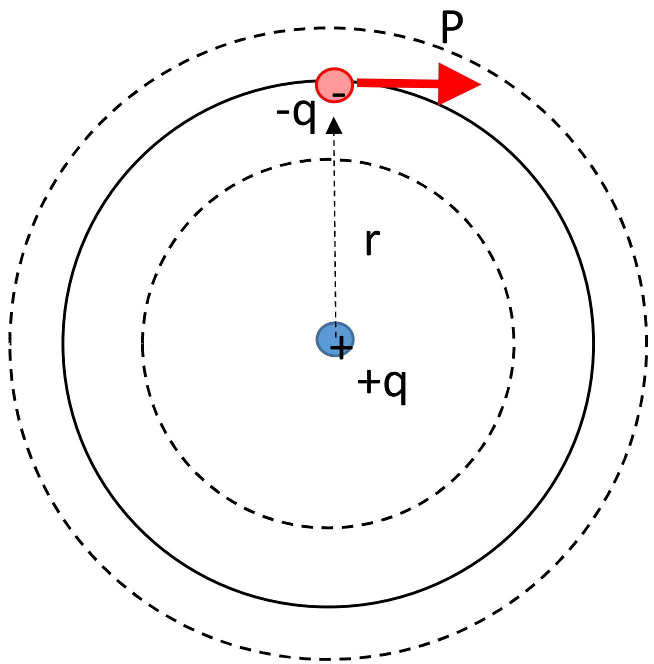
Exercice 4.1: Atome de Bohr

A) Considérez l'électron comme une **particule classique** et

utilisez le potentiel de Coulomb $E_{pot} = -\left(\dfrac{q^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)\cdot\dfrac{1}{r}$



1) Reliez la vitesse et le rayon pour une orbite circulaire stable en équilibrant la force électrique et la force centrifuge.

2) Pour ces orbites classiques stables exprimez l'énergie cinétique et l'énergie totale de l'électron en fonction du rayon

B) Considérez l'électron comme une **onde quantique**

3) Reliez le vecteur d'onde au rayon pour une orbite stable

4) Exprimez l'énergie cinétique en fonction du rayon

C) Considérez l'électron à la fois comme une **particule classique** et comme une **onde quantique**

5) Déterminez l'énergie totale quantifiée.

PAB

Atome de Bohr: orbite classique

1) Reliez la vitesse et le rayon pour une orbite circulaire stable en équilibrant la force électrique et la force centrifuge.

$$\frac{q^2}{(4\pi\varepsilon_0)}\cdot\frac{1}{r^2}=\frac{m\cdot \mathrm{v}^2}{r} \quad\Rightarrow\quad m\cdot \mathrm{v}^2=\frac{q^2}{(4\pi\varepsilon_0)}\cdot\frac{1}{r} \quad\Rightarrow\quad \boxed{\mathrm{v}=\sqrt{\frac{q^2}{(4\pi\varepsilon_0 m)}}\cdot\frac{1}{\sqrt{r}}}$$

2) Pour ces orbites classiques stables exprimez l'énergie cinétique et l'énergie totale de l'électron en fonction du rayon

$$E_{cin}=\frac{1}{2}m\cdot \mathrm{v}^2=\frac{1}{2}\frac{q^2}{(4\pi\varepsilon_0)}\cdot\frac{1}{r}$$

$$E_{tot}=E_{cin}+E_{pot}=E_{cin}-\frac{q^2}{(4\pi\varepsilon_0)}\cdot\frac{1}{r} \quad\Rightarrow\quad \boxed{E_{tot}=-\frac{1}{2}\frac{q^2}{(4\pi\varepsilon_0)}\cdot\frac{1}{r}}$$

Atome de Bohr: vision «onde quantique»

3) Reliez le vecteur d'onde au rayon pour une orbite stable

$$2\pi \cdot r = n \cdot \lambda \quad \Rightarrow \quad \boxed{K = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{n}{r}} \qquad n = 1, 2, \dots, \infty$$

4) Exprimez l'énergie cinétique

$$E_{cin} = \frac{P^2}{2m} = \frac{\hbar^2 K^2}{2m} = n^2 \cdot \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{1}{r^2}$$

quantique

$$E_{cin} = \frac{1}{2} \frac{q^2}{(4\pi\varepsilon_0)} \cdot \frac{1}{r}$$

classique

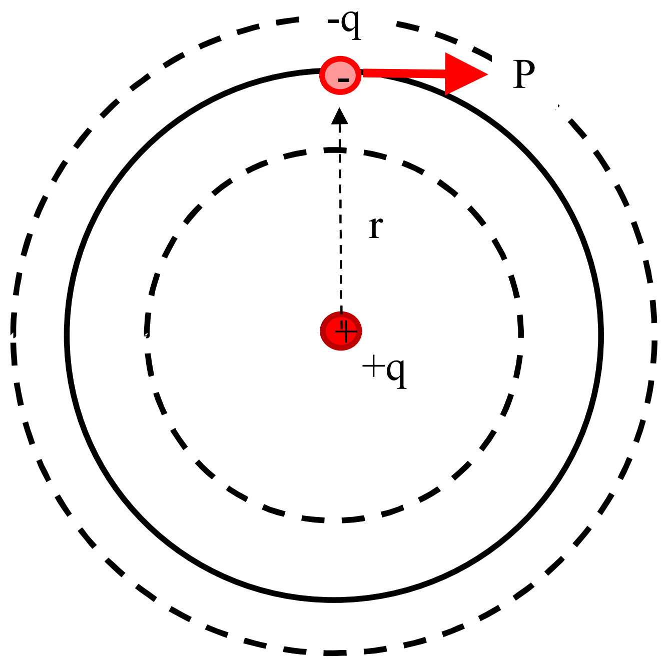
$$\boxed{\frac{1}{r} = \frac{mq^2}{\hbar^2 (4\pi\varepsilon_0)} \cdot \frac{1}{n^2}}$$

