

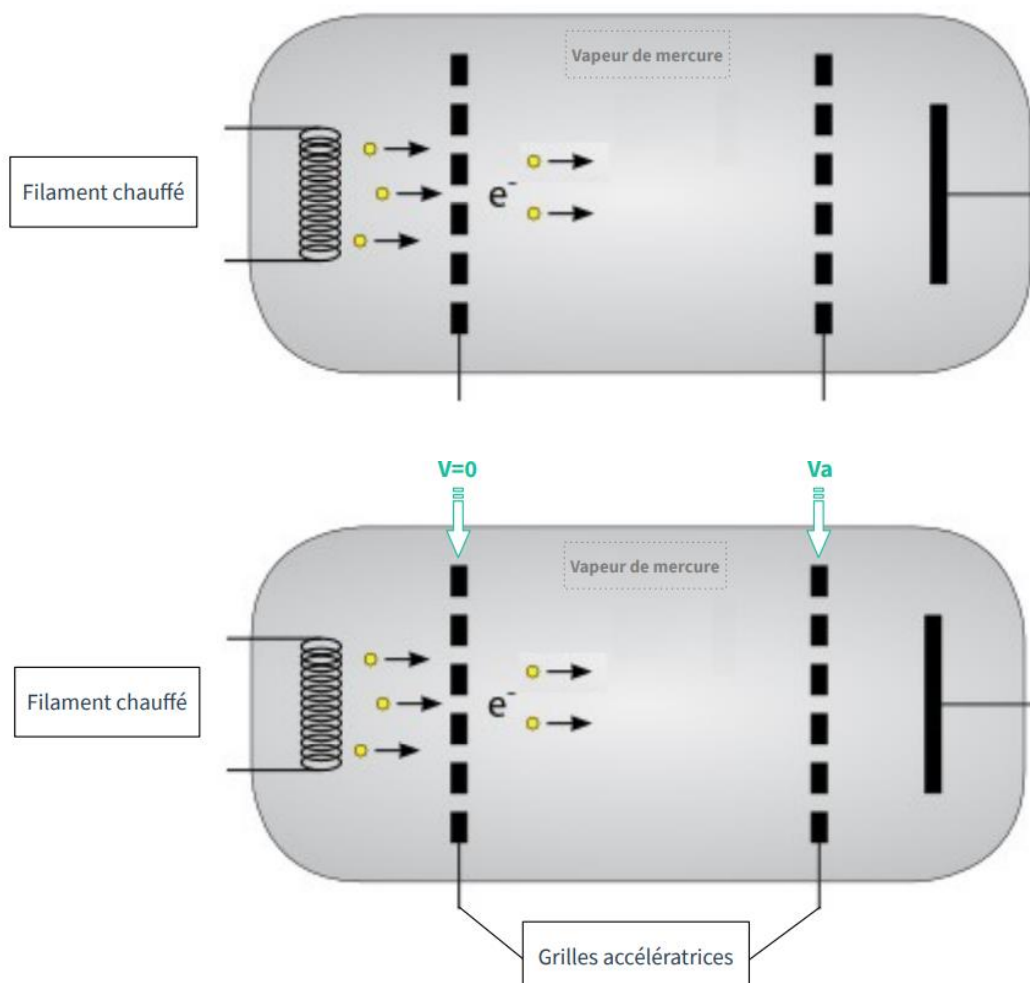
Confinement d'une particule et quantification de l'énergie

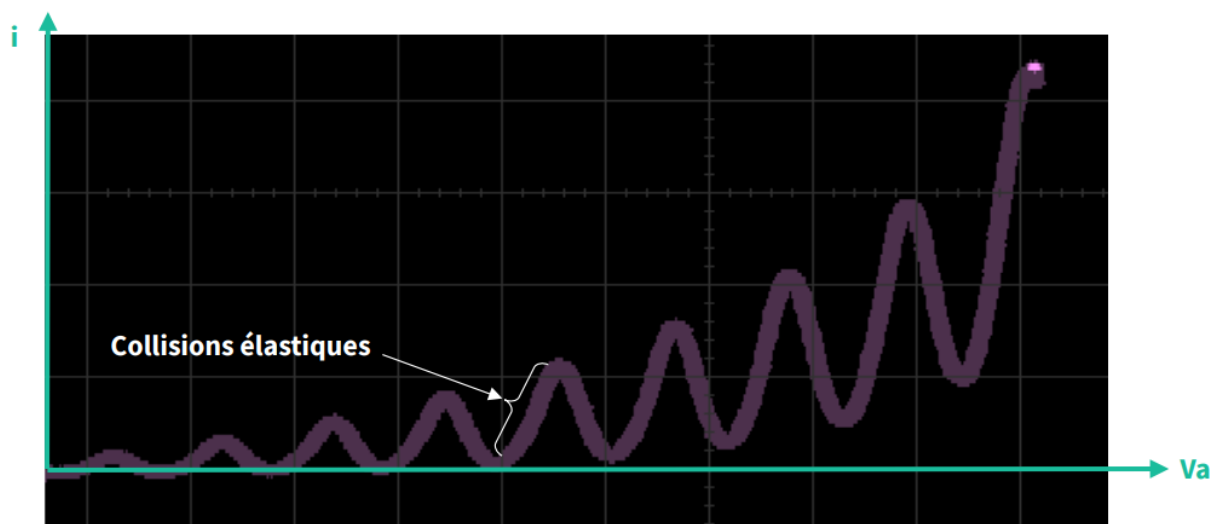
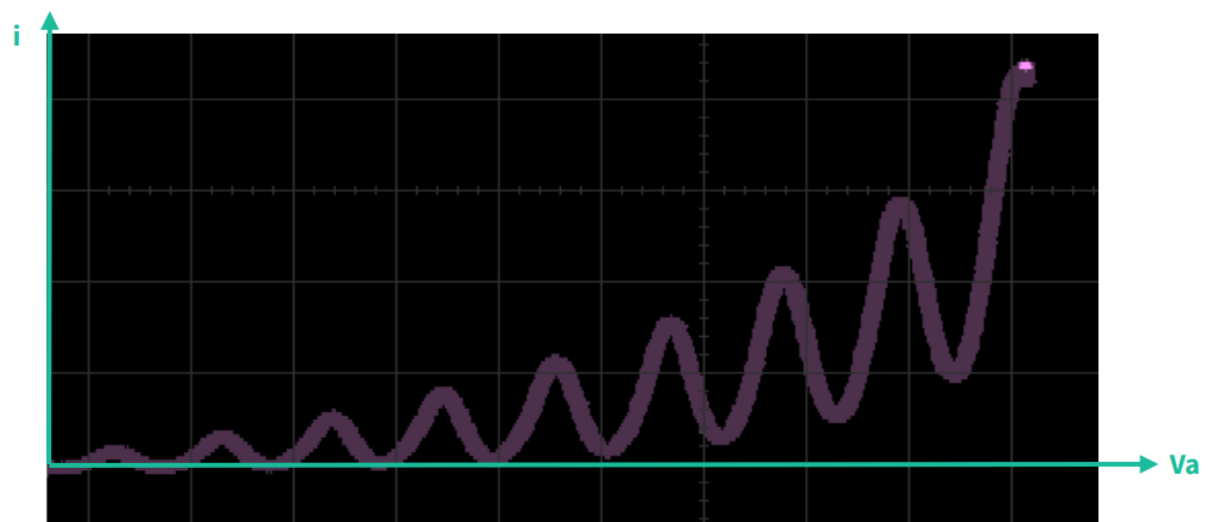
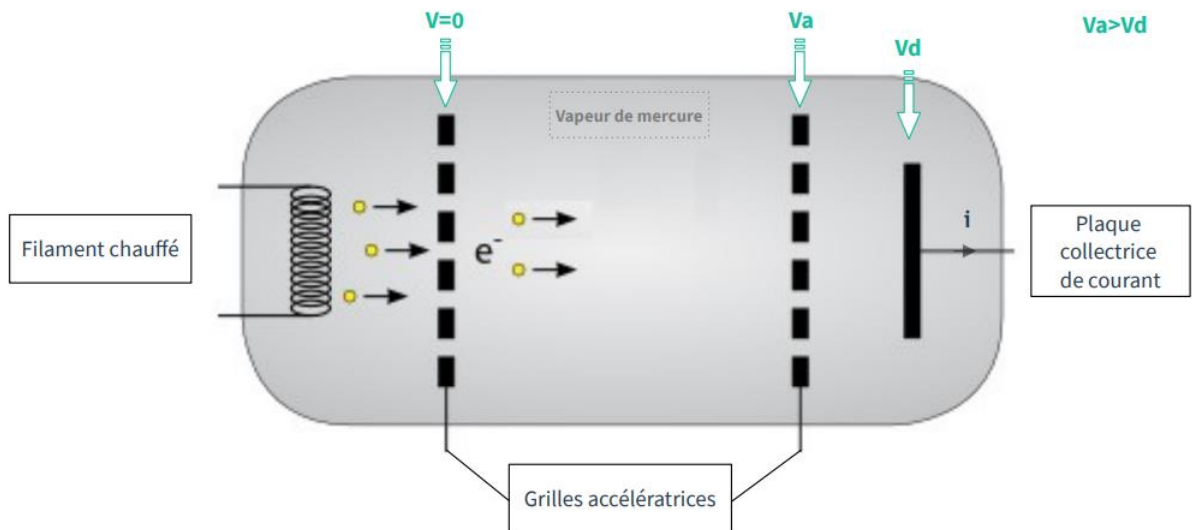
Niveau : L3

