

Quantification de l'énergie pour les systèmes simples

Chapitre 4

Les buts de cet amphi

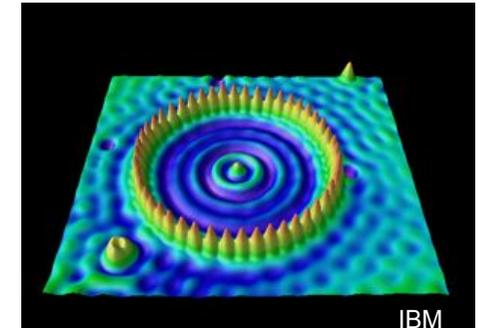
Utiliser le formalisme de la physique ondulatoire pour aborder des problèmes de physique d'une grande importance pratique

➔ Propagation de particules

microscope à effet tunnel,
radioactivité α

➔ Particules confinées

énergies quantifiées,
liaison chimique.



surface d'un cristal de cuivre,
48 atomes de fer forment une
enceinte d'un rayon de 7 nm

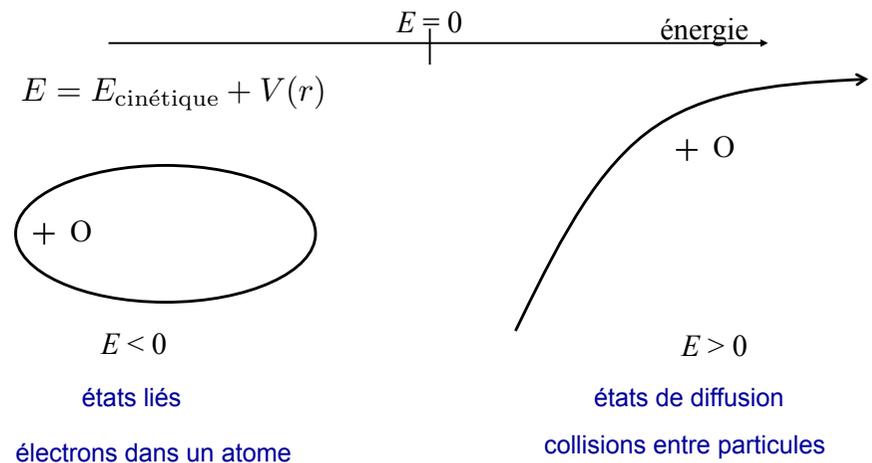
1.

États liés et états de diffusion

Les deux types de mouvement classique

On considère un potentiel qui tend vers 0 quand r tend vers l'infini

$$V(r) = -\frac{Gmm'}{r}$$



Les états stationnaires de l'équation de Schrödinger

Hamiltonien $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$ $\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$

On s'intéresse aux états propres de l'hamiltonien $\hat{H}\psi_\alpha(x) = E_\alpha \psi_\alpha(x)$

E_α : valeur propre réelle (dimension d'une énergie)

« équation de Schrödinger indépendante du temps »

Rappel : une fois les $\psi_\alpha(x)$ connus, on déduit l'évolution de tout état $\psi(x, t)$

$$\psi(x, 0) = \sum_{\alpha} C_{\alpha} \psi_{\alpha}(x) \quad \longrightarrow \quad \psi(x, t) = \sum_{\alpha} C_{\alpha} \psi_{\alpha}(x) e^{-iE_{\alpha}t/\hbar}$$

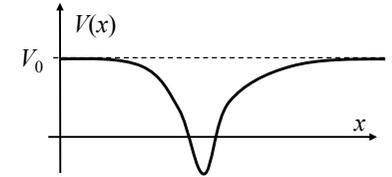
Remarque : on peut chercher des fonctions propres ψ_{α} réelles.

Si ψ_{α} est solution, alors ψ_{α}^* est solution pour la même énergie.

