Compte rendu de leçon de physique
-
Préparation à l'agrégation de physique de L'ENS Paris-Saclay

BENHAMOU-BUI Benjamin
PLO Juliette

Confinement d'une particule et quantification de l'énergie

Présenté par Benjamin

Table des matières

1 Objectifs de la leçon

Niveau : L3
Prérequis :
- équation de Schrödinger
- résolution d'équations différentielles du 2nd ordre à coefficients constants
- modèle de Bohr de l'atome d'hydrogène
- longueur d'onde de De Broglie

L'objectif de cette leçon est d'établir le lien fort qu'il existe entre confinement spatial d'une particule et quantification de ses énergies accessibles. Je me suis aussi attaché au fait de présenter un certain nombre d'ordre de grandeur qui à mon sens sont important à avoir en tête (surtout en mécanique quantique où on a tendance à oublier, à cause des calculs, qu'on travaille à des très petites échelles). J'ai finalement trouvé important de traiter un certain nombre d'applications concrètes et récentes pour ancrer cette leçon dans un contexte actuel (adieu les classiques exemples atomistiques qui datent de plus d'un siècle).

2 Introduction

- Introduction historique : enjeux du début du XXe siècle est de décrire la matière au niveau atomique. De nombreuses expériences rapportent des résultats surprenants et décrivant un phénomène singulier : la quantification de l'énergie. Explication de ce que ça veut dire et comparaison avec le monde macro pour souligner la singularité de ce résultat.
- J'ai ensuite montré en live l'expérience de Franck et Hertz (1914) qui illustre la quantification des énergies des électrons dans l'atome de Mercure. J'ai expliqué les résultats sur slide (cf diapo).
- À 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.

3 Proposition de plan

3.1 Effet du confinement sur une particule

3.1.1 Définition et cadre d'étude

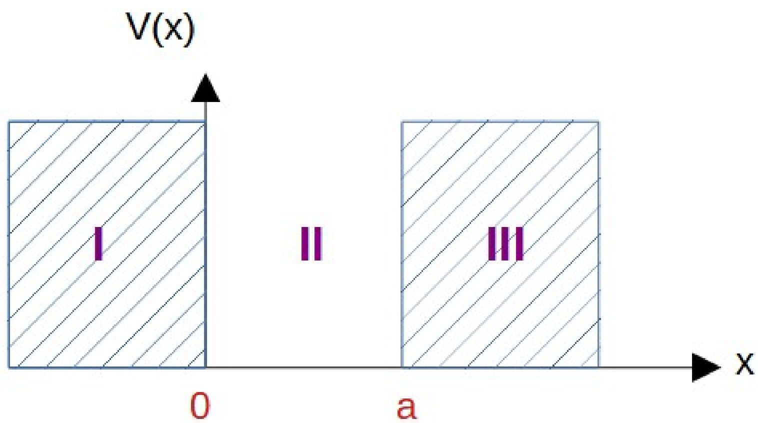
- définition de confinement : Une particule est dite confinée lorsqu'elle est contrainte de rester dans une région restreinte de l'espace, sous l'effet d'une force ou d'un potentiel.
- Image d'une particule dans une boîte
- Écriture de l'équation de Schrödinger stationnaire :

$$H\Psi = E\Psi \text{ avec } H = \frac{p^2}{2m} + V_{conf} \tag{1}$$

V_{conf} traduit le confinement de la particule. On le suppose pour la suite stationnaire et on va essayer de le modéliser.
- Petit arrêt ordre de grandeur : en effet, notre définition du confinement est imprécise. Si on considère un électron confiné dans cette salle, il y a peu de chance pour qu'un 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 $m_e = 9.1 * 10^{-31} kg$ et $v = 10^5 m.s^{-1}$ donc $\lambda_{dB} = 7nm$. Par conséquent il faudra que V_{conf} ait des variation sur des distances nanométriques.

3.1.2 Modèle du puits carré infini

- 1ère modélisation : parois qui confinent parfaitement la particule (fictif)



- Avec ce modèle on peut directement écrire que dans I et II : $\Psi(x) = 0$ car il faudrait une énergie infinie pour faire sortir la particule de la zone, ce qui est impossible.
- On écrite l'ES en représentation position dans II :

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

- On résout ça : $\Psi(x) = Acos(kx) + Bsin(kx)$
- Ψ doit être continue donc les conditions aux limites s'écrivent :

$$\Psi(0) = 0 \text{ et } \Psi(a) = 0 \tag{3}$$

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

$$E_n = n^2\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2} = n^2 E_1 \tag{4}$$

Remarques :
- l'énergie est quantifiée!!!!!
- E_1 est non nulle (contre-intuitif : ex d'une bille dans un verre, son énergie minimale est nulle)
- OdG : avec un électron à température ambiante et a de l'ordre du nm on trouve $E_1 = 400meV$ (énergie dans l'IR)
- On peut aussi calculer les fonctions d'ondes associées : $\Psi_n(x) = Bsin(n\frac{\pi x}{a})$
- Condition de normalisation nous donne $B = \sqrt{\frac{2}{a}}$
- Finalement :

