Titre : CONFINEMENT D'UNE PARTICULE ET QUANTIFICATION DE L'ENERGIE

Présentée par : Gabriel GOURAUD **Rapport écrit par** : PE NIELEN

Correcteur : Jean HARE **Date** : 10/02/2020

Bibliographie de la leçon :			
Titre	**Auteurs**	**Éditeur**	**Année**

Plan détaillé

Niveau choisi pour la leçon : CPGE

Pré-requis : équation de Schrödinger, inégalités de Heisenberg, relation de de Broglie, corde de Melde.

Ne pas balancer tous les résultats dès l'introduction

Introduction : problème de la constitution de la matière, modèle planétaire, instabilité de l'atome en électrodynamique classique, conduit au modèle de Bohr avec quantification des orbites, ce que l'on retrouve avec le formalisme de la mécanique quantique.

« Avec les mains »:
$\Delta x \Delta p \geqslant \frac{\hbar}{2} \rightarrow E \geqslant \frac{\hbar^2}{8ma^2}$, avec a taille de l'atome. Il existe donc un fondamental. (état d'énergie minimale)

Quantification : analogie avec la corde de Melde :
$E = \frac{\hbar k^2}{2m}$ k ^2 est quantifié donc l'énergie est quantifiée.

On raffine :

I. Puit infini

On considère un puit infini compris entre $x = 0$ et $x = a$, on cherche des solutions de l'équation de Schrödinger (ES) sous la forme :
$\psi(x,t) = \varphi(x) e^{-i\frac{Et}{\hbar}}$ vérifiant l'équation de Schrödinger stationnaire $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi}{dx^2} = E\varphi$

1) Mise en équation et résolution

La fonction d'onde stationnaire a la forme : (plus correctement : « la solution de l'équation de Schrödinger stationnaire » ou « la gonction d'onde de l'état stationnaire », d'énergie E)

$$\varphi(x) = A\cos(kx) + B\sin(kx) \quad \text{avec } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}.$$

Il faut justifier ici la condition d'annulation de $\varphi(x)$ aux deux extrémités
La continuité de φ en $x = 0$ donne : $k = \frac{n\pi}{a}$, n entier naturel et $A = 0$.
Il faut justifier le choix de restreindre n aux entier naturels (et non relatifs) et de plus il faut exclure $n = 0$

La condition de normalisation $\int_0^a |\varphi(x)|^2\, dx = 1$ donne : $B = \sqrt{\frac{2}{a}}$.

La solution est donc donnée par : $\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$.
Slides : tracé des fonctions d'onde, on remarque que le nombre de zéros est égal à $n+1$.

2) Énergie : (la quantification des vecteurs d'onde entraine celle des énergies)

$$E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = n^2\left(\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}\right) = n^2 E_1$$

Ici, (1) faut expliquer en quoi l'analogie avec la corde Melde est limitée car la corde n'a pas elle, d'énergie quantifiée (2) on devrait faire un commentaire en lien avec l'inégalité de Heisenberg

3) Ordres de grandeurs

- électron confiné dans un atome de taille $a \approx 0{,}1$ nm , avec $m \approx 10^{-30}$ kg on a $E_1 \approx 7$ eV qui est la bonne échelle d'énergie pur des états atomique (émission optique UV ou visible)
- électron confiné dans une molécule polyène conjuguée de taille $a \approx 1$ nm , avec $m \approx 10^{-30}$ kg on a $E_1 \approx$ 0.4 eV qui est la bonne échelle d'énergie pour des niveaux moléculaire (émission optique visible ou IR)
- nucléons de masse $m \approx 10^{-27}$ kg dans des noyaux, de taille $a \approx 1$ fm *on* a $E_1 \approx 70$ MeV, ce qui est la bonne échelle d'énergie pour des reconfigurations internes à un noyau (émission gamma)

II. Puit fini

On considère un puit fini de profondeur $V_0 > 0$, compris entre $x = -a/2$ et $x = a/2$, ce qui définit trois régions I, II et III. On fixe l'origine des énergies au fond du puits

