Année Universitaire	2020-2021	Période	Automne 2020		
Code UE	4TBX310(2)U	Nom de l'épreuve	DS ATOMISTIQUE		
Date	23/10/2020 14h00 – 15h30	Enseignants	JC SOETENS, Y. HANNACHI		
Documents **non autorisés**	Calculatrice **autorisée**		Sujet sur 20 points	Durée de l'épreuve	1h30
NOM +PRENOM :				Note / 20	

A - **Questions de cours** (4 points)

(1) A-1) Quelle est l'expression de la formule permettant de calculer la valeur moyenne d'une grandeur physique A pour un système décrit par une fonction d'onde (normée) Φ.

$$\langle A \rangle = \int_{espace} \Phi^* \hat{A} \Phi \, d\tau$$ avec $\hat{A}$ l'opérateur associé à la grandeur physique A.

(1) A-2) Ecrire le résultat de l'expression précédente dans le cas où la fonction d'onde Φ est fonction propre de l'opérateur associé à la grandeur physique A.

Φ fonction propre de $\hat{A} \Rightarrow \hat{A}\Phi = a\Phi$

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

(1) A-3) Quelle(s) propriété(s) mathématique(s) possèdent les fonctions propres normées et les valeurs propres d'un opérateur Hermitique de mécanique quantique ?

- Les fonctions propres constituent une base orthogonale
  c.a.d. $\int_{esp} \Phi_i^* \Phi_j \, d\tau = \begin{cases} 1 & si\ i = j \\ 0 & si\ i \neq j \end{cases}$
- Les valeurs propres sont des nombres réels.

(1) A-4) Quelles sont les conséquences pour la mesure simultanée de deux grandeurs physiques A et B si leurs opérateurs associés sont non commutables ?

non commutables $\Rightarrow \underbrace{[\hat{A},\hat{B}]}_{\text{commutateur}} = k \neq 0$ $\quad \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$

Conséquence : la mesure simultanée des grandeurs A et B sera affectée d'une incertitude tel que :

$$\Delta A \, \Delta B \geq \frac{1}{2} \left| [\hat{A},\hat{B}] \right|$$

B - Traitement quantique d'une particule confinée dans un espace à une dimension (16 points

Soit une particule libre de se déplacer dans une boîte unidimensionnelle de longueur L par applica potentiel nul dans la boîte (V(x)=0 entre x=0 et x=L) et infini à l'extérieur de la boîte (V(x)=∝ poı x>L). Ce système a été traité en cours et les fonctions d'ondes et énergies suivantes ont été proposées pour décrire le système :

$$\psi_n(x) = K.sin(\frac{n\pi x}{L}) \qquad E_n = \frac{n^2h^2}{8mL^2}$$

Où K est une constante, n un entier positif, m la masse de la particule et h la constante de Planck.

1 B-1) Exprimer l'opérateur Hamiltonien de ce système entre x=0 et x=L ainsi que l'équation qui a permis de trouver les états de ce système.

$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$. Soit à résoudre $\hat{H}\psi = E\psi$

1 B-2) Le nombre quantique n est un entier positif. Faut-il considérer la valeur n=0 ? Pourquoi ?

si $n=0$, $\psi_0(x) = 0 \Leftrightarrow$ La particule est nulle part.
donc $n=0$ est à exclure.

1 B-3) Démontrer que les fonctions $\Psi_n(x)$ proposées ci-dessus sont bien fonctions propres de cet opérateur Hamiltonien.

$\hat{H}\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(K\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}K\left(\frac{n^2\pi^2}{L^2}\left(-\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)\right)\right)$

$= \underbrace{\frac{n^2h^2}{8mL^2}}_{\text{valeur propre } E_n}\psi(x)$

B-4) Les fonctions $\Psi_n(x)$ proposées ci-dessus sont données à la constante *K* près. Expliquer comment déterminer cette constante et calculer sa valeur. *On rappelle que $sin^2(a) = (1 - cos(2a))/2$.*

1 → $\psi_n(x)$ doit être normée, soit $\int_{esp} \psi_n^*(x)\psi_n(x)\,dx = 1$

Ici : $\int_0^L K^2\sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right)dx = 1 \Leftrightarrow K^2\int_0^L\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\cos\left(\frac{2n\pi x}{L}\right)\right)dx = 1$

$\Leftrightarrow K^2\left[\frac{x}{2} - \frac{1}{2}\frac{L}{2n\pi}\sin\left(\frac{2n\pi x}{L}\right)\right]_0^L = 1$

1 $\Leftrightarrow K^2\left[\left(\frac{L}{2} - 0\right) - (0-0)\right] = 1 \Rightarrow \boxed{K = \sqrt{2/L}}$

