

Corrigé - TD 11

I - Fondements de la mécanique quantique

1 - Effet photoélectrique

1. Non, c'est l'une des observations considérées (à l'époque) comme surprenante dans l'effet photoélectrique: E_c ne dépend que de λ .
2. On peut écrire par conservation de l'énergie:
$$E_{\text{photon}} = W_{\text{ext}} + E_c = \frac{hc}{\lambda}$$
 par la loi de Planck-Einstein
3. On trace E_c en fonction de $\frac{c}{\lambda}$:
$$E_c = h \times \frac{c}{\lambda} - W_{\text{ext}}$$
4. On fait la régression, on convertit d'abord E_c en J
($1\text{eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$) et on trouve: $h = 6,65 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}^{-1}$
ce qui correspond bien à la valeur tabulée au bon du nombre de chiffres significatifs.
5. La régression donne $W = 3,69 \cdot 10^{-19} \text{ J} = \boxed{2,31 \text{ eV}}$
On a $W = \frac{hc}{\lambda_{\text{lim}}}$ avec $\lambda_{\text{lim}} = 539 \text{ nm}$.
Si $\lambda \geq \lambda_{\text{lim}}$ alors l'énergie du photon n'est pas suffisante pour extraire un électron.

2 - Gaz classique, gaz quantique

1. a. On a vu en MPSI (j'espère!) que $\langle v^2 \rangle = \sqrt{\frac{3k_B T}{m}}$
moyenne d'une molécule/atome
Ici $m = \frac{M}{N_A} = \frac{4 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}}{6 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}} = 6,7 \cdot 10^{-24} \text{ kg}$ et $T \sim 300 \text{ K}$
$$E \quad \langle v^2 \rangle = \sqrt{\frac{3k_B T}{m}} \sim \boxed{43 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}}$$

b. $\lambda_{\text{de}} = \frac{h}{m \cdot v} = \frac{6,6 \cdot 10^{-34}}{6,7 \cdot 10^{-24} \cdot 43} \sim \boxed{2,3 \text{ pm}}$

La distance d entre deux atomes est telle que $\rho = \frac{m_0}{d^3}$.

↑
masse volumique

$$\text{Or } \rho = \frac{m_{\text{tot}}}{V} = \frac{m_{\text{tot}} P}{n_{\text{tot}} R T} = \frac{M P}{R T}$$

$$\Rightarrow d \approx \sqrt[3]{\frac{m R T}{M P}} = \sqrt[3]{\frac{R T}{N_A P}} \sim 4,1 \cdot 10^{-8} \text{ m} = \boxed{41 \text{ nm}}$$

Ainsi $\boxed{\lambda_{\text{dB}} \ll d}$

c. Ici $\lambda_{\text{dB}} \ll d$ donc, on peut considérer que λ est très petite devant toutes les caractéristiques du problème et on n'observe pas de phénomène ondulatoire (un peu comme si on essayait de faire une expérience de diffraction avec une fente très grande). Il n'y a donc pas d'effet quantique à l'échelle macroscopique.

2. a. On a maintenant: $m = m_{e^-} = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$

$$\langle v^2 \rangle = \sqrt{\frac{3 k_B T}{m_e}} = 1,4 \cdot 10^5 \text{ m.s}^{-1} \quad \lambda_{\text{dB}} = \frac{h}{m v} = 6,2 \text{ nm}$$

$$\text{Et } d = \sqrt[3]{\frac{m_0}{\rho}} \sim 2,8 \text{ nm}$$

b. On a ainsi $\lambda_{\text{dB}} \sim d$ donc la mécanique quantique joue un rôle important pour expliquer la conduction de l'électricité.

II - Puits de potentiel

3 - Absorption par un puits quantique

1. Le puits de potentiel étant infini la probabilité de présence de la particule doit s'annuler en $x=0$ et $x=L$:

$$\psi(x=0) = \psi(x=L) = 0.$$

$$\text{De plus: } \psi''(x) + \frac{2m^* E}{\hbar^2} \psi(x) = 0$$

$$\Rightarrow \psi(x) = A \sin\left(\sqrt{\frac{2m^* E}{\hbar^2}} x + \theta\right)$$

$\theta = 0$ par la première condition aux limites en $x=0$.

la seconde impose soit $A=0$ (ennuyeux!), soit $\sin\left(\sqrt{\frac{2m^* E}{\hbar^2}} \times L\right) = 0$

Autrement dit : $\exists n \in \mathbb{N}^*, \frac{\sqrt{2m^*E}}{\hbar} L = n\pi$.

On a donc : $\psi_n(x) = A_n \sin(k_n x)$ avec $k_n = \frac{n\pi}{L}$

2. La fonction d'onde doit être normalisée, or on sait que $\Psi(x,t) = \psi(x) e^{-iEt/\hbar}$ donc $|\Psi|^2 = |\psi|^2$ et :

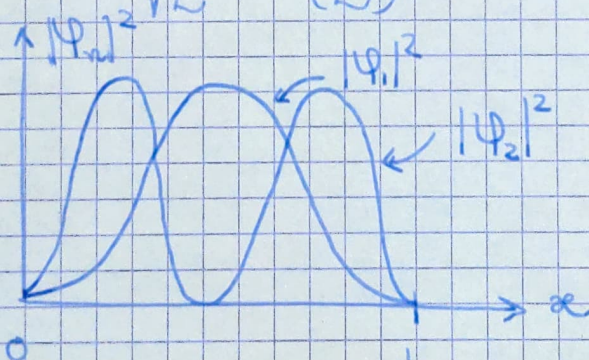
$$\int_0^L |\Psi|^2 dx = \int_0^L |\psi(x)|^2 dx = \int_0^L A_n^2 \sin^2(k_n x) dx$$

$$= \int_0^L A_n^2 \left(\frac{1 - \cos(2k_n x)}{2} \right) dx = \frac{A_n^2 L}{2}$$

Pour que la fonction soit normalisée on a donc :

$$A_n = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

3. $\psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)$ $\psi_2(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right)$



La fonction ψ_2 présente un nœud (présence impossible) en $x = \frac{L}{2}$.