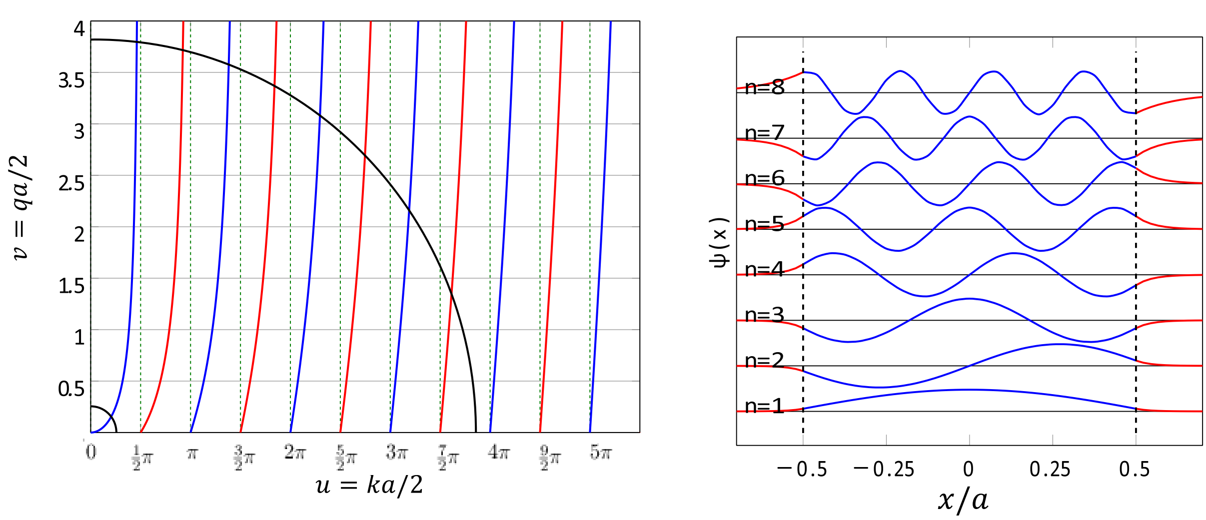
On résout l'ES stationnaire dans ces trois régions, avec k= $\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ et $k = \frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}$

Etats pairs : $\varphi_{I,III}\,(x) = A\exp(-q|x|)$ $\varphi_{II}\,(x) = B\cos(kx)$

Etats impairs : $\varphi_{I,III}\,(x) = \mathrm{sgn}(x)\,C\exp(-q|x|)$ $\varphi_{II}\,(x) = D\sin(kx)$

Les conditions de raccordement, **à expliciter et justifier**, conduisent aux équations [1]

Etats pairs : $q = k\tan(\frac{ka}{2})$ (bleu sur la figure) et impairs : $q = -k\,\mathrm{cotan}(\frac{ka}{2})$ (rouge sur la figure) que l'on résout graphiquement en utilisant la relation $q^2 + k^2 = K^2 = 2mV_0/\hbar^2$, dont le graphe est le cercle de rayon K(en noir sur la figure). Les lignes pointillées vertes sont les asymptotesdes fonctions tan et cotan , qui correspondent aux postions des états du puits infini.



Figures extraites du poly de JH

On remarque sur le graphe que l'existence des ondes évanescentes (cf. effet tunnel)[2] augmente la largeur effective par rapport a, et abaisse les niveaux d'énergie par rapport au puits infini. Cela est d'autant plus marqué que n est élevé, car l'onde évanescente est de plus en plus importante (leur profondeur est environ $\delta_n \approx \frac{1}{q} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0-E)}}$).

On note que es états pait et impairs sont alternés, que le nombre d'états est toujours supérieur ou égal à 1, et vaut $n_{max} = \mathrm{E}\left(\frac{Ka}{\pi}\right) + 1$ (E=fonction partie entière)

[1] Ici par annulation du déterminant du système linaire sur les coefficients (A,B) ou (C,D).