La forme des états stationnaires (1D)

On considère un potentiel qui tend vers V_0 quand x tend vers l'infini

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x) \psi(x) = E \psi(x)$$



Solutions physiquement intéressantes :

→ $\psi(x)$ tend vers 0 quand x tend vers l'infini

Si $\int |\psi(x)|^2 dx = 1$, état directement éligible comme fonction d'onde

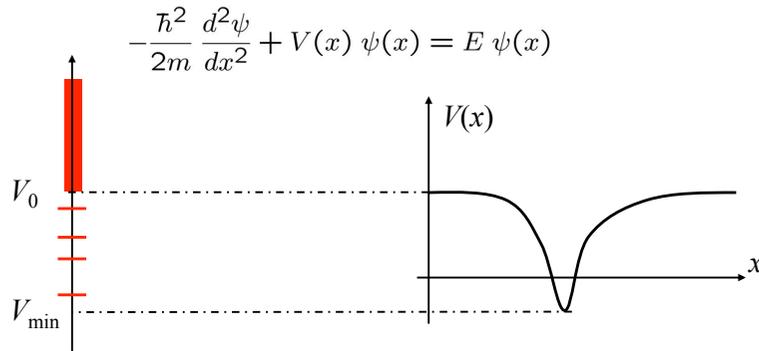
→ état lié

→ $\psi(x)$ se comporte comme une combinaison d'ondes planes à l'infini :

$$\psi(x) \simeq \alpha e^{ikx} + \beta e^{-ikx} \quad \text{quand} \quad x \rightarrow +\infty \text{ et/ou } -\infty$$

On peut l'utiliser pour former des paquets d'ondes → état de diffusion

Etats liés et états de diffusion



→ Aucun état physiquement intéressant avec $E < V_{\min}$

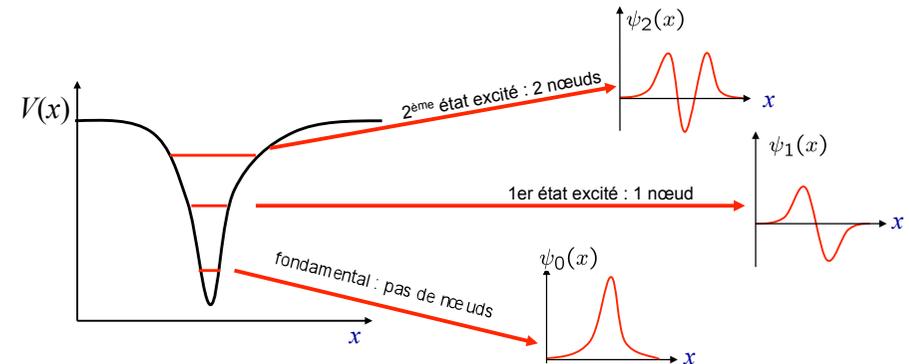
→ Entre V_{\min} et V_0 , états liés en nombre fini ou dénombrable

→ Au dessus de V_0 , continuum d'énergies : états de diffusion

Deux théorèmes importants concernant les états liés (1D)

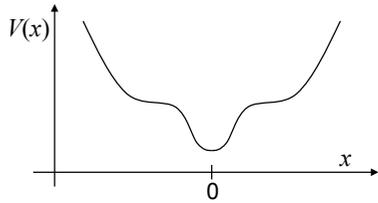
Le théorème de Sturm-Liouville (fonctions propres réelles)

On peut classer les niveaux par valeur croissante de l'énergie en fonction du nombre de nœuds (points où le signe change) de la fonction d'onde.



Deux théorèmes importants concernant les états liés (1D)

Le cas de potentiels symétriques (ou « pairs »)



Potentiel $V(x)$ symétrique par rapport à 0 : $V(x) = V(-x)$

On peut chercher les états propres de $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)$ sous forme de fonctions paires ou impaires.

$$\psi(x) = \psi(-x)$$

$$\psi(x) = -\psi(-x)$$

A montrer en exercice, en remarquant que si $\psi(x)$ est état propre, alors $\psi(-x)$ l'est également

Les fonctions impaires ont toujours au moins un nœud en $x = 0$

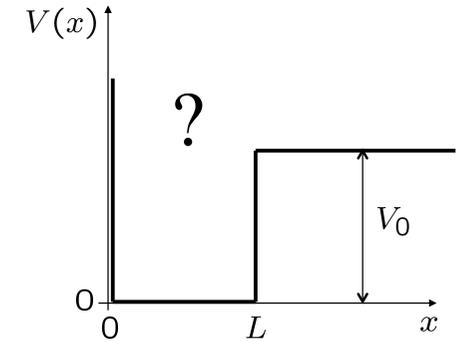
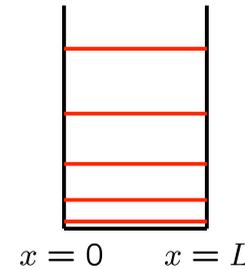


État fondamental pair
Premier état excité impair
Deuxième état excité pair,...

