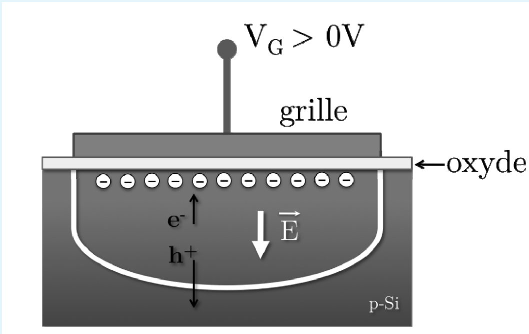
Chapitre 31 : introduction à la mécanique quantique
Fiche méthode

1 Notion de photon

Situation : le capteur CCD d'un appareil photo numérique est construit sur un substrat de silicium et chaque photo-site (ou pixel) est délimité par une fin électrode métallique appelée "grille". Chaque photon qui arrive sur un photo-site crée une paire électron-trou et l'électron est "piégé" si on applique une tension positive (V_G) entre la grille et le silicium. Chaque photo-site peut donc être modélisé comme un condensateur qui se charge au cours du temps sous l'effet de l'éclairement, la charge étant proportionnelle à l'intensité lumineuse reçue. À la fin de la durée d'exposition du capteur (appelée "durée d'intégration") la charge de chaque photo-site est convertie en tension et le photo-site est remis à zéro.



Source : *Contribution au développement d'une technologie d'intégration tridimensionnelle pour les capteurs d'image CMOS à pixels actifs*, Perceval Coudrain (2009, thèse de doctorat, Université de Toulouse).

1. Sous quel nom est connu le phénomène selon lequel un photon peut "arracher" un électron à un métal ? Citer le nom d'un physicien qui en proposa une interprétation en 1905.

2. Ce phénomène ne peut avoir lieu que si le photon possède une énergie minimale, liée au matériau du support. Pour le silicium cette énergie minimale est de $1,12\,\text{eV}$. Montrer que cette valeur est compatible avec la photographie en lumière visible.

1. Ce phénomène s'appelle **l'effet photoélectrique**. **Einstein** en proposa une interprétation dans un célèbre article publié en 1905 : "Sur un point de vue heuristique concernant la production et la transformation de la lumière".

► Déterminer la longueur d'onde seuil pour l'effet photoélectrique

Rappel de cours : une onde lumineuse transporte l'énergie sous la forme de paquets indivisibles appelés "quanta de lumière" ou encore "photons", dont voici quelques propriétés :

- leur masse est rigoureusement nulle,
- leur énergie E est proportionnelle à la fréquence ν de l'onde lumineuse (loi de **Planck-Einstein**) : $\boxed{E = h\nu}$ avec $h = 6,63 \cdot 10^{-34}\,\text{J} \cdot \text{s}$ est la constante de Planck,
- leur quantité de mouvement est proportionnelle au vecteur d'onde : $\boxed{\vec{p} = \hbar\vec{k}}$ avec $\hbar = h/2\pi$ la constante de Planck *réduite*.

2. L'énergie minimale nécessaire pour arracher un électron au matériau porte le nom de **travail d'extraction**, on le notera W. L'effet photoélectrique se produit si l'énergie $E = h\nu$ du photon incident (où ν est la fréquence de l'onde lumineuse) est supérieure à W. On établit alors la condition sur la longueur d'onde du rayonnement incident pour que celui-ci produise un effet photoélectrique :

$$\text{E} = h\nu = \frac{hc}{\lambda} \geq W \iff \boxed{\lambda \leq \frac{hc}{W} = 1,1\,\mu\text{m}}$$

Les photons visibles $(0,4\,\mu\text{m} \leq \lambda \leq 0,8\,\mu\text{m})$ ont une énergie suffisante pour produire un effet photoélectrique dans le silicium. **La valeur du travail d'extraction du matériau du support est compatible avec la photographie en lumière visible**.

Application 1 : TD : exercice 4.

2 Comportement ondulatoire de la matière

Situation : En 1927 une expérience conduite par C.J. Davisson et L. Germer consista à envoyer un faisceau d'électrons lents d'énergie cinétique fixée $E_c = 54\,\mathrm{eV}$ sur un monocristal de nickel. Ils observèrent une déviation des électrons formant une figure de diffraction semblable à celle prédite par les calculs de William Henry Bragg pour des rayons X de longueur d'onde $\lambda = 0,17\,\mathrm{nm}$.

