

Mécanique quantique

TD 1: Introduction

1 Analyse dimensionnelle

L'analyse dimensionnelle est une technique consistant à trouver des relations de proportionnalité entre des grandeurs décrivant un phénomène donné à partir des dimensions de chacun des paramètres. Un de ces théorèmes fondamentaux est le théorème de Vaschy-Buckingham :

Théorème de Vaschy-Buckingham: S'il existe une relation entre n grandeurs physiques faisant apparaître k unités différentes, alors on peut trouver $n - k$ nombres sans dimension (x_i) formés de ces grandeurs vérifiant une loi $f(x_1, \dots, x_{n-k}) = 0$.

Si cette méthode ne donne pas de résultats quantitatifs, sa force de prédiction ne doit pas être sous-estimée. Elle est particulièrement utile en mécanique quantique.

1.1 Une nouvelle constante fondamentale

1. On étudie l'atome d'hydrogène en mécanique classique. Montrer qu'on ne peut pas construire d'énergie ou de longueur caractéristiques à partir des constantes du problème.
2. En ajoutant \hbar à ces grandeurs, identifier une distance a_0 , une énergie E_0 et un temps t_0 caractéristiques. Les estimer, et proposer une interprétation pour ces quantités.
3. Que se passe-t-il si on rajoute la célérité de la lumière c à ce lot de grandeurs ? Définir au moins un paramètre adimensionné simple α et le calculer.

1.2 Une application macroscopique

4. Rappeler la définition de la tension de surface γ d'une interface fluide/vapeur (pour l'eau par exemple), ainsi que de son enthalpie de vaporisation L_v . Interpréter ces deux grandeurs d'un point de vue microscopique.
5. Par analyse dimensionnelle, en déduire une relation faisant intervenir ces deux grandeurs et a_0 .
6. En déduire un ordre de grandeur de a_0 .
7. **Bonus.** Justifier la phrase de V. Weisskopf : *La longueur capillaire est essentiellement la moyenne géométrique entre la hauteur maximale d'une montagne et la distance interatomique.*¹

2 Atome de Bohr

Avant l'avènement de la mécanique quantique, de nombreux modèles ont cherché à modéliser la structure interne de l'atome. Bohr propose un modèle dérivé du modèle planétaire où il intègre des idées issues des résultats expérimentaux contemporains :

- seules certaines orbites (circulaires) sont autorisées pour les électrons, indiquées par un entier $n \geq 1$;
- un électron sur une orbite n rayonne à une pulsation ω_n , et celle-ci correspond à la différence d'énergie entre deux états successifs : $E_n - E_{n-1} = \hbar\omega_n$.
- on retrouve un comportement classique pour les orbites très excitées (n grand).

De ces hypothèses, Bohr tire plusieurs conséquences dont la formule expérimentale des énergies de l'atome d'hydrogène qui lui valut sa notoriété.

1. V. Weisskopf, *Search for Simplicity*, American Journal of Physics

8. Dans un modèle classique où l'électron tourne à vitesse constante sur une orbite circulaire autour du noyau, retrouver l'expression de la vitesse angulaire de rotation ω ainsi qu'une expression simple de l'énergie E d'une orbite en fonction de son rayon r .
9. Dans le cadre du modèle de Bohr, en déduire l'équation semi-classique suivante

$$-\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0} \left(\frac{1}{r_{n+1}} - \frac{1}{r_n} \right) = \hbar\omega_{n+1} \quad (1)$$

10. Justifier que plus n est grand, plus les orbites sont resserrées, et que $\omega_{n+1} \approx \omega_n$. En déduire une équation différentielle vérifiée par $r(n)$ où le rayon est pris comme une fonction continue de n .
11. Résoudre l'équation précédente, et montrer que $r_n = \tilde{r}n^2$ où on donnera l'expression et la valeur numérique de la constante \tilde{r} .
12. Exprimer alors les fréquences d'émission lorsque l'électron passe de l'orbitale m à l'orbitale $n < m$. En déduire une expression de la constante de Rydberg \mathcal{R} définie dans la loi

$$\frac{\omega_{n \rightarrow m}}{c} = \mathcal{R} \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \text{ (L'grossesse de l'atome de Bohr)} \quad (2)$$

