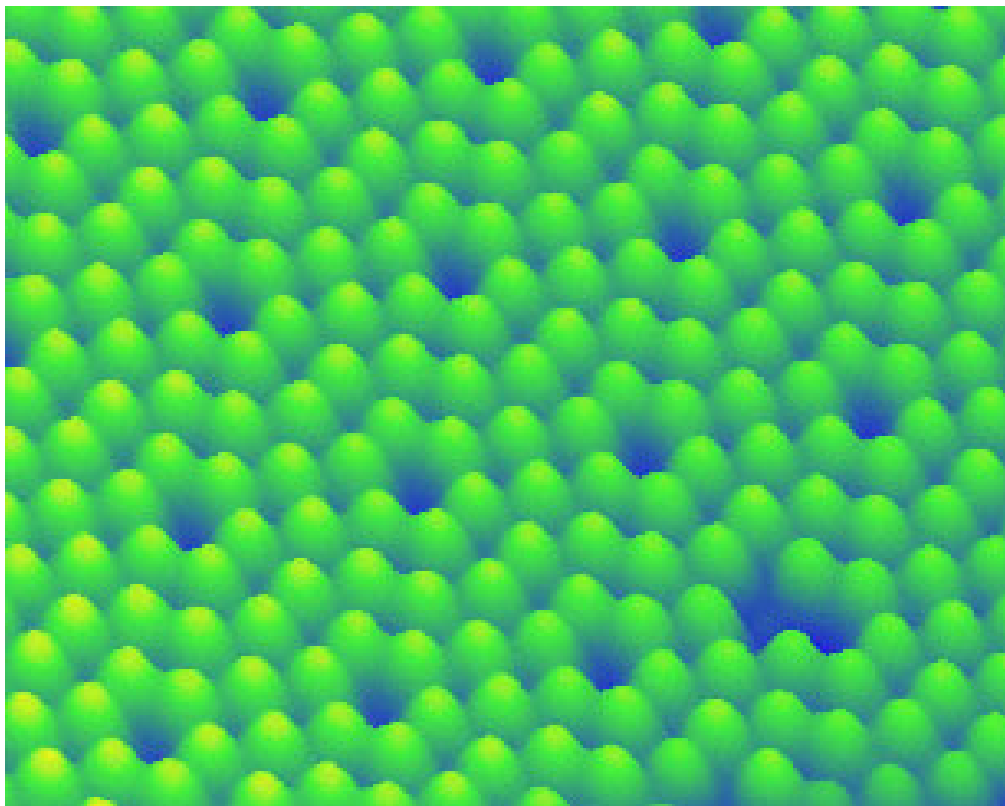


11 LA MÉCANIQUE QUANTIQUE

Comment peut-on construire un microscope qui grossit tellement qu'il permet même de voir les atomes ?



www.aip.org/history/einstein/atoms.htm

Découvrez la réponse à cette question dans ce chapitre.

En 1925, Erwin Schrödinger développe davantage les idées de De Broglie et arrive à une équation qui permet de calculer l'amplitude de l'onde en fonction de la position. Le résultat dépend de l'énergie de la particule et de l'énergie potentielle, qui elle aussi varie avec la position. Cette équation est l'équation de Schrödinger.

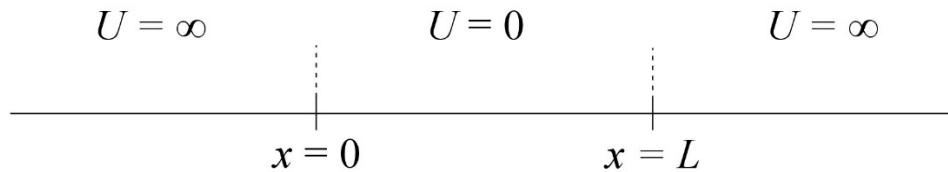
$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\psi = 0$$

Il existe une version un peu plus complexe en trois dimensions. Je vous rassure tout de suite en vous disant que vous n'aurez pas à résoudre cette équation différentielle pour trouver l'amplitude de l'onde. On va cependant vous montrer ce que donne l'application de cette formule dans des situations simples ou importantes.

11.1 UNE PARTICULE DANS UNE BOITE

Boite en une dimension

On va commencer par une situation où l'énergie potentielle est nulle entre $x = 0$ et $x = L$ et infinie à l'extérieur de la région entre $x = 0$ et $x = L$.



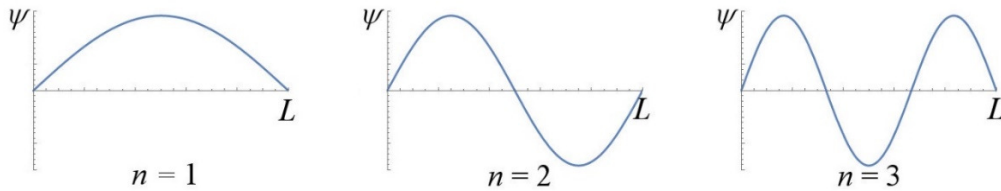
Dans cette situation, une particule est prisonnière dans la région de l'espace entre $x = 0$ et $x = L$. La particule ne peut sortir de cette région, peu importe l'énergie qu'on lui donne, puisque la particule ne peut pas aller aux endroits où U est plus grand que l'énergie mécanique de la particule. On appelle aussi cette situation *une particule dans un puits de potentiel infini* parce que le graphique du potentiel ressemble à un puits ayant des côtés d'une hauteur infinie.

La solution de l'équation de Schrödinger est relativement simple dans ce cas. Les solutions sont :

- Une onde sinusoïdale pour la région entre $x = 0$ et $x = L$.
- 0 pour les régions $x < 0$ et $x > L$.

De plus, comme la fonction d'onde doit être continue, l'onde sinusoïdale doit être nulle à $x = 0$ et $x = L$.

On se retrouve donc avec une situation similaire à celle que l'on avait obtenue avec les ondes stationnaires. Les ondes possibles sont les suivantes (du moins les trois premières).



Ce qui nous donne les valeurs possibles de longueurs d'onde suivantes.

Longueurs d'onde possibles pour une particule enfermée dans une boîte en une dimension

$$\lambda_n = \frac{2L}{n}$$

Comme la longueur d'onde est

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

Les quantités de mouvement possibles pour la particule sont

$$\begin{aligned} p_n &= \frac{h}{\lambda_n} \\ &= \frac{nh}{2L} \end{aligned}$$

Pour trouver l'énergie, il nous faut l'énergie cinétique. Pour la trouver facilement, rappelons-nous ce lien entre la quantité de mouvement et l'énergie cinétique quand la vitesse est loin de la vitesse de la lumière trouvée en mécanique.

$$E_k = \frac{1}{2} \frac{p^2}{m}$$

L'énergie est donc

$$\begin{aligned} E_n &= E_k + U \\ &= \frac{1}{2} \frac{p_n^2}{m} + 0 \end{aligned}$$

Si on remplace, on a

Énergies possibles pour une particule enfermée dans une boîte en une dimension

$$E_n = n^2 \frac{h^2}{8mL^2}$$

Ce sont les seules valeurs d'énergie que la particule dans une boîte peut avoir. L'énergie est donc quantifiée, ce qui signifie qu'elle ne peut prendre que certaines valeurs précises.

Exemple 11.1.1

Un électron est prisonnier d'une boîte unidimensionnelle d'une longueur de 0,7 nm. Quelles sont les quatre plus petites valeurs d'énergie que peut avoir cet électron ?

Les niveaux d'énergie sont donnés par

$$\begin{aligned}
 E_n &= n^2 \frac{h^2}{8mL^2} \\
 &= n^2 \cdot \frac{(6,626 \times 10^{-34} \text{ Js})^2}{8 \cdot 9,11 \times 10^{-31} \text{ kg} \cdot (0,7 \times 10^{-9} \text{ m})^2} \\
 &= n^2 \cdot 1,23 \times 10^{-19} \text{ J} \\
 &= n^2 \cdot 0,767 \text{ eV}
 \end{aligned}$$

Les énergies des niveaux sont donc

$$\begin{aligned}
 E_1 &= 1^2 \cdot 0,767 \text{ eV} \\
 &= 0,767 \text{ eV}
 \end{aligned}$$

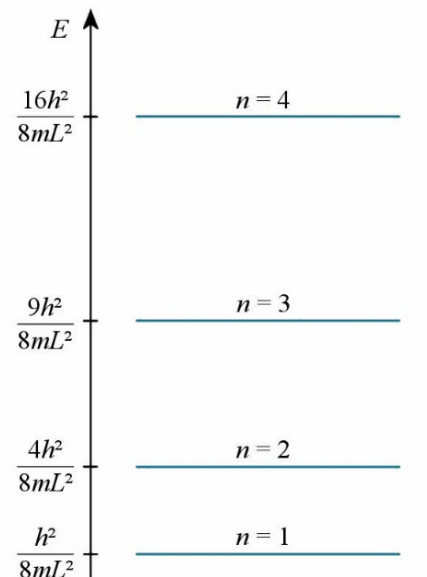
$$\begin{aligned}
 E_2 &= 2^2 \cdot 0,767 \text{ eV} \\
 &= 3,070 \text{ eV}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 E_3 &= 3^2 \cdot 0,767 \text{ eV} \\
 &= 6,907 \text{ eV}
 \end{aligned}$$

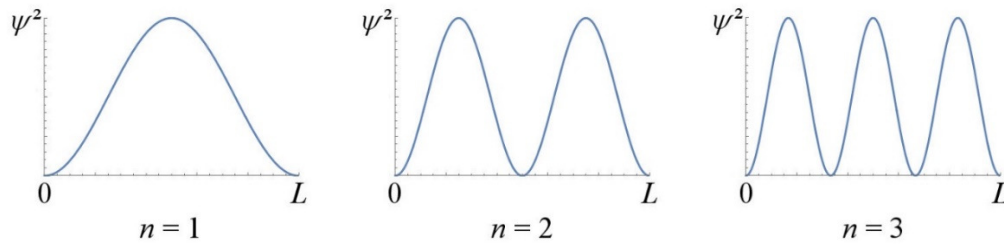
$$\begin{aligned}
 E_4 &= 4^2 \cdot 0,767 \text{ eV} \\
 &= 12,279 \text{ eV}
 \end{aligned}$$

On peut représenter ces énergies par le diagramme suivant (on montre 4 niveaux, mais il y en a une infinité).

Dans ce diagramme, il n'y a qu'un seul axe (qui est l'axe vertical utilisé pour l'énergie).



Si on fait le graphique de ψ^2 pour les trois premiers niveaux, on obtient les graphiques suivants.



Ces graphiques nous montrent la probabilité de trouver la particule à un endroit dans la boîte si on mesure sa position. Par exemple, quand la particule est au troisième niveau, on voit qu'il y a trois zones où il y a de fortes chances de trouver la particule alors qu'il est impossible d'observer la particule à $x = L/3$ et à $x = 2L/3$.

Rappelez-vous que, selon l'interprétation de Copenhague, la particule est partout en même temps dans la boîte (sauf aux endroits où ψ^2 est nul). C'est seulement si on mesure la position de la particule qu'elle sera à un endroit précis choisi au hasard parmi toutes les possibilités en suivant les lois des probabilités.

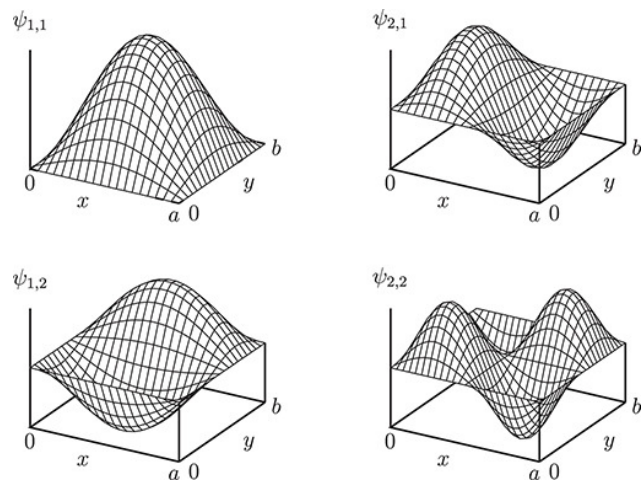
Boîte en 3 dimensions

Commençons par passer en 2 dimensions. Dans ce cas, on a les ondes suivantes.

La solution est maintenant caractérisée par 2 nombres. Ces nombres, n_x et n_y , indiquent le nombre de demi-longueurs d'onde qu'il y a en x et en y . Les ondes possibles sont dénotées par ψ_{n_x, n_y} . Par exemple, l'onde $\psi_{1,2}$ est la solution quand $n_x = 1$ et $n_y = 2$.

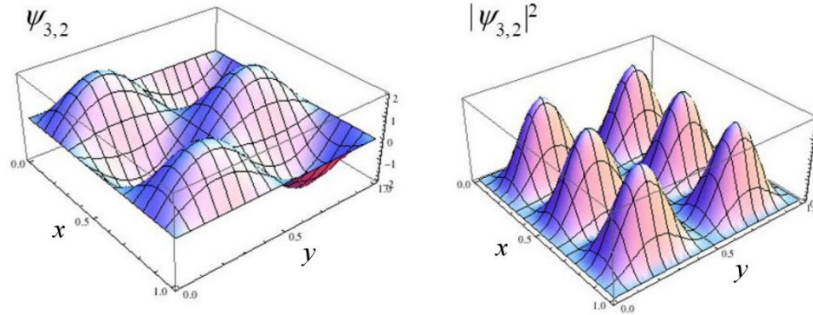
Dans ce cas, l'énergie est

$$E_n = (n_x^2 + n_y^2) \frac{h^2}{8mL^2}$$



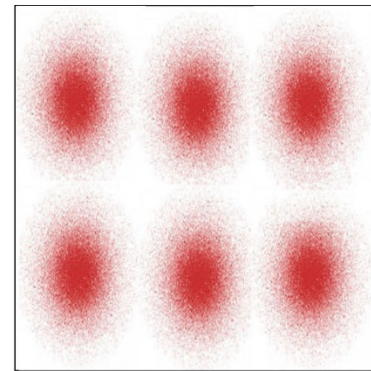
iopscience.iop.org/book/978-1-6817-4637-1/chapter/bk978-1-6817-4637-1ch4

Encore une fois, ces ondes permettent de calculer la probabilité de trouver la particule à un endroit spécifique dans la boîte. Par exemple, voici le graphique de la probabilité de trouver la particule à différents endroits pour l'onde $\psi_{3,2}$ (Ce qui se reconnaît par le fait qu'il y a 3 maximums de probabilité en x et 2 en y .)



slideplayer.com/slide/4751950/

On peut aussi représenter cette probabilité comme sur l'image de droite. Cette image montre ce qu'on obtiendrait si on mesurait plusieurs milliers de fois la position de la particule dans la boîte. Évidemment, on obtient plus souvent des positions où la probabilité est plus grande.



En trois dimensions, la solution est maintenant caractérisée par 3 nombres. Ces nombres, n_x , n_y et n_z , indiquent le nombre de demi-longueurs d'onde qu'il y a en x , en y et en z . Les ondes possibles sont dénotées par ψ_{n_x, n_y, n_z} . Par exemple, l'onde est $\psi_{1,2,4}$ quand $n_x = 1$, $n_y = 2$ et $n_z = 4$.

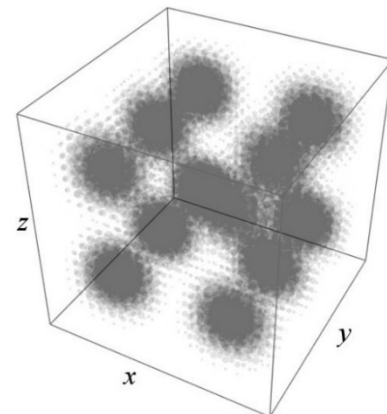
Dans ce cas, l'énergie est

Énergies possibles pour une particule enfermée dans une boîte en 3 dimensions

$$E_n = (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \frac{h^2}{8mL^2}$$

Le carré de l'amplitude de l'onde ψ^2 donne encore la probabilité de trouver la particule. Par exemple, la figure de droite montre les endroits où il est plus probable de trouver la particule pour l'onde $\psi_{2,3,2}$ (Ce qui se reconnaît par le fait qu'il y a 2 maximums de probabilité en x , 3 en y et 2 en z .)

L'image montre les positions qu'on obtiendrait si on mesurait plusieurs milliers de fois la position de la particule dans la boîte.



Fait avec demonstrations.wolfram.com/ParticlesIn1DAnd3DBoxes/

Exemple 11.1.2

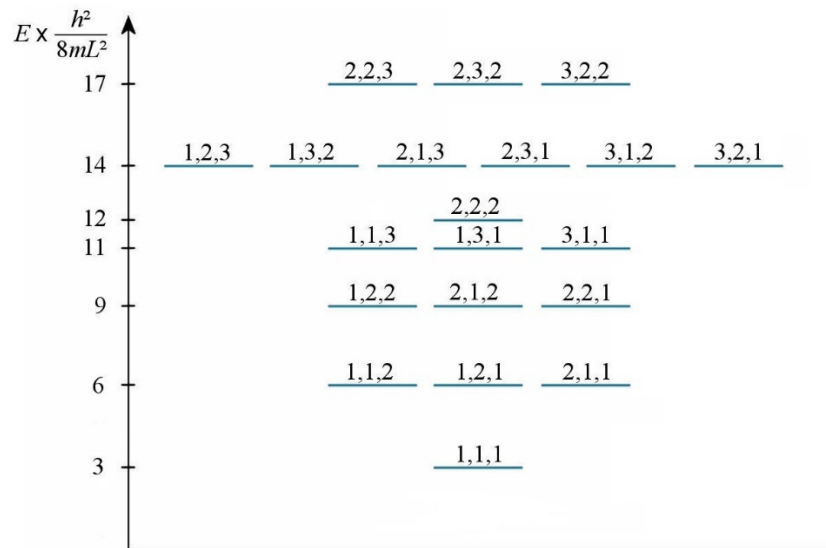
Un électron est prisonnier d'une boîte en trois dimensions dont les côtés ont une longueur de 0,7 nm. Quelle est l'énergie de l'électron s'il est au niveau caractérisé par $n_x = 1$, $n_y = 3$ et $n_z = 2$?

