Année Universitaire	2024 - 2025	Période	Automne 2024	
Code UE	4TBX310U & 4TBX312U	Epreuve	DS ATOMISTIQUE	
Date	8/11/2024	Enseignants	J-C. SOETENS, L. TRUFLANDIER	
Sans documents	Calculatrice autorisée		Durée	1h30
NOM & PRENOM :			Note / 25 :	

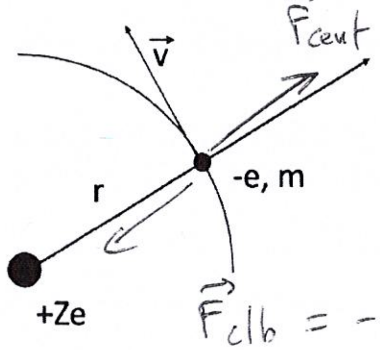
A- Un modèle classique de l'atome d'hydrogène et des hydrogénoïdes (10 points)

On suppose un noyau fixe de charge $+Ze$ et un électron de masse m et de charge $-e$. L'électron est supposé être sur une orbite circulaire stable de rayon r avec une vitesse constante v. Un des postulats de Bohr stipule que le moment cinétique orbital est quantifié, soit $mvr = nh/2\pi$, avec n un entier positif non nul.

1) Donner l'expression des forces pertinentes présentes dans ce système et les faire apparaître clairement sur le dessin (la force centrifuge vaut mv^2/r) :

1

$\vec{F}_{cent} = \frac{mv^2}{r}$



$\vec{F}_{clb} = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r^2}$ Force Coulombienne

2) L'application de principes simples de physique classique sur ce système permet de trouver le rayon r de l'orbite de l'électron, la vitesse v de l'électron et l'énergie totale E du système. Le tableau ci-dessous donne ces expressions à des constantes près : a_0, v_0 et E_0 respectivement. Effectuer sur brouillon les traitements nécessaires pour retrouver ces constantes et reporter expressions et unités dans le tableau ci-dessous (pas les démonstrations, uniquement les expressions) :

3

Quantité	Expressions et unités SI des constantes
$r = a_0 \frac{n^2}{Z}$	$a_0 = \frac{(4\pi\varepsilon_0)\hbar^2}{me^2}$ (m) $\frac{\varepsilon_0 h^2}{\pi m e^2}$ 1
$v = v_0 \frac{Z}{n}$	$v_0 = \frac{e^2}{(4\pi\varepsilon_0)\hbar}$ (m/s) $\frac{e^2}{2\varepsilon_0 h}$ 1
$E = -E_0 \frac{Z^2}{2n^2}$	$E_0 = \frac{me^4}{(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2}$ (J) $\frac{me^4}{4\varepsilon_0^2 h^2}$ 1

3) Calculer les valeurs de ces trois constantes et les reporter dans le tableau suivant avec leurs unités :

3

$a_0 =$ $5,35\ 10^{-11}$ m	1
$v_0 =$ $2,16\ 10^{6}$ m/s	1
$E_0 =$ $4,25\ 10^{-18}$ J	1

Un peu de science-fiction…

4) La particule muon, aussi appelée « électron lourd » possède les mêmes propriétés que l'électron à l'exception de sa masse m_m qui est 207 fois supérieure. Imaginons que « *l'atome d'hydrogène muonique* » existe, soit un système constitué d'un proton (charge +e) comme noyau et d'un muon de masse $m_m=207m_e$ et de charge $-e$ qui tourne autour.

On reste dans le cadre du modèle de Bohr et de tous les développements précédents.
On se place dans l'état d'énergie fondamentale (n=1).

Question (a) : que peut-on dire de la vitesse du muon par rapport à celle de l'électron ?

1

v n'est pas une fonction de la masse.
Donc $v_{muon} = v_{e^-}$

Question (b) : que peut-on dire de l'énergie de « *l'atome d'hydrogène muonique* » par rapport à celle de l'atome d'hydrogène ?

