

- pré requis:
- caractère ondulatoire de la matière
  - équation de Schrödinger dépendante / indépendante du temps.
  - lien entre spectre et énergie des photons

Intro: Je vais vous présenter la leçon n°38

Jusqu'à présent, on a décrit le caractère ondulatoire de la matière grâce à la mécanique quantique. Cependant, on parle de mécanique « quantique » et non pas ondulatoire. Nous n'avons rien quantifié du tout.\*

\* On pourrait même se dire que c'est contre-intuitif: on a une équation avec des variables continues, des fonctions continues, etc.

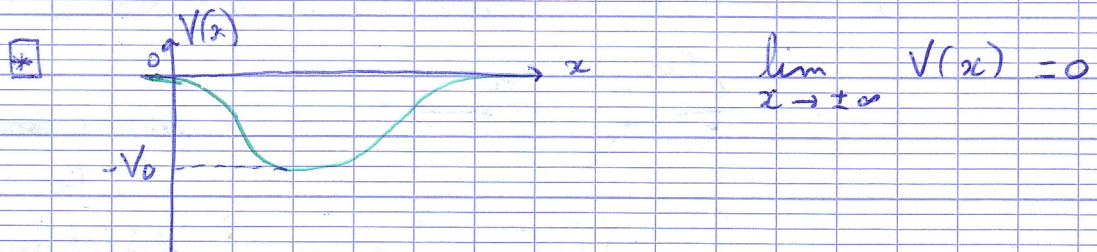
C'est l'objet de cette leçon. Dans un premier temps, nous allons établir le lien entre le confinement dans un puits de potentiel, et ensuite traiter le cas de l'atome d'hydrogène, qui a été une des premières motivations de l'introduction de la mécanique quantique.

## I - Lien entre caractère ondulatoire et spectre discret

### 1-) États liés / états de diffusion

\* états stationnaires car ils forment une base.

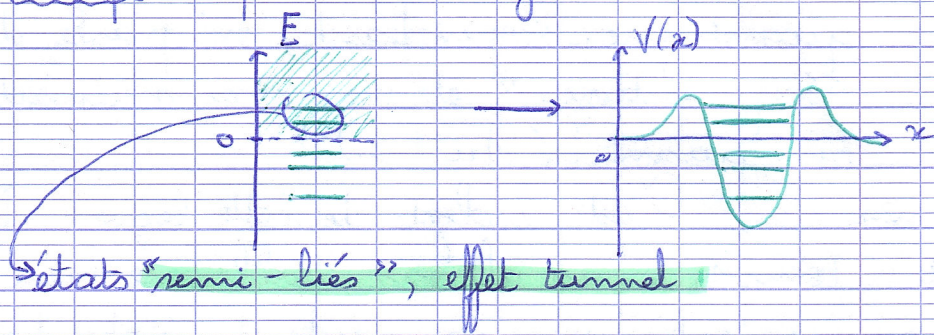
\* cas 1D;  $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)$



\* différence mécanique classique / quantique : on a toujours un continuum d'états de diffusion mais plus d'états liés : seules certaines valeurs sont permises.

\* seuls les états  $E < 0$  peuvent former des états liés, car à l'infini,  $\varphi(x) \sim A e^{i k x} + B e^{-i k x}$  ( $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ )

remarque : spectre du noyau de  ${}^{11}_5B$  :