L'énergie est

$$\begin{aligned}
 E_n &= (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \frac{h^2}{8mL^2} \\
 &= (1^2 + 3^2 + 2^2) \cdot \frac{(6,626 \times 10^{-34} \text{ Js})^2}{8 \cdot 9,11 \times 10^{-31} \text{ kg} \cdot (0,7 \times 10^{-9} \text{ m})^2} \\
 &= 1,72 \times 10^{-18} \text{ J} \\
 &= 10,74 \text{ eV}
 \end{aligned}$$

Il y a maintenant des niveaux qui ont la même énergie. Par exemple le niveau caractérisé par $n_x = 1$, $n_y = 1$, $n_z = 2$, le niveau caractérisé par $n_x = 1$, $n_y = 2$, $n_z = 1$ et le niveau caractérisé par $n_x = 2$, $n_y = 1$, $n_z = 1$ ont tous la même énergie. Quand plusieurs niveaux ont la même énergie, on dit qu'ils sont *dégénérés*.

On a alors le diagramme d'énergie suivant.



Notez que si une particule a une énergie pour laquelle il y a plusieurs niveaux, la particule est dans tous les niveaux en même temps. Par exemple, avec une énergie de $6h^2/8mL^2$, la particule est en même temps dans les trois états dénotés par $\psi_{1,1,2}$, $\psi_{1,2,1}$ et $\psi_{2,1,1}$. C'est seulement si on mesure l'état de la particule que le niveau va se décider.

11.2 LE SPIN

Qu'est-ce que le spin ?

Durant les années 20, on découvre que plusieurs particules ont un moment cinétique.

Le moment cinétique de la particule est appelé le *spin*. C'est comme si l'électron tournait sur lui-même, mais cette image ne peut pas être vraie puisque l'électron n'a même pas de grosseur dans la théorie actuelle. (Même si on voit souvent ce genre de représentation dans les ouvrages de vulgarisation.) Pratiquement toutes les particules connues, comme les électrons, les protons et les neutrons, ont un moment cinétique, mais on ne sait pas pourquoi ces particules ont un moment cinétique. Le spin d'une particule est une propriété intrinsèque de la particule, au même titre que sa charge électrique et sa masse. Tout comme on ne sait pas pourquoi une particule a une certaine charge électrique, on ne sait pas pourquoi les particules ont un certain moment cinétique. La particule a un moment cinétique, c'est tout ce qu'on peut dire et on n'a pas d'explication à cela.

La grandeur du moment cinétique d'une particule, noté S , est donnée par la formule

$$S = \sqrt{s(s+1)} \frac{h}{2\pi}$$

où s peut prendre les valeurs 0, $\frac{1}{2}$, 1, $1\frac{1}{2}$, 2, ... Ce s s'appelle aussi, par raccourci, le spin de la particule. L'électron, le proton et le neutron ont un spin de $s = \frac{1}{2}$ et le photon a un spin de $s = 1$.

Ce qui est encore plus étonnant, c'est que le spin ne peut pas prendre n'importe quelle orientation. Ainsi, quand on mesure la grandeur de la composante du spin dans la direction d'un axe, le nombre de possibilités est limité. Pour une particule ayant un spin de s , le nombre de valeurs possible pour la composante du spin est $2s + 1$. Pour une particule qui a un spin de $\frac{1}{2}$ (comme l'électron, le proton et le neutron), on peut seulement obtenir 2 valeurs possibles, soit $+\frac{1}{2}h/2\pi$ (qu'on appelle souvent un spin vers le haut), soit $-\frac{1}{2}h/2\pi$ (qu'on appelle souvent un spin vers le bas).

Une particule chargée qui a un moment cinétique a aussi un moment magnétique. Le moment magnétique mesure si l'atome agit comme un petit aimant. Plus le moment magnétique est grand, plus l'effet d'un champ magnétique sur la particule est grand. Notez que si on suppose que l'électron est une sphère uniformément chargée, on peut calculer le moment magnétique à partir du moment cinétique. En faisant cela, on trouve un moment magnétique 2 fois plus petit que le véritable moment magnétique de l'électron. C'est un autre signe que la représentation de l'électron comme une sphère chargée en rotation ne peut pas être vraie.

Le principe d'exclusion de Pauli

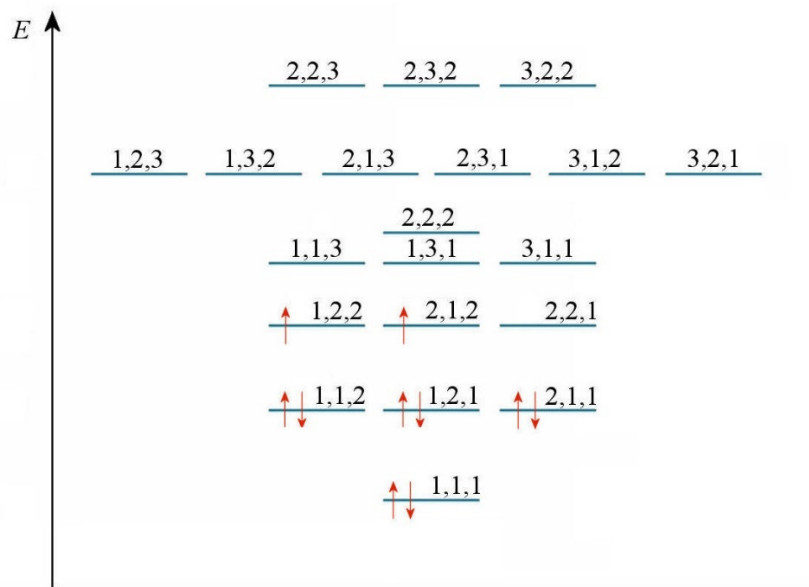
En 1925, Pauli découvre que les particules qui ont un spin demi-entier ($\frac{1}{2}$, $1\frac{1}{2}$, $2\frac{1}{2}$, ...) ne peuvent pas être dans le même état. C'est le principe d'exclusion de Pauli.

Prenons l'exemple de la boîte en 3 dimensions pour illustrer ce que cela signifie. Supposons qu'on place 10 électrons dans la boîte. Dans ce cas, les niveaux d'énergie sont toujours décrits par les mêmes nombres n_x , n_y et n_z , mais l'énergie des niveaux n'est plus la même que celle qu'il y avait quand il y avait un seul électron dans la boîte. La répulsion entre les électrons ajoute de l'énergie potentielle, ce qui fait monter un peu les niveaux d'énergie par rapport à ce qu'on avait avec un seul électron. Nous ne calculerons pas les nouvelles valeurs des énergies.

Le principe d'exclusion nous dit qu'on ne peut pas placer les 10 électrons au niveau le plus bas. Les électrons seraient alors dans le même état et cela est interdit par le principe d'exclusion. Chaque électron doit avoir un état distinct.

Avec un spin de $\frac{1}{2}$, un électron a 2 états distincts selon l'orientation du spin. Cela signifie qu'on peut placer 2 électrons sur chaque niveau d'énergie. (Si la particule avait un spin de $1\frac{1}{2}$, on pourrait en placer 4 par niveau.)

Voici la configuration qui a la plus petite énergie pour les 10 électrons dans la boîte.



À l'état stable, les électrons se placent toujours au niveau d'énergie le plus bas possible. En cas d'égalité, on peut prendre n'importe quel niveau. Dans notre exemple, on doit placer 2 électrons sur les 3 niveaux $\psi_{1,2,2}$, $\psi_{2,1,2}$ et $\psi_{2,2,1}$. Peu importe le choix que vous ferez, les deux électrons sont en réalité dans un état qui est une superposition des trois niveaux de toute façon.

Quand on place des électrons dans des niveaux qui ont la même énergie (comme les niveaux $\psi_{1,2,2}$, $\psi_{2,1,2}$ et $\psi_{2,2,1}$), on commence toujours par placer un seul électron sur chacun des niveaux avec des spins tous orientés dans le même sens. On placera des électrons avec un spin dans la direction opposée sur les niveaux seulement quand il y aura un électron sur chacun des niveaux. Les électrons se placent ainsi avec des spins dans la même direction parce que cela les force à être plus loin les uns des autres puisqu'ils ne peuvent pas occuper le même état s'ils ont des spins dans la même direction. En étant plus loin les uns des autres, l'énergie potentielle électrique est plus petite et le système, à l'équilibre, est toujours à l'énergie la plus basse. Doit-on choisir le spin vers le haut ou vers le bas ? Cela ne change rien parce que même si on écrit 2 spins vers le haut, le système est véritablement dans un état qui est superposition de 2 spins vers le haut et de 2 spins vers le bas ! C'est seulement si on mesure la direction du spin que la direction des 2 spins va se spécifier.

Le principe d'exclusion a été postulé par Pauli en 1925 pour expliquer pourquoi les électrons d'un atome ne se retrouvaient pas tous au niveau le plus bas. Le principe est confirmé plus tard avec la mécanique quantique quand on a montré que l'addition de 2 ondes identiques de particules de spin demi-entier donnait un résultat nul. Un résultat nul signifie qu'on ne peut pas avoir 2 particules dans le même état.

11.3 LE PASSAGE D'UN NIVEAU D'ÉNERGIE À UN AUTRE

Baisse d'énergie

Une particule qui est sur un niveau d'énergie peut passer à un niveau d'énergie plus bas. L'énergie perdue est alors émise sous forme de photon.

Au départ, la particule est au niveau d'énergie E_i . Après le changement de niveau, la particule est au niveau d'énergie E_f et il y a un photon ayant l'énergie E_γ . Selon le principe de conservation de l'énergie, on a donc

$$E = E'$$

$$E_i = E_f + E_\gamma$$

ce qui donne

Énergie du photon émis quand une particule baisse d'énergie pour passer d'un niveau d'énergie E_i à un niveau d'énergie E_f

$$E_\gamma = E_i - E_f$$

Exemple 11.3.1

Un électron est prisonnier d'une boîte unidimensionnelle d'une longueur de 0,7 nm. Quelle est la longueur d'onde de la lumière émise si l'électron passe du troisième au premier niveau d'énergie ?

L'énergie du photon est

$$\begin{aligned}
 E_{\gamma} &= E_3 - E_1 \\
 &= \frac{3^2 h^2}{8mL^2} - \frac{1^2 h^2}{8mL^2} \\
 &= (9-1) \frac{h^2}{8mL^2} \\
 &= 8 \cdot \frac{(6,626 \times 10^{-34} \text{ Js})^2}{8 \cdot 9,11 \times 10^{-31} \text{ kg} \cdot (0,7 \times 10^{-9} \text{ m})^2} \\
 &= 9,84 \times 10^{-19} \text{ J} \\
 &= 6,139 \text{ eV}
 \end{aligned}$$

La longueur d'onde de la lumière émise est donc

$$\begin{aligned}
 E_{\gamma} &= \frac{hc}{\lambda} \\
 6,139 \text{ eV} &= \frac{1240 \text{ eVnm}}{\lambda} \\
 \lambda &= 202 \text{ nm}
 \end{aligned}$$

Montée d'énergie

Une particule qui est sur un niveau d'énergie ne peut pas passer seule à un niveau d'énergie plus élevé. Pour qu'elle puisse monter sur un niveau d'énergie plus élevé, il doit y avoir un apport d'énergie. Cela peut se faire en absorbant un photon ou en recevant de l'énergie lors d'une collision.

Absorber un photon

La particule peut gagner de l'énergie en absorbant un photon. Toutefois, le photon doit avoir exactement l'énergie nécessaire pour passer d'un niveau à l'autre. Par exemple, pour faire passer une particule d'un niveau d'énergie de 3,2 eV à un niveau d'énergie de 8,4 eV, la particule peut absorber un photon, mais le photon doit avoir une énergie exactement égale à 5,2 eV.

Au départ, la particule est sur un niveau d'énergie E_i et il y a un photon qui arrive. Après le changement de niveau, la particule est au niveau d'énergie E_f . Selon le principe de conservation de l'énergie, on a

$$E = E'$$

$$E_i + E_\gamma = E_f$$

ce qui donne

Énergie du photon absorbé quand une particule monte d'énergie pour passer d'un niveau d'énergie E_i à un niveau d'énergie E_f

$$E_\gamma = E_f - E_i$$

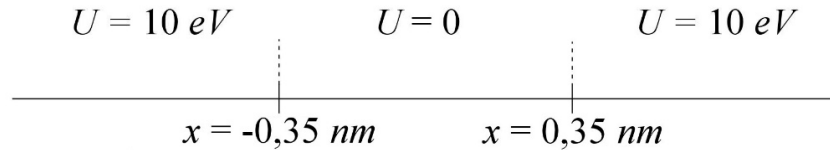
Gagner de l'énergie lors d'une collision

Si une autre particule A entre en collision avec la particule B sur un niveau d'énergie, la particule B peut gagner juste assez d'énergie pour lui permettre de passer à un niveau supérieur.

Dans ce cas, la particule A qui entre en collision avec la particule B sur un niveau d'énergie ne doit pas nécessairement avoir une énergie qui correspond exactement à l'énergie nécessaire pour monter de niveau. Prenons un exemple en supposant qu'il y a un neutron enfermé dans une boîte, qu'il lui faut 5,2 eV pour monter à un niveau d'énergie supérieur et qu'on bombarde ce neutron avec des électrons. Lors de la collision, l'électron va donner une partie de son énergie au neutron. Si les électrons ont moins de 5,2 eV, alors le neutron ne pourra pas monter de niveau puisqu'aucun des électrons ne pourra donner les 5,2 eV nécessaires. Si les électrons qui arrivent ont plus de 5,2 eV, alors il est possible qu'exactly 5,2 eV soient transférés au neutron lors d'une des collisions pour lui permettre de monter de niveau. En fait, probablement que plusieurs électrons feront une collision élastique avec le neutron (ce qui lui ne donne pas d'énergie) avant qu'un électron ne lui donne exactement les 5,2 eV nécessaires pour monter de niveau.

11.4 UNE PARTICULE DANS UNE BOITE (PUITS DE POTENTIEL FINI)

Dans ce cas, la particule est prisonnière d'une région entre $x = -L/2$ et $x = L/2$, mais elle pourrait sortir de la boîte si son énergie est suffisante. Prenons un exemple avec des valeurs. Supposons que l'énergie potentielle est de 0 eV entre $x = -0,35$ nm et $x = 0,35$ nm et qu'elle est de 10 eV pour $x < -0,35$ nm et $x > 0,35$ nm.



Ainsi, si l'énergie de la particule est inférieure à 10 eV, elle est prisonnière de la région entre $x = -0,35 \text{ nm}$ et $x = 0,35 \text{ nm}$ (rappelez-vous que les objets ne peuvent pas aller aux endroits où l'énergie potentielle est plus grande que l'énergie mécanique selon la mécanique classique). Par contre, si son énergie est supérieure à 10 eV, la particule peut être n'importe où et elle peut donc sortir de la boîte. On appelle cette situation *une particule dans un puits de potentiel fini* parce que le graphique du potentiel ressemble à un puits dont les côtés ont une hauteur qui n'est pas infinie.

Les solutions de l'équation de Schrödinger sont complètement différentes dans les deux régions si la particule a une énergie inférieure à 10 eV. Les solutions sont :

- Une fonction sinusoïdale pour la région entre $x = -0,35 \text{ nm}$ et $x = 0,35 \text{ nm}$. Avec un $x = 0$ au centre du puits, on a une situation symétrique. Les fonctions sinusoïdales dans le puits doivent donc être soit un cosinus ou soit un sinus.

$$\psi = A \cos kx \quad \text{ou} \quad \psi = B \sin kx$$

où

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi p}{h} = \frac{2\pi\sqrt{2mE}}{h} = \frac{\pi\sqrt{8mE}}{h}$$

- Des fonctions exponentielles pour les régions $x < -0,35 \text{ nm}$ et $x > 0,35 \text{ nm}$.

$$\psi = Ce^{-\alpha x} \quad (\text{à droite de la boîte}) \quad \text{et} \quad \psi = De^{\alpha x} \quad (\text{à gauche de la boîte})$$

où

$$\alpha = \frac{\pi\sqrt{8m(U-E)}}{h}$$

Comme la fonction d'onde et la dérivée de la fonction d'onde doivent être continues, il n'y a que quelques solutions possibles pour faire « fitter » ensemble la fonction sinusoïdale et les fonctions exponentielles. C'est plus facile à dire qu'à faire. Faisons-le en examinant ce qui se passe à la frontière à droite de la boîte (comme c'est symétrique, la frontière de gauche donne les mêmes équations).

