Université Joseph Fourier L2 UE Phy 242

Corrigé des TD de Physique Quantique

C. Hoffmann, G. Méjean 2008

4 Liaison moléculaire

La liaison entre deux (ou plusieurs) atomes en une molécule est un phénomène quantique de nature électronique, avec une énergie de liaison de l'ordre d'un eV.

1. En déduire l'ordre de grandeur de la distance entre atomes dans la molécule.
   Il s'agit d'un phénomène quantique ce qui veut dire que l'action caractéristique est de l'ordre de $\hbar$. Interviennent l'énergie de liaison, la masse de l'électron (la liaison est d'origine électronique) et la distance recherchée :
   $$\mathcal{A} = \sqrt{Em_e}d \Rightarrow d = \frac{\hbar}{\sqrt{Em_e}} = 2,8\text{Å}.$$
2. Si la molécule est suffisamment dissymétrique, comme par exemple la molécule diatomiques SiO, elle possède un moment dipolaire électrique D. Estimer son ordre de grandeur et comparer à la valeur éxprimentale $D = 1,0 \times 10^{-29}$ Cm.
   La dimension du moment dipolaire est $[D] = QL$. Une estimation de son amplitude dans une molécule dissymétrique est alors donnée par $D = ed = 4,5 \times 10^{-29}$ Cm, le bon ordre de grandeur comparé à sa valeur expérimentale.

5 Modèle de Bohr

Le modèle de Bohr correspond à un électron ponctuel (charge $-e$, masse m_e) en orbite sur une trajectoire circulaire de rayon R autour d'un noyau quasi ponctuel fixe (masse $M >> m_e$, charge $+Ze$). Ce modèle décrit l'atome d'hydrogène ($Z = 1$) ainsi que les ions à un électron He^+ ($Z = 2$), Li^{2+} ($Z = 3$) etc...

1. Démontrer que la force d'attraction gravitationnelle électron-proton est environ 2×10^{39} fois plus faible que la force coulombienne et donc négligeable.
   Force gravitationnelle et force coulombienne s'écrivent respectivement :
   $$F_G = -G\frac{m_p m_e}{R^2} \ , \ F_C = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{q_e q_p}{R^2} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R^2}$$
   $$\Rightarrow \frac{F_C}{F_G} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0 G}\frac{e^2}{m_e m_p} = 2,3 \times 10^{39},$$
   avec $G = 6,7 \times 10^{-11}$ N/m^{2}kg^2 et $\epsilon_0 = 8,85 \times 10^{-12}$ As/Vm.
2. Exprimer, dans le cadre de la mécanique classique, l'énergie cinétique E_c de l'électron et l'énergie potentielle E_p d'interaction entre l'électron et le noyau.
   $$E_c = \frac{1}{2}m_e v^2 \text{ et } E_p = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{Ze^2}{R}$$

3. En appliquant le principe fondamentale de la dynamique, montrer que $E_c = -E_p/2$ et exprimer l'énergie totale E.

Dans un système de coordonnées polaires (cf. Phy 121) avec les vecteurs unitaires $\vec{u}_r$ et $\vec{u}_\theta$, vitesse et accéleration s'écrivent pour un mouvement circulaire uniforme de rayon R :

$$\vec{v} = v\vec{u}_\theta \text{ et } \vec{a} = -\frac{v^2}{R}\vec{u}_r.$$

En applicant $\vec{F} = m_e\vec{a}$ avec $F = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{Ze^2}{R^2}$ la force centripète, on obtient :

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{Ze^2}{R^2} = \frac{m_e v^2}{R} \Rightarrow E_c = \frac{m_e v^2}{2} = \frac{1}{2}\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{Ze^2}{R} = -\frac{1}{2}E_p$$

$$\Rightarrow E = E_c + E_p = E_p/2 < 0.$$

Il s'agit d'un système lié.

4. Bohr postulait une quantification du moment cinétique $L = n\hbar$ (n entier positif). Montrer que ceci impose une quantification des rayons R des orbites sous la forme : $R_n = n^2 R_1/Z$ où R_1 est une constante que l'on calculera.
On donne : $\hbar c = hc/2\pi = 197.3$ MeV.fm ; $\alpha^{-1} = 4\pi\epsilon_0\hbar c/e^2 = 137$ et $m_e c^2 = 0.511$ MeV.

On a $\vec{L} = \vec{r} \wedge \vec{p} = R\vec{u}_r \wedge m_e v\vec{u}_\theta = m_e R v\vec{u}_z$. Connaissant la norme $L = m_e R v$ on peut écrire :

$$\frac{m_e v^2}{R} = \frac{m_e}{R}\left(\frac{L}{m_e R}\right)^2 = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 R^2}$$

Si le moment cinétique est quantifié sous la forme $L = n\hbar$ on a :

$$\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} = \frac{n^2\hbar^2}{m_e R}$$

A chaque entier n correspond un rayon R_n :

$$R_n = n^2\frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e Z e^2} = n^2\frac{R_1}{Z} \quad Avec \quad R_1 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2}$$

$$R_1 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar c}{e^2}\frac{\hbar c}{m_e c^2} = \frac{\hbar c}{\alpha m_e c^2}\frac{137 \times 197.3}{0.511} = 5.29 \times 10^4 \ fm = 0.529\text{Å}.$$

R_1 est souvent appelé le rayon de Bohr, α la constante de structure fine.

