Année Universitaire	*2019-2020*	**Période**	*Automne 2019*	
Code UE	*4TBX310U & 4TBX312U*	**Epreuve**	*DS ATOMISTIQUE*	
Date	*25/10/2019*	**Enseignants**	*J-C. SOETENS, Y. HANNACHI*	
Sans documents	**Calculatrice autorisée**		**Durée**	*1h30*
NOM & PRENOM :			**Note / 20 :**	

A- Questions de cours (3 points)

1) Citer deux conséquences de l'utilisation d'opérateurs Hermitiques en mécanique quantique ?

(1)

- Valeurs propres réelles
- Fonctions propres orthogonales

2) Quelle est l'expression de la valeur moyenne d'une grandeur physique A pour un système décrit par une fonction d'onde Φ.

(1)

$$\langle A \rangle = \int_{esp} \Phi^* \hat{A} \Phi \, d\tau$$

1) Ecrire le résultat de l'expression précédente dans le cas ou la fonction Φ est fonction propre de l'opérateur associé à la grandeur physique A.

(1)

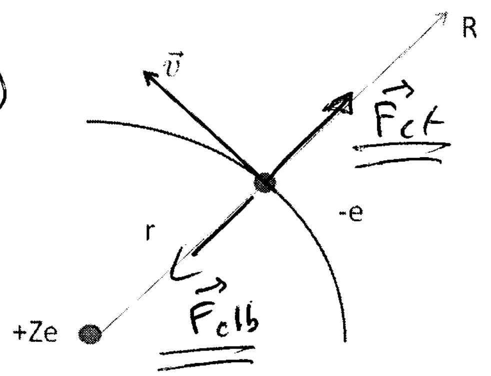
$$\langle A \rangle = \int_{esp} \phi^* \hat{A} \phi \, d\tau = \int_{esp} \phi^* a \phi \, d\tau = a$$

B- Premiers modèles de l'atome d'hydrogène et des hydrogénoïdes (11 points)

On suppose un noyau fixe de charge +Ze et un électron de masse m et de charge –e. L'électron est supposé sur une orbite circulaire stable de rayon r avec une vitesse constante v. Un des postulats de Bohr stipule que le moment cinétique orbital est quantifié, soit mvr=nh/2π, avec n un entier positif non nul.

1) Donner l'expression des forces présentes dans ce système et les faire apparaître clairement sur le dessin (on rappel que la force centrifuge vaut mv^2/r).

(1)



Force coulombienne : $\vec{F}_{clb} = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{Ze^2}{r^2}$

Force centrifuge : $\vec{F}_{ct} = \frac{mv^2}{r}$

2) L'analyse de ce système permet d'exprimer le rayon r de l'orbite de l'électron, la vitesse v de l'électron et l'énergie totale E du système. Le tableau ci-dessous donne ces expressions à des constantes près, a_0, v_0 *et* E_0 respectivement. Effectuer sur brouillon les traitements nécessaires pour retrouver les ces constantes et reporter leurs expressions et unités dans le tableau ci-dessous (pas la démonstration, uniquement les expressions).

	Quantité	**Expressions et unités SI des constantes**
1	$r = a_0 \dfrac{n^2}{Z}$	$a_0 = \dfrac{(4\pi\varepsilon_0)\hbar^2}{me^2}$ (m) $= \dfrac{\varepsilon_0 h^2}{\pi m e^2}$
1	$v = v_0 \dfrac{Z}{n}$	$v_0 = \dfrac{e^2}{(4\pi\varepsilon_0)\hbar}$ (m/s) $= \dfrac{e^2}{2\varepsilon_0 h}$
1	$E = -E_0 \dfrac{Z^2}{2n^2}$	$E_0 = \left(\dfrac{1}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2 \dfrac{me^4}{\hbar^2}$ (J) $= \dfrac{me^4}{4\varepsilon_0^2 h^2}$

3) Calculer les valeurs de ces trois constantes (unités SI) et les reporter dans le tableau suivant :

1	$a_0 =$ 5,35 10^{-11} m
1	$v_0 =$ 2,16 10^{6} m/s
1	$E_0 =$ 4,26 10^{-18} J

Echelles de temps et de distance dans les atomes.