À la frontière, le cosinus ou le sinus doit avoir la même valeur que la fonction exponentielle. Comme la frontière est à $x = L/2$, on a les 2 possibilités suivantes.

$$A \cos\left(\frac{kL}{2}\right) = Ce^{-\frac{\alpha L}{2}} \quad \text{ou} \quad B \sin\left(\frac{kL}{2}\right) = Ce^{-\frac{\alpha L}{2}}$$

Les dérivées des fonctions doivent aussi être identiques à la frontière. Comme les dérivées sont

$$\psi' = -Ak \sin kx \quad \text{ou} \quad \psi' = Bk \cos kx$$

$$\psi' = -C\alpha e^{-\alpha x}$$

l'égalité des dérivées à la frontière de droite nous donne les deux possibilités suivantes.

$$-Ak \sin\left(\frac{kL}{2}\right) = -C\alpha e^{-\frac{\alpha L}{2}} \quad \text{ou} \quad Bk \cos\left(\frac{kL}{2}\right) = -C\alpha e^{-\frac{\alpha L}{2}}$$

Prenons le premier cas (quand ψ est un cosinus). On a alors les deux équations suivantes.

$$A \cos\left(\frac{kL}{2}\right) = C e^{-\frac{\alpha L}{2}} \quad \text{et} \quad -Ak \sin\left(\frac{kL}{2}\right) = -C\alpha e^{-\frac{\alpha L}{2}}$$

En divisant la deuxième équation par la première, on obtient

$$\frac{-Ak \sin\left(\frac{kL}{2}\right)}{A \cos\left(\frac{kL}{2}\right)} = \frac{-C\alpha e^{-\frac{\alpha L}{2}}}{C e^{-\frac{\alpha L}{2}}}$$

$$k \tan\left(\frac{kL}{2}\right) = \alpha$$

Or, comme

$$\alpha^2 = \frac{\pi^2 8m(U - E)}{h^2}$$

$$= \frac{\pi^2 8mU}{h^2} - \frac{\pi^2 8mE}{h^2}$$

on arrive à

$$k \tan\left(\frac{kL}{2}\right) = \sqrt{\frac{\pi^2 8mU}{h^2} - \frac{\pi^2 8mE}{h^2}}$$

Comme

$$k = \frac{\pi \sqrt{8mE}}{h}$$

l'équation est

$$\frac{\pi \sqrt{8mE}}{h} \tan\left(\frac{L}{2} \frac{\pi \sqrt{8mE}}{h}\right) = \sqrt{\frac{\pi^2 8mU}{h^2} - \frac{\pi^2 8mE}{h^2}}$$

Dans cette équation, on retrouve souvent la combinaison $h^2/8mL^2$ qui est l'énergie du premier niveau du puits infini. On va noter cette énergie ainsi.

$$E_{1\infty} = \frac{h^2}{8mL^2}$$

On peut alors écrire l'équation sous la forme suivante.

$$\pi \sqrt{\frac{E}{E_{1\infty}}} \tan\left(\frac{L\pi}{2} \sqrt{\frac{E}{E_{1\infty}}}\right) = \sqrt{\frac{\pi^2 U}{E_{1\infty}} - \frac{\pi^2 E}{E_{1\infty}}}$$

On pose ensuite

$$E_n = v^2 E_{1\infty} \quad \text{et} \quad U = u^2 E_{1\infty}$$

pour arriver à

$$\begin{aligned} \frac{\pi v}{L} \tan\left(\frac{\pi v}{2}\right) &= \sqrt{\frac{\pi^2 u^2}{L^2} - \frac{\pi^2 v^2}{L^2}} \\ v \tan\left(\frac{\pi v}{2}\right) &= \sqrt{u^2 - v^2} \end{aligned}$$

Si on fait la même chose pour le 2^e cas (quand ψ est un sinus), on obtient $-v \cot\left(\frac{\pi v}{2}\right) = \sqrt{u^2 - v^2}$.

On trouve donc l'énergie de la façon suivante.

Énergies possibles pour une particule enfermée dans une boîte en une dimension (puits de potentiel fini)

$$E_n = v^2 E_{1\infty}$$

où v s'obtient en faisant la solution des équations

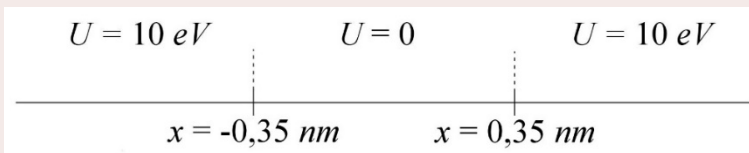
$$\begin{aligned} v \tan\left(\frac{\pi v}{2}\right) &= \sqrt{u^2 - v^2} \\ -v \cot\left(\frac{\pi v}{2}\right) &= \sqrt{u^2 - v^2} \end{aligned}$$

dans lesquelles la valeur de u est donnée par

$$U = u^2 E_{1\infty}$$

Exemple 11.4.1

Quels sont les niveaux d'énergie possibles d'un électron enfermé dans cette boîte ?



Les niveaux d'énergie sont donnés par

$$E_n = v^2 E_{1\infty}$$

Dans ce cas, on a

$$E_{1\infty} = \frac{h^2}{8mL^2}$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{(6,626 \times 10^{-34} \text{ Js})^2}{8 \cdot 9,11 \times 10^{-31} \text{ kg} \cdot (0,7 \times 10^{-9} \text{ m})^2} \\
 &= 1,2295 \times 10^{-19} \text{ J} = 0,7674 \text{ eV}
 \end{aligned}$$

On trouve les valeurs de v avec

$$\begin{aligned}
 v \tan\left(\frac{\pi v}{2}\right) &= \sqrt{u^2 - v^2} \\
 -v \cot\left(\frac{\pi v}{2}\right) &= \sqrt{u^2 - v^2}
 \end{aligned}$$

où u est

$$\begin{aligned}
 U &= u^2 E_{1\infty} \\
 10 \text{ eV} &= u^2 \cdot 0,7674 \text{ eV} \\
 u &= 3,610
 \end{aligned}$$

On doit donc résoudre les 2 équations suivantes.

$$\begin{aligned}
 v \tan\left(\frac{\pi v}{2}\right) &= \sqrt{3,610^2 - v^2} \\
 -v \cot\left(\frac{\pi v}{2}\right) &= \sqrt{3,610^2 - v^2}
 \end{aligned}$$

La solution consiste en fait à trouver les points de croisement des fonctions $\sqrt{3,610^2 - v^2}$ et des fonctions $v \tan(v)$ et $-v \cot(v)$ (graphique de droite).

Il ne reste qu'à résoudre les équations. Le problème, c'est qu'il n'y a pas de solutions analytiques à ces équations ! Qu'importe, on peut résoudre avec un ordinateur.

La première équation est

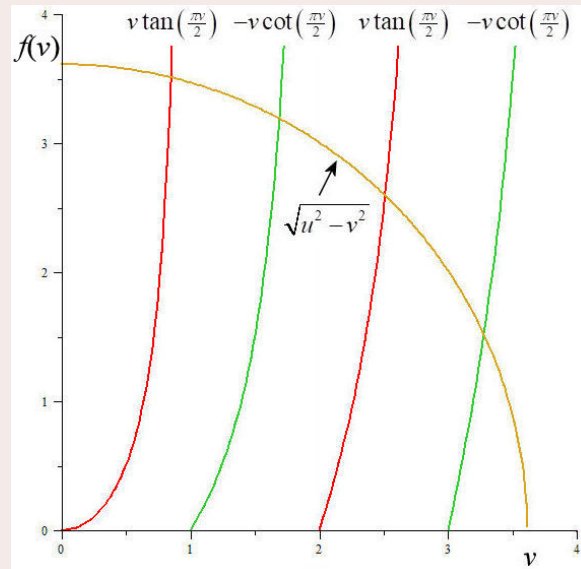
$$v \tan\left(\frac{\pi v}{2}\right) = \sqrt{3,610^2 - v^2}$$

Le site wolfram nous donne les solutions de cette équation.

https://www.wolframalpha.com/input/?i=solve+v*tan%28Pi*v%2F2%29%3D%E2%88%9A%283.610%5E2-v%5E2%29

$$v = 2,510 \quad \text{et} \quad v = 0,849$$

On a alors les niveaux d'énergie suivants.



$$E_1 = v^2 E_{1\infty} = 0,849^2 \cdot 0,767 \text{ eV} = 0,553 \text{ eV}$$

$$E_3 = v^2 E_{1\infty} = 2,511^2 \cdot 0,767 \text{ eV} = 4,836 \text{ eV}$$

La deuxième équation est

$$-v \cot\left(\frac{\pi v}{2}\right) = \sqrt{3,610^2 - v^2}$$

Le site wolfram nous donne les solutions de cette équation.

https://www.wolframalpha.com/input/?i=solve+-v*cot%28Pi*v%2F2%29%3D%E2%88%9A%283.610%5E2-v%5E2%29

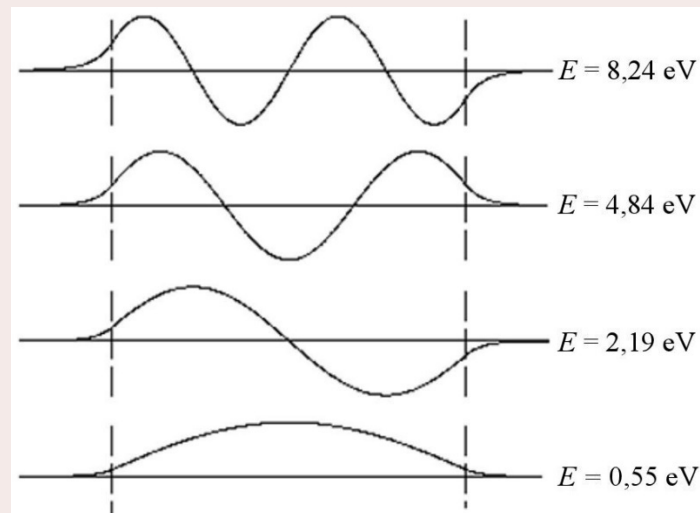
$$v = 3,276 \quad \text{et} \quad v = 1,690$$

On a alors les niveaux d'énergie suivants.

$$E_2 = v^2 E_{1\infty} = 1,690^2 \cdot 0,767 \text{ eV} = 2,191 \text{ eV}$$

$$E_4 = v^2 E_{1\infty} = 3,276^2 \cdot 0,767 \text{ eV} = 8,236 \text{ eV}$$

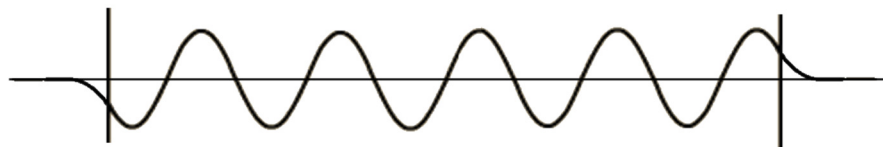
Voici donc les niveaux d'énergie possibles, avec les fonctions d'onde associées à ces niveaux.



tccc.iesl.forth.gr/education/local/quantum/vqm/figs/5fwf.gif

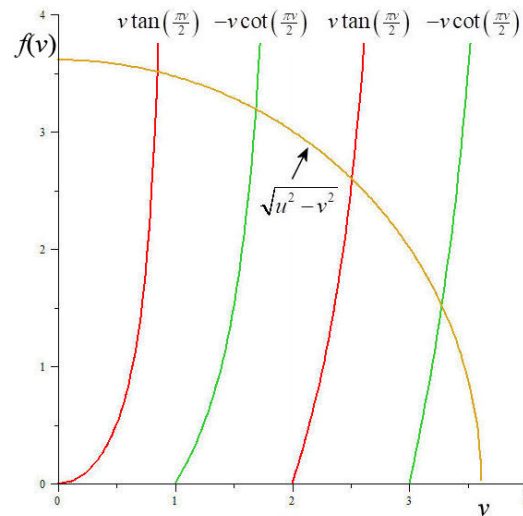
Notez qu'il y aura toujours une valeur de v entre 0 et 1, une entre 1 et 2, une entre 2 et 3 et ainsi de suite.

Notez aussi qu'il s'ajoute un nœud à l'onde chaque fois qu'on monte de niveau. Le numéro du niveau est égal au nombre de nœuds + 1. Par exemple, l'image suivante



représente l'onde du 10^e niveau puisqu'il y a 9 nœuds dans la boîte. (Dans notre exemple, Il n'y avait que 4 niveaux. Ce 10^e niveau n'existe donc pas dans ce cas.)

On peut facilement trouver le nombre de niveaux en trouvant le nombre de points de croisement sur le graphique de droite. Il y a un point de croisement pour chaque courbe de tan ou cot qui part de l'axe des v à l'intérieur du cercle. Comme il y a une de ces courbes qui part à toutes les valeurs entières et que le cercle a un rayon de u , on n'a qu'à garder la partie entière de u et additionner 1 (pour la courbe de tan qui part de 0).



Nombre de niveaux d'énergie pour une particule enfermée dans une boîte en une dimension (puits de potentiel fini)

Il faut prendre la partie entière de $u + 1$

Exemple 11.4.2

Un électron est enfermé dans une boîte ayant une largeur de 2 nm et une profondeur de 18 eV. Combien y a-t-il de niveaux d'énergie possibles pour la particule ?

Le nombre de niveaux est égal à la partie entière de $u + 1$, où u est donné par

$$U = u^2 E_{1\infty}$$

Comme

$$\begin{aligned} E_{1\infty} &= \frac{h^2}{8mL^2} \\ &= \frac{(6,626 \times 10^{-34} \text{ Js})^2}{8 \cdot 9,11 \times 10^{-31} \text{ kg} \cdot (2 \times 10^{-9} \text{ m})^2} \\ &= 1,506 \times 10^{-20} \text{ J} = 0,09401 \text{ eV} \end{aligned}$$

la valeur de u est

$$\begin{aligned} U &= u^2 E_{1\infty} \\ 18 \text{ eV} &= u^2 \cdot 0,09401 \text{ eV} \\ u &= 13,84 \end{aligned}$$

On a donc

$$u + 1 = 14,84$$

Comme la partie entière de ce nombre est 14, il y a 14 niveaux d'énergie possibles.

On peut alors faire les observations suivantes :

- 1- Le nombre de niveaux d'énergie est limité si U n'est pas infini à l'extérieur de la boîte.
- 2- Les énergies pour lesquelles la particule est enfermée dans la boîte sont un peu plus basses que celles obtenues avec le puits de potentiel infini (comparez les exemples 11.1.1 et 11.4.1), car la fonction sinusoïdale est un peu plus étirée, ce qui augmente la longueur d'onde, ce qui diminue la quantité de mouvement et, par la même occasion, l'énergie.
- 3- Chose curieuse : on voit que l'onde dépasse un peu de chaque côté dans les régions interdites. Dans l'exemple 11.4.1, l'onde dépasse de la boîte pour les quatre niveaux ayant moins de 10 eV. Cela veut dire qu'il y a une certaine probabilité de trouver l'électron dans les régions $x < -0,35$ nm et $x > 0,35$ nm, même si cela est tout à fait impossible selon la mécanique classique.

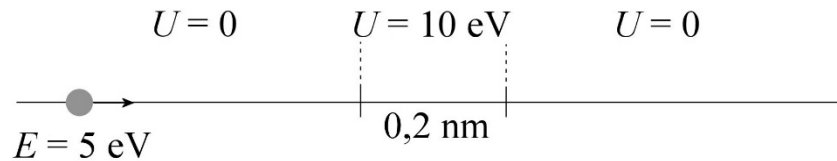
La particule n'est pas enfermée dans la boîte si son énergie est plus grande que U . Dans ce cas, la particule peut avoir n'importe quelle énergie, pourvu qu'elle soit plus grande que U . L'énergie est quantifiée si la particule est dans la boîte, mais elle ne l'est pas si elle n'est pas enfermée dans la boîte.

Avec la mécanique quantique, on a compris assez vite que le modèle du noyau atomique de l'époque ne pouvait pas être bon. En effet, on pensait à l'époque que le noyau atomique était composé de protons et d'électrons. Avec la mécanique quantique, on peut faire un modèle assez rudimentaire du noyau dans lequel les particules sont enfermées dans un puits de potentiel fini ayant une largeur de l'ordre de 10^{-15} m et une hauteur du puits de potentiel d'environ 10 MeV. On se rend compte alors qu'il n'y a qu'une seule solution où l'électron est prisonnier du puits de potentiel, mais avec une énergie beaucoup trop près de la hauteur du puits. Il ne pourrait pas y avoir plus de 2 électrons dans le noyau et l'énergie du niveau est tellement près de la hauteur du puits qu'il est impossible que des électrons restent dans le noyau atomique. Pour remplacer ces électrons qui ne peuvent pas rester dans le noyau, on a postulé alors, durant les années 20, l'existence du neutron. Cette particule a ensuite été découverte en 1932 par James Chadwick.

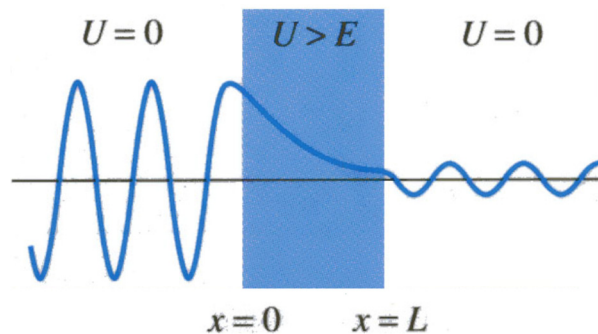
11.5 L'EFFET TUNNEL

On a remarqué à la section précédente que la particule a une certaine probabilité de se trouver à des endroits interdits par la mécanique classique (la particule avait une probabilité

de se trouver à l'extérieur de la boîte même si l'énergie de la particule était inférieure à U). On obtient un résultat encore plus surprenant quand on applique la mécanique quantique au cas d'une particule se dirigeant vers une barrière. Voici une situation représentant cela.



Un électron ayant une énergie de 5 eV est dans une région où l'énergie potentielle est nulle. Il se dirige vers une région assez mince (0,2 nm) où l'énergie potentielle est de 10 eV. Comme l'énergie potentielle de cette région (10 eV) est plus grande que l'énergie totale de la particule (5 eV), la particule ne pourrait pas entrer dans cette région selon la mécanique classique et il est donc impossible qu'elle traverse cette barrière. Pourtant la solution de la mécanique quantique est différente. Encore une fois, on obtient une fonction sinusoïdale pour les régions où l'énergie de la particule est plus grande que l'énergie potentielle et une solution exponentielle pour les régions où l'énergie de la particule est plus petite que l'énergie potentielle. La figure de droite représente la solution.



Harris Benson, Physique 3 : Ondes, optique et physique moderne, ERPI, 2009

Dans la barrière, la fonction exponentielle diminue rapidement, mais elle n'est pas nulle lorsqu'elle arrive de l'autre côté de la barrière. Comme la fonction d'onde doit être continue, la fonction sinusoïdale a une certaine amplitude de l'autre côté de la barrière. Puisque la fonction d'onde n'est pas nulle à droite de la barrière, cela signifie qu'il y a une certaine probabilité de trouver la particule de l'autre côté de la barrière de potentiel alors que cela aurait dû être impossible selon la mécanique classique. Dans notre exemple, la probabilité de traverser la barrière est de 4,1 % (voir le calcul un peu plus loin).

Cette probabilité qu'ont les particules de traverser des régions qu'il aurait été impossible de traverser selon la mécanique classique est appelée *l'effet tunnel*.

Pour calculer la probabilité, il faut trouver les amplitudes des ondes avant et après la barrière en égalant les valeurs des fonctions d'onde et des dérivées des fonctions d'onde aux limites de la barrière sachant qu'on a des fonctions sinusoïdales à l'extérieur de la barrière et une fonction exponentielle à l'intérieur de la barrière (sans oublier que l'onde de gauche est une superposition d'une onde incidente et d'une onde réfléchie). Une fois qu'on a les amplitudes, la probabilité de transmission se trouve avec les carrés de l'amplitude. On ne donnera pas les détails de ce calcul dont la solution mène à la formule suivante.