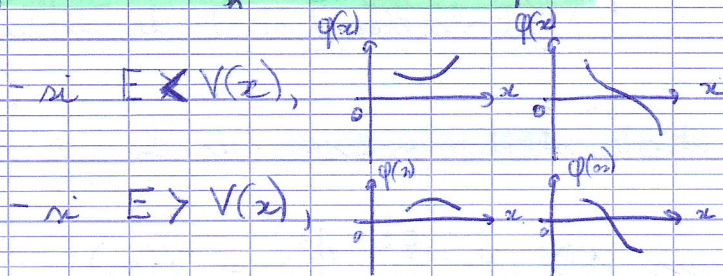


→ états "semi-liés", effet tunnel

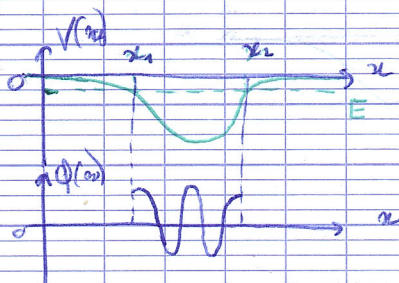
### e-) Prédiction sur les états liés

\* aucune hypothèse supplémentaire, mais plein de propriétés.

\*  $\varphi''(x) = -\frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E] \varphi(x)$  : convexité de  $\varphi$



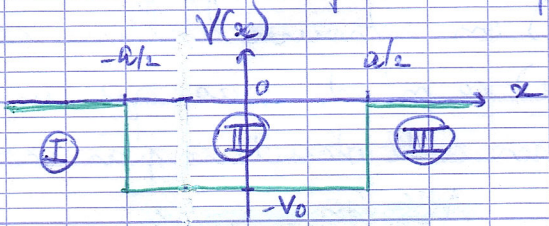
\* application à une cuvette de potentiel :



forme oscillante sur  $[x_1, x_2]$  caractéristique

\* cependant, ça peut diverger en dehors de  $[x_1, x_2]$   
lien entre raccordement et quantification dans la partie suivante sur un exemple.

3-) Exemple d'un puits carré



\*  $V$  pair  $\rightarrow$  solutions paires ou impaires

$$K = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} \quad k = \sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}}$$

$$q = \sqrt{\frac{-2mE}{\hbar^2}} \quad q^2 = K^2 - k^2$$

I et III :  $\phi'' - q^2 \phi = 0$   
 II :  $\phi'' + k^2 \phi = 0$

\* solutions paires;

$$\phi_I(x) = Ce^{qx}; \quad \phi_{III}(x) = Ce^{-qx}$$

$$\phi_{II}(x) = A \cos ka$$

\* raccordement de  $\phi$  et  $\phi'$  en  $\frac{a}{2}$  : essentiel, c'est de là que sort la quantification.

$$\begin{cases} A \cos \frac{ka}{2} = C e^{-\frac{qa}{2}} & ; (1) \\ -A \frac{k}{2} \sin \frac{ka}{2} = -C \frac{q}{2} e^{-\frac{qa}{2}} & ; (2) \end{cases}$$

$$\frac{(2)}{(1)} : k \tan \frac{ka}{2} = q; \quad k^2 \tan^2 \frac{ka}{2} = q^2 = K^2 - k^2$$

$$1 + \tan^2 \frac{ka}{2} = \frac{K^2}{k^2}$$

$$\cos^2 \frac{ka}{2} = \frac{\hbar^2}{K^2}; \quad |\cos \frac{ka}{2}| = \frac{\hbar}{K}$$

\* solutions impaires:  $|\sin \frac{ka}{2}| = \frac{\hbar}{K}$

transparent

remarques: i) toujours un état pair au moins.  
 ii) on retrouve l'allure prévue précédemment  
 iii) ce n'est pas qu'un exemple basique, on peut réaliser cette structure par croissance épitaxiale d'alliages de  $Al_xGa_{1-x}As$

Par exemple pour un puits suffisamment profond,  $E_1 - E_0 \approx \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^* a^2}$ . On peut réaliser un détecteur de photons dans l'infrarouge lointain ( $\lambda = 20 \mu m \leftrightarrow a = 10 nm$ )

$$\frac{\hbar c}{\lambda} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^* a^2}$$

$$a = \sqrt{\frac{\lambda \hbar}{2m^*}}$$

$m^* = 0,067 m_e$

## II - $\Psi$ atome d'hydrogène

### 1-) Bref historique

### 2-) Qui est le puits de potentiel?

\*  $H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta - \frac{e^2}{r}$  avec  $\mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} \approx m_e$