5) Déterminez l'énergie totale quantifiée.

$$\Rightarrow \boxed{E_{tot} = -\frac{1}{2} \frac{q^2}{(4\pi\varepsilon_0)} \cdot \frac{1}{r} = -\frac{mq^4}{2\hbar^2 \cdot (4\pi\varepsilon_0)^2} \cdot \frac{1}{n^2} \cong -13.6 \cdot \frac{1}{n^2} \ [eV]} \qquad n = 1, 2, \dots, \infty$$

Atome de Bohr: moment cinétique et moment magnétique

$$P = \hbar K = \hbar \frac{n}{r}$$



Quels sont les moments cinétiques quantiques possibles ?

$$L_Z = P \cdot r \quad \Rightarrow \quad \boxed{L_Z = n \cdot \hbar} \qquad n = 1, 2, 3, \ldots$$

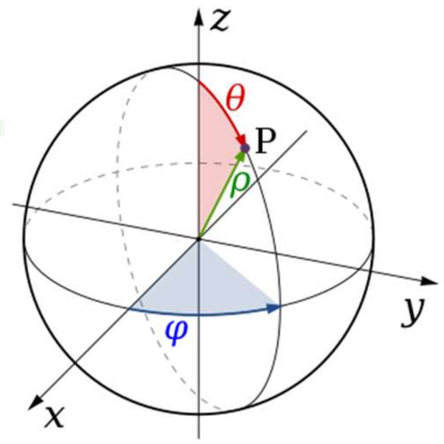
Quelles sont les moments magnétiques quantiques possibles (magneton de Bohr)?

$$M_Z = \left| J \cdot surface \right| = \left| \frac{q}{2\pi r} \cdot v \right| \cdot \left| \pi r^2 \right|$$

$$M_Z = \frac{q}{2m} \cdot mv \cdot r = \left(\frac{q}{2m} \right) \cdot (\mathrm{P} \cdot r)$$

$$M_Z = \left(\frac{q}{2m} \right) \cdot L_Z \quad \Rightarrow \quad \boxed{M_Z = \left(\frac{q\hbar}{2m} \right) \cdot n} \qquad n = 1, 2, 3, \ldots$$

Opérateurs quantiques



Hamiltonien

Ecriture en coordonnées sphériques

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2 - \frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0 \cdot r}$$

$$H = 4Ry\cdot\left[\left\{-\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho^2\frac{\partial}{\partial\rho}\right)\right\} + \frac{1}{\rho^2}\underbrace{\left\{-\frac{1}{\sin(\theta)}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin(\theta)\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin(\theta)^2}\underbrace{\left(-\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)}_{L_Z^2/\hbar^2}\right\}}_{L^2/\hbar^2}\right] - 4Ry\cdot\frac{1}{\rho}$$

$$\rho \equiv \frac{2}{a_0}\cdot r \qquad a_0 \equiv \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{m_e\cdot q^2} = 0.529\ \overset{0}{\mathrm{A}} \qquad Ry \equiv \frac{m_e\cdot q^4}{2\cdot(4\pi\varepsilon_0)^2\cdot\hbar^2} = 13.6\ eV$$

$$H\cdot|\psi\rangle = E\cdot|\psi\rangle$$

Séparation de variables: $|\psi(\rho,\theta,\varphi,t)\rangle = R(\rho)\cdot\Theta(\theta)\cdot\Phi(\varphi)\cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$

Solutions pour l'atome d'hydrogène

$$\left|\psi_{n,l,m}\right\rangle = \frac{1}{A} \cdot e^{-\frac{\rho}{2n}} \cdot \left(\frac{\rho}{n}\right)^{l} \cdot L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{\rho}{n}\right) \cdot P_l^m(\cos(\theta)) \cdot \begin{matrix} \cos(|m|\varphi) \\ \sin(|m|\varphi) \end{matrix}$$

$n = 1, 2, 3, \ldots$

$l = 0, 1, 2, \ldots, (n-1)$

$m = -l, \ldots, +l$

$L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{\rho}{n}\right)$ associated Laguerre Polynomials

$P_l^m(\cos(\theta))$ associated Legendre Polynomials

Choisir la normalisation A tel que: $\left\langle \psi_{n,l,m} \middle| \middle| \psi_{n,l,m} \right\rangle = \int_0^{\infty}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} \left|\psi_{n,l,m}\right|^2 \cdot r^2 \sin(\theta)\, dr\, d\theta\, d\varphi = 1$

Quantisations:

$$H \cdot \left|\psi_{n,l,m}\right\rangle = E_n \cdot \left|\psi_{n,l,m}\right\rangle = -\left(\frac{1}{n^2} Ry\right) \cdot \left|\psi_{n,l,m}\right\rangle$$

$n = 1, 2, 3, \ldots$

$$L^2 \cdot \left|\psi_{n,l,m}\right\rangle = \left(l \cdot (l+1) \cdot \hbar^2\right) \cdot \left|\psi_{n,l,m}\right\rangle$$

$l = 0, 1, 2, 3, \ldots, (n-1)$
s, p, d, f, ...