Quelques années plus tôt, en 1923, Louis de Broglie formulait l'hypothèse selon laquelle des corpuscules de matière peuvent se comporter de manière aléatoire de la même manière qu'une onde lumineuse peut se comporter de manière corpusculaire. Il proposa que dans les deux cas la relation entre la quantité de mouvement de la particule et le vecteur d'onde associé est la même : $\vec{p} = \hbar\vec{k}$.

Justifier que l'expérience de Davisson et Germer est en accord avec la prédiction de de Broglie.

Données : constante de Planck : $h = 6,63 \cdot 10^{-34}\,\mathrm{J \cdot s}$, masse de l'électron : $m = 9,1 \cdot 10^{-31}\,\mathrm{kg}$, unité électron-volt : $1\,\mathrm{eV} = 1,6 \cdot 10^{-19}\,\mathrm{J}$.

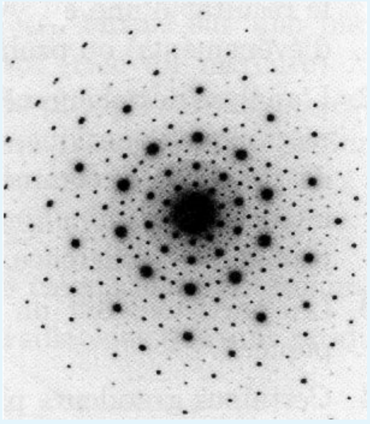


Figure de diffraction d'électrons à travers un cristal fait d'un alliage Al Mn Si

► Calculer une longueur d'onde de de Broglie

L'énergie cinétique de l'électron est suffisamment faible pour que l'on puisse le traiter dans un cadre non-relativiste (pour un électron les effets relativistes deviennent sensibles pour des énergies cinétiques supérieures à environ $10\,k\mathrm{eV}$). Dans ce cas son énergie cinétique s'écrit classiquement $E_c = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m}$. On rappelle par ailleurs que pour une onde sinusoïdale qui se propage dans un milieu non absorbant et non dispersif, $k = \frac{2\pi}{\lambda}$. On détermine alors la longueur d'onde de de Broglie pour ces électrons :

$$E_c = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{h^2}{2m\lambda^2} \iff \boxed{\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mE_c}} = 0,17\,\mathrm{nm}}$$

L'expérience menée par Davisson et Germer confirme les hypothèses de de Broglie à double titre. Elle illustre parfaitement **le comportement ondulatoire de la matière** (des électrons en l'occurrence) et est en **très bon accord avec la formule proposée par de Broglie** pour le vecteur d'onde associé à ces particules.

Application 2 : TD : exercices 2 + 5.

3 Formalisme de la mécanique quantique

Situation : On considère une particule quantique, de masse m, astreinte à demeurer sur un axe (Ox), plongée dans un champ d'énergie potentielle de la forme $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$. Un tel système est appelé *oscillateur harmonique quantique*.

Le résultat d'une expérience unique consistant à mesurer la position x de la particule ou bien sa quantité de mouvement p_x est **aléatoire**. En revanche les probabilités d'obtenir telle ou telle mesure répondent à des lois mathématiques **déterministes**, que la théorie quantique permet d'obtenir, et qui sont entièrement contenue dans la **fonction d'onde** $\psi(x,t)$. On suppose que le système est dans un état stationnaire, c'est-à-dire un état décrit par une fonction d'onde telle que $|\psi(x,t)|^2$ ne dépend pas du temps. Dans cet état on suppose que l'énergie mécanique $E = \frac{p^2}{2m} + V(x)$ de la particule est **fixée** et n'est pas aléatoire.

1. La position x de la particule et sa quantité de mouvement p_x sont traitées comme des variables aléatoires continues, de moyennes $\langle x \rangle$ et $\langle p_x \rangle$. Justifier à l'aide d'un argument simple que pour cet oscillateur harmonique quantique $\langle x \rangle = 0$ et $\langle p_x \rangle = 0$.

