L3

Module: Mécanique Quantique

Examen, épreuve de janvier 2007, durée 2 h

1 Longueurs d'onde de de Broglie et critère quantique

1. Quelle est la longueur d'onde de de Broglie pour : (a) un électron d'énergie 100 eV, (b) un neutron thermique ? Comparer avec les dimensions atomiques. Que pouvez-vous en conclure ?

2. Dans un noyau ordinaire, l'énergie de liaison inter-nucléon est de l'ordre de 8 MeV. Sachant que la masse d'un nucléon est $M \approx 1.6 \times 10^{-27}$ kg et que l'échelle spatiale typique est $r_0 \approx 1.2$ F, dites si on a besoin d'invoquer la mécanique quantique pour décrire la physique des phénomènes nucléaires.

On donne: $m_e = 9.109 \times 10^{-31}$ kg, $m_n = 1.67 \times 10^{-27}$ kg, $k_B = 1.38 \times 10^{-23}$ J.K^{-1}, $\hbar = 1.054 \times 10^{-34}$ J.s, $e = 1.602^{-19}$ C.

2 Molécule triatomique linéaire

On considère les états d'un électron dans une molécule triatomique linéaire formée d'atomes G(gauche), C(centre), D(droit); les distances GC et CD sont égales et notées d.

On désigne par $|\psi_G>$, $|\psi_C>$ et $|\psi_D>$ les états propres d'une observable $\hat{B}$, correspondant à l'électron localisé respectivement au voisinage des atomes G, C et D:

$$\hat{B}|\psi_G>= -d|\psi_G>; \quad \hat{B}|\psi_C>= 0; \quad \hat{B}|\psi_D>= +d|\psi_D> .$$

L'hamiltonien $\hat{H}$ de ce système est représenté dans la base $|\psi_G>, |\psi_C>, |\psi_D>$ par la matrice:

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} E_0 & -a & 0 \\ -a & E_0 & -a \\ 0 & -a & E_0 \end{pmatrix} \quad a > 0.$$

1. Calculer les niveaux d'énergie et les états propres de $\hat{H}$.

2. On considère *l'état fondamental*; quelles sont les probabilités de trouver l'électron en G, C et D ?

3. On considère un électron dans l'état $|\psi_G>$ et on mesure son énergie; que peut-on trouver, et avec quelle probabilité ? Calculer $<E>$ et ΔE dans cet état. On rappelle que $\Delta x = \sqrt{<x^2> - <x>^2}$.

3 Théorème de Viriel

On considère un système unidimensionnel d'hamiltonien $\hat{H} = \hat{p}^2/2m + V(\hat{x})$, où $V(\hat{x}) = \lambda \hat{x}^n$.

1. Calculer le commutateur $[\hat{H}, \hat{x}\hat{p}\,]$.

2. En prenant la valeur moyenne de ce commutateur sur un état propre de $\hat{H}$, montrer qu'on a pour tout état propre de $\hat{H}$ la relation:

   $$2 < T >= n < V >,$$

   où $\hat{T} = \hat{p}^2/2m$ est l'opérateur énergie cinétique. Vérifier cette relation pour l'oscillateur harmonique.

3. Généraliser ce résultat au cas tridimensionnel en calculant $[\hat{H}, \hat{\vec{r}}.\hat{\vec{p}}\,]$ pour un potentiel $V(\hat{\vec{r}})$ qui est une fonction homogène des variables x, y, z de degré n. Une fonction homogène de degré n satisfait $V(\alpha x, \alpha y, \alpha z) = \alpha^n V(x, y, z)$ et $\vec{r}.\vec{\nabla} V = nV$.

4. Montrer pour un potentiel central quelconque la relation:

   $$2 < T >=< r \frac{\partial V}{\partial r} > .$$

   Comme pour la question 2, les valeurs moyennes sont obtenues sur des états propres de $\hat{H}$.