[2] Il ne FAUT pas parler de l'effet tunnel à ce stade, les ondes évanescentes ont leur signification en elles même et permettent de justifier les résultats présents, et notamment l'écart au puits dinfini.

Questions posées par l'enseignant

Comment on obtient l'équation de Schrödinger stationnaire ?
Pourquoi $\varphi(x)$ est-elle réelle ?
Limite classique de l'énergie pour n grand ?
Montrez que pour n grand, les niveaux sont équidistants.
Comment comprendre l'oscillation d'une particule à partir des états calculés ? Représentez qualitativement un état stationnaire.
Comment se manifeste le changement de configuration du noyau ?
Pourquoi les niveaux du puit fini sont plus bas que ceux du puits infini ? Comment évaluer la différence ?
Existe-t-il des exemples d'ondes évanescentes en physique classique ?

Commentaires donnés par l'enseignant

Les commentaires sont donnés en bleu et en rouge dans le compte rendu

Partie réservée au correcteur

Avis général sur la leçon (plan, contenu, etc.)

Le plan choisi et amiteux, car présenter correctement le puits fini et le puits infini en 40 min n'est pas chose aisée. Le pari est à peu près tenu, mais le coté pédagogique de la leçon en souffre fortement, car les points délicats ou simplement un peu subtils sont assez souvent peu explicités

Je ne saurais que recommander aux candidats moins sûrs d'eux de faire un choix.

Un compromis intéressant serait de ne traiter que le puits fini (en ne détaillant quel es états pairs pour simplifier et gagner du temps), car on peut en déduire aisément les résultats du puits infini, ce qui fait ressortir la physique.

Notions fondamentales à aborder, secondaires, délicates

Enfin il faut à la fois expliciter et justifier les différentes conditions aux limites utilisée, car le jury est, naturellement, très sourcilleux sur ce point

Il faut absolument faire ressortir le message clé *: la quantification résulte des conditions aux limites.* En ce sens c'est un effet purement ondulatoire, puisque l'on a aussi quantification des vecteurs d'onde sur la corde de Melde (ou le Fabry Perot), mais pour la corde cela n'entraîne pas la quantification de l énergie, car elle n'est pas une fonction directe de la longueur d'onde.

Montrer la photo des NC se semi-conducteurs qui est dans le poly et introduire le vocable « énergie de confinement. »

Un autre point à mon sens incontournable même si on ne fait pas le calcul des états du puits fini, et de parler des ondes évanescentes. Et du fait qu'elles augmentent un peu la largeur du puits, si du moins on n'a pas $E \ll V_0$. Pour elles, la corde de Melde ne marche plus, mais la réflexion totale interne est un parfait analogue EM.

A titre optionnel mais intéressant, si on a le temps, on peut envisager de

- Évoquer la dynamique en considérant la superposition des états n=0 et n=1
- Dire, sans calculs, ce qui est reste vrai pour un puis quelconque
- Appliqyer aux cas de la boîte de potentiel 3D (états S seulement) qui donne un puits infini d'un côté mais pas de l'autre
- Pour ceux qui savent ce que cela veut dire, regarder le portait de phase et de retrouver la quantification comme le fait que la variable d'action est une surface qui contient un nombre entier de cellules élémentaires d'aire égale à $h = 2\pi\hbar$ en vertu de l'inégalité de Heisenberg

Expériences possibles (leçon pas au programme de l'agrégation docteur)

Est-il vraiment utile de sortir la corde de Melde ?

Bibliographie conseillée

Ces concepts et calculs sont dan stous les livres de mécanque quanique, mais le poly donne les idées essentielles et les figures utiles.
On notera que dans le livre de Cohen Tannouji et al, la résolution graphique est faite en considérant l'intersection d'une sinusoïde avec une droite. Je n'aime pas, mais c'est plus simple pour ceux qui seraient fâchés avec les fonctions tan et cotan ;-)