TD2: Concepts de la physique quantique

Dans ce TD, nous illustrons le concept de quantification de l'énergie d'un système, avec le modèle de Bohr (1913). Ce modèle (dépassé depuis 1925) permet de se familiariser avec la quantification de l'énergie, et d'expliquer simplement des phénomènes tels que les radiations lumineuses « quantifiées », c'est-à-dire selon des longueurs d'ondes fixées : à l'inverse de la lumière blanche, d'on le spectre est continu, celui d'une lampe halogène (composée d'un seul corps chimique) émet seulement selon des longueurs d'ondes bien précises, ce qui explique sa couleur, rouge pour le Néon, bleu/ultraviolet pour le Mercure, orange pour les lampes à Sodium...

Nous abordons aussi la relation de De Broglie, qui associe une longueur d'onde à chaque particule ayant une masse, et nous illustrons le principe d'incertitude d'Heisenberg.

Ex1: Modèle de Bohr(1913)

L'atome d'hydrogène est constitué d'un proton de charge +q (noyau) et d'un électron de masse m et de charge -q. Le modèle de Bohr est formulé une dizaine d'années après l'idée du « quanta » émise par Planck, mais emprunte encore à la Physique classique.

Le modèle repose sur trois postulats :

- Considérés comme ayant un mouvement circulaire uniforme de rayon r à une vitesse v, les électrons sont supposés présents sur des orbites stables, des « couches » successives correspondant chacune à un niveau d'énergie de l'électron. Ne rayonnant donc aucune énergie, l'électron ne s'«effondre» pas sur le noyau.
- L'électron présent sur une couche n peut passer à une couche n' en absorbant ou en émettant un photon, d'énergie fixée, quantifiée h_c, où h est la constante de Planck, c la célérité de la lumière dans le vide, et λ la longueur d'onde du photon (Ex.2).
- Le moment cinétique de l'électron est quantifié, ce qui se traduit par la relation suivante:

$$mrv = n\frac{h}{2\pi}$$

  - m: masse de l'élement
  - r: rayon de l'orbite
  - v: vitesse de déplacement de l'électron
  - n: numéro de la couche atomique
  - h: constante de Planck ($6{,}62\times10^{-34}$J·s)

Le modèle de Bohr aboutit au résultat suivant : l'énergie E_n d'un électron lié au noyau dépend de l'inverse du carré du nombre quantique n, numéro de la couche électronique où peut se trouver l'électron. C'est ce que l'on appelle la quantification des états de l'électron.

$$E_n = \frac{cste}{n^2}$$

- n: numéro du niveau

rayon_orbite.png

Figure 1: Illustration de l'atome de Bohr

L'objectif de cet exercice est de retrouver ce résultat à partir des hypothèses de Bohr.

1. En utilisant la 3e hypothèse du modèle, exprimer le produit mv en fonction de n, h et du rayon de l'orbite numéro n.
   La 3ème hypothèse implique la quantification du mouvement cinétique : $\overrightarrow{L} = \overrightarrow{OM} \bigwedge \overrightarrow{p}$, avec $\overrightarrow{p} = m\overrightarrow{p}$ le vecteur quantité de mouvement
   $\Longrightarrow ||\overrightarrow{L}|| = ||\overrightarrow{OM}|| \times ||\overrightarrow{p}|| \times \sin\left(\frac{\pi}{2}\right)$=rmv
   $\Longrightarrow ||\overrightarrow{L}||$ est quantifié $\rightarrow$ mrv = n$\frac{h}{2\pi}$ avec n$\in \mathbb{N}^*$
   $\Longrightarrow$ mv = $\frac{nh}{2r\pi}$

2. Rappeler l'expression de la norme de la force de Coulomb entre un électron et un proton. $||\overrightarrow{F_e}|| = \frac{k|q_1||q_2|}{r^2}$: force de Coulomb entre un électron et un proton (attraction)
   $\Longrightarrow ||\overrightarrow{F_e}|| = \frac{ke^2}{r^2}$; on notera ke^2=e^2