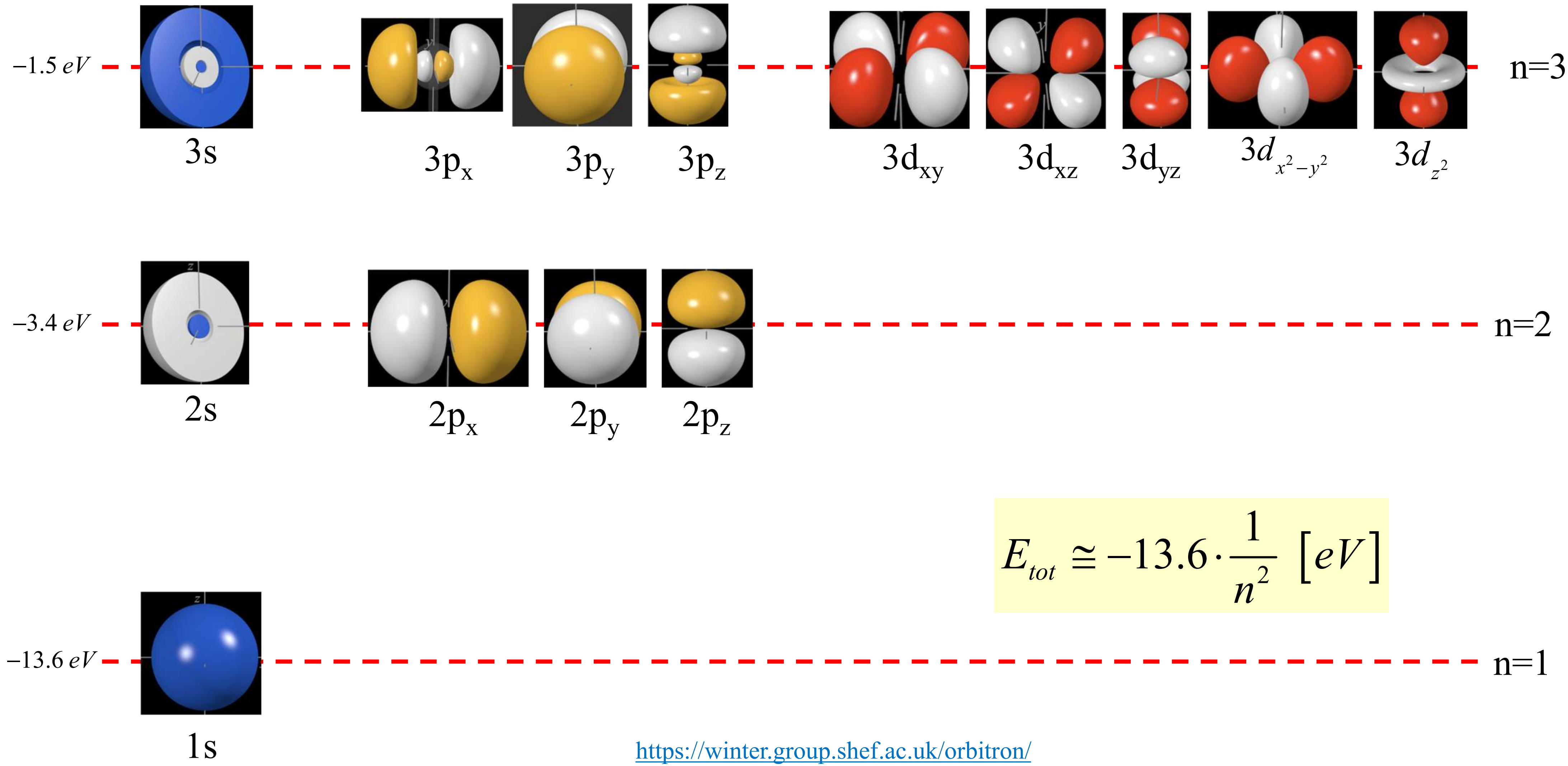
$$L_Z \cdot \left|\psi_{n,l,m}\right\rangle = (m \cdot \hbar) \cdot \left|\psi_{n,l,m}\right\rangle$$

$m = -l, \ldots, +l$

+ spin

$s = -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}$

Orbitales et énergies de l'atome d'hydrogène



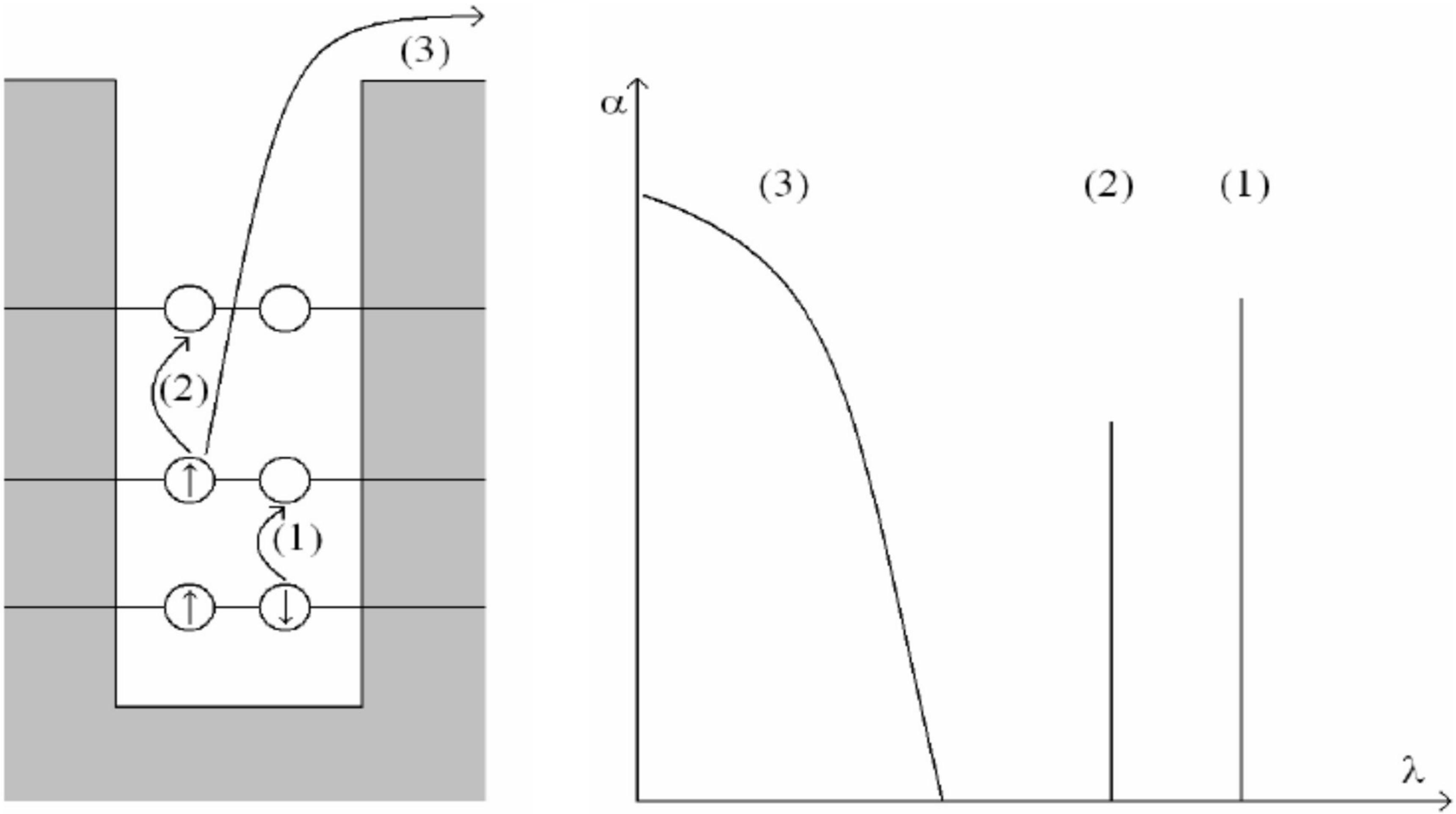
$$E_{tot} \cong -13.6 \cdot \frac{1}{n^2} \ [eV]$$