Soit $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$

B-5) Exprimer les trois quantités suivantes associées à la particule dans l'état fondamental ainsi que dans le premier état excité :

	Nombre quantique n	Energie E_n (en unité $h^2/8mL^2$)	Expression de la fonction d'onde
0,5 **Etat fondamental**	1	1	$\psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)$
0,5 **1^er^ état excité**	2	4	$\psi_2(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right)$

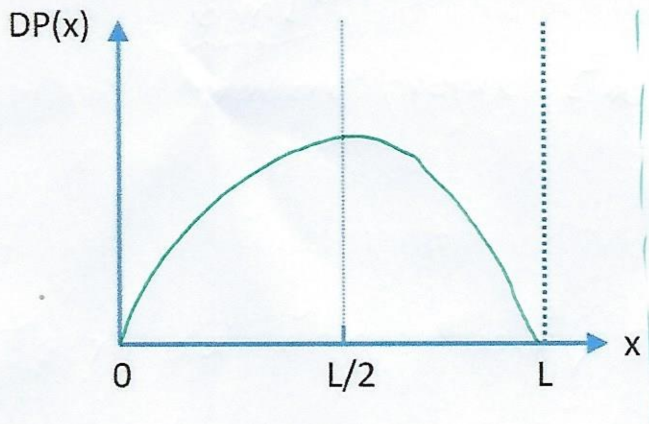
B-6) Exprimer puis dessiner qualitativement l'allure de la densité de probabilité de présence DP(x) de la particule en fonction de sa position dans la boîte, dans l'état fondamental et dans le premier état excité.

1

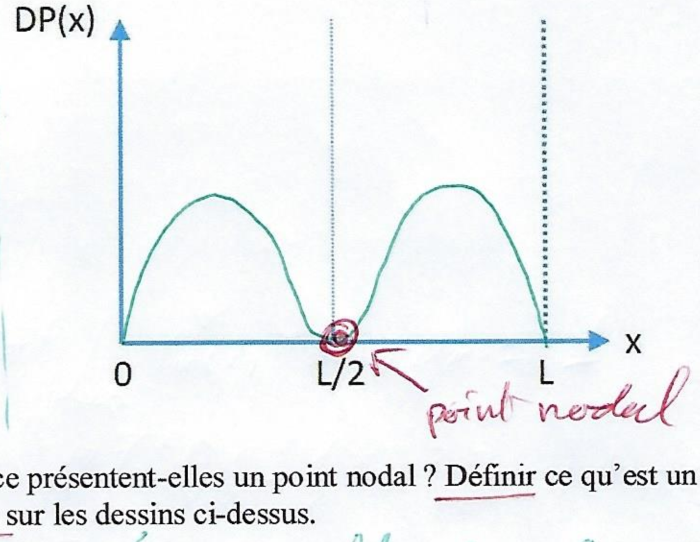
$$P = \int_0^L \psi_n^*(x)\,\psi(x)\,dx \Rightarrow \underbrace{\frac{dP(x)}{dx}}_{DP(x)} = \psi_n^*(x)\,\psi_n(x) = \frac{2}{L}\sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

$n=1$ $DP(x) = \frac{2}{L}\sin^2\left(\frac{\pi x}{L}\right)$ | $n=2$ $DP(x) = \frac{2}{L}\sin^2\left(\frac{2\pi x}{L}\right)$

Etat fondamental



1er état excité



1

1 B-7) Ces courbes de densité de probabilité de présence présentent-elles un point nodal ? Définir ce qu'est un point nodal et préciser leurs éventuelles localisations sur les dessins ci-dessus.

Point nodal = probabilité de présence nulle de la particule.

en $n=2$ → point nodal en $\frac{L}{2}$

⚠ Point nodal
⟺ $DP(x) = 0$
car $\psi(x)$ change de signe.

Application du modèle de la particule dans la boîte au cas d'un électron confiné dans une boite unidimensionnelle de longueur L.