2. On rappelle que l'écart-type ΔX d'une variable aléatoire X est définie par $(\Delta X)^2 = \langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2$. Rappeler l'inégalité de Heisenberg spatiale reliant Δx et Δp_x. En déduire que :

$$E \geq \frac{\hbar^2}{8m(\Delta x)^2} + \frac{1}{2}m\omega^2(\Delta x)^2$$

3. On pose $f : u \mapsto \frac{\hbar^2}{8mu} + \frac{1}{2}m\omega^2 u$ avec $u \in]0, +\infty[$. Étudier les variations de la fonction f et montrer que l'énergie d'un oscillateur harmonique quantique possède une borne inférieure $\mathscr{E}_0 = \beta \times \hbar\omega$ avec β un réel à déterminer.

On admet que l'état fondamental est décrit par la fonction d'onde complexe $\psi(x,t)$ dont le module vérifie $|\psi(x,t)| = \mathscr{N} \exp\left(-\dfrac{x^2}{a^2}\right)$.

4. Quel nom donne-t-on à $|\psi(x,t)|^2$? Quelle est la valeur de $\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x,t)|^2 \,\mathrm{d}x$? En déduire l'expression de $\mathscr{N}$.

On donne $\forall \alpha > 0$: $\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-\alpha u^2)\mathrm{d}u = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$.

► Exploiter les symétries du problème

1. La fonction $V(x)$ est paire, ce qui signifie que le champ d'énergie potentielle est **symétrique par rapport à O**. Il n'y a pas plus de raison de trouver la particule dans le domaine $x > 0$ que $x < 0$, de même qu'il n'y a pas plus de raison de mesurer une quantité de mouvement $p_x > 0$ que $p_x < 0$. On en déduit que $\langle x \rangle = 0$ et $\langle p_x \rangle = 0$.

► Mettre en œuvre l'inégalité de Heisenberg spatiale

Rappel de cours : pour un système quantique 1D situé sur un axe (Ox) la position x et la quantité de mouvement p_x sont des variables aléatoires continues dont les écart-types vérifient toujours l'inégalité suivante :

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

Cette relation, appelée **inégalité de Heisenberg spatiale**, signifie que plus la densité de probabilité de présence est fine et plus la densité de probabilité de quantité de mouvement est large (et inversement). C'est une propriété fondamentale de la nature, intrinsèquement quantique, qui implique **qu'indépendamment du procédé de mesurage** il est impossible de mesurer simultanément la position et la quantité de mouvement d'un système quantique avec une précision arbitraire.

2. Il est dit dans l'énoncé que l'énergie mécanique de l'oscillateur est fixée et non-aléatoire. Ainsi, pour cet oscillateur et pour un état stationnaire d'énergie E donnée, tout couple (x, p_x) doit vérifier :

$$\frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 = \text{Cste} = E$$

En passant à la valeur moyenne on obtient :

$$\frac{\langle p_x^2 \rangle}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \langle x^2 \rangle = E$$

D'après le résultat de la question 1 $(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle$ et $(\Delta p_x)^2 = \langle p_x^2 \rangle$. Selon l'inégalité de Heisenberg spatiale : $\Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2\Delta x}$. On peut donc écrire :

$$\boxed{E = \frac{(\Delta p_x)^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2(\Delta x)^2 \geq \frac{\hbar^2}{8m(\Delta x)^2} + \frac{1}{2}m\omega^2(\Delta x)^2}$$

► Étudier les variations d'une fonction

3. On détermine les éventuels extrema de f sur $]0, +\infty[$:

$$f'(u_0) = -\frac{\hbar^2}{8mu_0^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 = 0 \iff u_0 = \frac{\hbar}{2m\omega}$$

On trace le tableau de variations de f.

u	0		u_0		$+\infty$
$f'(u)$		$-$	0	$+$	
f		$\searrow$	$f(u_0)$	$\nearrow$	

Puisque $f(u_0)$ est un minorant de f alors d'après le résultat de la question 2 c'est également un minorant de E. Après calcul de $f(u_0)$ on conclut que l'énergie d'un oscillateur mécanique quantique est minorée par $\boxed{\mathscr{E}_0 = \dfrac{\hbar\omega}{2}}$.

► Mettre en œuvre la relation de normalisation d'une fonction d'onde

4. La quantité $|\psi(x,t)|^2$ porte le nom de **densité de probabilité de présence**. La probabilité de trouver la particule dans l'intervalle $I = [x_1, x_2]$ vaut $\mathscr{P}(I) = \int_{x_1}^{x_2} |\psi(x,t)|^2 \, \mathrm{d}x$.