13. Montrer que le moment cinétique est une grandeur quantifiée dans le modèle de Bohr.
14. **Validité du modèle de Bohr.** Bohr a introduit ce modèle pour donner une description quantitative des orbitales qui s'écartaient de la description classique du modèle de Rutherford. Nous pouvons a posteriori donner la validité de son approche « semi-classique » : si r et p sont respectivement la position et la quantité de mouvement de l'électron, une approche semi-classique est justifiée si les indéterminations Δr et Δp sont petites. En comparant $\Delta r \Delta p$ et rp , montrer que cette condition n'est vérifiée que pour les orbites de Bohr à grand n . Conclure.

Sur les orbites de Bohr, l'indétermination de position est de l'ordre de $\hbar r / p$ et celle de la quantité de mouvement est de l'ordre de \hbar / r . L'indétermination de position est donc importante et celle de la quantité de mouvement est négligeable.

Sur les orbites de Bohr, l'indétermination de position est de l'ordre de $\hbar r / p$ et celle de la quantité de mouvement est de l'ordre de \hbar / r . L'indétermination de position est donc importante et celle de la quantité de mouvement est négligeable.

Sur les orbites de Bohr, l'indétermination de position est de l'ordre de $\hbar r / p$ et celle de la quantité de mouvement est de l'ordre de \hbar / r . L'indétermination de position est donc importante et celle de la quantité de mouvement est négligeable.

Sur les orbites de Bohr, l'indétermination de position est de l'ordre de $\hbar r / p$ et celle de la quantité de mouvement est de l'ordre de \hbar / r . L'indétermination de position est donc importante et celle de la quantité de mouvement est négligeable.

Sur les orbites de Bohr, l'indétermination de position est de l'ordre de $\hbar r / p$ et celle de la quantité de mouvement est de l'ordre de \hbar / r . L'indétermination de position est donc importante et celle de la quantité de mouvement est négligeable.

Sur les orbites de Bohr, l'indétermination de position est de l'ordre de $\hbar r / p$ et celle de la quantité de mouvement est de l'ordre de \hbar / r . L'indétermination de position est donc importante et celle de la quantité de mouvement est négligeable.

Sur les orbites de Bohr, l'indétermination de position est de l'ordre de $\hbar r / p$ et celle de la quantité de mouvement est de l'ordre de \hbar / r . L'indétermination de position est donc importante et celle de la quantité de mouvement est négligeable.



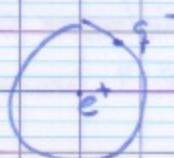
TD MA 1-1

TD Mécanique quantique

TD introductif

regarder sur phys.ens.fr/vraoux

1 Analyse Dimensionnelle

1.2 Une nouvelle constante fondamentale
ctes:1) atome d'hydrogène: ~~vitesse~~: F charge: e masse: m rayon: r perméabilité: ϵ_0 célérité: c de gravit.
 \times de gravit.
 \times 

r et r
 - depends de la
 dynamique de
 Pb.
 ne sont pas
 des ctes!

La charge e relie la charge du champ E_0 , ϵ_0 nous indique le complexe de forces entre les charges.

Par ailleurs $F_{el} > 10^{40}$ F_{grav}

- donc pas la peine de prendre en compte la gravité.
- c'est la vitesse de propagation du champ E.M., en mécanique classique c'interviendra pas.

$$e \approx 10^{-19} C$$

$$m \approx 10^{-30} kg$$

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \approx 10^{10}$$

$$(E_0 \text{ en } A^2 \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{m}^{-3})$$

$$(F \cdot m^{-1})$$

$$\text{on a } \frac{q^2}{\epsilon_0} \text{ donc } \text{Energie} \cdot \text{longueur} = \frac{q^2}{\epsilon_0} \cdot L^3 \cdot T^{-2}$$

Si on a e , ϵ_0 et m on peut bien construire une énergie ou une longueur.