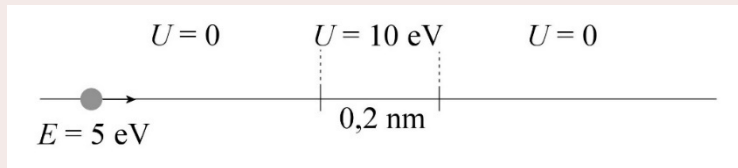
Probabilité de traverser une barrière de potentiel

$$T = \frac{16E(U-E)}{U^2} e^{-2\alpha L} \quad \text{où } \alpha = \frac{\pi\sqrt{8m(U-E)}}{h}$$

En gros, la probabilité diminue quand U augmente et quand L augmente.

Exemple 11.5.1

Quelle est la probabilité que la particule traverse la barrière dans cette situation ?



On trouve la probabilité avec

$$T = \frac{16E(U-E)}{U^2} e^{-2\alpha L}$$

Ici, α est

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{\pi\sqrt{8m(U-E)}}{h} \\ &= \frac{\pi\sqrt{8 \cdot 9,11 \times 10^{-31} \text{ kg} \cdot (10 \text{ eV} - 5 \text{ eV}) \cdot 1,602 \times 10^{-19} \frac{\text{J}}{\text{eV}}}}{6,626 \times 10^{-34} \text{ Js}} \\ &= 1,146 \times 10^{10} \text{ m}^{-1} \end{aligned}$$

La probabilité est donc

$$\begin{aligned} T &= \frac{16E(U-E)}{U^2} e^{-2\alpha L} \\ &= \frac{16 \cdot 5 \text{ eV} \cdot (10 \text{ eV} - 5 \text{ eV})}{(10 \text{ eV})^2} \cdot e^{-2 \cdot 1,146 \times 10^{10} \text{ m}^{-1} \cdot 0,2 \times 10^{-9} \text{ m}} \\ &= 0,0409 \end{aligned}$$

La probabilité de traverser la barrière est de 4,1 %.

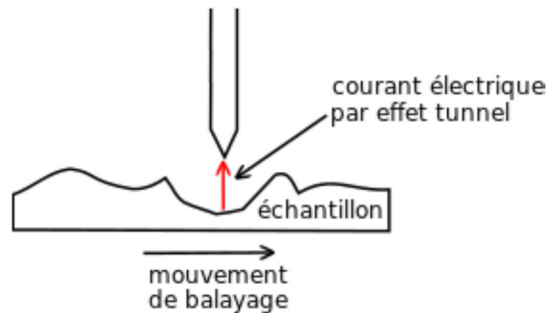
(Nous n'avons qu'une approximation ici, valide uniquement si la probabilité est faible, disons moins de 10 %. Si la probabilité est grande, la formule est

$$T = \left(1 + \frac{U^2}{4E(E-U)} \sinh^2 \left(\frac{\pi L}{h} \sqrt{8m(U-E)} \right) \right)^{-1}$$

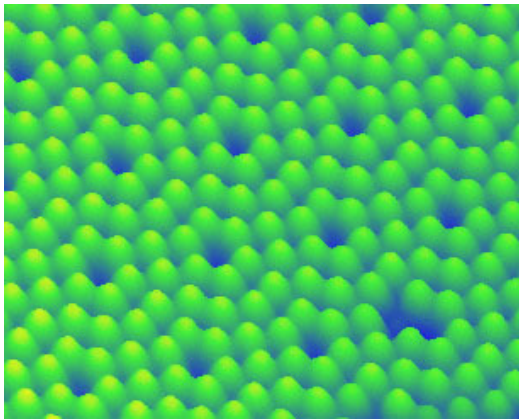
où $\sinh$ est un sinus hyperbolique, une fonction qui est sur votre calculatrice.)

On pourrait se demander si cette probabilité de traverser une barrière est importante dans la vie de tous les jours. Par exemple, supposons qu'un objet de 100 g ayant une énergie de 4 J tente de traverser une région de 1 mm de large où l'énergie potentielle est de 5 J. Dans ce cas, la probabilité de traverser la barrière est d'une chance sur $10^{1\,000\,000\,000\,000\,000\,000\,000\,000\,000\,000\,000\,000}$. Autrement dit, c'est carrément impossible. N'essayez donc pas de traverser les murs par effet tunnel...

L'effet tunnel est à la base du fonctionnement du microscope à effet tunnel (Ben oui !). Cet appareil d'une précision inégalée fut inventé en 1981. Une pointe très pointue (il n'y a qu'un seul atome au bout) passe au-dessus d'une surface. La pointe est chargée avec des électrons et la surface est chargée positivement. Les électrons sont donc attirés par la surface, mais ils ne pourraient aller à cette surface selon la mécanique classique puisqu'ils n'ont pas assez d'énergie pour traverser l'espace entre la pointe et la surface. Cependant, avec l'effet tunnel, certains électrons arrivent à traverser cet espace et à rejoindre la surface. Plus l'espace entre la pointe et la surface est petit, plus il y a d'électrons qui peuvent passer par effet tunnel. Le nombre d'électrons qui traversent se mesure assez facilement avec le courant traversant la pointe (le courant augmente quand il y a plus d'électrons qui traversent). Plus le courant est important, plus la surface est proche de la pointe. En balayant la surface, on peut déterminer la forme de la surface.



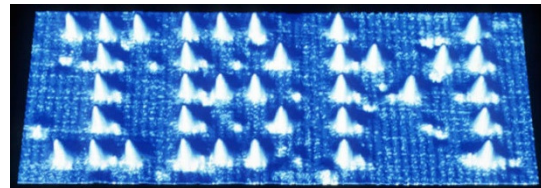
fr.wikipedia.org/wiki/Microscope_à_effet_tunnel



La précision est assez remarquable comme on peut le voir sur l'image. Cette image représente une surface en silicium. Les points verts qu'on peut voir sont des atomes de silicium. On peut même remarquer qu'il manque un atome dans la structure en bas à droite de l'image.

www.aip.org/history/einstein/atoms.htm

Depuis le début des années 90, on arrive même à déplacer les atomes un à la fois à l'aide de ce microscope. Cette image, faite en avril 1990, est le résultat de la première manipulation d'atomes avec le microscope fait chez IBM. On a déplacé les atomes pour écrire les lettres IBM sur une surface de métal.



www-03.ibm.com/ibm/history/exhibits/vintage/vintage_4506VV1003.html

On a même fait un petit film avec des atomes.

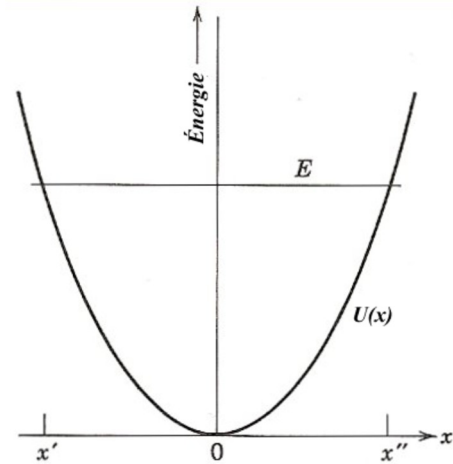
www.youtube.com/watch?v=oSCX78-8-q0

11.6 L'OSCILLATEUR HARMONIQUE

L'énergie potentielle d'une particule en oscillation harmonique est $\frac{1}{2}kx^2$. Si une particule soumise à ce potentiel a une énergie E , alors, selon la mécanique classique, elle fait une oscillation harmonique entre les points x' et x'' et sa vitesse est la plus grande à $x = 0$. De plus, il devrait être impossible, toujours selon la mécanique classique, que la particule soit dans la région $x > x''$ ou dans la région $x < x'$ (puisque U est plus grand que E dans ces régions).

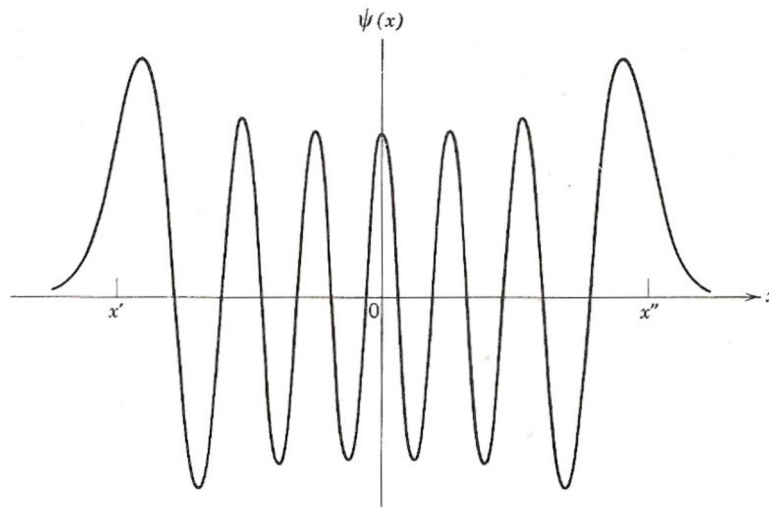
Pour savoir ce qui se passe dans ce cas selon la mécanique quantique, on a qu'à résoudre l'équation de Schrödinger avec cette énergie potentielle.

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{1}{2}kx^2 \right) \psi = 0$$



Eisberg, Resnick, Quantum physics, John Wiley, 1985

Ça peut sembler facile au premier coup d'œil, mais c'est un beau défi mathématique puisque les solutions font appel aux polynômes d'Hermite (que vous ne connaissez probablement pas). Par exemple, voici le graphique de l'onde pour le treizième niveau d'énergie.



Eisberg, Resnick, Quantum physics, John Wiley, 1985

Même si on ne donnera pas les détails de ces solutions ici, quelques éléments montrent que ces solutions sont conformes à ce que l'on a appris jusqu'ici.

1. L'amplitude de l'onde augmente quand l'énergie potentielle augmente. C'est tout à fait normal, car l'énergie cinétique diminue quand l'énergie potentielle augmente. Ainsi, la particule se déplace moins vite et passe plus de temps à cet endroit qu'aux endroits où l'énergie potentielle est basse. Si elle passe plus de temps à cet endroit,

alors la probabilité de trouver la particule à cet endroit est plus grande et l'onde doit avoir une plus grande amplitude.

2. La longueur d'onde augmente quand l'énergie potentielle augmente. Quand l'énergie potentielle augmente, l'énergie cinétique doit diminuer, ce qui fait diminuer la quantité de mouvement aussi. Comme la longueur d'onde est h/p , la longueur d'onde augmente aussi quand U augmente.

Ces deux remarques ne s'appliquent pas seulement à une particule qui fait une oscillation harmonique. Elles sont valides peu importe la façon dont l'énergie potentielle change.

Malgré la complexité des solutions, la formule donnant les valeurs d'énergie possibles est, de façon surprenante, d'une très grande simplicité. Elles sont données par

Énergie des niveaux pour une particule en oscillation harmonique

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) hf$$

Commence à $n = 0$

Les niveaux d'énergie sont donc tous régulièrement séparés en énergie. L'écart entre les niveaux est toujours hf .

Exemple 11.6.1

Un électron est en oscillation harmonique. Le niveau d'énergie le plus bas est 0,4 eV. Quelle est la longueur d'onde de la lumière émise si l'électron passe du 5^e au 3^e niveau d'énergie ?

L'énergie du photon est

$$\begin{aligned} E_\gamma &= E_4 - E_2 \\ &= \left(4 + \frac{1}{2} \right) hf - \left(2 + \frac{1}{2} \right) hf \\ &= 2hf \end{aligned}$$

(Notez que pour une particule en oscillation harmonique, on commence à $n = 0$. Le 5^e niveau a donc $n = 4$ et le 3^e niveau a $n = 2$.)

Pour trouver l'énergie du photon, il nous faut la valeur de hf . Comme on sait que l'énergie du premier niveau est 0,4 eV, on a

$$\begin{aligned} E_0 &= \left(0 + \frac{1}{2} \right) hf \\ 0,4 \text{ eV} &= \left(0 + \frac{1}{2} \right) hf \\ 0,8 \text{ eV} &= hf \end{aligned}$$

L'énergie du photon est donc

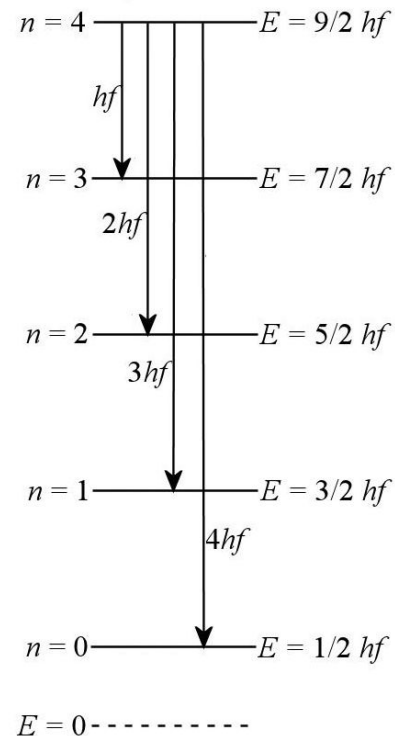
$$\begin{aligned} E_\gamma &= 2hf \\ &= 2 \cdot 0,8eV \\ &= 1,6eV \end{aligned}$$

La longueur d'onde de la lumière est donc

$$\begin{aligned} E_\gamma &= \frac{hc}{\lambda} \\ 1,6eV &= \frac{1240eVnm}{\lambda} \\ \lambda &= 775nm \end{aligned}$$

Retour sur l'hypothèse de Planck

Les atomes dans un solide sont soumis à des forces telles que chaque atome est en oscillation harmonique (quand les amplitudes sont petites). Quand un atome baisse d'un niveau d'énergie, l'énergie du photon émis est hf . Si l'énergie de l'atome baisse de 2 niveaux, le photon émis a une énergie $2hf$. Si l'énergie de l'atome baisse de trois niveaux, l'énergie du photon émis est de $3hf$ et ainsi de suite. On voit que l'énergie des photons émis doit être nhf où n est un entier. Ainsi, les objets chauds ne peuvent qu'émettre des photons dont l'énergie est nhf . C'est exactement ce que supposa Planck en 1900 pour expliquer le rayonnement des corps chauds. C'est une chance incroyable que les niveaux d'énergie soient ainsi régulièrement espacés pour les particules en oscillation harmonique. Si les différences d'énergie avaient été irrégulières, l'énergie des photons aurait été bien différente de nhf et il est fort probable que Planck n'aurait jamais pu deviner la formule donnant cette énergie et résoudre la question des corps chauds.

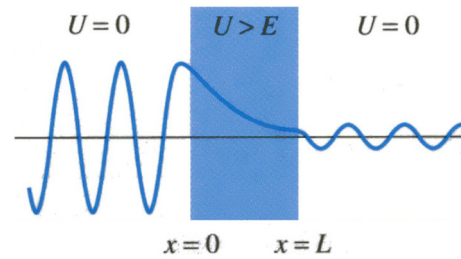


Énergie au zéro absolu

Quand la température d'un corps devient très basse, les atomes descendent vers les niveaux ayant des énergies plus petites et, à 0 K, ils se retrouvent tous au niveau le plus bas. Cependant, on peut voir que, même au premier niveau $n = 0$, l'énergie n'est pas nulle ($E = \frac{1}{2}hf$). Ainsi, même à 0 K, il reste de l'énergie et les atomes oscillent encore un peu.

Une erreur d'interprétation fréquente

Pour pratiquement tous les types d'ondes, l'amplitude augmente avec l'énergie de l'onde. Toutefois, ce n'est pas le cas avec l'onde en mécanique quantique. Pour illustrer l'erreur conceptuelle souvent faite, examinons à nouveau l'onde quand il y a effet tunnel. Certains interprètent mal cette onde en commentant cette erreur commune.

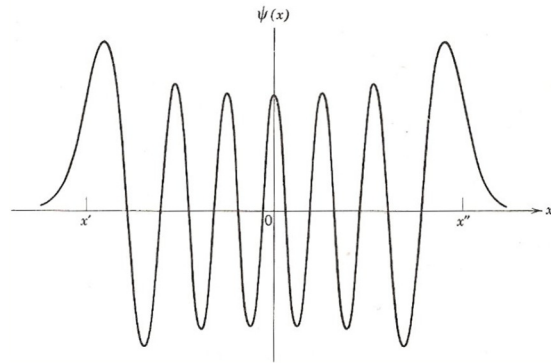


Erreur fréquente : penser que l'énergie baisse si l'amplitude baisse

Dans l'effet tunnel, comme l'amplitude est plus petite de l'autre côté de la barrière, on penserait alors que l'électron perd de l'énergie en traversant la barrière.

L'électron ne perd pas du tout d'énergie en traversant la frontière. En fait, l'électron a exactement la même énergie après avoir traversé la barrière qu'avant de traverser puisque l'énergie potentielle est exactement la même de chaque côté. L'amplitude allant avec la probabilité de trouver l'électron à cet endroit, l'amplitude est moindre parce que peu d'électrons arrivent à traverser la barrière, pas parce que l'énergie des électrons est moindre.

Cela ne veut pas dire qu'il n'y a pas de lien du tout entre l'énergie et l'amplitude. Quand on a étudié l'oscillateur harmonique, on a remarqué que l'amplitude augmentait quand l'énergie potentielle augmentait (parce que l'énergie cinétique est alors plus petite, ce qui signifie que la particule va moins vite à cet endroit et qu'elle a donc plus de chance d'être à cet endroit).



Ce lien est généralement vrai, sauf s'il y a une barrière comme dans le cas de l'effet tunnel. Dans ce cas, les amplitudes pourraient être différentes de chaque côté de la barrière même si les énergies potentielles sont les mêmes.