4. On a vu que $\frac{\sqrt{2m^*E}}{\hbar} L = n\pi \Leftrightarrow E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m^* L^2}$

5. On peut avoir une longueur d'onde λ émise ou absorbée si : $\exists (m,n) \in \mathbb{N}^{*2}, \frac{hc}{\lambda} = E_m - E_n$

Autrement dit $\lambda \in (\lambda_{mn})_{\substack{m \in \mathbb{N}^* \\ n \in \mathbb{N}^*}}$ avec :

$$\lambda_{mn} = \frac{hc}{E_m - E_n} = \frac{hc}{\frac{\pi^2 \hbar^2}{2m^* L^2} (m^2 - n^2)} = \frac{4m^* L^2 c}{\pi^2 \hbar (m^2 - n^2)}$$

6. On trouve : $\lambda_{21} = 2,7 \mu\text{m}$ $\lambda_{31} = 1,0 \mu\text{m}$

Il s'agit du domaine infrarouge (rayonnement thermique), c'est ce qui est utilisé par exemple dans les diodes de télécommande.

4 - Colorants organiques et modèle de Kuhn

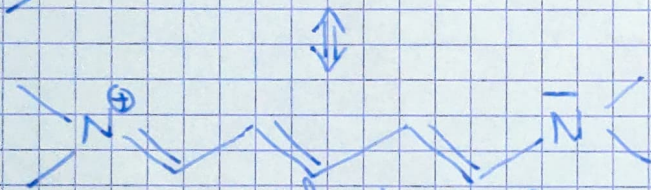
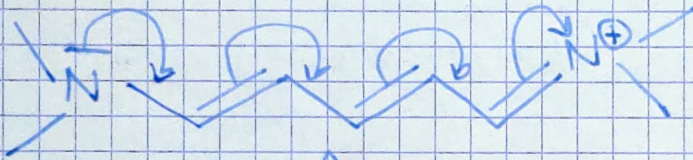
1. Les électrons délocalisés sont ceux qui sont sur les doubles liaisons mais seulement 1 des deux doublets, par exemple :



3 doublets = 6 e⁻
délocalisés

Ici on a $\begin{cases} p+1 \text{ double liaisons} \\ 1 \text{ doublet non liant sur N} \end{cases}$ donc

$$N = 2p + 4$$



2. Pour une corde vibrante, la longueur d'onde des ondes stationnaires est quantifiée : $\psi(x,t) \propto \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$ avec $n \in \mathbb{N}^*$.

Il en est de même ici, alors $k = \frac{n\pi}{L}$ et on sait que

$$E \times \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \psi \Leftrightarrow E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \boxed{\frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2}}$$

n est appelé le nombre quantique.

3. Les électrons sont alors au maximum deux par niveau d'énergie, les $2p+4$ électrons remplissent donc $p+2$ niveaux.

Le niveau $p+3$ est le premier niveau libre et on peut avoir une transition entre ces niveaux.

4. Alors : $\Delta E = \frac{hc}{\lambda} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \left((p+3)^2 - (p+2)^2 \right) = \frac{(2p+5) \hbar^2 \pi^2}{2mL^2}$

Or $N = 2p+4$ donc : $\lambda = \frac{hc}{\Delta E} = \frac{2mL^2}{(N+1)\pi^2 \hbar^2}$

Soit $\lambda = \frac{4mL^2 e}{(N+1)\pi^2 \hbar^2}$

$= \frac{8mL^2 e}{\hbar^2} \frac{1}{N+1}$ avec $\hbar = \frac{2\pi\hbar}{N}$
 $L = Nl$

5. Les prédictions du modèle sont les suivantes :

N	6	8	10	12	14	
p	1	2	3	4	5	
λ [nm]	327	453	579	705	832	théorie
		313	416	519	735	mesures

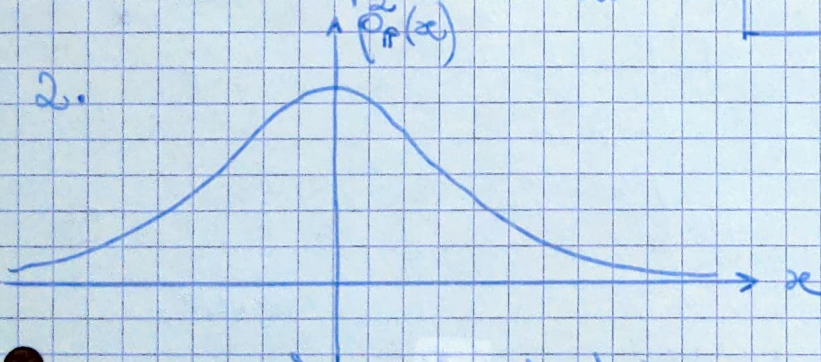
On a des écarts de l'ordre de 20-30% qui peuvent être dus au fait que le puits de potentiel n'est pas infini et que la chaîne carbonée n'est pas nécessairement linéaire. Il y a aussi sûrement des interactions avec les atomes d'hydrogène.

