

TD 17 | O6 - Mécanique quantique

I Flux de photons d'un laser (★)

Un laser hélium - néon émet une lumière rouge quasi - monochromatique de longueur d'onde dans le vide $\lambda_0 = 600\text{ nm}$. La puissance du laser est $P = 3\text{ mW}$. La section du faisceau laser est un disque de diamètre 1 mm .

1. Préciser la famille d'éléments chimiques à laquelle appartiennent le néon et l'hélium.

Réponse :
Ce sont tous les deux des gaz rares

2. Exprimer l'énergie E d'un photon émis par le laser. Faire l'application numérique en joule et en électron-volt.

Réponse :
On a d'après le cours $E = h\nu = hc/\lambda = 2\text{ eV} = 3 \times 10^{-19}\text{ J} \approx 2\text{ eV}$.

3. Quel est le flux Φ de photons, c'est-à-dire le nombre de photons émis par unité de temps par le laser ?

Réponse :
La puissance P est reliée au flux et à l'énergie par photon par la relation $P = \Phi E$ donc $\Phi = 10^{16}\text{ s}^{-1}$.

Données numériques : Pour simplifier les applications numériques, on prendra $h \approx 6 \times 10^{-34}\text{ Js}$ et $1\text{ eV} \approx 1,5 \times 10^{-19}\text{ J}$.

II Vitesse d'un électron (★)

Un atome d'hydrogène est constitué d'un électron de masse $m = 9,1 \times 10^{-31}\text{ kg}$ confiné dans une zone de taille $a = 1,0 \times 10^{-10}\text{ m}$ autour d'un proton.

1. Estimez l'ordre de grandeur de la vitesse de l'électron à l'aide de l'inégalité de Heisenberg.

Réponse :

On utilise l'inégalité de Heisenberg. Pour chercher un ordre de grandeur, on suppose l'égalité :

$$\Delta x \Delta mv_x \approx \frac{\hbar}{2} \Rightarrow v \approx \Delta v \approx \frac{\hbar}{2ma} \approx 500\text{ km/s}$$

En effet, pour des grandeurs harmoniques, on a $\Delta X \approx X$ (on approxime la variation, ou l'incertitude à l'amplitude).

2. Quelle est son énergie cinétique ?

Réponse :
La formule usuelle pour l'énergie cinétique donne simplement :

$$E_c = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m} \approx 1,4\text{ J}$$

soit $E_c \approx 0,9\text{ eV}$ (électron Volt : l'énergie potentielle d'un électron dans un champ électrique d'un Volt)

On donne la constante de PLANCK réduite : $\hbar = 1,0 \times 10^{-34}\text{ Js}$.

3. Estimez ensuite la valeur absolue de son énergie potentielle à l'aide de la formule suivante :

$$|E_p| = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{a} \quad \text{avec} \quad \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \approx 9 \times 10^9\text{ U.S.I.}$$

puis concluez.

Réponse :
On a $e = 1,6 \times 10^{-19}\text{ C}$ et $\epsilon_0 = 8,85 \times 10^{-12}\text{ A}^2\text{s}^4\text{kg}^{-1}\text{m}^{-3}$ et on en déduit $E_p \approx 14,4\text{ eV}$.

Les ordres de grandeur des énergies cinétiques et potentielles sont similaires.

4. Quelle est la longueur d'onde associée à l'électron ? A-t-on besoin de la mécanique quantique pour décrire un atome ?

Réponse :
On utilise la relation de de Broglie, $p = h/\lambda$ soit $\lambda = 1,5 \times 10^{-9}\text{ m}$. La longueur d'onde de l'électron est proche de la taille de l'atome ce qui rend nécessaire l'utilisation de la MQ pour la description du modèle atomique.

III Microscope électronique à balayage (★)

Le pouvoir de résolution d'un microscope, c'est-à-dire la taille caractéristique des plus petits détails qu'il permet d'observer est de l'ordre de grandeur de la longueur d'onde utilisée.

1. *Quel est le phénomène qui limite le pouvoir de résolution d'un microscope ?*

Réponse :

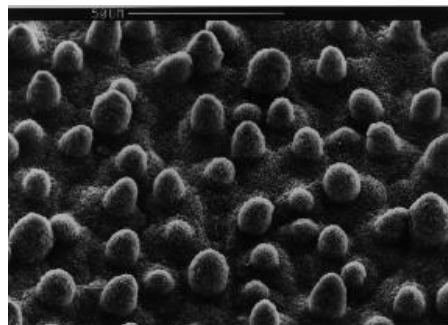
C'est le phénomène de diffraction qui joue un rôle prépondérant lorsque la longueur d'onde et les dimensions de l'objet étudié deviennent comparables.