11.7 L'ATOME D'HYDROGÈNE

Électron et noyau

Après 1905, il ne reste pratiquement plus de scientifiques qui doutent de l'existence des atomes. (Un des arguments finaux fut formulé par Einstein en 1905 avec sa thèse de

doctorat sur le mouvement brownien. C'est aussi durant cette même année qu'il publia ses articles sur la relativité et l'effet photoélectrique. Il avait également un fils de 1 an, Hans-Albert. Pas étonnant qu'on appelle 1905 *l'année miraculeuse d'Einstein.*)

Toutefois, à cette époque, on a très peu de détails concernant la structure interne de l'atome. On se doute qu'il y a des électrons (découvert en 1897) dans l'atome, mais on ne sait pas grand-chose de plus. Après 1906, on commence à se douter que le nombre d'électrons dans l'atome correspond au numéro atomique de l'élément.

En 1908, Marsden et Geiger font passer des noyaux d'hélium (appelé aussi particule alpha) à travers une feuille d'or très mince et observent comment dévient ces noyaux. Ils obtiennent alors des résultats très différents de ce qui était attendu. Alors qu'ils s'attendent toujours à des déviations peu importantes, ils obtiennent parfois des déviations très importantes pouvant aller jusqu'à 180°. C'est Ernest Rutherford qui trouve, en 1911, une explication aux résultats de cette expérience : dans l'atome, il y a un noyau positif très petit (environ 10^{-14} m) où on retrouve pratiquement toute la masse de l'atome et il y a des électrons négatifs autour du noyau.

Rutherford n'a jamais dit que les électrons tournent autour du noyau, un peu comme les planètes autour du Soleil. Il savait qu'il y avait de graves problèmes avec un tel modèle. Hantaro Nagaoka avait déjà proposé un tel modèle en 1904, mais on s'est vite aperçu que les électrons en orbite émettraient alors un rayonnement électromagnétique (car les charges qui accélèrent émettent un tel rayonnement) qui leur ferait perdre de l'énergie. Cette perte d'énergie, qui rapproche les électrons du noyau, se fait si vite que les électrons s'écraseraient sur le noyau en un millionième de seconde ! On peut dire que le résultat n'est pas un atome très stable. Rutherford savait cela et a évité la question en disant simplement qu'il y avait des électrons autour du noyau, sans préciser leur mouvement ou leur position.

Si les électrons ne peuvent pas tourner autour du noyau, que font-ils alors ?

Fonctions d'onde pour l'hydrogène

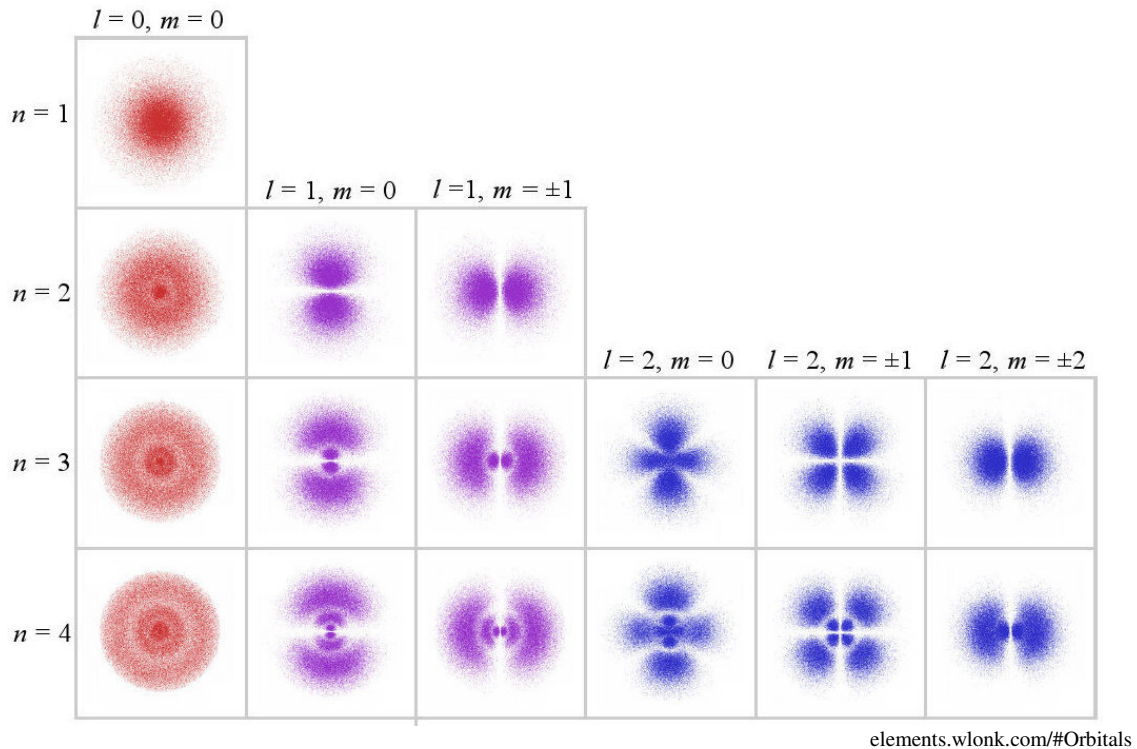
Très tôt, Schrödinger a utilisé son équation pour trouver les fonctions d'onde de l'électron dans l'hydrogène. Dans ce cas, il faut utiliser, dans l'équation de Schrödinger, la valeur de l'énergie potentielle de l'électron quand il est soumis à la force d'attraction électrique du noyau.

$$U = \frac{-ke^2}{r}$$

k est une constante qui vaut $8,9876 \times 10^9 \text{ Nm}^2/\text{C}^2$
 e est la charge élémentaire qui vaut $1,602 \times 10^{-19} \text{ C}$
 r est la distance entre le noyau et l'électron

Même si la formule de l'énergie potentielle est assez simple, la solution pour ψ est, encore une fois, assez difficile à obtenir, d'autant plus qu'il faut utiliser l'équation de Schrödinger

en 3 dimensions. Cette fois-ci, la solution fait appel aux fonctions de Bessel et aux polynômes de Legendre, que vous ne connaissez probablement pas (à moins d'être vraiment nerd). Tout comme avec les particules dans une boîte et les particules en oscillation harmonique, il y a plusieurs solutions possibles. Voici des diagrammes montrant quelques-unes de ces solutions. (Ici, on a en fait les densités de probabilités, qui se calculent à partir de ψ^2 .)



Comme on peut le voir sur la figure, les différentes solutions, qui sont appelées les *orbitales*, sont caractérisées par les trois entiers n , l et m .

Le nombre n peut prendre les valeurs 1, 2, 3, 4, 5, ...

Le nombre l peut prendre les valeurs de 0 jusqu'à $n - 1$. Par exemple, si n vaut 3, alors l peut prendre les valeurs 0, 1 et 2. On utilise aussi des lettres pour donner la valeur de l . Pour les 4 premières valeurs de l , on a s pour $l = 0$, p pour $l = 1$, d pour $l = 2$ et f pour $l = 3$. Ainsi, la solution avec $n = 2$ et $l = 1$ correspond à l'orbitale $2p$.

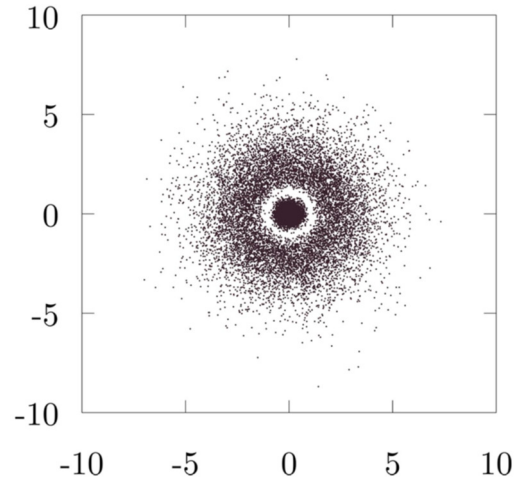
Les valeurs de m peuvent prendre des valeurs entre $-l$ et l . Par exemple, si l vaut 2, alors m peut prendre les valeurs -2, -1, 0, 1 et 2.

Illustrons le genre de solution obtenue en prenant l'exemple de la solution $n = 2$, $l = 0$ et $m = 0$ qui correspond à l'orbitale $2s$. Dans ce cas, la solution est

$$\psi_{200} = \frac{1}{\sqrt{32\pi r_0^2}} \left(2 - \frac{r}{r_0} \right) e^{-r/2r_0} \quad \text{où } r_0 = 5,292 \times 10^{-11} \text{ m}$$

(r_0 est appelé le rayon de Bohr). À partir de cette onde, on peut calculer la probabilité de trouver l'électron à une certaine distance du noyau. On obtient alors le graphique de droite (où les distances sont en angströms et 1 angström vaut $1 \text{ Å} = 10^{-10} \text{ m}$).

L'orbitale correspond aux endroits où il y a une grande probabilité de trouver l'électron. Dans ce modèle, on ne dit pas que l'électron tourne autour du noyau en suivant une orbite. Tout ce qu'il y a dans la mécanique quantique, ce sont les orbitales et ces orbitales ne représentent que les endroits où il y a de fortes chances de trouver l'électron. (Le graphique montre en fait ce qu'on pourrait obtenir si on mesurait 15 000 fois la position de l'électron dans cette orbitale.)



www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1806-11172019000400419

Si on ne fait pas de mesure de la position de l'électron, l'électron est dans une superposition d'états correspondant à tous les résultats possibles de la mesure de la position. Cela veut donc dire que l'électron est partout en même temps dans l'orbitale. L'électron est donc à plusieurs places en même temps ! Si on fait une mesure de la position de l'électron et qu'on obtient une certaine position, alors cela signifie qu'il y a eu effondrement de la fonction d'onde et que l'électron est passé de partout en même temps dans l'orbitale à un endroit précis.

Niveaux d'énergie de l'électron

Encore une fois, même si les solutions des fonctions d'ondes sont assez compliquées, les énergies possibles de l'électron sont données par une formule très simple. Cette formule est

$$E_n = -\frac{2\pi^2 m_e k^2 e^4}{n^2 h^2} \quad \text{où } m_e \text{ est la masse de l'électron}$$

Il y a un paquet de constantes dans cette formule. La valeur de cette combinaison de constantes est

$$\begin{aligned} \frac{2\pi^2 m_e k^2 e^4}{h^2} &= \frac{2\pi^2 \cdot 9,1094 \times 10^{-31} \text{ kg} \cdot \left(8,9876 \times 10^9 \frac{\text{N}}{\text{C}^2 \text{ m}^2}\right)^2 \cdot \left(1,6022 \times 10^{-19} \text{ C}\right)^4}{\left(6,6261 \times 10^{-34} \text{ Js}\right)^2} \\ &= 2,180 \times 10^{-18} \text{ J} \\ &= 13,606 \text{ eV} \end{aligned}$$

Toutefois, la fonction d'onde de l'électron n'est pas centrée sur le noyau, mais plutôt sur le centre de masse de l'atome. Cela change un peu la force entre l'électron et le noyau et,

conséquemment, les énergies des niveaux. En tenant compte de cette correction, la valeur de l'énergie calculée précédemment diminue à 13,598 eV. On a donc les énergies possibles suivantes.

Niveaux d'énergie de l'électron dans l'hydrogène

$$E_{Hn} = -\frac{2\pi^2 m_e k^2 e^4}{n^2 h^2} = -\frac{13,598 \text{ eV}}{n^2}$$

Notez que s'il y a des orbitales ayant la même énergie, comme les trois orbitales 2p, alors l'électron est partout en même temps dans les trois orbitales.

Les 4 premiers niveaux d'énergie de l'électron dans l'atome d'hydrogène sont donc

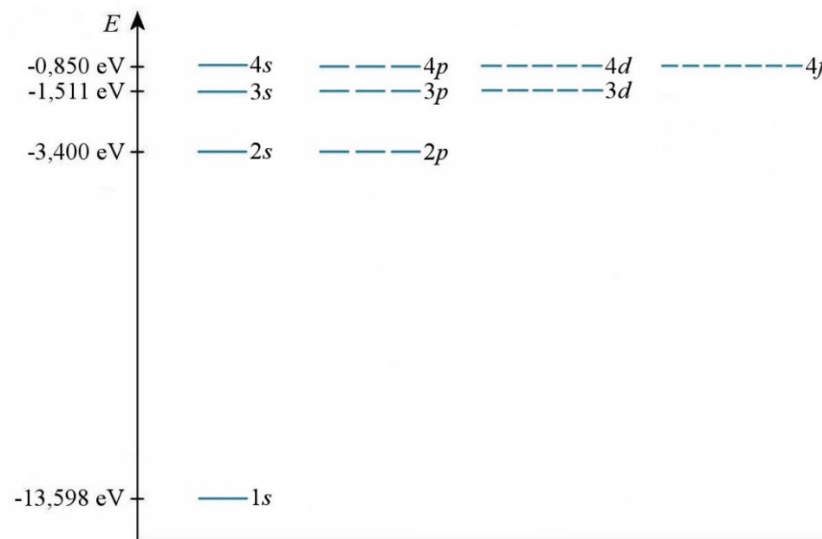
$$E_{H1} = -\frac{13,598 \text{ eV}}{1} = -13,598 \text{ eV}$$

$$E_{H2} = -\frac{13,598 \text{ eV}}{4} = -3,400 \text{ eV}$$

$$E_{H3} = -\frac{13,598 \text{ eV}}{9} = -1,511 \text{ eV}$$

$$E_{H4} = -\frac{13,598 \text{ eV}}{16} = -0,850 \text{ eV}$$

On peut représenter ces 4 niveaux d'énergie par ce diagramme.



(Les petites lignes montrent les niveaux ayant différents m sur ce diagramme. Par exemple, les trois lignes du niveau 2p représentent les 3 niveaux ayant les valeurs $m = -1$, $m = 0$ et $m = 1$.)

On peut remarquer que l'énergie des niveaux augmente (de moins en moins négatif) à mesure que n augmente. L'énergie des niveaux est négative parce que l'électron est lié au

noyau. Comme l'énergie électrique U est nulle loin du noyau, l'électron ne peut pas quitter le noyau, car il ne peut être aux endroits où l'énergie U est plus grande que l'énergie mécanique.

Énergie d'ionisation

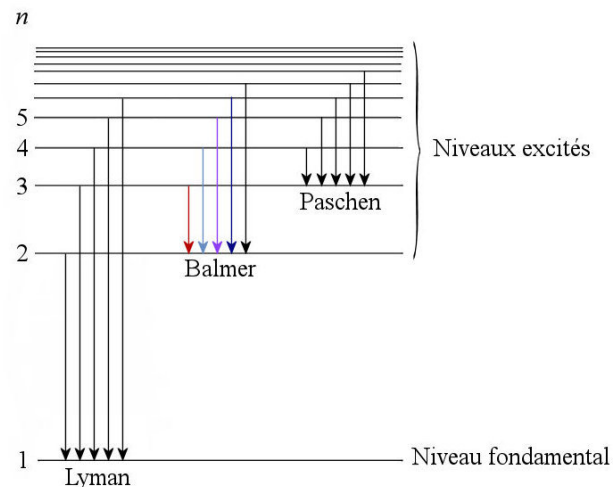
Pour arracher un électron à l'atome (donc l'ioniser), on doit lui fournir de l'énergie. L'énergie minimale de l'électron loin du noyau est 0 (énergie cinétique nulle et $U = 0$ loin du noyau). Si l'énergie de l'électron sur son orbite est de $-13,598 \text{ eV}$, on doit donc lui fournir au moins $13,598 \text{ eV}$ pour que son énergie soit au moins 0. Ainsi, les valeurs absolues des énergies calculées correspondent aux énergies nécessaires pour arracher l'électron de l'atome.

Le spectre d'émission de l'hydrogène

Quand l'électron dans l'hydrogène change de niveau pour aller à un niveau d'énergie plus bas, alors il y a émission d'un photon.

Le niveau $n = 1$ est appelé le niveau fondamental. Quand l'électron n'est pas au niveau fondamental, on dit que l'atome est *excité*. Le niveau $n = 2$ est le premier niveau excité, le $n = 3$ est le deuxième niveau excité et ainsi de suite.

Pour l'hydrogène, les transitions entre les niveaux ont des noms spécifiques. Par exemple, toutes les transitions qui se terminent au niveau $n = 1$ font partie de la série de Lyman et toutes les transitions qui se terminent au niveau $n = 2$ font partie de la série de Balmer.



Exemple 11.7.1

Un électron dans un atome d'hydrogène passe du niveau $n = 4$ au niveau $n = 2$. Quelle est la longueur d'onde de la lumière émise ?

L'énergie du photon est (en utilisant les énergies des niveaux calculées précédemment)

$$\begin{aligned} E_\gamma &= E_4 - E_2 \\ &= -0,850 \text{ eV} - (-3,400 \text{ eV}) \\ &= 2,550 \text{ eV} \end{aligned}$$

La longueur d'onde de la lumière est donc

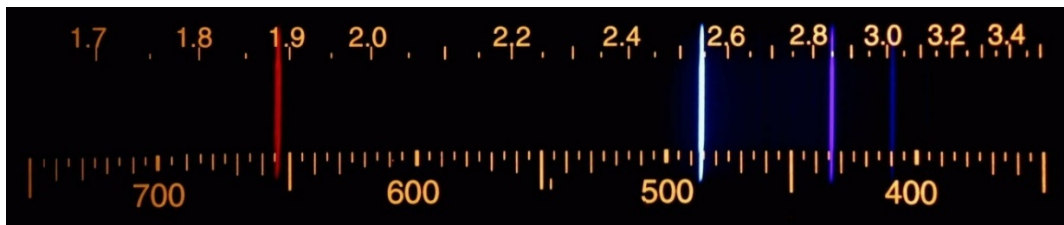
$$E_\gamma = \frac{hc}{\lambda}$$

$$2,550\text{eV} = \frac{1240\text{eVnm}}{\lambda}$$

$$\lambda = 486\text{nm}$$

Cette longueur d'onde émise n'est qu'une des possibilités. On pourrait trouver bien d'autres longueurs d'onde en prenant différentes valeurs de n pour les niveaux initial et final de l'électron.

