

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

Université Dr Tahar Moulay SAIDA

Faculté de Science
Département de physique



Mémoire de fin d'étude pour obtenir la licence
Spécialité : physique

Thème

*Effet Stark par la méthode de
perturbation*

Présenté par:

❖ *Ramdani meriem*

Devant le jury :

❖ Mr Djedid

Examineur

❖ Mr Kouidri

Rapporteur

❖ Mr Rachdi

Examineur

Soutenu en date du : 25/05/2015

Année universitaire :2014/2015

Sommaire

Dédicace	
Remerciement	
Introduction générale.....	1
Qui est Stark.....	2
Chapitre I : oscillateur harmonique	
Introduction.....	4
L'oscillateur harmonique en physique.....	4
L'importance de l'oscillateur harmonique.....	5
L'oscillateur linéaire harmonique.....	6
Conclusion.....	12
Chapitre II : oscillateur harmonique dan un champ électrique	
Effet Stark par la méthode de perturbation.	14
L'effet Stark.....	14
Histoire de découverte.....	15
Théorie de la perturbation.....	15
L'oscillateur harmonique dans un champ électrique.	16
Le champ électrique	16
L'oscillateur harmonique chargé placé dans un champ électrique uniforme.....	16
Equation aux valeurs propres.....	17
Chapitre III : Résultat et discussion	
Introduction.....	20
Méthode d'Euler.....	20
Organigramme de calcul	22
Discussions des résultats.....	23
Susceptibilité électrique D'un électron élastiquement Lié.....	23

Détermination des fonctions de bases.....	24
Discussions des résultats.....	25
Conclusion.....	26
Conclusion générale.....	27
Référence	28



Dédicaces

Je dédie le fruit de cet effort aux deux bougies qui ont veillé

Pour mon avenir :

A la lumière de mes jours, la source de mes efforts, la flamme de mon cœur, ma vie et mon bonheur ; A mon adorable maman MABROUKA qui j'adore.

A l'homme de ma vie, mon exemple éternel, celui qui s'est toujours sacrifié pour me voir réussir, mon soutien moral et source de joie et de bonheur, A mon chère père M'Hamed qui j'adore.

➤ *A tout mes frères.*

➤ *A mes chères sœurs : Fatiha et ses fils et Fatima.*

➤ *Spécialement A mes petites fillettes : AMIRA et RAJAA et REMAÏSSA*

➤ *A tous mes amis dans la chambre : MANA et MIRA et IMAN.*

➤ *A mon amie NADIA.*

➤ *A mes tantes et mes ancêtres.*

➤ *A tout la famille RAMDANI.*

➤ *Enfin à toute ma promotion du physique 2014-2015.*



Meriem



Remerciement



Je tiens tout d'abord à remercier ALLAH le tout puissant et miséricordieux, qui m'a donné la force et la patience d'accomplir ce modeste travail.

En seconde lieu, je tiens à exprimer ma profonde gratitude à mon encadreur Dr.Smail Kouidri, pour sa disponibilité, sa patience, son précieux conseil et son aide qui ont contribué à orienter et à réaliser notre recherche et notre réflexion durant toute la période du travail.

Je remercie infiniment le président de jury et ces membres d'avoir accepté d'examiner ce travail.

Je remercie s'adresse également à tous me professeurs pour leurs générosités la grande patience dont ils ont su faire preuve malgré leurs charges académiques et professionnelles.

Enfin, j'adresse mon plus sincère remerciement à toutes les personnes qui ont participé de près ou de loin à la réalisation de ce travail.



Introduction Générale

La physique des matériaux s'est développée tout au long du *XXième* siècle, d'une façon spectaculaire en donnant naissance à des avancées technologiques. Ces avancées ont permis de comprendre et de prévoir toutes classer les atomes via tableau de Mendeleïev. La détermination de ces propriétés se repose généralement sur le modèle proposé comme première étape et sur la résolution de la fameuse équation dite ici équation de Schrödinger.

Plusieurs modèles ont été établi dans le but de déterminer et de prévoir la forme générale de la fonction potentielle. Dans ce travail nous allons utiliser l'approximation de Hartree-Fock comme première détermination de ce problème à N corps en interaction.

Le but de ce travail de License est de déterminer les fonctions d'ondes solution de l'équation de Schrödinger ainsi que les sections efficaces correspondants toute en frappant une cible avec un atome de charge Ze via le potentiel Coulombien.

Le deuxième chapitre est consacrée à nous familiariser à l'étude de la théorie des diffusions toute en se restreint à la diffusion élastique (conservation de l'énergie et l'impulsion).

Le dernier chapitre représente la partie la plus laborieuse de notre travail ou on applique tous l'outil théorique déjà vu au chapitre précédent à des équations numérique accessibles aux calculs.

Finalement nous terminerons ce mémoire par une petite conclusion.

Chapitre I

OSCILLATEUR HARMONIQUE

L'oscillateur harmonique

1)- Introduction

Oscillateur harmonique est un système périodique dans le temps. Il est dit harmonique si les oscillations effectuées sont sinusoïdales, avec une amplitude et une fréquence qui ne dépendent que des caractéristiques intrinsèques du système et des conditions initiales. Cela est le cas en mécanique pour une particule évoluant à une dimension dans un potentiel quadratique, de forme générale :

$$V(r) = \frac{1}{2}kx^2$$

k étant une constante positive. Cette forme de potentiel est obtenue notamment dans le cas d'oscillations de faible amplitude autour d'une position d'équilibre stable dans un potentiel quelconque (cf. article sur l'oscillateur harmonique classique), car au voisinage de cette position d'équilibre le potentiel prend cette forme. Pour cette raison, le concept d'oscillateur harmonique joue un rôle majeur dans de nombreuses applications de la physique.

Un oscillateur harmonique est un oscillateur idéal dont l'évolution au cours du temps est décrite par une fonction sinusoïdale, dont la fréquence ne dépend que des caractéristiques du système et dont l'amplitude est constante. L'intérêt d'un tel modèle est qu'il décrit l'évolution de n'importe quel système physique au voisinage d'une position d'équilibre stable, ce qui en fait un outil transversal utilisé dans de nombreux domaines : mécanique, électricité et électronique, optique.

L'oscillateur harmonique en physique

L'exemple le plus classique d'un oscillateur harmonique est celui d'une masse m qui se déplace le long d'une droite Ox , sous l'action d'une force de rappel $\mathbf{F} = -k\mathbf{x}$, au voisinage d'une position d'équilibre stable qu'on peut prendre comme origine. Cette masse a pour énergie potentielle :

$$V(x) = \frac{1}{2} kx^2$$

De très nombreux systèmes physiques peuvent être assimilés, en première approximation, à de tels oscillateurs harmoniques dits linéaires. C'est le cas, par exemple, des atomes ou des ions d'un cristal qui peuvent vibrer autour de leur position d'équilibre. Les vibrations des atomes d'une molécule diatomique peuvent aussi être modélisées, en première approximation, par un oscillateur harmonique à une dimension.

