UNIVERSITE PAUL SABATIER TOULOUSE III

L3 LICENCE PHYSIQUE CHIMIE APPLICATION 2008/2009
Mention physique fondamentale

Examen de Physique Quantique du 22 juin 2009

Module 2L50PY1E2
Durée : 2h - Tous documents interdits

I Orbitales atomiques

1°) Donner la forme générale des fonctions d'onde des états stationnaires de l'atome d'hydrogène $\Psi_{n,\ell,m}(r,\theta,\varphi)$ où on a séparé les variables en coordonnées sphériques. Que représentent les nombres quantiques n, ℓ et m ? Donner les valeurs propres associées.

2°) Définir les densités de probabilité radiale et angulaire de ces états. On s'attachera en particulier à bien expliquer la signification de ces fonctions.

3°) On donne :

$$Y_0^0(\theta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \quad Y_1^{\pm1}(\theta,\varphi) = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\, e^{\pm i\varphi} \quad Y_1^0(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta$$

Montrer par un calcul direct que les harmoniques sphériques correspondant aux états $\Psi_{n,\ell=1,m}(r,\theta,\varphi)$ sont normées. Quelle est la raison de cette normalisation ?

4°) On forme les trois superpositions linéaires suivantes :

$$\Psi_{n,\ell=1,m=0}(r,\theta,\varphi), \quad -\Psi_{n,\ell=1,m=1}(r,\theta,\varphi)+\Psi_{n,\ell=1,m=-1}(r,\theta,\varphi), \quad \Psi_{n,\ell=1,m=1}(r,\theta,\varphi)+\Psi_{n,\ell=1,m=-1}(r,\theta,\varphi)$$

Montrer que ces fonctions d'onde sont orthogonales entre elles. Les normer si nécessaire (on ne précisera pas pour l'instant le facteur de phase du coefficient de normalisation).

5°) Montrer que, si l'on choisit les facteurs de phase de normalisation de manière à ce que les fonctions soient réelles, ces trois nouvelles fonctions peuvent se mettre sous la forme :

$$\Psi_{nx}(\vec{r}) = f(r)\frac{x}{r}, \quad \Psi_{ny}(\vec{r}) = f(r)\frac{y}{r}, \quad \Psi_{nz}(\vec{r}) = f(r)\frac{z}{r}$$

6°) Dessiner l'orbitale correspondant à $\Psi_{nz}(\vec{r})$. Justifier l'appellation orbitale p_z. Déduire sans calcul la forme des autres orbitales.

7°) On étudie maintenant la fonction d'onde :

$$\Psi(\vec{r}) = \lambda\Psi_{nx}(\vec{r}) + \mu\Psi_{ny}(\vec{r}) + \nu\Psi_{nz}(\vec{r})$$

Montrer qu'elle est normée pourvu que les coefficients λ, μ et ν vérifient une relation que l'on donnera. Montrer que $\Psi(\vec{r})$ peut se mettre sous la forme $f(r)\frac{u}{r}$ et dire ce que représente u (on se restreindra au cas où λ, μ et ν sont réels).

II Superposition quantique des états de l'oscillateur harmonique

1°) Ecrire l'hamiltonien H d'un oscillateur harmonique à une dimension en fonction des opérateurs X et Px et des constantes m et ω.

2°) En introduisant les opérateurs $Q=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}X$ et $P=\frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}}Px$, donner l'expression du hamiltonien précédent.

3°) Soit les opérateurs de création et d'annihilation définis par : $a=\frac{Q+iP}{\sqrt{2}}$ et $a^{+}=\frac{Q-iP}{\sqrt{2}}$ et tels que $a|n\rangle=\sqrt{n}|n-1\rangle$ et $a^{+}|n\rangle=\sqrt{n+1}|n+1\rangle$ où $|n\rangle$ désigne un état propre de *H*.

Calculer le commutateur $[a,a^{+}]$ ainsi que le produit $a^{+}a$.

4°) En déduire une nouvelle expression de *H* faisant intervenir ces deux opérateurs. Donner la position des niveaux d'énergie en fonction de ω et n.

5°) Montrer que l'état $|\alpha\rangle=e^{-|\alpha|^2/2}\sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle$ est un état propre de l'opérateur *a* défini au 3°).

6°) A l'instant t=0, l'oscillateur est dans l'état $|\psi(t=0)\rangle=|\alpha\rangle$. Donner l'expression de $|\psi(t)\rangle$.

7°) Pendant un temps τ très bref (τ<<1), l'oscillateur est soumis à un potentiel supplémentaire : $V=\hbar uN^2$ avec $u>>\omega$ et $N=a^{+}a$. Nous considérerons que pendant le temps τ, l'hamiltonien total du système est tel que $H\approx V$. Montrer que les états $|n\rangle$ sont états propres de V.

8°) Ecrire le développement, sur la base des états $|n\rangle$, de $|\psi(\tau)\rangle$ lorsque $|\psi(t=0)\rangle=|\alpha\rangle$.

9°) Que devient $|\psi(\tau)\rangle$ lorsque $\tau=\pi/2u$? En utilisant $e^{-in^2\pi/2}=\frac{1}{2}[1-i+(1+i)(-1)^n]$, montrer que $|\psi(\tau)\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(e^{-i\pi/4}|\alpha\rangle+e^{i\pi/4}|-\alpha\rangle)$.

10°) α est un imaginaire pur tel que $\alpha=i\gamma$. Déterminer les valeurs moyennes de *X* et de P_x lorsque l'oscillateur se trouve dans les états $|\alpha\rangle$ et $|-\alpha\rangle$. Quelle est la particularité de $|\psi(\tau)\rangle$?