5 - Oscillateur harmonique

1. On trouve la constante A par normalisation:

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{2x^2}{a^2}} dx = A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-u^2} \times a du$$

$$= A^2 \times a \sqrt{\pi} \quad \text{d'où : } \boxed{A = \frac{2^{1/4}}{\pi^{1/4} \sqrt{a}}}$$



$\rho_P(x)$ est une fonction paire donc $\boxed{\langle x \rangle = 0}$

3. La fonction d'onde doit vérifier l'équation de Schrödinger

stationnaire :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} = E \psi - V \psi$$

$$\text{Soit } (E - V) \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2}$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{2}{a^2} e^{-\frac{x^2}{a^2}} - \frac{4x^2}{a^4} e^{-\frac{x^2}{a^2}} \right]$$

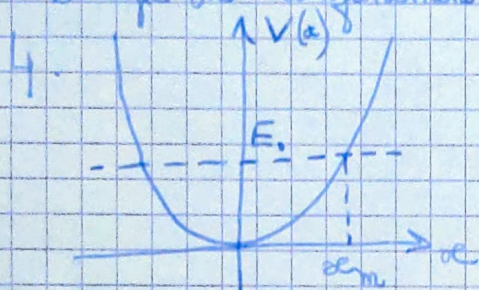
$$= \psi \times \left[\frac{\hbar^2}{ma^2} - \frac{2x^2 \hbar^2}{ma^4} \right]$$

On en déduit par identification que

$$\begin{cases} E = \frac{\hbar^2}{ma^2} \\ \frac{1}{2} m \omega_0^2 = \frac{2\hbar^2}{ma^4} \end{cases}$$

D'où $a = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega_0}}$ et $E_0 = \frac{\hbar\omega_0}{2}$

$E_0 \neq 0$: l'état fondamental a une énergie non nulle car la particule n'est pas exactement localisée en $x=0$. C'est une énergie de confinement.



Dans l'oscillateur classique x_m est fixé par $V(x_m) = E_0$ soit :

$$\frac{1}{2} m \omega_0^2 x_m^2 = \frac{\hbar\omega_0}{2}$$

D'où $x_m = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_0}}$

On constate que $a \geq x_m$: la particule quantique peut pénétrer dans les régions où $E < V$ ce qui n'est pas possible en mécanique newtonienne.

De plus : $P(-x_m \leq x \leq x_m) = A^2 \int_{-\frac{a}{\sqrt{2}}}^{\frac{a}{\sqrt{2}}} \left(e^{-\left(\frac{x}{a}\right)^2} \right)^2 dx$ $\begin{cases} u = \frac{x}{a} \\ du = \frac{1}{a} dx \end{cases}$

$$= A^2 \int_{-\frac{1}{\sqrt{2}}}^{\frac{1}{\sqrt{2}}} e^{-2u^2} du = \frac{A^2 a \times 1,05}{\sqrt{2/\pi}} \quad (Q1)$$

Soit $P(|x| \geq x_m) = 1 - \frac{1,05\sqrt{2}}{\sqrt{\pi}} = \boxed{0,16}$

Cette probabilité n'est pas du tout négligeable.

5. On a $\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} A^2 \times x^2 \left(e^{-\frac{x^2}{a^2}} \right)^2 dx$ $\begin{cases} u = \frac{x}{a} \\ du = \frac{dx}{a} \end{cases}$

$$= a^3 A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} u^2 e^{-2u^2} du$$

$$= \frac{a^3 A^2}{4} \int_{-\infty}^{+\infty} u \times 4u e^{-2u^2} du \quad \text{IPP}$$

$$= \frac{a^3 A^2}{4} \left[\left[u e^{-2u^2} \right]_{-\infty}^{+\infty} + \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2u^2} du \right]$$

$$= \frac{a^3 A^2}{4} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \quad \text{Or } A^2 a = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \text{ donc } \langle x^2 \rangle = \frac{a^2}{4}$$

6. On peut écrire que l'énergie potentielle de la particule est $V(x) = \frac{1}{2} m \omega_0^2 x^2$ et son énergie cinétique $E_c = \frac{p^2}{2m}$.

Alors: $E_0 = \langle V(x) + E_c \rangle = \frac{1}{2} m \omega_0^2 \langle x^2 \rangle + \frac{\langle p^2 \rangle}{2m}$

Comme $\langle x \rangle = 0$ et $\langle p \rangle = 0$ on a $\langle x^2 \rangle = \Delta x^2$ et $\langle p^2 \rangle = \Delta p^2$ et:

$$E_0 = \frac{1}{2} m \omega_0^2 \Delta x^2 + \frac{\Delta p^2}{2m}$$

D'où: $\Delta p^2 = 2m \left[\frac{\hbar \omega_0}{2} - \frac{1}{2} m \omega_0^2 \times \frac{a^2}{4} \right]$

$$= m \hbar \omega_0 - m^2 \omega_0^2 \times \frac{\hbar}{2m \omega_0} = \frac{m \hbar \omega_0}{2}$$

Soit $\Delta p = \sqrt{\frac{m \hbar \omega_0}{2}}$ et $\Delta x \Delta p = \frac{a}{2} \times \sqrt{\frac{m \hbar \omega_0}{2}}$

$$\Delta x \Delta p = \sqrt{\frac{\hbar}{2m \omega_0}} \sqrt{\frac{m \hbar \omega_0}{2}} = \frac{\hbar}{2}$$

On constate que l'inégalité de Heisenberg est ici une égalité.

6 - Enclaves quantique

1. On constate qu'il y a une longueur d'onde dominante dans le puits avec un nombre $n = 8$ noeuds donc on peut assimiler le puits à un puits 1D avec $n = 8$ et $L = 2R$:

$$E_n = \frac{n^2 \hbar^2 \omega_0^2}{2m L^2} = \boxed{0,31 \text{ eV}}$$

En réalité la barrière ne forme pas un puits infini (on voit des oscillations à l'extérieur) et donc on a probablement surestimé l'énergie des électrons.

