Mécanique quantique I

Séance d'exercices 2 : Oscillateur harmonique à trois dimensions

1. Écrire l'équation de Schrödinger en coordonnées sphériques de l'oscillateur harmonique à trois dimensions.
2. Exprimer les unités de temps, d'énergie et de longueur en fonction des paramètres du problème, puis choisir $\hbar = m = \omega = 1$ et réécrire l'équation de Schrödinger dans ces unités. Résoudre alors par séparation des variables.
3. En utilisant les postulats, chercher la solution physique $u_l(r)$ de l'équation radiale :
   (a) Déterminer $u_{r\to\infty}(r)$, la solution approchée de l'équation de Schrödinger dans la régime asymptotique (obtenu en faisant tendre r vers l'infini).
   (b) Poser $u_l(r) = u_{r\to\infty}(r)v_l(r)$ et en déduire l'équation satisfaite par $v_l(r)$.
   (c) Autour du point singulier régulier $r = 0$, en posant le développement en série entière suivant
   $$v_l(r) = r^s \sum_{i=0}^{\infty} a_i\, r^i, \quad a_0 \neq 0.$$
   en déduire le système d'équations pour les coefficients a_i.
   (d) Finalement, résoudre ce système d'équations en exprimant s et a_i en fonction des paramètres du problème.
   (e) Déterminer le rayon de convergence r_c de la série $\sum_{j=0}^{\infty} c_j\, r^j$ donné par
   $$\frac{1}{r_c} = \lim_{j\to\infty} \left| \frac{c_{j+1}}{c_j} \right| .$$
   Déduire du comportement asymptotique de la fonction d'onde ainsi que de ses conditions aux bornes une condition de quantification de l'énergie.
4. À partir des résultats obtenus précédemment, il est possible d'écrire les fonctions radiales
   $$R_{n_r,l}(r) = e^{-r^2/2} r^l\, c_0 \frac{n_r!\Gamma(l+3/2)}{\Gamma(n_r+l+3/2)}\, L_{n_r}^{l+1/2}(r^2)$$
   où $n_r = \frac{n-l}{2}$ et $E = n + 3/2$.
   Pour $n = 0$ et 1, normer les fonctions d'onde.
5. Application : (Si le temps le permet)
   Un nanocristal (ou "particule quantique" ou "q(uantum) dot") constitué d'arséniure de gallium (GaAs) possède des propriétés optiques très particulières du fait de la quantification des niveaux d'énergie des électrons de conduction piégés en son sein. Un modèle simpliste pour ces électrons de conduction est de considérer qu'ils ont une masse effective de $0.067 m_e$ et qu'ils sont soumis à un potentiel harmonique de force $\hbar\omega = 4$ meV. Calculer les énergies accessibles aux électrons de conduction. Sachant que, pour un cristal infini, le gap du GaAs est de 1.42 eV, en déduire l'énergie minimale d'un photon émis par un électron passant de l'état de conduction le plus bas à l'état de valence le plus élevé.

http ://quic.ulb.ac.be, Evgueni.Karpov@ulb.ac.be, ahertz@ulb.ac.be

Rappel :

Polynômes de Laguerre généralisés

$$L_n^\alpha(z) = \frac{\Gamma(n+\alpha+1)}{n!\,\Gamma(\alpha+1)}\,{}_1F_1(-n,\alpha+1,z),$$

$${}_1F_1(a,c,z) = 1 + \frac{a}{c}\frac{z}{1!} + \frac{a(a+1)}{c(c+1)}\frac{z^2}{2!} + \ldots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(a+n)}{\Gamma(a)}\frac{\Gamma(c)}{\Gamma(c+n)}\frac{z^n}{n!},$$

$$\Gamma(z) = \int_0^\infty du\, u^{z-1} e^{-u}, \quad z \in \mathbb{C},$$

$$\Gamma(n) = (n-1)! \quad \text{et} \quad \Gamma\left(n+\frac{1}{2}\right) = \frac{(2n)!}{4^n n!}\sqrt{\pi}, \quad n \in \mathbb{N},$$

Harmoniques sphériques

$$Y_l^m(\theta,\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\sqrt{\frac{2l+1}{2}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\,P_{lm}(\cos\theta)\,e^{im\phi},$$

$$P_{lm}(x) = \frac{(-1)^m}{2^l\,l!}(1-x^2)^{\frac{m}{2}}\frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}}(x^2-1)^l.$$