| | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|
| **Année Universitaire** | *2023-2024* | **Période** | *Automne 2023* | | |
| **Code UE** | *4TBX310U*<br>*4TBX312U* | **Nom de l'épreuve** | *DS ATOMISTIQUE* | | |
| **Date** | *17/11/2023 – 14h* | **Enseignants** | *JC SOETENS* | | |
| **Documents non autorisés** | **Calculatrice autorisée** | | **Sujet sur 25 points** | **Durée de l'épreuve** | *1h30* |

## A- Questions de cours (5 points).

1) Quelle est l'expression de l'opérateur associé à l'énergie cinétique d'une particule de masse $m$.

2) Définir le commutateur de deux opérateurs $\hat{A}$ et $\hat{B}$ de mécanique quantique. Expliquer les cas possibles et leurs conséquences.

3) Soient $\hat{A} = \hat{x}$ et $\hat{B} = -i\hbar\,\partial/\partial x$, les opérateurs position et quantité de mouvement selon l'axe x, respectivement. Calculer le commutateur de $\hat{A}$ et $\hat{B}$ et conclure.

4) Soit l'opérateur Hamiltonien $\hat{H}$ d'un système et un état $\Phi$ de ce système construit comme combinaison linéaire de deux fonctions d'onde $\Psi_1$ et $\Psi_2$ : $\Phi = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$.
   $\Psi_1$ et $\Psi_2$ sont fonctions propre de $\hat{H}$ avec les valeurs propres $e_1$ et $e_2$, respectivement.
   - Déterminer la condition sur les coefficients $c_1$ et $c_2$ pour que cette fonction $\Phi$ soit acceptable ?
   - Calculer la valeur moyenne de l'énergie de ce système dans l'état $\Phi$.

## B- Fonctions d'ondes hydrogénoïdes (10 points).

Les fonctions d'ondes hydrogénoïdes (fonctions propres) et les énergies (valeurs propres) obtenues par la résolution de l'équation de Schrödinger sont respectivement de la forme :

$$\Psi_{nlm}(r\theta\phi) = R_{nl}(r)\,\Theta_{lm}(\theta)\,\Phi_m(\phi) \quad et \quad E_n = -\frac{1}{2}\frac{Z^2}{n^2}\ (unite\ atomique)$$

*Questions générales*

1) Considérer les quatre niveaux d'énergies les plus bas : figurer sur un diagramme d'énergie les états possibles en indiquant clairement les nombres quantiques qui y sont associés et les noms de ces états.

2) Quelle est l'interprétation physique du carré d'une fonction d'onde ?

3) Quel est le résultat de l'intégrale suivante ? Justifiez votre réponse

$$\int_{tout\ l'espace} \Psi^*_{nlm}\,\Psi_{nlm}\,dV =$$

4) Quel est le résultat de l'intégrale suivante ? Justifiez votre réponse.

$$\int_{tout\ l'espace} \Psi^*_{nlm}\,\Psi_{n'lm}\,dV = \qquad \text{avec } n' \neq n$$

*Etude de la fonction d'onde hydrogénoïde $\Psi_{200}$*

5) Utiliser les informations fournies an annexe pour construire la fonction d'onde $\Psi_{200}$ .

6) Déterminer l'expression de la densité de probabilité de présence radiale d'un électron dans cet état $\Psi_{200}$. On rappelle que l'élément de volume en coordonnées sphériques : $dv = r^2 \sin\theta \, dr \, d\theta \, d\varphi$.

7) Dessiner approximativement sur un même dessin l'allure de la fonction d'onde $\Psi_{200}$ et de la densité de probabilité de présence radiale (courbes en fonction de r) dans cet état $\Psi_{200}$.

8) Définir ce qu'est une surface nodale.

9) L'état $\Psi_{200}$ possède-t-il une surface nodale ? Si oui calculer à quelle distance du noyau et placer si elle existe cette distance sur la figure précédente.

**C- Traitement quantique d'un objet confiné dans un espace à une dimension (10 points)**

Soit un objet libre de se déplacer le long d'un segment de longueur L par application d'un potentiel nul dans ce segment ($V(x)=0$ entre $x=0$ et $x=L$) et infini à l'extérieur ($V(x)=\infty$ pour $x<0$ et $x>L$).