Cela signifie qu'un atome d'hydrogène ne peut émettre que des photons ayant des longueurs d'onde très spécifiques. De toutes les longueurs d'onde possibles, seulement quatre sont dans la partie visible du spectre (elles font toutes partie de la série de Balmer). Ces longueurs d'onde, mesurées pour la première fois par Anders Jona Ångström en 1853, sont : 656,3 nm (rouge), 486,1 nm (bleu), 434,1 nm (violet) et 410,2 nm (violet, très difficile à voir). Il y a beaucoup d'autres longueurs d'ondes, mais elles sont en dehors de la partie visible du spectre. Voici le spectre de l'hydrogène.



astrodave.name

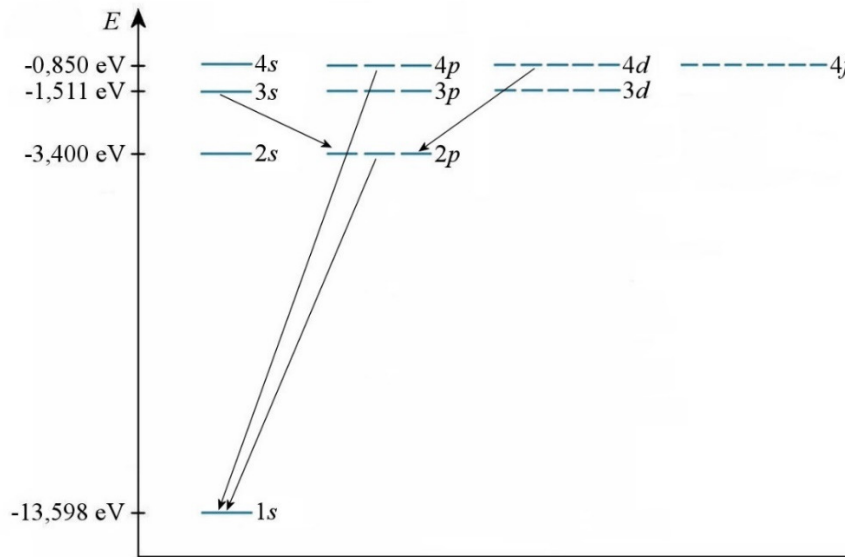
On donne le nom de *raies spectrales* à ces lignes.

(Le spectre est ce qu'on voit quand on observe la lumière émise par plusieurs atomes d'hydrogène. Certains atomes émettent la raie rouge, certains autres la bleue, certains autres la violette et ainsi de suite. Un atome seul ne pourrait pas émettre toutes les raies en même temps.)

Toutefois, pour voir un tel spectre, les électrons des atomes d'hydrogène doivent être initialement sur des niveaux plus élevés que $n = 1$ pour que les électrons puissent descendre de niveau. Le problème c'est que, normalement, l'électron est au niveau $n = 1$ dans tous les atomes d'hydrogène. Impossible alors d'émettre des photons, car l'électron ne peut pas descendre de niveau. Cependant, si on chauffe le gaz, la situation change. À mesure que la température augmente, la vitesse des atomes augmente et les collisions entre les atomes sont de plus en plus violentes. À partir d'une certaine température (aux environs de 3000 K), l'énergie des atomes devient assez grande pour parfois provoquer une augmentation de niveau de l'électron lors des collisions. Quand l'électron redescend de niveau par la suite (cela se fait assez vite puisque l'électron reste, en moyenne, seulement 1.6 ns au niveau $n = 2$ par exemple), un photon est émis. L'hydrogène devient alors lumineux et émet son spectre caractéristique.

Règles de sélection

L'électron a plus de facilité à faire certaines transitions dans un atome d'hydrogène (et tous les autres atomes). Comme le photon émis a un spin de 1, le moment cinétique de l'électron doit changer de 1 lors d'une transition. Cela signifie que la valeur de l doit monter ou descendre de 1 lors d'une transition. Un électron ne peut donc pas passer de l'orbitale $3p$ à l'orbitale $2p$ puisque la valeur de l resterait la même. Voici quelques-unes de ces transitions permises.



Autrement dit, l'électron doit passer d'une colonne à une colonne voisine dans ce diagramme lors d'une transition.

En fait, les transitions pour lesquelles l ne change pas de 1 sont possibles, mais par un processus plus complexe qui diminue la probabilité de faire cette transition. Ainsi, un électron restera en moyenne seulement 1,6 ns sur le niveau $2p$ avant de descendre au niveau $1s$ alors qu'un électron sur le niveau $2s$ restera en moyenne 0,12 s sur le niveau $2s$ avant de passer au niveau $1s$.

Le principe d'indétermination et la longueur d'onde de la lumière émise

Selon le principe d'indétermination $\Delta E \Delta t \approx h$, l'énergie de l'électron sur un niveau peut avoir une certaine indétermination si l'électron ne reste pas longtemps sur ce niveau. Si l'énergie du niveau de départ a une indétermination, cela donne une indétermination à l'énergie de photon émis.

Exemple 11.7.2

Un électron est au niveau $2p$ qui a une énergie de $-3,399\,623\,3$ eV. L'électron reste sur ce niveau en moyenne 1,6 ns avant de redescendre au niveau fondamental qui a une énergie

de -13,598 433 8 eV. Quelle est l'indétermination sur la longueur d'onde de la lumière émise lors de cette transition ? (On utilise des valeurs plus précises des niveaux d'énergie parce que les indéterminations sont très petites.)

Avec une durée de vie de 1,6 ns, l'indétermination sur l'énergie du niveau $2p$ est

$$\Delta E \Delta t \approx h$$

$$\Delta E \approx \frac{h}{\Delta t}$$

$$\Delta E \approx \frac{6,626 \times 10^{-34} \text{ Js}}{1,6 \times 10^{-9} \text{ s}}$$

$$\Delta E \approx 4,14 \times 10^{-25} \text{ J}$$

$$\Delta E \approx 2,585 \times 10^{-6} \text{ eV}$$

Cela signifie que l'énergie du niveau excité peut prendre n'importe quelle valeur entre 3,399 622 0 eV et 3,399 624 6 eV (l'écart entre ces valeurs est $2,6 \times 10^{-6}$ eV).

L'énergie du photon émis est

$$\begin{aligned} E_\gamma &= E_2 - E_1 \\ &= -3,399 623 3 \text{ eV} - (-13,598 433 8 \text{ eV}) \\ &= 10,198 810 5 \text{ eV} \end{aligned}$$

Comme le niveau fondamental n'a pas d'indétermination (puisque sa durée de vie est très longue), l'indétermination sur l'énergie du photon est aussi de $2,6 \times 10^{-6}$ eV. Cela signifie que l'énergie du photon peut prendre n'importe quelle valeur entre 10,198 809 2 eV et 10,198 811 8 eV (l'écart entre ces valeurs est $2,6 \times 10^{-6}$ eV).

La longueur d'onde de la lumière est

$$\begin{aligned} E_\gamma &= \frac{hc}{\lambda} \\ 10,198 810 5 \text{ eV} &= \frac{1239,841 974 \text{ eVnm}}{\lambda} \\ \lambda &= 121,567 312 \text{ nm} \end{aligned}$$

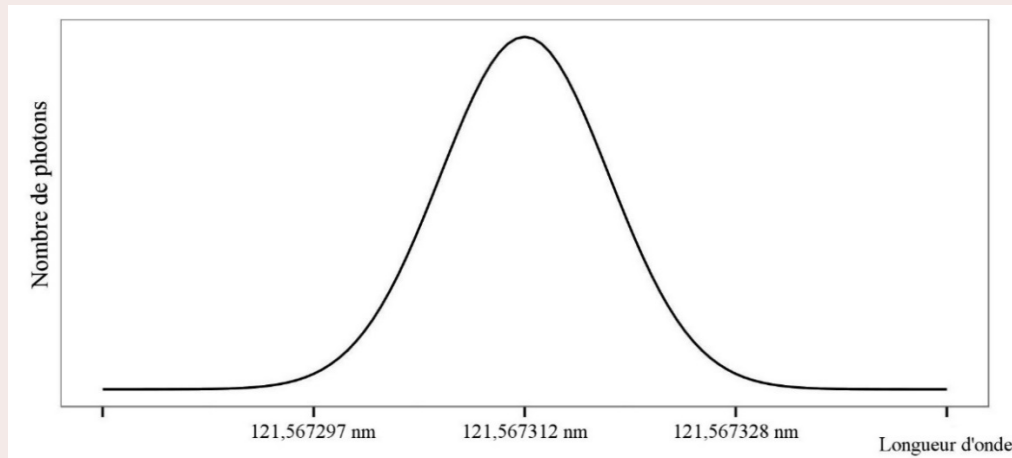
L'indétermination sur la longueur d'onde est

$$\begin{aligned} \Delta \lambda &= \left| \frac{d \frac{hc}{E_\gamma}}{dE_\gamma} \right| \Delta E_\gamma \\ &= \frac{hc}{E_\gamma^2} \Delta E_\gamma \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{1239,841\,974\,eVnm}{(10,198\,810\,5\,eV)^2} \cdot 2,6 \times 10^{-6}\,eV \\
 &= 3,1 \times 10^{-5}\,nm
 \end{aligned}$$

Cela signifie que la longueur d'onde de la lumière peut prendre n'importe quelle valeur entre 121,567 297 nm et 121,567 328 nm (l'écart entre ces valeurs est $3,1 \times 10^{-5}$ nm).

En pratique, cela signifie que si on mesure la longueur d'onde de la lumière émise pour plusieurs de ces atomes, on obtiendra une distribution qui ressemble à ceci.

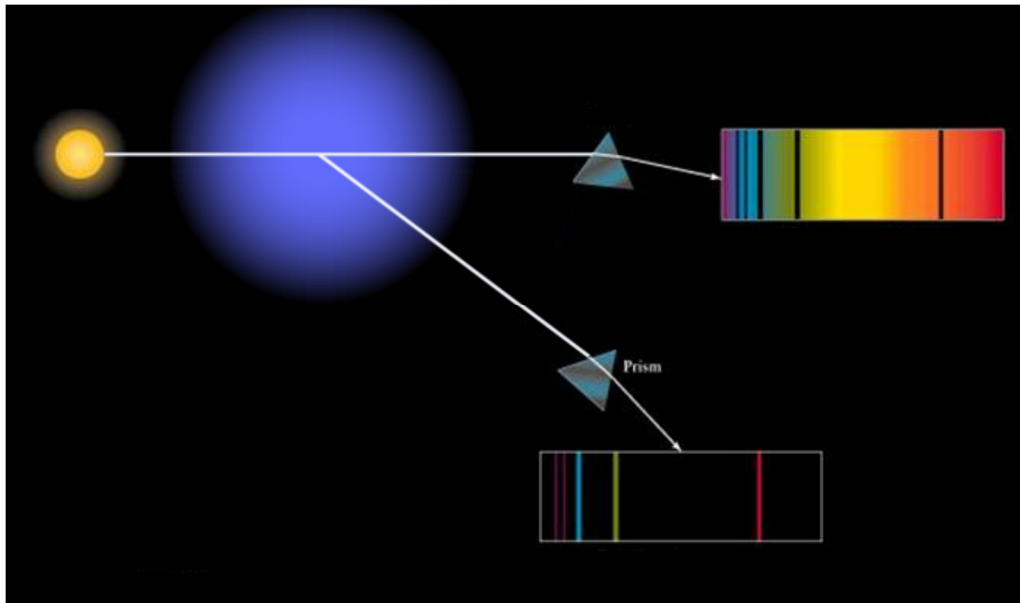


La durée de vie très courte du niveau $2p$ fait en sorte que l'indétermination de l'énergie du photon émis est d'environ 10^{-6} eV. Par contre, l'indétermination sur l'énergie du photon émis lors d'une transition du niveau $2s$ vers le niveau $1s$ est beaucoup plus petite parce que la durée de vie sur le niveau $2s$ est plus grande. L'indétermination sur l'énergie du photon émis dans ce cas est seulement d'environ 10^{-19} eV.

Le spectre d'absorption de l'hydrogène

Quand de la lumière blanche traverse de l'hydrogène froid, les photons qui ont exactement la bonne énergie peuvent être absorbés par l'électron. Les photons doivent avoir une énergie qui correspond exactement à la différence d'énergie entre deux niveaux. Par exemple, dans l'hydrogène, il y a 10,17 eV entre le premier niveau et le deuxième niveau. Si un photon a exactement cette énergie, il pourra être absorbé par l'électron et il fera passer ce dernier du premier niveau au deuxième niveau. Comme les photons ayant cette énergie sont absorbés, ils disparaissent de la lumière qui traverse le gaz, ce qui crée les raies d'absorption dans le spectre de la lumière qui traverse le gaz. Toutes ces raies sont exactement à la même place que les raies d'émission dans le spectre puisque les énergies des photons absorbés sont les mêmes que les énergies des photons émis dans le spectre d'émission. Dans les deux cas, les énergies sont égales aux différences d'énergie entre les niveaux.

L'électron qui a monté de niveau à cause de l'absorption d'un photon va finir par redescendre de niveau en émettant un photon. Toutefois, cette lumière sera réémise dans n'importe quelle direction. Il a donc peu de chance que le photon soit émis dans la même direction que la direction de la lumière qui traverse le gaz. La lumière qui traverse le gaz sera donc beaucoup moins intense aux longueurs d'onde absorbée, ce qui donnera le spectre d'absorption. Dans les autres directions, on va capter uniquement la lumière réémise par les électrons qui redescendent de niveaux. On verra alors un spectre d'émission.



www.ualberta.ca/~pogosyan/teaching/ASTRO_122/lect6/lecture6.html

La formule de Balmer

Bien avant l'élaboration de la mécanique quantique, on avait trouvé une formule qui donne les longueurs d'onde émises par l'hydrogène. Elle a été obtenue grâce aux travaux de Balmer (1884), de Rydberg (1889) et de Ritz (1908), entre autres. Cette formule est

$$\frac{1}{\lambda} = 0,01097 \text{ nm}^{-1} \cdot \left(\frac{1}{a^2} - \frac{1}{b^2} \right)$$

où a et b sont des entiers (n'importe quels entiers qui respectent la condition $a < b$). Par exemple, si $a = 2$ et $b = 3$, on obtient 656,3 nm, qui est la raie rouge dans le spectre de l'hydrogène.

Toutefois, cette formule n'était pas basée sur une théorie. Elle a été obtenue par tâtonnement pour arriver à une formule qui donne les bonnes valeurs des longueurs d'onde obtenues expérimentalement.

On peut montrer la validité de cette formule en partant des niveaux d'énergie de l'électron dans l'hydrogène.

$$\begin{aligned}
 E_\gamma &= E_i - E_f \\
 E_\gamma &= -\frac{13,598\text{eV}}{n_i^2} - \left(-\frac{13,598\text{eV}}{n_f^2}\right) \\
 hf &= \frac{13,598\text{eV}}{n_f^2} - \frac{13,598\text{eV}}{n_i^2} \\
 \frac{hc}{\lambda} &= 13,598\text{eV} \cdot \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right) \\
 \frac{1}{\lambda} &= \frac{13,598\text{eV}}{hc} \cdot \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right) \\
 \frac{1}{\lambda} &= \frac{13,598\text{eV}}{1240\text{eVnm}} \cdot \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right) \\
 \frac{1}{\lambda} &= 0,01097\text{nm}^{-1} \cdot \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right)
 \end{aligned}$$

Ce qui est bien la formule de Balmer ! La théorie est donc venue confirmer ce qu'on avait trouvé expérimentalement des décennies plus tôt.

Le modèle de Bohr

Bohr est le premier à trouver, en 1913, la formule des niveaux d'énergie de l'électron dans l'atome d'hydrogène. À partir de cette formule et de $E = hf$, Bohr arrive à la formule de Balmer, exactement comme on l'a fait précédemment. Bohr donnait ainsi une première explication théorique à la formule de Balmer qui n'était jusqu'alors qu'une formule obtenue à partir de résultats expérimentaux.

L'explication était quand même assez révolutionnaire à cette époque. Personne avant lui n'avait trouvé les niveaux d'énergie dans l'hydrogène et personne n'avait parlé de lumière émise quand l'électron passe d'un niveau à l'autre. De plus, c'était très audacieux d'utiliser la constante h puisque cette constante n'apparaissait que dans les formules du rayonnement de corps noir et de l'effet photoélectrique à l'époque. (Notez que même si Bohr utilise $E = hf$, il ne pense pas que la lumière émise est sous forme de photon. Seul le processus d'émission était lié à $E = hf$. Une fois que la lumière était émise, elle n'avait pas à rester en paquet pour être un photon.)

Il reste cependant une question importante. Comment Bohr a-t-il pu arriver, en 1913, à la formule des niveaux d'énergie plus d'une décennie avant l'élaboration de la mécanique quantique (1925) ?

Bohr y arrive en supposant que l'électron tourne autour du noyau même si cela est impossible selon la physique classique (puisqu'il perdrait rapidement son énergie). Pour Bohr, l'électron est donc en orbite autour du noyau, comme une planète autour du Soleil. Toutefois, l'électron ne peut pas suivre n'importe quelle orbite selon Bohr. Les orbites permises sont celles pour lesquelles

$$m_e v r = \frac{nh}{2\pi}$$

où n est un entier. Voyons comment cette supposition permet d'obtenir les niveaux d'énergie.