L'oscillateur harmonique joue également un rôle important dans la description d'un ensemble de bosons se trouvant tous dans le même état quantique.

Le modèle de l'oscillateur harmonique est donc très important en mécanique quantique.

L'importance de l'oscillateur harmonique

L'importance de l'oscillateur harmonique tient au fait que la dynamique de tout système possédant un état stable peut être approximativement décrite par un potentielle quadratique, tant que l'on reste dans un régime de petites excursions autour de l'équilibre, la "coordonnée " n'étant pas forcément une coordonnée spatiale. De surcroît, Les modes propres du champ libre sont, strictement, des oscillateurs harmoniques.

Historiquement, l'oscillateur harmonique a aussi été le terrain d'essai de la théorie quantique, sans parler de son importance conceptuelle pour le rayonnement thermique. A l'autre bout, on doit à Dirac une reformulation conduisant à la seconde quantification, étape essentielle pour le développement de la Théorie quantique des champs et ses avatars rencontrés dans (presque) tous les champ de la Physique.

Oscillateur linéaire harmonique :

Un modèle essentiel utilisé en physique atomique est justement l'oscillateur linéaire harmonique. Dans l'exposé antérieur on a utilisé plusieurs fois ce modèle. L'énergie potentielle de l'oscillateur harmonique, comme il est connu, est égale à

$$U = \frac{f x^2}{2} = \frac{m \omega_0^2}{2} \quad (\text{I - 1})$$

Ou

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{f}{m}}$$

Est la pulsation de l'oscillateur calculée en mécanique classique.

Le diagramme de potentiel correspondant est la parabole de la figure 01.

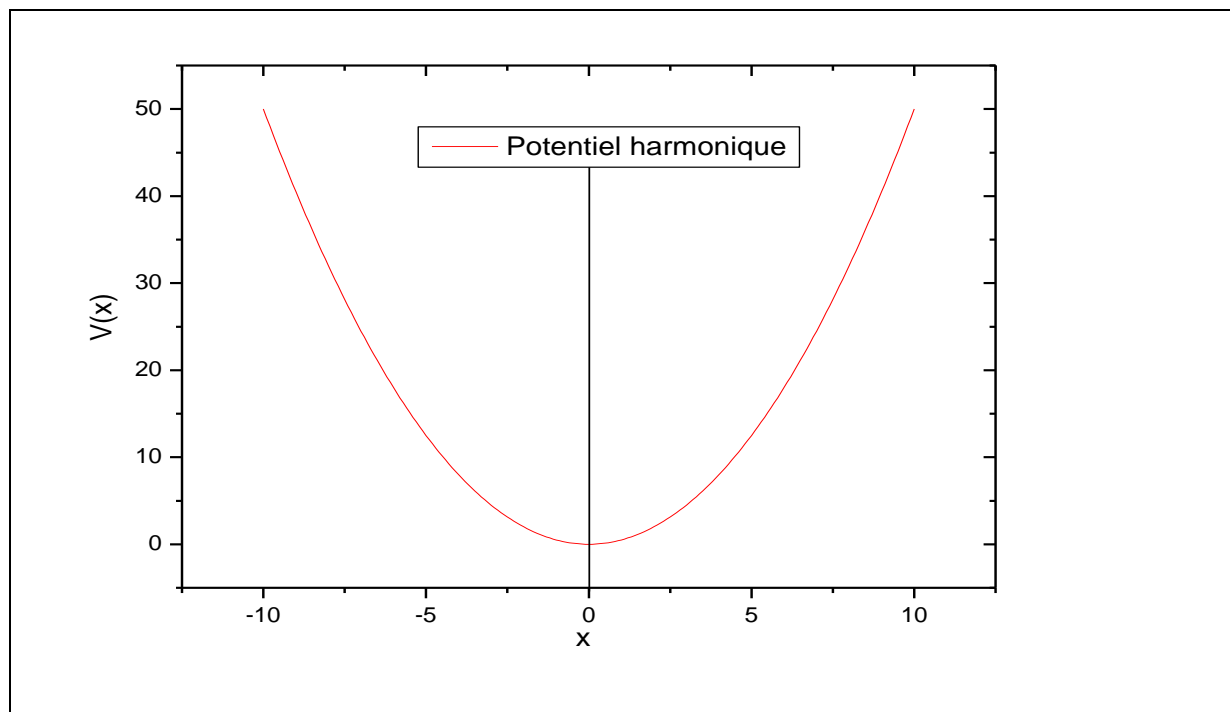


Fig. 01. Diagramme de potentiel de l'oscillateur linéaire harmonique.

IL est facile de constater que ce diagramme de potentiel se présente sous forme d'une boîte aux parois réfléchissantes semblable à celle examinée au 156. L'oscillateur macroscopique d'énergie E vibre entre les «murs»

d'un mouvement de va-et-vient en restant dans les limites du segment $x_1 x_2$, c'est-à-dire en ne pénétrant pas à droite de x_2 et à gauche de x_1 . Pour trouver la solution du problème de l'oscillateur microscopique il faut examiner les ondes stationnaires se formant à l'intérieur de la boîte ; en principe le procédé est le même que celui utilisé pour la recherche des vibrations propres de la corde .

Toute fois une particularité survient qui complique énormément la résolution mathématique du problème ; à l'intérieur de la boîte l'énergie potentielle n'est pas partout constante, mais varie suivant la loi parabolique ; c'est pourquoi la longueur d'onde

$$\lambda = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(E-U)}}$$

Ne reste pas constante en divers points de la boîte, mais augmente vers les bords et diminue au milieu.

L'équation de Schrödinger pour le problème de l'oscillateur harmonique prend la forme

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar} \left(E - \frac{m\omega_0^2 x^2}{2} \right) \varphi = 0 \quad (\text{I-2})$$

La fonction Ψ y devant satisfaire à la condition : pour $x \rightarrow \pm\infty$ $\Psi(x)=0$ de même qu'aux autres conditions standard.