3. Utiliser la 1ère hypothèse et le principe fondamental de la dynamique appliqué à l'électron pour exprimer le produit mv^2 en fonction de la charge élémentaire e, et du rayon r de la couche électronique.
   Principe fondamental de la dynamique: $\Sigma\overrightarrow{F_{ext}} = m\overrightarrow{a}$ avec m la masse de l'électron
   $\Longrightarrow ||\overrightarrow{F_e}|| = ma_r$ (le poids est négligeable devant $\overrightarrow{F_e}$)
   $\Longrightarrow \frac{ke^2}{r^2} = m\left(\frac{v^2}{r}\right)$, on obtient donc:

$$mv^2 = \frac{ke^2}{r}$$

   - m: masse de l'électron (kg)
   - e: valeur absolue de la charge de l'électron
   - r: rayon de l'orbite
   - k: constante de Coulomb

4. Utiliser ces résultats pour exprimer les rayons r_n des orbites successives accessibles à l'électron en fonction de leur nombre quantique n, c'est-à-dire le numéro de la couche électronique. Montrer qu'ils s'écrivent : $r_n = a_0 n^2$ avec $n \in \mathbb{N}$. On appelle la constante a_0 le rayon de Bohr, qui correspond au plus petit rayon accessible.
   D'après les questions précédentes, on a:

$$\begin{cases} mv = \frac{nh}{2\pi r} \\ mv^2 = \frac{ke^2}{r} \end{cases} \Longrightarrow \frac{1}{m}(mv)^2 = \frac{ke^2}{r}$$

$$\Longleftrightarrow \frac{1}{m}\left(\frac{nh}{2\pi r}\right)^2 = \frac{ke^2}{r}$$

$$\Longleftrightarrow \frac{1}{m}\frac{n^2h^2}{4\pi^2 r_n^2} = \frac{ke^2}{r_n}$$

$$\Longleftrightarrow r_n = \left(\frac{h^2}{4\pi^2 mke^2}\right)n^2 \quad \text{avec n} \in \mathbb{N}^*$$

On obtient donc

$$r_n = \left(\frac{h^2}{4\pi^2 mke^2}\right) n^2$$

- r_n: rayon de l'orbite de la n-ième couche atomique
- h: constante de Planck (6,62×10^{-34}J·s)
- e: valeur absolue de la charge de l'électron (1,6×10^{-19}C)
- m: masse de l'électron (9,1×10^{-31}kg)
- k: constante de Coulomb (9×10^{-9}SI)

On pose $a_0 = r_1$ (plus petit rayon des orbites de l'électron, aussi appelé *rayon de Bohr*)
<u>A.N:</u> $a_0 = \frac{h^2}{4\pi^2 mke^2} \simeq 5,29 \times 10^{-11} m$

5. Etablir, en fonction de e et du rayon r_n d'une orbite, l'expression de l'énergie totale de l'électron $E = E_c + E_{pe}$ (somme de l'énergie cinétique et de l'énergie potentielle électrique $E_{pe} = \frac{k \times q_{proton} \times q_{electron}}{r}$).

$$\begin{cases} E_{tot} = E_c + E_{p_e} \\ E_c = \frac{1}{2} mv^2 \\ E_{p_e} = q_{e^-} \times V_{\text{tension entre } e^- \text{ et } e^+} \end{cases} \Longrightarrow \begin{cases} E_{p_E} = -\frac{ke^2}{r_n} \\ E_c = \frac{1}{2} mv^2 \end{cases}$$

Or $||\overrightarrow{F_e}|| = \frac{mv^2}{r_n} = \frac{ke^2}{r_n^2}$ selon le PFD $\Longrightarrow mv^2 = \frac{ke^2}{r_n}$
$\Longrightarrow E_c = \frac{1}{2} mv^2 = \frac{1}{2} \frac{ke^2}{r_n}$
<u>Conclusion:</u> $E_{tot} = -\frac{ke^2}{2r_n}$: l'énergie est quantifiée.

