EFREI Promo L3 **Année 2010-2011**

Mécanique Quantique

T.A.I

TAI N°1

1. Une cellule photo-électrique contenant une cathode en césium est irradiée par une lampe spectrale à vapeurs de mercure. Pour chacune des longueurs d'onde d'irradiation, on mesure l'énergie cinétique des photo-électrons extraits du césium. Les résultats sont regroupés dans le tableau ci-dessous.

λ (nm)	578	546	436	365	254
ν ($\times 10^{12}$ Hz)					
E_c(électron) (eV)	0,21	0,33	0,90	1,46	2,94
v(électron) (m.s^{-1})					

   Compléter le tableau et représenter la caractéristique $E_c(électron) = f(\nu)$. Tracer la droite passant au plus près des points expérimentaux.

2. En déduire la valeur expérimentale de la constante de Planck h ainsi que le travail d'extraction du césium W_{Cs}.

3. Dans l'effet photo-électrique, une onde électromagnétique incidente sur la surface d'un métal ne peut éjecter un électron que si la fréquence de l'onde excède une valeur seuil ν_0. L'énergie minimum requise pour éjecter un électron de la surface du magnésium est 3,68 eV. Montrer qu'une radiation lumineuse de fréquence ν inférieure à 8,89$\times$10^{14} Hz ne peut produire de photo-électrons du magnésium, quelle que soit l'intensité lumineuse. Tracer la caractéristique de l'effet photo-électrique attendue pour le magnésium sur le même graphe qu'à la question 1.

Données : $e = 1,6 \times 10^{19}$ C ; $c = 3 \times 10^8$ m.s^{-1} ; $m_e = 9,1 \times 10^{-31}$ kg.

TAI N°2

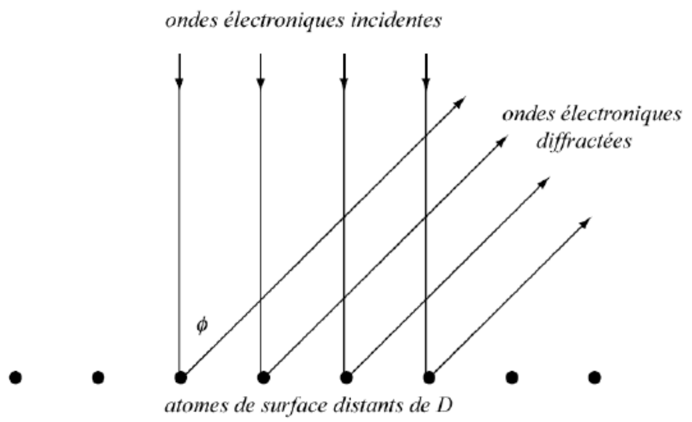
1. Les électrons qui assurent la conduction électrique dans le cuivre ont une énergie cinétique d'environ 7 eV. Calculer leur longueur d'onde de De Broglie. En comparant cette longueur d'onde à la distance interatomique du cuivre a_{Cu}, expliquer pourquoi les propriétés ondulatoires des électrons de conduction jouent un rôle prépondérant lorsque ces derniers se déplacent dans le cuivre.

2. Estimer la longueur d'onde de De Broglie d'une molécule de dioxygène dans l'air ambiant. Comparer cette longueur d'onde avec la séparation des molécules dans l'air et expliquer pourquoi le mouvement des molécules de dioxygène dans l'air ambiant n'est pas affecté par les propriétés ondulatoires des molécules.

Données : masse volumique du cuivre : $\rho = 8,9{\times}10^3$ kg.m^{-3} ; masse molaire du cuivre : $M_{Cu} = 60$ g.mol^{-1} ; énergie cinétique d'un gaz à température ambiante (*i.e.* 300 K) : $E_C = 25$ meV ; volume molaire d'un gaz parfait à pression et température ambiante : $V_M = 22,4$ L ; masse molaire de l'oxygène : $M_O = 16$ g.mol^{-1} ; $m_e = 9,1 \times 10^{31}$ kg ; $e = 1,6 \times 10^{19}$ C ; $h = 6,62 \times 10^{-34}$ Js ; $\mathcal{N}_A = 6,02 \times 10^{23}$ mol^{-1}.

