MQ1-TD

Introduction à la mécanique quantique

MQ1 — 01 Petites questions indépendantes

1) Que représente la fonction d'onde pour une particule ? Pour une particule libre, quels sont les états stationnaires ? Sont-il « physiques » ? Comment peut-on alors décrire une particule libre ?

2) Donner l'inégalité de Heisenberg. L'utiliser pour montrer qu'il faut abandonner la notion de trajectoire dans le monde microscopique.

3) Donner l'équation de Schrödinger pour une particule libre. Obtenir sa relation de dispersion. Donner les relations de De Broglie. Que traduit en fait la relation de dispersion ?

4) Dans l'équation de Schrödinger, que représente $V(x,\, t)$? Écrire explicitement l'équation de Schrödinger pour une particule dans un potentiel harmonique $V(x) = k\, x^2/2$.

5) Démontrer l'équation de Schrödinger pour un état stationnaire.

6) Décrire une expérience d'interférence d'électrons. Fondamentalement, à quoi sont dues ces interférences ? Dresser un tableau d'analogie entre ces interférences de matière et les interférences en optique. Malgré ces analogies, il y a une différence marquante entre les interférences de matière et celles d'optique. Laquelle ? *Réponse : la figure d'interférence se construit électron par électron, c'est-à-dire par impacts successifs à l'écran.*

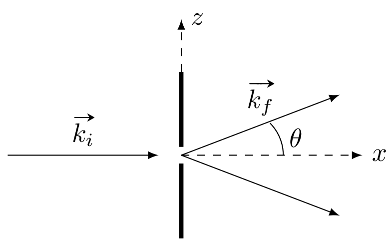
Remarque : Pour votre culture, les interférences de matière ont été observées en laboratoire depuis les années 1980 avec de nombreuses particules : électrons, neutrons, photons (en quoi est-ce différent des interférences en optique ?), mais aussi avec le fullérène (la molécule C_{60} en forme de ballon de football).

MQ1 — 02 Diffraction d'une particule quantique

On considère une particule quantique, représentée par une OPPH pour simplifier, de la forme

$$\Psi(x\, t) = \Psi_0 \exp\Big(\mathrm{i}(k\, x - \omega\, t)\Big)$$

Cette particule arrive sur une fente de largeur a selon la direction z, et infinie dans la direction y.



1) En raisonnant avec les inégalités d'Heisenberg en ordre de grandeur, que vaut k_z après la fente ?

2) Montrer alors que l'angle de diffraction θ vérifie $\sin\theta \approx \lambda/a$ à un facteur numérique près. Commenter en comparant à la diffraction des ondes lumineuses.

Remarque : tous les raisonnements construits sur une utilisation en égalité de l'inégalité d'Heisenberg ne sont en aucun cas rigoureux et doivent être vus comme des illustrations qualitatives.

MQ1 — 03 Évolution d'un état non stationnaire

On considère deux états stationnaires pour une particule

$$\Psi_1(x,\, t) = \varphi_1(x)\, \exp\left(-\frac{\mathrm{i}\, E_1\, t}{\hbar}\right) \qquad \text{et} \qquad \Psi_2(x,\, t) = \varphi_2(x)\, \exp\left(-\frac{\mathrm{i}\, E_2\, t}{\hbar}\right)$$

1) Pour une particule libre, déterminer φ_1^{libre} et φ_2^{libre}. Que sont alors Ψ_1^{libre} et Ψ_2^{libre} ? Pour la suite on se place dans un cas plus général, et on ne précise plus les expressions de φ_1 et φ_2.

2) Si la particule est dans l'état Ψ_1, quelle est sa densité de probabilité de présence en x ? Commenter.

3) La particule est maintenant dans l'état superposé $\Psi_1 + \Psi_2$ (on ne préoccupe pas de la normalisation de cette fonction d'onde). Quelle est sa densité de probabilité de présence en x ? On supposera pour cette question que φ_1 et φ_2 sont réelles. Commenter.