Données numériques :

$m = 9.1\ 10^{-31}$ kg	*masse de l'électron*
$L = 10$ Å	*taille de la boîte*
$h = 6.62\ 10^{-34}$ J.s	*constante de Planck*
$c = 3\ 10^{8}$ m/s	*célérité de la lumière*

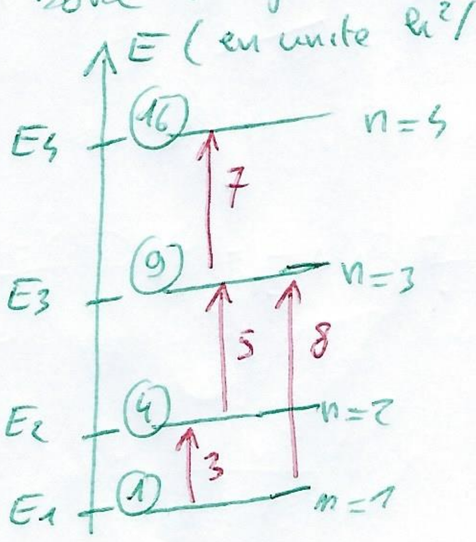
B-8) Dessiner un diagramme des niveaux d'énergie associés aux quatre plus grandes longueurs d'onde du spectre de raies d'absorption de ce système (transitions $n_1 \rightarrow n_2$ avec $n_2 > n_1$). Bien faire apparaitre l'énergie des niveaux (en unité $h^2/8mL^2$) ainsi que les quatre transitions par une flèche.

Rq $E_n = \frac{n^2 h^2}{8mL^2}$ donc l'écart entre les niveaux augmente avec n

Or grandes longueurs d'ondes $\Leftrightarrow$ petits ΔE

Donc il faut considérer les faibles valeurs de n

2



B-9) Application numérique : reporter dans le tableau ci-dessous les informations relatives à ces quatre transitions par ordre décroissant des longueurs d'onde.

$\Delta E = hc/\lambda$

2

Raie n°	n_1	n_2	ΔE n1→ n2 (en unité $h^2/8mL^2$)	ΔE n1→ n2 (Joule)	Longueur d'onde λ (nm)
1	1	2	3	$1{,}806\ 10^{-19}$	1099
2	2	3	5	$3{,}01\ 10^{-19}$	659
3	3	4	7	$4{,}21\ 10^{-19}$	471
4	1	3	8	$4{,}82\ 10^{-19}$	412

B-10) Trouver la formule exprimant la probabilité de présence de l'électron à ±1Å du centre de la boîte, soit entre 4 Å et 6 Å, ou encore entre 2L/5 et 3L/5.

0,5 $\boxed{P = \int_{2L/5}^{3L/5} \psi_n^2(x)\, dx} = \underbrace{\frac{2}{L}\left[\frac{x}{2} - \frac{L}{4n\pi}\sin\left(\frac{2n\pi x}{L}\right)\right]_{2L/5}^{3L/5}}_{\text{idem B-4)}}$

$$\Rightarrow P = \frac{2}{L}\left[\left(\frac{3L}{10} - \frac{L}{4n\pi}\sin\left(\frac{6n\pi}{5}\right)\right) - \left(\frac{2L}{10} - \frac{L}{4n\pi}\sin\left(\frac{4n\pi}{5}\right)\right)\right]$$

$$\Leftrightarrow P = \frac{3}{5} - \frac{\cancel{L}\,2}{4n\pi \cancel{L}}\sin\left(\frac{6n\pi}{5}\right) - \frac{2}{5} + \frac{\cancel{L}\,2}{4n\pi\cancel{L}}\sin\left(\frac{4n\pi}{5}\right)$$

$$\Leftrightarrow P = \frac{1}{5} - \frac{1}{2n\pi}\left(\sin\left(\frac{6n\pi}{5}\right) - \sin\left(\frac{4n\pi}{5}\right)\right)$$

0,5

B-11) Appliquer la formule trouvée pour calculer numériquement cette probabilité de présence, à ±1Å du centre de la boîte, dans l'état fondamental et dans le premier état excité. Les résultats trouvés sont-ils en accord avec les figures dessinées en B-6) ?

$\underline{n=1}$ $\quad P_1 = \frac{1}{5} - \frac{1}{2\pi}\left(\sin\left(\frac{6\pi}{5}\right) - \sin\left(\frac{4\pi}{5}\right)\right)$

$\underline{n=2}$ $\quad P_2 = \frac{1}{5} - \frac{1}{4\pi}\left(\sin\left(\frac{12\pi}{5}\right) - \sin\left(\frac{8\pi}{5}\right)\right)$

1 $\left\{ \begin{array}{l} \underline{\text{AN}} \quad P_1 = 0,387 \Leftrightarrow 38,7\,\% \text{ de probabilité de prés} \\ \phantom{\text{AN}} \quad P_2 = 0,049 \Leftrightarrow 4,9\,\% \quad \text{"} \quad \text{"} \quad \text{"} \end{array} \right.$

1 {
en n=1 → maximum de probabilité de presence entre 2L/5 et 3L/5, en fait en L/2

en n=2 → point nodal entre 2L/5 et 3L/5