UNIVERSITE PAUL SABATIER

TOULOUSE III

Licence Physique Chimie et Applications
L2 Mention physique

Année 2006/2007

Travaux Dirigés de Physique quantique

Texte 4 - ETATS NON STATIONNAIRES, OSCILLATEUR HARMONIQUE, ATOME D'HYDROGENE

I - Etat non stationnaire d'un électron dans un puits quantique:

1. Rappeler l'expression des fonctions d'onde stationnaires $\phi_0(x,t)$ et $\phi_1(x,t)$ ainsi que des énergies propres E_0 et E_1 pour l'état fondamental et le premier état excité d'un électron piégé dans un puits de potentiel infini de largeur L.
2. Montrer que la fonction d'onde $\phi(x,t)=\phi_0(x,t)+\phi_1(x,t)$ est solution de l'équation de Schrödinger. Cette fonction d'onde décrit donc un état quantique de l' électron dans le puits. Montrer que cet état quantique n'est pas stationnaire.
3. Calculer la densité de probabilité de présence de l'électron dans le puits pour l'état $\phi(x,t)$. Montrer que cette densité de probabilité de présence est de la forme $|\phi(x,t)|^2 = f_1(x)+f_2(x)cos(\omega t)$ où ω est une pulsation caractéristique à déterminer. Représenter $|\phi(x,t)|^2$ pour $t=0,T/4,T/2$ et $3T/4$ avec $T=2\pi/\omega$.
4. Calculer $\langle x(t)\rangle$ dans le cas où la particule est dans l'état $\phi(x,t)$. Représenter graphiquement $\langle x(t)\rangle$.
5. Application numérique : calculer ω pour un électron piégé dans un puits quantique de largeur $L=0.1nm$.

II - Etat fondamental et premier état excité d'un oscillateur harmonique:

1. Rappeler l'expression de l'Hamiltonien associé à un oscillateur harmonique de pulsation propre ω.
2. Vérifier que les fonctions d'onde $\phi_0(x,t)=A_0 exp(-\alpha x^2/2)exp(-iE_0 t/\hbar)$ et $\phi_1(x,t)=A_1 x exp(-\alpha x^2/2)exp(-iE_1 t/\hbar)$ sont fonctions propres de l'Hamiltonien à condition que la constante α ait une valeur que l'on déterminera. En déduire les valeurs propres E_0 et E_1 associées aux fonctions propres $\phi_0(x,t)$ et $\phi_1(x,t)$.
3. Déterminer A_0 et A_1 pour que ces fonctions soient normées. Vérifier qu'elles sont orthogonales.

III - Nuage électronique associé à l'état 1s de l'atome d'hydrogène:

1. Rappeler l'expression de l'Hamiltonien associé à un atome d'hydrogène. A l'état de plus basse énergie est associé la fonction d'onde d'expression $\phi_{1s}(r,t)=(\pi a_0^3)^{-1/2} exp(r/a_0)exp(-iE_1 t/\hbar)$, ou $a_0=53pm$ est le rayon de Bohr et $E_1=-13,6eV$.

2. Calculer les densités volumiques, radiale et angulaire de la probabilité de présence de l'électron autour du proton.
3. Pour quelle valeur de r la densité radiale est-elle maximum?
4. Calculer la probabilité $P(r)$ de trouver l'électron à une distance inférieure à r du proton. En déduire la probabilité pour que l'électron soit à une distance comprise entre $0.9a_0$ et $1.1a_0$. Calculer $P(r)$ pour $r=3a_0$. Commenter ces résultats par rapport à ceux donnés par le modèle de Bohr.

<u>On donne les intégrales:</u>

$$\int_0^{\infty} exp\left(-x^2\right)dx=\sqrt{\pi}/2$$

$$\int_0^{\infty} x^2 exp\left(-x^2\right)dx=\sqrt{\pi}/4$$

$$\int_0^{\pi/2} cos^3(x)dx=2/3$$