

T.D. de Mécanique Quantique

Série n° 2

Exercice 1: Loi de Balmer dans le modèle de Bohr

1/- Donner en introduisant la règle des quanta de Bohr les rayons r_n des orbites quantifiées de l'électron dans l'atome d'hydrogène.

2/- Calculer les niveaux d'énergie quantifiées E_n de l'atome d'hydrogène. On admettra que l'énergie potentielle électrostatique de l'électron s'annule lorsque celui-ci devient suffisamment loin du noyau.

3/- En déduire la valeur théorique de la constante de Rydberg de la loi de Balmer. La comparer à sa valeur empirique, conclusion.

On donne la masse de l'électron $m_e = 0.9 \cdot 10^{-30}$ kg, sa charge électrique $e = -1.6 \cdot 10^{-19}$ C, la constante de Coulomb $K = 9 \cdot 10^9$ Nm²C⁻², la constante de Planck $h = 6.62 \cdot 10^{-34}$ Js et la valeur empirique de la constante de Rydberg $R = 10967800$ m⁻¹.

Exercice 2: Les ondes de matière de Louis de Broglie

1/- Considérons un grain de poussière de diamètre $d = 1 \mu$, de masse $m = 10^{-13}$ g et animé d'un mouvement de vitesse moyenne $v = 3$ mm/s.

Quelles sont la longueur d'onde λ et la fréquence ν associée à cette particule ? Dire si le traitement physique de cette particule peut relever de la mécanique classique.

2/- Mêmes questions pour un véhicule de masse $m = 3$ Tonnes, de longueur $l = 6$ m et roulant à une vitesse $v = 60$ km/h.

3/- En considérant les électrons accélérés sous l'effet d'une tension électrique continue $V = 100$ Volts comme des particules non-relativistes, calculer la vitesse qu'acquiert chacun d'eux. Calculer la longueur λ de l'onde de Broglie associée au mouvement de ces électrons. Conclusion ?

Exercice III: Vitesse de groupe - vitesse de phase - loi de dispersion des ondes de de Broglie:

1/- Une onde plane électromagnétique de fréquence ν se propageant dans le vide est donnée par le champ électrique $E(t,x)$ qui s'écrit dans les relations complexes :

$$E(t,x) = E_0 \exp(i(kx - \omega t)); \quad \text{avec : } k = \frac{2\pi}{\lambda}; \quad \omega = 2\pi\nu \quad \text{et} \quad \nu = \frac{c}{\lambda}$$

Déterminer l'onde plane lumineuse en termes de l'impulsion p et de l'énergie E du photon; puis en fonction de p seul.

Calculer la vitesse de groupe V_g , et la vitesse de phase V_ϕ de cette onde, conclusion.

Rappeler l'expression de l'intensité I de cette onde, l'interpréter en termes quantiques.

2/- De même, l'onde plane monochromatique de De Broglie associée à une particule de mouvement peut être représentée par la fonction d'onde : $\psi(t,x) = A \exp(i(kx - \omega t))$ où $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ est la norme du vecteur d'onde et $\omega = 2\pi\nu$ la pulsation de l'onde de matière.

Etablir une relation entre la fréquence ν et la longueur d'onde λ de cette onde de matière.

Déterminer l'onde plane de matière en fonction de l'impulsion p et de l'énergie E de la particule dans le cas général et en fonction de p seul dans la cas d'une particule libre.

Calculer, dans ce dernier cas la vitesse de groupe et celle de phase; conclusion.

Calculer l'intensité de cette onde et l'interpréter physiquement.

3/- Pour une particule relativiste, montrer que la vitesse de groupe V_g de l'onde de matière associée coïncide avec la vitesse de la particule.

Montrer que la vitesse de phase V_ϕ de cette onde coïncide avec la célérité de propagation de celle-ci et qu'elle n'a pas de réalité physique (on vérifiera l'égalité $V_g V_\phi = C^2$)

Calculer V_g et V_ϕ en termes de la fréquence ν , ou d'une façon équivalente en fonction de l'énergie E . En déduire la loi de dispersion pour l'onde associée à cette particule (on calculera l'indice de réfraction relatif aux ondes de matière, défini par $n = C/V_\phi$ en fonction de ν).
Conclusion.