TAI N°3

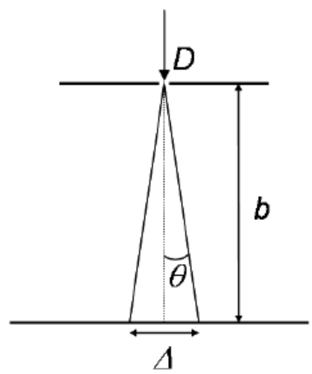
1. Les propriétés ondulatoires des électrons furent démontrées expérimentalement pour la première fois par Davisson et Germer en 1925. Le principe de leur expérience est schématisé ci-dessous.



Un faisceau d'électrons d'énergie 54 eV est diffusé par les atomes de surface d'un cristal de nickel. L'espacement entre les rangées parallèles d'atomes à la surface du solide est $D = 0,125$ nm. Expliquer pourquoi Davisson et Germer ont observé une forte diffusion des électrons sous un angle $\phi \approx 51°$.

2. En 1897, J.J. Thomson déduisit que les électrons se comportaient comme des particules avec une valeur définie du rapport e/m_e.

   L'expérience consistait à envoyer un faisceau d'électrons d'énergie cinétique 200 eV entre deux plaques métalliques chargées distantes de 2 cm. Sachant qu'un rayonnement de longueur d'onde λ sortant d'une ouverture de diamètre D diverge d'un angle θ de telle manière que $\sin\theta = \frac{\lambda}{D}$, estimer le diamètre de la tache de diffraction produite sur écran placé à la distance $b = 20$ cm de l'ouverture (voir schéma ci-contre). En déduire pourquoi J.J. Thomson n'observa aucun comportement ondulatoire du faisceau d'électrons.



3. La particule la plus massive ayant montré des propriétés ondulatoires est, depuis 1999, la molécule de fullerène, formée de 60 atomes de carbone (formule brute C_{60}). Dans l'expérience qui a été réalisée, un four à 2000°C produit un faisceau monocinétique de C_{60} d'énergie $E_C = 0,2$eV. Ce faisceau est envoyé au travers d'une ouverture de largeur 50 nm. Estimer la vitesse du faisceau de particules. En déduire sa longueur de De Broglie associée. À quelle distance de l'ouverture faudrait-il placer un écran de détection pour observer une tache de diffraction de largeur 1 mm ?

Données : $e = 1,6 \times 10^{19}$ C ; $h = 6,62 \times 10^{-34}$ Js ; $m_e = 9,1 \times 10^{-31}$ kg.

TAI N°4

1. En mécanique classique, la trajectoire circulaire d'un électron tournant à la distance r autour d'un proton résulte de l'équilibre entre force centrifuge et force électrostatique. Cet équilibre se traduit par la relation suivante : $\frac{mv^2}{r} = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2}$. Les lois classiques de la mécanique peuvent s'appliquer si le moment cinétique de l'électron $L = mvr$ est très grand devant la constante de Planck réduite $\hbar$. Montrer que cette condition est satisfaite si le rayon de l'orbite r est très grand devant le rayon atomique de Bohr a_0, c'est à dire, si $r >> a_0 = \frac{4\pi\varepsilon_0}{e^2}\frac{\hbar^2}{m_e}$.
2. On considère un électron confiné dans une région de l'espace de taille atomique. Estimer l'incertitude minimum sur son impulsion. En supposant que cette incertitude est compa-

rable à l'impulsion moyenne de l'électron, estimer son énergie cinétique moyenne ainsi que sa vitesse moyenne.

3. On mesure, dans le spectre de l'atome d'hydrogène, une radiation de longueur d'onde $\lambda = 97,24\,\text{nm}$. Cette raie spectrale du domaine UV correspond à une transition électronique depuis un niveau excité n vers le niveau fondamental. Sachant que les niveaux d'énergie de l'atome d'hydrogène sont donnés par $E_n = -\frac{E_0}{n^2}$, en déduire le niveau n sur lequel se trouvait l'électron avant désexcitation.

Données : masse de l'électron : $m_e = 9,1 \times 10^{-31}$ kg ; $e = 1,6 \times 10^{19}$ C ; $h = 6,62 \times 10^{-34}$ Js ; $c = 3 \times 10^8$ m.s^{-1} ; $E_0 = 13,6$ eV.