MQ1 — 04 Atome de Bohr

Avant la naissance de la mécanique quantique, Bohr a proposé un modèle empirique de la structure de l'atome (1913) pour expliquer les spectres d'émission observés. Son modèle, l'atome de Bohr, correspond au modèle planétaire d'un électron en orbite autour du noyau atomique, pour lequel on suppose que le moment cinétique est quantifié

$$L = n\,\hbar \qquad \text{avec} \qquad n \in \mathbb{N}^*$$

1) On considère l'atome d'hydrogène. En appliquant le principe fondamental de la dynamique à l'électron, obtenir sa vitesse sur l'orbite de rayon r. On supposera sa trajectoire circulaire uniforme.

2) En déduire son moment cinétique sur l'orbite de rayon r. En utilisant la condition de Bohr $L = n\,\hbar$, trouver les rayons des orbites possibles r_n pour l'électron. Le rayon r_1 (souvent noté r_B ou aussi a_0) est le **rayon de Bohr**. Évaluer numériquement r_1 et v_1, la vitesse de l'électron sur l'orbite $n = 1$. L'électron est-il relativiste ?

3) Écrire l'énergie de l'électron pour l'orbite de rayon r_n. Retrouver alors l'expression des niveaux d'énergie de l'atome d'hydrogène

$$E_n = -\frac{E_0}{n^2}$$

Calculer numériquement E_0.

4) Quelle est la longueur d'onde du photon émis lors de la désexcitation de l'atome, du niveau $m > n$ vers le niveau n ? En déduire la formule de Rydberg

$$\frac{1}{\lambda_{nm}} = R_{\mathrm{H}} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)$$

et identifier la **constante de Rydberg** R_{H}.

5) Calculer les longueurs d'ondes émises lors des désexcitations de $m = 6$, $m = 5$, $m = 4$ et $m = 3$ vers $n = 2$. Commenter.

6) Malgré le caractère empirique du modèle de Bohr, il se trouve que tous les résultats obtenus précédemment sont corrects. Nous souhaitons néanmoins dans les questions suivantes montrer que ce modèle n'est pas cohérent avec les principes de la mécanique quantique. Le modèle de Bohr repose en effet sur le modèle planétaire et suppose que l'électron a une trajectoire (circulaire) autour du noyau. Montrer pour commencer que sur la première orbite r_1, on a $p_1 = \hbar/r_1$. Afin de pouvoir parler de trajectoire de l'électron sur la première orbite, quelles conditions doivent satisfaire Δr et Δp, les extensions quantiques du paquet d'onde représentant l'électron ? Montrer que ces conditions sont incompatibles avec l'inégalité d'Heisenberg. Conclure.

MQ1 — 05 Oscillateur harmonique quantique

On considère une particule quantique, de masse m, soumise à une énergie potentielle de la forme

$$V(x) = \frac{1}{2}\,m\,\omega^2\,x^2$$

La fonction d'onde d'un état stationnaire d'énergie E s'écrit $\qquad \Psi(x,\,t) = \varphi(x)\,\exp\left(-\frac{\mathrm{i}\,E\,t}{\hbar}\right)$.

1) Écrire l'équation de Schrödinger vérifiée par l'état stationnaire.

2) La résolution de cette équation conduit à une solution de la forme $\varphi(x) = \mathcal{N}\,\exp\left(-\frac{x^2}{a^2}\right)$. Déterminer $\mathcal{N}$.

3) Représenter l'allure de la densité de probabilité de présence de la particule. Sans faire de calculs, dire quelle est sa position moyenne.

4) Déterminer l'énergie E et la constante a en fonction de $\hbar$, m et ω.