https://winter.group.shef.ac.uk/orbitron/

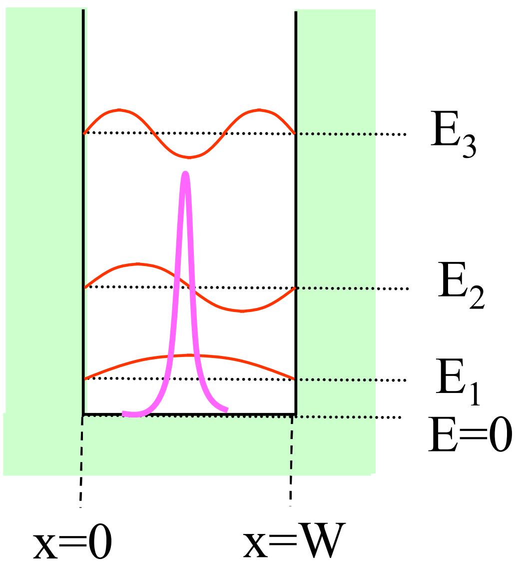
Exercice 4.2: absorption des gaz

À l’aide du schéma d’énergie, expliquez l’absorption optique dans un gaz

Absorption dans un gas



Exercice 4.3: Evolution temporelle dans un potentiel rectangulaire



$$E_n = \frac{\hbar^2 K^2}{2m} = n^2 \cdot \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m\,W^2}$$

$$\left|\varphi_n(x)\right\rangle \approx \sin\left(n \cdot \pi \cdot \frac{x}{W}\right)$$

Un électron est localisé dans un puit de potentiel rectangulaire de largeur W=18um et de profondeur infinie.
Au temps t=0, sa fonction d'onde est centrée à x=W/2 et elle a la forme:

$$\psi(t=0) \approx e^{-\left(\frac{x-W/2}{a}\right)^2} \quad avec \quad a = 1\,um$$

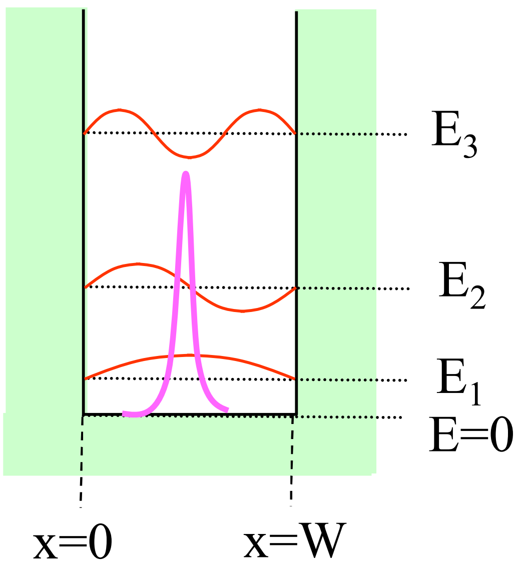
Nous définissons le temps caractéristique par $t_c \equiv \dfrac{\pi \cdot \hbar}{E_2 - E_1}$

1) Décrivez les étapes nécessaires pour simuler l'évolution temporelle de cet électron.

2) Simulez la fonction d'onde de cet électron aux temps

$$t = \frac{1}{N} \cdot \frac{3}{4} t_c \quad \text{avec N=1, 2, 3, 4 et 5}$$

Exercice 4.3: Evolution temporelle dans un potentiel rectangulaire



$$E_n = \frac{\hbar^2 K^2}{2m} = n^2 \cdot \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m\,W^2}$$

$$\left|\varphi_n(x)\right\rangle \approx \sin\left(n \cdot \pi \cdot \frac{x}{W}\right)$$

A) Calcul des coefficients de décomposition en modes propres:

$$a_n = \frac{\left\langle \varphi_n \middle| \middle| \psi(0) \right\rangle}{\sqrt{\left\langle \varphi_n \middle| \middle| \varphi_n \right\rangle} \cdot \sqrt{\left\langle \psi(0) \middle| \middle| \psi(0) \right\rangle}}$$

B) Décomposition en modes propres:

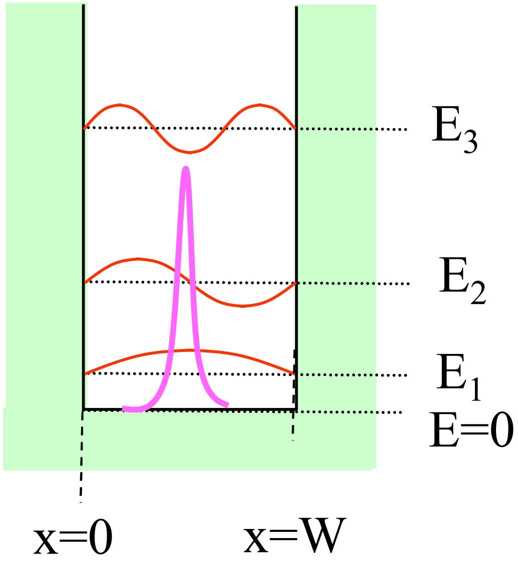
$$\frac{\left|\psi(0)\right\rangle}{\sqrt{\left\langle \psi(0) \middle| \middle| \psi(0) \right\rangle}} = \sum_{n=1}^{\text{nmax}} a_n \cdot \frac{\left|\varphi_n\right\rangle}{\sqrt{\left\langle \varphi_n \middle| \middle| \varphi_n \right\rangle}}$$

C) Evolution temporelle:

$$\frac{\left|\psi(t)\right\rangle}{\sqrt{\left\langle \psi(t) \middle| \middle| \psi(t) \right\rangle}} = \sum_{n=1}^{\text{nmax}} a_n \cdot \frac{\left|\varphi_n\right\rangle}{\sqrt{\left\langle \varphi_n \middle| \middle| \varphi_n \right\rangle}} \cdot e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$$

PAB

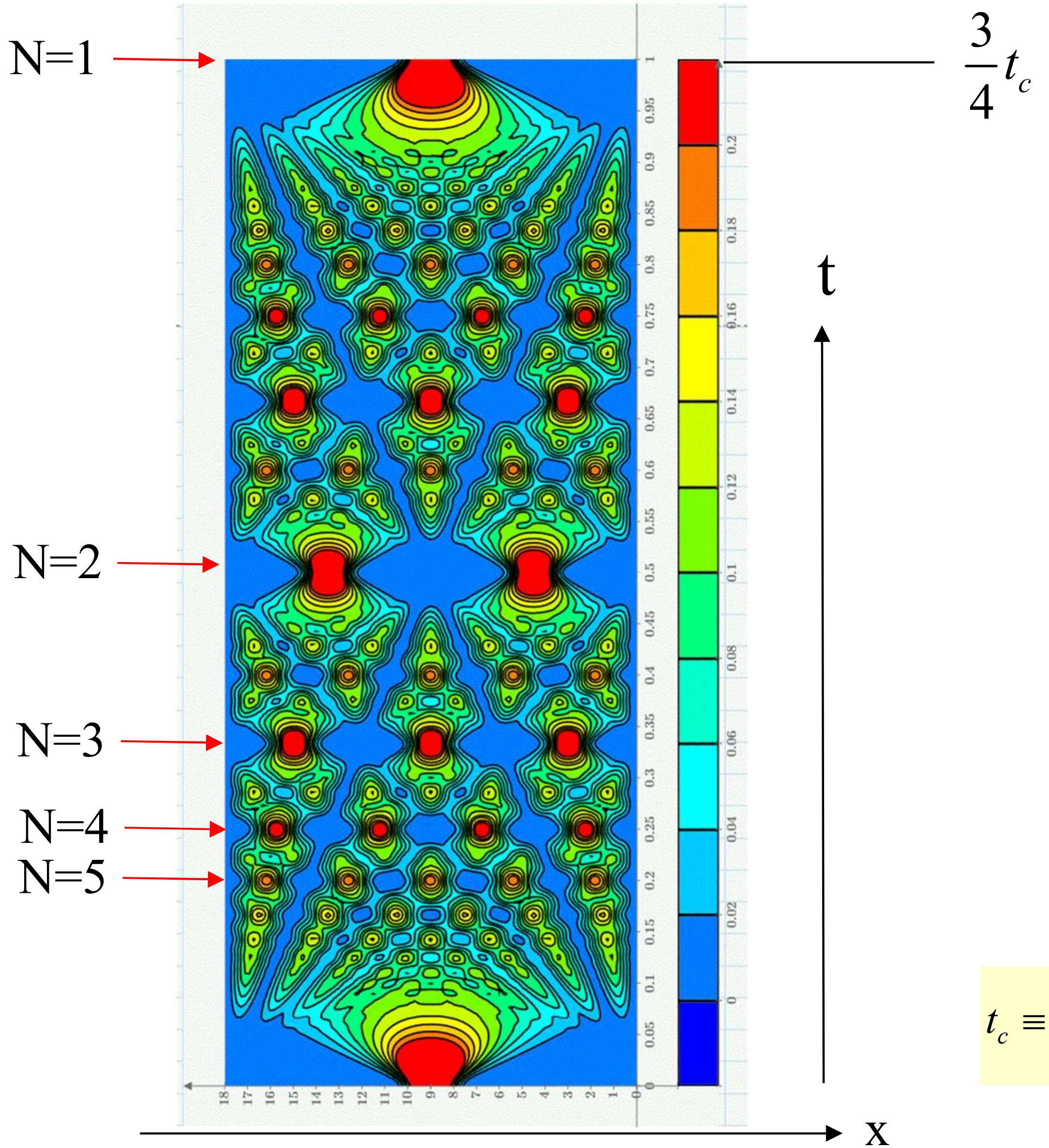
Exercice 4.3: Evolution temporelle dans un potentiel rectangulaire



$$E_n = \frac{\hbar^2 K^2}{2m} = n^2 \cdot \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m\,W^2}$$

$$\left|\varphi_n(x)\right\rangle \approx \sin\left(n \cdot \pi \cdot \frac{x}{W}\right)$$