L'électron étant soumis à la force électrique faite par le noyau, la force sur l'électron et l'énergie potentielle de l'électron sont données par

$$F = \frac{ke^2}{r^2} \quad U = -\frac{ke^2}{r}$$

Si l'électron fait un mouvement circulaire, c'est qu'une force centripète agit sur l'électron. Comme la seule force qui agit sur l'électron est la force électrique, cette dernière doit être la force centripète. On a donc

$$\frac{m_e v^2}{r} = \frac{ke^2}{r^2}$$

$$m_e v^2 = \frac{ke^2}{r}$$

Mais le deuxième postulat nous dit que

$$m_e r v = \frac{nh}{2\pi}$$

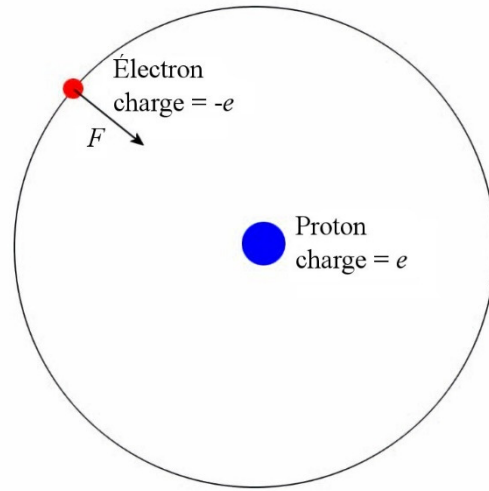
$$v = \frac{nh}{2\pi r m_e}$$

Si on remplace cette vitesse dans l'équation de la force centripète, on a

$$m_e v^2 = \frac{ke^2}{r}$$

$$m_e \left(\frac{nh}{2\pi m_e r} \right)^2 = \frac{ke^2}{r}$$

On peut simplifier pour obtenir les rayons des orbites permises (selon Bohr)



$$r = \frac{n^2 h^2}{4\pi^2 m_e k e^2}$$

De là, on peut trouver l'énergie mécanique de l'électron.

$$E = E_k + U$$

$$E = \frac{1}{2} m_e v^2 - \frac{k e^2}{r}$$

Or, l'équation de la force centripète

$$m_e v^2 = \frac{k e^2}{r}$$

nous permet d'écrire l'énergie cinétique sous la forme suivante.

$$\frac{1}{2} m_e v^2 = \frac{k e^2}{2r}$$

On a donc

$$E = E_k + U$$

$$= \frac{k e^2}{2r} - \frac{k e^2}{r}$$

$$= -\frac{k e^2}{2r}$$

Si on utilise maintenant la formule du rayon de l'orbite, on a

$$E = -\frac{k e^2}{2r}$$

$$= -k e^2 \frac{4\pi^2 m_e k e^2}{2n^2 h^2}$$

$$= -\frac{2\pi^2 m_e k^2 e^4}{n^2 h^2}$$

Voilà, c'est la même formule d'énergie que celle donnée précédemment.

Bohr arrive bel et bien à la bonne formule des niveaux d'énergie, mais en partant du postulat que $m_e v r = n h / 2\pi$. Cette équation arrive de nulle part et n'a pas de justification dans le modèle de Bohr. Il l'utilise juste parce que ça donne les bons niveaux d'énergie. Bohr espère simplement qu'un jour on pourra expliquer l'origine de cette équation.

Cette équation recevra une première justification en 1923 quand Louis de Broglie trouve la formule $\lambda = h/p$. Voyons ce que devient le postulat de Bohr $m_e v r = n h / 2\pi$ si on utilise la formule de De Broglie.

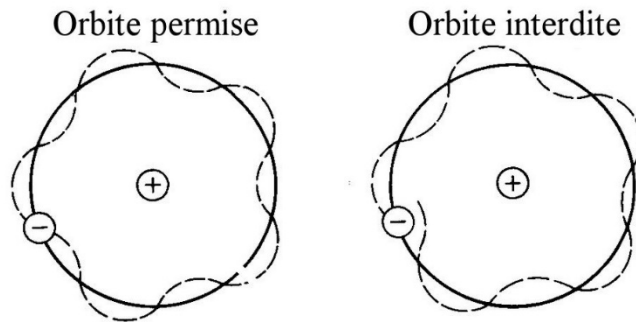
$$m_e v r = \frac{nh}{2\pi}$$

$$p r = \frac{nh}{2\pi}$$

$$\frac{h}{\lambda} r = \frac{nh}{2\pi}$$

$$n\lambda = 2\pi r$$

Cette formule nous dit que la circonférence de l'orbite doit être un nombre entier de fois la longueur d'onde de l'électron. Ce ne pouvait pas être un hasard. La formule de De Broglie semblait donc fournir un début de justification au postulat de Bohr. De Broglie se sert d'ailleurs de ce résultat comme argument en faveur de sa formule.



www.scinote.org/blog/seeking-scinote-physics-why-dont-electrons-fall-into-the-nucleus

On arrive aussi à la même condition avec la mécanique quantique, mais avec une différence. Même s'il n'y a pas d'orbites en mécanique quantique, on retrouve le même résultat que celui obtenu par de Broglie puisque la fonction d'onde doit être identique si on ajoute 2π à l'angle ϕ qui donne la position autour du noyau. On doit donc avoir

$$\psi(\phi + 2\pi) = \psi(\phi)$$

Cela signifie que l'onde ne peut que changer en ϕ qu'avec $\sin(m\phi)$ et $\cos(m\phi)$ où m est un entier. Le fait que m doit être un entier est l'équivalent de la condition $n\lambda = 2\pi r$ trouvée par de Broglie.

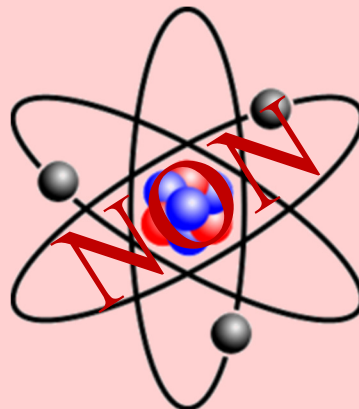
On note une différence. C'est m plutôt que n ! On se rappelle que les solutions ψ sont caractérisées par les valeurs de n , l et m . Ce n'est pas le n qui se retrouve dans la condition, mais c'est le m . Ainsi, en suivant la logique de De Broglie et de Bohr, on devrait obtenir des niveaux d'énergie qui dépendent de m plutôt que de n , ce qui est faux. Par accident, on obtient les mêmes valeurs d'énergie parce que n et m ne peuvent tous les deux que prendre des valeurs entières.

Notez que si la valeur de m est 0 (comme dans les orbitales s), la condition donnée précédemment semble donner $\lambda = \infty$. Cela signifie seulement qu'il n'y a pas variation de l'onde quand on change de direction autour du noyau. Il y a quand même une longueur d'onde parce que l'onde varie en fonction de la distance r .



Erreur fréquente : penser que l'électron est sur une orbite dans un atome

On obtient les bonnes valeurs de niveaux d'énergie avec le modèle de Bohr, mais le modèle de Bohr n'est pas un modèle convenable de l'atome. Le modèle accepté est celui de la mécanique quantique. Dans ce modèle quantique, il n'y a pas d'orbites et de trajectoires d'électron, il n'y a que des orbitales qui représentent la probabilité de trouver l'électron à un endroit. Dans le modèle quantique, l'électron est partout à la fois dans l'orbitale si on ne mesure pas sa position.



Vous serez certainement surpris d'apprendre que très peu de gens connaissent réellement le modèle atomique actuel, et cela inclut même des étudiants ayant des diplômes en chimie (les entrevues auxquelles j'ai participé pour engager des profs de chimie le démontrent assez bien !) Plusieurs personnes vous diront que dans l'atome d'hydrogène, il y a un seul électron qui tourne autour du noyau en suivant une orbite. Pourtant, le modèle atomique accepté ne dit rien de tel.

Corrections aux niveaux d'énergie de l'hydrogène

Le modèle de l'atome d'hydrogène de Schrödinger ne donne pas tout à fait les bons niveaux d'énergie. Voici, par exemple, la différence entre la prévision théorique et la valeur expérimentale pour le niveau d'énergie le plus bas de l'hydrogène.

Prévision de Schrödinger	-13,598 286 680 eV
Valeur expérimentale	-13,598 433 771 eV

Toutefois, il y a toute une série de corrections qu'on peut faire à la valeur théorique. En voici quelques-unes.

1. **L'interaction spin-orbite.** L'électron dans les orbitales autour du noyau génère un champ magnétique. Ce champ magnétique agit sur l'électron puisque ce dernier a un moment magnétique.
2. **L'interaction spin-spin.** Le noyau a un moment magnétique qui génère aussi un champ magnétique qui agit sur l'électron.
3. **La relativité.** Avec l'équation de Dirac (une version relativiste de l'équation de Schrödinger), les orbitales et les niveaux d'énergie sont un peu différents.
4. **La polarisation du vide.** Dans le vide, des particules et des antiparticules apparaissent continuellement et disparaissent presque aussitôt. La très brève présence de ces particules change très légèrement les niveaux d'énergie.

Avec toutes ces petites corrections, on obtient une valeur théorique en accord parfait avec la valeur expérimentale. En fait, l'électrodynamique quantique, utilisée pour faire ces calculs, est la théorie scientifique la plus précise qui soit. Les prévisions théoriques et les mesures expérimentales sont en accord jusqu'à 10 chiffres significatifs.

11.8 LES AUTRES ATOMES

Atomes à un seul électron

On peut trouver une solution en mécanique quantique pour les atomes qui ont un seul électron. Le noyau compte alors Z protons. Si $Z = 1$, c'est un atome d'hydrogène. Si $Z = 2$, c'est un atome d'hélium ionisé une fois (He^+). Si $Z = 3$, c'est un atome de lithium ionisé deux fois (Li^{2+}) et ainsi de suite. Dans ce cas, les niveaux d'énergie sont donnés par

Énergie des niveaux de l'électron dans un atome ayant 1 seul électron

$$E_n = -\frac{2\pi^2 Z^2 m_e k^2 e^4}{n^2 h^2} = -\frac{Z^2 \cdot 13,60 \text{ eV}}{n^2}$$

(Ici, la valeur de l'énergie en électronvolts (13,60 eV) est un peu différente de celle utilisée pour l'hydrogène parce que la modification qui tient compte de la position du centre de masse est moins importante pour ces atomes.)

Exemple 11.8.1

Un électron est dans un atome d'hélium ionisé une fois (He^+).

- a) Quelle est l'énergie d'ionisation si l'électron est au niveau fondamental ?

L'énergie de l'électron au premier niveau est

$$\begin{aligned} E_n &= -\frac{Z^2 \cdot 13,60 \text{ eV}}{n^2} \\ E_1 &= -\frac{2^2 \cdot 13,60 \text{ eV}}{1^2} \\ &= -54,40 \text{ eV} \end{aligned}$$

On doit donc fournir 54,40 eV pour arracher cet électron.

- b) Quelle est la longueur d'onde de la lumière émise quand l'électron passe du troisième au deuxième niveau ?

On trouve la longueur d'onde avec

$$E = \frac{hc}{\lambda}$$

où E est l'énergie du photon, qui correspond au changement d'énergie de l'électron. On doit donc premièrement trouver la variation d'énergie de l'électron.

L'énergie du troisième niveau est

$$\begin{aligned} E_n &= -\frac{Z^2 \cdot 13,60eV}{n^2} \\ E_3 &= -\frac{2^2 \cdot 13,60eV}{3^2} \\ &= -6,04eV \end{aligned}$$

L'énergie du deuxième niveau est

$$\begin{aligned} E_n &= -\frac{Z^2 \cdot 13,60eV}{n^2} \\ E_2 &= -\frac{2^2 \cdot 13,60eV}{2^2} \\ &= -13,60eV \end{aligned}$$

L'énergie du photon est donc

$$\begin{aligned} E_\gamma &= E_3 - E_2 \\ &= -6,04eV - (-13,60eV) \\ &= 7,56eV \end{aligned}$$

Ainsi, la longueur d'onde de la lumière est

$$\begin{aligned} E_\gamma &= \frac{hc}{\lambda} \\ 7,56eV &= \frac{1240eVnm}{\lambda} \\ \lambda &= 164nm \end{aligned}$$

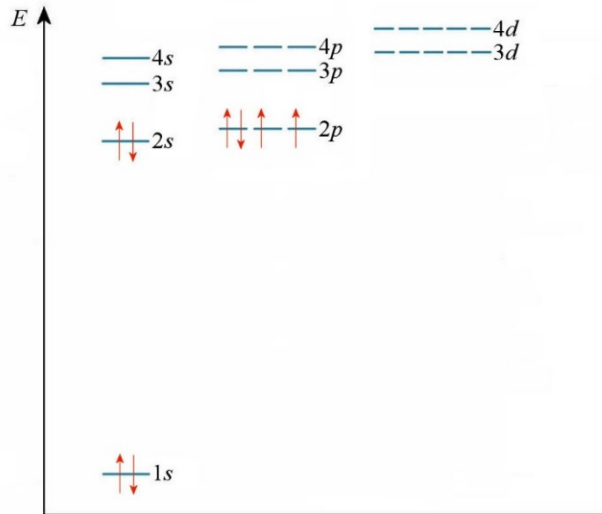
Atomes à plusieurs électrons

Dès qu'il y a plusieurs électrons, il n'y a plus de solutions exactes possibles à l'équation de Schrödinger. Comme les électrons se repoussent mutuellement, la formule de l'énergie potentielle devient plus complexe. Même avec seulement 2 électrons, on n'est pas capable de résoudre l'équation de Schrödinger exactement (on trouve quand même des résultats intéressants à l'aide d'approximations).

On sait cependant que les solutions restent caractérisées par les mêmes nombres n , l et m qu'il y avait dans l'atome d'hydrogène. On doit donc placer les électrons dans les orbitales, tout en respectant le principe d'exclusion de Pauli. Pour un atome ayant la configuration d'énergie la plus basse, on place donc les électrons dans les orbitales ayant les énergies les plus basses en plaçant au maximum 2 électrons par niveaux, soit un électron avec un spin positif et un électron avec un spin négatif. Ainsi, il n'y aura pas d'électrons qui auront le même état (même n , l , m et s).

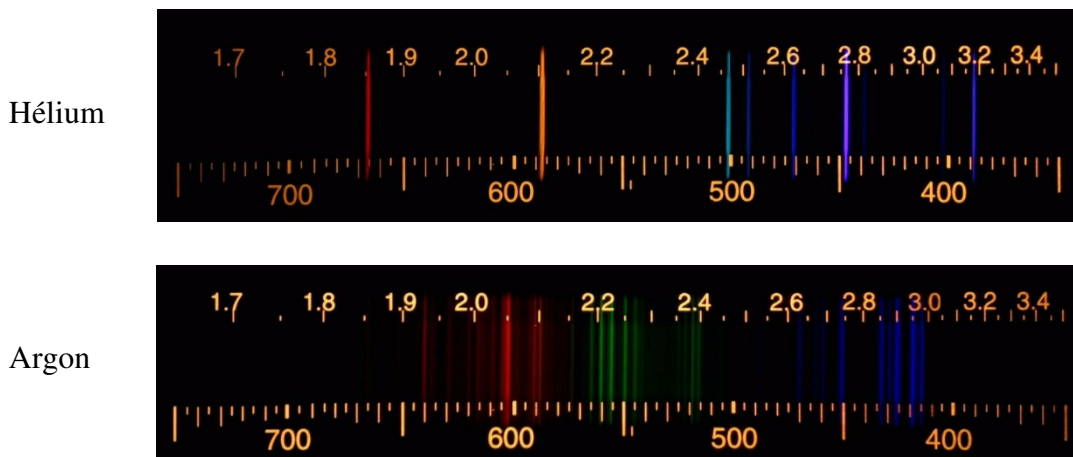
On sait aussi que les énergies des orbitales p sont décalées vers le haut par rapport aux orbitales s et que les énergies des orbitales d sont encore plus décalées vers le haut. Donc, puisqu'on doit remplir les orbitales en remplissant toujours les orbitales qui ont le moins d'énergie, on remplit les orbitales en ordre croissant de $n + l$. En cas d'égalité, on remplit l'orbitale qui a le plus petit n en premier.

C'est essentiellement ce que vous avez fait en chimie générale. Par exemple, si on place les électrons dans les orbitales de l'oxygène, on a la configuration montrée à droite.



Les spectres des éléments

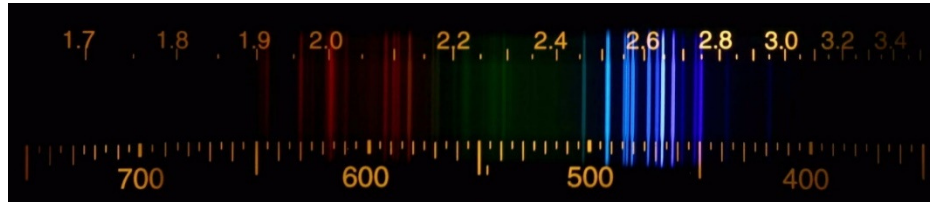
Quand un électron change de niveau d'énergie, il y aura un photon émis. Comme les niveaux d'énergie changent avec le nombre d'électrons dans l'atome et la charge électrique du noyau, les niveaux d'énergie sont différents pour chaque atome. Cela signifie que les longueurs d'onde émises par chaque atome sont différentes de celles émises par les autres atomes. On obtient donc des spectres différents pour chaque atome. En voici quelques-uns.



Mercure



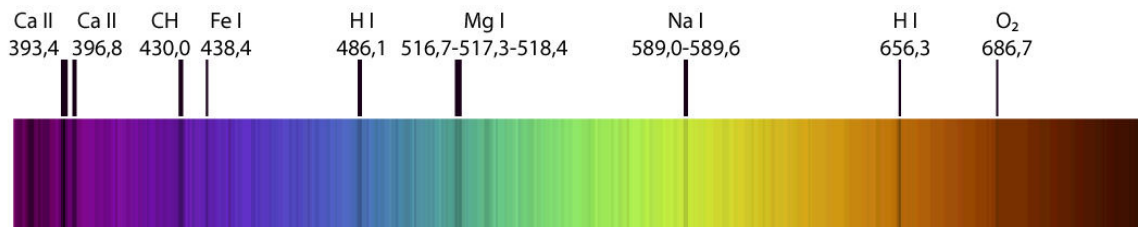
Xénon



astrodave.name/

On sait depuis le 19^e siècle, sans en connaître l'explication au départ, que chaque élément a un spectre spécifique. C'est grâce aux spectres qu'on a découvert de nombreux nouveaux éléments. Par exemple, on découvre en 1868 des raies d'absorption dans le spectre du Soleil qui ne correspondaient à aucun élément connu. On comprend alors qu'on a affaire à un élément inconnu jusqu'alors, qu'on appela hélium (qui vient d'*hélios*, qui veut dire Soleil en grec). On a identifié ainsi 12 nouveaux éléments (césium, rubidium, thorium, indium, gallium, scandium, germanium, hélium, néon, argon, krypton et xénon) à partir de leur spectre.

C'est grâce aux spectres qu'on connaît la composition du Soleil. Les raies d'absorption nous indiquent tous les éléments présents dans le Soleil. On peut même faire le spectre des étoiles et ainsi connaître leur composition chimique malgré la très grande distance qui nous sépare de ces étoiles. On peut voir ces raies d'absorption dans la figure suivante qui nous montre le spectre du Soleil. Chacune de ces raies est associée à un élément présent dans le Soleil (un élément forme plusieurs raies).



media4.obspm.fr/public/ressources_lu/pages_tp-spectre-soleil/impression.html

William Wollaston a été le premier à observer les raies spectrales du Soleil en 1802. Dès 1814, Joseph Fraunhofer avait catalogué 475 de ces raies d'absorption dans le spectre solaire.

