

**LP39 : CONFINEMENT DE L'ÉLECTRON ET QUANTIFICATION DE L'ÉNERGIE (L2)****Prérequis**

- caractère ondulatoire de la matière
- lien entre spectre et énergie des photons
- équation de Schrödinger

**Idées directrices à faire passer**

- la quantification vient du confinement de l'onde
- ce n'est pas intrinsèquement une propriété quantique, le pas décisif était d'accepter la complémentarité onde-corpuscule

**Commentaires du jury**

–

**Bibliographie**

- [1] Mécanique quantique, Basdevant, Editions de l'école Polytechnique
- [2] Mécanique quantique, Berkeley, Dunod

**Introduction :** il ne suffit pas de décrire la matière par une approche ondulatoire pour quantifier quelque chose. En revanche, en confinant cette onde, on ajoute des conditions aux limites et alors là...

**I Fonction d'onde confinée et quantification****1 Prendre la théorie ondulatoire au sérieux [2]**

- traiter le cas d'un puits de profondeur infini
- résoudre l'équation aux valeurs propres associée et appliquer les conditions limites
- on trouve alors facilement un espace discret de solutions (mode propre/énergie propre)
- en théorie ondulatoire de la matière, la quantification apparaît facilement. Et elle n'est pas différente de celle décrite par Pythagore pour les instruments de musique !

**2 Prédiction sur les états liés [2]**

- rappeler succinctement la définition d'un état lié (état qui nous intéresse dans notre problème)
- suivre le Berkeley pour un traitement avec les mains de la forme de l'onde adaptée à la forme d'un certain potentiel
- appliquer cette démonstration au cas qui nous intéresse : état lié dans un puits de forme quelconque : elle est ondulatoire dans le puits (concave), puis convexe à l'extérieur
- la solution doit être physique donc normalisable. A l'extérieur du puits, on doit donc avoir des solutions à décroissance exponentielle
- ajoutons à cela des conditions de raccordement et on obtient la forme typique des solutions (évidemment des calculs numériques ou analytiques donneraient ces résultats)

**3 traitement d'un puits de potentiel carré de profondeur finie [1] et [2]**

- motiver l'étude en expliquant dans quel cas on rencontre des puits de potentiel carrés (Basdevant)
- utilisons dans un premier temps l'étude précédente.
- on peut supposer que tous les états liés présentent une allure semblable au puits de potentiel infini (on aura des états liés tant que l'énergie du mode sera inférieure à l'énergie potentielle du puits)
- on peut continuer à appliquer le constat  $n - 1$  noeuds pour le mode  $n$
- avec les conditions de raccordement, on obtient alors une bonne idée de la forme des modes associées à ce puits
- mais dans ce cas, un calcul analytique est envisageable
- suivre la résolution du Basdevant

- poser le système puis constater que l'invariance du potentiel dans le changement  $x \rightarrow -x$  impose que l'hamiltonien codiagonalise avec cet opérateur (dont les valeurs propres sont des fonctions symétriques ou antisymétriques)
- montrer les solutions en énergie à partir d'une résolution graphique (alternance de solutions paires et impaires)
- on retrouve bien ce qu'on avait qualitativement prévu

## II L'atome d'hydrogène

### 1 Bref historique de la construction quantique de l'atome [1]

Suivre le chapitre historique du Basdevant partie "le spectre atomique"

### 2 Où est le puits de potentiel ? [1]

- modèle de l'atome d'hydrogène
- écrire l'hamiltonien directement dans le référentiel du centre de masse
- on obtient alors un hamiltonien séparable
- la partie centre de masse est triviale (onde plane)
- on cherche alors à diagonaliser la partie interne
- écrire le laplacien en coordonnées sphériques
- attention dans les calculs du Basdevant, il est plus sain de remplacer la masse de l'électron par la masse réduite  $\mu$ , même si la différence finale est faible
- dans une première approche simple on admet par homogénéité :  $L^2 = \hbar^2$  (on se place dans le cas du fondamental, orbitale  $s$ )
- on met alors en évidence une nouvelle équation aux valeurs propres
- on peut alors mettre en évidence un potentiel effectif somme du potentiel d'interaction et d'une barrière centrifuge
- ce potentiel présente donc un minimum, ce qui évite que l'électron chute sur le proton ! victoire !

### 3 Spectre de l'hydrogène [1]

- par dérivation du potentiel effectif, remonter à la distance typique de l'électron au proton  $\rightarrow$  on obtient le rayon de Bohr
- on peut alors calculer la valeur du potentiel effectif à cet endroit  $\rightarrow$  on obtient l'énergie d'ionisation dans son état fondamental  $\rightarrow$  tout ça est très logique
- vérifier que l'approximation non relativiste est justifiée (comparée la vitesse que l'on peut construire avec les grandeurs du problème à  $c$ )  $\rightarrow$  en profiter pour introduire la constante de structure fine
- donner les énergies propres dans le cas de l'atome d'hydrogène (dégénérées  $n^2$  fois)
- il est possible de classer ces solutions dégénérées en énergie par des considérations de type angulaires
- en effet, les harmoniques sphériques, qui sont les fonctions d'onde solutions du problème doivent être caractérisées par les deux nombres  $\ell$  et  $m$
- pour tout potentiel central, il y a dégénérescence en  $m$  de l'énergie, pour tout potentiel en  $1/r$  ou  $1/r^2$  il y a également dégénérescence suivant  $\ell$
- parler des règles de sélection (la règle sur  $\Delta m$  peut être établie avec les mains à partir de la conservation du moment cinétique, sachant que le spin du photon vaut 1)
- manipulation : montrer au spectro à fibre le spectre de la lampe à hydrogène : ce sont les raies correspondant à la série de Balmer : raies du visible

**Conclusion** : on a fait que commencer à percevoir la puissance du lien entre confinement et quantification. La portée est évidemment bien plus large. L'une des étapes suivantes possibles serait de mettre deux puits l'un à côté de l'autre. Se mettrait alors en place un phénomène de couplage entre oscillateurs. Et si on en mettait bien plus, on aurait une approche d'une théorie descriptive des métaux et on pourrait mettre en évidence la théorie des bandes...

## Q/R

1. D'où vient le nom capacité thermique ?

2. Hypothèses et démonstration du théorème d'équipartition de l'énergie.

3. Comment passe-t-on de la relation de dispersion des phonons obtenue par diffraction à la densité de modes ?

- 
4. Pour une molécule homodiatomique, que se passe-t-il ?
  5. Pour des phonons,  $E$  est en  $T^4$  et  $C_V$  en  $T^2$ . A quoi cela fait-il penser ?
  6. GPM dans la limite BT (limite classique non valide), que se passe-t-il ?
  7. Les ddl de translation peuvent-ils être quantifiés ?
  8. pourquoi faut-il  $3n - 6$  coordonnées pour repérer une molécule à  $n$  atomes ?
  9. Qu'est-ce qu'un phonon ? Lien et différence avec un photon.
  10. Qu'est-ce que l'approximation classique ?