Etats liés de l'~~osc~~oscillateur harmonique 3D

1.1 $H = H_x + H_y + H_z$, qui commutent tous les trois

$\Rightarrow$ le problème est factorisable

$$\Psi(x,y,z) = \varphi_1(x) \cdot \varphi_2(y)\, \varphi_3(z)$$

avec p. ex. φ_1 vect. propre de H_x
de valeur propre $\hbar\omega\,(n_x + 1/2)$

$$\Rightarrow \quad E = E_x + E_y + E_z = \hbar\omega\,(n_x + n_y + n_z + 3/2)$$

1.2 $$\varphi^{(0)}(x) = \left(\frac{1}{\pi\lambda^2}\right)^{1/4} e^{-x^2/2\lambda^2}$$

$$\Psi^{(0)}(x,y,z) = \left(\frac{1}{\pi\lambda^2}\right)^{3/4} e^{-\frac{r^2}{2\lambda^2}}$$

Cette fonction d'onde est de symétrie sphérique; la probabilité de présence est maximale à l'origine, et contenue essentiellement dans un rayon λ.

1.3 $$\Psi^{(1)}(x,y,z) = \left(\frac{1}{\pi\lambda^2}\right)^{3/4} \frac{1}{\sqrt{2}}\, 2x\, e^{-r^2/2\lambda^2}$$

ou y, ou z

Fonction anti symétrique dans la direction de son excitation.

Energie $= \hbar\omega\,(1 + 3/2) = \frac{5}{2}\hbar\omega$

dégénérée 3 fois, selon si excitation dans direction x, y, ou z.

1.4 Soit un état d'énergie $\hbar\omega(n+\frac{1}{2})$

Combien de façons de choisir $n = n_x + n_y + n_z$?

tous les trois $\in \mathbb{N}$

Il y a $(n+1)$ façons de choisir $n_x = 0, \dots, n$

Pour un n_x donné, il y a $n_x + 1$ façons de choisir $n_y = 0, \dots, n_x$

n_z est alors déterminé.

$\hookrightarrow$ dégé $= \sum_{n_x=0}^{n} (n_x+1) = \sum_{n_x=1}^{n+1} n_x = \frac{(n_x+1)(n_x+2)}{2}$

1.5 . Le potentiel est isotrope donc $[H, \vec{L}] = \vec{0}$ et H, L_z et $\vec{L}^2$ sont codiagonalisables.

$\rightarrow \vec{L}$ est pertinent pour construire la base de diagonalisation de H.

1.6 • Non, les trois fonctions d'onde de 1.3 ne sont pas des états propres de L_z, car p. ex. $\psi^{(1)}(x,y,z) \propto x e^{-r^2/2\lambda^2}$ fait ressortir une direction privilégiée dans le plan xOy ; ce n'est donc pas un état propre de L_z. En effet

$$L_z \psi^{(1)} \propto \frac{\partial}{\partial \varphi} (x \cdot e^{-r^2/2\lambda^2})$$

$$= e^{-r^2/2\lambda^2}\, r \underbrace{\frac{\partial \cos\varphi}{\partial \varphi}}_{\propto \sin\varphi} \not\propto \cos\varphi$$

1.6 Réf. sphérique !

$$\vec{P}^2 = \frac{\vec{L}^2}{r^2} - \frac{\hbar^2}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r\,.)$$

Soit $\Psi_{\ell m}$ tel que

$H\Psi_{\ell m} = E\Psi_{\ell m}$ $\qquad L_z\Psi_{\ell m} = \hbar m\Psi_{\ell m}$

$\vec{L}^2\Psi_{\ell m} = \hbar^2 \ell(\ell+1)\Psi_{\ell m}$

→ harmonique sphérique

$\Psi_{\ell m} = \chi(r)\cdot Y_\ell^m(\theta,\varphi)$

$$E\Psi_{\ell m} = H\Psi_{\ell m}$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\underbrace{\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r\chi Y_\ell^m)}_{Y_\ell^m\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r\chi)} + \frac{1}{2m}\underbrace{\frac{\vec{L}^2}{r^2}\chi Y_{\ell m}}_{\frac{\chi}{r^2}\hbar^2\ell(\ell+1)Y_\ell^m} + \frac{m\omega^2}{2}r^2\chi Y_\ell^m$$

→ on simplifie par Y_ℓ^m

$$E\chi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r\chi) + \frac{1}{2m}\frac{\hbar^2(\ell+1)\ell}{r^2}\chi + \frac{m\omega^2}{2}r^2\chi$$

Eq. différentielle radiale.

