

MÉCANIQUE QUANTIQUE

Interrogation n° 1 (*durée 20 mn*)

Questions de cours

1. On note \vec{s} le spin d'un électron et $\vec{\mu}$ son moment magnétique. Donner sans démonstration la relation entre $\vec{\mu}$ et \vec{s} , en faisant intervenir les constantes fondamentales e (charge élémentaire), m_e (masse de l'électron) et \hbar . On notera g le facteur de Landé.

2. Donner (toujours sans démonstration) l'expression des opérateurs \mathbf{s}_x , \mathbf{s}_y , \mathbf{s}_z (composantes du spin de l'électron) dans la base ($|+\rangle$, $|-\rangle$) des kets propres de \mathbf{s}_z .

Exercice : État fondamental de la molécule Na_3

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 :

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

où a et b sont deux constantes positives. b dépend de la distance 1–3.

1. On définit 3 nouveaux kets :

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

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

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

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.

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

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 ?