5) Déterminer l'écart quadratique moyen $\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$ de l'amplitude de probabilité de présence de la particule. Dans cette expression on définit

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2\,|\varphi(x)|^2\,\mathrm{d}x \qquad \text{et} \qquad \langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x\,|\varphi(x)|^2\,\mathrm{d}x$$

Données : On a $\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\alpha\,u^2\right)\,\mathrm{d}u = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$ et $\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} u^2\,\exp\left(-\alpha\,u^2\right)\,\mathrm{d}u = \frac{1}{2\,\alpha}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$.

MQ1 — 09 Orbitale atomique $1s$ (CCINP PC 2019) ☐ ☐ ☐ ☐ ☐

On considère l'électron de l'atome d'hydrogène, plongé dans le potentiel coulombien

$$V(\vec{r}) = -\frac{e^2}{4\,\pi\,\varepsilon_0\,r}$$

En régime stationnaire, la fonction d'onde $\varphi(\vec{r})$ vérifie l'équation de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2\,m}\Delta\varphi(\vec{r}) + V(\vec{r})\,\varphi(\vec{r}) = E\,\varphi(\vec{r})$$

avec E l'énergie de l'état stationnaire et Δ le laplacien.

1) Par opposition avec les principes de la physique classique, comment est décrit le comportement des particules à l'échelle microscopique en physique quantique ? Une réponse en une phrase est attendue.

2) Que représente physiquement, pour l'électron de l'atome d'hydrogène, la norme au carré de la fonction d'onde associée $|\varphi(\vec{r})|^2$?

3) Concernant l'orbitale $1s$, la résolution de l'équation de Schrödinger conduit à

$$\varphi_{1s}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi\,r_0^3}}\,\exp\left(-\frac{r}{r_0}\right) \qquad \text{et} \qquad |\varphi_{1s}(\vec{r})|^2 = \frac{1}{\pi\,r_0^3}\,\exp\left(-\frac{2\,r}{r_0}\right)$$

avec r_0 le rayon de Bohr. Nommer puis expliciter la propriété qui permet de justifier dans l'expression de $|\varphi_{1s}(\vec{r})|^2$ la provenance du coefficient $1/(\pi\,r_0^3)$.

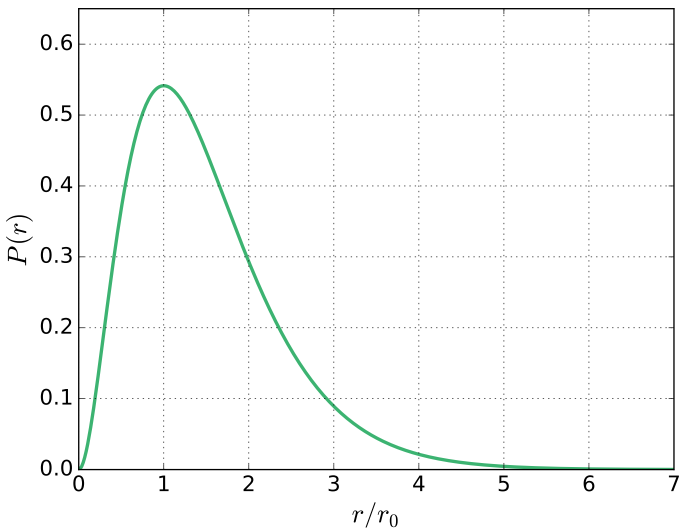
4) À partir de l'équation de Schrödinger, établir l'expression de l'énergie E_{1s}, correspondant à l'énergie d'un état stationnaire de l'électron lié à l'orbitale $1s$ de l'atome d'hydrogène, en fonction de ε_0, h, m_e et e. On donne le rayon de Bohr $r_0 = 4\,\pi\,\varepsilon_0\,\hbar^2/(m_e\,e^2)$ et l'expression du laplacien en coordonnées sphériques

$$\Delta f(r) = \frac{1}{r^2}\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2\,\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}r}\right)$$

