Examen de Physique Quantique I

Novembre 2020
Phelma IPhy 2A / C. Winkelmann

Etats liés de l'oscillateur harmonique tri-dimensionnel

- On note H_i l'hamiltonien de l'oscillateur harmonique à une dimension, avec $i = x, y$ ou z. Par exemple
$$H_x = \frac{P_X^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} X^2,$$
avec m la masse de la particule, ω sa pulsation propre, X et P_X les opérateurs position et impulsion selon x. On définit aussi l'échelle de longueur naturelle du système $\lambda = \sqrt{\hbar/m\omega}$.
- On admet que le spectre de H_i est de la forme $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$, avec n un entier naturel. Les fonctions propres associées (normées) sont de la forme
$$\varphi_n(x) = \left(\frac{1}{\pi\lambda^2}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n\, n!}}\, H_n(x/\lambda)\, \exp(-x^2/2\lambda^2),$$
où les H_n sont les polynômes d'Hermite. Les premiers de ceux-ci s'écrivent $H_0(x) = 1$ et $H_1(x) = 2x$; nous n'aurons pas besoin de l'expression explicite des suivants.
- Les vecteurs sont notés en **gras**.
- Les questions un peu plus difficiles sont signalées par une étoile *. Leur résolution n'est pas indispensable pour traiter la suite.

1 Etats à une particule de l'oscillateur harmonique 3D

On considère l'hamiltonien d'une particule de masse m confinée dans un potentiel harmonique tri-dimensionnel *isotrope*
$$H = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\mathbf{R}^2$$

1.1

Montrez que le problème est factorisable selon les trois directions orthogonales d'une référentiel cartésien. Déduisez-en que le spectre est de la forme
$$E = \hbar\omega(n_x + n_y + n_z + 3/2),$$
avec $(n_x, n_y, n_z) \in \mathbb{N}^3$

1.2

Donnez la fonction d'onde $\psi(x, y, z)$ de l'état fondamental et décrivez sa forme qualitativement.

1.3

Décrivez en détail le premier état excité : énergie, dégénérescence, expression (et forme) des fonctions d'onde.

1.4

*Montrez que la dégénérescence d'un état propre d'énergie $\hbar\omega(n+3/2)$ est $(n+1)(n+2)/2$.

1.5

Justifier la pertinence du moment cinétique orbital pour décrire ce système. Est-ce que les fonctions propres du premier état excité (question 1.3) sont aussi des états propres du moment cinétique ? Discutez.

1.6

Dans quel référentiel travaillera-t-on pour chercher les fonctions d'onde qui sont états propres du moment cinétique ? On rappelle la relation vue en cours $\mathbf{P}^2 = \frac{\mathbf{L}^2}{r^2} - \frac{\hbar^2}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r\cdot)$. On note $\hbar^2\ell(\ell+1)$ les valeurs propres de $\mathbf{L}^2$. Donnez la forme générale des états propres communs de H et du moment cinétique et donnez l'équation différentielle *radiale* dont ils sont solutions.

1.7

*On ne cherchera pas à résoudre cette équation différentielle radiale. En vous inspirant du début du problème, proposez néanmoins une forme asymptotique des solutions pour $r \to +\infty$. Commentez. Pouvez-vous suggérer comment procéder pour trouver les solutions générales de l'équation différentielle radiale à partir de cette forme asymptotique (en analogie avec ce qui est fait pour l'atome d'hydrogène).

1.8

*On admettra que la résolution complète permet de montrer que les énergies propres de H sont de la forme $E = \hbar\omega(2\nu + \ell + 3/2)$ avec ℓ défini en 1.6, ν un entier et où le couple (ν, ℓ) parcourt $\mathbb{N}^2$ de manière *indépendante* (sans relation entre eux). Cela confirme le résultat trouvé plus haut, sauf que l'on sait à présent que ℓ est la "norme" du moment cinétique. Justifiez à présent de manière indépendante la dégénérescence trouvée à la question 1.4 (il est conseillé de considérer séparément les deux cas de parité possibles de $n = 2\nu + \ell$).

1.9

Sur un diagramme (norme du moment cinétique, énergie) nous avons représenté en cours les états de plus basse énergie de l'atome d'hydrogène $(1s, 2s, 2p, ...)$, avec leur multiplicité. Faites-en de même avec l'hamiltonien présent pour les niveaux de plus basse énergie $(n = 2\nu + \ell \leq 3)$. On pourra noter ces états sous la forme $|n, \alpha\rangle$, avec $\alpha = s, p, d, ...$ pour $\ell = 0, 1, 2, ...$ respectivement. Commentez les différences avec l'atome d'hydrogène.

2 Deuxième électron

On considère désormais la présence de deux électrons, aux positions notées $\mathbf{r}_1$ et $\mathbf{r}_2$ dans ce même potentiel confinant. On néglige le spin, l'indiscernabilité et l'interaction coulombienne répulsive entre les deux électrons.

2.1

Ecrivez l'hamiltonien du système en précisant dans chaque cas à quelle variable s'appliquent les dérivées spatiales. Montrez qu'il est constitué de deux termes qui commutent. Déduisez-en que la fonction d'onde du système de deux particules $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ est le produit de deux fonctions déterminées dans la partie I.

2.2

Décrivez qualitativement l'état fondamental et le premier niveau excité du système. Proposez une base du premier niveau excité dont les vecteurs soient tous soit symétriques soit antisymétriques par échange entre les deux électrons.

2.3

Ré-écrivez l'équation différentielle en prenant comme nouvelles variables la position du centre de masse $\mathbf{R} = (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)/2$ et la position relative $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$. On pourra utiliser les relations

$$\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_2^2} = 2\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{\partial^2}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2}{\partial Z^2}\right)$$

et

$$r_1^2 + r_2^2 = 2R^2 + \frac{1}{2}r^2,$$

où (x, y, z) sont les composantes cartésiennes de $\mathbf{r}$, et (X, Y, Z) celles de $\mathbf{R}$

2.4

Montrez que le système peut être décrit comme la somme de deux oscillateurs, décrivant l'un le centre de masse et l'autre le mouvement relatif des deux électrons. Donnez-en les pulsation et longueur caractéristique respectives.

2.5

On note $|0S\rangle|0s\rangle$ l'état fondamental, où le premier ket est relatif au mouvement du centre de masse et le deuxième au mouvement relatif des deux électrons. Exprimez le premier état excité dans cette base et discutez-en la dégénérescence.