

LP n° 40 Titre : Confinement d'une particule et quantification de l'énergie

Présentée par : Olivier Choffrut

Rapport écrit par : JB Bourjade

Correcteur : Jean Hare

Date : 11/02/2019

Bibliographie de la leçon :

Titre	Auteurs	Éditeur	Année
Quantique fondement et applications	Perez et al	De boeck	2013
Mécanique quantique	Aslangul	De boeck	
Mécanique quantique 3	Aslangul	De boeck	

Plan détaillé

Niveau choisi pour la leçon : L3

Pré-requis : Corde vibrante, fonction d'onde, principe d'indétermination d'Heisenberg, équation de Schrödinger

Intro Ondes planes infinies qu'on vient d'étudier pas physique. Confinement.
=> Quantification 1mn20

I Position du problème 6min

a) Spectre d'émission de l'hydrogène 3mn10

Spectre de raie

Modèle classique de l'atome hydrogène n'explique pas les raies

Modèle avec fonction d'onde confinée spatialement

b) Principe d'indétermination d'Heisenberg 2min 40

Rappel, application une particule confinée ne peut être d'énergie nulle

II Modélisation quantique du confinement 12mn10

a) Modèle du puit infini 3mn20

Introduction du modèle

b) Equation de Schrödinger 5mn30

Rappel et application au puit infini. Solution stationnaire

c) Formes des solutions 3mn20

III Quantification de l'énergie 12mn40

a) Conditions aux limites 2mn40

b) Quantification 6mn20

c) Analogie avec la corde vibrante 3mn40

IV Influence de la hauteur du puit 7mn10

a) Comparaison 4min

Utilisation d'un modèle informatique

b) Exemple : la bêta carotène 3mn10

Expliquer la couleur (spectre d'absorption) à partir de la différence d'énergie entre HO et BV

Questions posées par l'enseignant

Que des ondes planes pour la particule libre ? Aussi des paquets d'ondes !
 Cas confiné paquets d'ondes ? Il faut le projeter sur la base de modes propres stationnaires et les faire évoluer avec l'équation de Schrödinger
 Que se passe-t-il si on met un paquet d'onde dans un puits infini ? Il oscille à la fréquence de Bohr dans le puit
 Retour sur des erreurs dans l'exploitation du principe d'Heisenberg Attention au signe du potentiel
 Comment s'en servir pour trouver la taille de l'atome d'hydrogène dans son état fondamental ?
 Heisenberg $\rightarrow E_c \sim \hbar^2/(2m a^2)$, $E_p \sim K/a$ et $E_c \sim E_p$ (Viriel ou minimisation, ou ordres de grandeurs) $a = \hbar^2/mK$
 A partir du puit infini 1D comment faire un modèle 3D sphérique (isotrope)? Prendre l'équation de Schrödinger stationnaire avec le laplacien en sphérique
 Energie pour un puit carré infini ? somme de 3 nombres quantiques au carré
 Les n sont-ils positifs stricts ? Dépend de comment on prend les modes (sinus ou CLP)
 Forme du potentiel sur le rayon ? Pour le modèles sphérique un sinus, plus généralement des fonctions de Bessel sphériques, simple pour $l=0$ ou 1
 Pourquoi la densité de probabilité doit être continue ? Parce que la fonction d'onde est continue à cause de l'équation de Schrödinger
 Pourquoi la fonction d'onde doit s'annuler dans les zones de potentiel infini ? A cause de V infini dans l'équation de Schrödinger
 Quelles sont les différences avec le modèle de la corde vibrante ? L'énergie n'est pas quantifiée
 Est-ce que l'énergie de la corde vibrante est quantifiée ? Non
 Comment montrer qu'elle n'est pas quantifiée ? On peut la choisir avec les conditions initiales
 Qu'est ce qui diffère fondamentalement dans le cas du puit fini ? Ondes évanescentes dans la zone classiquement interdite et énergie des modes propres dépendant de la hauteur du puit
 Si je baisse la valeur à l'infini du potentiel) y aurait-il toujours un état lié ? Oui car l'énergie du fondamental baisse avec la hauteur du puit
 Quelle est la valeur critique ? NA
 Quel est le lien avec la longueur d'onde de de Broglie ? NA
 Est-ce que le niveau d'énergie du fondamental dépend de la profondeur du puit ? Et comment ?
 Voir calcul du puit fini
 Comment le programme fonctionne ? A priori en traitant le problème en stationnaire dans le puit et en prenant la solution onde évanescence qui tend vers 0 en l'infini
 C'est de la chimie quantique donc c'est de la physique ?
 BV ? HO ? Apparemment ces termes de chimistes ont de meilleurs noms en physique
 Origine du principe de Pauli et de 2 électrons par niveau d'énergie ? Les électrons sont des fermions de spin 1/2
 Exemple de quantifications qui ne viennent pas des conditions aux limites que vous avez mentionné en conclusion ? ???