La mesure de la position x de la particule donnant forcément un résultat sur $\mathbb{R}$, on a $\mathscr{P}(\mathbb{R}) = 1$, autrement dit :

$$\boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x,t)|^2 \, \mathrm{d}x = 1}$$

Cette égalité porte le nom de **relation de normalisation de la fonction de d'onde**. On s'en sert pour exprimer $\mathscr{N}$:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x,t)|^2 \, \mathrm{d}x = \mathscr{N}^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{2x^2}{a^2}\right) \mathrm{d}x = \mathscr{N}^2 \sqrt{\frac{\pi a^2}{2}} = 1 \iff \boxed{\mathscr{N} = \left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{\frac{1}{4}}}$$

Remarque : jusqu'ici nous avons parlé de "mesurer la position de la particule" et cela pourrait laisser croire qu'une particule quantique **est quelque part** mais que, pour une raison ou une autre, il est impossible pour l'expérimentateur de prévoir à l'avance où. En réalité on sait aujourd'hui que cette vision est erronée. Tant que l'on n'a pas mesuré la position d'une particule quantique celle-ci se trouve **dans une superposition continue de toutes les positions possibles dans l'univers**, chacune d'entre elles étant pondérée suivant des lois de probabilité déterministes. C'est cette notion de superposition d'états que Schrödinger souhaitait vulgariser avec sa fameuse expérience de pensée du chat.

Au cours des années 1920, une controverse est née entre Einstein et Bohr. Le premier était partisan d'une vision déterministe de la mécanique quantique (quitte à postuler l'existence de "variables cachées", inaccessibles mais qui en théorie permettraient de prévoir exactement le comportement de tout système quantique). Le second était convaincu de la nature intrinsèquement aléatoire des phénomènes quantiques, ce que l'on appelle aujourd'hui "l'interprétation de Copenhague" en référence à la nationalité de Niels Bohr. La controverse dura plusieurs dizaines d'années avant que le point de vue de Bohr finisse par l'emporter définitivement.

Pour revenir à l'inégalité de Heisenberg spatiale et à l'oscillateur harmonique quantique, il faut comprendre qu'à l'échelle microscopique la notion de trajectoire n'a plus de sens. Une particule n'est **pas** située en un lieu, à un instant donné, avec une certaine quantité de mouvement. Il faut plutôt considérer qu'elle est **délocalisée**, c'est-à-dire un peu partout à la fois. Ainsi pour un oscillateur harmonique quantique un état d'énergie E rigoureusement nulle (ce qui s'apparenterait à l'échelle macroscopique à un oscillateur au repos dans sa position d'équilibre) est impossible puisque cela impliquerait que l'on sait avec une précision parfaite que $x = 0$ et $p_x = 0$, ce qui est interdit par l'inégalité de Heisenberg spatiale.

On peut alors se demander pourquoi, lorsque l'on mesure sa position avec un capteur, on observe bien la particule **quelque part** et pas à plusieurs endroits à la fois. Pour le comprendre il faut admettre **qu'un expérimentateur qui souhaite obtenir une information sur un système quantique modifie obligatoirement l'état dans lequel il se trouve**. En interagissant avec un système quantique on modifie son état (on parle de "réduction de la fonction d'onde"). On peut donc déterminer l'endroit où se trouve une particule quantique, mais ce faisant **on détruit irréversiblement l'état quantique dans lequel elle se trouvait initialement**.

Application 3 : Un atome d'hydrogène est constitué d'un proton supposé fixe et d'un électron en mouvement autour du proton. La stabilité de l'atome est assurée par la force d'interaction électrostatique attractive qui s'exerce entre le proton et l'électron. On admet que l'inégalité de Heisenberg, appliquée à l'électron, s'écrit sous la forme :

$$\langle p^2 \rangle \geqslant \hbar^2 \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle^2$$

avec p la quantité de mouvement de l'électron et r la distance entre le proton et l'électron. Déterminer l'expression de l'énergie potentielle électrostatique $E_p(r)$ de l'électron. En utilisant l'inégalité de Heisenberg spatiale et en admettant que l'énergie mécanique de l'électron, dans un état stationnaire, est fixe et non-aléatoire, trouver un minorant de l'énergie de l'électron de l'atome d'hydrogène (vérifier que ce minorant est négatif). Faire l'application numérique en eV et commenter le résultat.