1.7 $\quad r \to +\infty$ $\qquad$ soit $\phi = r\chi$

$$E\phi \simeq -\frac{\hbar^2}{2m}\phi'' + \frac{m\omega^2}{2}r^2\phi$$

$$\phi'' \simeq \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}\cdot r^2\phi = \frac{1}{\lambda^4}r^2\phi$$

Essayons/ Posons $\phi = e^{-\frac{r^2}{2\lambda^2}}$

$$\phi' = -\frac{r}{\lambda^2} e^{-\frac{r^2}{2\lambda^2}}$$

$$\phi'' = \left(\frac{r^2}{\lambda^4} - \frac{1}{\lambda^2}\right) e^{-r^2/2\lambda^2} \simeq \frac{r^2}{\lambda^4} e^{-r^2/2\lambda^2}$$

$$= \frac{r^2}{\lambda^4} \phi$$

Donc c'est la bonne forme asymptotique.

N.B. : $\phi = e^{+r^2/2\lambda^2}$ marcherait aussi, mais ne serait pas intégrable.

1.8 * si n pair $\Rightarrow l = \cancel{}\ 2i = n - 2v$

et $i = 0, 1, \dots, n/2$

alors dégé $= g_n = \sum_{i=0}^{n/2} (2l+1) = \left(\frac{n}{2}+1\right) \times 1 + 4 \cdot \frac{n}{2}\left(\frac{n}{2}+1\right)\frac{1}{2}$

$\uparrow$ projections m_l

$$= \left(\frac{n}{2}+1\right)\left(1+n\right) = \frac{(n+1)(n+2)}{2}$$

* si n impair $\Rightarrow l$ est impair

$\Rightarrow l = 2i + 1$

avec $i = 0, 1, \dots, \frac{n-1}{2}$

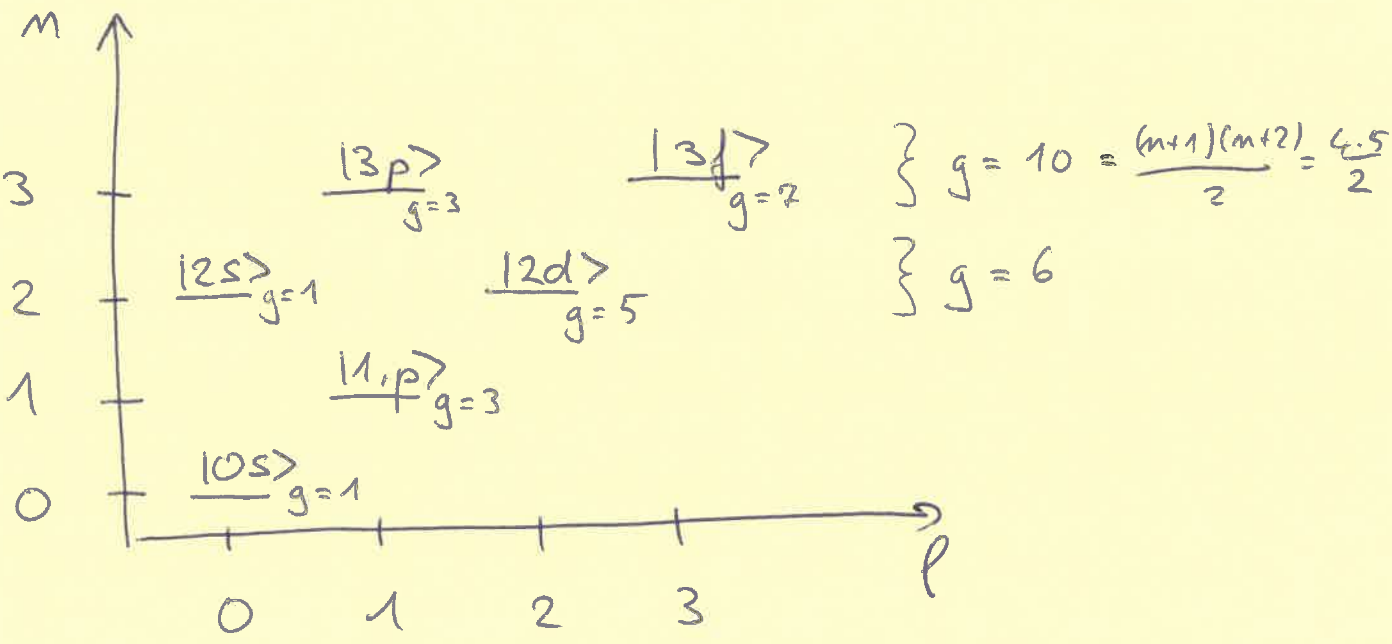
alors $$g_n = \sum_{i=0}^{\frac{n-1}{2}} \left(2\cdot(2i+1)+1 \right)$$