TAI N°5

1. Vérifier, par substitution directe, que les fonctions d'onde réelles $\Psi_A(x,t) = A\cos(kx - \omega t)$ et $\Psi_B(x,t) = B\sin(kx - \omega t)$ ne sont pas solutions de l'équation de Schrödinger pour une particule libre.
2. En mécanique quantique, une particule libre d'impulsion p et d'énergie E est représentée par convention au moyen de la fonction d'onde $\Psi(x,t) = A\exp[\frac{+i}{\hbar}(px - Et)]$. Sur une autre planète, les physiciens ont choisi la convention $\Psi(x,t) = A\exp[\frac{-i}{\hbar}(px - Et)]$. Quelle est la forme de l'équation de Schrödinger pour une particule libre sur cette planète ?

TAI N°6 On considère une particule quantique confinée dans la région $0 \leq x \leq a$ et représentée par la fonction d'onde $\psi(x) = Nx(a-x)$ où N est une constante.

1. Normer la fonction d'onde.
2. trouver la position moyenne et l'impulsion moyenne de la particule.
3. Calculer l'incertitude sur la position de la particule. En déduire l'incertitude minimum sur l'impulsion.

TAI N°7 On considère une particule de fonction d'onde normée

$$\Phi(x) = \begin{cases} Nxe^{-\alpha x/2} & \text{si } 0 \leq x \leq \infty \\ 0 & \text{ailleurs} \end{cases}$$

avec α réel positif et $N = \sqrt{\alpha^3/2}$.

1. Donner l'expression de la probabilité de trouver la particule entre x et x+dx. Calculer les valeurs attendues de la position $\langle x \rangle$ et du carré de la position $\langle x^2 \rangle$.
2. Calculer la valeur attendue de l'impulsion $\langle p \rangle$ et du carré de l'impulsion $\langle p^2 \rangle$.
3. Montrer que ces valeurs attendues conduisent à des incertitudes Δx et Δp compatibles avec le principe d'incertitudes de Heisenberg.

Donnée : $\displaystyle\int_\infty^0 x^n e^{-\alpha x} dx = \frac{n!}{\alpha^{n+1}} \qquad \forall n > -1.$

TAI N°8 Une particule soumise au potentiel $V(x)$ possède une énergie définie et une fonction d'onde décrites par :

$$E = -\frac{\hbar^2\alpha^2}{2m} \qquad \text{et} \qquad \Phi(x) = \begin{cases} Nxe^{-\alpha x} & \text{si } 0 \leq x \leq \infty \\ 0 & \text{ailleurs} \end{cases}$$

où N et α sont des constantes réelles positives.

1. Vérifier que le potentiel est donné par $V(x) = \begin{cases} -\frac{\alpha\hbar^2}{mx} & \text{si } 0 \leq x \leq \infty \\ \infty & \text{ailleurs} \end{cases}$
2. Écrire l'expression donnant la probabilité de trouver la particule entre x et $x+dx$. Étudier les variations de cette probabilité avec x et trouver la position x_{max} la plus probable pour la particule.
3. Sachant que la fonction d'onde $\Phi(x)$ décrit l'état fondamental, représenter grossièrement la fonction d'onde du premier état excité.

TAI N°9 Soit une particule quantique dont deux états d'énergie définie E_1 et E_2 sont représentés par les fonctions d'ondes normées et orthogonales suivantes :

$$\psi_1(x,t) = \Phi_1(x)e^{-iE_1t/\hbar} \quad \text{et} \quad \psi_2(x,t) = \Phi_2(x)e^{-iE_2t/\hbar}$$

telles que $\hat{H}\Phi_1 = E_1\Phi_1$ et $\hat{H}\Phi_2 = E_2\Phi_2$, avec $\hat{H}$ l'opérateur hamiltonien.
L'état de la particule est décrit au temps t par une combinaison linéaire de Ψ_1 et Ψ_2 :

$$\Psi(x,t) = A\psi_1(x,t) + B\psi_2(x,t) \qquad \text{avec } A, B \in \mathbb{C}$$

1. On mesure l'énergie du système au temps $t = 0$. Montrer que les valeurs attendues de l'énergie et du carré de l'énergie sont respectivement :

$$\langle E \rangle = |A|^2E_1 + |B|^2E_2 \qquad \text{et} \qquad \left\langle E^2 \right\rangle = |A|^2E_1^2 + |B|^2E_2^2$$

2. Trouver les valeurs de A et B pour que la valeur attendue de l'énergie soit $\frac{1}{4}E_1 + \frac{3}{4}E_2$. En déduire l'expression de $\Psi(x,t)$ à tout instant.
3. Trouver l'incertitude correspondante sur l'énergie de la particule.