Données : constante de Planck : $h = 6,63 \cdot 10^{-34}\,\mathrm{J \cdot s}$, charge élémentaire : $e = 1,6 \cdot 10^{-19}\,\mathrm{C}$, masse de l'électron : $m = 9,1 \cdot 10^{-31}\,\mathrm{kg}$, $\frac{1}{4\pi\varepsilon_0} = 9,0 \cdot 10^9\,\mathrm{SI}$.

4 Modèle semi-classique de l'atome d'hydrogène et spectroscopie

Situation : au tournant du XX° siècle, plusieurs découvertes permirent de mieux comprendre la structure de la matière et notamment celle des atomes, dont l'existence était soupçonnée depuis longtemps.

- En 1897, Thomson découvrit l'électron,
- en 1906, Jean Perrin apporta la preuve de l'existence des atomes,
- en 1909, Rutherford découvrit le noyau et établit un premier modèle planétaire de l'atome.

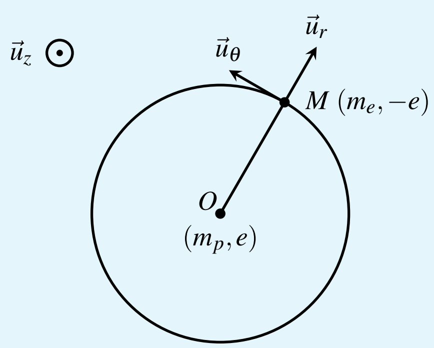
Cependant, le modèle de Rutherford ne permettait pas d'expliquer l'existence de raies dans le spectre d'émission des éléments chimiques. Le physicien danois Niels Bohr voulu construire un modèle d'atome d'hydrogène qui soit cohérent avec son spectre d'émission, dont on connaît la composition spectrale depuis 1888 et les travaux de Rydberg et Ritz. Bohr avait lu les travaux de Planck et d'Einstein sur la quantification de l'énergie et proposa en 1913 le modèle semi-classique suivant :

L'atome d'hydrogène est constitué d'un noyau supposé ponctuel et fixe, de charge électrique positive e, autour duquel un électron de charge $-e$ et de masse m_e suit une orbite circulaire.
Le moment cinétique $\vec{L}$ de l'électron par rapport au noyau est quantifié, il ne peut prendre que les valeurs suivantes :

$$\left\| \vec{L}_n \right\| = n\hbar$$

où $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ est la constante de Planck réduite et n est un entier naturel non nul appelé nombre quantique principal.

Dans ce problème on se propose d'analyser la cohérence du modèle de Bohr avec le spectre d'émission de l'atome d'hydrogène. On repère le mouvement de l'électron dans la base cylindrique $(\vec{u}_r, \vec{u}_\theta, \vec{u}_z)$ représentée sur le schéma ci-dessus. Par la suite on notera r_n, v_n et E_n le rayon, la vitesse et l'énergie mécanique de l'électron sur l'orbite de nombre quantique principal n.



Données : constante de Planck : $h = 6,63 \cdot 10^{-34}\,\mathrm{J \cdot s}$, charge élémentaire : $e = 1,60 \cdot 10^{-19}\,\mathrm{C}$, permittivité du vide $\varepsilon_0 = 8,85 \cdot 10^{-12}\,\mathrm{F \cdot m^{-1}}$, masse de l'électron : $m_e = 9,11 \times 10^{-31}\,\mathrm{kg}$, masse du proton : $m_p = 1,67 \cdot 10^{-27}\,\mathrm{kg}$, constante de gravitation universelle : $G = 6,67 \cdot 10^{-11}\,\mathrm{N \cdot m^2 \cdot kg^{-2}}$, célérité de la lumière dans le vide : $c = 3,00 \cdot 10^8\,\mathrm{m \cdot s^{-1}}$.

1. Justifier, à l'aide d'une estimation en ordre de grandeur, que le poids de l'électron et la force gravitationnelle exercée par le proton sont négligeables devant la force électrostatique exercée par le proton.

2. En appliquant le PFD à l'électron dans le référentiel lié au noyau supposé galiléen, déterminer v_n en fonction de r_n, e, ε_0 et m_e.

3. Exprimer E_n en fonction de r_n, e et ε_0.

4. Exprimer le moment cinétique $\left\|\vec{L}_n\right\|$ de l'électron en fonction de m, r_n et v_n.

5. Montrer que le rayon de l'orbite électronique est quantifié : $r_n = n^2 r_1$.
Déterminer littéralement puis numériquement r_1. Quelle peut être sa signification ?