2. *Rappelez les valeurs des longueurs d'onde extrêmes (dans le vide) du spectre visible et déterminer les énergies des photons correspondants en eV.*

Réponse :

On a $\lambda_V = 400 \text{ nm}$ et $\lambda_R = 750 \text{ nm}$ soit $E_V = 3,1 \text{ eV}$ et $E_R = 1,7 \text{ eV}$.

L'image ci-contre a été obtenue à l'aide d'un microscope électronique à balayage (MEB), dans lequel un faisceau d'électrons est envoyé sur l'échantillon à analyser.



L'objectif est de visualiser une feuille de lotus afin de comprendre ses propriétés. Après interaction avec la matière, ces électrons sont récupérés par des capteurs dont les informations permettent de reconstruire l'image.

3. *La taille des picots recouvrant la surface de cette feuille de lotus est d'environ $10 \mu\text{m}$. Sachant que l'on peut observer des détails 100 fois plus petits que les picots de la feuille (d'ailleurs eux-mêmes recouverts de "micro-picots"), expliquer pourquoi il n'est pas possible d'obtenir une telle image avec un microscope optique.*

Réponse :

$x_{\text{picot}} = 10 \mu\text{m}$ donc d'après l'énoncé, on a $x_{\text{detail}} \leq 100 \text{ nm}$. On en déduit $x_{\text{detail}} \ll \lambda_{\text{visible}}$. L'image du picot sera grandement altérée par le phénomène de diffraction (tâche floue).

4. *Évaluez l'ordre de grandeur de l'énergie cinétique minimale des électrons qui doivent être utilisés pour observer les détails mentionnés ci-dessus. On donne la masse de l'électron $m = 9,1 \times 10^{-31} \text{ kg}$.*

Réponse :

Pour le cas limite, on a $\lambda_e = x_{\text{detail}}$. On en déduit l'impulsion de l'électron en utilisant la relation de Planck-Einstein puis l'énergie cinétique :

$$\frac{h}{p_e} = \lambda_e = x_{\text{detail}} \Rightarrow E_c = \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2m} \left(\frac{h}{x_d} \right)^2 = 1,5 \times 10^{-4} \text{ eV}$$

Pour avoir une meilleure résolution, il faut ensuite diminuer λ_e et donc augmenter E_c .

5. *Sachant que les MEB actuels peuvent aller jusqu'à des énergies de 150 eV , déterminez la taille des plus petits détails qu'on peut observer avec ce type d'appareil.*

Réponse :

Il suffit d'inverser la relation précédente :

$$x_d = \frac{h}{\sqrt{2mE_c}} = 1,0 \times 10^{-10} \text{ m}$$

Il s'agit de la taille d'un atome

IV Électron confiné dans une molécule (★★)

Certaines molécules ayant une longue chaîne carbonée linéaire, comme le β -carotène contiennent des électrons qui ne sont pas attachés à un noyau particulier mais peuvent au contraire se déplacer sur toute la longueur de la molécule. On modélise un tel électron, de masse $m = 9,1 \times 10^{-31} \text{ kg}$ comme une particule qui se déplace librement sur un segment de droite compris entre les abscisses $x = 0$ et $x = L$. L'énergie potentielle de l'électron est alors nulle sur ce segment et infiniment grande partout ailleurs : l'électron est confiné dans une boîte quantique.

1. *Que peut-on en déduire (qualitativement) quant aux valeurs possibles pour les énergies de cet électron et en particulier concernant son énergie minimale (on détaillera le raisonnement) ?*

Réponse :

Confinement $\Rightarrow$ quantification de l'énergie. En utilisant le principe de Heisenberg, on montre que son énergie minimale est non nulle :

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \Rightarrow \Delta v \geq \frac{\hbar}{2mL}$$

Ainsi, l'électron possède une vitesse minimale non nulle, donc une énergie non nulle, même dans son état fondamental.

