TD 1 Physique quantique -

Exercice 3.

14- f vérifie l'équation de Schrödinger indépendant du tps

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2f}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2 f(x) = E\,f(x).$$

15. A priori l'introduction de ces variables doit permettre d'adimensionner l'éq.

$$\alpha^4 = x^4\,\frac{\mu k}{\hbar^2}$$

$$\dim \alpha^4 = L^2\,\frac{M\,\dim(kx^2)}{T^2\,\dim(\text{énergie}^2)} \leftarrow \cancel{\dim(\text{énergie})}$$

$$= \frac{ML^2T^{-2}}{\dim(\text{énergie})}$$

$$= 1$$

$$\dim(\gamma^2) = \frac{M\,\cancel{\dim(\text{énergie}^2)}}{T^2\,\cancel{\dim(\text{énergie}^2)}}\,\frac{L^2}{\dim(kx^2)}$$

$$= \frac{ML^2T^{-2}}{\dim(\text{énergie})} = 1$$

α et γ sont respectivement, la position et l'énergie adimensionnée.

16. Les changements de variables de ce type peuvent être "piégeux". Pensez à utiliser la dimension

$$\dim\left(\frac{df}{d\alpha}\right) = \dim(f)$$

$$\dim\left(\frac{df}{dx}\right) = \frac{\dim f}{L} \quad \text{or} \quad \dim\left(\frac{\mu k}{\hbar^2}\right)^{1/4} = \frac{1}{L}.$$

$$\dim\left(\frac{df}{dx}\right) = \dim\left(\frac{\mu k}{\hbar^2}\right)^{1/4}\dim\left(\frac{df}{d\alpha}\right)$$

$$\frac{df}{dx} = \frac{df}{d\alpha}\,\frac{d\alpha}{dx} = \left(\frac{\mu k}{\hbar^2}\right)^{1/4}\frac{df}{d\alpha}.$$

$$\frac{d^2f}{dx^2} = \frac{d}{d\alpha}\left(\frac{df}{dx}\right)\frac{d\alpha}{dx} = \left(\frac{\mu k}{\hbar^2}\right)^{1/2}\frac{d^2f}{d\alpha^2}$$

$$-\frac{\cancel{\hbar^2}}{2\mu}\left(\frac{\mu k}{\cancel{\hbar^2}}\right)^{1/2}\frac{d^2f}{d\alpha^2} + \cancel{\frac{1}{2}k\left(\frac{\hbar^2}{\mu k}\right)^{1/2}}\alpha^2 f(\alpha)$$

$$= \cancel{\left(\frac{\hbar^2 k}{4\mu}\right)^{1/2}}\gamma\, f(\alpha)$$

$$-\frac{d^2f}{d\alpha^2} + \alpha^2 f(\alpha) = \gamma\, f(\alpha)$$

17. On injecte la solution proposée.

$$f(\alpha) = e^{\pm\frac{1}{2}\alpha^2}$$

$$\frac{df}{d\alpha} = \pm\alpha e^{\pm\frac{1}{2}\alpha^2}$$

$$\frac{d^2f}{d\alpha^2} = \pm e^{\pm\frac{1}{2}\alpha^2} + \alpha^2 e^{\pm\frac{1}{2}\alpha^2}. \sim \alpha^2 e^{\pm\frac{1}{2}\alpha^2}.$$

Si $\alpha \to \pm\infty$, l'équation différentielle

$$-\frac{d^2f}{d\alpha^2} + (\alpha^2 - \gamma) f(\alpha) = 0 \text{ en}$$

$$-\frac{d^2f}{d\alpha^2} + \alpha^2 f(\alpha) = 0.$$

et la fonction proposée convient dans la limite $\alpha \to \pm\infty$

18. La normalisation impose le choix $e^{-\frac{1}{2}\alpha^2}$

19 $f(\alpha) = g(\alpha)e^{-\frac{1}{2}\alpha^2}$.