6. Montrer que la vitesse de l'électron est quantifiée : $v_n = \dfrac{v_1}{n}$.
Déterminer littéralement puis numériquement v_1.

7. Montrer que l'énergie mécanique est quantifiée : $E_n = -\dfrac{E_1}{n^2}$.
Déterminer littéralement puis numériquement E_1, en eV.

8. En 1888 Johannes Rydberg propose une formule empirique pour déterminer toutes les longueurs d'onde du spectre d'émission de l'atome d'hydrogène :

$$\frac{1}{\lambda} = R_H\left(\frac{1}{p^2} - \frac{1}{q^2}\right)$$

avec p et $q > p$ deux entiers naturels non nuls et $R_H = 1,10 \cdot 10^7\,\mathrm{m}^{-1}$ la constante de Rydberg. Montrer que le modèle de Bohr est compatible avec la formule de Rydberg.

► **Effectuer des comparaisons en ordres de grandeur**

1. On évalue le poids de l'électron : $P = mg \sim 10^{-29}\,\mathrm{N}$. La dimension caractéristique d'un atome étant de l'ordre d'un dixième de nanomètre, on évalue la force gravitationnelle exercée par le proton : $F_g = \frac{Gm_pm_e}{r^2} \sim 10^{-48}\,\mathrm{N}$ puis la force électrostatique : $F_e = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2} \sim 10^{-8}\,\mathrm{N}$. Par comparaison :

$$\frac{P}{F_e} \sim 10^{-21} \qquad \text{et} \qquad \frac{F_g}{F_e} \sim 10^{-40}$$

Le poids et la force gravitationnelle du proton sont négligeables devant la force électrostatique.

► **Mettre en œuvre le PFD**

2. On applique le principe fondamental de la dynamique à l'électron dans le référentiel lié au noyau supposé galiléen :

$$m_e\vec{a} = \vec{F}_e = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_n^2}\vec{u}_r$$

Le vecteur accélération s'écrit $\vec{a} = -\dfrac{v_n^2}{r_n}\vec{u}_r + \dfrac{\mathrm{d}v_n}{\mathrm{d}t}\vec{u}_\theta$. La projection du PFD sur $\vec{u}_\theta$ indique que le mouvement de l'électron est **uniforme**. On trouve l'expression de v_n en projetant sur $\vec{u}_r$:

$$-m_e\frac{v_n^2}{r_n} = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_n^2} \iff \boxed{v_n = \frac{e}{\sqrt{4\pi\varepsilon_0 m_e r_n}}}$$

3. L'énergie potentielle associée à la force électrostatique vaut $E_p(r) = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$. L'énergie mécanique de l'électron s'écrit :

$$E_n = \frac{1}{2}m_e v_n^2 - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_n}$$

En utilisant le résultat de la question précédente on obtient :

$$E_n = \frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 r_n} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_n} \iff \boxed{E_n = -\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 r_n}}$$

4. L'électron est en orbite circulaire donc $\vec{v} = v_n \vec{u}_\theta$. Le moment cinétique de l'électron vaut :

$$\vec{L}_n = m_e r_n \vec{u}_r \wedge v_n \vec{u}_\theta = m_e r_n v_n \vec{u}_z \implies \boxed{\|\vec{L}_n\| = m_e r_n v_n}$$

5. On utilise l'hypothèse de Bohr et le résultat de la question 2 :

$$\|\vec{L}_n\| = n\hbar = m_e r_n v_n = e\sqrt{\frac{m_e r_n}{4\pi\varepsilon_0}} \iff \boxed{r_n = n^2 \frac{4\pi\varepsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2}}$$

On identifie $\boxed{r_1 = \frac{4\pi\varepsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2} = 53\,\mathrm{pm}}$. Cette valeur correspond au **rayon de l'atome d'hydrogène dans son état fondamental**.

6. Á partir du résultat précédent on obtient immédiatement :

$$v_n = \frac{e}{\sqrt{4\pi\varepsilon_0 m_e r_n}} \iff \boxed{v_n = \frac{1}{n} \cdot \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 \hbar}}$$

On identifie $\boxed{v_1 = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 \hbar} = 2,1 \cdot 10^6\,\mathrm{m \cdot s^{-1}}}$.

Cette valeur, plus de cent fois inférieure à c, justifie qu'un traitement non-relativiste de l'électron est pertinent.