Ce système a été traité en cours à l'aide de la mécanique quantique et les fonctions d'ondes et énergies suivantes ont été trouvées pour décrire le système :

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

où K est une constante, n un entier positif non nul, m la masse de l'objet et h la constante de Planck.

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.

2) Les fonctions $\Psi n(x)$ proposées ci-dessus sont données à la constante K près. Expliquer comment déterminer cette constante et calculer sa valeur.

*<u>Application à un premier système</u> : un électron confiné sur un segment de longueur L=2 nm.*

3) Calculer les énergies de l'état fondamental et du premier état excité ?

4) Si l'électron passe du premier état excité à l'état fondamental, quelles sont l'énergie et la longueur d'onde du photon émis ?

*Application à un second système : un petit chariot de masse 0.4 kg fait des allers-retours le long d'une voie de mine entre deux murs situés à L=2 m l'un de l'autre (nous supposons qu'il n'y a pas de friction, pas de pertes d'énergies lors des collisions avec les pare-chocs) et le chariot possède une vitesse constante de 0.5 m/s.*

5) Calculer l'énergie totale de ce chariot dans le cadre de la physique classique (soit $E_{chariot}$).

6) En traitant le chariot comme une particule quantique, calculer la valeur du nombre quantique qui correspond à cette énergie classique $E_{chariot}$.

7) En traitant le chariot comme une particule quantique, calculer les énergies de l'état fondamental et du premier état excité.

*Analyse comparée des approches théoriques*

1) Utiliser les résultats précédents pour répondre aux questions suivantes :

   - Aurait-il été pertinent de traiter l'électron classiquement ?
   - Est-il pertinent de traiter le chariot quantiquement ?
   - Le formalisme de la mécanique quantique est-il applicable à tout type de système ?

---

***Données :***

| | | |
|---|---|---|
| $e$ | $= 1.6\ 10^{-19}$ C | charge de le l'électron |
| $m_e$ | $= 9.1\ 10^{-31}$ kg | masse de l'électron |
| $c$ | $= 3\ 10^{8}$ m.s$^{-1}$ | vitesse de la lumière |
| $h$ | $= 6.62\ 10^{-34}$ J.s | constante de Planck |

On rappelle que $\sin^2(a) = ( 1 - \cos(2a) ) / 2$.

## Annexes : Fonctions radiales et angulaires hydrogénoïdes

| n | $\ell$ | $R_{nl}(r)$ |
|---|---|---|
| 1 | 0 | $2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}$ |
| 2 | 0 | $\frac{1}{\sqrt{8}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\left(2-\frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Zr/2a_0}$ |
| 2 | 1 | $\frac{1}{\sqrt{24}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/2a_0}$ |
| 3 | 0 | $\frac{1}{\sqrt{3}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\frac{2}{81}\left(27-18\frac{Zr}{a_0}+2\left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2\right) e^{-Zr/3a_0}$ |
| 3 | 1 | $\frac{1}{\sqrt{6}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\frac{4}{81}\left(6\frac{Zr}{a_0}-\left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2\right) e^{-Zr/3a_0}$ |
| 3 | 2 | $\frac{1}{\sqrt{30}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\frac{4}{81}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)^2 e^{-Zr/3a_0}$ |

| m | $\phi_m(\varphi)$ |
|---|---|
| 0 | $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$ |
| +1 | $\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i\varphi}$ |
| -1 | $\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-i\varphi}$ |
| +2 | $\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{2i\varphi}$ |
| -2 | $\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-2i\varphi}$ |

| $\ell$ | \|m\| | $\Theta_{lm}(\theta)$ |
|---|---|---|
| 0 | 0 | $\frac{1}{\sqrt{2}}$ |
| 1 | 0 | $\frac{\sqrt{6}}{2}\cos\theta$ |
| 1 | 1 | $\frac{\sqrt{3}}{2}\sin\theta$ |
| 2 | 0 | $\frac{\sqrt{10}}{4}(3\cos^2\theta-1)$ |
| 2 | 1 | $\frac{\sqrt{15}}{2}\sin\theta\cos\theta$ |
| 2 | 2 | $\frac{\sqrt{15}}{4}\sin^2\theta$ |

DS CPBx // 17-11-2023 // Atomistique. (1)

A) (1) (1) (1) 1) à 3) voir cours.