4) Utiliser les résultats précédents pour calculer la fréquence de révolution (nombre de tours par seconde) de l'électron dans l'état d'énergie fondamentale de l'atome d'hydrogène.

1

$Z = n = 1 \Rightarrow \begin{cases} r = a_0 \\ v = v_0 \end{cases} \Rightarrow 2\pi r = 2\pi a_0$ le périmètre

$\tau_{\text{révolution}} = \dfrac{2\pi a_0}{v_0} = 1{,}56\ 10^{-16}$ s pour 1 tour

Donc $\nu = \dfrac{1}{\tau} = 6{,}42\ 10^{15}$ tours/s

Un peu de science fiction…

5) La particule muon, aussi appelée « électron lourd » possède les mêmes propriétés que l'électron à l'exception de sa masse m_m qui est 207 fois supérieure. Imaginons que « l'atome d'hydrogène muonique » existe, soit un système constitué d'un proton (charge +e) comme noyau et d'un muon de masse $m_m=207m_e$ (charge –e) qui tourne autour.

<u>On reste dans le cadre du modèle de Bohr et de tous les développements précédents. On se place dans l'état d'énergie fondamentale (n=1).</u>

<u>Question</u> : que peut-on dire de la vitesse du muon par rapport à celle de l'électron ?

$v = v_0 \frac{Z}{n}$ avec v_0 indépendant de m

1

Donc la vitesse du muon est identique à celle de l'électron.

<u>Question</u> : que peut-on dire de l'énergie de « l'atome d'hydrogène muonique » par rapport à celle de l'atome d'hydrogène ?

$E = -\frac{1}{2}\frac{Z^2}{n^2}\left[\left(\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2 \frac{me^4}{\hbar^2}\right]$ pour l'électron

1

Donc $E_{muon} = 207\ E_{electron}$

<u>Question</u> : que peut-on dire du rayon de l'orbite du muon de « l'atome d'hydrogène muonique » par rapport à celle de l'électron dans l'atome d'hydrogène ?

$r = a_0 \frac{n^2}{Z} = \frac{n^2}{Z}\frac{\hbar^2(4\pi\varepsilon_0)}{me^2}$ pour l'électron

1

Donc $r_{muon} = r_{electron}/207$

<u>Bilan :</u> $r \downarrow \Rightarrow \begin{cases} \vec{F}_{clb} \uparrow\uparrow \\ \vec{F}_{c} \uparrow\uparrow \Leftrightarrow \text{effet de masse (pas de } v) \end{cases}$

$\sum \vec{F} = 0$

C- Traitement quantique d'un système simple : particule dans une boîte à 3 dimensions (6+2 points)

Soit une particule de masse m libre de se déplacer dans une boîte *orthorhombique** de côtés (L_{x1}, L_{x2}, L_{x3}) par application d'un potentiel nul dans la boîte ($V(x_1)=0$ entre $x_1=0$ et $x_1=L_{x1}$, idem selon x_2 et x_3) et infini à l'extérieur de la boîte.

* *Une boîte orthorhombique possède trois côtés de longueurs différentes et que des angles droits.*

1) La fonction d'onde étant nulle à l'extérieur en raison du potentiel infini, écrire l'opérateur Hamiltonien $\hat{H}$ de la particule à l'intérieur de la boîte.

(1)

$$\hat{H} = \hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$$

2) Montrer que cet opérateur Hamiltonien $\hat{H}$ peut s'écrire comme la somme de trois termes indépendants $\hat{h}_i$ $(i = 1, 2, 3)$ d'une particule confinée dans chacune des directions x_i (i=1, 2, 3).