2.

L'exemple du puits semi-infini

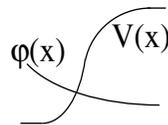
énergies: $n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$



Conditions de continuité : résumé

Potentiel $V(x)$

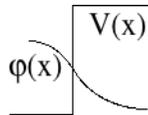
continu, borné (cas "réel")



Fonction d'onde $\phi(x)$

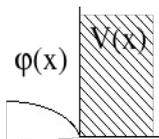
bornée, continue, 2 fois dérivable

discontinu, borné ("marche")



bornée, continue, 1 fois dérivable ($\phi''(x)$ est discontinue)

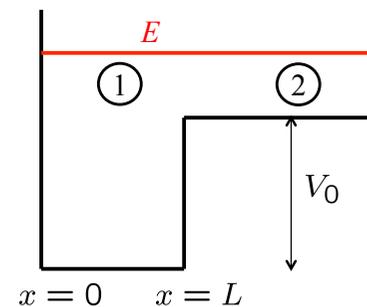
discontinu, non borné ("mur")



bornée, continue, non dérivable ($\phi'(x)$ est discontinue)

Recherche des états de diffusion

état d'énergie E supérieure à V_0



région 1 : $\psi'' + k^2\psi = 0$

$$k = \sqrt{2mE}/\hbar$$

$$\psi(0) = 0$$

$$\Rightarrow \psi(x) = A \sin(kx)$$

région 2 : $\psi'' + k'^2\psi = 0$

$$k' = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar$$

$$\Rightarrow \psi(x) = B \sin(k'x) + C \cos(k'x)$$

Il faut ensuite raccorder ces fonctions en $x = L$

Recherche des états de diffusion $E > V_0$ (II)

En $x = L$, la fonction d'onde ψ et sa dérivée ψ' sont continues :

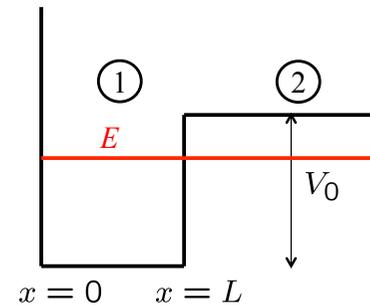
$$\begin{aligned} A \sin(kL) &= B \sin(k'L) + C \cos(k'L) & k &= \sqrt{2mE}/\hbar \\ kA \cos(kL) &= k' (B \cos(k'L) - C \sin(k'L)) & k' &= \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar \end{aligned}$$

Système linéaire de 2 équations à 3 inconnues : pour toute $E > V_0$ on trouve une solution différente de la solution nulle $A = B = C = 0$

Pour toute énergie supérieure à la valeur asymptotique du potentiel, on trouve un état propre $\psi(x)$ de l'hamiltonien. Il se comporte comme une onde plane à l'infini, en $B \sin(k'x) + C \cos(k'x)$ ou de manière équivalente en $\beta e^{ik'x} + \gamma e^{-ik'x}$

Recherche des états liés

état d'énergie E inférieure à V_0



région 1 : $\psi'' + k^2\psi = 0$
 $k = \sqrt{2mE}/\hbar$
 $\psi(0) = 0$
 $\Rightarrow \psi(x) = A \sin(kx)$

région 2 : $\psi'' - K^2\psi = 0$
 $K = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$
 $\Rightarrow \psi(x) = B e^{-Kx} + C e^{Kx}$

Il faut encore raccorder ces fonctions en $x = L$...

Recherche des états liés $E < V_0$ (II)

En $x = L$, la fonction d'onde ψ et sa dérivée ψ' sont continues :

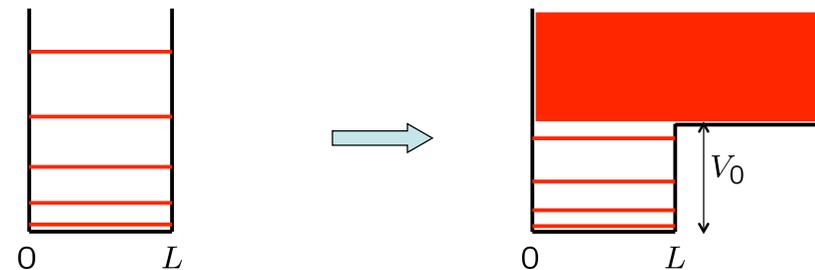
$$\begin{aligned} A \sin(kL) &= B e^{-KL} & k &= \sqrt{2mE}/\hbar \\ kA \cos(kL) &= -KB e^{-KL} & K &= \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar \end{aligned}$$