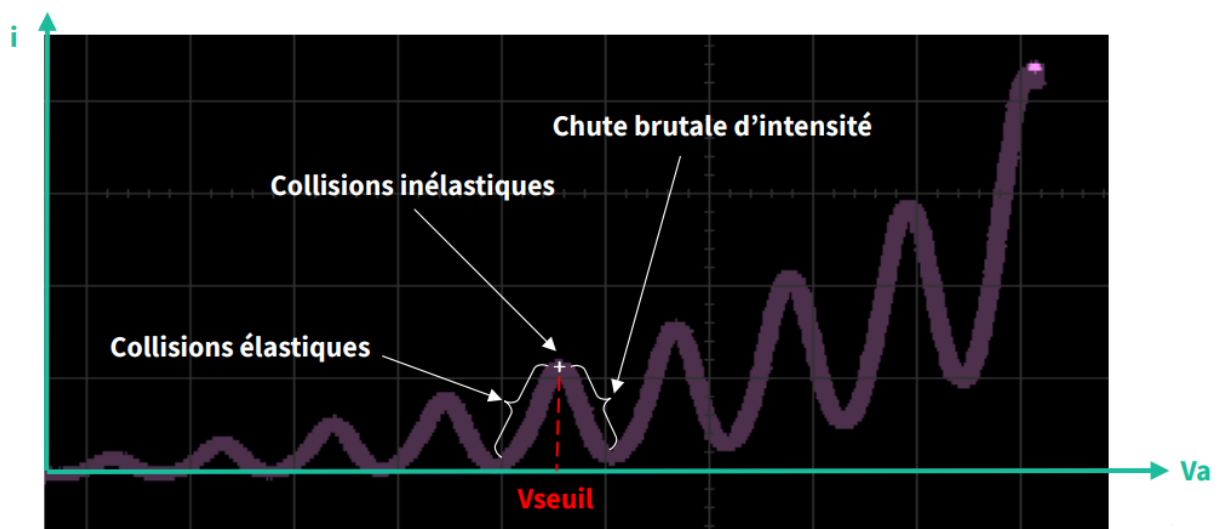
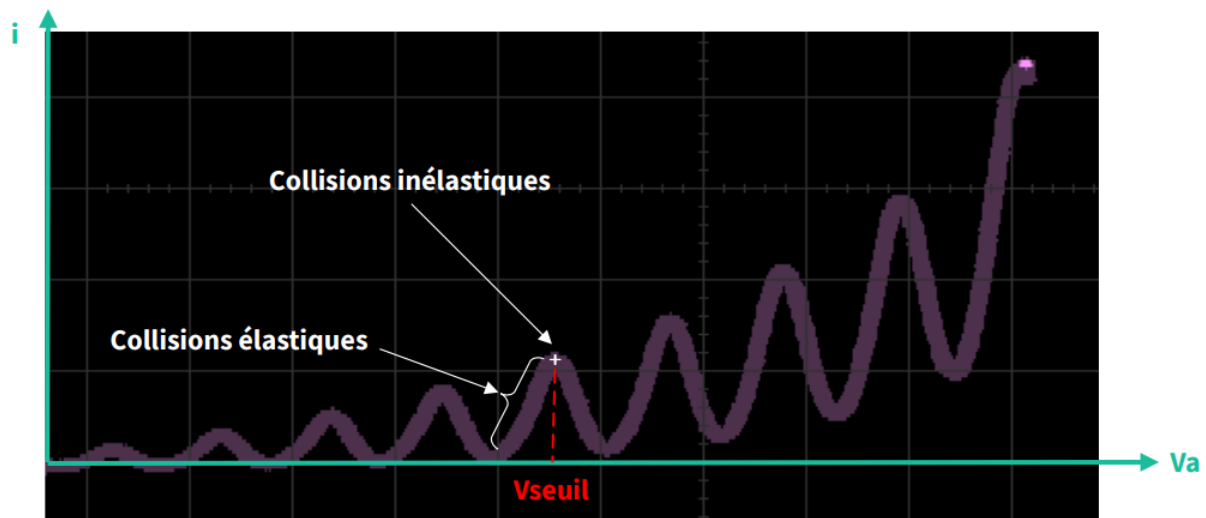
Prérequis : équations différentielles du second ordre, équation de Schrödinger, modèle de Bohr, longueur d'onde de de Broglie

Introduction

Il existe un lien fort entre confinement spatial d'une particule et quantification de ses énergies accessibles. Les enjeux du début du XXe siècle sont de décrire la matière au niveau atomique. De nombreuses expériences rapportent des résultats surprenants et décrivant un phénomène singulier : la quantification de l'énergie : l'énergie d'un atome ou d'une molécule ne peut prendre qu'une de ces valeurs quantifiées, il s'agit d'un résultat pour le moins singulier (voir expérience de Franck et Hertz, en 1914). A cette époque, le modèle de Bohr existe mais la quantification de l'énergie n'est qu'un postulat : on va essayer de voir d'où ça sort dans cette leçon.