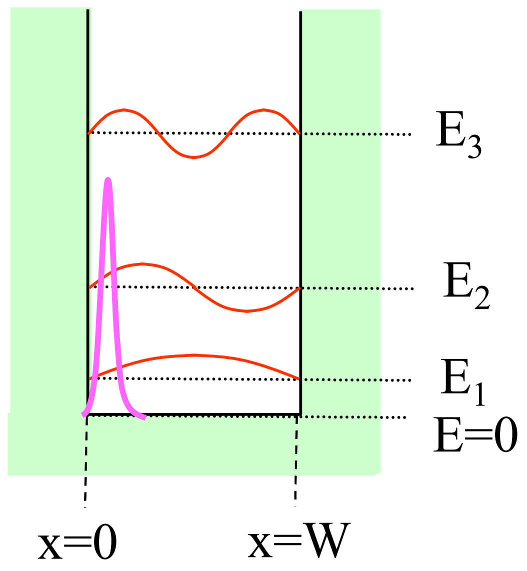
Effet Talbot
1836



Input au milieu

$$t_c \equiv \frac{\pi \cdot \hbar}{E_2 - E_1}$$

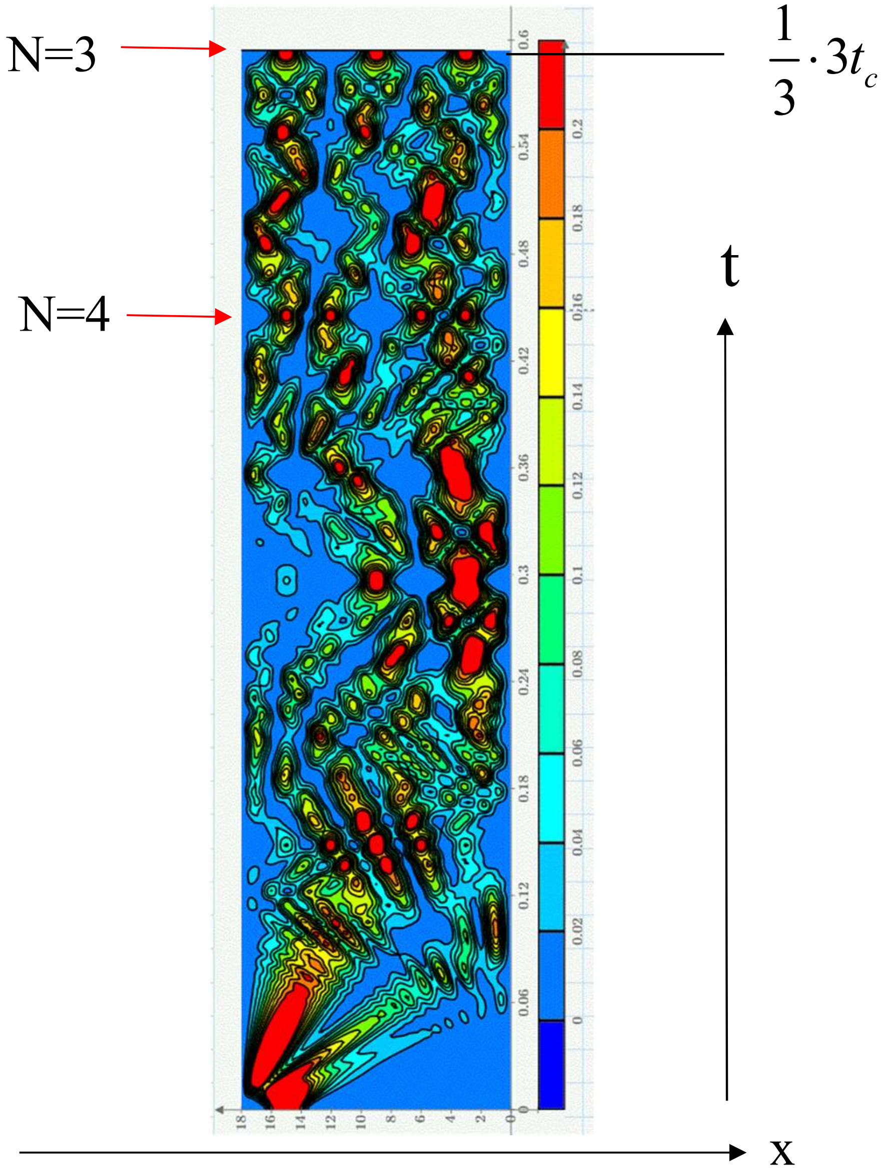
Exercice 4.3: Evolution temporelle dans un potentiel rectangulaire



$$E_n = \frac{\hbar^2 K^2}{2m} = n^2 \cdot \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m\,W^2}$$

$$\left|\varphi_n(x)\right\rangle \approx \sin\left(n \cdot \pi \cdot \frac{x}{W}\right)$$

Multi-Mode
Interference
(MMI)