Système linéaire de 2 équations à 2 inconnues : on ne trouve pas toujours une solution différente de la solution nulle $A = B = 0$

Il faut pour cela $k \cot(kL) = -K$

Pour m et V_0 donnés, ceci n'est possible que pour des valeurs particulières de l'énergie E .

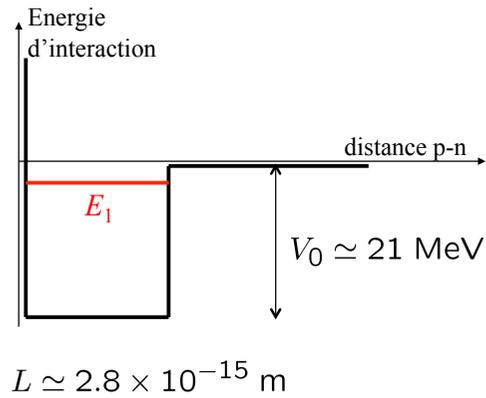
Résultats pour le puit semi-infini



Continuum d'états libres pour $E > V_0$

Nombre fini d'états liés pour $0 < E < V_0$

Modélisation de la force nucléaire entre un proton et un neutron



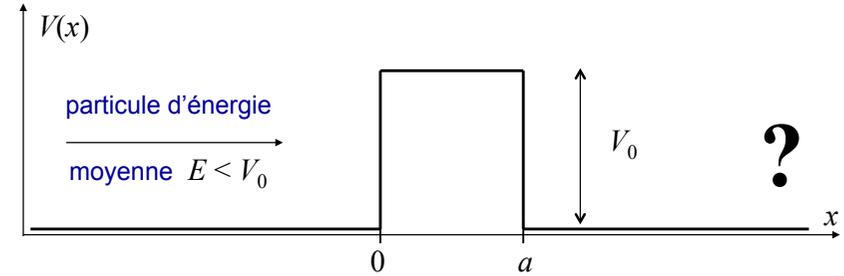
On ne trouve qu'un seul état lié, et cette liaison est faible:

$$V_0 - E_1 \simeq 2.2 \text{ MeV}$$



deuteron
(noyau de deutérium)

3. L'effet tunnel



Le coefficient de transmission par effet tunnel

➔ Le coefficient de transmission est non nul, contrairement au cas classique !

➔ Le coefficient de transmission varie exponentiellement avec la hauteur V_0 et la largeur a de la barrière

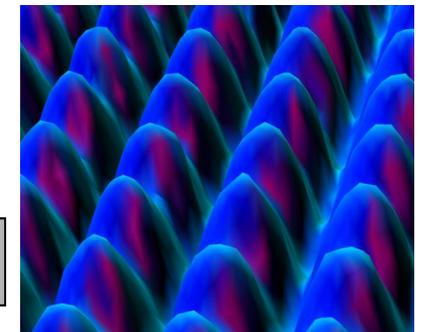
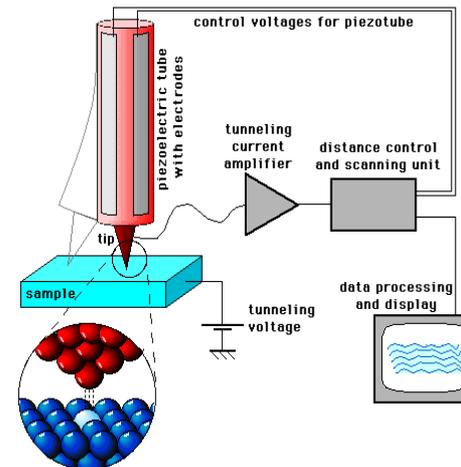
$$T \propto \exp(-2\kappa a) \quad \kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)/\hbar}$$

nombre ridiculement faible pour des objets macroscopiques...

retournement « spontané » d'une pièce de monnaie : $10^{-10^{27}}$

Le microscope à effet tunnel

Binnig et Rohrer (IBM) 1981-85
Prix Nobel 1986



Surface de Nickel (D. Eigler, IBM)

Electron : $V_0 - E = 1 \text{ eV}$, $a = 5 \text{ Angströms}$: $T \sim 6 \times 10^{-3}$
 $a = 6 \text{ Angströms}$: $T \sim 2 \times 10^{-3}$

Le courant varie extrêmement vite avec la distance !