A des fins de simplification introduisons les notations

$$\frac{2m}{\hbar^2} E = \lambda, \quad \frac{m\omega_0}{\hbar} = \alpha \quad (\text{I - 3})$$

L'équation de Schrödinger peut se récrire de la façon suivante :

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} + (\lambda - \alpha^2 x^2)\varphi = 0 \quad (\text{I - 4})$$

Afin d'intégrer (I - 4) examinons d'abord le cas limite de x très grand, de sorte que

$\alpha x^2 \gg \lambda$. Alors dans (I - 4) on peut négliger λ comme une quantité petite devant $\alpha^2 x^2$ et on obtient

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} - \alpha^2 x^2 \varphi = 0 \quad (\text{I - 5})$$

Pour $x \gg 1$ cette équation est satisfaite avec une précision suffisante par la solution

$$\varphi = e^{\pm \alpha x^2/2}. \quad (\text{I - 6})$$

En effet, on a

$$\frac{d\varphi}{dx} = \pm \alpha x e^{\pm \alpha x^2/2}$$

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = \alpha^2 x^2 e^{\pm \alpha x^2/2} \pm \alpha e^{\pm \alpha x^2/2}.$$

Mais pour $x \gg 1$ le deuxième terme du second membre de la dernière égalité est négligeable par rapport au premier et, par suite, l'équation (I - 6). Des deux signes possibles de cette solution il faut choisir le signe moins

$$\varphi = e^{-\alpha x^2/2}$$

Car la solution avec le signe plus augmente indéfiniment pour $x \rightarrow \infty$, ce qui contredit naturelles imposées à la fonction φ

$$\varphi = e^{-\alpha x^2} f(x) \quad (\text{I-7})$$

Ou $f(x)$ est une fonction encore inconnue qui doit être choisie de façon que (I-7) satisfasse à l'équation (I-4). Portons la solution de (I-7) dans (I-4) en calculant auparavant les dérivées

$$\frac{d\varphi}{dx} = \left(-\alpha x f + \frac{df}{dx}\right) e^{-\alpha x^2/2}.$$

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = \left(-\alpha f - 2\alpha x \frac{df}{dx} + \alpha^2 x^2 f + \frac{d^2f}{dx^2}\right) e^{-\alpha x^2/2}.$$

En remplaçant dans (I-4) après de simples transformations et la simplification par $e^{-\alpha x^2/2}$ on a :

$$\frac{d^2f}{dx^2} - 2\alpha x \frac{df}{dx} + (\lambda - \alpha)f = 0 \quad (\text{I-8})$$

Cette équation sera transformée par l'introduction d'une nouvelle variable indépendante ε au lieu de x :

$$\varepsilon = \sqrt{\alpha} * x \quad (\text{I-10})$$

ε est un nombre sans dimensions, car α a la dimension de $[cm^{-2}]$ [il est facile de s'en convaincre directement d'après l'expression de α (I-3)] .

On a maintenant

$$\frac{d}{dx} = \frac{d}{d\varepsilon} \cdot \frac{d\varepsilon}{dx} = \sqrt{\alpha} \frac{d}{d\varepsilon}$$

$$\frac{d^2}{dx^2} = \frac{d}{d\varepsilon} \left(\sqrt{\alpha} \frac{d}{d\varepsilon} \right) \frac{d\varepsilon}{dx} = \alpha \frac{d^2}{d\varepsilon^2}.$$

Après changement de variable et simplification par α (I - 8) prend la forme

$$\frac{d^2 H}{d\varepsilon^2} - 2\varepsilon \frac{dH}{d\varepsilon} + \left(\frac{\lambda}{\alpha} - 1\right) H = 0 \quad (\text{I - 10})$$

OU $H(\varepsilon)$ est une fonction obtenue par remplacement dans $f(x)$ de la variable indépendante x par ε . Cherchons $H(\varepsilon)$ sous forme d'une série de puissances

$$H(\varepsilon) = a_v \varepsilon^v + a_{v+1} \varepsilon^{v+1} + a_{v+2} \varepsilon^{v+2} + \dots \equiv \sum_{k=v}^{\infty} a_k \varepsilon^k \quad (\text{I - 11})$$

Pour garantir la finitude de la solution on commence la série par une certaine puissance v par la suite de telle façon que la fonction $H(\varepsilon)$ ne devienne nulle part infinie. Ecrivons les dérivées de $H(\varepsilon)$:

$$\frac{dH}{d\varepsilon} = v a_v \varepsilon^{v-1} + (v+1) a_{v+1} \varepsilon^v + (v+2) a_{v+2} \varepsilon^{v+1} + \dots$$

$$\frac{d^2 H}{d\varepsilon^2} = v(v-1) a_v \varepsilon^{v-2} + (v+1)v a_{v+1} \varepsilon^{v-1} + (v+2)(v+1) a_{v+2} \varepsilon^v + \dots$$

Portant ces valeurs dans (I - 10) on obtient après des transformations simples

$$v(v-1) a_v \varepsilon^{v-2} + (v+1)v a_{v+1} \varepsilon^{v-1} + (v+2)(v+1) a_{v+2} \varepsilon^v + \dots = \left[2v - \left(\frac{\lambda}{\alpha} - 1\right) \right] a_v \varepsilon^v + \dots$$

Comme cette égalité doit avoir lieu identiquement, les coefficients des mêmes puissances de ε à gauche et à droite doivent être mutuellement égaux.

Le terme inférieur à gauche est $v(v-1) a_v \varepsilon^{v-2}$; son coefficient doit être nul, car à droite il n'y a pas de terme de telle puissance de ε . Ceci donne $v(v-1)=0$ d'où $v=0$ ou $v=1$. En égalant à zéro le coefficient du terme suivant on obtient $v=0$ ou $v=-1$. La première solution n'apporte rien de nouveau, la seconde ne convient pas, car la série commençant par le terme avec ε^{-1} devient infinie pour $\varepsilon=0$.

Comparant les coefficients des termes contenant ε^i on trouve

$$(i + 1)(i + 2)a_{i+2} = \left[2i - \left(\frac{\lambda}{\alpha} - 1\right)\right] a_i$$

D'où

$$a_{i+2} = \frac{2i+1-\frac{\lambda}{\alpha}}{(i+1)(i+2)} a_i \quad (\text{I-12})$$

Cette formule permet de calculer par récurrence tous les termes de la série en sautant chaque fois un. Comme la série peut commencer soit par la puissance $\mathbf{v=0}$, soit par la puissance $\mathbf{v=1}$, la formule de récurrence (I -12) donne deux séries dont l'une n'est composée que de termes pairs :

$$a_0 + a_2\varepsilon^2 + a_4\varepsilon^4 + \dots, \quad (\text{I-13})$$

Et l'autre que de termes impairs :

$$a_1\varepsilon + a_3\varepsilon^3 + a_5\varepsilon^5 + \dots, \quad (\text{I-14})$$

Ces séries constituent des solutions particulières de l'équation (I -10).