TAI N°10 Au temps $t = 0$, une particule soumise au potentiel de l'oscillateur harmonique $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$ est décrite par la fonction d'onde $\Psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\Phi_0(x)+\Phi_1(x)]$ où $\Phi_0(x)$ et $\Phi_1(x)$ sont respectivement les fonctions propres réelles orthogonales et normées de l'état fondamental et du premier état excité de l'oscillateur. Les énergies propres correspondantes sont données par $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$.

1. Écrire l'expression de $\Psi(x,t)$, la fonction d'onde au temps t. Montrer que $\Psi(x,t)$ est une fonction d'onde normée.
2. Sachant que la valeur attendue de la position de la particule dans l'un des états propres ϕ_n de l'oscillateur harmonique est $\langle x \rangle_{\phi_n} = 0$, montrer que la valeur attendue de la position pour l'état $\Psi(x,t)$ peut se mettre sous la forme

$$\langle x \rangle = A\cos(\omega t) \qquad \text{où } A = \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi_0(x)x\Phi_1(x)\, dx$$

où l'on explicitera la pulsation ω en fonction des états d'énergie permis. Quelle est la signification physique de ce résultat ?

3. Les transitions entre niveaux vibrationnels adjacents de la molécule NO produisent une radiation infrarouge à la longueur d'onde $\lambda = 5330$ nm. Déterminer la constante de raideur k qui caractérise la force de la liaison entre les noyaux N et O de la molécule.

Données : masse molaire de l'azote : $M_N = 14$ g.mol^{-1} ; masse molaire de l'oxygène : M_O =16 g.mol^{-1} ; $\mathcal{N}_A = 6,02 \times 10^{23}$ mol^{-1} ; $c = 3 \times 10^8$ m.s^{-1}.

TAI N°11 Une particule de masse m se déplace dans un espace à trois dimensions. Elle est soumise au potentiel $V(r)$ généré par une source située en $r = 0$, la variable r désignant la distance entre la source de potentiel et la particule ($r \in]0; +\infty[$). Le potentiel $V(r)$ s'exprime de la façon suivante :

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & \text{si } r < R \\ 0 & \text{si } r > R \end{cases}$$

On s'intéresse aux fonctions d'onde stationnaires sphériques de la particule n'ayant aucune dépendance angulaire. Ces fonctions d'onde se mettent sous la forme

$$\psi(r) = \frac{u(r)}{r}$$

$\psi(r)$ obéit à l'équation de Schrödinger, qui transposée dans un système de coordonnées sphériques sans dépendance angulaire, se met sous la forme :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V(r)\psi = E\psi \qquad \text{avec l'opérateur différentiel } \nabla^2 = \frac{1}{r}\frac{\partial^2(r\psi)}{\partial r^2}$$

1. Montrer que l'équation de Schrödinger s'écrit :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}u''(r) + V(r)u(r) = Eu(r)$$

2. On suppose que la particule possède l'énergie $E = -\frac{\hbar^2\alpha^2}{2m}$ telle que $0 < E < V_0$. Établir la forme générale des solutions $u(r)$ de l'équation différentielle ci-dessus dans les régions $r < R$ et $r > R$.
3. En appliquant les conditions aux limites telles que $\psi(r)$ soit nulle quand r tend vers 0 et $+\infty$, montrer que $\psi(r)$ se met sous la forme :

$$\psi(r) = \begin{cases} A\sin(k_0 r)/r & \text{si } r < R \\ B\exp(-\alpha r)/r & \text{si } r > R \end{cases}$$

où A et B sont des constantes et $k_0 = \frac{\sqrt{2m(V_0+E)}}{\hbar}$.
4. En appliquant la condition de continuité de $\psi(r)$ en $r = R$, représenter graphiquement l'un de ces états.