Le microscope à effet tunnel

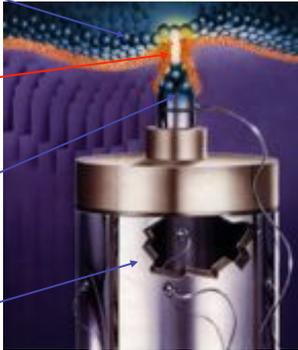
Gerd Binnig et Heinrich Rohrer, Prix Nobel 1986

Surface
Métallique

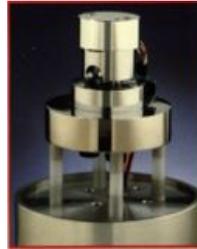
Courant
électrique:
Effet tunnel !

Pointe
Métallique

Mécanisme
de
déplacement
de la pointe



Dessin « artistique »



Appareil complet

Le microscope à effet tunnel

Gerd Binnig et Heinrich Rohrer, Prix Nobel 1986

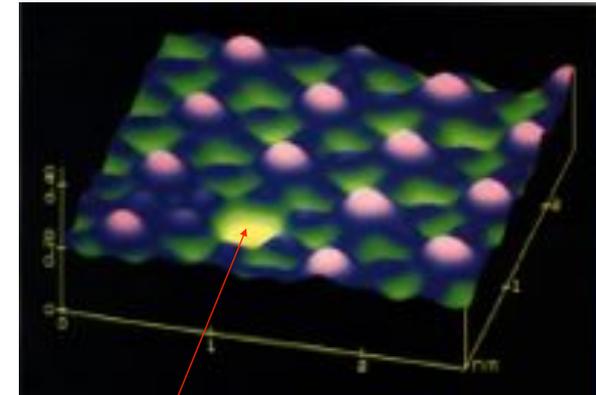
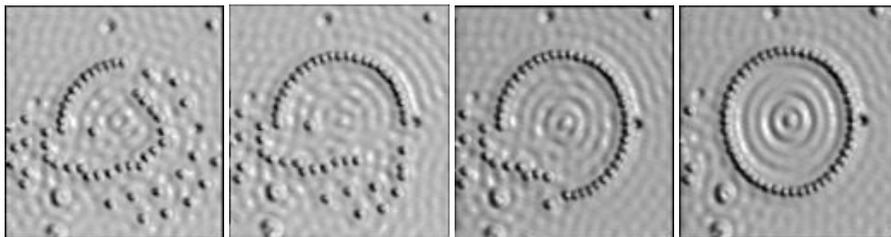


Image : un atome est absent !

Manipulations d'atomes

Etape 1 : La pointe « pousse » les atomes : ils sont rangés un par un !
Etape 2 : La pointe s'éloigne de la surface : elle « voit » les atomes sans les déplacer



1

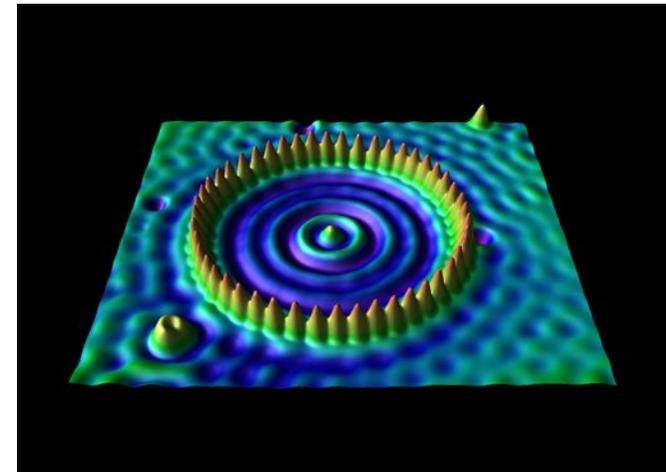
2

3

4

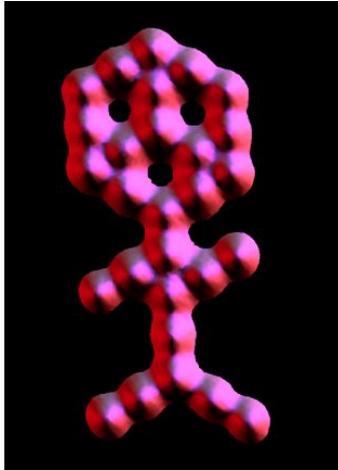
Atomes de Fer déplacés sur une surface de Cuivre