Examinons maintenant le comportement des séries obtenues pour des grandes valeurs de ε . Prenons une de ces séries, par exemple (I-13) et montrons que pour ε suffisamment grand elle se comporte comme $\mathbf{e^{\varepsilon^2}}$.

Pour cela comparons la série (I-13) avec la série $\mathbf{e^{\varepsilon^2}}$. Il est connu que

$$e^z = 1 + \frac{z}{1!} + \frac{z^2}{2!} + \frac{z^3}{3!} + \dots$$

Et par suite

$$e^{\varepsilon^2} = 1 + \frac{z^2}{1!} + \frac{z^4}{2!} + \frac{z^6}{3!} + \dots + \frac{\varepsilon^\tau}{\left(\frac{\tau}{2}\right)!} + \frac{\varepsilon^{\tau+2}}{\left(\frac{\tau}{2} + 1\right)!} + \dots$$

Pour ε suffisamment grand les premiers termes de cette somme ont des valeurs négligeables par rapport aux termes supérieurs. Désignons les coefficients de ε^τ et $\varepsilon^{\tau+2}$ par $\mathbf{b_\tau}$ et $\mathbf{b_{\tau+2}}$; leur rapport

$$\frac{b_{\tau+2}}{b_\tau} = \frac{(\tau/2)!}{(\tau/2+1)!} = \frac{1}{(\tau/2+1)}. \quad (\text{I-15})$$

Pour τ suffisamment grand au dénominateur de (I-15) on peut négliger 1 :

$$\frac{b_{\tau+2}}{b_{\tau}} = \frac{1}{\tau/2} = \frac{2}{\tau} \quad .(I-16)$$

Pour la relation des termes correspondants de série (I-13) la formule de récurrence donne

$$\frac{a_{\tau+2}}{a_{\tau}} = \frac{2\tau + 1 - \lambda/a}{(\tau + 2)(\tau + 1)};$$

Pour un τ suffisamment grand

$$\frac{a_{\tau+2}}{a_{\tau}} = \frac{2}{\tau} \quad (I-17)$$

Rapprochant (I-16) et (I-17) on voit que

$$\frac{b_{\tau+2}}{b_{\tau}} = \frac{b_{\tau}}{a_{\tau}} = \dots = \text{const},$$

C'est - à- dire que les termes supérieurs de la série considérée ne diffèrent des termes supérieurs de la série e^{ε^2} que d'un facteur constant, ce qui signifie que $H(\varepsilon)$ pour des ε grands croît comme e^{ε^2} et, par suite, en vertu de (I-7) et de (I-9),

$$\varphi = e^{-xx^{2/2}} f(x) = e^{-\varepsilon^2/2} H(\varepsilon) \rightarrow e^{\varepsilon^2/2},$$

C'est-à-dire pour $\varepsilon \rightarrow \infty$ et $\varphi \rightarrow \infty$.

On voit ainsi que les solutions fournies par les séries de puissances à formule de récurrence (I-12) ne satisfont pas en général aux conditions aux limites. Or il est facile de remarquer que pour des valeurs choisies de λ/a les séries s'arrêtent à un certain terme, autrement dit, se transforment en des polynômes. Ainsi, par exemple, pour $\lambda/a = 5$ la série (I-13) n'est formée que d'un seul terme a_0 ,

car d'après (I-12) on voit que pour $\lambda/a = 5$ le coefficients $a_2 = 0$, par suite, au second terme, au troisième, etc.

Mais si $H(\varepsilon)$ est réduit à un polynôme, alors la présence d'un facteur exponentiel assurera l'annulation de φ pour $\varepsilon \rightarrow \infty$. Ainsi les solutions satisfaisant aux conditions standard ne s'obtiennent que dans le cas où les séries

(I-13) et (I-14) deviennent des polynômes. En vertu de la formule de récurrence (I-12) on obtient un polynôme s'arrêtant sur le terme de puissance n si

$$\frac{\lambda}{\alpha} = 2n + 1.$$

En y portant les valeurs de λ et de α tirées de (158.3) il vient

$$\frac{2mE_n}{\hbar^2} = \frac{m\omega_0}{\hbar} (2n + 1).$$

D'où

$$E_{n=\hbar\omega_0} \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (n=0,1,2,\dots) \quad (\text{I-18})$$

On voit ainsi que parmi les fonctions φ satisfaisant à l'équation d'onde de l'oscillateur ne satisfont en même temps aux conditions aux limites que les fonctions correspondant à la série discontinue des valeurs de l'énergie de l'oscillateur (I-18). Notons que cette formule diffère quelque peu de l'ancienne formule de la théorie quantique :

$$E_n = n\hbar\omega_0$$

Précisément, d'après la formule (I-18) le nombre quantique de l'oscillateur linéaire s'exprime toujours par des demi-entiers $n + \frac{1}{2}$. Par suite dans l'état quantique inférieur (pour $n = 0$) l'énergie de l'oscillateur ne s'annule pas mais est égal à

$$E_0 = \frac{\hbar\omega_0}{2} \quad (\text{I-19})$$

Cette valeur de E_0 est appelée «énergie nulle». L'origine de cette appellation est liée à ce que l'énergie $\frac{1}{2}\hbar\omega_0$ persiste même au zéro absolu. Son contenu de même que son rôle seront expliqués dans les paragraphes suivants.

la quantification de l'énergie de « la particule dans une boîte » s'obtient par application des conditions aux limites analogues à celles du problème de la corde vibrante. Dans le problème de l'oscillateur linéaire examiné dans ce paragraphe la quantification a été la conséquence de la condition naturelle de la finitude de la fonction dans tout l'espace. La possibilité d'obtenir la quantification en qualité de conséquence simple de semblables conditions

naturelles constitue justement la remarquable particularité de l'équation de Schrödinger.

Chapitre II

OSCILLATEUR HARMONIQUE DANS UN CHAMP ÉLECTRIQUE

II-1) Effet Stark par la méthode de perturbation.

1-1) L'effet Stark

Sous l'action d'un champ électrique, les niveaux d'énergie d'un atome sont perturbés et, par conséquent, les raies émises par cet atome sont modifiées. Elles sont décomposées en plusieurs composantes dont le centre de gravité peut être déplacé par rapport à la raie initiale.

En physique atomique, l'effet Stark (du nom de son découvreur Johannes Stark) est la modification des états électroniques sous l'action d'un champ électrique qui se traduit par l'éclatement et le décalage de raies spectrales en plusieurs composantes.

Cet effet est utilisé dans les puits quantiques à semi-conducteurs. L'application d'un champ électrique à ces puits quantiques permet de moduler l'absorption optique (décalage Stark des pics excitoniques) très rapidement. Il porte alors le nom d'« effet Stark confiné quantiquement », les barrières de potentiel d'un puits quantique représentant un confinement quantique des porteurs (électrons et trous).