Série n°2
Théorie quantique de la matière (1)

I. Loi de Balmer dans le modèle de Bohr.

1) La règle des quanta de Bohr représente la quantification du moment cinétique

$$\vec{J} = \vec{r} \wedge m\vec{v} = r \wedge m\vec{v} = n\hbar$$

pour un mouvement circulaire on a:
 $r \times mv = n\hbar \Rightarrow r = \frac{n\hbar}{mv}$ (1)

Or pour un atome d'hydrogène si on applique le principe fondamental de la dynamique et sachant que seule la force d'interaction coulombienne agit sur le système on a:

$$\sum \vec{F}_{ext} = \vec{F} = m\vec{\sigma}$$

$$\Rightarrow -F = -m\gamma_n \Leftrightarrow \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2} = \frac{mv^2}{r} \quad (*)$$

$$\Rightarrow \frac{K e^2}{m v r} = m v^2 \quad (2)$$

d'où (1) $\Rightarrow r_n = \frac{n^2 \hbar^2}{m K e^2}$ \Rightarrow les orbites des électrons dans un atome (ici l'hydrogène) sont quantifiées.

2) L'énergie totale $E = E_c + E_p = \frac{1}{2}mv^2 + E_p$ $\vec{F} = \begin{cases} \vec{F}_c \\ \vec{F}_p \end{cases} = -\vec{F}$

or la force coulombienne dérive du potentiel:
 $\vec{F} = -\text{grad } E_p \Rightarrow -F = -\frac{\partial E_p}{\partial r} = -\frac{Ke^2}{r^2}$

soit $E_p = -\frac{Ke^2}{r} + cte$

Or par énoncé $E_p(\infty) = 0 \Rightarrow cte = 0$

$$\Rightarrow E = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{Ke^2}{r}$$

sachant que: $mv^2 = \frac{Ke^2}{r}$ d'après (*) on a alors

$$E = -\frac{Ke^2}{2r} = -\frac{K^2 e^4 m}{2\hbar^2} \times \frac{1}{m^2} \quad n \in \mathbb{N}^*$$

$$E_n = -\frac{K^2 e^4 m}{2\hbar^2} \times \frac{1}{m^2} \quad n \in \mathbb{N}^*$$

Ainsi $\forall n \in \mathbb{N}^* \quad E_n < 0$; pour $n=1$ on a: $E_1 = -13,6 \text{ eV}$

$$\rightarrow \forall n \in \mathbb{N}^* \quad E_n = -\frac{13,6}{n^2} \text{ eV}$$

3) Loi de Balmer: $h\nu_{nm} = E_n - E_m = CRh \left(\frac{1}{m^2} + \frac{1}{n^2} \right)$ (voir cours)
si $E_n > E_m$ $E_n = -\frac{CRh}{n^2}$

$$\Rightarrow E_n = -\frac{CRh}{n^2} = -\frac{k^2 m e^4}{2\hbar^2} \times \frac{1}{n^2}$$

$$\Rightarrow R = -\frac{n^2 E_n}{Ch} = +\frac{k^2 m e^4}{2\hbar^2 Ch}$$

\Rightarrow la cte de Rydberg théorique: $R_n \approx 109500 \text{ cm}^{-1}$

La cte théorique est très proche de celle expérimentale $R_{exp} = 109678 \text{ cm}^{-1}$

Conclusion: le modèle de Bohr reproduit avec un bon accord l'expérience de Balmer - Rydberg.

Ex II - Ondes de matière de Louis de Broglie

Rappel: d'après Louis de Broglie à toute particule matérielle on peut associer une onde de longueur d'onde $\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}$

• lorsque l'on compare λ au diamètre d de la particule on peut dire que l'étude quantique est obligatoire si $\lambda \sim d$ mais si $\lambda \ll d$ alors le traitement classique suffit.

1) grain de poussière: $\lambda = \frac{h}{mv} = \frac{6,62 \cdot 10^{-34}}{10^{-12} \times 10^3 \times 2 \times 10^{-3}} = 2,2 \cdot 10^{-10} \mu$ $\approx \frac{d}{10}$

$\lambda \ll d = 1 \mu \Rightarrow$ On peut traiter par la mécanique classique ce grain de poussière.

2) Note: le calcul de v ne peut pas se faire car la relation $v = \frac{c}{\lambda}$ ne peut être valable que lorsque la vitesse de phase $v_{cp} = \lambda v$ est égale à c (c'est le cas pour le photon) mais ici on ne connaît pas cette vitesse.