En déduire que la fréquence de rotation de l'électron peut s'exprimer sous la forme :

$$f_n = \frac{\hbar Z^2}{2\pi m_e n^3 R_1^2}$$

La fréquence de rotation de l'électron peut s'écrire $f_n = v/2\pi R_n$, en exprimant v en fonction de L on a :

$$f_n = \frac{v}{2\pi R_n} = \frac{L}{2\pi m_e R_n^2} = \frac{n\hbar Z^2}{2\pi m_e n^4 R_1^2} = \frac{\hbar Z^2}{2\pi m_e n^3 R_1^2}$$

5. Montrer que l'énergie totale E est également quantifiée sous la forme : $E_n = -Z^2 E_1/n^2$ où E_1 est une constante que l'on calculera.

On a vu que $E = E_c + E_p = E_p/2$, en exprimant E_p en fonction de R_n on a :

$$E_n = E_p/2 = -\frac{1}{2}\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 R_n} = -\frac{1}{2}\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{Z}{n^2 R_1} = -\frac{1}{2}\frac{Z^2 e^2}{4\pi\epsilon_0 R_1}$$

$$E_n = -\frac{Z^2 E_1}{n^2} \quad \text{avec} \quad E_1 = \frac{1}{2}\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R_1}$$

La constante E_1 peut se calculer facilement sous la forme :

$$E_1 = \frac{\hbar c}{2R_1}\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} = \frac{197.3}{2\times 5.29\times 10^{-2}}\frac{1}{137} = 13.6\ eV,$$

c'est l'énergie de Rydberg.

6. Calculer l'énergie que l'on doit fournir pour arracher le dernier électron d'un ion Fe^{25+} dans son état fondamental.

   Pour le fer, $Z = 26$, donc il faut fournir une énergie supérieure ou égale à l'énergie de liaison du dernier électron, soit : $E = 26^2 \times 13.6 = 9200$ eV.

6 Principe d'incertitude

1. Une masse de 1 g est confinée dans un tube d'une longueur de 1 m. Quelle est l'incertitude sur sa vitesse ? De combien se déplace-t-elle en un an à cette vitesse ?

   On utilise la relation $\Delta p \Delta x \geq \hbar/2$, si la masse m est connue, on peut écrire $m\Delta v\Delta x \geq \hbar/2$ soit :

$$\Delta v \geq \frac{\hbar}{2m\Delta x} = \frac{10^{-34}}{2\times 10^{-3}} = 5\times 10^{-32}\ m/s$$

   Avec cette vitesse on parcourt en un an une distance égale à : $5\times 10^{-32} \times 365 \times 86400 = 1.5\times 10^{-24}$ m et en un milliard d'années 1.5×10^{-15} m, c'est à dire à peu près la taille du noyau d'un atome. A l'échelle macroscopique, le principe d'incertitude n'a en général pas d'effet mesurable.

2. Un état atomique excité a une énergie de 3 eV plus élevée que son état fondamental et une durée de vie de 1 ns.

   (a) Quelles sont les incertitudes absolue et relative sur l'énergie de cet état ?

   Ici on a $\Delta E\Delta t \geq \hbar/2$ soit $\Delta E \geq \hbar/2\Delta t = 10^{-34}/2\times 10^{-9} = 5\times 10^{-26}$ J $= 3\times 10^{-7}$ eV. L'incertitude relative $\Delta E/E$ est donc de l'ordre de 10^{-7}

   (b) Quelle est l'incertitude sur la fréquence du photon émis lorsque l'atome retrouve son état fondamental ?

   Pour un photon de fréquence ν, on a : $E = h\nu$ d'où $\Delta\nu \geq \Delta E/h = 1/(4\pi\Delta t) = 8\times 10^7$ Hz.

3. Un système émet un photon en passant d'un état excité d'énergie E_1 à l'état fondamental d'énergie E_0, par exemple un atome émettant de la lumière ou un noyau émettant des rayons gamma.

   (a) On suppose le système, de masse m, initialement au repos. Montrer que la conservation de la quantité de mouvement lui communique un certain recul, et qu'il emporte en conséquence une fraction δE de la différence d'énergie $\epsilon = E_1 - E_0$, laissant au photon l'énergie $\epsilon - \delta E$. Montrer que sous condition $\epsilon << mc^2$, on a $\delta E = \epsilon^2/2mc^2$.

