

NOM :

Prénom :

UNIVERSITÉ PAUL SABATIER L3 PHYSIQUE FONDAMENTALE

ANNÉE UNIVERSITAIRE 2009-2010

MÉCANIQUE QUANTIQUE

Interrogation n° 1 (durée 45 mn)

Exercice I : État fondamental de la molécule Na_3

La molécule Na_3 est formée de 3 atomes. Pour fixer les idées on numérote ces atomes de 1 à 3. La molécule a une forme de triangle isocèle dont la base (on suppose que c'est la distance entre les atomes 2 et 3) est plus longue que les côtés. On fait le modèle simple suivant pour les états d'un électron de valence dans la molécule Na_3 :

- L'espace des états est de dimension 3. La base de ces états correspond à des fonctions d'ondes centrées sur chaque atome et on note $|1\rangle$ la fonction centrée sur l'atome 1, $|2\rangle$ celle sur l'atome 2 et $|3\rangle$ celle sur l'atome 3. On admet que cette base est orthonormée;
- Le hamiltonien \mathbf{H} pour un électron dans cette base est de la forme :

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} 0 & -a & -a \\ -a & 0 & -b \\ -a & -b & 0 \end{bmatrix} \quad (1)$$

où a et b sont deux constantes positives. b dépend de la distance 2-3.

I.1. On définit 3 nouveaux kets :

$$\begin{aligned} |e'_1\rangle &= |1\rangle \\ |e'_2\rangle &= |2\rangle + |3\rangle \\ |e'_3\rangle &= |2\rangle - |3\rangle \end{aligned}$$

Montrer que ces 3 kets sont orthogonaux deux à deux, mais non nécessairement normés.

On sait $\langle 1|2\rangle = \langle 1|3\rangle = \langle 2|3\rangle = 0$ et $\langle 1|1\rangle = \langle 2|2\rangle = \langle 3|3\rangle = 1$

$$\langle e'_1 | e'_2 \rangle = \langle 1 | 2 \rangle + \langle 1 | 3 \rangle = 0, \text{ de même } \langle e'_1 | e'_3 \rangle = \langle 1 | 2 \rangle - \langle 1 | 3 \rangle = 0$$

$$\langle e'_2 | e'_3 \rangle = \langle 2 | 2 \rangle - \langle 2 | 3 \rangle + \langle 3 | 2 \rangle - \langle 3 | 3 \rangle = 1 - 0 + 0 - 1 = 0$$

Donner l'expression des kets $|e_1\rangle, |e_2\rangle, |e_3\rangle$ normalisés, proportionnels respectivement à $|e'_1\rangle, |e'_2\rangle, |e'_3\rangle$.

$$\begin{aligned} |e_1\rangle &= |e'_1\rangle \text{ évident.} \\ \langle e'_2 | e'_2 \rangle &= \langle 2 | 2 \rangle + \langle 3 | 3 \rangle = 2 \Rightarrow |e_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |e'_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|2\rangle + |3\rangle) \\ \langle e'_3 | e'_3 \rangle &= 2 \text{ aussi } \Rightarrow |e_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |e'_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|2\rangle - |3\rangle) \end{aligned}$$

TSVP

I.2. Écrire le hamiltonien dans la nouvelle base ($|e_1\rangle, |e_2\rangle, |e_3\rangle$). On pourra commencer par exprimer les kets $\mathbf{H}|e_1\rangle, \mathbf{H}|e_2\rangle, \mathbf{H}|e_3\rangle$ dans la nouvelle base (et se souvenir que les colonnes de la matrice sont les composantes de ces kets).

$$\begin{aligned}
 \mathbf{H}|e_1\rangle &= -a|2\rangle - a|3\rangle = -a\sqrt{2}|e_2\rangle && (0,5) \\
 \mathbf{H}|e_2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{H}|2\rangle + \mathbf{H}|3\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(-a|e_1\rangle - b|3\rangle - a|e_1\rangle - b|2\rangle) \\
 &= -\sqrt{2}a|e_1\rangle - b|e_2\rangle && (0,5) \\
 \mathbf{H}|e_3\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{H}|2\rangle - \mathbf{H}|3\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(-a|2\rangle - b|3\rangle + a|2\rangle + b|3\rangle) \\
 &= b|e_3\rangle && (0,5)
 \end{aligned}
 \quad \left. \vphantom{\begin{aligned} \mathbf{H}|e_1\rangle \\ \mathbf{H}|e_2\rangle \\ \mathbf{H}|e_3\rangle \end{aligned}} \right\} \mathbf{H} = \begin{pmatrix} 0 & -a\sqrt{2} & 0 \\ -a\sqrt{2} & -b & 0 \\ 0 & 0 & b \end{pmatrix} \quad (1)$$

I.3. Donner les niveaux d'énergie de ce hamiltonien (on ne demande pas les états propres).