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}sin(n\frac{\pi x}{a}) \tag{5}$$

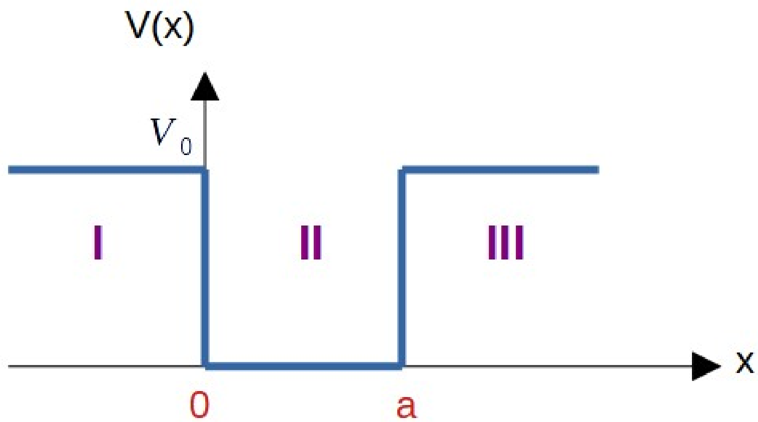
<u>Animation :</u>
- tracé des niveaux d'énergies et fonctions d'ondes associés
- on remarque que Ψ s'annule en certains points : là encore contre-intuitif (retour sur l'exemple de la bille dans un verre : si on lui donne une vitesse, elle va rebondir sur les parois mais aura toutes les positions accessibles)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

avec la remarque précédente, si le puits est grand devant λ_{dB}, on a plus quantification

Transition : exemple fictif mais qui permet de faire émerger du confinement la quantification de l'énergie. Intéressons nous maintenant à une modélisation plus réaliste.

3.2 Le confinement en pratique

3.2.1 Modèle du puits carré fini



- On considère dans un premier temps $E < V_0$
- On écrit les différentes ES :

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + (E - V_0)\Psi = 0 \text{ dans I et III} \\ \\ \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + E\Psi = 0 \text{ dans II} \end{cases} \tag{6}$$

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

$$\begin{cases} \Psi \text{ continue en } \pm\frac{a}{2} \\ \Psi' \text{ continue en } \pm\frac{a}{2} \end{cases} \tag{7}$$

Résolution totale du problème sur slide :
- expression des fonctions d'ondes
- équations transcandentes
- résolution graphique
- Pour $E < V_0$:
(i) l'énergie est de nouveau quantifiée (ouf), on parle **d'états liés**
(ii) le nombre d'états liés augmente avec V_0
(iii) en particulier pour $V_0 < V_{lim} = \dfrac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$, on a uniquement un état lié
- On considère cette fois $E > V_0$: cette fois l'énergie n'est pas quantifiée, on parle **d'états de diffusion**
- Slide bilan du puits carré fini

3.2.2 Comment réaliser un puits carré ?

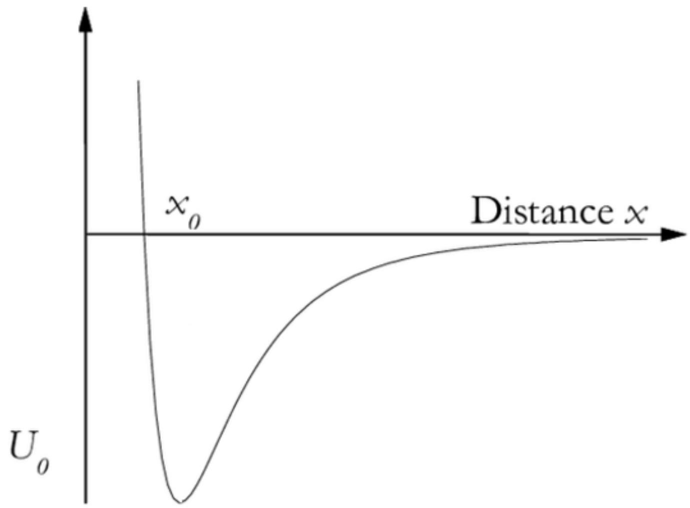
- Pour réaliser un puits carré on utilise des matériaux semi-conducteurs
- Slide de rappel de ce qu'est un semi-con
- Slide de comment on réalise un puits carré
- Slide montrant des images expérimentales