2) véhicule: $\lambda = \frac{h}{mv} = 1,32 \cdot 10^{-38} \text{ m} \ll l = 6 \text{ m} \Rightarrow$ traitement classique

3) électrons: $E_c = eV = \frac{1}{2} m v_e^2 \Rightarrow v_e = \sqrt{\frac{2eV}{m}} \approx 6 \cdot 10^6 \text{ m/s}$

$v_e \ll c \Rightarrow$ les électrons sont des particules relativistes \Rightarrow
 $\lambda = \frac{h}{p}$ avec $p = \frac{1}{c} \sqrt{E^2 - m^2 c^4} = \frac{m v}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$

Suite de l'ex 2 :

$$\lambda = \frac{hc}{[E^2 - m_0^2 c^4]^{1/2}} \quad \text{or } E = E_t(\text{électron}) = \frac{1}{2} m v_e^2 + m_0 c^2$$

$$\lambda = \frac{hc}{\sqrt{eV^2 + 2eV m_0 c^2}} \approx 1,22 \text{ \AA} \Rightarrow \boxed{1,22}$$

Ex. 3 Vitesses de groupe et de phase

1) l'onde plane s'écrit en termes de la position x et du temps t :

$$E = E_0 \exp\left[\frac{i}{\hbar} (kx - \omega t)\right]$$

* Connaissant les relations de Planck - Einstein : $E = \hbar\omega$, $p = \hbar k$

en termes de p et E elle s'écrit : $E(t, x) = E_0 \exp\left[\frac{i}{\hbar} (px - Et)\right]$

ou comme $E = \hbar\nu = pc$ $E(t, x) = E_0 \exp\left[\frac{i}{\hbar} (x - ct)\right]$

* Par définition $v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{dE}{dp} \stackrel{\text{pour le photon}}{=} c$

$$v_p = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{p} = c \Rightarrow \boxed{v_g = v_p = c}$$

* l'intensité $I = |E(t, x)|^2 = E^*(t, x) E(t, x) = |E_0|^2$
 = densité de proba. de présence du photon avec une fréquence entre ν et $\nu + d\nu$

2) l'onde de Louis de Broglie : $\psi(t, x) = A \exp\left[\frac{i}{\hbar} (kx - \omega t)\right]$

* par définition

$$v_p = \frac{\omega}{k} = \frac{2\pi\nu}{2\pi/\lambda} \Rightarrow \boxed{\lambda\nu = v_p}$$

* d'après les relations de Planck - Einstein $\psi(t, x) = A \exp\left[\frac{i}{\hbar} (px - Et)\right]$ cas général

* pour une particule libre $E = E_c$ (car pas d'interaction)

$$\Rightarrow \psi(t, x) = A \exp\left[\frac{i}{\hbar} (x - \frac{p}{2m} t)\right]$$

o vitesse de groupe $v_g = \frac{d\omega}{dk}$ or $\omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{p^2}{2m\hbar} = \frac{\hbar k^2}{2m}$

(Note l'énergie d'une particule libre est donc $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$)

$$\Rightarrow v_g = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m} = v \quad \boxed{v_g = v}$$

o vitesse de phase : $v_p = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar k}{2m} = \frac{p}{2m} = \frac{v}{2}$ aucune application physique

3°) particule relativiste:

$$E = \sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4} \quad \left\{ \begin{array}{l} E = \hbar \omega \\ p = \hbar k \end{array} \right.$$

$$* v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{dE}{dp} = \frac{pc^2}{E}$$

$$\text{or } \left. \begin{array}{l} E = m_{\text{rel}} c^2 \\ p = m_{\text{rel}} v \end{array} \right\} \Rightarrow \frac{p}{E} = \frac{v}{c^2} \Rightarrow \boxed{v_g = v}$$

$$* v_{\varphi} = \frac{\omega}{k} = \frac{2\pi\nu}{2\pi\lambda} \Rightarrow v_{\varphi} = \lambda\nu = \text{célérité de propagation de l'onde.}$$

$$\text{or } v_{\varphi} = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{p} = \frac{c^2}{v} = \frac{c^2}{v_g} \Rightarrow \boxed{v_{\varphi} \times v_g = c^2}$$

$v_g = v \Rightarrow < c \Rightarrow v_{\varphi} > c ?!$ $\Rightarrow v_{\varphi}$ n'a pas de signification ou réalité physique.

* En termes de fréquence ou en termes d'énergie

$$o \quad E = \hbar\nu = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} = \frac{m_0^0 c^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$$

$$\Rightarrow \boxed{v_g = c \sqrt{1 - \frac{m_0^2 c^4}{\hbar^2 \nu^2}}} < c$$

$m_0 c^2 = \text{énergie au repos.}$
 $\hbar\nu = \text{énergie totale}$

$$o \quad v_{\varphi} \times v_g = c^2 \Rightarrow \boxed{v_{\varphi} = \frac{c^2}{v_g} = \frac{c}{\sqrt{1 - \frac{m_0^2 c^4}{\hbar^2 \nu^2}}} \geq c$$

o loi de dispersion:

$$n(\nu) = \frac{c}{v_{\varphi}} = \sqrt{1 - \frac{m_0^2 c^4}{\hbar^2 \nu^2}} = \text{indice de réfraction relatif aux ondes de matière}$$

Conclusion $\boxed{n(\nu) \leq 1}$