6. En déduire E_n l'expression de l'énergie de l'électron sur l'orbite n, en fonction de e, a_0 et n. L'on pourra regrouper les constantes sous le terme E_1, énergie de la plus "basse" orbite. Quel est le nom de la constante E_1?
D'après les questions précédentes, on a:

$$\begin{cases} E_n = -\frac{ke^2}{2r_n} = \left(-\frac{ke^2}{2a_0}\right)\frac{1}{n^2} = E_1 \times \frac{1}{n^2} \\ E_1 = E(n=1) : \text{énergie de l'état fondamental} \end{cases}$$

<u>A.N:</u> $E_1 = -\frac{ke^2}{2a_0} = -\frac{9\times10^9 \times (1,6\times10^{-19})^2}{2\times5,29\times10^{-11}} = -2,177 \times 10^{-18} J = -13,6 eV$
(pour rappel: 1eV=$1,6$×10^{-19}J); de la même manière on obtient

$$E_n = \frac{E_1}{n^2} \begin{cases} n = 1 \rightarrow E_1 = -13,6 eV \\ n = 2 \rightarrow E_2 = -3,4 eV \\ n = 3 \rightarrow E_3 = -1,51 eV \\ \vdots \\ n \rightarrow \infty \rightarrow E_n = 0 \end{cases}$$

Ex2: Transitions électroniques

D'après le modèle de Bohr, l'on peut calculer le diagramme d'énergie de l'électron dans l'atome d'hydrogène (voir schéma), c'est-à-dire donner les différents niveaux d'énergie de l'électron dans les différentes couches n$\in \mathbb{N}^*$. Remarquons que ces énergies (en électronvolts ev) sont négatives, comme vu en Ex1.
(Cf figure 3 à la fin du document)

1. Sur le diagramme, où se trouve le niveau d'énergie fondamental ? A quoi correspond l'état d'énergie nulle ?
   Sur le diagramme, le niveau fondamental se situe au niveau n=1. L'état d'énergie nulle correspond aux états libres car n$\rightarrow +\infty$.

2. Calculer la longueur d'onde du photon émis lors de la désexcitation de l'état n = 3 vers l'état n = 2. Donner le résultat en nm. La lumière émise fait-elle partie du domaine visible ? A quelle(s) série(s) appartiennent ces transitions ?

   Calcul de λ du photon émis lors de la désexcitation de n=3$\rightarrow$n=2:
   E3 = -1,5eV et E2 = -3,4eV donc $\frac{hc}{\lambda_{3,2}} = |\Delta E_{3,2}| = |E_3 - E_2|$
   $\Longrightarrow \lambda_{3,2} = \frac{hc}{|E_2-E_3|} = \frac{6,62\times10^{-34}\times3\times10^8}{|-3,4+1,51|\times1,6\times10^{-19}} = 6,55\times10^{-7}m = 655nm$ (dans le spectre du visible)
   Ces transistions appartiennent au spectre de Balmer.

3. Quelle énergie (en électronvolts puis en joules) faut-il apporter pour opérér une transition électronique de l'état fondamental vers l'état n = 3 ? Quelle est la longueur d'onde du photon permettant d'opérer cette transition ? (insérer figure 3)
   $\Delta E_{1,3} = |E_3 - E_1| = |-1,5+13,6| = 12,1eV =$ (on multiplie par $1,6\times10^{-19}$)$1,94\times10^{-18}J$
   $\lambda_{3,1} = \frac{hc}{\Delta E_{3,1}} = \frac{6,62\times10^{-34}\times3\times10^8}{1,94\times10^{-18}} = 1,02\times10^{-7}m = 102nm$

4. Comment peut-on ioniser l'atome d'hydrogène depuis son état fondamental, c'est-à-dire arracher complètement l'électron à l'atome depuis l'état n = 1 ?
   Lors de l'ionisation, on doit passer de n=1 à n=$+\infty$, d'après la formule: $\Delta E_{1,\infty} = E_\infty - E_1 = 0 - (-13,6) = 13,6$eV

$$\lambda_{ionisation} = \frac{hc}{|E_\infty - E_1|} = \frac{hc}{|E_1|} = \frac{6,62\times10^{-34}\times3\times10^8}{13,6\times1,6\times10^{-19}} = 91nm$$

   Pour ioniser l'atome d'hydrogène, on doit lui envoyer 13,6eV, correspondant à une longueur d'onde de 91nm.