L'effet Stark est le déplacement et la répartition des raies spectrales des atomes et des molécules devant un champ électrique externe. En général, l'effet Stark est séparé en deux types, le premier linéaire dans le champ électrique appliqué, et la seconde campo. Quando quadratique déplacé dans les mêmes lignes ou de décharge sont divisés, l'effet est à l'opposé Stark.

L'effet Stark ne peut pas être expliqué par la mécanique classique, mais il est parfaitement expliqué par les lois régissant la mécanique quantique.

1-2) Histoire de découverte :

L'effet a été découvert en 1913 par Johannes Stark et indépendamment par le physicien italien Antonino Lo Surdo. La découverte de cet effet était d'une grande importance pour le développement de la théorie quantique. Cependant, une fois l'effet découvert, les deux chercheurs ont abandonné leurs recherches dans la physique moderne à adhérer aux politiques et fasciste Mussolini nazi et Hitler.

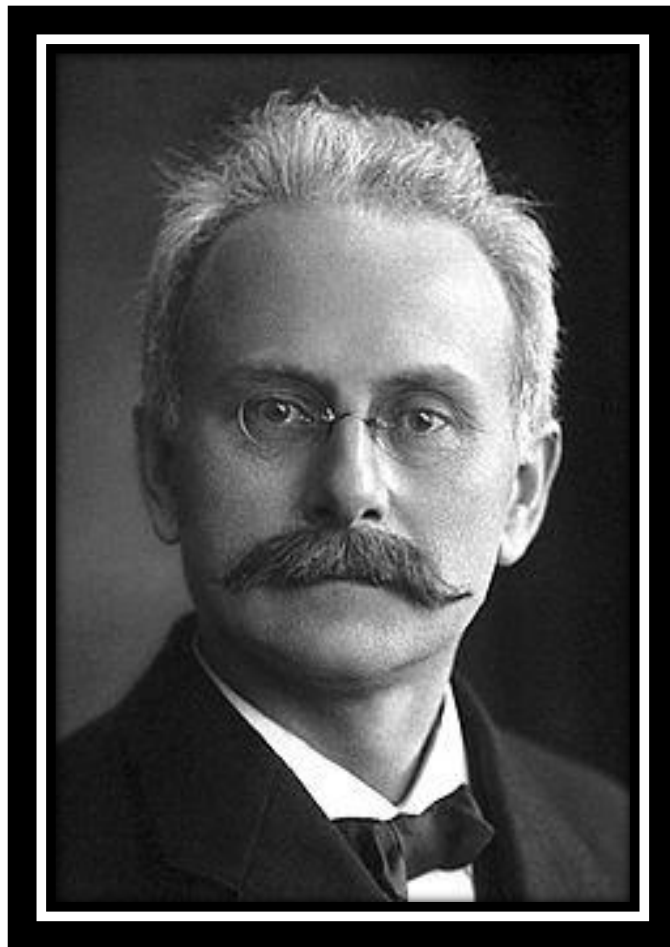
Le premier traitement mécanique quantique a été faite par Wolfgang Pauli. Erwin Schrödinger a discuté de l'importance de l'effet Stark de l'effet dans sa troisième rôle dans la théorie quantique, une fois à la mi-1916, en utilisant le travail de Epstein et une fois par l'approche de la perturbation. Enfin, Epstein reconsidérée effets Stark linéaires et quadratiques du point de vue de la nouvelle théorie quantique. Donc, il a déduit les équations pour l'intensité des lignes était une amélioration décisive sur les résultats qui ont été obtenus en utilisant Kramer l'ancienne théorie.

1-3) Théorie de la perturbation :

En mécanique quantique, la théorie de la perturbation est un ensemble de schémas d'approximations liée à une perturbation mathématique utilisée pour décrire un système quantique complexe de façon simplifiée. L'idée est de partir d'un système simple et d'appliquer graduellement un hamiltonien « perturbant » qui représente un écart léger par rapport à l'équilibre du système (perturbation). Si la perturbation n'est pas trop importante, les différentes quantités physiques associées avec le système perturbé (comme ses niveaux d'énergie et états propres) seront générés de manière continue à partir de ceux du système simple. On peut donc étudier le premier à partir des connaissances sur le dernier

Utilisation de la mécanique quantique nous voyons maintenant un atome ou une molécule comme une collection de points chargés, puis appliquer la seconde définition du dipôle. L'interaction de u atome ou une molécule par un champ électrique externe uniforme est décrite par l'opérateur .Cet opérateur est utilisé que la perturbation de la première et de seconde afin d'expliquer et premier et second ordre de l'effet Stark.

1-4) Qui est Stark ?



Johannes Stark

(15 avril 1874 à Freiburg, Bavière, Allemagne - 21 juin 1957) était un physicien allemand. Il a reçu le prix Nobel de physique de 1919 « pour sa découverte de l'effet Doppler dans les rayons canaux et du dédoublement des raies spectrales par les champs électriques».

II-2) L'oscillateur harmonique dans un champ électrique.

2-1) Champ électrique.

En physique, un champ électrique entoure des particules électriquement chargées. Plus précisément, un tel champ permet de déterminer en tout point de l'espace la force électrique exercée à distance par ces charges. Dans un référentiel galiléen donné une charge q donnée, de vecteur vitesse \vec{v} , subit de la part des autres charges présentes (fixes ou mobiles) une force (dite de Lorentz) qui se décompose en deux parties:

$$\vec{f} = q(\vec{E} + \vec{v} \wedge \vec{B})$$

Expression dans laquelle \vec{E} est le champ électrique, et \vec{B} est le champ magnétique.

Le champ électrique peut ainsi être défini comme le champ traduisant l'action à distance subie par une charge électrique fixe dans un référentiel donné de la part de toutes les autres charges, que celles-ci soient fixes ou mobiles.

Dans le cas de charges fixes dans le référentiel d'étude, le champ électrique est appelé champ électrostatique. Il est important de souligner que ce dernier champ ne se confond pas en général avec le champ électrique tel qu'il a été défini précédemment, en effet lorsque les charges sont en mouvement dans ce référentiel, il faut y ajouter un champ électrique induit dû aux déplacements des charges pour obtenir le champ électrique complet.

2-2) L'oscillateur harmonique chargé placé dans un champ électrique uniforme

L'oscillateur harmonique à une dimension étudié V est constitué par une particule de masse m et d'énergie potentielle :

$$V(X) = \frac{1}{2} m \omega^2 X^2 \quad (\text{II-1})$$

Supposons de plus que cette particule porte une charge q et qu'elle est plongée dans un champ électrique uniforme ε , parallèle à Ox . Quels sont alors ses états stationnaires et les énergies correspondantes ?