I Effet du confinement sur une particule

1) Définitions

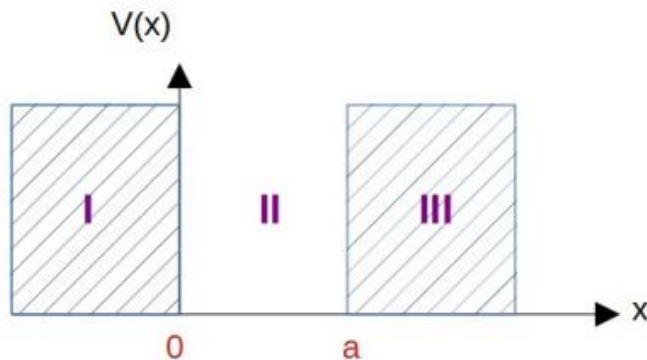
Une particule est dite confinée lorsqu'elle est contrainte de rester dans une région restreinte de l'espace, sous l'effet d'une force ou d'un potentiel (particule dans une boîte).

L'équation de Schrödinger s'écrit : $H\psi = E\psi$ avec $H = \frac{p^2}{2m} + V$, V traduit le confinement de la particule. On suppose qu'il est stationnaire.

Si on considère un électron confiné dans cette salle, il y a peu de chance pour que de quelconques effets quantiques apparaissent. Il faut préciser un peu : on calcule la longueur d'onde de de Broglie d'un électron libre à température ambiante : $m_e = 9,1 \cdot 10^{-31}$ kg, $v = 10^5$ m.s⁻¹ donc $\lambda_{dB} = 7$ nm. Par conséquent il faudra que V ait des variations sur des distances nanométriques.

2) Modèle du puits carré infini

Première modélisation : parois qui confinent parfaitement la particule (fictif)



Avec ce modèle on peut directement écrire que dans I et III : $\Psi(x) = 0$ car il faudrait une énergie infinie pour faire sortir la particule de la zone, ce qui est impossible.

On écrit l'équation de Schrödinger dans II :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = E\Psi \text{ soit } \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + k^2 \Psi = 0 \text{ où } E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

On résout et on obtient : $\Psi(x) = A \cos(kx) + B \sin(kx)$

Ψ doit être continue donc les conditions aux limites s'écrivent : $\Psi(0) = 0$ et $\Psi(a) = 0$.

On trouve ainsi $A = 0$ et $k_n = \frac{n\pi}{a}$ avec n un entier naturel non nul (sinon on aurait Ψ nulle partout).

On trouve donc finalement :

$$E_n = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} = n^2 E_1$$

Remarque : l'énergie est quantifiée ! E_1 est non nulle (contre-intuitif : ex d'une bille dans un verre, son énergie minimale est nulle).

Avec un électron à température ambiante et a de l'ordre du nm on trouve $E_1 = 400 \text{ meV}$ (énergie dans l'IR).

On peut aussi calculer les fonctions d'ondes associées : $\psi_n(x) = B \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$

La condition de normalisation donne : $B = \sqrt{\frac{2}{a}}$

Finalement : $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$

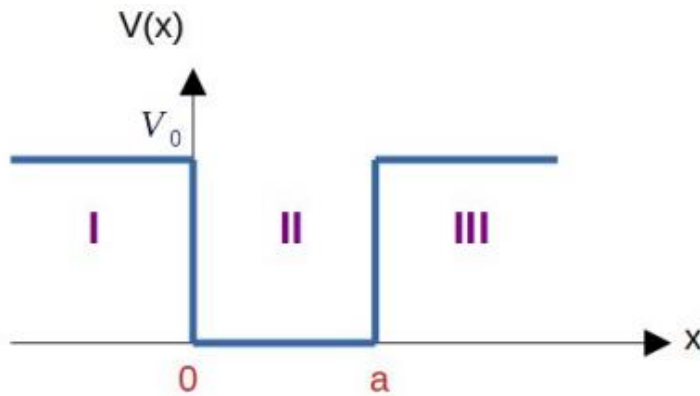
Animation : tracé des niveaux d'énergies et fonctions d'ondes associés. On remarque que Ψ s'annule en certains points : là encore contre-intuitif (retour sur l'exemple de la bille dans un verre : si on lui donne une vitesse, elle va rebondir sur les parois mais aura toutes les positions accessibles). On remarque aussi que les énergies se rapprochent quand la largeur a du puits augmente : c'est cohérent. Si le puits est grand devant λ_{dB} , on a plus quantification.

<http://ressources.univ-lemans.fr/AccesLibre/UM/Pedago/physique/02/divers/qboite.html>

Il s'agit d'un exemple fictif mais qui permet de faire émerger du confinement la quantification de l'énergie. Intéressons-nous maintenant à une modélisation plus réaliste.

II Le confinement en pratique

1) Modèle du puits carré fini



On considère dans un premier temps $E < V_0$:

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + (E - V_0)\Psi = 0 \text{ dans I et III} \\ \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + E\Psi = 0 \text{ dans II} \end{cases}$$

On écrit les conditions aux limites : cette fois ce sont Ψ et Ψ_0 qui sont continues donc :

$$\begin{cases} \Psi \text{ continue en } \pm \frac{a}{2} \\ \Psi' \text{ continue en } \pm \frac{a}{2} \end{cases}$$

Expression des fonctions d'ondes :