Un anneau d'atomes



48 atomes de Fer rangés sur une surface de Cuivre (IBM)
Image « virtuelle » reconstruite par ordinateur

« Bonhomme atomique »



Images extraites de: "The STM image gallery"
(<http://www.almaden.ibm.com/vis/stm/gallery.html>)

« Carbone-homme »

Réalisé en disposant des molécules C-O (oxygène et carbone) sur une surface de platine (D.M. Eigler, IBM, 1990)

Ces images ne sont pas des photographies : personne ne pourrait "voir" cela avec son oeil.

Ce ne sont pas non plus des images de synthèse.

Ce sont des visualisations de mesures expérimentales.

La radioactivité alpha

Röntgen 1895 : les rayons X (photons) émis dans des tubes à rayons cathodiques

→ impressionnent des plaques photos

Le verre du tube est fluorescent au niveau de l'impact du faisceau d'électrons



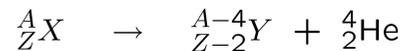
Becquerel, février 1896 : qu'en est-il de la fluorescence de sels d'uranium exposés à la lumière du soleil ?

et quand il n'y a pas de soleil ???

Pierre et Marie Curie, 1898 : séparations chimiques successives sur les sels, puis sur des résidus de minerais d'uranium. Ils isolent le polonium et le radium.



Caractéristiques de l'émission α

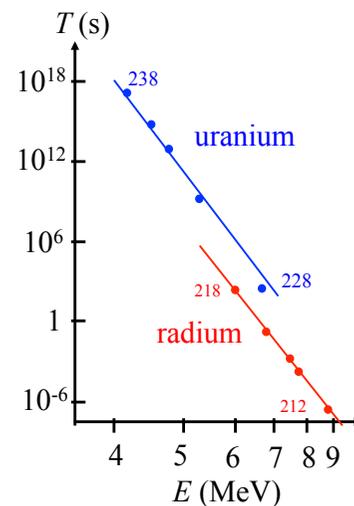
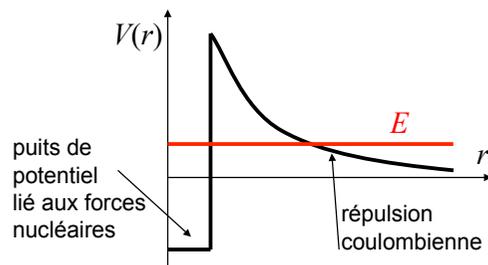


particule α = noyau d'hélium (Rutherford et Soddy, 1909)

énergie de la particule α : E entre 4 et 9 MeV

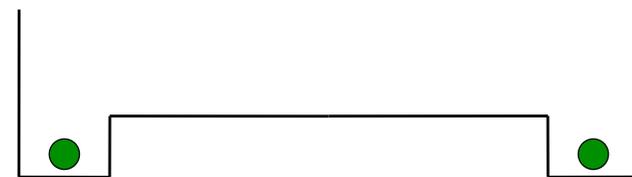
temps moyen d'émission : T entre 10^{-6} s et 10^{18} s

Gamow 1929 : $\log T = a + \frac{b}{\sqrt{E}}$



4.

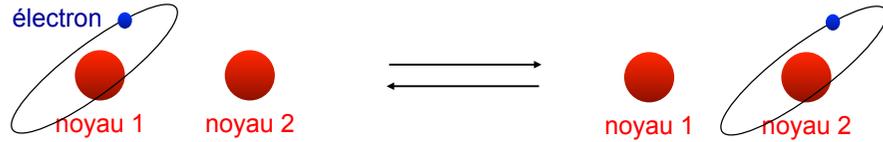
Le modèle du puits double



ou « comment combiner effet tunnel et puits de potentiel »...

