondamental $E_1$. De plus, l'énergie minimale de la particule quantique est d'autant plus élevée que la largeur a du puits est petite, c'est-à-dire que la particule quantique est mieux localisée: ceci explique en particulier pourquoi la physique de l'infiniment petit et des particules élémentaires est aussi la physique des hautes énergies. Aussi, on remarque que $E_1$ est d'autant plus faible que la masse est élevée → les effets quantiques s'estompent.
-[1] Points communs et différences avec la corde de Melde. Insister sur le fait que la quantification de k est commune aux deux situations, tandis que celle de E est spécifique au problème quantique. Point important : $\lambda_{DB}$ /2 est un sous-multiple de la largeur du puits, comme L pour la corde vibrante.
- Comparer le fondamental à l'énergie minimale obtenue avec Heisenberg.
**Conclusion** : c'est le confinement qui est à l'origine de la quantification d'énergie.

→ Applications [2] [1]
-Ordres de grandeur d'énergies pour les nucléons d'un noyau, les électrons d'un atome. Calcul pour un être humain dans une pièce : c'est totalement négligeable.
- Exemple des polymères conducteurs, qui servent à faire des écrans OLED. TODO : s'informer. Montrer que la longueur d'onde est proportionnelle au nombre d'atomes.

### 2) Généralisation au puits fini

[1] [4]
L'énergie de la particule quantique n'est plus négligeable devant la profondeur du puits $V_o$.
-Modélisation : trois sections, puits symétrique par rapport à x = 0.
-On a vu que les symétries du potentiel se retrouvent dans la densité de probabilité : cela nous permet de séparer les cas symétrique et antisymétrique (pair et impair). Lorsque le potentiel est symétrique, on constate qu'il y a 2 fonction d'ondes propres associés à l'énergie E, la combinaison linéaire des solutions donne: $\varphi_s(x)$ est la solution symétrique, elle est paire et $\varphi_A(x)$ est la solution antisymétrique, elle est impaire.

-Écrire l'équation de Schrödinger pour les 3 domaines + résolution (on s'intéressera uniquement au cas où les états sont liée $0<E<V_o$, car si $E>V_o$, la particule est délocalisée dans tout l'espace, et l'énergie n'est pas quantifiée, elle varie de façon continue → état de diffusion. On voit alors que la quantification de l'énergie est dû au confinement!!)
-Conditions aux limites très importantes : ψ et dψ / dx sont continues. Démontrer la continuité de la dérivée en supposant ψ continue.
Après calculs on a :
$\beta = \alpha.\tan(\alpha)$ (1)
$\beta = -\alpha.\cot an(\alpha)$ (2)
On a $\alpha^2+\beta^2 = ma^2V_o/2\hbar^2$ (3)
Une construction graphique permet d'obtenir les solutions possible pour déterminer les valeurs de α et β:




(1) trait continu sombre
(2) trait continu clair
(3) cercle centré sur l'origine de rayon racine($ma^2V_o/2\hbar^2$)

Les solutions obtenues sont en nombre fini et alternant entre solution symétriques et antisymétriques → Quantification de l'énergie.

<u>Remarque :</u> L'ensemble des restrictions imposées aux fonctions d'ondes propres : conditions de continuité + impossibilité de diverger à l'infini ont conduit à l'origine de la quantification de l'énergie.

- Montrer niveaux d'énergie et densité de probabilité de présence pour un puits fini.

Le nombre de niveaux d'énergie est d'autant plus élevé que le puits de potentiel à une largeur importante ou que la particule quantique à une masse important → les niveaux d'énergies sont très resserrées au point de former un continuum de niveaux d'énergie : limite classique.

-Profondeur de pénétration : on constate qu'il y a une probabilité de présence non nul en dehors du puit (chose impensable en mécanique classique) → effet purement quantique. La fonction d'onde propre varie proportionnellement à exp(qx) dans la région 1, et en exp(-qx) dans la région 3 : elle est atténuée sur une distance caractéristique $\delta=1/q$ que l'on identifie comme la distance caractéristique de pénétration de la particule quantique dans ces régions. Ouverture sur l'effet Tunnel.
-Interprétation à l'aide de l'inégalité temps-énergie d'Heisenberg.
-Comparaison avec le puit infini des valeurs des énergies des états stationnaires : $E_{fini}<E_{infini}$, et l'écart augmente avec n. On peut interpréter ce résultat en montrant que l'effet de confinement, que nous avons discuté pour le puits de profondeur infinie, est moins important pour la particule quantique piégée dans un puits de profondeur finie. En effet, en raison de la pénétration de la fonction d'onde en dehors du puits, la particule quantique est piégée dans un puits de largeur effective supérieure à a, $a_{eff}=a+2\delta$

### 3) Application à l'atome d'hydrogène

[3][4]
https://martinbourhis.monsite-orange.fr/file/c9633c2dd18bfad564a88f715fbddb6a.pdf
http://chaours.rv.pagesperso-orange.fr/physique/Quant/hydrogene.htm
https://fr.wikipedia.org/wiki/Atome_d%27hydrog%C3%A8ne#%C3%89quation_de_Schr%C3%B6dinger_%E2%80%93_S%C3%A9paration_radiale-angulaire

**Conclusion:**
Application aux hétérostructure à semi-conducteurs, horloge à atome froid ( PH suet)
On remarque que dans le cas du puit de potentiel fini on a également une quantification de l'énergie. La quantification est dû au confinement/conditions aux limites. Dans le cas de l'atome d'hydrogène, une résolution de l'équation de Schrödinger avec le potentiel coulombien aboutirait également à une quantification des niveaux d'énergies.

**Remarques:**
Ce n'est pas une propriétés quantique, la propriété quantique est la dualité onde/corpuscule.
-Tout cela n'est pas faisable en 30 min mais j'ai présenté les différents points possible qui peuvent être abordés sur un sujet comme celui-ci!
-Ne pas hésiter à abuser des ODG, des AN car leçon très théoriques.

**Question:**
-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 ?
-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 apparaît 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 ?
-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 ? Non, cela à lieu dès qu'on a des phénomènes ondulatoires.
-Est-ce que le modèle d'un puits fini est bien adapté à l'atome d'hydrogène ?
-Comment justifier physiquement la continuité de la dérivée première de la fonction d'onde ? Il existe des solutions dans les zones interdites classiquement. Dans ce cas se pose la question des caractéristiques de la fonction d'onde à la frontière des puits et de la barrière. L'onde étant régie par l'équation de Schrödinger, qui s'exprime en fonction de la dérivée seconde de psi, impose que psi et psi' soient continues en tout point, y compris à la frontière. Si psi n'était pas continue, on ne pourrait pas calculer psi', et si psi' n'était pas continue, psi'' ne serait pas calculable. Donc, du fait de la forme de l'équation de Schrödinger, psi' doit être continue dans l'intervalle de définition de psi. Dans le cas d'un puits infini, de domaine de définition psi se limite à l'intérieur du puits ($|x|<a/2$). Donc la condition de continuité ne tient plus en $\pm a/2$.
-Expérience Franck Hertz
https://fr.wikipedia.org/wiki/Exp%C3%A9rience_de_Franck_et_Hertz

Autres leçons possibles:
Quantification de l'énergie dans les atomes :
http://romain.bel.free.fr/agregation/Lecons/LP58.pdf