7. L'énergie mécanique s'obtient elle aussi rapidement à partir du résultat de la question 3 :

$$E_n = -\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 r_n} \iff \boxed{E_n = -\frac{1}{n^2} \cdot \frac{m_e e^4}{32\pi^2 \varepsilon_0^2 \hbar^2}}$$

On identifie $\boxed{E_1 = \frac{m_e e^4}{32\pi^2 \varepsilon_0^2 \hbar^2} = 13,6\,\mathrm{eV}}$.

► Déterminer la longueur d'onde associée à une transition électronique

8. Le résultat précédent montre que l'énergie mécanique est une fonction croissante de n. Le niveau $n = 1$ correspond à l'état fondamental de l'atome d'hydrogène. On considère la transition électronique de l'atome d'hydrogène d'un état excité caractérisé par l'entier q vers un état de plus basse énergie caractérisé par l'entier $p < q$. Elle s'accompagne de l'émission d'un photon d'énergie $E = E_q - E_p$. On détermine la longueur d'onde associée grâce à la loi de Planck-Einstein :

$$E_q - E_p = E_1 \left(\frac{1}{p^2} - \frac{1}{q^2}\right) = \frac{hc}{\lambda} \iff \boxed{\frac{1}{\lambda} = \frac{E_1}{hc}\left(\frac{1}{p^2} - \frac{1}{q^2}\right)}$$

La relation obtenue est cohérente avec la formule de Rydberg. On vérifie que la valeur théorique de la constante multiplicative est en accord celle proposée par Rydberg et issue de l'expérience :

$$\boxed{R_H = \frac{E_1}{hc} = 1,09 \cdot 10^7\,\mathrm{m^{-1}}}$$

Le modèle semi-classique de Bohr est compatible avec le spectre d'émission de l'atome d'hydrogène.

Remarque : Bohr fut le premier à introduire une hypothèse quantique pour modéliser le comportement d'un atome. À une époque où la théorie quantique n'avait pas encore de fondements mathématiques solides (il faudra attendre les années 1920 et les travaux de Schrödinger, Heisenberg, Pauli, Dirac, Born entre autres), il engagea la réflexion sur le bon chemin, celui d'une théorie quantique de la matière. Le modèle de Bohr possède un défaut majeur : un électron en mouvement circulaire autour du noyau devrait, selon la théorie de l'électromagnétisme de Maxwell, perdre continuellement de l'énergie par rayonnement, et ainsi suivre un mouvement en spirale l'amenant *in fine* à s'effondrer sur le noyau ! Bohr, parmi d'autres, était conscient de ce problème. Il fallut attendre quelques années pour que l'idée de trajectoires suivies par l'électron soit abandonnée et remplacée par la notion d'états stationnaires quantiques décrit par des fonctions d'ondes particulières appelées **orbitales atomiques**.

Application 4 : TD : exercice 3.

5 Puits de potentiel infini

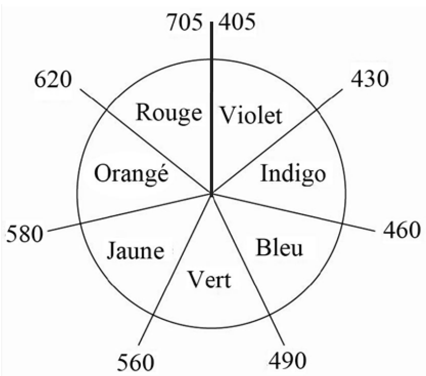
Situation : un traitement thermique permet de donner à certaines pierres cristallines un éclat vert les faisant passer pour des émeraudes. Pour l'expliquer on suppose que les électrons de masse m associés à l'absorption du cristal dans le visible sont plongés dans un puits de potentiel infini de largeur a. L'énergie potentielle au fond du puits est prise nulle : $V = 0$ pour $x \in [0, a]$.

Données : constante de Planck : $h = 6{,}63 \cdot 10^{-34}\,\mathrm{J \cdot s}$, masse de l'électron : $m = 9{,}11 \cdot 10^{-31}\,\mathrm{kg}$, célérité de la lumière dans le vide : $c = 3{,}00 \cdot 10^{8}\,\mathrm{m \cdot s^{-1}}$.