$$f'(\alpha) = g'(\alpha)e^{-\frac{1}{2}\alpha^2} - \alpha g(\alpha)e^{-\frac{1}{2}\alpha^2}$$

$$f''(\alpha) = g''(\alpha)e^{-1/2\alpha^2} - \alpha g'(\alpha)e^{-\frac{1}{2}\alpha^2}.$$

$$- g(\alpha)e^{-\frac{1}{2}\alpha^2} - \alpha g'(\alpha)e^{-\frac{1}{2}\alpha^2} + \alpha^2 g(\alpha)e^{-\frac{1}{2}\alpha^2}$$

$$= \left(g''(\alpha) - 2\alpha g'(\alpha) + (\alpha^2-1)\, g(\alpha)\right) e^{-\frac{1}{2}\alpha^2}.$$

$$-f'' + \alpha^2 f = -\left(g'' - 2\alpha g' + (\cancel{\alpha^2}-1)g\right)e^{-\frac{1}{2}\alpha^2}$$

$$+ \cancel{\alpha^2 g(\alpha)}\, e^{-\frac{1}{2}\alpha^2}.$$

$$= \gamma g(\alpha) e^{-\frac{1}{2}\alpha^2}.$$

Donc.

$$\underline{-g''(\alpha) + 2\alpha g'(\alpha) + g(\alpha) = \gamma g(\alpha).}$$

20. $g(\alpha) = \sum_{p=0}^{+\infty} b_p \alpha^p$.

$$\alpha g'(\alpha) = \sum_{p=1}^{+\infty} p b_p \alpha^p$$

(correct égal ! si on indice la somme à partir de $p=0$)

$$g''(\alpha) = \sum_{p=2}^{+\infty} b_p\, p(p-1)\alpha^{p-2}.$$

$$= \sum_{p=0}^{+\infty} b_{p+2}(p+2)(p+1)\alpha^p$$

$$\sum_{p=0}^{+\infty} \left(-b_{p+2}(p+2)(p+1) + 2p b_p + b_p - \gamma\right)\alpha^p = 0$$

Soit $b_{p+2}(p+2)(p+1) = (2p+1-\gamma)\, b_p$.

$$b_{p+2} = \frac{2p+1-\gamma}{(p+1)(p+2)}\, b_p$$

21 - $b_{n+2} = 0$ si $2n + 1 - \gamma = 0$.

Soit $\gamma_n = 1 + 2n$

$$E_n = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{k}{\mu}}\,\hbar\left(2n+1\right)$$

On pose $\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{\mu}}$ $\quad E_n = \hbar\omega_0\left(n+\frac{1}{2}\right)$

Ex 4 : Autour de l'atome d'hydrogène

1 - $\varphi(r) = A \exp\left(-\frac{r}{a}\right)$

Il s'agit de la composante spatiale d'un état stationnaire.

Il s'agit d'une fonction d'onde 3D (avec indépendance en θ et φ)

2 - Normalisation

$$1 = \iiint |\varphi(r)|^2 \, d\tau$$

$$= \int_{r=0}^{+\infty} |A|^2 \exp\left(-2\frac{r}{a}\right) 4\pi r^2 \, dr.$$

$$= |A|^2 \, 4\pi a^3 \underbrace{\int_{0}^{\infty} \exp\left(-2\frac{r}{a}\right) \left(\frac{r}{a}\right)^2 d\left(\frac{r}{a}\right)}_{\int_{u=0}^{+\infty} u^2 \exp(-2u)\, du \; = \frac{2}{2^3} = \frac{1}{4}}$$

$$= |A|^2 \pi a^3$$

Donc $|A| = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}$

* Probabilité de présence radiale de l'électron (densité)

$dP = \rho(r)\, dr$: probabilité que l'électron ait une coordonnée comprise entre r et $r+dr$. càd que l'électron soit compris entre les sphères de rayon r et $r+dr$.

$$= |\varphi|^2 \, 4\pi r^2 \, dr.$$

$$\rho(r) = |\varphi|^2 \, 4\pi r^2$$

$$= 4\pi |A|^2 r^2 \exp\left(-2\frac{r}{a}\right)$$

* Distance la plus probable :

On cherche le max de ρ.

$$\frac{d\rho}{dr} = 0 \Rightarrow 2r \exp\left(-2\frac{r}{a}\right) - \frac{2r^2}{a} \exp\left(-\frac{2r}{a}\right) = 0$$

$$\Rightarrow r = a.$$

* Moyenne d'une mesure de distance.

