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 $f(x_1,\ldots,x_{n-k}) = 0$.

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 s'il 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, indicées 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

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

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 $\mathscr{R}$ définie dans la loi

$$\frac{\omega_{n\to m}}{c}=\mathscr{R}\left(\frac{1}{m^2}-\frac{1}{n^2}\right) \tag{2}$$

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.