Commentaires donnés par l'enseignant

Plan général correct, mais dans cette approche il serait nécessaire d'aller plus loin sur le puits fini ou une autre application

L'interprétation et les limites de l'analogie avec la corde vibrante manquent.

La notion la plus importante est que la fonction d'onde décrit une onde stationnaire, dont la demi longueur d'onde de de Broglie est un sous multiple de la largeur du puits

Il n'est pas vain de mentionner (sans calculs) que les états libres ne sont pas quantifiés

L'atome d'hydrogène est compliqué avec des calculs laborieux par contre il est possible d'aborder l'oscillateur harmonique avec les opérateurs d'échelle a et a^+ (mais déconseillé sans). Ou traiter la boîte sphérique isotrope, dont le solutions radiales pour $l=0$ et $l=1$ sont aisément accessibles (fonction de Bessel sphérique, qui s'expriment en fonction de $\cos(kr)$ et $\sin(kr)$ ce qui est bien plus simple que les polynômes de Laguerre de l'atome d'hydrogène)

Il faut bien justifier les conditions de raccordements en partant de l'équation de Schrödinger (qui impose que le courant de probabilité doit être conservé ou par l'absurde dans le cas du potentiel discontinu mais borné ce qui implique que ψ et ψ' sont continus). Dans le cas où V n'est pas borné (puits infini notamment) on n'a plus que la continuité de ψ'

L'autre notion centrale est les ondes évanescentes (dans le puit fini). En particulier plus on baisse le potentiel des bords du puit plus la fonction d'onde s'étend dans la zone classiquement interdite ce qui élargit de facto le Δx . Autres points importants à au moins mentionner si on traite le puits fini: l'énergie (et k) dépend de la hauteur du puit, il y a toujours au moins un état lié tant que le potentiel a une zone plus basse que les bornes, changer la largeur du puit est similaire à changer la hauteur.

En fait le problème est similaire à l'équation transverse dans un guide d'onde diélectrique en optique, dont on peut savoir qu'il existe toujours un mode.

Partie réservée au correcteur

Les commentaires principaux sont restitués dans les pages antérieures

Avis sur le plan présenté

Plan classique donc acceptable, mais il faut aller plus à fond sur le puits fini.
Ou traiter un cas réel (OH ou hydrogène) si on se sent armé

Concepts clés de la leçon

Équation de Schrödinger, Onde de de Broglie stationnaire,
Conditions de raccordement de ψ
Origine de la quantification = conditions aux limites
Existence et effet des ondes évanescentes

Concepts secondaires mais intéressants

Notion « énergie de confinement » (repos pas possible). Pour les nanostructures de semiconducteurs, cela se traduit par une augmentation très sensible de l'énergie de recombinaison des excitons (contrôle de la « couleur »).

Expériences possibles (en particulier pour l'agrégation docteur)

Corde de Melde ? mais c'est très marginal
(Cette LP40 n'est pas au programme de l'agreg docteurs)

Points délicats dans la leçon

Conditions de raccordement de ψ
Ondes évanescentes
Limites de l'analogie avec la corde vibrante

Bibliographie conseillée

La biblio suggérée est plausible, mais pourquoi se priver du premier chapitre du Cohen et ses compléments ?