$$\langle r \rangle = \int_{r=0}^{+\infty} r \, \rho(r) \, dr.$$

$$= 4\pi |A|^2 a^4 \int_{r=0}^{+\infty} \frac{r^3}{a^3} \exp\left(-2\frac{r}{a}\right) \frac{dr}{a}$$

$$= 4\pi |A|^2 a^4 \int_{u=0}^{+\infty} u^3 \exp(-2u) \, du$$

$$\langle r \rangle = 4\pi |A|^2 a^4 \frac{3!}{2^4}$$

$$= \pi \frac{1}{\pi a^3} a^4 \frac{3}{2}$$

$$\langle r \rangle = \frac{3}{2} a .$$

* Ecart type.

$$\sigma_r^2 = \langle r^2 \rangle - \langle r \rangle^2 .$$

avec $\langle r^2 \rangle = \int r^2 \rho(r) dr .$

$$= 4\pi |A|^2 a^5 \underbrace{\int u^4 \exp(-2u) du}_{\frac{4!}{2^5}}$$

$$= \cancel{\pi} \frac{1}{\cancel{\pi} a^3} a^5 \frac{4!}{2^3}$$

$$= 3a^2$$

$$\sigma_r^2 = 3a^2 - \frac{9}{4}a^2 = \frac{3}{4}a^2 .$$

$$\sigma_r = \frac{\sqrt{3}}{2} a$$

* Energie moyenne.

$$\langle E \rangle = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle$$

$$= -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \int_{r=0}^{+\infty} \frac{1}{r} \rho(r) dr .$$

$$= -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} 4\pi |A|^2 \int_{r=0}^{+\infty} r \exp\left(-\frac{2r}{a}\right) dr$$

$$= -\frac{e^2}{\cancel{4\pi}\varepsilon_0} \cancel{4\pi} |A|^2 a^2 \underbrace{\int_{u=0}^{\infty} u \exp(-2u) du}_{\frac{1}{2^2}} .$$

$$= -\frac{e^2}{4\varepsilon_0} \frac{1}{\pi a^3} a^2$$

$$\underline{\langle E \rangle = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \frac{1}{a} .}$$

* Classiquement on associe à a le rayon de Bohr de l'atome d'hydrogène.

3. Equation de Schrodinger indépendant du temps.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r}\varphi = E_0\,\varphi(r).$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}\left(rA\exp\left(-\frac{r}{a}\right)\right) - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{A}{r}\exp\left(-\frac{r}{a}\right)$$

$$= E_0 A\exp\left(-\frac{r}{a}\right)$$

avec $\frac{d}{dr}\left(r\exp\left(-\frac{r}{a}\right)\right) = \left(1-\frac{r}{a}\right)\exp\left(-\frac{r}{a}\right)$

$$\frac{d^2}{dr^2}\left(r\exp\left(-\frac{r}{a}\right)\right) = \left(-\frac{1}{a}\left(1-\frac{r}{a}\right)-\frac{1}{a}\right)\exp\left(-\frac{r}{a}\right)$$

$$= \left(\frac{r}{a^2}-\frac{2}{a}\right)\exp\left(-\frac{r}{a}\right)$$

Donc

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{a^2}-\frac{2}{ar}\right) - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r} = E_0$$

Ceci étant valable pour tout r, on doit avoir

$$\begin{cases} \frac{\hbar^2}{ma} = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \\ E_0 = -\frac{\hbar^2}{2ma^2} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} a = \frac{4\pi\varepsilon_0}{me^2}\hbar^2 \\ E_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{me^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}\right)^2 \end{cases}$$

$$\boxed{\begin{cases} a = \frac{4\pi\varepsilon_0}{me^2}\hbar^2 \\ E_0 = -\frac{me^4}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2} \end{cases}}$$

AN $$a = \frac{4\pi \cdot 8{,}85\cdot 10^{-12}}{9{,}1\cdot 10^{-31}\left(1{,}6\cdot 10^{-19}\right)^2}\cdot\left(1{,}05\cdot 10^{-34}\right)^2$$

$$= \frac{4\pi\cdot 8{,}85\cdot 1{,}05^2}{9{,}1\times 1{,}6^2}\,10^{-11}.$$

$$\underline{= 5{,}3\ 10^{-11}\ \text{m}.}$$

$$E_0 = -\frac{9{,}1\cdot 10^{-31}\left(1{,}6\cdot 10^{-19}\right)^4}{32\pi^2\left(8{,}85\cdot 10^{-12}\right)^2\left(1{,}05\cdot 10^{-34}\right)^2}$$

$$= -\frac{9{,}11\times 1{,}6^4}{32\cdot\pi^2\cdot 8{,}85^2\cdot 1{,}05^2}\,10^{-15}$$

$$= -2{,}19\ 10^{-18}\ \text{J}$$

$$\underline{= -13{,}7\ \text{eV}.}$$

Quantique TD 1.