2) identifions ce qu'on peut obtenir avec t_h :

$$\text{on a 3 fois: } e^k m^\rho \epsilon_0^\sigma t_h^\delta$$

On connait pas α_0 :

$$[e^k m^\rho \epsilon_0^\sigma t_h^\delta] = L \quad \text{on développe et on obtient } q$$

es. $\in q$ irrationnel.

$$\text{on voit alors que } \left[\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right] = m \cdot L^3 \cdot T^{-2}$$

$$[t_h] = \text{Energie dépendance} = M T \cdot L^2 \cdot T^{-2} = M L^2 T^{-1}$$

$$\left[\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right] : \frac{M L^2 T^{-2}}{M L^2 T^{-1}} = L T^{-1}$$

$$\Rightarrow \left[\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 t_h^2} \right] = \frac{M L^2 T^{-2}}{M^2 L^4 T^{-2}} = \frac{1}{M L}$$

$$\Rightarrow [L] = \frac{4\pi\epsilon_0 t_h^2}{m e^2}$$

TD mag-2

Trouver E_0 :

$$\begin{array}{ccc} \frac{c^2}{4\pi\epsilon_0} & M & h \\ \downarrow & \downarrow & \downarrow \\ M L^3 T^{-2} & M & M L^2 T^{-1} \\ \parallel & \parallel & \parallel \\ E L & E \cdot L^{-2} T^2 & E \cdot T \end{array}$$

alors $\frac{m}{h^2} \cdot \left(\frac{c^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 = \frac{E^2 L^2 \cdot E \cdot L^2 \cdot T^2}{E^2 T^2} = E$

finlement $a_0 = \frac{h}{E_0} = \frac{m \cdot (c^2)^2}{h \cdot (4\pi\epsilon_0)}$

ordres de grandeur:

$$a_0 \sim \frac{10^{68}}{10^{10} \cdot 10^{50} \cdot 10^{-38}}$$

$$\text{rg: } h^2 \sim 10^{-34}$$

$$a_0 \sim 10^{-10} \quad \text{-on compare au diamètre d'un atome} \rightarrow 1 \text{ \AA}$$

$$E \sim \left(10^{-38} \cdot 10^{10} \right)^2 \cdot \frac{10^{-30}}{10^{-68}} \sim 10^{-18} \text{ J}$$

$$E_0 \sim 10 \text{ eV} \sim \text{rendement}$$

E_0 de 10 eV
c'est ≈ 12 eV.

$\Rightarrow 0 \text{ K}$

$$\text{pénétrant} \rightarrow n \frac{10^{-34}}{10^{-4}} \approx 10^{-16} \text{ A.}$$

On le compare à temps de vie de la transition, plutôt à une fréquence \rightarrow U.V.

3) Lien avec Ancienne π :

On peut construire un nb. dimensionnel avec :

$$\frac{c^2}{4\pi\epsilon_0} m \ h \ C$$

$$B \cdot L \quad E \cdot L^{-2} \cdot F \cdot T \quad L \cdot T^{-1}$$

de manière à enlever toutes les dimensions sauf une :

$$\text{donc } k = \frac{\alpha_0}{\text{constante}} = \frac{4\pi\epsilon_0}{e^2} \frac{h^2}{m} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{m}{h^2}$$

$$k = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 c h} = \frac{10^{-10}}{10^{40} \cdot 10^{-16}} = 10^{-2}$$

const de structure fine.

I.2) Une application macroscopique

4) Tension de surface =

rg. toujours dire tension de surface de l'interface
et

Si on veut augmenter la surface d'une interface
il faut fournir de l'énergie.

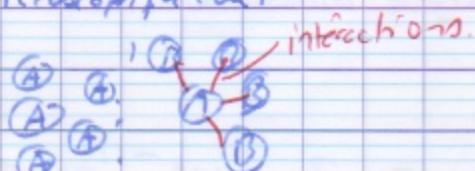
Théorème 3

Cette énergie est donnée par γ_{ds} .



(1)

microscopiquement :



✓

dix. d'énergie
entre ces 2 états.

Υ : énergie à donner par unité de surface pour atteindre l'intégration.

mlr = ΔH + énergie à fournir pour passer d'une phase liquide à la phase vapeur par unité de masse.

$$\Upsilon_{\text{ea}} = 2 \cdot 2 \text{ mN} \cdot \text{m}^{-1} \leftarrow \text{air - liquide par l'eau}$$

$$\Upsilon_{\text{ea}} = 2200 \text{ kJ} \cdot \text{kg}^{-1}$$

L'énergie dans le liquide viendra de la brisure des interactions entre les molécules de liquide. Pour l'eau ce sont essentiellement des liaisons H_2 .