2. a. La condition s'écrit:

$$1 = \int_0^{2\pi} \int_0^\infty |f(r)|^2 |g(\theta)|^2 r dr d\theta = \int_0^{2\pi} |g(\theta)|^2 d\theta \times \int_0^\infty r |f(r)|^2 dr$$

On peut alors choisir $f(r)$ de sorte à ce que :

$$\int_0^\infty |f(r)|^2 r dr = \frac{1}{2\pi} \quad (\text{quitte à multiplier } f \text{ par une constante})$$

et on aura $|g(\theta)| = 1$ qui convient. (La situation étant invariante par rotation autour de O_z , $|g(\theta)|^2$ est une constante).

b. L'équation de Schrödinger stationnaire donne :

$$-\frac{2m}{\hbar^2}(E - V(r))f(r)g(\theta) = g(\theta) \times \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{df(r)}{dr} \right) + \frac{1}{r^2} f(r) g''(\theta) \quad (*)$$

$$\text{Soit : } \underbrace{\frac{g''(\theta)}{g(\theta)}}_{\text{indépendant de } r} = \underbrace{\frac{-2m(E - V(r))f(r)}{\hbar^2} - r \frac{d}{dr} \left(r \frac{df(r)}{dr} \right)}_{\text{indépendant de } \theta}$$

Les deux membres ne dépendent ni de r ni de θ donc sont une constante : $g''(\theta) = K g(\theta)$

On écrit $K = -\alpha^2$ avec $\alpha \in \mathbb{C}$, alors $g''(\theta) + \alpha^2 g(\theta) = 0$

$$\text{Soit } g(\theta) = A e^{i\alpha\theta} + B e^{-i\alpha\theta}$$

On doit avoir : $\forall k \in \mathbb{N}, g(\theta + 2k\pi) = g(\theta)$

Ceci est possible si et seulement si $\alpha \in \mathbb{N}$, on note alors $\alpha = n$

$$\text{et } g(\theta) = A e^{i n \theta} + B e^{-i n \theta}$$

Par convention on prendra $g(\theta) = A e^{i n \theta}$. Comme $|g(\theta)| = 1$ on peut prendre $A = 1$ (tout facteur de phase n'a pas de sens physique puisqu'il ne change pas la probabilité de présence :

$$\boxed{g(\theta) = e^{i n \theta}}$$

c. Alors, avec $V(r) = 0$ dans l'enclos, (*) devient :

$$\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{df(r)}{dr} \right) - \frac{n^2}{r^2} f(r) = -\frac{2mE}{\hbar^2} f(r)$$

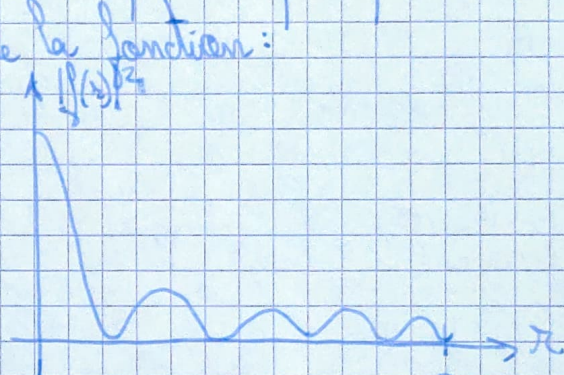
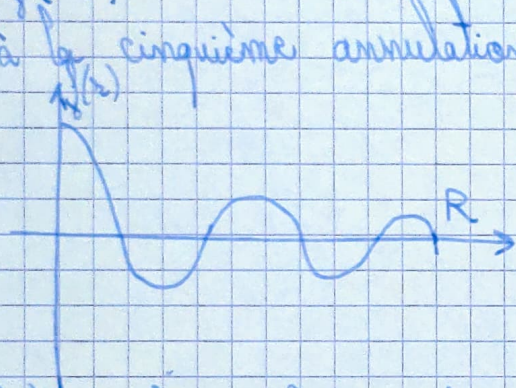
Si $x = kr$ alors $dr = \frac{dx}{k}$ et $\frac{d}{dr} = k \frac{d}{dx}$:

$$\frac{k^2}{x} \frac{d}{dx} \left(x \frac{df(x)}{dx} \right) - k^2 \frac{n^2}{x^2} f(x) = -k^2 f(x) \quad \text{ou encore :}$$

$$x^2 f'''(x) + x f'(x) + (x^2 - n^2) f(x) = 0$$

3. On constate sur la figure que seule la solution pour $n=0$ a un maximum en $x=0$ comme sur la photo.

Par ailleurs on peut voir en tout 5 maxima de $|f(x)|^2$ entre $x=0$ et $x=R$ ce qui indique que $x=R$ à la cinquième annulation de la fonction:



On lit sur le graphique: $kR \approx 15$ (courbe $n=0$, 5^e annulation)

Donc: $\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} R \approx 15 \Leftrightarrow E = \frac{15^2 \hbar^2}{2mR^2} \approx \boxed{0,44 \text{ eV}}$

On obtient une valeur sensiblement similaire, l'approximation du modèle 1D n'est donc pas trop mauvaise.

7 - Expansion soudaine d'un puits infini

1. On a $\varphi_{n\lambda}(x) = \sqrt{\frac{2}{a\lambda}} \sin\left(\frac{n\pi}{\lambda a}\right)$ $\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\frac{n\pi}{a}$

Les deux spectres n'ont aucune coïncidence si:

$$\forall (m,n) \in \mathbb{N}^2, \frac{n\pi}{\lambda a} \neq \frac{m\pi}{a} \Leftrightarrow \lambda \neq \frac{n}{m}$$

Autrement dit si λ est irrationnel.