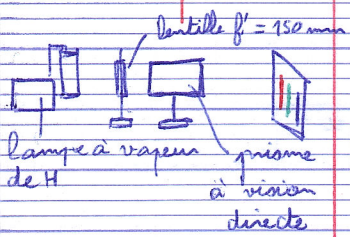
$$e^2 = \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0}$$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial^2(r \cdot)}{\partial r^2} - \frac{\vec{L}^2}{\hbar^2 r^2} \right] - \frac{e^2}{r}$$

\*  $\vec{L}^2 \approx \hbar^2$ , admis. C'est homogène et ça suppose que les variations angulaires sont du même ordre que les variations radiales.

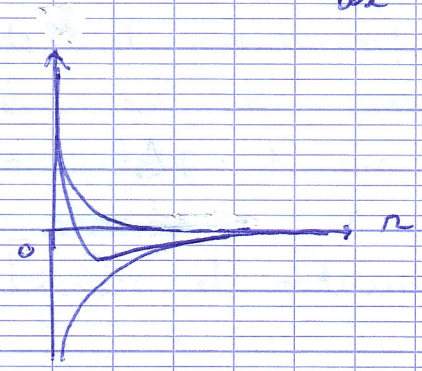
expérience

+ transparent



très joli dans le noir...

$$H = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r \cdot)}_{\leftrightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}} + \underbrace{\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{e^2}{r}}_{V_{eff}(r) \leftrightarrow V(r)}$$



C'est un terme d'énergie cinétique qui contrebalance le potentiel en  $-\frac{1}{r}$  et qui assure la stabilité de l'atome.

$$\frac{dV_{eff}}{dr} = 0 \Leftrightarrow -\frac{\hbar^2}{\mu r^3} + \frac{e^2}{r^2} = 0 \Leftrightarrow r = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}$$

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m e^2} \approx 0,53 \text{ \AA}, \text{ rayon de Bohr}$$

$$V_{eff, \min} = \frac{\hbar^2}{\mu \left(\frac{\hbar^2}{\mu e^2}\right)^2} - \frac{e^2}{\frac{\hbar^2}{\mu e^2}} = -\frac{\mu e^4}{2 \hbar^2}$$

$$E_I = \frac{m e e^4}{2 \hbar^2} \approx 13,6 \text{ eV}, \text{ énergie d'ionisation}$$

### 3-) Spectre de H

\* solutions :  $E_n = -\frac{E_I}{n^2}$ ,  $n \in \mathbb{N}^*$ , dégénéré  $n^2$  fois

\* possibilité de classer les solutions dégénérées - par symétrie angulaire grâce au nombre  $l \in \{0, n-1\}$  - par orientation de la fonction d'onde grâce à  $m \in \{-l, l\}$

\* notation spectroscopiques:

$l$	spec	symétrie
0	s	sphérique
1	p	dipôle
2	d	quadrupôle
3	f	;

transparent

\* les raies qu'on observe sont dans ce qu'on appelle la série de Balmer.

remarques: i) interprétation de  $l$  et  $m$  en termes de moment cinétique. D'où les règles de sélection, puisque le photon a un spin 1 :  $|\Delta l| = \pm 1$   
 $|\Delta m| = 0, \pm 1$

ii) équation de Schrödinger non-relativiste, justifié?

$$E_I = \frac{1}{2} \alpha^2 mc^2 \text{ avec } \alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \text{ constante de structure fine.}$$
$$\alpha \approx \frac{1}{137} \text{ donc } E_I \ll mc^2: \text{ OK}$$

iii)  $|\Psi_{n,l,m}(\vec{r})|^2$  n'est non-nul que pour  $l \neq 0$  (en  $\vec{r} = \vec{0}$ ). Ça intervient dans des phénomènes de capture électronique ou de structure hyperfine

Conclusion: on n'a fait qu'entrepercevoir la puissance du lien entre confinement et quantification. Avec ce qu'on a, on peut déjà étudier tous les systèmes hydrogénoïdes. Un puits de potentiel harmonique pourrait nous permettre de modéliser un noyau et de montrer qu'il a aussi un spectre discret.