$$= \left(\frac{n-1}{2}+1\right)\times 3 + 4\cdot\left(\frac{n-1}{2}\right)\left(\frac{n-1}{2}+1\right)\cdot\frac{1}{2}$$

$$= \left(\frac{n+1}{2}\right) * \left(3 + n-1\right) = \frac{(n+1)(n+2)}{2}$$

1.9

Oscillateur harmonique 3D



On retrouve des états possibles au dessus d'une diagonale imposée par $l \leq n$, comme dans l'atome d'H, mais décalée de 1 (inégalité pas stricte ici).

Au-dessus de cette diagonale, on trouve une structure "en damier", car n et l doivent avoir la m̂ parité.

2.1

$$H = \frac{\vec{P}_1^2}{2m} + \frac{\vec{P}_2^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\vec{R}_1^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\vec{R}_2^2$$

agissent sur ~~$\vec{r}_1$~~ $\vec{r}_1$ dans $\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$

agissent sur $\vec{r}_2$ dans $\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$

Ces deux sous-hamiltoniens commutent car ils n'agissent pas sur les mêmes variables.

$\Rightarrow$ $\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$ se factorise en $\Psi_1(\vec{r}_1) \times \Psi_2(\vec{r}_2)$ dont l'expression a été déterminée en première partie.

2.2 * $\Psi_{fonda} = \Psi^{(0)}(\vec{r}_1) \cdot \Psi^{(0)}(\vec{r}_2) = |0s\rangle \cdot |0s\rangle$

$$= \left(\frac{1}{\pi\lambda^2}\right)^{1/2} e^{-\frac{r_1^2+r_2^2}{2\lambda^2}}$$

Energie $= \hbar\omega\left(\frac{3}{2}+\frac{3}{2}\right) = 3\hbar\omega$

* $\Psi_{exc} = |0s\rangle \cdot |1p\rangle$ ou $|1p\rangle|0s\rangle$

Energie $= \hbar\omega\left(\frac{3}{2}+\frac{5}{2}\right) = 4\hbar\omega$

dégé $= 3+3 = 6$

* Base symétrique : $\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0s\rangle|1pm\rangle \pm |1pm\rangle|0s\rangle\right)$

avec $m = -1, 0, 1$

2.3

$$H\Psi = E\Psi$$

$$= \frac{-\hbar^2}{2m}\left(2\Delta_{\vec{r}} + \frac{1}{2}\Delta_{\vec{R}}\right) + \frac{1}{2}m\omega^2\left(2R^2 + \frac{1}{2}r^2\right)$$

$$= \frac{-\hbar^2}{2m}\cdot 2\Delta_{\vec{r}} + \frac{1}{2}\overbrace{m\omega^2}^{k}\cdot\frac{1}{2}r^2$$

$$+ \frac{-\hbar^2}{2m}\,\frac{1}{2}\Delta_{\vec{R}} + \frac{1}{2}\overbrace{m\omega^2}^{k}\cdot 2R^2$$

2.4 premier oscillateur ($\vec{r}$) $\quad m \to \frac{m}{2} \quad k \to \frac{k}{2}$

$\Rightarrow \omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ inchangé

mais $\lambda_{\vec{r}} = \sqrt{2}\cdot\lambda$

2e oscillateur ($\vec{R}$)

$m \to 2m \quad k \to 2k$

$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ inchangé

mais $\Lambda_{\vec{R}} = \frac{1}{\sqrt{2}}\lambda$

2.5 premier état excité : $E = 4\hbar\omega$ (cf. 2.2)

$|1P\rangle|0s\rangle$ ou $|0S\rangle|1p\rangle$

dégé = 3 + 3 = 6