2. On doit avoir à $t=0$ continuité de la fonction d'onde,

soit: $\varphi_i(x) = \sum_{n \in \mathbb{N}^*} c_n \varphi_n(x)$

Soit $m_0 \in \mathbb{N}^*$ alors:

$$\varphi_i(x) \varphi_{m_0}(x) = \sum_{n \in \mathbb{N}^*} c_n \varphi_n(x) \varphi_{m_0}(x)$$

On intègre sur $\mathbb{R}$ ce qui revient à intégrer entre $-\lambda a$ et λa :

$$\int_{-\lambda a}^{\lambda a} \psi_1(x) \psi_{m_2}(x) dx = \sum_{n \in \mathbb{N}^*} c_n \int_{-\lambda a}^{\lambda a} \psi_n(x) \psi_{m_2}(x) dx$$

$$\text{Or } \psi_n(x) \psi_{m_2}(x) = \frac{2}{\lambda a} \times \frac{1}{2} \left(\underbrace{\cos\left((n-m_2)\frac{\pi}{\lambda a}\right)}_{\text{intégrale nulle sauf si } n=m_2} - \underbrace{\cos\left((n+m_2)\frac{\pi}{\lambda a}\right)}_{\text{intégrale nulle}} \right)$$

$$\text{Ainsi } \int_{-\lambda a}^{\lambda a} \psi_n(x) \psi_{m_2}(x) dx = \begin{cases} 1 & \text{si } m_2 = n \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (*)$$

$$\text{Et : } \sum_{n \in \mathbb{N}^*} c_n \int_{-\lambda a}^{\lambda a} \psi_n(x) \psi_{m_2}(x) dx = c_{m_2}$$

D'où (en remplaçant m par n):

$$c_n = \int_{-a}^a \psi_1(x) \psi_n(x) dx$$

Rq: j'ai remplacé les bornes par $-a$ et a car $\psi_1(x) = 0$ si $|x| \geq a$

De plus la condition de normalisation s'écrit à $t=0$:

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\lambda a}^{\lambda a} |\psi|^2 dx = \int_{-\lambda a}^{\lambda a} \left| \sum_{n \in \mathbb{N}^*} c_n \psi_n(x) \right|^2 dx \\ &= \sum_{n \in \mathbb{N}^*} \sum_{m \in \mathbb{N}^*} c_n c_m^* \int_{-\lambda a}^{\lambda a} \psi_n(x) \psi_m(x) dx \end{aligned}$$

car $\psi_m^* = \psi_m$ (fonction réelle)

On peut réutiliser (*) et on trouve:

$$1 = \sum_{n \in \mathbb{N}^*} c_n c_n^* = \sum_{n \in \mathbb{N}^*} |c_n|^2$$

$$\text{Si } \lambda = n_0 \in \mathbb{N}^* \text{ alors : } c_{n_0} = \int_{-a}^a \psi_1(x) \psi_{n_0}(x) dx$$

$$\text{avec } \psi_{n_0}(x) = \sqrt{\frac{2}{n_0 a}} \sin\left(\frac{n_0 \pi}{n_0 a} x\right)$$

Toujours en utilisant (*) on trouve que $c_n = 0$ si $n \neq n_0$ car n est un entier donc un certain nombre de c_n sont nuls.

3. On calcule C_n :

$$\begin{aligned}
 C_n &= \sqrt{\frac{2}{a}} \sqrt{\frac{2}{\lambda a}} \int_{-a}^a \sin\left(\frac{n\tilde{u}x}{a}\right) \sin\left(\frac{n\tilde{u}x}{\lambda a}\right) dx \\
 &= \frac{1}{\sqrt{\lambda} a} \int_{-a}^a \left[\cos\left(\frac{(\lambda-1)n\tilde{u}x}{\lambda a}\right) - \cos\left(\frac{(\lambda+1)n\tilde{u}x}{\lambda a}\right) \right] dx \\
 &= \frac{1}{a\sqrt{\lambda}} \left(\frac{2\lambda a}{(\lambda-1)n\tilde{u}} \sin\left(\frac{\lambda-1}{\lambda} n\tilde{u}\right) - \frac{2\lambda a}{(\lambda+1)n\tilde{u}} \sin\left(\frac{\lambda+1}{\lambda} n\tilde{u}\right) \right) \\
 &= \frac{2\sqrt{\lambda}}{n\tilde{u}} \left(\frac{1}{\lambda-1} \left(\underbrace{\sin(n\tilde{u})}_{=0} \cos\left(\frac{n\tilde{u}}{\lambda}\right) - \sin\left(\frac{n\tilde{u}}{\lambda}\right) \underbrace{\cos(n\tilde{u})}_{=(-1)^n} \right) \right. \\
 &\quad \left. - \frac{1}{\lambda+1} \left(\sin(n\tilde{u}) \cos\left(\frac{n\tilde{u}}{\lambda}\right) + \sin\left(\frac{n\tilde{u}}{\lambda}\right) \cos(n\tilde{u}) \right) \right)
 \end{aligned}$$

On $\frac{1}{\lambda-1} + \frac{1}{\lambda+1} = \frac{2\lambda}{\lambda^2-1}$ d'où:

$$C_n = -\frac{4\sqrt{\lambda}\lambda}{n\tilde{u}(\lambda^2-1)} \times (-1)^n \sin\left(\frac{n\tilde{u}}{\lambda}\right)$$

On voit que $|C_n| \rightarrow 0$ si $\lambda \rightarrow \infty$ (il n'y a plus de confinement) et que $|C_n|$ décroît avec n , ainsi les niveaux les plus occupés correspondent aux basses énergies. Si $\lambda \gg 1$ alors pour $n \ll \lambda$ on a $\sin\left(\frac{n\tilde{u}}{\lambda}\right) \ll 1$ et $\sin\left(\frac{n\tilde{u}}{\lambda}\right) \times \frac{1}{n} \simeq \text{cte}$ donc dans ce cas les niveaux sont occupés jusqu'à $n \simeq \lambda$ ce qui est dû à la conservation de l'énergie.