Exercice 5.

1- $\Psi_{1D,n}(x,t) = f_n(x) e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} = f_n(x) e^{-i(n+\frac{1}{2})\omega t}$

(propriété des états stationnaires)

2. De même (prop. des états stationnaires)

$$g(t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t}.$$

La fonction d'onde spatiale vérifie

$$H.\varphi(x)\chi(y) = E\,\varphi(x)\chi(y)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta(\varphi\chi) + \frac{1}{2}m\omega^2(x^2+y^2)\varphi(x)\chi(y) = E\varphi(x)\chi(y)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\varphi''(x).\chi(y) + \varphi(x)\chi''(y)\right)$$

$$+\frac{1}{2}m\omega^2(x^2+y^2)\varphi(x)\chi(y) = E\varphi(x)\chi(y)$$

$\times \frac{1}{\varphi(x)\chi(y)}$

$$\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\varphi''(x)}{\varphi(x)} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2}_{\text{Fonction de } x \text{ seule!}} \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\chi''(y)}{\chi(y)} + \frac{1}{2}m\omega^2y^2}_{\text{Fonction de } y \text{ seule!}} = E$$

Donc nécessairement

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\varphi''(x)}{\varphi(x)} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 = \text{cst notée } E_x \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\chi''(y)}{\chi(y)} + \frac{1}{2}m\omega^2y^2 = \text{cst notée } E_y \end{cases}$$

et $E = E_x + E_y$

Donc d'après la question 1, $\varphi(x)$ et $\chi(y)$ correspondent à la partie spatiale d'états stationnaires d'un oscillateur 1D

Donc $\exists n$ tq $\varphi(x) = f_n(x)$ et $E_x = E_n = (n+\frac{1}{2})\hbar\omega$

$\exists m$ tq $\chi(y) = f_m(y)$ et $E_y = E_m = (m+\frac{1}{2})\hbar\omega$

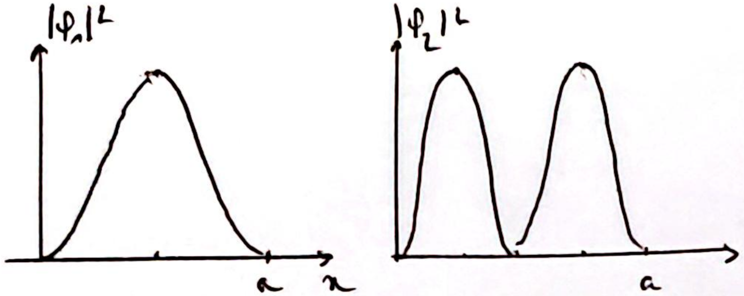
Valeurs possibles de l'énergie $E = (n+m+1)\hbar\omega$.

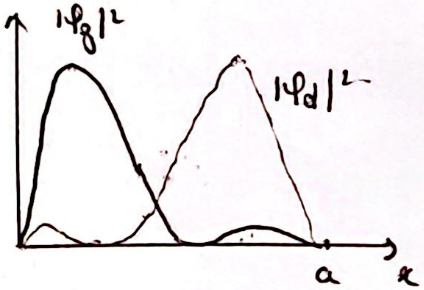
(ou $E = (p+1)\hbar\omega$. $p \in \mathbb{N}^*$)

Les niveaux d'énergie $E_p = (p+1)\hbar\omega$ sont donc <u>p+1 fois dégénérés</u>

(Pour p fixé, il y a $p+1$ couples (n,m) tq $n+1 = p+1$.)

3c





On a déjà dit que $P(x,t)$ oscillait dans le temps à la pulsation $3\omega_0$

On peut ajouter que compte tenu de l'allure de $|\varphi_g|^2$ et $|\varphi_d|^2$, cela correspond à une oscillation de la particule de "droite" à "gauche" de proche à la pulsation $3\omega_0 = \dfrac{E_2 - E_1}{\hbar}$