L'énergie potentielle classique d'une particule placée dans un champ uniforme ε vaut :

Chapitre II Oscillateur harmonique dans un champ électrique

$$W(\varepsilon) = -q\varepsilon x \quad (\text{II-2})$$

Pour obtenir en mécanique quantique l'opérateur hamiltonien $H'(\varepsilon)$ en présence du champ, il faut donc ajouter à l'énergie potentielle (1) de l'oscillateur harmonique le terme :

$$W(\varepsilon) = -q\varepsilon X \quad (\text{II-3})$$

Ce qui donne :

$$H'(\varepsilon) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2 - q\varepsilon X \quad (\text{II-4})$$

Le problème est donc de trouver les valeurs propres de cet opérateur. Dans ce but, nous allons utiliser deux méthodes différentes :

En premier lieu, nous allons raisonner directement sur l'équation aux valeurs propres de $H'(\varepsilon)$ en représentation $\{|x\rangle\}$, les résultats obtenus ayant une interprétation physique très simple ; nous montrerons ensuite comment le problème peut être résolu à partir d'un calcul purement opératoire.

2-3) Equation aux valeurs propres de $H'(\varepsilon)$ en représentation $\{|x\rangle\}$:

Soit $|\varphi'\rangle$ un vecteur propre de $H'(\varepsilon)$:

$$H'(\varepsilon)|\varphi'\rangle = E'|\varphi'\rangle \quad (\text{II-5})$$

Utilisant (II-4), on peut écrire cette équation en représentation $\{|x\rangle\}$:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 - q\varepsilon x \right] \varphi'(x) = E' \varphi'(x) \quad (\text{II-6})$$

Dans le premier membre de (II-6), groupons dans un carré les termes en x^2 et en x :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 \left(x - \frac{q\varepsilon}{m\omega^2} \right)^2 - \frac{q^2\varepsilon^2}{2m\omega^2} \right] \varphi'(x) = E' \varphi'(x) \quad (\text{II-7})$$

Remplaçons alors la variable x par une nouvelle u , en posant :

$$u = x - \frac{q\varepsilon}{m\omega^2} \quad (\text{II-8})$$

φ' est alors, par l'intermédiaire de x , une fonction de u , et l'équation (II-7) devient :

Chapitre II Oscillateur harmonique dans un champ électrique

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 u^2 \right] \varphi'(x) = E'' \varphi'(u) \quad (\text{II-9})$$

Avec :

$$E'' = E' + \frac{q^2 \varepsilon^2}{2m\omega^2} \quad (\text{II-10})$$

On voit alors que l'équation (II-9) est la même que celle qui d'obtenir, en représentation $\{|x \rangle\}$, les états stationnaires de l'oscillateur harmonique en l'absence de champ électrique.

Nous avons donc déjà résolu cette équation, et nous savons que les valeurs acceptables de E'' sont donnés par :

$$E''_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega \quad (\text{II-11})$$

(Ou n est un nombre entier positif ou nul).

Les égalités (II-10) et (II-11) nous montrent qu'en présence du champ électrique, les énergies E' des états stationnaires de l'oscillateur harmonique sont modifiées :

$$E'_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega - \frac{q^2 \varepsilon^2}{2m\omega^2} \quad (\text{II-12})$$

Le spectre de l'oscillateur harmonique est donc décalé « en bloc » de la quantité $\frac{q^2 \varepsilon^2}{2m\omega^2}$.

Quant aux fonctions propres $\varphi'_n(x)$ associées aux énergies (II-12), elles s'obtiennent tous, à partir des $\varphi_n(x)$, par une même translation ; en effet, la solution de (II-9).

Correspondant à une valeur donnée de n est $\varphi_n(u)$

Et d'après (II-8) on a :

$$\varphi'_n = \varphi_n \left(x - \frac{q\varepsilon}{m\omega^2} \right) \quad (\text{II-9}).$$

Chapitre III

RÉSULTAT ET DISSCUTION

Introduction :

Nous arrivons maintenant à la partie la plus laborieuse de notre travail où nous allons convertir tout ce que nous avons vu aux chapitres I et II, les équations théoriques, aux équations numériques accessible aux calculs.

Nous commencerons par la résolution de l'équation radiale :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 - qEdx - E \right] \psi(x) = 0 \quad (\text{III} - 1)$$

Résoudre (III-1) numériquement revient à construire un organigramme de calcul inspirés par un programme écrit en fortran qui repose sur la méthode d'Euler décrite comme suit :

Méthode d'Euler

Pour résoudre numériquement l'équation de Schrödinger, il semble pertinent d'appliquer la méthode de discrétisation de l'espace et des opérateurs. Sous les hypothèses que $\Psi(x)$ est au moins de classe C^2 , un développement de Taylor nous permet d'écrire les deux égalités suivantes :

$$\Psi(x+h) - \Psi(x) = h \frac{d\Psi}{dx}(x) + \frac{h^2}{2!} \frac{d^2\Psi}{dx^2}(x) + O(h^3) \quad (\text{III} - 2)$$

$$\Psi(x-h) - \Psi(x) = -h \frac{d\Psi}{dx}(x) + \frac{h^2}{2!} \frac{d^2\Psi}{dx^2}(x) + O(h^3) \quad (\text{III} - 3)$$

Le somme de ces deux égalités :

$$\frac{\Psi(x+h) + \Psi(x-h) - 2\Psi(x)}{h^2} = \frac{d^2\Psi}{dx^2}(x) + O(h^2) \quad (\text{III} - 4)$$

Apparait alors équivalent discret de l'opérateur Δ (à une dimension, mais le cas à trois dimensions s'en déduit aisément). La précision de cette expression est en $O(h^2)$.

En discrétisant l'espace d'un pas "h" et en injectant le résultat précédent dans l'équation de Schrödinger, il vient :

$$\frac{\Psi(x+h) + \Psi(x-h) - 2\Psi(x)}{h^2} + f(x)\Psi(x) + O(h^2) = 0 \quad (\text{III} - 5)$$

$$\Psi(x+h) + \Psi(x-h) - 2\Psi(x) + h^2 f(x)\Psi(x) + O(h^4) = 0 \quad (\text{III} - 6)$$

Cette équation peut être réécrite de façon à faire apparaitre une relation de récurrence entre les valeurs de Ψ aux nœuds du maillage. Le pas de la discrétisation est fixé à h et l'origine est définie par le point O.