Par conservation de l'énergie on s'attend à avoir:

$$E_1 = \sum_n |C_n|^2 E_{n\lambda}$$

$$4. \langle E^2 \rangle = \sum_n |C_n|^2 E_n^2 = \sum_n \underbrace{\frac{16\lambda^3}{n^2\tilde{u}^2(\lambda^2-1)^2} \sin^2\left(\frac{n\tilde{u}}{\lambda}\right)}_{|C_n|^2} \times \underbrace{\left(\frac{n^2\tilde{u}^2}{2m\lambda^2a}\right)^2}_{E_n^2}$$

Soit:

$$\langle E^2 \rangle = \frac{4\tilde{u}^2\tilde{u}^4}{m\lambda a^2(\lambda^2-1)^2} \sum_{n \in \mathbb{N}^*} n^2 \sin^2\left(\frac{n\tilde{u}}{\lambda}\right)$$

On $\sum n^2 \sin^2\left(\frac{n\pi}{2}\right)$ est une série divergente puisque $n^2 \sin^2\left(\frac{n\pi}{2}\right)$ diverge (sauf dans le cas inintéressant $\lambda = 1$). Ainsi:

$$\langle E^2 \rangle \rightarrow \infty \quad \text{et} \quad \text{Var}(E) = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 \rightarrow \infty$$

Ceci n'est pas surprenant, par l'inégalité de Heisenberg temporelle on a $\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$ or ici $\Delta t = 0$ (l'expansion du puits est instantanée) donc la variance de l'énergie est infinie, autrement dit des états d'énergie arbitrairement élevée sont accessibles à la particule. Ce résultat est évidemment non physique, en réalité $\Delta t \neq 0$ et il faudrait le prendre en compte.

5. Si l'on voulait comprimer le puits, on aurait une énergie de confinement supérieure après compression:

$$\forall n \in \mathbb{N}^*, E_{n2} > E_{n1}$$

Ainsi, la conservation de l'énergie $\sum_n |C_n|^2 E_{n2} = E$, devient impossible à satisfaire et il faut que l'on apporte du travail pour comprimer le puits, ou bien que l'on fasse la compression quand la particule est initialement dans un état excité.

III - Principe d'indétermination

8 - Fentes d'Young

1 a. Toute particule en mouvement est associée à une onde de probabilité de présence dont la longueur d'onde est donnée

$$\text{par } \lambda_{de} = \frac{h}{m v}$$

b. On a vu dans le cours sur les fentes d'Young que:

$$i = \frac{\Delta D}{2a} = \frac{h \lambda_D}{2m v a}$$

Après 2a
entre les fentes

2. a. Une électrons qui impacte la plaque en x=0 depuis la fente supérieure

arrive avec une vitesse.

$$\vec{v} = v \times \left(\frac{D}{\sqrt{D^2 + (a-d)^2}} \vec{e}_y + \frac{d-a}{\sqrt{D^2 + (a-d)^2}} \vec{e}_x \right)$$

En supposant $d, a \ll D$ on a alors une quantité de mouvement selon $\vec{e}_x$:

$$\boxed{m\vec{v} \cdot \vec{e}_x \approx \frac{d-a}{D} \times mv}$$

b. Pour la fente du bas : $\boxed{m\vec{v} \cdot \vec{e}_x = \frac{d+a}{D} \times mv}$

Ainsi la quantité de mouvement transmise dépend de la fente par laquelle l'électron est passé : en la mesurant, on sait par quelle fente il est passé.

c. Il faut que l'on soit capable de séparer les deux valeurs :

$$|p_x^{\text{haut}} - p_x^{\text{bas}}| = \frac{2a}{D} \times mv \quad p_x^{\text{moyen}} = \frac{d}{D} \times mv$$

L'écart-type de la distribution est l'écart à la moyenne donc :

$$\boxed{\Delta p_x = \frac{amv}{D}}$$

3. a. On a alors : $\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \Rightarrow \Delta x \geq \frac{\hbar}{2p_x}$

$$\text{Soit } \Delta x \geq \frac{\hbar}{2} \cdot \frac{D}{amv}$$

b. L'écart-type de la distribution est alors $\Delta x = \frac{s}{\sqrt{12}} = \frac{s}{2\sqrt{3}}$

$$\text{D'où : } s \geq \frac{\hbar D \sqrt{3}}{amv} = \frac{\hbar D \sqrt{3}}{2\pi amv}$$

c. Or on a $i = \frac{\hbar D}{2mva}$ donc $s \geq \frac{\sqrt{3}}{\pi} i \approx 0,55 \times i$

Ainsi en mesurant la quantité de mouvement p_x avec une précision suffisante pour savoir par quelle fente l'électron est passé, les électrons ont leur position qui devient variable avec une variabilité de l'ordre de l'interfrange : on ne peut plus voir les interférences.

IV - Modèles de l'atome d'hydrogène

9 - Autour de l'atome d'hydrogène

1. a. $[k] = \frac{C^2}{F \cdot m^{-1}} \quad \text{or} \quad \begin{cases} 1F = 1J \cdot V^{-2} & (E = \frac{1}{2} CV^2) \\ 1C = 1J \cdot V^{-1} & (E = QV) \end{cases}$

$$= \frac{J^2 V^{-2}}{J \cdot V^{-2} \cdot m^{-1}}$$

$$[k] = J \cdot m = \boxed{kg \cdot m^3 \cdot s^{-2}}$$

b. On a $[k] = kg \cdot m^3 \cdot s^{-2}$ $[m] = kg$ $[h] = J \cdot s = kg \cdot m^2 \cdot s^{-1}$

Notons: $E_{\text{ref}} = a \times k^\alpha m^\beta h^\gamma$

Alors $[E_{\text{ref}}] = kg^{\alpha+\beta} \cdot m^{3\alpha+2\gamma} \cdot s^{-2\alpha-\gamma}$

$$= kg \cdot m^2 \cdot s^{-2}$$

D'où $\begin{cases} \alpha + \beta + \gamma = 1 \\ 3\alpha + 2\gamma = 2 \\ -2\alpha - \gamma = -2 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \alpha = 2 \\ \beta = 1 \\ \gamma = -2 \end{cases}$