5) par analyse dimensionnelle: $\Upsilon = \frac{E}{a_0} \approx 10^2 \text{ N} \cdot \text{m}^{-1}$
or ça devrait être $10^{-3} \text{ N} \cdot \text{m}^{-1}$

L'énergie qu'on doit considérer c'est donc des énergies moléculaires, d'où la diff. entre l'énergie totale et totale.

$$\text{Pour } L_V = \frac{E}{a_0^3 \cdot e} = \frac{10^{-18}}{10^{-30}} = 10^{12} \text{ J} \cdot \text{m}^{-3} = 10^9 \text{ kJ} \cdot \text{m}^{-3} \text{ à comparer à } 10^6 \text{ kJ} \cdot \text{kg}^{-1}$$

difference liée aux 2 raisons

$$a_0 = \sqrt[3]{L_V} \text{ par analyse dimensionnelle}$$

$$(7) \Rightarrow a_0 = \frac{70 \cdot 10^{-3}}{2 \cdot 10^6 \cdot 10^3} = 3,5 \cdot 10^{-11} \text{ m}$$

\downarrow

$(= 10^3 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-2})$

à comparer avec $a_0 = 5,2 \cdot 10^{-11} \text{ m}$
rayon de Bohr!

On a un ordre de grandeur très correct!

$$7) \text{ moyenne géométrique} = \sqrt{2 \beta}$$

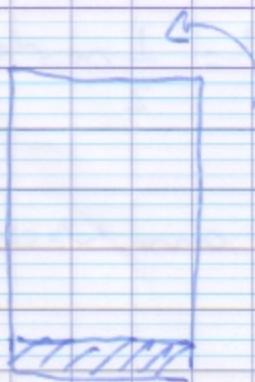
Soit la hauteur d'une montagne H :

$$h_0 = \sqrt{H \cdot a_0} = \sqrt{10^4 \cdot 10^{-10}}$$

$$= 10^{-3} \text{ m} \rightarrow 1 \text{ mm.}$$

si quelle hauteur H est-il aussi rentable de rajouter une roche si on met de la roche qui va faire bondir à cause de la pression la m'roche en dessous de la montagne?

TD M&H-4



$$E_p = mgh \rightarrow eV_{sh} \quad (1)$$

$$\cancel{mL_F} = eV_{LF} \quad (2)$$

Soit la longueur capillaire $L_C = \sqrt{\frac{V}{\rho g}}$

Si on met en équation l'égalité des énergies :

$$L_F \sim gh \quad (1) = (2)$$

$$L_C = \sqrt{\frac{V}{\rho g}} = \sqrt{\frac{V h}{\rho L_F}} = \sqrt{\frac{\rho h}{\frac{V}{L_F}}} = \sqrt{h a_0}$$

d'où la phrase de V. Weisskopf !

2) Atome de bohr

8) électron vitraine à une vitesse constante sur orbite circulaire.

$$m\vec{v}^2 = F = r\vec{a}_r$$

$$\vec{v} = \frac{d\vec{r}}{dt} = r \frac{d\vec{u}_r}{dt} = r \frac{dt \vec{\omega} \times \vec{u}_r}{dt \cdot r \omega_0} = -\vec{\omega}$$

donc v² angulaire de rotation: $\frac{-\vec{v}}{2\pi} = \frac{r\vec{\omega}}{2\pi}$

$$B = \frac{1}{2} m r^2 \omega^2 = \frac{1}{2} m r \dot{\theta}^2$$

avec $r = a_0 = \text{cte}$ et comme $\omega = \text{cte}$ $\dot{\theta}^2 = \text{cte}$.