Modélisation (très simple) de la liaison chimique

Deux noyaux et un électron (par exemple l'ion H_2^+) :

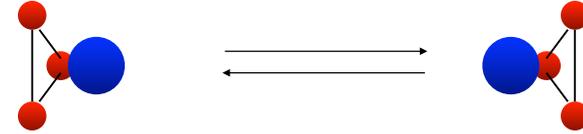


Le « saut tunnel » de l'électron de l'orbite 1 vers l'orbite 2 crée un abaissement d'énergie, d'autant plus grand que les noyaux sont proches.

attraction entre atomes \rightarrow liaison chimique

Changement de conformation des molécules

L'inversion de la molécule d'ammoniac NH_3 :
structure pyramidale qui peut se « retourner » comme un parapluie

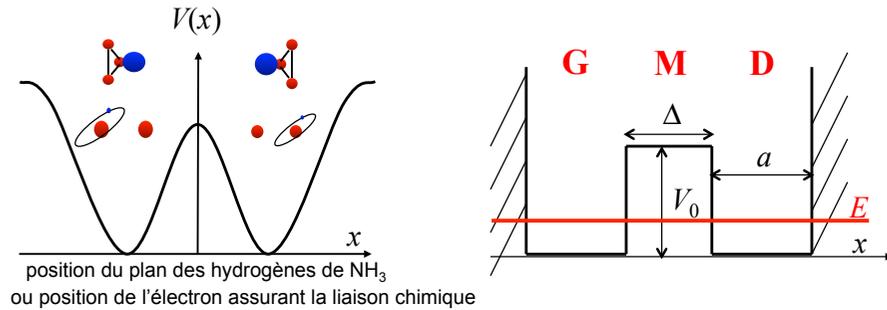


configuration « gauche »

configuration « droite »

L'état quantique fondamental de la molécule est une « superposition » des deux configurations classiques « gauche » et « droite »

Modélisation par un double puits carré



On s'intéresse aux niveaux d'énergie $E < V_0$:

\rightarrow quel est le rôle de l'effet tunnel à travers la barrière ?

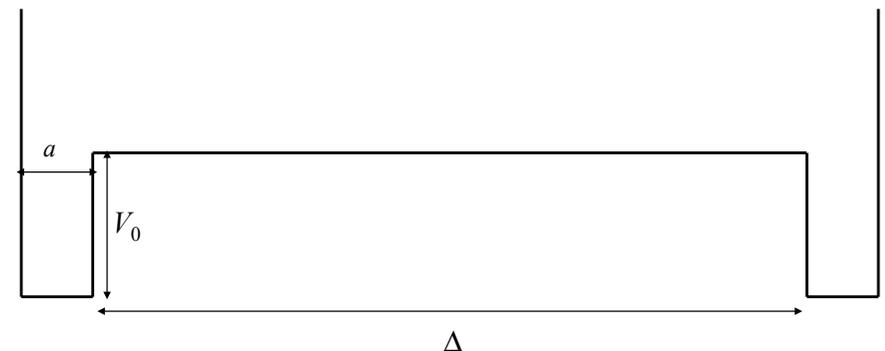
Le puits de potentiel $V(x)$ est pair : on peut chercher les états propres de l'hamiltonien sous forme de **fonctions paires** ou de **fonctions impaires**

$$\psi(x) = \psi(-x) \quad \psi(x) = -\psi(-x)$$

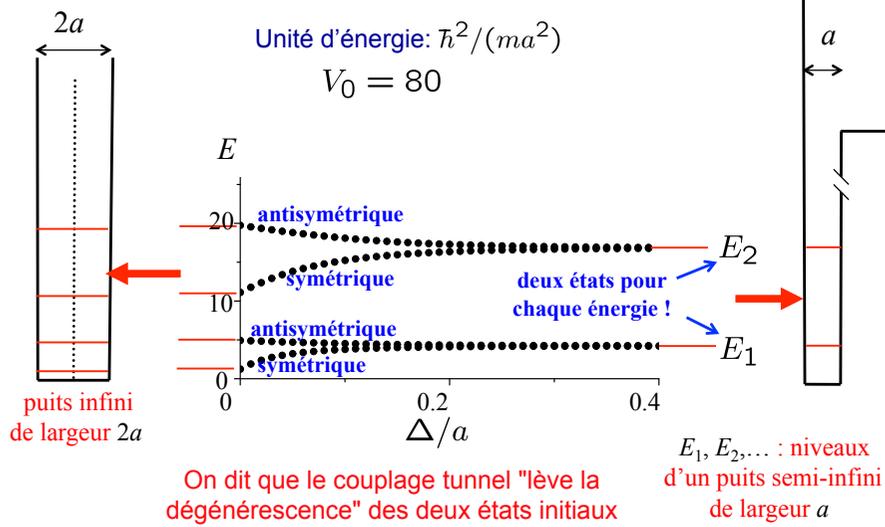
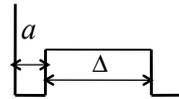
Les niveaux d'énergie les plus bas du double puits