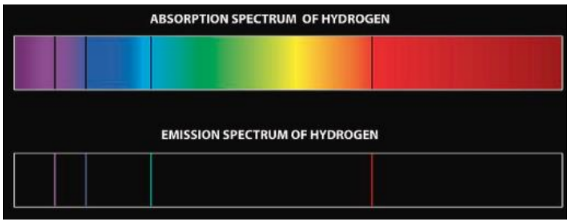

Figure 2: Spectres d'absorption et d'émission de l'atome d'hydrogène

5. La Figure 2 (juste au dessus) montre les spectres d'émission et d'absorption de l'atome d'hydrogène, mesurés en laboratoire. Calculer les longueurs d'onde des transitions du tableau ci-dessous et interpréter les spectres observés.

Transition	3→2	4→2	5→2	6→2
Longueur d'onde	655	486	433	409
Couleur	rouge-orange	bleu-vert	bleu-violet	violet

Remarques : Les données du diagramme de l'hydrogène selon le modèle de Bohr peuvent être comparées à l'expérience. Pour les atomes non hydrogénoïdes et les molécules, le modèle de Bohr est insuffisant pour prévoir par le calcul l'énergie des niveaux, en raison de la présence de plusieurs électrons.

Ex3: Incertitude d'une balle de tennis : relation de De Broglie (1924) et principe d'incertitude d'Heisenberg (1927)

Un électron et une balle de tennis se déplacent tous deux à une vitesse de 95 m·s^{-1}, avec une incertitude sur la vitesse de 0,085%.

1. Donner la longueur d'onde de De Broglie de chacun des deux objets, considérés tous deux comme des particules.
   (réponse à la question 2)

2. Quantifier l'incertitude sur la position de l'électron et sur celle de la balle de tennis.

	m(kg)	$\Delta v = v \times 0,085\%$	$\Delta x \geqslant \frac{\hbar}{2m\Delta v}$
e^-	9,1×10^{-31}	0,08m·s^{-1}	Δx_{e^-} ⩾0,76mm
balle	50×10^{-3}	0,08m·s^{-1}	$\Delta x_{balle} \geqslant 1,3 \times 10^{-32}$m

3. Commentaires.
   Le principe n'a pas de sens à l'échelle macroscopique. Ce principe précise que si on connnait avec précision la position de la particule, alors la mesure de la vitesse de la précise (autrement, c'est toujours un compromis entre la précision de la vitesse et la précision de la position).

   Données:

   - Masse d'un électron: $m_e = 9,1 \times 10^{-31}$kg
   - Masse de la balle de tennis: m $= 5,0 \times 10^{-2}$kg
   - Constante de Planck h: 6,62×10^{-34}Js

Rappel : $mv = \frac{h}{c} = p$ pour une particule à l'échelle nanoscopique et λ_B: longueur d'onde de De Broglie.

Annexes:

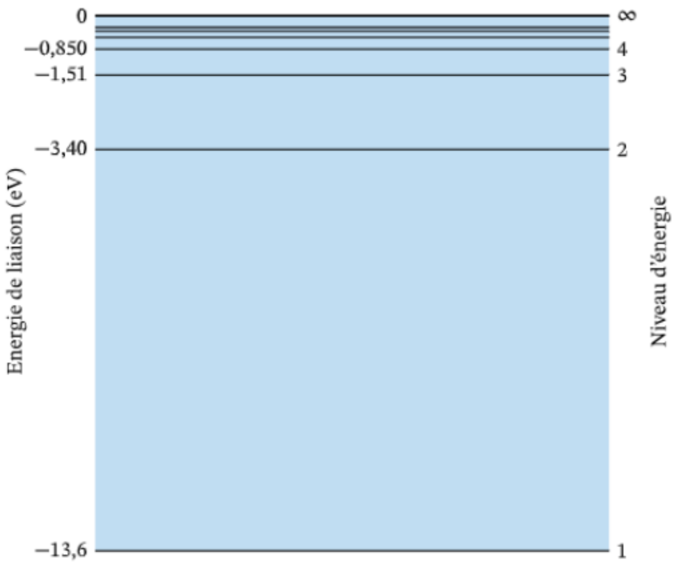

Figure 3: Diagramme d'énergie de l'atome d'hydrogène dans le cadre du modèle de Bohr