Donc:



on se place dans le repère de l'atome:

On utilise la PEG:

$$\frac{m d\vec{v}}{dt} = \vec{F}_{\text{élec.}}$$

$$\text{en polaires } \vec{a} = \begin{pmatrix} \ddot{r} - r \dot{\theta}^2 \\ r \ddot{\theta} + 2r \dot{\theta}^2 \\ \ddot{\phi} \end{pmatrix}$$

$$\text{comme orbite circulaire} \Rightarrow \vec{a} = \begin{pmatrix} -r \dot{\theta}^2 \\ r \dot{\theta}^2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Comme $v = \text{cte}$: $r \dot{\theta} \vec{v} \dot{\theta} = \text{cte} \Rightarrow r \dot{\theta} = \text{cte}$ et $\ddot{\theta} = 0$

donc on a une force centrale: $\vec{F}_{\text{élec.}} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \hat{r}$

$$\Rightarrow m r \dot{\theta}^2 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \rightarrow \text{d'où } \dot{\theta} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m r^3}$$

+ D notes

$$E = \frac{1}{2}mv^2 + E_p$$

$$= \frac{1}{2}mv^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad \leftarrow \text{Force centrale qui déclive une force potentielle.}$$

On est sur une orbite circulaire donc on utilise le théorème de l'unité.

$$2\langle E_c \rangle = -\langle E_p \rangle \quad \leftarrow \text{valable pour } \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \leq \frac{1}{r}$$

$$\text{donc } E_c = -\frac{1}{2}\langle E_p \rangle$$

$$\text{donc } E = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r} \quad \text{si non on remplace } v^2 \text{ avec } (\omega r)^2$$

9) On utilise les hypothèses d-ph

$$E_{n+1} - E_n = \hbar\omega_{n+1}$$

$$\text{d'où } -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{r_{n+1}} - \frac{1}{r_n} \right) = \hbar\omega_{n+1}$$

10) on remplace ω_{n+1} :

$$-\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{r_{n+1}} - \frac{1}{r_n} \right) = \hbar \sqrt{\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m r^3}}$$

on part opération la division par r^3 !

$$\frac{L}{2} \sqrt{\frac{e^2 n}{4\pi \epsilon_0}} \left(\frac{r_{n+1} - r_n}{r_n \cdot r_{n+1}} \right) = \frac{\vec{h}_n}{r_n \sqrt{r_{n+1}}}$$

/ utilisation d'hypothèse d'orbites réservées. $\Rightarrow r_n \approx r_{n+1}$

alors: $\frac{dr}{dn} = \sqrt{\frac{4\pi \epsilon_0 e^2}{e^2 n}} = \sqrt{\alpha_0}$ on pose

$$(1) \text{ donc } \sqrt{r_n} - \sqrt{r_1} = \sqrt{\alpha_0} (n-1)$$

avec $r_1 = \alpha_0 l$

donc $r_n = \alpha_0 n^2$

$$(2) E_n - E_1 = \frac{e^2}{8\pi \epsilon_0 \alpha_0} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)$$



on retrouve formule de Rydberg avec le coefficient R₂:

$$\frac{w_{nm}}{c} = \frac{e^2}{8\pi \epsilon_0 \alpha_0 c h} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)$$

$R_2 \leftarrow m^{-1}$

PROBLEME

ordre de grandeur de Ω ?

$$\Omega \sim \frac{10^{-38}}{2 \cdot 0,5 \cdot 10^{-20} \cdot 10^{-37} \cdot 3 \cdot 10^8} \sim \frac{10^{-38}}{3 \cdot 10^{-26}} = 10^8$$
$$\sim 3 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$$

La vrai valeur est: $\Omega = 1,097 \cdot 10^8 \text{ m}^{-1}$

13 $L = r_p n p$

$$L = r_p n p = n m v$$
$$= \frac{E_{kin}^2 m}{r} \sqrt{\frac{e^2}{4\pi \epsilon_0 n r}}$$

car $v = \frac{e^2}{4\pi \epsilon_0 n r}$

si on simplifie:

$$L = \hbar n$$

14 $\omega r p \ll r_p$ $\Rightarrow l \ll n$

$\omega \sim \frac{l}{n \tau}$

Le modèle de Bohr est une mauvaise image de l'état d'hydrogène
Car il faut que $n \geq 2$ car ici on a $H_1 = 1.17 \text{ eV}$
orbites $\geq n$ petit.