2. *Rappeler la définition de la fonction d'onde $\Psi(x, t)$. En particulier, quelle relation existe-t-il entre $\Psi(x, t)$ et la probabilité de présence de l'électron en x à l'instant t ?*

Réponse :

La fonction d'onde, également appelé amplitude de probabilité est une fonction complexe telle que la probabilité que l'électron se trouve en x à dx près à l'instant t vaut

$$P = |\Psi(x, t)|^2 dx$$

La somme des probabilité étant égale à 1, on a aussi :

$$\int_{x \in D} |\Psi(x, t)|^2 dx = 1$$

3. *Que valent $\Psi(0)$ et $\Psi(L)$? Justifier.*

Réponse :

Les domaines $x < 0$ et $x > L$ n'étant pas accessibles à l'électron (probabilité de présence rigoureusement nulle), on déduit par continuité de la fonction $\Psi(x)$:

$$\Psi(0) = 0 \text{ et } \Psi(L) = 0$$

4. *En déduire les valeurs possibles de la longueur d'onde de l'électron confiné. A quel phénomène ce comportement est-il analogue ?*

Réponse :

Par analogie avec la formation d'ondes stationnaires sur une corde de Melde, on peut en déduire que les seules longueurs d'ondes possibles pour l'électron confiné sont telles que

$$n \frac{\lambda_n}{2} = L \Leftrightarrow \lambda_n = \frac{2L}{n}$$

Ce résultat classique peut aussi être obtenu en considérant deux ondes qui se propagent dans les deux sens d'une cavité. La prise en compte de la première CL en $x = 0$ indique que l'on obtient des ondes stationnaires, tandis que la prise en compte de la seconde CL en $x = L$ donne le résultat mentionné.

5. *Donner enfin l'expression des niveaux d'énergie mécanique E_n en fonction de m , L , n et h . Justifier précisément.*

Réponse :

Par définition $E = E_c + E_p$ Or, dans le puits de potentiel, l'énergie potentielle est nulle. On a donc :

$$E = E_c = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m}$$

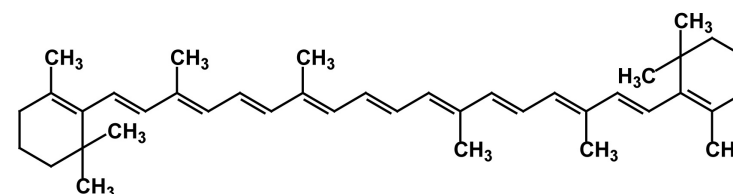
Or, d'après la relation de De Broglie, $p = h/\lambda$, d'où les différents niveaux d'énergie E_n correspondant aux longueurs d'ondes λ_n :

$$E_n = \frac{h^2}{2m\lambda_n^2} = \frac{h^2 n^2}{2m4L^2}$$

Soit au final :

$$E_n = n^2 \frac{h^2}{8mL^2}$$

Dans le β -carotène (formule ci-dessous), ce sont les 22 électrons des onze liaisons doubles qui se comportent comme des particules libres confinées, sur une longueur $L = 1,83$ nm. Dans l'état fondamental, ces électrons occupent les onze niveaux d'énergie les plus bas (deux par niveaux).



6. Calculer les niveaux d'énergie E_{11} et E_{12} . On donne $h = 6,62 \times 10^{-34}$ J.s.

Réponse :

L'application numérique donne $E_{11} = 2,18 \times 10^{-18}$ J et $E_{12} = 2,59 \times 10^{-18}$ J .

7. En déduire l'énergie, puis la longueur d'onde dans le vide d'un photon absorbé par la molécule lorsqu'un électron passe du niveau 11 au niveau 12. On donne $c = 3,00 \times 10^8$ m/s.

Réponse :

Lorsqu'un électron passe du niveau 11 au niveau 12, il faut que la molécule reçoive une énergie $E = E_{12} - E_{11}$. Ainsi, il faut qu'un photon d'énergie $E_{12} - E_{11}$ soit absorbé.

On a donc

$$E_{\text{photon}} = E_{12} - E_{11} = (144 - 121) \frac{h^2}{8mL} \Leftrightarrow E_{\text{photon}} = \frac{23h^2}{8mL^2}$$

L'application numérique donne $E = 4,14 \times 10^{-19}$ J soit $E = 2,6$ eV. La longueur d'onde correspondante vérifie la loi de Planck-Einstein :

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} \Leftrightarrow \lambda = \frac{hc}{E}$$

L'application numérique donne $\lambda = 480$ nm.

8. Expliquer alors la couleur orangées des organismes contenant une grande quantité de cette molécule (carottes, citrouilles, etc).

Réponse :

Ainsi, lorsqu'elle est exposée à la lumière blanche, la molécule absorbe le violet, mais pas les autres couleurs, ce qui fait qu'on la voit de la couleur complémentaire du violet/bleu, qui est le jaune/orangé.