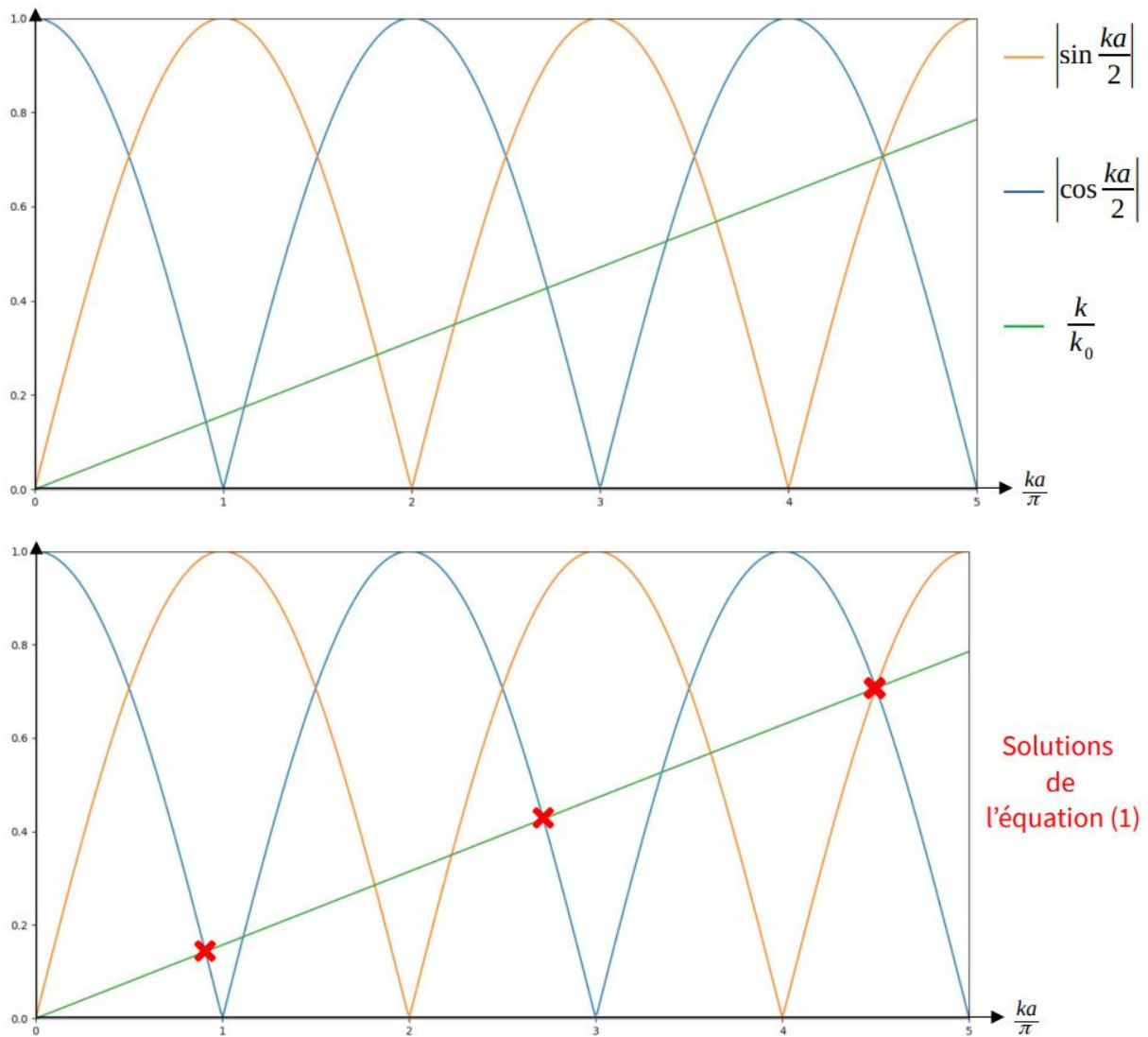
$$\begin{cases} \Psi_I = A e^{qx} \\ \Psi_{II} = B \cos(kx) + C \sin(kx) \\ \Psi_{III} = D e^{-qx} \end{cases}$$

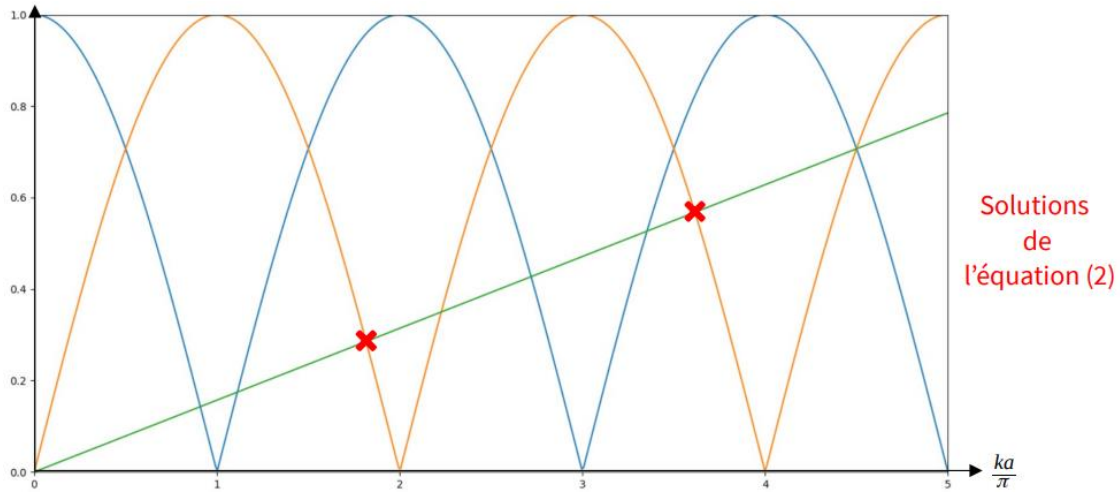
$$\text{avec } q = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \text{ et } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Équations transcendantes :

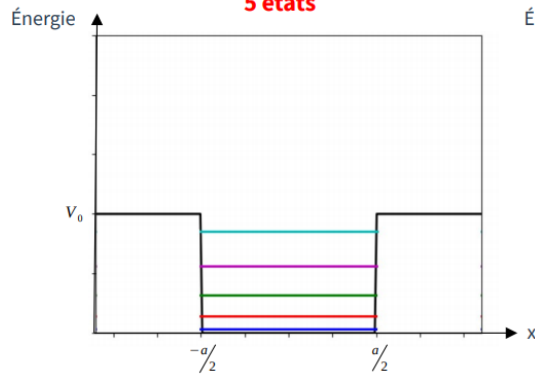
$$\left\{ \begin{array}{l} \left| \cos \frac{ka}{2} \right| = \frac{k}{k_0} \quad \text{et} \quad \tan \frac{ka}{2} > 0 \\ \left| \sin \frac{ka}{2} \right| = \frac{k}{k_0} \quad \text{et} \quad \tan \frac{ka}{2} < 0 \end{array} \right. \quad (1) \quad (2)$$