La fonction d'onde discrète s'écrit alors $\Psi_n = \Psi(nh)$ avec n un entier. De même, $f_n = f(nh)$. En ces termes, l'équation s'écrit :

$$\Psi_{n+1} = [1 - h^2 f_n] \Psi_n - \Psi_{n-1} + O(h^4) \quad (\text{III7})$$

Le potentiel V étant à support compact il existe M tel que V soit nul ($V = 0$) pour $x < 0$ et $x > M$ (quitte à redéfinir le point O). Les solutions sur ces parties où le potentiel est nul ($V = 0$) sont connues : ce sont des ondes planes de la forme : pour $k = \sqrt{cE}$

$$\Psi(x < 0) = e^{ikx} + B e^{-ikx} \quad (\text{III} - 8)$$

$$\Psi(x > M) = C e^{ikx} \quad (\text{III} - 9)$$

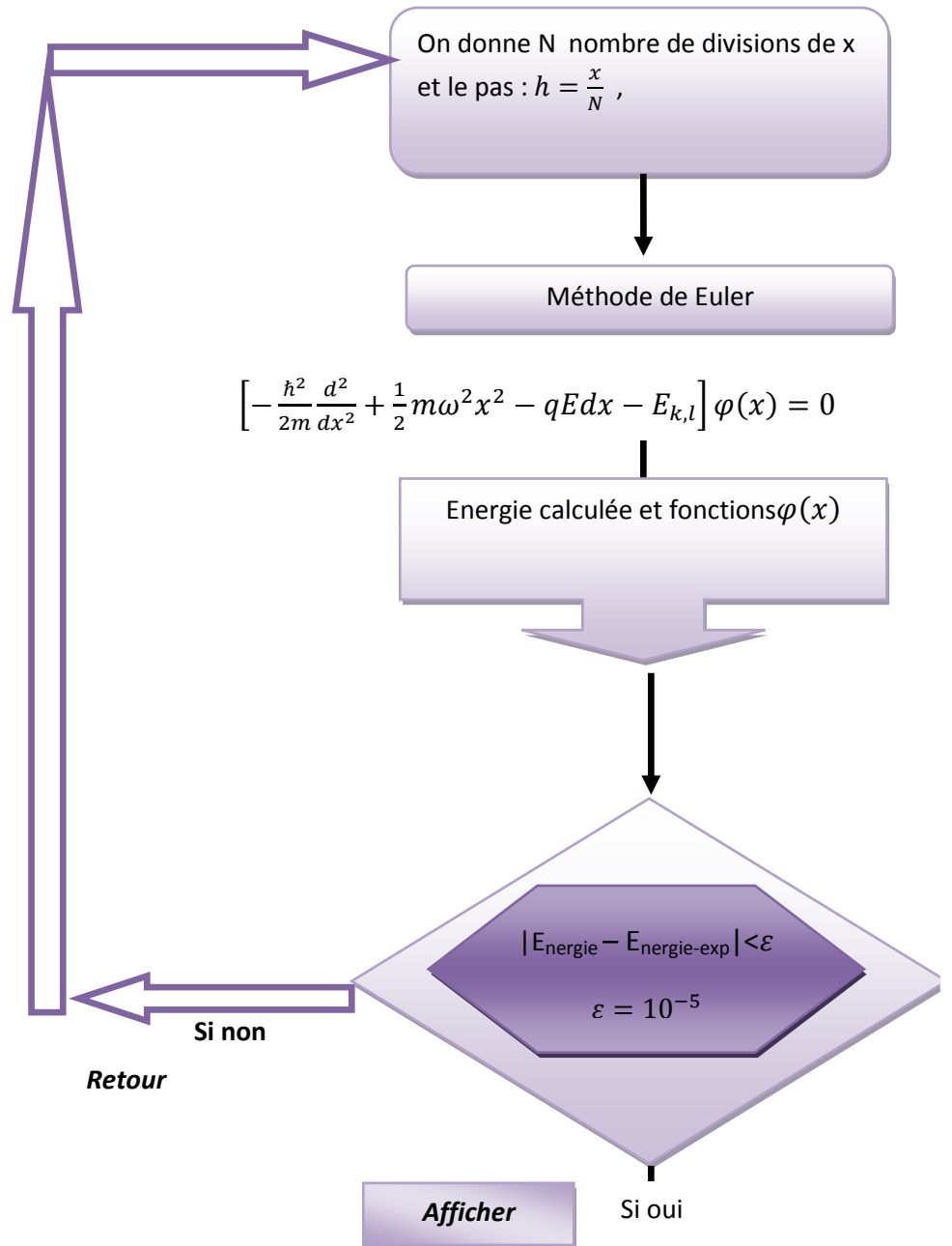
à un terme complexe A près qui n'est pas intéressant ici (ainsi B est directement le coefficient de réflexion en amplitude et C celui de transmission en amplitude).

Lors de la résolution numérique, l'algorithme débute à $x = -2h$. La connaissance des deux premières valeurs de Ψ_n (il s'agit de l'onde plane écrite précédemment) permet d'initier la récurrence qui donne accès à tous les Ψ_n .

Une fois que l'algorithme arrive à $x = M$, il renvoie la valeur de C (le coefficient de transmission en amplitude) et refait les calculs dans le sens inverse (par symétrie la formule est la même) une fois revenue à $x = 0$, il renvoie une nouvelle valeur de B .

Pour la bonne valeur de B , la distance entre le complexe d'entrée et celui de sortie est nulle. Il est donc nécessaire de faire appel à un autre algorithme qui va chercher le minimum de la fonction qui prend B comme argument et qui renvoie la distance (au carré) entre le complexe B d'entrée et celui de sortie.

Organigramme de calcul :



Discussions des résultats

Susceptibilité électrique D'un électron élastiquement Lié :

Dans certaines situations, les électrons d'un atome ou d'une molécule se comportent à une bonne approximation comme s'ils étaient « élastiquement liés », c'est-à-dire comme si chacun d'eux constituait un oscillateur harmonique. Nous le démontrerons pour les atomes

La contribution de chaque électron au moment dipolaire électrique de l'atome est décrite par l'opérateur :

$$D=qX \quad (\text{III-10})$$

Où q est la charge de l'électron ($q < 0$) et X l'observable position correspondante.

Nous allons étudier ici la valeur moyenne de D dans le cadre du modèle de l'électron élastiquement lié.