5) La densité de probabilité de présence d'un électron sur une sphère de rayon r, encore appelée densité radiale de probabilité, est notée $P(r)$. Dans le cas de l'orbitale $1s$, montrer que la densité radiale de probabilité $P(r)$ de trouver l'électron à une distance r du noyau est

$$P(r) = 4\,\frac{r^2}{r_0^3}\,\exp\left(-\frac{2\,r}{r_0}\right)$$

6) La courbe suivante représente $P(r)$ pour l'électron $1s$ de l'atome d'hydrogène. On montre que la distance moyenne entre l'électron et le noyau est $\langle r\rangle = 3\,r_0\,/\,2$. En vous appuyant sur la figure, expliquer pourquoi cette distance est différente du maximum de $P(r)$.



MQ1 — 10 Spin et expérience de Stern et Gerlach (Approche documentaire)

I) Quelques notions sur le spin

Deux types de moments cinétiques, et moments magnétiques associés

Un électron sur une orbite autour d'un noyau atomique possède un moment cinétique $\vec{L}$, dit **orbital**. Ce moment cinétique est relié à un moment magnétique par le rapport gyromagnétique de l'électron

$$\vec{\mathcal{M}} = \gamma_e \vec{L} \qquad \text{avec} \qquad \gamma_e = -\frac{e}{2\,m_e}$$

La mécanique quantique montre en fait que l'électron possède aussi un moment cinétique **intrinsèque** $\vec{S}$ appelé **spin**, sans aucun équivalent classique (et en aucun cas une rotation de l'électron sur lui-même comme on peut parfois le lire, l'électron étant ponctuel). Ce moment cinétique de spin correspond lui aussi à un moment magnétique $\vec{\mu}$, avec un facteur gyromagnétique modifié

$$\vec{\mu} = g_e\,\gamma_e\,\vec{S}$$

où la correction g_e sans dimension est appelée **facteur de Landé** et vaut $g_e \approx 2$ pour l'électron. On peut ajouter que le proton et le neutron possèdent aussi un spin, avec un rapport gyromagnétique $\gamma_p = e/(2\,m_p)$ et des facteurs de Landé $g_p = 5,59$ et $g_n = -3,83$.

Quantification du moment cinétique orbital

Par ailleurs, la mécanique quantique montre aussi que pour un électron sur l'orbite n, la projection du moment cinétique orbital sur un axe quelconque z ne peut prendre que les valeurs

$$L_z = m_\ell\,\hbar \qquad \text{avec} \qquad m_\ell = -\ell, -\ell+1, \cdots, \ell-1, \ell$$

où ℓ peut prendre plusieurs valeurs $\ell = 0, \cdots, n-1$.

Remarque. On fera le lien avec la chimie : lorsque $n = 1$, alors $\ell = 0$ (orbitales $1s$) et il y a un seul état possible $m_\ell = 0$. Lorsque $n = 2$, alors $\ell = 0$ (orbitales $2s$) ou $\ell = 1$ (orbitales $2p$). Dans le second cas il y a trois états possibles ($m_\ell = -1$, 0 ou 1), qui donnent lieu aux trois orbitales $2p_x$, $2p_y$ et $2p_z$, etc...

Quantification du moment cinétique intrinsèque

Enfin, la mécanique quantique (toujours elle), nous apprend que la projection du moment cinétique de spin de l'électron sur un axe quelconque ne peut prendre que deux valeurs

$$S_z = m_s\hbar \qquad \text{avec} \qquad m_s = \pm\frac{1}{2}$$

Pour cette raison on dit souvent que l'électron possède un « spin 1/2 ».

Remarque. Finalement la description de l'électron de l'atome d'hydrogène nécessite 4 nombres : n pour le niveau d'énergie, l pour l'orbitale (s, p, d,...), m_l pour l'occupation de l'orbitale et m_s pour le spin.

II) Expérience de Stern et Gerlach

En 1922, Stern et Gerlach ont mesuré les valeurs du moment magnétique des atomes d'argent avec le dispositif représenté ci-dessous.