BIBLIOGRAPHIE:

\* Cohen-Tannoudji pour une description très précise de l'atome d'hydrogène, et pour le puits carré. Le complément M<sub>III</sub> porte aussi sur un puits de forme quelconque, mais peut-être pas assez

intuitif.

\* Feynman (16.2) et Cours de Berkeley pour la discussion sur un puits de forme quelconque. Le cours de Berkeley est vraiment excellent pour préparer des leçons de mécanique quantique: formalisme très réduit mais beaucoup de physique.

### CORRECTION

Il faut absolument faire des choix sur cette leçon. Le plan en est un tout-à-fait cohérent, mais pas le seul possible. Le choix du niveau de détail des calculs est bien (peut-être un petit peu plus d'ordres de grandeur?).

→ On peut par exemple discuter la stabilité de  $H$  avec l'inégalité d'Heisenberg:  $\Delta x \Delta p \approx \hbar$   
 $n p \approx \hbar$

$$E = \frac{\hbar^2}{2mn^2} - \frac{e^2}{n}, \text{ ce qui redonne les bons } a_n \text{ et } E_n.$$

→ quel est l'analogie classique du terme en  $\frac{v^2}{2pr^2}$  dans le hamiltonien? (force centrifuge)

→ la discussion sur la concavité est intéressante et originale. On peut aussi donner cette interprétation: plus on "tord" la fonction d'onde, plus sa dérivée est grande, et donc  $\left(\frac{\hbar}{i} \nabla\right)$  augmente. Elle stocke plus d'énergie cinétique (analogie à une échelle de perroquet que l'on tord).

→ c'est bien d'expliquer le résonateur du modèle de Thomson. On peut aussi souligner que ça ne peut

conduire qu'à des fréquences  $\omega_m$ , et pas  $\omega_m$  comme c'est le cas. C'est ce qui a mis Heisenberg sur la piste de sa description matricielle.

→ on peut faire la manip avec un spectromètre à fibre. Moi j'ai choisi de le montrer avec un prisme parce que c'est plus visuel. En tout cas ce serait dommage de s'en priver.

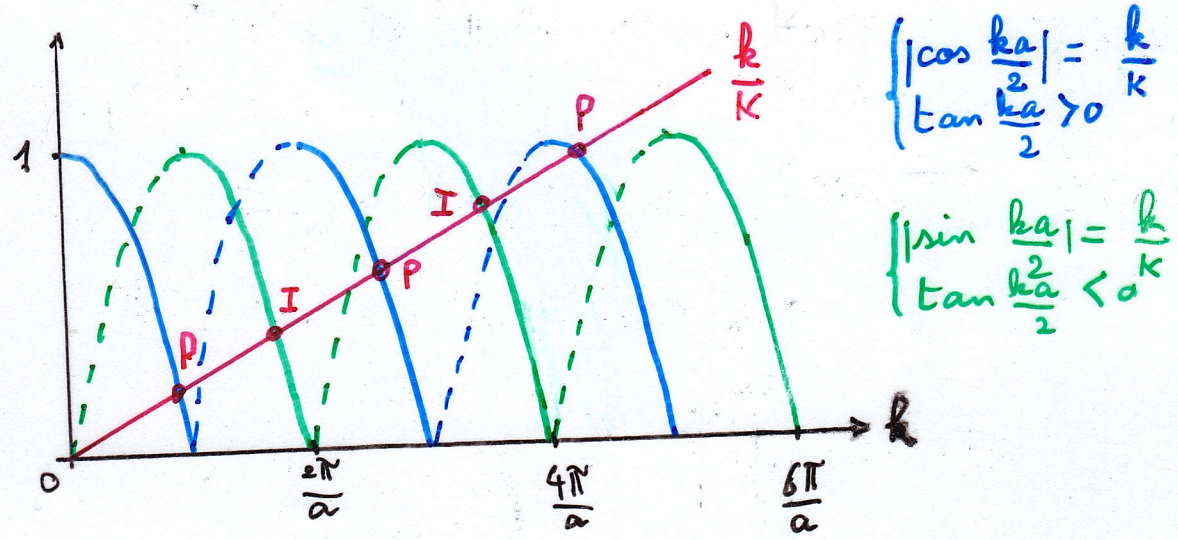
→ analogue optique des puits carrés ? (interféromètre de Fabry-Pérot. C'est expliqué dans le Cohen-Camoudji).

