L3-Magistère de Physique Fondamentale
L3 ENS Paris-Saclay
L3 Double licence Maths-Physique

MECANIQUE QUANTIQUE I
Examen du 9 janvier 2021

Durée : 2h30 heures

L'utilisation de documents, téléphones portables...est interdite. Les calculatrices sont autorisées.
Les différentes parties du sujet sont indépendantes,
Le barème est fourni à titre indicatif.
On pourra consulter avec profit les rappels donnés à la fin de l'énoncé.

Spectres de vibration et de rotation d'une molécule diatomique

On considère une molécule diatomique hétéronucléaire AB formée de deux atomes A et B différents. On note r la distance entre les deux atomes et μ la masse réduite du système. En notant $V(r)$ le potentiel d'intéraction entre les 2 atomes, l'hamiltonien du système d'écrit

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2\mu} + V(r) = \frac{{p_r}^2}{2\mu} + \frac{L^2}{2\mu r^2} + V(r),$$

où p_r est la composante de l'impulsion sur l'axe de la molécule. Cet hamiltonien peut ainsi être séparé en deux hamiltoniens indépendants : $H = H_{transl} + H_{rot}$ avec

$$H_{transl} = \frac{{p_r}^2}{2\mu} + V(r) \tag{1}$$

$$H_{rot} = \frac{L^2}{2\mu r^2} \tag{2}$$

A- Spectre de vibration

On s'intéresse au spectre de H_{transl} donné par l'équation (1). H_{transl} peut être considéré comme l'hamiltonien d'un problème à une dimension (vibrations le long de l'axe de la molécule). Une forme approchée de $V(r)$ est donnée par le potentiel de Morse :

$$V(r) = V_0\Big(1 - \exp\big(-a(r - r_0)\big)\Big)^2,$$

où V_0, a et r_0 sont des constantes positives.

1. Montrer que $V(r)$ possède un minimum pour une valeur r_* de r que l'on précisera.
2. Tracer $V(r)$ en fonction de r. Quelles sont les interprétations physiques de V_0, a et r_0 ?
3. D'après ce qui précède, on peut utiliser l'approximation harmonique au voisinage du minimum de $V(r)$:

$$V(r) \simeq V(r = r_*) + \frac{1}{2}\mu\omega^2(r - r_*)^2.$$

Exprimer la pulsation ω en fonction de V_0, a et μ.

4. En déduire une approximation des énergies propres E_n de H_{transl} en fonction de n et ω.

5. L'état du système est donné à un instant initial par

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\big(|0\rangle + a^\dagger|0\rangle\big)$$

où $a^\dagger$ dénote l'opérateur de création pour l'oscillateur harmonique consideré et $|0\rangle$ le vecteur associé à l'état fondamental $n = 0$. Déterminer l'état à tout instant $|\psi(t)\rangle$ et en déduire la valeur moyenne de $x = r - r_*$. Interpréter physiquement le résultat.

6. Les transitions vibrationnelles ne peuvent en fait exister qu'entre niveaux voisins, $n \longleftrightarrow n+1$ (règles de sélection pour ces transitions). Quelles sont les longueurs d'onde de la lumière susceptibles d'être absorbées ou émises par la molécule si seul H_{transl} est à considérer ?

7. Application à la molécule CO. On donne $\hbar \simeq 1.05\times10^{-34}$ J.s, $m_C \simeq 1.99\times10^{-26}$ kg, $m_O \simeq 2.66\times10^{-26}$ kg et la constante de raideur équivalente $k \simeq 1895$ N.m^{-1}. Calculer l'ordre de grandeur de la ou des longueur(s) d'onde pouvant être absorbées/émises ? Quel est le domaine du spectre électromagnétique correspondant ?

B- Spectre de rotation

On s'intéresse dans cette partie au spectre de rotation de la molécule et on considère que la longueur de la molécule est fixe (pas de vibration) et est égale à sa valeur à l'équilibre : $r = r_*$, si bien que l'hamiltonien (2) s'écrit plus simplement :

$$H'_{rot} = \frac{L^2}{2\mu r_*^2}.$$

On notera $|lm\rangle$ les vecteurs propres communs à L^2 et L_z.

8. Montrer que $|lm\rangle$ est vecteur propre de H'_{rot} pour une énergie que l'on précisera en fonction en particulier de l. Déterminer le degré de dégénérescence de ces énergies.

9. On pose $A = \hbar^2/(2\mu r_*^2)$. Donner les énergies du fondamental, du premier niveau excité et du deuxième niveau excité en fonction de A. A chaque fois donner le ou les vecteur(s) propre(s) associé(s).

10. Quelles sont les longueurs d'onde de la lumière susceptibles d'être absorbées/émises lors de transitions rotationnelles si on ne considère que ces 3 niveaux ?

11. Application à la molécule CO. On donne, en plus des quantités numériques déjà données, $r_* \simeq 113$ pm. Calculer l'ordre de grandeur de la ou des longueur(s) d'onde pouvant être absorbées/émises ? Quel est le domaine du spectre électromagnétique correspondant ?

C-Spectre de vibration-rotation simplifié

On considère désormais l'hamiltonien complet avec cependant l'approximation faite dans la partie **(B)** : $H = H_{transl} + H'_{rot}$.

12. Justifier que H_{transl} et H'_{rot} commutent.

13. Dans ce cas comment peut-on écrire les énergies propres de H à partir de celles de H_{transl} et H_{rot} ? Les donner en fonction des nombres quantiques introduits dans les parties **(A)** et **(B)**

Puits de potentiel sphérique.