(1)

$$\hat{H} = \hat{h}_1 + \hat{h}_2 + \hat{h}_3 \quad \text{avec } \hat{h}_i = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x_i^2}$$

3) La séparation des variables observée dans la question précédente permet d'écrire la fonction d'onde de la particule comme un produit de fonctions dans chacune des directions. Soit :

$$\Phi(x_1, x_2, x_3) = \phi_1(x_1).\phi_2(x_2).\phi_3(x_3)$$

Or de l'étude du cas 1D on connait les fonctions propres et valeurs propres de l'opérateur Hamiltonien $\hat{h}_i$ pour chaque direction i :

$$\phi_i(x_i) = \sqrt{\frac{2}{L_{xi}}}.sin(\frac{n_i \pi x_i}{L_{xi}}) \ et \ E_i = \frac{n_i^2 h^2}{8mL_{xi}^2} \quad avec\, n_i > 0 \quad (n\, entier\, naturel)$$

<u>Question</u> : montrer que cette fonction $\phi_1(x_1).\phi_2(x_2).\phi_3(x_3)$ est fonction propre de l'opérateur Hamiltonien $\hat{H}$ de ce système et déterminer la valeur propre.

$$\hat{H}\phi(x_1, x_2, x_3) = (\hat{h}_1 + \hat{h}_2 + \hat{h}_3)\phi_1(x_1)\phi_2(x_2)\phi_3(x_3)$$

$$= E_1 \phi_1(x_1)\phi_2(x_2)\phi_3(x_3)$$
$$+ \phi_1(x_1) E_2 \phi_2(x_2)\phi_3(x_3)$$
$$+ \phi_1(x_1)\phi_2(x_2) E_3 \phi_3(x_3)$$

(1)

$$= \underbrace{(E_1 + E_2 + E_3)}_{\text{Valeur propre}}\phi_1(x_1)\phi_2(x_2)\phi_3(x_3) \quad \text{cqfd}$$

4) Ecrire finalement l'expression générale des fonctions d'ondes et des énergies $E_{n1,n2,n3}$ de ce système dans le cas particulier d'une boîte cubique de longueur L (soit $L_{x1} = L_{x2} = L_{x3} = L$).

(1) $$\phi(x_1,x_2,x_3) = \left(\frac{2}{L}\right)^{3/2} \sin\left(\frac{n_1 \pi x_1}{L}\right) \sin\left(\frac{n_2 \pi x_2}{L}\right) \sin\left(\frac{n_3 \pi x_3}{L}\right)$$

(1) $$E = E_1 + E_2 + E_3 = \frac{h^2}{8mL^2}\left(n_1^2 + n_2^2 + n_3^2\right)$$ avec $n_i > 0$

5) A quel triplet (n_1, n_2, n_3) correspond l'état d'énergie fondamentale de la particule dans cette boîte cubique ? Ecrire l'expression de cette énergie.

$$E_0 = E(1,1,1)$$

(1) $$= \frac{3h^2}{8mL^2}$$

~~6)~~ Questions bonus... Que dire du deuxième niveau d'énergie de la particule dans cette boîte cubique : valeurs de (n_1, n_2, n_3) ? Valeur de l'énergie ? Dégénérescence de ce niveau ? Qu'est ce qui fondamentalement est à l'origine de la dégénérescence...?

(1) "E_1" correspond aux triplet $\underbrace{(1,1,2),\ (1,2,1) \text{ et } (2,1,1)}_{\text{dégénérescence } = 3}$

$$= \frac{6h^2}{8mL^2}$$

(1) Dégénérescence = symétries de l'état.

Données numériques en unités du Système International (SI) fondamentales et dérivées

e	$= 1.6\ 10^{-19}$	C	charge de le l'électron
m_e	$= 9.1\ 10^{-31}$	kg	masse de l'électron
$1/(4\pi\varepsilon_o)$	$= 8.9\ 10^{9}$	$J.m.C^{-2}$	permittivité du vide
c	$= 3\ 10^{8}$	$m.s^{-1}$	vitesse de la lumière
h	$= 6.62\ 10^{-34}$	J.s	constante de Planck