D'où: $E_{\text{ref}} = a \times \frac{mk^2}{h^2}$

2. a. On trace $\frac{hc}{\lambda}$ en fonction de $1 - \frac{1}{n^2}$, on fait la régression linéaire et on trouve $E_{\text{ref}} = 2,14 \cdot 10^{-18} J$ soit $E_{\text{ref}} = 13,3 eV$. (Rq: valeur tabulée 13,6 eV)

10 - Modèle de Bohr

1. $\frac{G M m}{r^2} \sim \frac{7 \cdot 10^{-11} \times 2 \cdot 10^{-27} \times 9 \cdot 10^{-31}}{(2 \cdot 10^{-10})^2} \sim 4 \cdot 10^{-28} SI$

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \sim \frac{(2 \cdot 10^{-19})^2}{12 \cdot 9 \cdot 10^{-12}} \sim 4 \cdot 10^{-28} SI$$

Ainsi $\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \gg \frac{G M m}{r^2}$ et on peut négliger la gravitation

2. On a $E_m = \frac{1}{2} m v_m^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_m}$

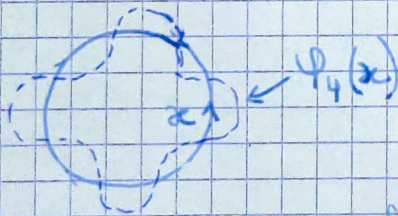
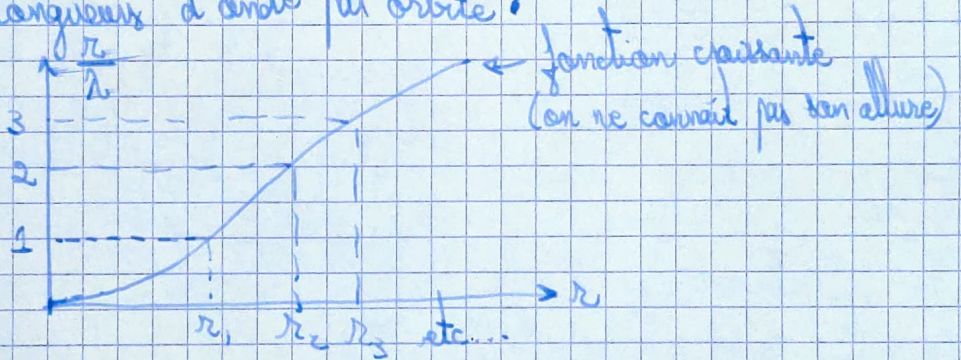
3. Il faut que la fonction d'onde soit continue et sa dérivée aussi:

$$\Psi_n(2\pi r_n) = \Psi_n(0) \quad \text{et} \quad \Psi_n'(2\pi r_n) = \Psi_n'(0)$$

4. On en déduit que le périmètre de l'orbite doit être un multiple entier de longueurs d'onde, ainsi:

$$2\pi r_n = n \lambda_p$$

En effet les orbites les plus courtes correspondent à $n=1$ puis s'allongent lorsque n augmente ce qui permet d'avoir plus de longueurs d'onde par orbite:



5. Sur une orbite circulaire uniforme l'accélération est:

$\vec{a} = -\frac{v_n^2}{r_n} \vec{e}_r$. La 2^e loi de Newton donne pour l'électron, dans le référentiel du noyau supposé galiléen:

$$-m \frac{v_n^2}{r_n} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_n^2} \quad \text{soit} \quad m v_n^2 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_n}$$

6. Alors $E_n = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r_n} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_n} = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r_n} = -\frac{1}{2} m v_n^2$

De plus: $\lambda_n = \frac{h}{m v_n} = \frac{2\pi r_n}{n} \Leftrightarrow v_n = \frac{h n}{2\pi m r_n}$

E_n est minimale pour $n=1$, alors:

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} = \frac{h^2 n^2}{4\pi^2 m r_n^2} \quad \text{avec } n=1 \quad \Leftrightarrow \quad r_1 = \frac{h^2 \epsilon_0}{m \pi e^2}$$

Et $r_n = n^2 \times r_1$

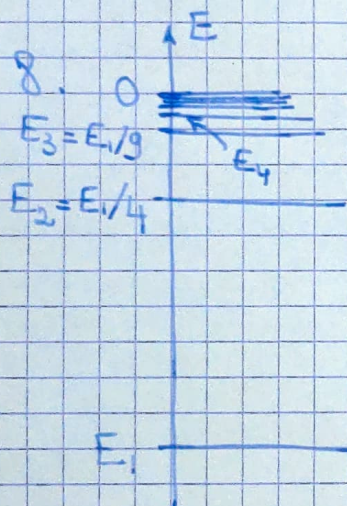
AN: $r_1 = 5,3 \cdot 10^{-11} \text{ m} = 0,53 \text{ \AA}$

7. On a alors $E_n = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r_n} = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r_1} \times \frac{1}{n^2}$

$E_n = -\frac{E_1}{n^2}$ avec $E_1 = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \times \frac{m e^2}{h^2 \epsilon_0}$

soit $E_1 = -\frac{m e^4}{8 \epsilon_0^2 h^2}$ AN: $E_1 = -13,6 \text{ eV}$

C'est le niveau fondamental de l'atome.



Les niveaux sont écartés près du fondamental et très rapprochés ailleurs.

L'énergie d'ionisation est tout simplement $-E_1 = 13,6 \text{ eV}$.

11 - Un autre modèle de l'atome

1. ρ étant homogène: $+e = \iiint_V \rho d\tau = \rho \times \frac{4}{3}\pi a^3$

D'où: $\rho = \frac{3e}{4\pi a^3}$

2. Soit M un point de l'espace: tout plan contenant O et M est plan de symétrie de la distribution de charges donc $\vec{E}(M)$ est contenu dans tous ces plans et $\vec{E}(M) = E(M) \vec{e}_r$.