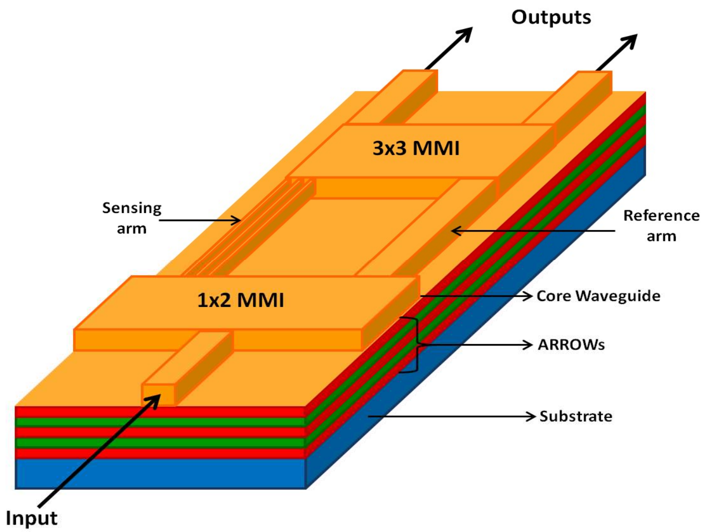
Input au bord

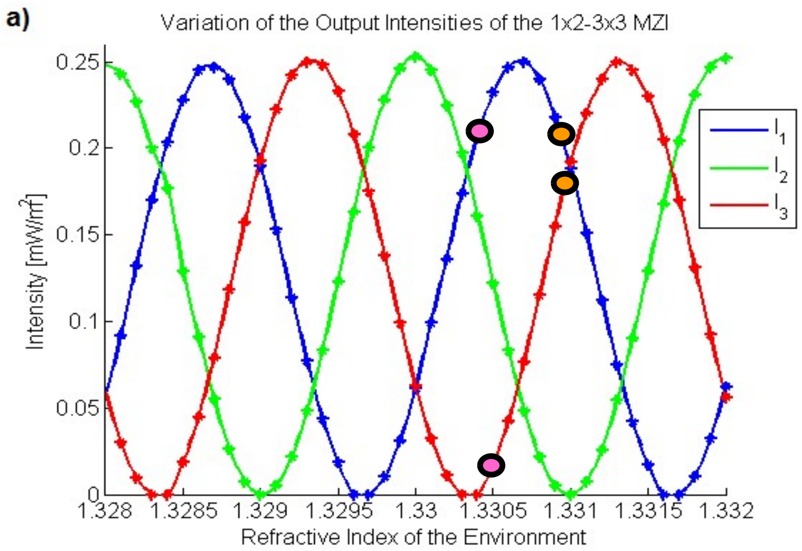
$$t_c \equiv \frac{\pi \cdot \hbar}{E_2 - E_1}$$

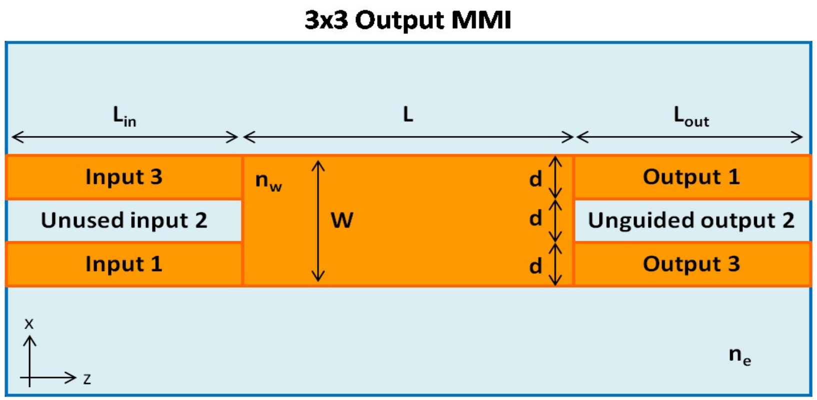
PAB

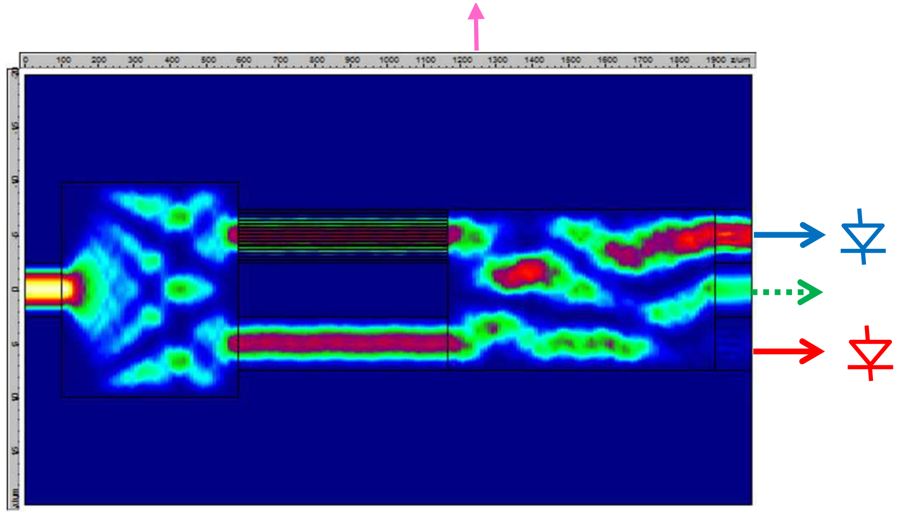
Phase diversity receiver: Mach- Zehnder Interferometer with 3x3 Multi-Mode Interference Coupler

N. Besse, « Simulation of Optical Nanostructures », sem. proj. 2012, SMT, EPFL









Exercice 4.4: atome de lithium

Considérez un atome de lithium (Li)