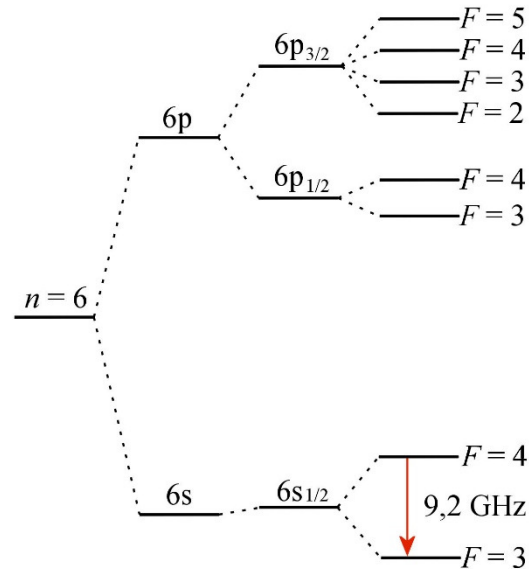
Définitions de la seconde, du mètre et du kilogramme

Les définitions de la seconde, du mètre et du kilogramme sont toutes liées d'une façon ou d'une autre à une transition atomique particulière émise par l'atome de césium 133, c'est-

à-dire un atome ayant 55 électrons et dont le noyau est formé de 55 protons et 78 neutrons. Dans cet atome, il y a un seul électron sur le niveau $n = 6$. Examinons plus en détail ce 6^e niveau.

Vous avez vu en chimie que le 6^e niveau se sépare premièrement en niveau 6s et 6p et que l'énergie du niveau 6p est plus grande. C'est ce qu'on peut voir sur la 2^e colonne de la figure de droite. Toutefois, l'histoire ne s'arrête pas là, il y a plusieurs autres modifications.

La 3^e colonne nous montre les corrections qui donnent la *structure fine* de l'atome. Ces corrections viennent de l'interaction spin-orbite (c'est-à-dire l'interaction entre le spin de l'électron et le champ magnétique généré par l'électron dans son orbital), de la relativité d'Einstein et de certaines fluctuations quantiques dans l'atome (une correction appelée la *correction de Darwin*). Au total, ces corrections font diminuer l'énergie de 2 des niveaux p (qui portent maintenant le nom $6p_{1/2}$) et monter l'énergie de 4 niveaux p (qui portent maintenant le nom $6p_{3/2}$). Le niveau 6s (qui devient le niveau $6s_{1/2}$) ne se sépare pas en plusieurs niveaux, mais l'énergie du niveau est légèrement modifiée par ces corrections.



La correction suivante donne la *structure hyperfine* de l'atome. Elle est générée par l'interaction spin-spin, qui est l'interaction entre le spin de l'électron et le champ magnétique généré par le noyau atomique. Cette interaction sépare en 2 le niveau $6s_{1/2}$ (niveaux qu'on appelle $F = 3$ et $F = 4$). Cette séparation vient du fait que l'énergie de l'électron est un peu plus grande quand le spin de l'électron est dans une direction que quand il est dans l'autre direction.

Quand l'électron passe de $F = 4$ à $F = 3$, de la lumière est émise. C'est en fait le rayonnement émis quand la direction du spin de l'électron s'inverse. Cette lumière n'est pas de la lumière visible, c'est du rayonnement microonde. On a décidé d'utiliser la fréquence de cette lumière pour définir la seconde.

Définition de la seconde

La seconde est définie en fixant la valeur de la fréquence de la transition hyperfine de l'état fondamental de l'atome de césium 133 non perturbé à 9 192 631 770 Hz.

Autrement dit, on a décidé que la fréquence de cette transition est exactement de 9 192 631 770 Hz.

Cette définition semble tout à fait arbitraire, mais on a choisi cette transition parce que c'est elle qu'on utilise dans les horloges atomiques. Ces horloges utilisent le rayonnement provenant de cette transition pour mesurer le temps.

La définition du mètre dépend aussi de ce rayonnement parce qu'il est basé sur la définition de la seconde.

Définition du mètre

Un mètre est la longueur du trajet parcouru par la lumière dans le vide pendant une durée de $1/299\,792\,458$ de seconde.

Autrement dit, on a décidé que la vitesse de la lumière est exactement de $299\,792\,458$ m/s.

Pour définir le kilogramme, on a décidé de fixer la valeur de h à $6,626\,070\,15 \times 10^{-34}$ Js. Voyons pourquoi cela fixe la valeur du kilogramme. Puisque h et la fréquence de la transition hyperfine sont fixés, l'énergie du photon émis lors de la transition hyperfine est exactement

$$\begin{aligned} E_\gamma &= hf \\ &= 6,626\,070\,15 \times 10^{-34} \text{ Js} \cdot 9\,192\,631\,770 \text{ Hz} \\ &= 6,091\,102\,297\,113\,866\,55 \times 10^{-24} \text{ J} \end{aligned}$$

La masse équivalente de ce photon est, selon $E = mc^2$,

$$\begin{aligned} E &= mc^2 \\ 6,091\,102\,297 \times 10^{-24} \text{ J} &= m \cdot \left(299\,792\,458 \frac{\text{m}}{\text{s}}\right)^2 \\ m &= 6,777\,265\,312\,312\,067\,610\,617 \times 10^{-41} \text{ kg} \end{aligned}$$

Cela signifie qu'il faudrait $1,475\,521\,399\,735\,279\,160\,650 \times 10^{40}$ de ces photons pour avoir 1 kg (la valeur exacte est c^2/hf où $f = 9\,192\,631\,770$ Hz). On pourrait donc avoir la définition suivante.

Définition du kilogramme

Un kilogramme est la masse équivalente à l'énergie de $1,475\,512\,400 \times 10^{40}$ photons provenant de la transition hyperfine de l'état fondamental de l'atome de césium 133 non perturbé.

RÉSUMÉ DES ÉQUATIONS

Longueurs d'onde possibles pour une particule enfermée dans une boîte en une dimension

$$\lambda_n = \frac{2L}{n}$$

Énergies possibles pour une particule enfermée dans une boîte en une dimension

$$E_n = n^2 \frac{h^2}{8mL^2}$$

Énergies possibles pour une particule enfermée dans une boîte en 3 dimensions

$$E_n = (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \frac{h^2}{8mL^2}$$

Énergie du photon émis quand une particule baisse d'énergie pour passer d'un niveau d'énergie E_i à un niveau d'énergie E_f

$$E_\gamma = E_i - E_f$$

Énergie du photon absorbé quand une particule monte d'énergie pour passer d'un niveau d'énergie E_i à un niveau d'énergie E_f

$$E_\gamma = E_f - E_i$$

Énergies possibles pour une particule enfermée dans une boîte en une dimension (puits de potentiel fini)

$$E_n = v^2 E_{1\infty}$$

où v s'obtient en faisant la solution des équations

$$v \tan\left(\frac{\pi v}{2}\right) = \sqrt{u^2 - v^2}$$

$$-v \cot\left(\frac{\pi v}{2}\right) = \sqrt{u^2 - v^2}$$

dans lesquelles la valeur de u est donnée par

$$U = u^2 E_{1\infty}$$

Nombre de niveaux d'énergie pour une particule enfermée dans un puits de potentiel de hauteur U

Il faut prendre la partie entière de $u + 1$

Probabilité de traverser une barrière de potentiel

$$T = \frac{16E(U-E)}{U^2} e^{-2\alpha L} \quad \text{où } \alpha = \frac{\pi\sqrt{8m(U-E)}}{h}$$

Énergie des niveaux pour une particule en oscillation harmonique

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) hf \quad \text{Commence à } n = 0$$

Niveaux d'énergie de l'électron dans l'hydrogène

$$E_{Hn} = -\frac{2\pi^2 m_e k^2 e^4}{n^2 h^2} = -\frac{13,598 eV}{n^2}$$

Énergie des niveaux de l'électron dans un atome ayant 1 seul électron

$$E_n = -\frac{2\pi^2 Z^2 m_e k^2 e^4}{n^2 h^2} = -\frac{Z^2 \cdot 13,60 eV}{n^2}$$

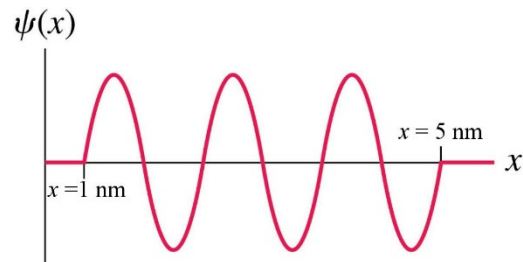
EXERCICES

Pour ces exercices, utilisez les masses suivantes.

Électron	$m_e = 9,1094 \times 10^{-31} \text{ kg}$	Proton	$m_p = 1,6726 \times 10^{-27} \text{ kg}$
Neutron	$m_n = 1,6749 \times 10^{-27} \text{ kg}$		

11.1 Une particule dans une boîte

- Un neutron est enfermé dans une boîte de $2 \times 10^{-14} \text{ m}$ de large.
 - Quelles sont les énergies des trois premiers niveaux (en MeV) ?
 - Quelle est la longueur d'onde du neutron quand il est au niveau $n = 1$?
- Voici l'onde de l'électron dans une boîte à une dimension. Quelle est la quantité de mouvement de cet électron ?



www.chegg.com/homework-help/questions-and-answers/figure-shows-wave-function-electron-rigid-box-electron-energy-25-ev-probability-electron-r-q30670724

3. Un électron est enfermé dans une boîte de 1 nm de large. Quelle est la plus petite énergie que cet électron peut avoir (en eV) ?
4. Un électron est enfermé dans une boîte. Au niveau $n = 4$, l'énergie de l'électron est de 10 eV. Quelle est la largeur de la boîte ?
5. L'énergie du niveau $n = 4$ est de 24 eV pour une particule enfermée dans une boîte. Quelle est l'énergie du niveau $n = 3$?
6. Un électron est enfermé dans une boîte en 3D ayant des côtés de 1 nm de long. Quelle est l'énergie du niveau caractérisé par $n_x = 3$, $n_y = 4$ et $n_z = 2$?
7. Un électron est enfermé dans une boîte à une dimension. Un niveau d'énergie a une énergie 80 eV et le niveau d'énergie suivant ce niveau a une énergie de 96,8 eV.
 - a) Quelle est l'énergie du premier niveau ?
 - b) Quelle est la largeur de la boîte ?

11.2 Le spin

8. Il y a 21 électrons dans une boîte en 3 dimensions. Si ces 21 électrons sont sur les niveaux d'énergies qui donnent la configuration ayant la plus petite énergie, sur quel niveau se trouve l'électron ayant la plus haute énergie ? (Autrement dit, le dernier électron est sur le niveau caractérisé par $n_x = ?$, $n_y = ?$ et $n_z = ?$)

11.3 Le passage d'un niveau à un autre

9. Un proton est enfermé dans une boîte en une dimension de 10^{-14} m de large. Quelle est la longueur d'onde de la lumière émise quand le proton passe du niveau $n = 2$ au niveau $n = 1$?
10. Un électron est au niveau $n = 1$ dans une boîte de 2 nm de large. Quelle est la longueur d'onde de la lumière que l'électron doit absorber pour le faire monter au niveau $n = 4$?

11. Un électron est enfermé dans une boîte en 3D ayant des côtés de 0,5 nm de long. Quelle est la longueur d'onde de la lumière émise quand l'électron passe du niveau caractérisé par $n_x = 2$, $n_y = 2$ et $n_z = 2$ au niveau caractérisé par $n_x = 1$, $n_y = 1$ et $n_z = 1$?

11.4 Une particule dans une boîte (puits de potentiel fini)

12. Un électron est enfermé dans une boîte de 0,6 nm de large. L'énergie potentielle à l'extérieur de la boîte est de 20 eV.
- a) Combien de niveaux d'énergie y a-t-il pour la particule enfermée dans la boîte ?
 - b) Quelles sont les énergies de ces niveaux ?
 - c) Quelle longueur d'onde maximale un photon doit-il avoir pour faire sortir un électron de la boîte si l'électron est initialement au 2^e niveau ?

11.5 L'effet tunnel

13. Un électron ayant une énergie de 3 eV tente de traverser une barrière d'une hauteur de 10 eV et d'une largeur de 0,3 nm. Quelle est la probabilité que l'électron traverse la barrière ?
14. Un électron a une probabilité de 5 % de traverser une barrière de 12 eV de haut. Quelle est la largeur de la barrière si l'électron a une énergie de 4 eV ?
15. Un électron ayant une énergie de 4 eV a une probabilité de 10 % de traverser une barrière de 8 eV. Quelle sera la probabilité de traverser si on double la largeur de la barrière ?

11.6 L'oscillateur harmonique

16. Un électron fait une oscillation harmonique avec une période de 4×10^{-15} s.
- a) Quelle est la plus petite énergie que peut avoir cet électron ?
 - b) Quelle sera la longueur d'onde de la lumière émise si l'électron passe du niveau $n = 3$ au niveau $n = 1$?
17. Quand un électron en oscillation harmonique passe du niveau $n = 5$ au niveau $n = 2$, un photon ayant une longueur d'onde de 496 nm est émis. Quelle est la période d'oscillation de l'électron ?

11.7 L'atome d'hydrogène

18. Un électron passe du niveau $n = 5$ au niveau $n = 2$ dans l'atome d'hydrogène. Quelle est la longueur d'onde de la lumière émise ?
19. On bombarde des atomes d'hydrogène avec des photons pour faire monter les électrons de niveaux. Quel doit-être la longueur d'onde de la lumière pour que les électrons montent du niveau $n = 1$ au niveau $n = 6$?
20. On bombarde des atomes d'hydrogène.
- a) Si on bombarde l'hydrogène avec des photons ayant une énergie de 13 eV. Sur quels niveaux peuvent monter les électrons si tous les électrons étaient initialement au niveau fondamental dans leur atome ?
 - b) Si on bombarde l'hydrogène avec des électrons ayant une énergie de 13 eV. Sur quels niveaux peuvent monter les électrons si tous les électrons étaient initialement au niveau fondamental dans leur atome ?
21. Montrez que le nombre de niveau dégénéré pour chaque énergie possible est égal à n^2 . (Ce qui signifie qu'il y a un niveau pour $n = 1$, 4 niveaux dégénérés pour $n = 2$, 9 niveaux dégénérés pour $n = 3$, et ainsi de suite.)

11.8 Les autres atomes

22. Dans l'atome de lithium ionisé deux fois (Li^{++}), calculez...
- a) l'énergie du niveau fondamental ($n = 1$).
 - b) l'énergie d'ionisation.
 - c) la longueur d'onde de la lumière émise quand l'électron passe du 2^e au 1^{er} niveau.
23. De la lumière ayant une longueur d'onde de 250 nm est absorbée par un atome. En absorbant le photon, l'électron passe du niveau fondamental à un niveau d'énergie supérieur. Toutefois, l'électron redescend en deux étapes en allant premièrement à un niveau d'énergie intermédiaire, puis en allant ensuite au niveau fondamental. Lors de la première transition, la longueur d'onde de la lumière émise est de 800 nm. Quelle sera la longueur d'onde de la lumière émise lors de la deuxième transition ?

Défis

(Questions plus difficiles que les questions qu'il y aura à l'examen.)

24. On a dit que la probabilité de trouver une particule à un endroit est proportionnelle à ψ^2 . Plus précisément, la probabilité de trouver une particule entre $x = a$ et $x = b$ est

$$\int_a^b \psi^2 dx$$

Si on somme toutes les probabilités de trouver la particule à tous les endroits, on devrait obtenir 100 %. Cela veut dire qu'on doit avoir

$$\int_{\text{toutes les positions possibles}} \psi^2 dx = 1$$

Appliquons maintenant cela pour une particule enfermée dans une boîte (puits de potentiel infini) au premier niveau. Calculez la probabilité de trouver un électron entre $x = 0$ nm et $x = 3$ nm si la boîte a une largeur de 10 nm.

Intégrale qui peut être utile : $\int \sin^2 ax = \frac{x}{2} - \frac{1}{4a} \sin(2ax)$

25. Dans l'oscillateur harmonique, l'énergie potentielle est donnée par $U = \frac{1}{2}kx^2$. Montrez que la fonction

$$\psi = Ae^{-Bx^2}$$

est une solution de l'équation de Schrödinger si l'énergie de ce niveau est $E = \frac{1}{2}hf$. (A et B sont des constantes.)

RÉPONSES

11.1 Une particule dans une boîte

1. a) 1^{er} niveau : 0,511 MeV 2^e niveau : 2,045 MeV 3^e niveau : 4,602 MeV
b) 4×10^{-14} m
2. $4,9696 \times 10^{-25}$ kgm/s
3. 0,376 eV
4. 0,7757 nm
5. 13,5 eV
6. 10,90 eV
7. a) 0,8 eV b) 0,6856 nm

11.2 Le spin

8. $n_x = 2, n_y = 2$ et $n_z = 2$

11.3 Le passage d'un niveau à un autre

9. $2,018 \times 10^{-4}$ nm

10.879 nm

11.91,60 nm

11.4 Une particule dans une boîte (puits de potentiel fini)

12.a) 5 niveaux b) 0,795 eV, 3,161 eV, 7,038 eV, 12,27 eV, 18,32 eV

c) 73,64 nm

11.5 La traversée d'une barrière

13.0,0987 %

14.0,1471 nm

15.0,25%

11.6 L'oscillateur harmonique

16.a) 0,517 eV b) 599,6 nm

17.4,963 $\times 10^{-15}$ s

11.7 L'atome d'hydrogène

18.434,2 nm

19.93,8 nm

20.a) Les électrons restent au niveaux $n = 1$ b) Les électrons peuvent monter aux niveaux $n = 2, n = 3$ et $n = 4$.

21. Voir la preuve dans le solutionnaire.

11.8 Les autres atomes

22.a) -122,4 eV b) 122,4 eV c) 13,51 nm

23.363,6 nm

Défis

24.14,86 %