   On fait un bilan d'énergie et de quantité de mouvement entre les états avant et après émission du photon : Avant, l'énergie du système est E_1, sa quantité de mouvement est nulle. Pour le photon, énergie et quantité de mouvement sont nulles (il n'existe pas). Après l'émission, on a pour le système une quantité de mouvement p_s et une énergie $E_0 + p_s^2/2m$, pour le photon $p_{ph} = E_{ph}/c$ et une énergie E_{ph}. De plus, on a $\epsilon = E_1 - E_0$. Les bilans s'écrivent donc :

$$\text{énergie : } \quad E_1 = E_0 + \frac{p_s^2}{2m} + E_{ph} \Leftrightarrow \epsilon - E_{ph} = \frac{p_s^2}{2m} = \delta E$$

$$\text{quantité de mouvement :} \quad 0 = p_s - \frac{E_{ph}}{c} \Leftrightarrow p_s = \frac{E_{ph}}{c} = \sqrt{2m\delta E} \Leftrightarrow E_{ph} = c\sqrt{2m\delta E}$$

$$\Rightarrow \delta E = \epsilon - c\sqrt{2m\delta E}$$

$$\Leftrightarrow c^2 2m\delta E = \epsilon^2 - 2\epsilon\delta E + \delta E^2$$

$$\Leftrightarrow (2mc^2 + 2\epsilon - \delta E)\delta E = \epsilon^2$$

$$\Leftrightarrow \Big(1 + \frac{\epsilon}{mc^2} - \frac{\delta E}{2mc^2}\Big)\delta E = \frac{\epsilon^2}{2mc^2}$$

En sachant que $\frac{\delta E}{2mc^2} < \frac{\epsilon}{mc^2} << 1$, on obtient $\delta E = \frac{\epsilon^2}{2mc^2}$.

(b) Le niveau excité d'énergie E_1 possède une durée de vie τ. En déduire qu'il a une certaine largeur ΔE_1. Qu'en est-il à cet égard du niveau fondamental ? A quelle condition un photon émis comme en 3a peut-il être réabsorbé par un autre système de la même espèce, supposé au repos dans son état fondamental ?

$$\Delta E_1 = \frac{\hbar}{2\Delta t} = \frac{h}{4\pi\Delta t}$$

Le niveau fondamental est stable et a une énergie parfaitement définie ! L'absorption s'éffectue également sous conservation de la quantité de mouvement : une fraction $\delta E'$ de l'énergie du photon est transférée au système absorbeur : $\delta E' = \delta E \approx \epsilon^2/2mc^2$. L'énergie disponible pour faire passer le système de E_0 à E_1 vaut donc seulement $\epsilon - 2\delta E$. Le niveau E_1 doit donc avoir une largeur $\Delta E_1 \geq 2\delta E$!

(c) Appliquer ces résultats aux deux exemples suivants :

- photon visible du mercure atomique : $\epsilon = 4,86$ eV ; $\tau = 10^{-8}$ s, $m = 3,4 \times 10^{-25}$ kg.

$$\Delta E_1 = \frac{\hbar}{2\Delta t} = \frac{\hbar c}{2c\Delta t} = \frac{197,3 \text{ MeV fm}}{2 \times 3 \times 10^{23} \text{ fm/s } 10^{-8} \text{ s}} = 3,3 \times 10^{-8} \text{ eV}$$

$$2\delta E = \frac{\epsilon^2}{mc^2} = 1,2 \times 10^{-10} \text{ eV}$$

On a $\Delta E_1 > 2\delta E$, la réabsorption est donc possible.

- émission gamma du noyau de nickel : $\epsilon = 1,33$ MeV ; $\tau = 10^{-14}$ s, $m = 1,0 \times 10^{-25}$ kg.

$$\Delta E_1 = \frac{\hbar}{2\Delta t} = \frac{\hbar c}{2c\Delta t} = \frac{197,3 \text{ MeV fm}}{2 \times 3 \times 10^{23} \text{ fm/s } 10^{-14} \text{ s}} = 3,3 \times 10^{-2} \text{ eV}$$

$$2\delta E = \frac{\epsilon^2}{mc^2} = 31,4 \text{ eV}$$

On a $\Delta E_1 < 2\delta E$, le photon émis ne peut donc pas être réabsorbé par un autre noyau. L'énergie communiquée au système est généralement très faible devant l'énergie du photon : $\delta E/\epsilon \approx 3 \times 10^{-12}$ et 3×10^{-8} dans les deux exemples.

4. Un méson π^+ au repos a une durée de vie de 26 ns. Quelle est l'incertitude sur la masse au repos du π^+ ? Que vaut cette incertitude en valeur relative sachant que $m_\pi c^2 = 139.6$ MeV.
$E = mc^2$ donc $\Delta E = c^2\Delta m$. L'application de la relation d'incertitude donne $\Delta mc^2 \geq \hbar c/(2c\Delta t)$ En utilisant $\hbar c = 197$ MeV.fm et en prenant soin d'exprimer c en fm/s, on trouve :
$\Delta mc^2 \geq 197/(2 \times 3 \times 10^{23} \times 2.6 \times 10^{-8}) = 1,26 \times 10^{-14}$ MeV. Soit en valeur relative $\Delta mc^2/mc^2 \approx 9 \times 10^{-17}$.