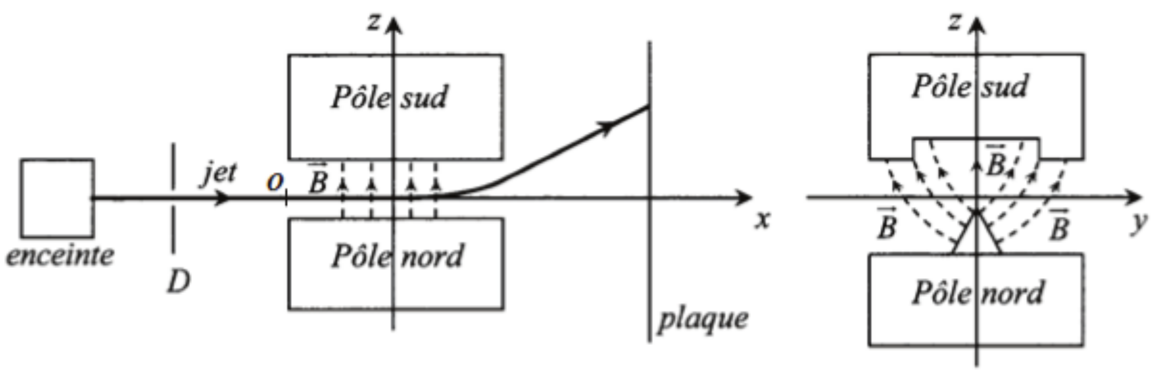


FIGURE 1 - **Dispositif de Stern et Gerlach.**

Les atomes d'argent sont envoyés depuis une enceinte vers un dispositif créant un champ magnétique **non homogène**, caractérisé par son gradient $\dfrac{\partial B_z}{\partial z} \neq 0$. La trajectoire des atomes est alors déviée.

1) Pourquoi utilise-t-on un champ magnétique non homogène ? Expliquer les deux figures de gauche ci dessous, en vous reposant sur un modèle **classique** de l'atome d'argent. Comment peut-on remonter à la valeur du moment magnétique (sans mener les calculs) ?

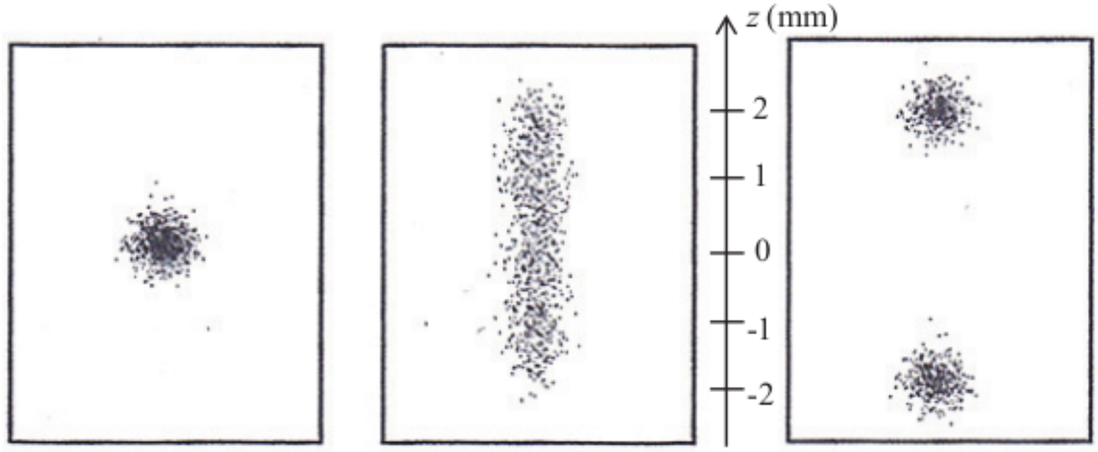


FIGURE 2 - **Observation à l'écran des impacts des atomes d'argent.** Dans trois cas : (à gauche) résultat sans champ magnétique ; (au milieu) schéma du résultat attendu classiquement, en présence du champ magnétique ; (à droite) résultat réellement obtenu en présence du champ.