En l'absence de champ électrique, la valeur moyenne du moment dipolaire électrique dans un état stationnaire de l'oscillateur est nulle :

$$\langle D \rangle = q \langle \varphi_n | X | \varphi_n \rangle = 0 \quad (\text{III-11})$$

Supposons maintenant que le champ ε soit établi de façon suffisamment lente pour que l'état de l'électron passe progressivement de $|\varphi_n \rangle$ à $|\varphi'_n \rangle$ (n restant les mêmes). Le moment dipolaire moyen est cette fois différent de zéro ; en effet :

$$\langle D \rangle' = q \langle \varphi'_n | X | \varphi'_n \rangle = q \int_{-\infty}^{+\infty} dx x |\varphi'_n(x)|^2 \quad (\text{III-12})$$

$$\langle D \rangle' = q \int_{-\infty}^{+\infty} u |\varphi_n(u)|^2 du + \frac{q^2 \varepsilon}{m\omega^2} \int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi_n(u)|^2 du = \frac{q^2 \varepsilon}{m\omega^2}$$

Car la première intégrale est nulle par symétrie. $\langle D \rangle'$ est donc proportionnel à ε ;

Dans ce modèle, la susceptibilité électrique de l'électron atomique considéré vaut :

$$x = \frac{\langle D \rangle'}{\varepsilon} = \frac{q^2}{m\omega^2}$$

Elle est positive quel que soit le signe de q .

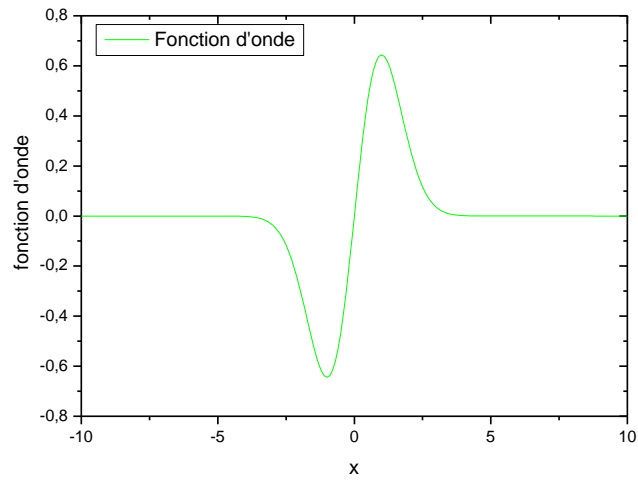
L'interprétation physique du résultat (III-18) est simple : le champ électrique a pour effet de déplacer la position d'équilibre classique de l'électron, c'est-à-dire la valeur moyenne de sa position en mécanique quantique [voir la formule (III-13)], ce qui se traduit par

l'apparition d'un moment dipolaire induit ; la décroissance de X lorsque ω augmente correspond au fait que l'oscillateur est d'autant moins facile à déformer que la force de rappel (proportionnelle à ω^2) est plus grande .

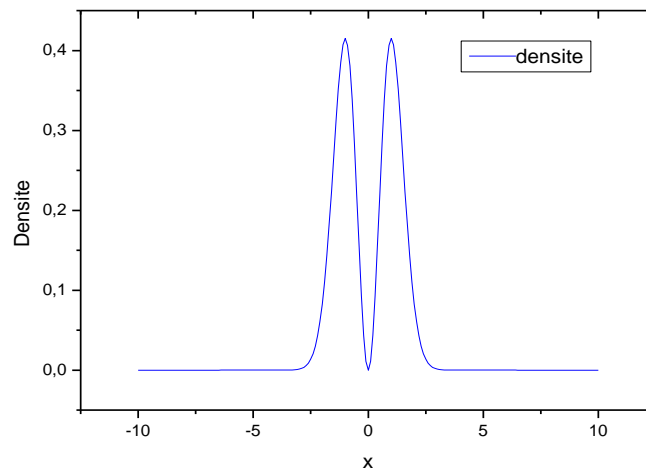
Discussions des résultats :

Dans un premier temps on résout l'équation de Schrödinger relatif à l'oscillateur harmonique ou on connaît ces solutions, puis en deuxième étape nous écrivons notre nouvelle solution avec l'ajout de la perturbation comme une combinaison linéaire des fonctions de base de l'oscillateur harmonique e nous déterminerons les nouvelles solutions ainsi que leurs énergies correspondantes et par conséquent les décalages induites par l'ajout de cette perturbation on dit ici que ces nouveaux d'énergies sont clivés.

Détermination des fonctions de bases



Les fonction d'onde , densités



Les fonction d'onde , densités

Conclusion

Dans ce chapitre nous avons calculés numériquement les fonctions d'ondes ainsi que leurs énergies possibles pour un oscillateur harmonique a 1 dimension en se basant sur la méthode d'Euler.

Référence :

- E-Chpolski Physique atomique Tome 1.
- Blokhintsev principes Mécaniques quantique.
- Cohen Tannandji Mécanique quantique Tome 1.
- Mécanique quantique Claude aslangul.

Conclusion générale :

Ce travail entre dans le cadre de préparation d'un diplôme de licence LMD option physique son titre intitulé **l'effet Stark** partant d'un modèle plus simple dit modèle de l'oscillateur harmonique plongé dans un champ électrique. Nous avons étudié le problème d'une manière quantique ce qui nous permet de déterminer toute les informations possibles sur les états quantiques ainsi que les énergies correspondantes. Nous avons écrit des programmes en Fortran en conversant nos équations théoriques à des équations numériques. Nos résultats numériques étaient en bonne accord avec les résultats trouvés par d'autres auteurs. Finalement comprendre la physique des matériaux c'est comprendre l'infiniment petit dit aussi l'atome.

Référence :

- D. Blokintsev, Principes de mécanique quantique, Éditions Mir, Moscou, 1981.
 - J.M. Lévy-Leblond, F. Balibar, Quantique. Rudiments, Inter-Editions, Paris, 1984.
 - Cl. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloë, Mécanique quantique, tomes I & II, Hermann, 1980.
 - E. Merzbacher, Quantum Mechanics, John Wiley, 3rd ed., 1998.
 - S. Gasiorowicz, Quantum Physics, John Wiley, 1997.
 - L.D. Landau, E.M. Lifshitz, Quantum Mechanics, Pergamon Press, 3rd ed., 1981.
 - V.K. Thankappan, Quantum Mechanics, John Wiley, 2nd ed., 1993.
 - A.B. Wolbarst, Symmetry and Quantum Mechanics, Van Nostrand Reinhold Comp., 1977.
 - W. Louisell, Radiation and noise in Quantum Electronics, McGraw-Hill, 1964.
 - A.Z. Capri, Nonrelativistic Quantum Mechanics, Benjamin/Cummings, 1985.
 - J.J. Sakurai, Modern Quantum Mechanics, Benjamin/Cummings, 1985.
 - W. Greiner, B. Müller, Quantum Mechanics, vol. I & II, Hermann, 1980.
 - T. Fliessbach, Quantenmechanik, Spektrum Akademischer Verlag, 1995.
-
- R.W. Robinett, Quantum Mechanics, Oxford University Press, 1997.