

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<sub>3</sub>**

La molécule Na<sub>3</sub> 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<sub>3</sub> :

- 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.

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

**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).

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

**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 ?

## 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 :

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

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

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 ( $\alpha$  et  $\beta$  sont des constantes complexes et l'on suppose  $\text{Re}(\alpha) > 0$ ) :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dk e^{-\alpha k^2 + \beta k} = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \exp\left(\frac{\beta^2}{4\alpha}\right)$$

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

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