On introduit maintenant une description quantique. Les atomes d'argent ont pour configuration électronique $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 4d^{10} 5s^1$ (avec une exception à la règle de Klechkowski). Seul l'électron $5s$ est responsable des propriétés magnétiques de l'atome (tous les autres sont associés par paires et leurs contributions s'annulent deux à deux).

2) Quel est le moment cinétique orbital de l'atome d'argent ? Quel est le moment magnétique associé ?

3) En prenant en compte seulement le moment cinétique orbital, quel résultat devrait-on observer à l'écran ?

4) En ajoutant le spin dans notre réflexion, expliquer pourquoi on observe en réalité la figure de droite. Pourquoi est-on sûr qu'il ne s'agit pas de l'effet d'un moment cinétique orbital ?

Remarque. Cette expérience est l'étude historique qui a prouvé l'existence du spin (prix Nobel pour Stern en 1943). Notons que sa réalisation date de 1922, plusieurs années avant l'avènement de la mécanique quantique.

MQ1 — 06 Évolution d'un paquet d'ondes gaussien

(Discussion du caractère dispersif de l'équation de Schrödinger, étalement du paquet d'onde.)

L'étude rigoureuse de l'étalement d'un paquet d'onde étant lourde mathématiquement, on propose ici un calcul semi-quantitatif moins fastidieux.

1) On considère une particule quantique libre de masse m. Quelle est la relation de dispersion correspondante ?

2) La particule est représentée par un paquet d'onde d'extension Δk en vecteur d'onde, autour d'une valeur centrale k_0. Ce paquet d'onde a une extension spatiale Δx_0 au temps $t = 0$. Donner la vitesse de groupe $v_{g,0}$ du paquet d'onde.

3) Qualitativement, si l'extension en k est Δk, quelle est l'extension Δv_g autour de $v_{g,0}$?

4) En ordre de grandeur, en déduire l'extension saptiale Δx du paquet d'onde à l'instant t. Représenter l'évolution du paquet d'onde sur un schéma.

MQ1 — 07 Stabilité de l'atome d'hydrogène

La mécanique classique montre qu'un électron accéléré rayonne (et donc perd) de l'énergie. Un électron en orbite autour d'un noyau atomique n'est donc pas stable classiquement, l'électron finissant toujours par s'effondrer sur le noyau. Un petit raisonnement qualitatif, basé sur l'inégalité de Heisenberg, montre que la mécanique quantique résout ce problème.

1) Écrire l'énergie totale E d'un électron autour d'un noyau d'hydrogène, en fonction de son impulsion p et du rayon de son orbite r. Pourquoi considère-t-on tout le temps le noyau d'hydrogène dans nos exercices ?

2) En supposant que l'extension spatiale de la fonction d'onde est $\Delta r = r$, et que l'extension en impulsion est $\Delta p = p$, on montre avec l'inégalité de Heisenberg en ordre de grandeur $\Delta r \, \Delta p \geqslant \hbar$ que

$$E \geqslant E_{\text{min}} = \frac{\hbar^2}{2\,m\,(\Delta r)^2} - \frac{e^2}{4\,\pi\,\varepsilon_0\,\Delta r}$$

Calculer alors le rayon a_0 de l'orbite de plus basse énergie et conclure.

Remarque : tous les raisonnements construits sur une identification entre r et Δr (ou p et Δp) dans l'inégalité d'Heisenberg ne sont en aucun cas rigoureux et doivent être vus comme des illustrations qualitatives.

MQ1 — 08 Neutron confiné dans une boîte (Résolution de problème)

1) Un neutron est emprisonné dans une boîte cubique de taille ℓ. Quelle pression exerce-t-il sur les parois, en ordre de grandeur ?