1

$E \propto m \Rightarrow E^{H}_{muon} = 207\ E^{H}_{e^-}$

Question (c) : que peut-on dire du rayon de l'orbite du muon de « *l'atome d'hydrogène muonique* » par rapport à celle de l'électron dans l'atome d'hydrogène ?

1

$r \propto \frac{1}{m} \Rightarrow r_{muon} = \frac{r_{e^-}}{207}$

B- Traitement quantique d'un système simple : particule dans une boîte à 1 dimension (15 points)

Soit une particule de masse m confinée dans un espace à 1 dimension 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)=∝ 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 exactes et énergies suivantes ont été trouvées pour décrire le système :

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

où K est une constante, n un entier positif non nul, m la masse de la particule 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)

$$E = \frac{P_x^2}{2m} \Rightarrow \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} \quad 1/$$

A résoudre : $\hat{H}\psi = E\psi$ 1/

2) Pourquoi est-il avancé dans la description ci-dessus que les fonctions d'ondes $\Psi_n(x)$ sont « *exactes* » ?

(1)

Car $\psi_n(x)$ sont fonctions propres de $\hat{H}$ avec la valeur propre E_n.

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

(2)

$\psi_n(x)$ doit être normée : $\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^*(x)\,\psi_n(x)\,dx = 1$ 1/

Ici $\Rightarrow \int_0^L \psi_n^2(x)\,dx = 1$

$$= \int_0^L K^2\left(\frac{1}{2} - \frac{\cos}{2}\left(\frac{2n\pi x}{L}\right)\right)dx = 1$$

$$= K^2\left[\frac{x}{2} - \frac{L}{4n\pi}\sin\left(\frac{2n\pi x}{L}\right)\right]_0^L = 1 \Rightarrow \boxed{K = \pm\sqrt{\frac{2}{L}}} \quad 1/$$

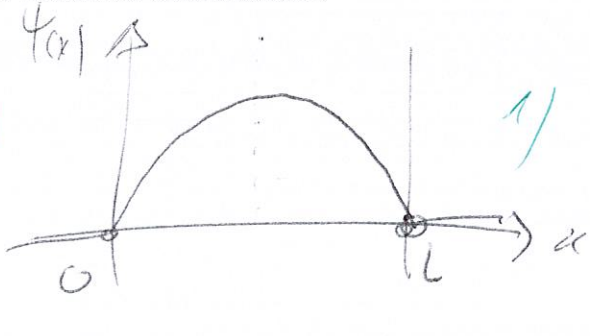
4) Donner les caractéristiques de l'état fondamental : nombre quantique, énergie que l'on notera E_A, expression de la fonction d'onde et dessiner l'allure de cette fonction :

(2)

$n = 1$

$E_A = \frac{h^2}{8mL^2}$ 1/

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



1/

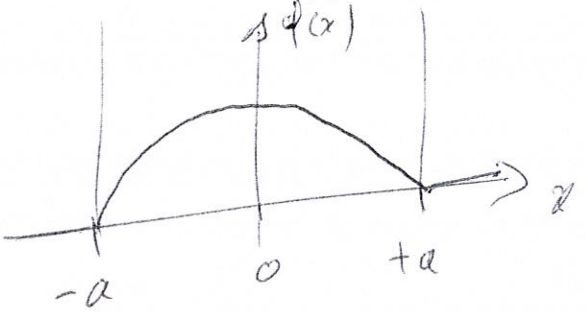
Un étudiant propose de tester une autre fonction d'onde pour l'état fondamental de ce système :

$\varphi(x) = K'(a^2 - x^2)$ entre $x = -a$ et $x = +a$

Au décalage de référentiel près, ce système est exactement le même que le précédent, avec $2a = L$.

5) Dessiner la fonction d'onde *$\varphi(x)$*. Cette fonction d'onde est-elle physiquement acceptable ?

1



oui | continue
dérivable
carré sommable

6) La fonction d'onde *$\varphi(x)$* est-elle « *exacte* » ? Justifier.

