

Licence de Physique, Parcours Sciences de la Matière, Année 2004-2005  
**Examen de seconde session, Mai 2005 (3h)**

*Les parties I, II et III sont entièrement indépendantes.*

## 1 Etat fondamental de l'atome H

La fonction d'onde de l'électron de l'atome d'hydrogène dans son état fondamental est de la forme

$$\psi(\vec{r}) = A \exp(-r/a_0)$$

où  $a_0$  est le rayon de Bohr.

On notera bien que  $\vec{r}$  désigne un point dans un espace **à 3 dimensions**.

1. Calculer la constante  $A$  en fonction de  $a_0$
2. Calculer la valeur moyenne de l'énergie potentielle et de l'énergie cinétique de l'électron. Pour l'énergie cinétique on utilisera le fait que  $\vec{\text{grad}} \psi(r)$  est purement radial, et égal à  $\psi'(r)\vec{e}_r$ . On exprimera les résultats en fonction de  $a_0$  et de constantes universelles.
3. Rappeler (sans calcul) les valeurs numériques de l'énergie de liaison de l'électron et du rayon de Bohr  $a_0$ . Vérifier que ces valeurs sont cohérentes avec le résultat ci dessus.

On donne  $e = 1.6 \cdot 10^{-19}\text{C}$ ,  $m_e = 9.1 \cdot 10^{-31}\text{kg}$ ,  $1/(4\pi\epsilon_0) = 9.1 \cdot 10^9\text{SI}$

## 2 Puits de potentiel asymétrique et noyau de deutérium

Le deuteron est composé d'un proton et d'un neutron. Son énergie de liaison est  $E = -2.22 \text{ MeV}$  et il n'existe pas d'autres états liés. Dans le cas d'une fonction d'onde à symétrie sphérique, on peut modéliser l'interaction proton-neutron par un puits de potentiel **à une dimension** défini par :

$$\begin{cases} V(z) = +\infty & \text{pour } z < 0 \\ V(z) = -V_0 & \text{pour } 0 \leq z \leq R (V_0 > 0) \\ V(z) = 0 & \text{pour } z > R \end{cases}$$

La variable  $z$  représente la distance entre le proton et le neutron.

1. Ecrire les équations qui doivent être vérifiées par l'énergie  $E$  et la fonction d'onde  $\psi(z)$  d'un état stationnaire dans les différentes régions de l'espace.

2. On pose :

$$q = \frac{\sqrt{2\mu(E + V_0)}}{\hbar} \quad , \quad k = \frac{\sqrt{-2\mu E}}{\hbar}$$

Montrer que les énergies des états liés sont solutions de l'équation :

$$qR \cotan(qR) = -kR$$

3. Etudier cette équation graphiquement en prenant  $x = qR$  comme variable. On remarquera que  $k^2 + q^2$  est une constante. Quelle est la condition pour que le système ait  $n$  états liés ?

### 3 Molécule CO<sub>2</sub>

La molécule de CO<sub>2</sub> est représentée par un **modèle unidimensionnel** de 3 points reliés par des ressorts de raideur  $k$ . On appelle atome 1 le premier atome O, 2 l'atome C et 3 le second atome O. La masse des O est  $M$ , celle de C est  $m$ .

1. On appelle  $u_i$  le déplacement de l'atome  $i$  par rapport à sa position d'équilibre. Justifier que l'énergie potentielle du système est

$$\frac{k}{2}((u_1 - u_2)^2 + (u_2 - u_3)^2)$$

2. Ecrire les équations du mouvement classiques pour les grandeurs  $u_1, u_2$  et  $u_3$ . En introduisant les quantités  $U = u_1 - u_3$ ,  $V = u_1 + u_3 - 2u_2$ ,  $W = (Mu_1 + mu_2 + Mu_3)/(m + 2M)$  montrer que ces équations sont équivalentes à celles du centre de gravité, et de deux oscillateurs harmoniques indépendants dont on précisera les fréquences.
3. On admet que le problème quantique se résout de la même manière, et introduit les mêmes oscillateurs harmoniques indépendants. Donner les énergies des 3 premiers niveaux excités de la molécule.
4. A quel type de mouvement correspondent, respectivement, des mouvements pour lesquels  $U$  ou  $V$  sont nuls ?
5. Expliquer pourquoi seulement un des deux types de vibration (lequel ?) va conduire à une absorption du champ électromagnétique.
6. Sachant que la molécule absorbe le rayonnement infra-rouge à une longueur d'onde de  $4,2\mu\text{m}$ , donner une valeur de la constante  $k$ . On donne  $m = 12m_p$ ,  $M = 16m_p$ ,  $m_p = 1,67 \cdot 10^{-27}\text{kg}$ .