4) On a $\hat{H}\psi_1 = e_1\psi_1$ et $\hat{H}\psi_2 = e_2\psi_2$ et $\psi_1 \perp \psi_2$

- $\phi$ doit être normée $\Rightarrow \int_{esp} \phi^* \phi \, d\tau = 1$

(1) $\int_{esp} (c_1\psi_1 + c_2\psi_2)^* (c_1\psi_1 + c_2\psi_2) \, d\tau = \boxed{1 = c_1^2 + c_2^2}$

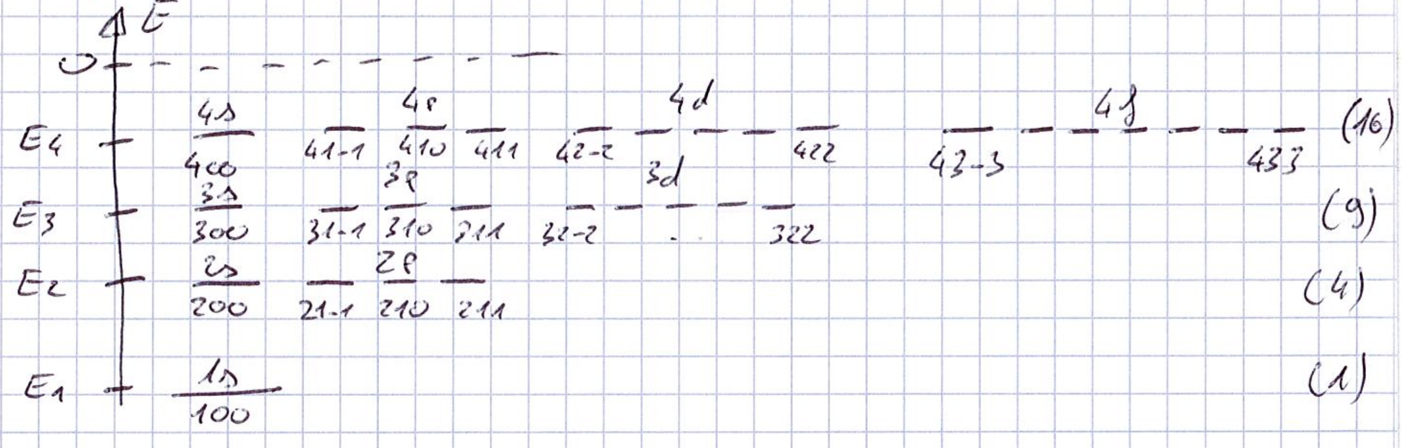
- $\langle E \rangle = \int_{esp} \phi^* \hat{H} \phi \, d\tau = \int_{esp} (c_1\psi_1 + c_2\psi_2)^* (c_1 e_1 \psi_1 + c_2 e_2 \psi_2) \, d\tau$

(1) $\Rightarrow \boxed{\langle E \rangle = c_1^2 e_1 + c_2^2 e_2}$

---

B) 1) 4 premiers niveaux $n = 1$ à $n = 4$

(2)




(1) 2) Une probabilité de présence

(1) 3) $\int_{esp} \psi^*_{nlm} \psi_{nlm} \, dV = 1$ car ces fonctions sont normées.

(1) 4) $\int_{esp} \psi^*_{nlm} \psi_{n'lm} \, dV = 0$ car ces fonctions sont fonctions propres de $\hat{H}$ et constituent une base orthonormée.

(2)

5) $\Psi_{200} = R_{20}(r)\ \Theta_{00}(\theta)\ \Phi_0(\varphi)$

(1)

$$= \frac{1}{\sqrt{8}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\left(2-\frac{Zr}{a_0}\right)e^{-\frac{Zr}{2a_0}} \times \frac{1}{\sqrt{2}} \times \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

$$= \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \quad \text{"} \quad \text{"}$$

6) $P = \int_{esp} \Psi_{200}^* \Psi_{200}\ r^2 \sin\theta\ dr\, d\theta\, d\varphi$