→ de quand date le premier lien entre onde et quantification ?

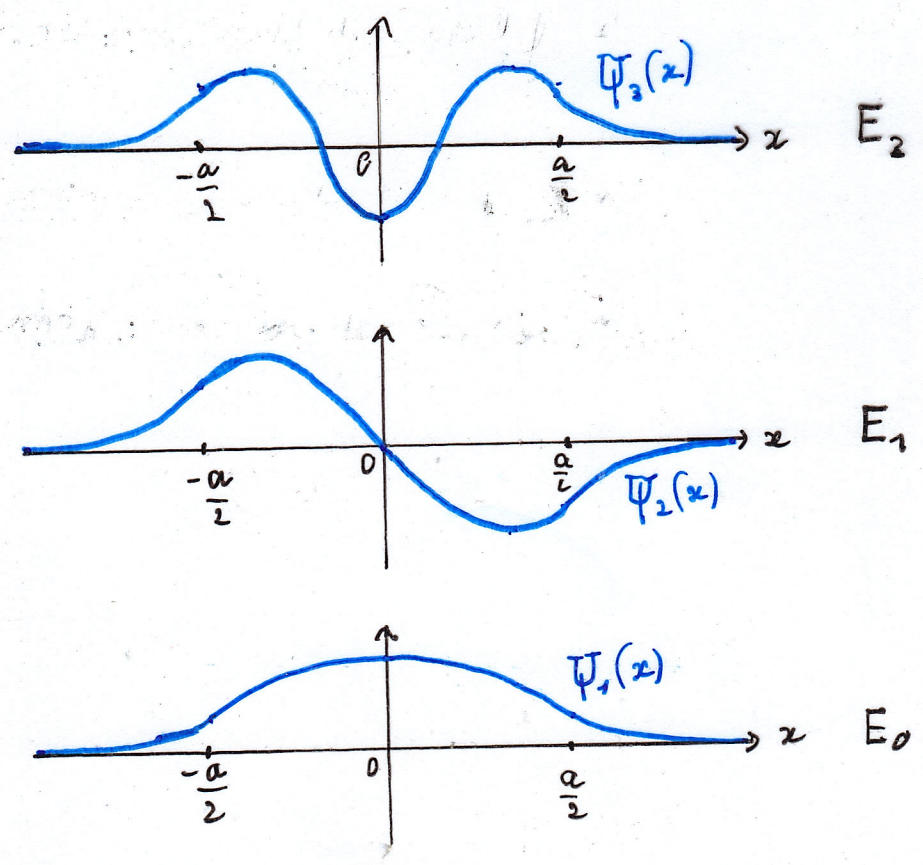
Il paraît que ça date de Pythagore, et de sa description de la musique. Si on parle des puits infinis, il faut impérativement faire le lien avec une corde vibrante.