On fixe la largeur a et on choisit $\hbar^2/(ma^2)$ comme unité d'énergie.

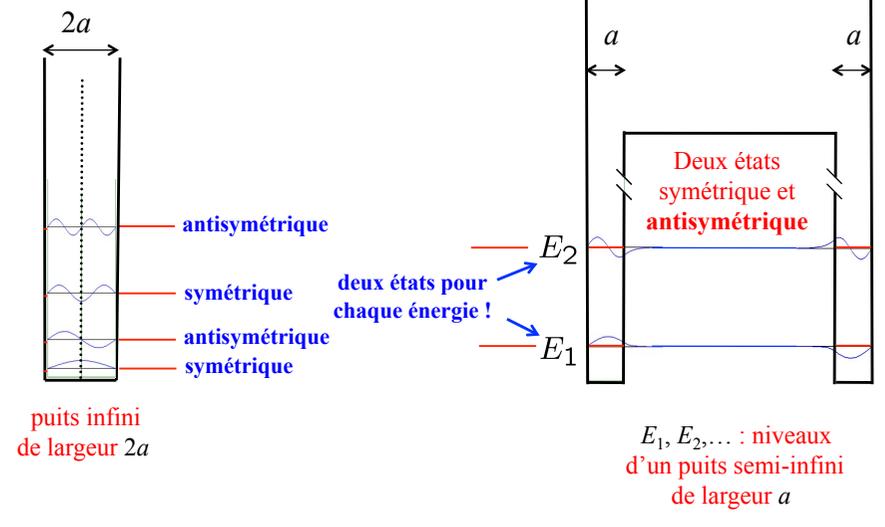
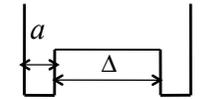
On choisit $V_0 = 80$ dans cette unité et on fait varier la largeur Δ



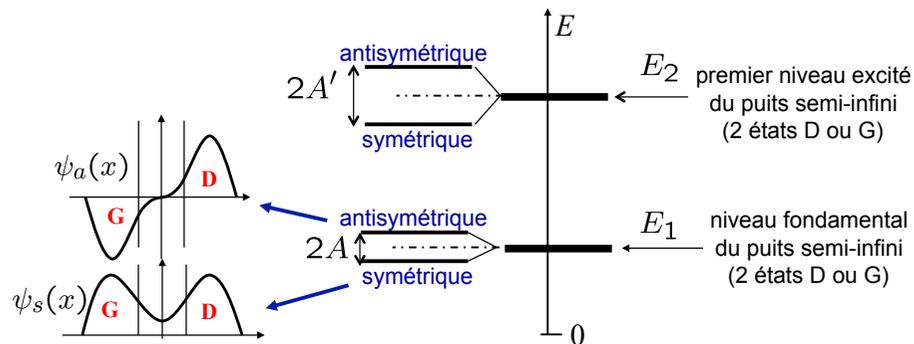
Les niveaux d'énergie les plus bas



Les niveaux d'énergie les plus bas



Les premiers niveaux d'énergie pour une grande barrière



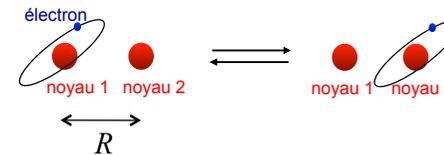
$$E_a = E_1 + A$$

$$E_s = E_1 - A$$

avec $A = \frac{2\hbar^2\pi^2}{m\kappa a^3} e^{-\kappa\Delta}$

si $V_0 \gg E$ $\kappa \simeq \sqrt{2mV_0}/\hbar$ $\kappa a, \kappa\Delta \gg 1$

L'origine de la liaison chimique



Le clivage $2A$ dépend de la distance R entre les deux noyaux