On a déjà un niveau car $|e_3\rangle$ état propre : $E_3 = b$. $(0,5)$
 il faut diagonaliser $\begin{pmatrix} 0 & -a\sqrt{2} \\ -a\sqrt{2} & -b \end{pmatrix}$ pour les autres niveaux.

$$\Delta P(\lambda) = \lambda(\lambda + b) - 2a^2 \quad \Delta = (b^2 + 8a^2) \quad E_1 = \frac{-b - \sqrt{b^2 + 8a^2}}{2} \quad (0,5)$$

$$E_2 = \frac{-b + \sqrt{b^2 + 8a^2}}{2} \quad (0,5)$$

I.4. En fait, il y a trois électrons de valence (un par atome de sodium), et on «remplit» les niveaux d'énergie du hamiltonien comme vous avez appris à le faire en chimie : chaque niveau peut accueillir deux électrons au maximum, et on met les électrons dans les niveaux les plus bas. L'énergie totale est alors la somme des énergies de chacun des électrons. On suppose $b < a$. Quelle est l'énergie totale du système?

E_1 est le niveau fondamental, on y met 2 électrons. $(0,5)$
 la question est de savoir si on met le 3^e électron sur E_2 ou E_3

$$\text{mais } a > b \Rightarrow \sqrt{b^2 + 8a^2} > 3b \Rightarrow E_2 > E_3 \quad (0,5)$$

$$\text{l'énergie finale est } E = E_3 + 2E_1 = -\sqrt{b^2 + 8a^2} \quad (0,5)$$

Exercice II : Paquet d'ondes gaussien

On considère une particule libre à une dimension de masse m . On prend un paquet d'onde de la forme :

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int dk f(k) \exp[i(kx - \omega t)] \quad (2)$$

II.1. écrire l'expression de ω en fonction \hbar , m , et k

$$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m} \quad (1)$$

On suppose que dans l'équation (2), la fonction $f(k)$ est donnée par :

$$f(k) = (4\pi a^2)^{1/4} \exp\left(-\frac{a^2(k-k_0)^2}{2}\right)$$

II.2. Calculer explicitement l'intégrale de l'équation (2). On donne la formule suivante pour calculer l'intégrale (α et β sont des constantes complexes et l'on suppose $\text{Re}(\alpha) > 0$) :

$$\Psi(x,t) = \frac{(4\pi a^2)^{1/4}}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk e^{-\frac{a^2 k^2}{2} - \frac{i\hbar k^2 t}{2m}} e^{a^2 k_0 k + ikx} e^{-\frac{a^2 k_0^2}{2}}$$

$$= \left(\frac{a}{2\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk e^{-\left(\frac{a^2}{2} + \frac{i\hbar k^2 t}{2m}\right) k^2} e^{(a^2 k_0 + ix)k} e^{-\frac{a^2 k_0^2}{2}}$$

soit $\alpha = \frac{a^2}{2} + \frac{i\hbar k^2 t}{2m}$ et $\beta = a^2 k_0 + ix$; le $\sqrt{\pi}$ s'en va; le terme devant

l'exponentielle est $\left[\frac{a}{\sqrt{\pi}(a^2 + i\hbar t/m)}\right]^{1/2}$ et $\frac{\beta^2}{4\alpha} = \frac{-a^2 k_0^2}{2} = \frac{1}{2} \frac{(a^2 k_0 + ix)^2 - a^2 k_0^2}{a^2 + \frac{i\hbar t}{m}}$

(5)

le terme en k_0^2 s'en va et l'argument de l'exponentielle devient :

$$\frac{1}{2} \left(\frac{-x^2 a^2 + 2x k_0 \hbar t a^2 - a^2 k_0^2 \frac{\hbar^2 t^2}{m^2} + i \dots}{a^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2}} \right) = \frac{1}{2} \frac{-a^2}{a^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2}} \left[x - \frac{\hbar k_0 t}{m} \right]^2 + i \dots$$

II.3. Calculer la densité de probabilité de la position de la particule.

(2)

$$p(x,t) = |\Psi(x,t)|^2 = \sqrt{\frac{a^2}{\pi(a^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2})}} e^{-\frac{-a^2}{a^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2}} (x - v_0 t)^2}$$

La partie imaginaire ne donne qu'une phase.

avec $v_0 = \frac{\hbar k_0}{m}$.

II.4. En déduire la position et la largeur du paquet d'onde au cours du temps.

(1) le centre x déplace à la vitesse v_0 .

(1) la largeur est $\sqrt{\frac{a^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2}}{a^2}} = a \sqrt{1 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2 a^4}}$

augmente au cours du temps.