De plus la distribution est invariante par rotations autour de O et donc les composantes de $\vec{E}$ ne dépendent que de r ainsi $\vec{E}(M) = E(r) \vec{e}_r$.

On applique le théorème de Gauss à une sphère de rayon r_0 :

$\oint \vec{E} \cdot d\vec{S} = 4\pi r_0^2 E(r_0) = \frac{Q_{int}}{\epsilon_0}$

car $Q_{int} = \frac{4}{3}\pi r_0^3 \rho = e \left(\frac{r_0}{a}\right)^3$. D'où, dans l'hypothèse où $r < a$:

$$\vec{E}(M) = \frac{ex}{4\pi\epsilon_0 a^3} \vec{e}_x \quad (= \frac{ex}{4\pi\epsilon_0 a^3} \vec{e}_x)$$

3. On applique le PFD à l'électron dans le référentiel du noyau supposé galiléen; l'électron est soumis à la seule force électrostatique: $m_e \ddot{x} = -e \vec{E} \cdot \vec{e}_x = -\frac{e^2 x}{4\pi\epsilon_0 a^3}$.

Sait: $\ddot{x} + \omega_0^2 x = 0$ avec: $\omega_0 = \frac{e}{\sqrt{4\pi m_e \epsilon_0 a^3}}$

Pour une abscisse initiale x_0 sans vitesse initiale la solution s'écrit: $x(t) = x_0 \cos(\omega_0 t)$

4. On a alors $\langle x \rangle = 0$ et $\langle x^2 \rangle = \frac{x_0^2}{2}$.

De plus: $\frac{dx}{dt} = -\omega_0 x_0 \sin(\omega_0 t) \Rightarrow p = m_e \frac{dx}{dt}$ vérifie

ainsi $\langle p \rangle = 0$ et $\langle p^2 \rangle = \frac{\omega_0^2 x_0^2}{2} \times m_e^2$

D'aut: $\Delta x = \frac{x_0}{\sqrt{2}}$ $\Delta p = \frac{m_e \omega_0 x_0}{\sqrt{2}}$

$$\Delta x \Delta p = \frac{m_e x_0^2}{2} \times \frac{e}{\sqrt{4\pi m_e \epsilon_0 a^3}} = \frac{x_0^2}{2} \times \sqrt{\frac{m_e}{4\pi \epsilon_0 a^3}}$$

Par l'inégalité de Heisenberg: $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$ soit:

$$x_0^2 \geq \frac{\hbar}{e} \sqrt{\frac{4\pi \epsilon_0 a^3}{m_e}} \quad \text{Or } x_0^2 \leq a^2$$

Donc $a^2 \geq \frac{\hbar}{e} \sqrt{\frac{4\pi \epsilon_0 a^3}{m_e}} \Leftrightarrow a \geq \frac{\hbar^2}{e^2} \cdot \frac{4\pi \epsilon_0}{m_e}$

On retrouve alors le rayon de Bohr $a_0 = \frac{4\pi \epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2}$.

2 - Le deutérium

fraction molaire

$$1. \quad w_D = \frac{x_D \times M_D}{x_D \times M_D + x_H \times M_H} = \frac{\frac{1}{6420} \times 2}{\frac{1}{6420} \times 2 + \frac{6419}{6420} \times 1}$$

On trouve $w_D \approx 3,1 \cdot 10^{-4} \approx \frac{1}{3210}$

2. Le noyau est composé d'un neutron et un proton, sa proportion en masse est : $\alpha = \frac{m_n + m_p}{m_n + m_p + m_e} = \boxed{0,99973}$

3. On peut supposer que la probabilité d'un atome d'hydrogène soit du deutérium est de $\frac{1}{6420}$ et que les événements sont deux à deux indépendants y compris pour les deux atomes d'hydrogène d'une même molécule d'eau.

Alors : $\alpha_{\text{HDO}} = \alpha_D \times (1 - \alpha_D) = \boxed{1,56 \cdot 10^{-4}}$

$$\alpha_{\text{D}_2\text{O}} = \alpha_D \times \alpha_D = \boxed{2,43 \cdot 10^{-8}}$$

4. L'eau lourde n'est pas nocive pour la santé ou l'environnement (c'est un isotope) et peut servir de traceur. Elle est aussi utilisée dans les réacteurs nucléaires pour modérer la réaction.

5. a. On doit avoir $\frac{hc}{\lambda_m} = E_n - E_2 = \frac{E_0}{2} \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{n^2} \right)$
 $= \frac{E_0(n^2 - 4)}{8n^2}$

D'où : $\lambda_m = \frac{8hc n^2}{E_0(n^2 - 4)}$

b. AN : $\lambda_3 = 658 \text{ nm}$ $\lambda_4 = 487 \text{ nm}$
 Ces longueurs d'onde sont dans le visible.

6. On a : $\lambda_m = \frac{8hc n^2}{n^2 - 4} \times \frac{m_e e^4}{(4\pi\epsilon_0 \hbar)^2}$

Une différentielle logarithmique donne $\frac{\Delta \lambda_m}{\lambda_m} \approx \frac{\Delta m'_e}{m'_e}$

Or $m'_e \approx m_e \left(1 - \frac{m_e}{M} \right) \approx m_e - \frac{m_e^2}{M}$ (DL 1 en $\frac{m_e}{M}$) donc

$\Delta m'_e \approx -\frac{m_e^2}{2M}$ (car $m_p \approx m_n$) et donc $\boxed{S = -\frac{m_e}{2m_p}}$

On a $\boxed{S = 2,7 \cdot 10^{-4}}$: l'identification spectroscopique du deutérium est très délicate, il faut un spectromètre très précis. Un Michelson pourrait peut-être fonctionner.