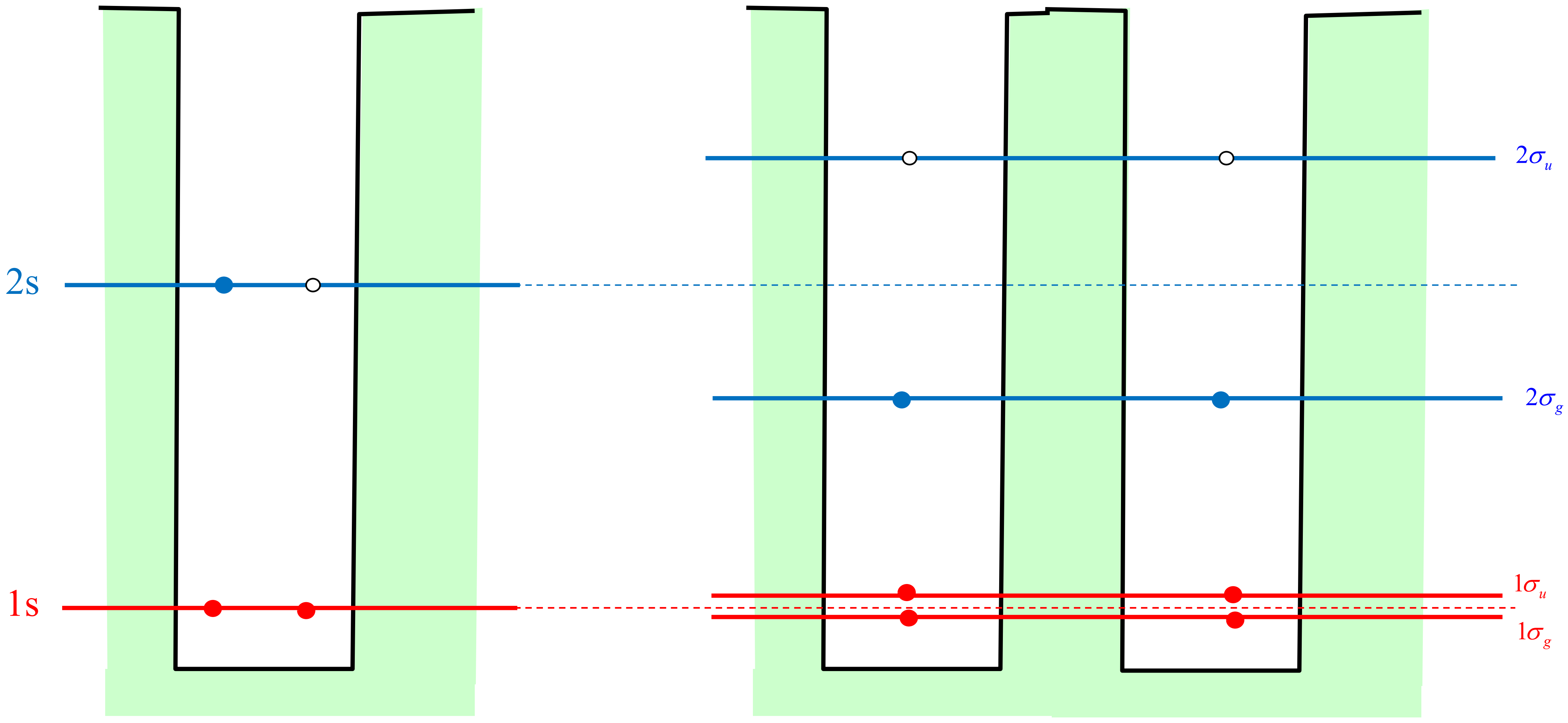
avec trois électrons sur deux niveaux d'énergie.

Dessinez le schéma d'énergie de la cellule Li-Li

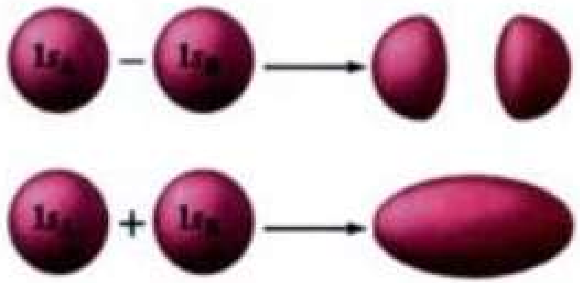
contenant deux atomes Li.

Exercice 4.4: atome de lithium

3 électrons par atome



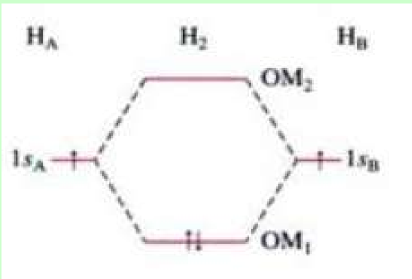
Formation de molécules



Anti-liant

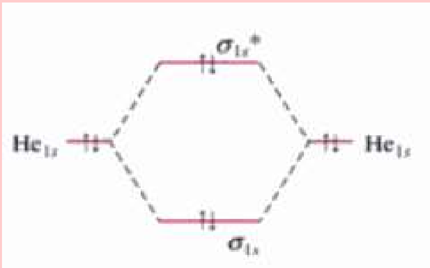
Liant

Molécule H_2



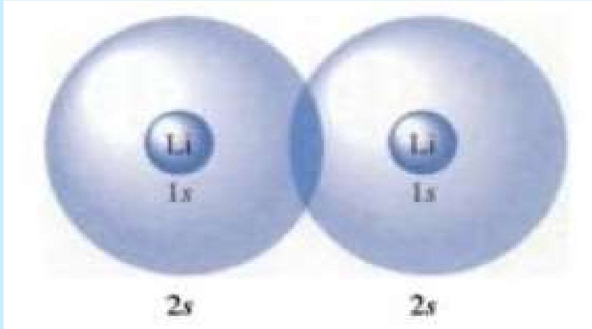
H_2 stable car
énergie plus petite

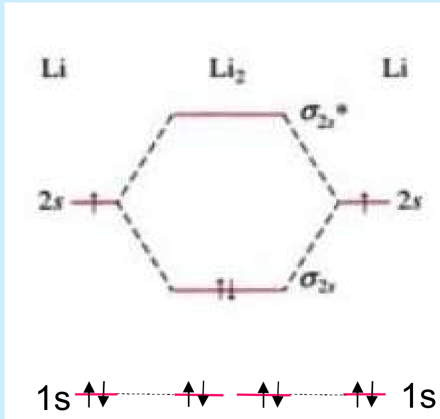
Molécule He_2



He_2 instable car
énergie égale

Molécule Li_2





Anti-liant

Liant

Inerte

Li_2 stable car
énergie plus petite
(le Li métallique est encore plus stable !)

Chimie générale, Steven S. Zumdahl, Jean-Marie Gagnon, Maurice Rouleau, De Boeck Université

Exemple molécule O2

8 électrons par atome