1

Il faut tester si $\varphi(x)$ est fonction propre de $\hat{H}$.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(K'(a^2-x^2)\right) = +2K'\frac{\hbar^2}{2m} \neq c^{st}\cdot\varphi(x)$$

Donc $\varphi(x)$ n'est pas fonction propre.
c'est une fonction approchée de la fonction propre $\psi_n(x)$

7) La fonction *$\varphi(x)$* est donnée à la constante *K'* près. Calculer la valeur de K' (qui dépendra de a) :

Condition de normalisation $\Rightarrow \int_{-a}^{a} \varphi^2(x)\,dx = 1$ ← 1

2

$$K'^2\int_{-a}^{+a}(a^2-x^2)^2\,dx = 1 \Leftrightarrow K'^2\int_{-a}^{+a}(a^4-2a^2x^2+x^4)\,dx = 1$$

$$\Leftrightarrow K'^2\left[a^4x - \frac{2a^2}{3}x^3 + \frac{a^5}{5}\right]_{-a}^{+a} = 1$$

$$\Leftrightarrow K'^2\left[\left(a^5 - \frac{2}{3}a^5 + \frac{a^5}{5}\right) - \left(-a^5 + \frac{2}{3}a^5 - \frac{a^5}{5}\right)\right] = 1$$

$$\Rightarrow \boxed{K' = \sqrt{\frac{15}{16a^5}}} \quad \text{et} \quad \varphi(x) = \sqrt{\frac{15}{16a^5}}\,(a^2 - x^2)$$

8) Rappeler la formule de mécanique quantique permettant de calculer la valeur moyenne d'une grandeur physique. Appliquer cette formule pour calculer l'énergie (que l'on notera E_B) de la particule dans l'état fondamental décrit par $\varphi(x)$:

1

Soit G une grandeur physique et $\hat{G}$ l'opérateur associé.
$\langle G \rangle = \int_{esp} \varphi^* \hat{G} \varphi \, d\tau$ la valeur moyenne de G du système dans l'état φ.

Ici $\langle E_B \rangle = \int_{-a}^{+a} \varphi^*_{(x)} \hat{H} \varphi(x) \, dx = \int_{-a}^{+a} \sqrt{\frac{15}{16a^5}}(a^2-x^2) \cdot \sqrt{\frac{15}{16a^5}} \frac{\hbar^2}{m} dx$

$\Leftrightarrow \frac{\hbar^2}{m}\frac{15}{16a^5}\int_{-a}^{+a}(a^2-x^2)\,dx = \frac{\hbar^2}{m}\frac{15}{16a^5}\underbrace{\left[a^2x - \frac{x^3}{3}\right]_{-a}^{+a}}_{\frac{4}{3}a^3}$

1

$\Rightarrow \langle E_B \rangle = \frac{h^2}{4\pi^2 m} \times \frac{15}{16a^5} \times \frac{4}{3}a^3 \Leftrightarrow \boxed{\langle E_B \rangle = \frac{5h^2}{16\pi^2 m a^2}}$

9) Comparer les énergies des états fondamentaux E_A (question 4) et E_B (question 8) en calculant le rapport $R = E_B / E_A$. Ce résultat était-il prévisible ? Selon quel principe ?
Si vous n'arrivez pas à faire le calcul, quel cas attendez-vous : R<1, R=1, R>1 ? Justifier.

1

$R = \frac{\langle E_B \rangle}{E_A} = \frac{5h^2}{16\pi^2 m a^2} \frac{8m(2a)^2}{h^2} \Rightarrow \boxed{R = \frac{10}{\pi^2} \simeq 1,013}$

1

R > 1 car $\varphi(x)$ est une fonction « approchée » donc son énergie est supérieure à l'énergie exacte.
$\Leftrightarrow$ Principe variationnel.

Données :

e	$= 1.6\ 10^{-19}$	C	charge de le l'électron
m_e	$= 9.1\ 10^{-31}$	kg	masse de l'électron
$1/(4\pi\varepsilon_0)$	$= 8.9\ 10^{9}$	$J.m.C^{-2}$	permittivité du vide
c	$= 3\ 10^{8}$	$m.s^{-1}$	vitesse de la lumière
h	$= 6.62\ 10^{-34}$	J.s	constante de Planck

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