où $k_0 = \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar}$

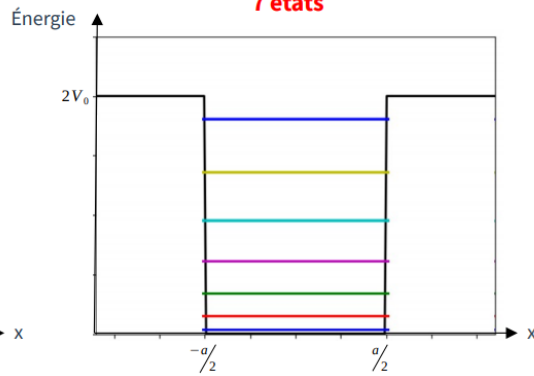




5 états



7 états



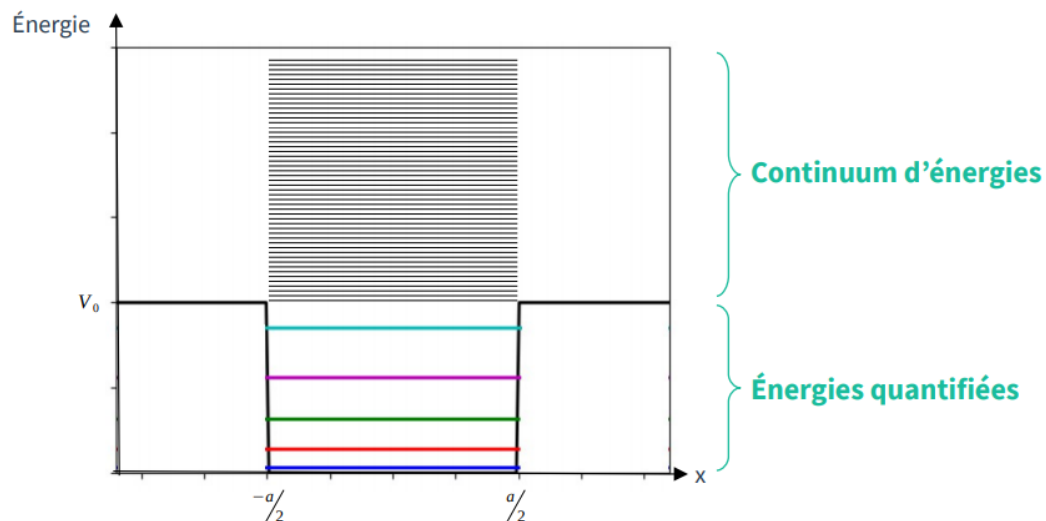
Pour $E < V_0$:

- L'énergie est de nouveau quantifiée (ouf !)
- Le nombre d'états liés augmente avec V_0

$$V_0 < V_{lim} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

- En particulier pour , on a uniquement un état lié

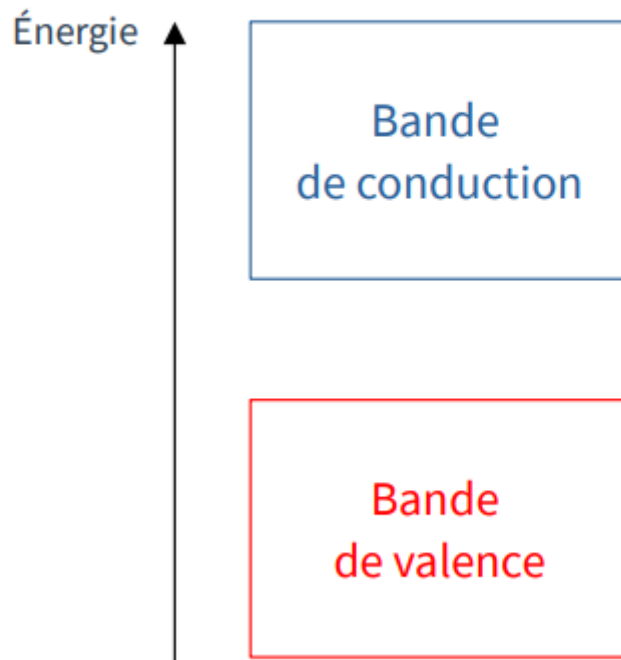
On considère maintenant que $E > V_0$: cette fois l'énergie n'est pas quantifiée, on parle d'états de diffusion.



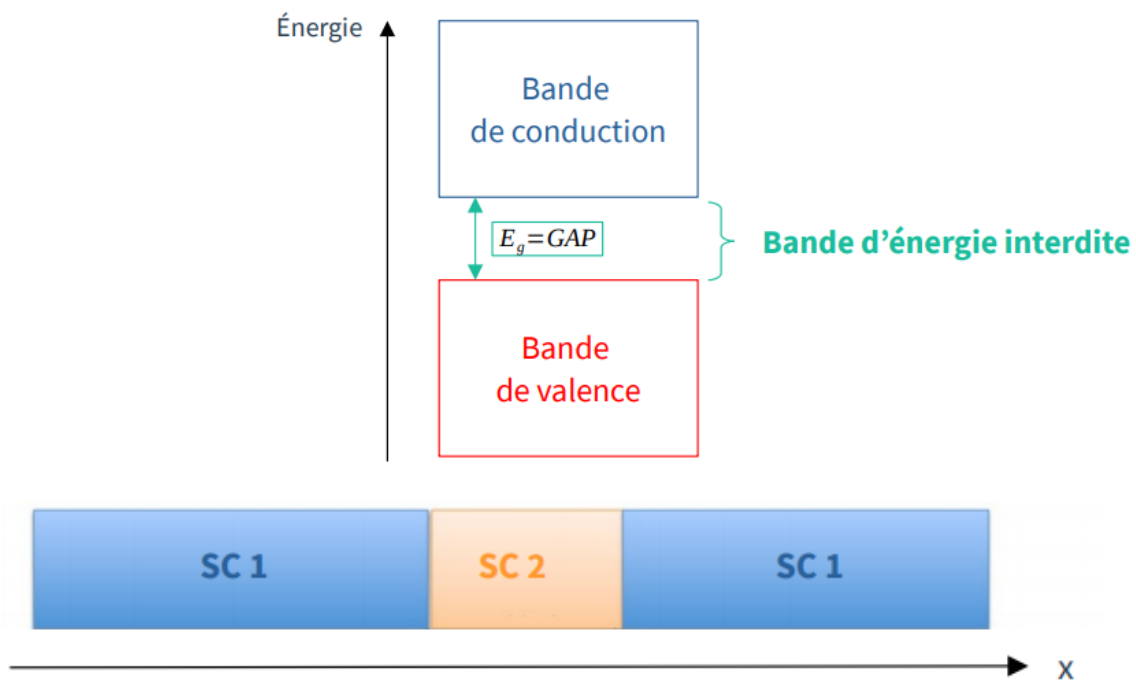
2) Réalisation d'un puits carré

Pour réaliser un puits carré on utilise des matériaux semi-conducteurs :

