

Examen de Physique Quantique du 20 juin 2011

Module 2L50PY1E2

Durée : 2h - Calculatrices, documents et téléphones portables interdits

I Orbitales atomiques

1. Donner la forme générale des fonctions d'onde des états stationnaires de l'atome d'hydrogène $\varphi_{n,l,m}(\vec{r})$. Quelles sont les grandeurs physiques associées aux nombres quantiques n , l et m ? Donner les valeurs propres associées à ces grandeurs physiques.
2. Définir les densités de probabilité radiale et angulaire de ces états. Que représentent ces fonctions?
3. Montrer par un calcul complet que les harmoniques sphériques correspondant aux fonctions $\varphi_{n,l,m}(\vec{r})$ sont normées.

$$\text{On donne : } Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, Y_1^{\pm 1}(\theta, \varphi) = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi} \text{ et } Y_1^0(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$$

4. On forme les trois superpositions linéaires suivantes : $\varphi_{n,1,0}(\vec{r})$, $-\varphi_{n,1,1}(\vec{r}) + \varphi_{n,1,-1}(\vec{r})$ et $\varphi_{n,1,1}(\vec{r}) + \varphi_{n,1,-1}(\vec{r})$. Normer, si besoin, ces fonctions d'ondes et montrer qu'elles sont orthogonales entre elles (on gardera pour l'instant un facteur de phase non précisé de la forme $e^{i\alpha}$).
5. En utilisant les relations entre les paramètres du repère sphérique, montrer (au besoin en choisissant le facteur de phase) que ces trois nouvelles fonctions peuvent se mettre sous la forme $\varphi_{nx}(\vec{r}) = f(r) \cdot \frac{x}{r}$, $\varphi_{ny}(\vec{r}) = f(r) \cdot \frac{y}{r}$ et $\varphi_{nz}(\vec{r}) = f(r) \cdot \frac{z}{r}$.
6. Donner la définition de l'orbitale associée à $\varphi_{nz}(\vec{r})$ et la dessiner. Justifier l'appellation orbitale p_z . En déduire sans calcul la forme des deux autres orbitales.
7. On se propose maintenant d'étudier la fonction d'onde suivante :
 $\varphi(\vec{r}) = \lambda \cdot \varphi_{nx}(\vec{r}) + \mu \cdot \varphi_{ny}(\vec{r}) + \nu \cdot \varphi_{nz}(\vec{r})$. Montrer que cette fonction d'onde est normée pourvu que les coefficients λ , μ et ν vérifient une relation que l'on donnera. En déduire que $\varphi(\vec{r})$ peut se mettre sous la forme $f(r) \frac{u}{r}$. Que représente alors u ?

$$\text{On donne } \sin p \cos q = \frac{1}{2} (\sin(p-q) \sin(p+q)) \text{ et } \cos^2 p = \frac{1}{2} (1 + \cos 2p)$$

II Modèle de deux oscillateurs pour l'étude de l'interaction de Van der Waals

On considère un oscillateur pour lequel x représente la position instantanée d'une particule de masse m par rapport à un point fixe O et tel que sa position d'équilibre corresponde à $x = 0$; on ne se préoccupe dans tout ce problème que des déplacements selon la seule direction x . On désignera par k la constante de force.

1. Ecrire le Hamiltonien de ce système.
2. On cherche une fonction d'onde de la forme $\Psi = N \exp(-ax^2)$. Après avoir indiqué la signification de N , calculer a . En supposant que Ψ décrit l'état fondamental, déterminer l'énergie correspondante et l'exprimer en fonction de ν_0 , fréquence caractéristique de l'oscillateur en mécanique classique.
3. On considère alors deux oscillateurs identiques au précédent dont les points fixes O_1 et O_2 sont séparés par la distance R . On suppose que ces deux oscillateurs sont couplés par une interaction d'origine électrostatique donnée par le potentiel d'interaction de la forme Ax_1x_2 / R^3 , où x_1 et x_2 représentent respectivement l'élongation de l'oscillateur 1 et de l'oscillateur 2, et A une constante.
 - a. Ecrire le Hamiltonien complet de ce nouveau système constitué des deux oscillateurs couplés.
 - b. Montrer que, moyennant le changement de variables $u = x_1 + x_2$, $v = x_2 - x_1$, le Hamiltonien total peut se mettre sous la forme $H'(u) + H''(v)$ où H' et H'' sont des Hamiltoniens du même type que celui établi en 1. Indiquer la masse effective et la constante de force effective pour chacun de ces deux Hamiltoniens.
4. Dédurre des résultats précédents la valeur de l'énergie de l'état fondamental pour ce système de deux oscillateurs couplés. En effectuant un développement limité au deuxième ordre par rapport à $1 / R^3$, montrer qu'elle diffère de celle du système sans interaction par un terme en $1 / R^6$, caractéristique de l'interaction de type Van der Waals. On rappelle que $(1 \pm x)^\alpha = 1 \pm \alpha x + \frac{\alpha(\alpha-1)}{2!}x^2 + O(x^3)$.