V Résolution de l'équation de Schrödinger stationnaire (***)

On considère une particule quantique confinée dans un puits d'énergie potentielle V rectangulaire infini, unidimensionnel et de largeur L suivant l'axe (Ox) : $V(x) = 0$ pour $x \in [0, L]$, $V(x) = +\infty$ pour $x < 0$ et $x > L$

On cherche à retrouver l'expression E_n des niveaux d'énergie n par résolution directe de l'équation de Schrödinger stationnaire, qui dans ce cas, s'écrit :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + V(x)\Psi(x) = E\Psi(x)$$

De plus, $|\Psi(x)|^2 dx$ représente la probabilité d'observer la particule dans le domaine $[x - dx/2, x + dx/2]$. Ainsi on a $\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x)|^2 dx = 1$ car il est certain d'observer la particule quelque part sur $\mathbb{R}$.

1. Justifiez le fait que $|\Psi(x)|^2 = 0$ en dehors de l'intervalle $[0, L]$. En déduire les conditions aux limites $\Psi(0)$ et $\Psi(L)$.

Réponse :

Le potentiel étant infini, la probabilité d'y observer la particule est nulle soit $|\Psi(x)| = 0$. On en déduit par continuité $\Psi(0) = \Psi(L) = 0$.

2. On se place donc dans l'intervalle $[0, L]$. Simplifiez l'équation sur cet intervalle.

Réponse :

Sur cet intervalle, le potentiel V est constant et égal à 0 soit :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} = E\Psi(x)$$

3. La résoudre dans le cas où $E = 0$. Cette solution est-elle physiquement acceptable ?

Réponse :

Dans le cas où $E = 0$, on a par double intégration $\Psi(x) = ax + b$ avec $(a, b) \in \mathbb{C}^2$. En appliquant les conditions limites, on trouve $a = 0$ et $b = 0$.

Ce résultat est incompatible avec la condition de normalisation de la fonction d'onde (l'intégrale du module au carré de la fonction d'onde doit valoir 1)

4. La résoudre enfin dans le cas où $E > 0$. Montrez que pour que la solution vérifie les conditions aux limites, on doit avoir :

$$E = E_n = \frac{n^2 \hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \quad \text{avec } n \in \mathbb{N}^*$$

Réponse :

Dans le cas où $E > 0$, on obtient une équation du type "oscillateur harmonique" dont on connaît la solution (ici, la solution particulière est nulle car il n'y a pas de second membre) :

$$\Psi(x) = A \cos(kx) + B \sin(kx), \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

On peut de plus aisément vérifier que k a la dimension de l'inverse d'une distance : $[k] = L^{-1}$. En effet :

$$\begin{aligned} [k] &= \frac{[2mE]^{1/2}}{[\hbar]} \\ \Rightarrow [k] &= \frac{M^{1/2} \cdot E^{1/2}}{E \cdot T} = \frac{M^{1/2}}{E^{1/2} \cdot T} \\ \Rightarrow [k] &= \frac{M^{1/2}}{M^{1/2} \cdot L \cdot T^{-1} \cdot T} = L^{-1} \end{aligned}$$

En appliquant la première condition limite, on remarque que $A = 0$. La seconde condition limite donne :

$$B \sin(kL) = 0$$

Cette relation est soit vérifiée pour la solution triviale $B = 0$ qui ne peut être retenue ici (dans ce cas, Ψ ne peut être normalisée à 1), soit pour $kL = n\pi$, $n \in \mathbb{N}$. On en déduit finalement :

$$k^2 = \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 \Rightarrow \frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{n^2 \pi^2}{L^2} \Rightarrow E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2}$$

L'application des deux conditions limites permet de retrouver un résultat attendu : seuls certains modes peuvent exister dans le puits de potentiel $\Rightarrow$ **quantification**.

Pour aller plus loin :

Contrairement au cas de la corde de Melde, on peut ici trouver la valeur de B en utilisant la condition de normalisation sur $|\Psi(x)|^2$:

$$\int_{x=0}^L |\Psi(x)|^2 dx = 1 \Rightarrow \int_{x=0}^L |B|^2 \sin^2(kx) dx = 1$$

En utilisant la formule $\sin^2(\theta) = (1 - \cos(2\theta))/2$, on obtient $|B|^2 L/2 = 1$ soit finalement :

$$B = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{L}} \cdot e^{i\phi}, \quad \phi \in [0, 2\pi[$$

En effet, la phase de B ne peut être déterminée.

Éléments de réponses :

E2 Q4 : on trouve $\lambda \approx 1,5 \text{ nm}$ pour la longueur d'onde de l'électron

E3 Q5 : On trouve une taille typique de $1,0 \times 10^{-10} \text{ m}$

E4 Q5 : On doit trouver $E_n = n^2 \frac{\hbar^2}{8mL^2}$