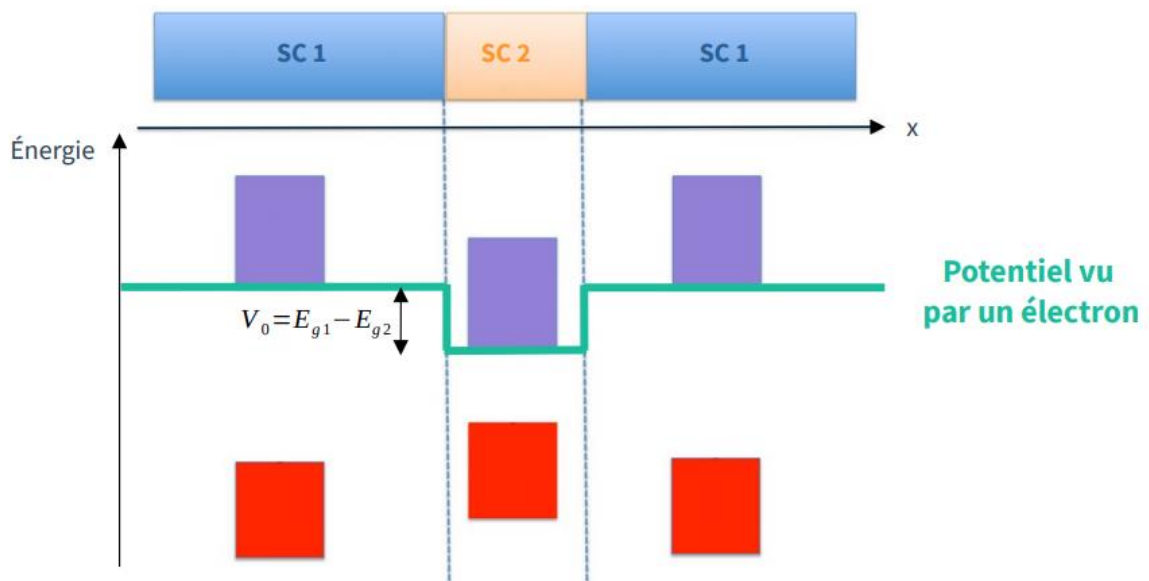
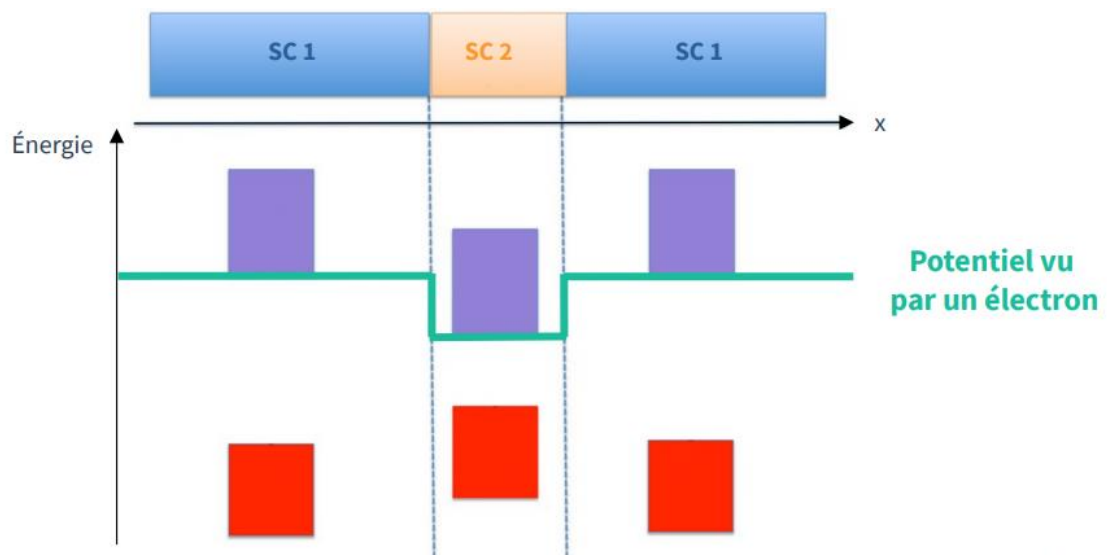
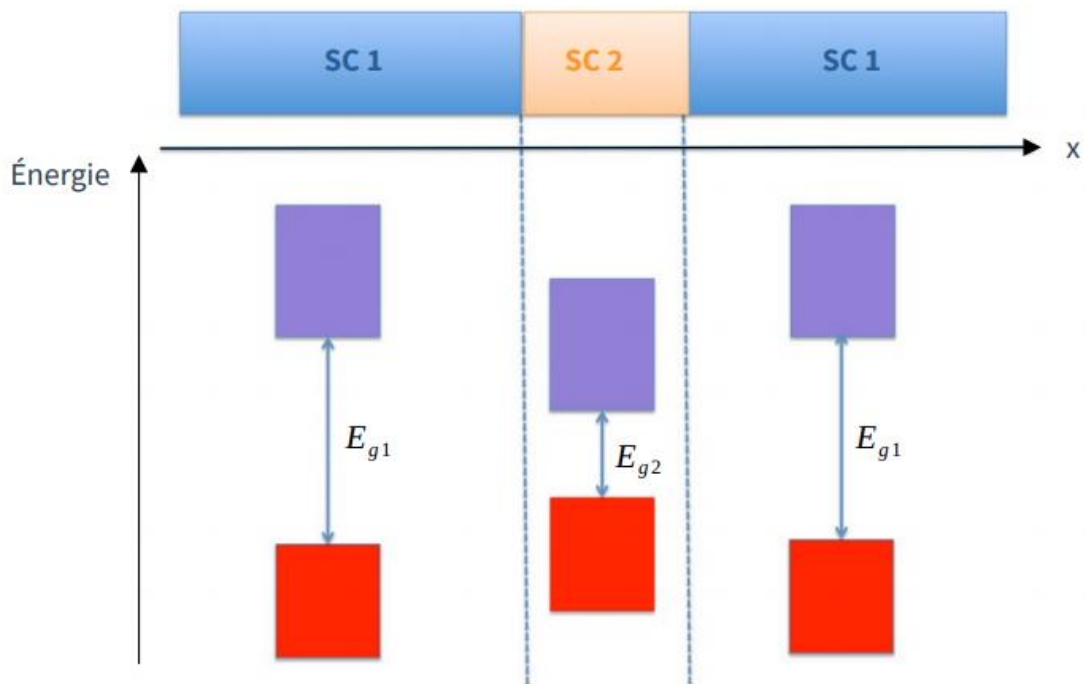
Qu'est ce qu'un semi-conducteur ?