Niveaux d'énergie dans un puits carré:



États liés associés



# Historique

\* années 1880 : observation des raies, règles empiriques (Balmer, Ritz, Rydberg...)

$$\frac{1}{\lambda_{mp}} = R_H \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{p^2} \right) \quad (m, p) \in \mathbb{N}^{*2}, m < p$$

\* 1904 : modèle de Thomson



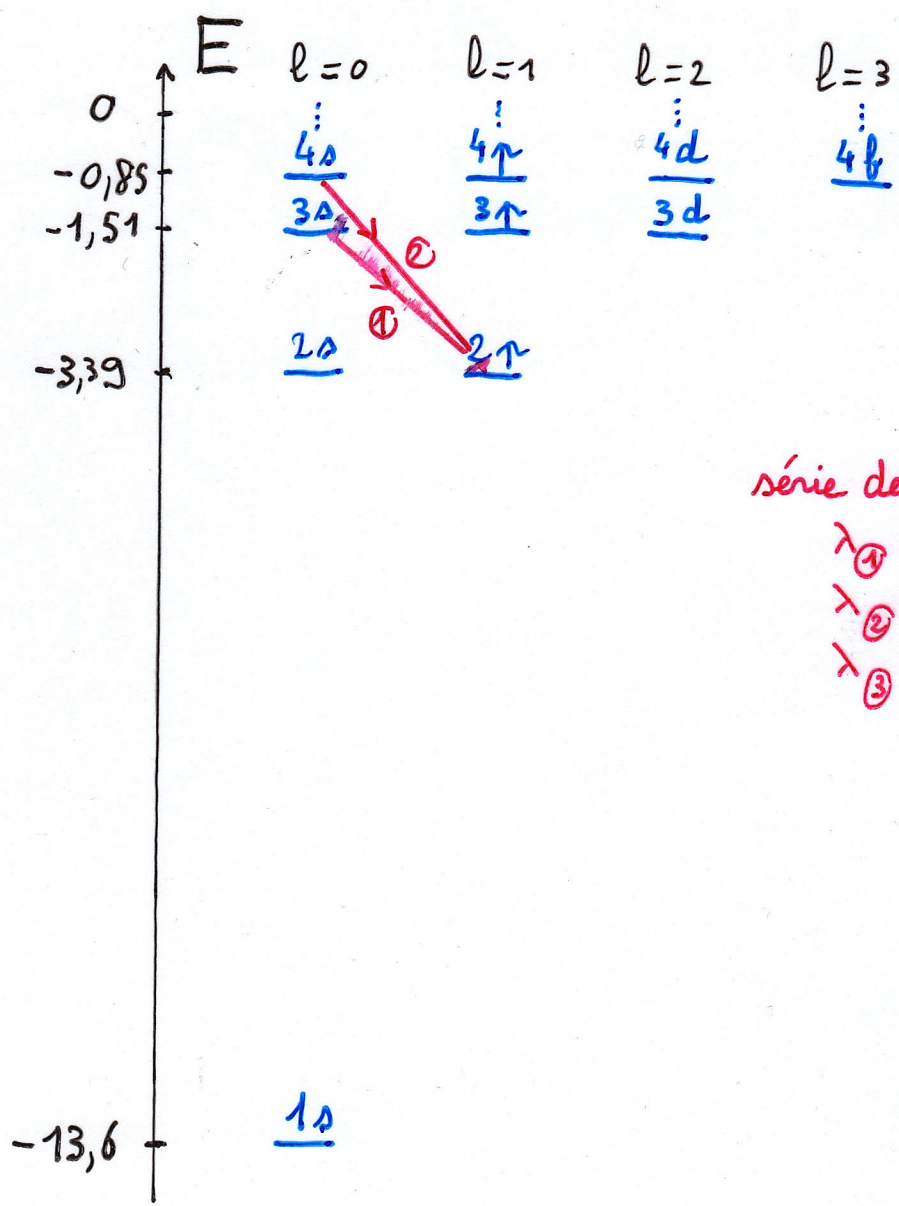
$$\vec{F}_{\text{rappel}} = -m_e \cdot \omega^2 \vec{r}$$

\* 1911 : modèle de Rutherford ; plus de fréquence de résonance, instabilité.

\* 1913 : modèle semi-quantique de Bohr

\* 1926 : solution de Schrödinger

# Spectre de l'hydrogène



série de Balmer :

- $\lambda_{①} = 656 \text{ nm}$
- $\lambda_{②} = 486 \text{ nm}$
- $\lambda_{③} = 434 \text{ nm}$