1. Par analogie avec une corde vibrante de longueur a démontrer que l'énergie de l'électron est quantifiée. Exprimer l'énergie E_1 associée à l'état fondamental et l'énergie E_2 associée au premier niveau excité. Faire l'application numérique en eV avec $a = 633\,\mathrm{pm}$.

2. À l'issue d'un traitement thermique, le puits dans lequel se trouve l'électron est élargi à la valeur $a' = 2^{1/3}a$. Calculer les nouveaux niveaux d'énergie E_1' et E_2'.

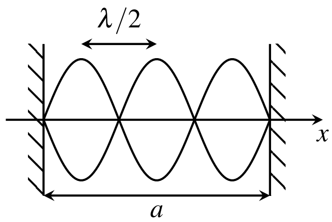
3. Si la lumière blanche pénètre dans le cristal, quelle est la longueur d'onde de la lumière absorbée et la couleur de la lumière transmise dans le cas du cristal modifié ? On pourra s'aider de la roue des couleurs ci-dessous.



Les longueurs d'onde sont indiquées en nm.
Chaque couleur est diamétralement opposée à sa couleur complémentaire.
Du blanc auquel on soustrait une couleur donne sa couleur complémentaire.

► **Déterminer les niveaux d'énergie dans un puits infini par analogie avec la corde vibrante**

1. La vibration d'une corde fixée en ses extrémités est une **onde stationnaire** dont les fréquences sont quantifiées à cause des **conditions limites** imposées aux deux extrémités (en l'occurrence la présence de deux **nœuds** de vibration). Dans le cas particulier d'une onde stationnaire sinusoïdale il a été vu cette année que les nœuds de vibration sont régulièrement répartis le longe de l'axe (Ox) et distants les uns des autres **d'une demi-longueur d'onde**, chaque intervalle étant appelé un **fuseau** (voir figure ci-contre).



Les conditions limites imposent que les deux extrémités de la corde sont séparées **par un nombre entier de fuseaux**, ce qui se traduit mathématiquement par :

$$a = n\frac{\lambda}{2} \quad , \quad n \in \mathbb{N}^\star$$

Un électron plongé dans un puits de potentiel infini est caractérisé par une fonction d'onde qui doit respecter des conditions limites similaires à celle d'une corde vibrante (il est impossible que l'énergie potentielle de la particule devienne infinie donc la fonction d'onde doit s'annuler sur les bords du puits). Par analogie avec la corde vibrante on suppose que **la longueur d'onde de de Broglie de l'électron vérifie une relation de quantification similaire à celle de la corde** :

$$a = n\frac{\lambda}{2} \quad \text{avec} \quad \lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE_c}}$$

où E_c est l'énergie cinétique de l'électron. L'énergie potentielle est supposée nulle à l'intérieur du puits donc $E_c = E$, ce qui permet de conclure :

$$a = n\frac{h}{2\sqrt{2mE_n}} \iff \boxed{E_n = n^2\frac{h^2}{8ma^2}}$$

On détermine littéralement et numériquement l'énergie du niveau fondamental $(n = 1)$ et celle du premier niveau excité $(n = 2)$:

$$\boxed{E_1 = \frac{h^2}{8ma^2} = 0,941\,\text{eV}} \qquad \text{et} \qquad \boxed{E_2 = 4E_1 = 3,76\,\text{eV}}$$

2. On reprend les calculs précédents en remplaçant a par a' :

$$\boxed{E_1' = 2^{-2/3}E_1 = 0,593\,\text{eV}} \qquad \text{et} \qquad \boxed{E_2' = 4E_1' = 2,37\,\text{eV}}$$

► **Déterminer la longueur d'onde associée à une transition électronique**

3. On considère la transition électronique du niveau fondamental vers le premier niveau excité, correspondant à **l'absorption** d'un photon visible. La longueur d'onde associée vérifie :

$$E_{\text{photon}} = E_2 - E_1 = \frac{hc}{\lambda} \iff \boxed{\lambda = \frac{hc}{E_2 - E_1} = 699\,\text{nm}}$$

Le cristal modifié absorbe dans le rouge, et plus particulièrement pour une longueur d'onde telle que la couleur complémentaire est le vert. Éclairé en lumière blanche **le cristal apparaît vert**.

Application 5 : TD : exercice 6.

SOLUTIONS

Application 3

$\mathscr{E}_0 = -\dfrac{m_e e^4}{32\pi^2 \varepsilon_0^2 \hbar^2} = -13,6\,\text{eV}.$