Qu'est ce qu'un semi-conducteur ?



avec $E_{g1} > E_{g2}$



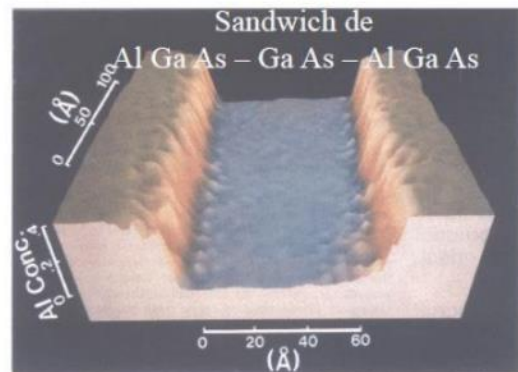
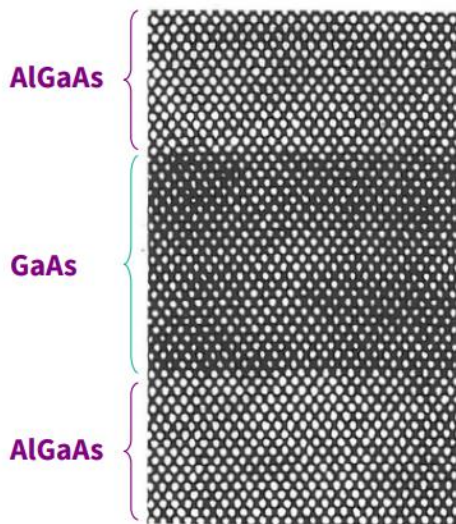
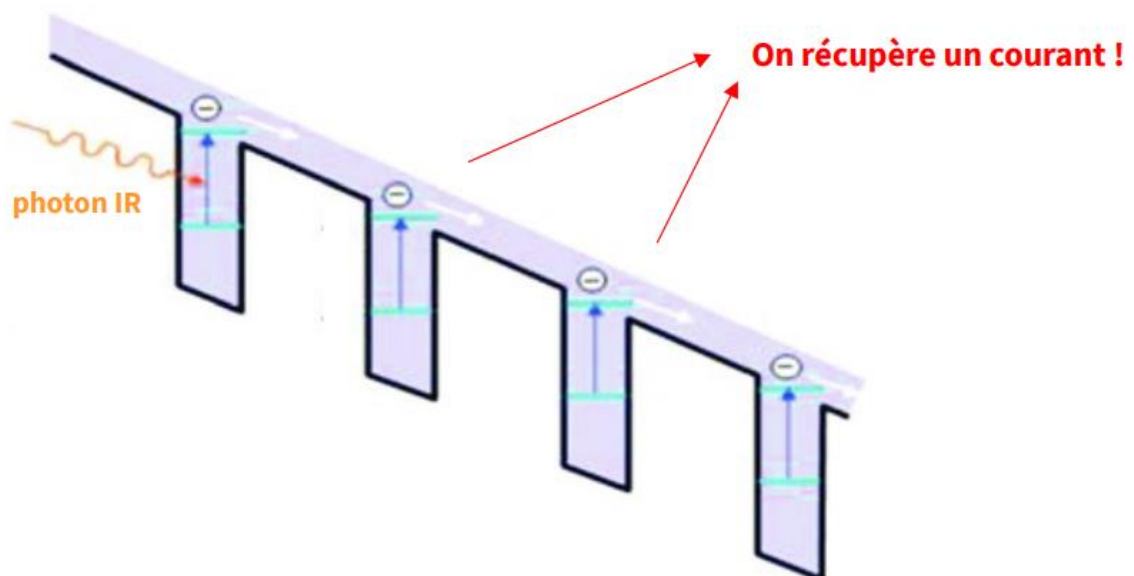
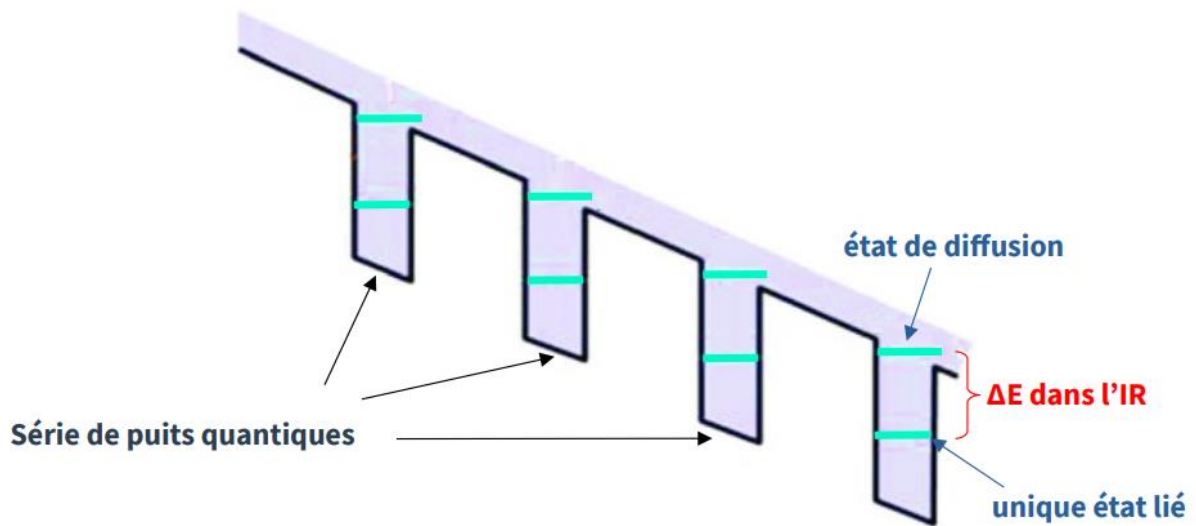


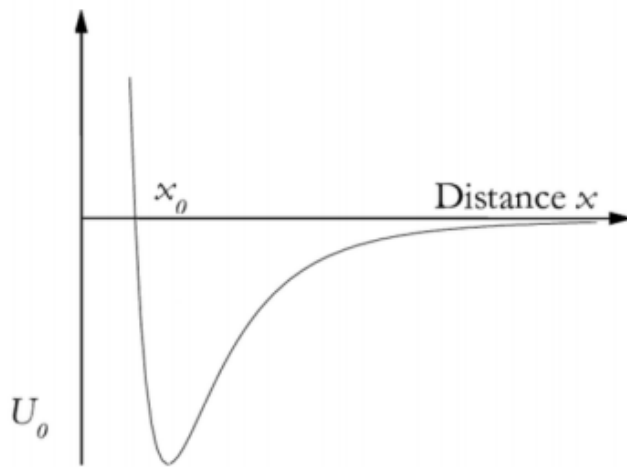
Image du potentiel vu par l'électron

3) Application au détecteur infrarouge

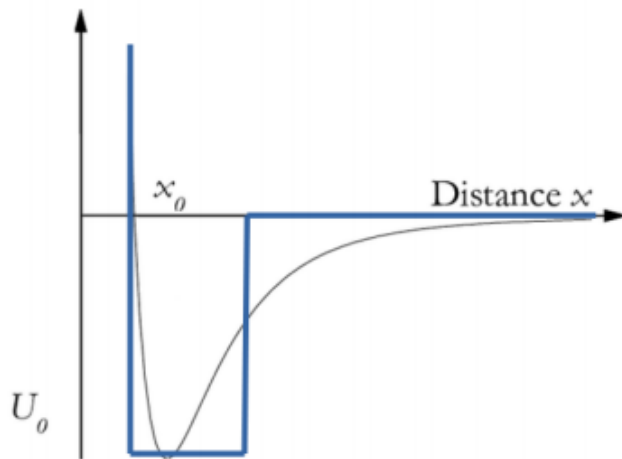


4) Retour sur l'expérience de Franck et Hertz

On sait que pour l'atome d'hydrogène, le potentiel auquel est soumis l'électron ressemble à ça :