A- Potentiel central

On considère une particule de masse m soumise à un potentiel central $V(r)$ où $r = ||\overrightarrow{OM}||$. On suppose que V tend vers 0 quand r tend vers l'infini. L'hamiltonien de cette particule s'écrit donc :

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(r).$$

On rappelle qu'en représentation x et avec le choix des coordonnées sphériques, l'équation de Schrödinger stationnaire devient :

$$\Big(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{\partial^2(r.)}{\partial r^2} + \frac{L^2}{2mr^2} + V(r)\Big)\psi(r,\theta,\varphi) = E\psi(r,\theta,\varphi)$$

On recherche les états liés (donc $E < 0$) et une solution à variables séparées, c'est à dire sous la forme

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)\chi(\theta,\varphi)$$

où $R(r)$ est la fonction d'onde radiale et $\chi(\theta,\varphi)$ la fonction d'onde angulaire.

1. Montrer qu'en injectant une telle fonction d'onde dans l'équation de Schrödinger on peut effectivement en construire une solution à la première condition que $\chi(\theta,\varphi)$ soit une fonction d'onde propre de L^2.

2. Un choix judicieux est de prendre $\chi(\theta,\varphi) = Y_l^m(\theta,\varphi)$, l'une des harmoniques sphériques ($Y_l^m(\theta,\varphi) = \langle\theta,\varphi|lm\rangle$ où les $|lm\rangle$ sont les vecteur propres communs à L^2 et L_z). Avec ce choix montrer alors que la fonction $u(r) = rR(r)$ obéit à l'équation différentielle :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u}{dr^2} + \Big(V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}\Big)u(r) = Eu(r).$$

   ("équation de Schrödinger radiale").

3. Expliquer pourquoi l'ensemble $\{H, L^2, L_z\}$ forme un ECOC.

4. Pourquoi peut-on étiqueter en général les énergies propres E_{kl} par seulement deux nombres quantiques dont l'un est l ? Quelle la dégénérescence systématique ou essentielle de ces énergies ?

B- Puits de potentiel sphérique

Le potentiel considéré désormais est de la forme : $V(r) = -V_0$ si $r \leq a$ et $V(r) = 0$ sinon. a est le rayon du puits de potentiel sphérique et V_0 sa profondeur. On va de plus chercher les solutions de moment cinétique nul, $\underline{l = 0}$ (états "s").

5. Résoudre l'équation de Schrödinger radiale pour $u(r)$ dans les deux régions $r \leq a$ et $r \geq a$. On posera $K = \sqrt{2m(V_0 + E)/\hbar^2}$ et $\alpha = \sqrt{-2mE/\hbar^2}$. On choisira d'exprimer la solution dans la zone $r \leq a$ en fonction de deux fonctions réelles indépendantes. En déduire la forme générale de la fonction d'onde radiale $R(r)$ dans chacune des deux régions.

6. Etude du comportement en $r = 0$: montrer que dans la région $r \leq a$ il faut éliminer une des deux solutions indépendantes pour que la fonction d'onde radiale $R(r)$ puisse être définie.

7. Ecrire les deux équations données par la continuité de $R(r)$ et de sa dérivée en $r = a$. Montrer que la relation permettant de déterminer les énergies des états liés est :

$$Ka\cos(Ka) = -\alpha a \sin(Ka).$$

   On pose $k_0 = \sqrt{2mV_0/\hbar^2}$. Quelle est la relation entre K, α et k_0 ?

8. En déduire une méthode graphique pour déterminer les énergies propres.

9. Existe-t-il toujours une solution ? Si non donner la condition sur V_0 et a pour qu'au moins une solution existe.

10. On considère l'état fondamental, si il existe. Ecrire la forme de la fonction d'onde radiale associée $R_{fond}(r)$ en faisant apparaitre une constante arbitraire et une seule (ne pas oublier la condition de continuité écrite plus haut). Comment fixer cette constante ? Ecrire la relation correspondante (le calcul complet n'est pas demandé). Tracer $R_{fond}(r)$. Quelle est la fonction d'onde "complète" $\psi_{fond}(r,\theta,\varphi)$?

11. Etudier le cas du puits infiniment profond ($V_0 \to \infty$). Combien y-a-t-il d'états liés possibles ? Exprimer leurs énergies. Comparer aux énergies de la boite quantique 1D (puits carré infini) de largeur $2a$ (on pourra rétablir les expressions de ces énergies.

12. Etudier le cas du puits infiniment large ($a \to \infty$). Combien y-a-t-il d'états possibles ? Quelle est la forme des fonctions d'ondes radiales solutions ? Interpréter physiquement cette situation.

13. Application au deutéron : On modélise (grossièrement) le potentiel d'interaction forte entre le neutron et le proton constituant un noyau de deutérieum (le deutéron) par un potentiel de puits sphérique avec $a \simeq 2$ fm. On observe expérimentalement qu'il n'existe qu'un seul état "s" (de moment cinétique nul); déterminer l'intervalle des valeurs de V_0 pour lesquelles il n'y a effectivement qu'un seul état lié. Comparer l'ordre de grandeur de ces valeurs avec l'énergie de liaison proton-neutron dans le deutéron, $E_l \simeq 2.2$ MeV.

Rappels potentiellement utiles:

Valeur moyenne d'une observable A : $< A >= \langle\psi|A|\psi\rangle$.

Oscillateur harmonique :

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\big(a + a^\dagger\big).$$

$$H = \Big(a^\dagger a + \frac{1}{2}\Big)\hbar\omega.$$

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$$
$$a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$$

Masse d'un nucléon $m \sim 940$ MeV/c^2.