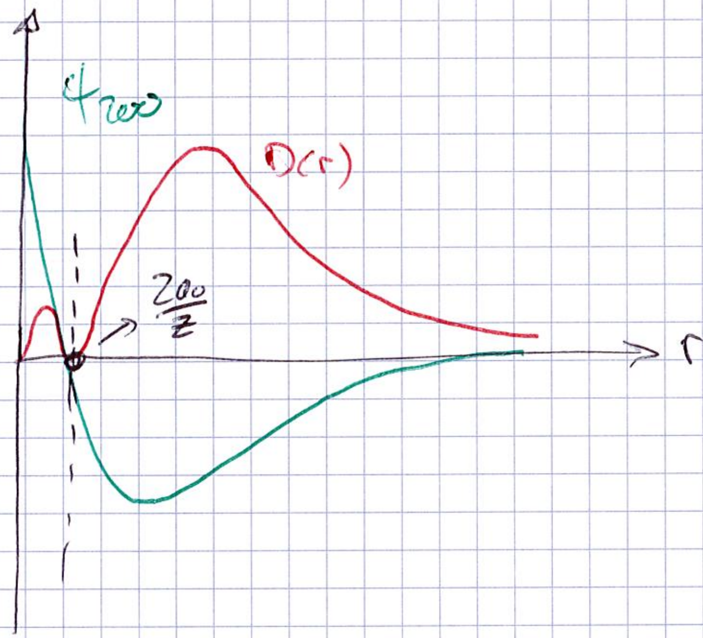
(1)

$$= 4\pi \int_0^\infty \Psi_{200}^2\ r^2\, dr$$

$$\Rightarrow \frac{dP}{dr} = D(r) = \frac{1}{8}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^3\left(2-\frac{Zr}{a_0}\right)^2 e^{-\frac{Zr}{a_0}} \times r^2$$

7)

(1)




(1) 8) Surface nodale

= espace où la probabilité de présence de la particule est nulle

(1) 9) Oui

$D(r) = 0$ en $\boxed{r = \frac{2a_0}{Z}}$

---

C) 1) $E = T$ entre $[0, L]$ où $V = 0 \Rightarrow E = \frac{p_x^2}{2m}$

(1)

$$\Rightarrow \boxed{\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}}$$

(1) 2) Il faut normer $\Psi(x)$

$$\Rightarrow \int_0^L \Psi^2(x)\, dx = 1 \Rightarrow K^2 \int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx = 1$$

$\sin^2 a = \frac{1-\cos 2a}{2}$

$$\Rightarrow \boxed{K = \sqrt{\frac{2}{L}}}$$

3

3) (1) $M_e = 9{,}1\ 10^{-31}$ kg ; $L = 2\ 10^{-9}$ m $\Rightarrow$ $E_2 =$ ~~[illegible]~~ $\underline{6{,}02\ 10^{-20}\ J}$ ; $E_1 =$ ~~[illegible]~~ $\underline{1{,}5\ 10^{-20}\ J}$

4) (1) $\Delta E_{2\to 1} = E_1 - E_2 = \underline{-4{,}80\ 10^{-20}}$ J — car perte d'énergie

Donc $E_{photon} = 4{,}80\ 10^{-20}$ J $= \frac{hc}{\lambda}$ $\Rightarrow$ $\boxed{\lambda = \text{~~[illegible]~~}\ 4400\ nm}$

5) (1) $M_c = 0{,}6$ kg ; $L = 2$ m ; $v = 0{,}5$ m/s

Physique classique : $E_{chariot} = T = \frac{1}{2} M_c v^2$

$\Rightarrow \boxed{E_{chariot} = 0{,}05\ J}$

6) (1) Traitement quantique $\Rightarrow$ $E_{chariot} = \frac{n^2 h^2}{8 M_c L^2}$

AN $\boxed{n = 1{,}21\ 10^{33}}$

7) (1)

$E_2 = 1{,}37\ 10^{-67}$ J

$E_1 = 3{,}42\ 10^{-68}$ J

8) (1) Formalisme quantique applicable à tout système ? OUI.

(1) Traitement classique de l'électron ? NON
- Quantification de l'énergie importante
- $E_1 \neq 0$

(1) Traitement quantique du chariot ? Oui mais système macroscopique classique

$E_1 \to 0$

$\Delta E_{12} \to 0$

Niveaux d'énergies continus.