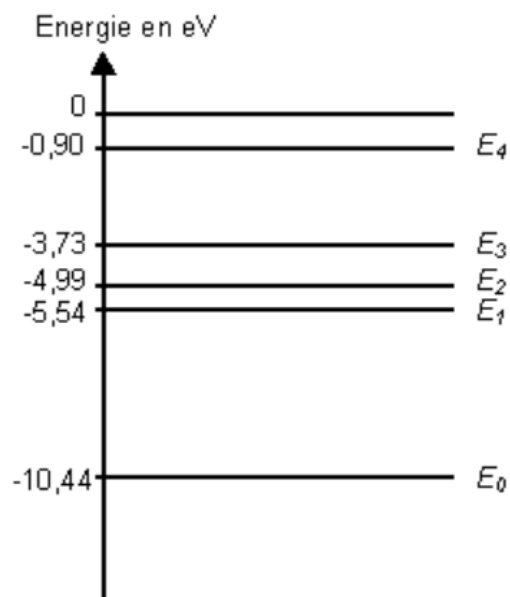


On peut l'approcher par :

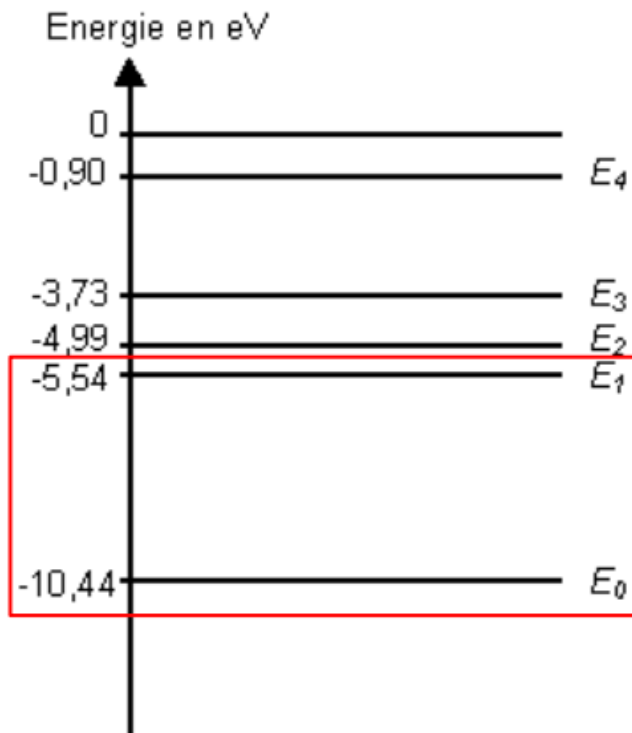


En appliquant les résultats précédents on montre que les énergies au sein des atomes sont quantifiées.

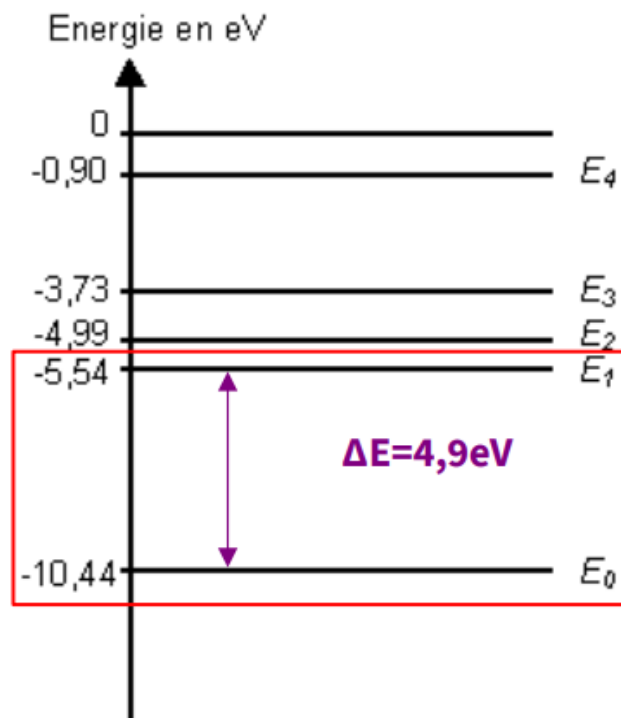
Spectre simplifié du mercure



Spectre simplifié du mercure



Spectre simplifié du mercure



Conclusion

On a réussi à montrer le lien entre confinement et quantification de l'énergie. Notons qu'il est possible de confiner plus de dimensions : 2D : nanofils, 3D : boîtes quantiques (quantum dots).

Bibliographie

-Aslangul (tome 1, p167, p273, p532)

-Basdevant et Dalibard, p83

Questions

- Autre représentation de l'équation de Schrödinger ?
 - ➔ Représentation p
- quel problème avec le modèle de Bohr ?
 - ➔ pas de notion de trajectoire en mécanique quantique
- Pourquoi c'est pas trop faux pour l'atome d'hydrogène ? l'orbital 1s en particulier ?
 - ➔ 1s a une symétrie sphérique et une probabilité de présence qui décroît en $\exp(-r)$ donc l'électron est effectivement très localisé sur une orbite.
- Principe d'incertitudes ?
- comment on montre que Ψ' est continue ?
 - ➔ en intégrant l'équation de Schrödinger entre $a/2+\epsilon$ et $a/2-\epsilon$ et en faisant tendre ϵ vers 0.
- A-t-on des états liés/diffus aussi en mécanique classique ?
 - ➔ Oui : portrait de phase d'un pendule.
- Dans quel autre domaine de la physique observe-t-on de la quantification ?
 - ➔ Corde de Melde, guide d'ondes
- D'où vient cette manifestation d'énergie quantifiée ?
 - ➔ Caractère ondulatoire de la matière
- Un système quantique a-t-il toujours ses énergies quantifiées ?
 - ➔ Non
- Caractéristique de l'écart entre les niveaux d'énergie ? Quel avantage ? Quelle utilité ?
 - ➔ L'écart n'est pas constant, on peut faire en sorte que les électrons se désexcitent de niveaux différents et ainsi récupérer des photons de fréquences différentes. On peut ainsi faire des sources de photon unique, utilité : bits quantiques
- Comment faire changer la profondeur du puits sans changer de matériaux ?
 - ➔ En polarisant la jonction.
- Par quel autre potentiel peut-on approcher le potentiel de l'hydrogène ?
 - ➔ Par l'oscillateur harmonique, cette fois on aura des écarts d'énergie égaux.
- Pour les atomes à plusieurs électrons on fait comment ?
 - ➔ On peut considérer des électrons indépendants. Ainsi l'hamiltonien total est factorisable et il ne reste plus qu'à écrire un déterminant de Slater pour assurer l'antisymétrie de la fonction d'onde.