3.2.3 Application au détecteur infra-rouge

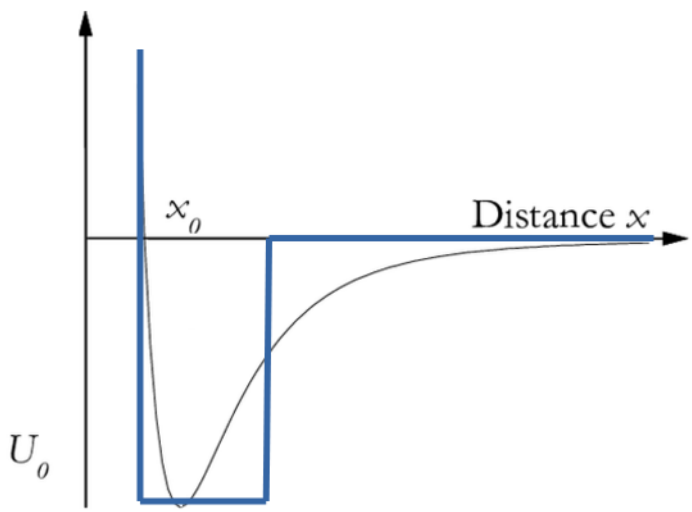
Slides expliquant le principe : on réutilise ainsi tout ce qu'on a vu précédemment !!

3.2.4 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
- Slide montrant les niveaux d'énergie du Mercure
- Slide montrant que l'écart entre le fondamental et le 1er état excité vaut 4.9eV

Retour sur l'expérience, à l'aide des curseurs on mesure l'écart entre deux pics et on trouve 4.9/5V (la boucle est bouclée)

4 Conclusion et ouverture

- 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)

5 Expériences, animations, simulations

Expérince de Frank et Hertz : expérience très facile à faire (elle est toute faite dans la collection du département) et je trouve qu'elle apporte une vraie plus value à la leçon si elle est bien expliquée.
Faire attention au timing car le four met un certain temps à chauffer et les résultats sont moyens si la température n'est pas proche de la température nominale.
Notez que le module impose un gain de 1/10 en sortie pour la tension accélératrice ce qui explique que l'on trouve un écart entre pics de 490mV au lieu de 4.9V
Animation qui simule un puits infini :
http ://ressources.univ-lemans.fr/AccesLibre/UM/Pedago/physique/02/divers/qboite.html
J'ai utilisé le code python de Guillaume Dewaele pour montrer certains résultats sur le puits carré fini

6 Choix pédagogiques

J'ai choisi de faire une intro relativement longue (environ 5min) présentant un peu d'histoire et une expérience historique car ça me semblait important. En effet la question de la quantification était très importante à l'époque. Certains compte-rendus en font carrément une sous partie mais je trouvais ça inutile et plus d'actualité : j'ai préféré mettre l'accent sur les applications qui sont plus récentes.
J'ai aussi fait le choix de traiter en entier le puits infini et partiellement le puits fini (en donnant les grandes lignes au tableau et le reste sur slides) car les calculs sont longs et chiants et n'apporte rien physiquement.

7 Questions posées

- *autre représentation de l'équation de Schrödinger ?* représentation p
- *c'est quoi le modèle de Bohr ? quelle année ?*
- *quel problème avec le modèle de Bohr ?* pas de notion de trajectoire en mécaQ
- *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
- *énoncé du principe d'incertitude ?*
- *possible de retrouver l'odg de E_1 ?* oui avec le principe d'incertitude en prenant $\Delta x = a$
- *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
- *que vaut le rayon de Bohr ?*
- *a-t-on des états liés/diffus aussi en méca classique ?* oui, ex : portrait de phase d'un pendule
- *dans quel autre domaine de la physique observe-t-on de la quantification ?* corde de Melde, ondes sonores, guides d'onde
- *d'où vient cette manifestation d'énergie quantifiée ?* du caractère ondulatoire de la matière
- *un système quantique a-t-il toujours ses énergies quantifiées ?* non aucune raison
- *pourquoi l'énergie d'un système libre s'écrit-elle naturellement en fonction de p ?* car on a symétrie par translation donc p est conservée
- *caractéristique de l'écart entre les niveaux d'énergie ?* il n'est pas constant
- *quel avantage ?* on peut faire 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
- *quelle utilité ?* bits quantiques
- *comment faire changer la profondeur du puits sans changer de matériaux ?* en polarisant la jonction (une différence de potentiel "penche" l'allure du potentiel
- *par quel autre potentiel peut-on approcher le potentiel de l'hydrogène ?* oscillateur harmonique. Cette fois

on aura des écarts en énergie égaux
- *quels autres atomes se comportent comme l'atome d'hydrogène ? quelles différences ?* les hydrogénoïdes. Il faut multiplier les énergies par Z^2
- *pour les atomes à plusieurs électrons on fait comment ?* on peut considérer des électrons indépendants. Ainsi l'hamiltonien total est factorisable et il reste plus qu'à écrire un déterminant de Slater pour assurer l'anti-symétrie de la fonction d'onde

8 Bibliographie

- Aslangul (tome 1) : p167 (explication/interprétation de l'expérience de Frantz et Hertz), p273 (discussion sur la longueur d'onde de de Broglie), p532 (discussion sur les potentiels carrés et conditions aux limites)
- Basdevant-Dalibart : p83 (résolution du potentiel carré fini et infini)