Mécanique Quantique 1 —— CORRIGÉ

Séance d'éxercices 2 : oscillateur harmonique à trois dimensions (2)

Exercice 1

À partir des résultats de la partie 1, on peut écrire la fonction $R_{n_r,l}(r)$:

$$
\begin{aligned}
R_{n_r,l}(r) &= r^{-1}u_{n_r,l}(r) \\
&= r^{-1}e^{-r^2/2}v_{n_r,l}(r) \\
&= r^{-1}e^{-r^2/2}r^{l+1}\sum_{i=0}^{\infty} c_i(n_r,l)r^{2i} \qquad \text{avec } c_{i+1} = \frac{-2E+3+2l+4i}{4l+6+(4l+10)i+4i^2}c_i \\
&= e^{-r^2/2}r^{l}\sum_{i=0}^{\infty} c_i(n_r,l)r^{2i}
\end{aligned}
$$

Pour l'instant, les coefficients c_i ne semblent pas dépendre explicitement de n_r, mais seulement de l. Pour remidier à la situation, on se rappelle que $l = n - 2n_r \Leftrightarrow n = l + 2n_r$ et $E = n + 3/2 \Leftrightarrow -2E + 3 = -2n = -2l - 4n_r$ ce qui nous permet de réécrire le coefficient c_{i+1} :

$$
c_{i+1} = \frac{-2E+3+2l+4i}{4l+6+(4l+10)i+4i^2}c_i = \frac{-2l-4n_r+2l+4i}{4(i+1)(l+3/2+i)}c_i = \frac{-n_r+i}{(i+1)(l+3/2+i)}c_i
$$

. Calculons les premiers termes :

$$
c_1 = \frac{-n_r}{l+3/2}c_0
$$

$$
c_2 = \frac{-n_r+1}{2(l+3/2+1)}c_1 = \frac{-n_r+1}{2(l+3/2+1)} \times \frac{-n_r}{l+3/2}c_0
$$

$$
c_3 = \frac{-n_r+2}{3(l+3/2+2)}c_2 = \frac{-n_r+2}{3(l+3/2+2)} \times \frac{-n_r+1}{2(l+3/2+1)} \times \frac{-n_r}{l+3/2}c_0
$$

etc.

La fonction $R_{n_r,l}(r)$ peut donc se réécrire ainsi :

$$
\begin{aligned}
R_{n_r,l}(r) &= e^{-r^2/2}r^l\, c_0\Bigg(1 + \frac{-n_r}{l+3/2}r^2 + \frac{-n_r+1}{2(l+3/2+1)}\frac{-n_r}{l+3/2}r^4 + \\
&\qquad \frac{-n_r+2}{3(l+3/2+2)}\frac{-n_r+1}{2(l+3/2+1)}\frac{-n_r}{l+3/2}r^6 + \dots\Bigg) \\
&= e^{-r^2/2}r^l\, c_0\, {}_1F_1(-n_r, l+3/2, r^2) \\
&= e^{-r^2/2}r^l\, c_0\frac{n_r!\Gamma(l+3/2)}{\Gamma(n_r+l+3/2)}L_{n_r}^{l+1/2}(r^2)
\end{aligned}
$$

n_r représente le nombre de noeuds de la fonction $R_{n_r,l}$, c'est-à-dire le nombre de fois que la densité de probabilité s'annule.

Exercice 2

n=0

$$n = 2n_r + l = 0 \qquad \Leftrightarrow \qquad n_r = 0 \quad \text{et} \quad l = 0$$

La fonction d'onde est donc

$$\psi_{0,0,0}(\vec{r}) = R_{0,0}(r)Y_0^0(\theta,\phi) = e^{-r^2/2}c_0 L_0^{1/2}(r^2)\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\sqrt{\frac{1}{2}} = e^{-r^2/2}c_0\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

car $L_0^\alpha(x) = 1$. Pour normaliser la fonction il suffit de trouver la valeur de c_0 telle que l'intégrale de la norme au carrée de la fonction donne 1. Attention, n'oubliez pas qu'on intègre en coordonnée sphériques et qu'il faut donc rajouter le jacobien $r^2 \sin\theta$.

$$\begin{aligned}
1 &= \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta \int_0^{\infty} dr\, r^2 |\psi_{0,0,0}(\vec{r})|^2 \\
&= \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta \frac{1}{4\pi}\ |c_0|^2 \int_0^{\infty} dr\, r^2 e^{-r^2} \\
&= 4\pi \frac{1}{4\pi}\,|c_0|^2 \int_0^{\infty} dr\, r^2 e^{-r^2} \\
&= |c_0|^2 \int_o^{\infty} \frac{dt}{2\sqrt{t}} t e^{-t} \qquad \text{en posant } t = r^2 \ \Rightarrow\ dt = 2rdr \\
&= \frac{|c_0|^2}{2}\int_o^{\infty} t^{1/2} e^{-t} \\
&= \frac{|c_0|^2}{2}\Gamma(3/2) \\
&= \frac{|c_0|^2}{2}\frac{1}{2}\Gamma(1/2) \\
&= \frac{|c_0|^2}{4}\sqrt{\pi}
\end{aligned}$$

Et donc $|c_0| = \frac{2}{\pi^{1/4}}$ et la fonction d'onde normalisée s'écrit

$$\psi_0(\vec{r}) = \frac{1}{\pi^{3/4}} e^{-r^2/2}$$

Notez qu'en fait il n'est pas nécessaire de trouver la valeur de l'harmonique sphérique Y_0^0 pour normaliser la fonction d'onde. En effet, on sait que les harmoniques, intégrées sur les angles, sont déjà normalisées :

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta\, Y_l^{m*}(\theta,\phi) Y_{l'}^{m'}(\theta,\phi) = \delta_{ll'}\delta mm' \quad \Rightarrow \quad \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta\, |Y_l^m(\theta,\phi)|^2 = 1$$

Ainsi, pour tous les nombres quantiques n_r, l et m, normaliser $\psi_{n_r,l,m}$ revient à simplement normaliser la fonction radiale. C'est-à-dire qu'il suffit de trouver le c_0 tel que

$$\int_0^{\infty} dr\, r^2 |R_{n_r,l}|^2 = 1.$$

n=1

$$n = 2n_r + l = 1 \qquad \Leftrightarrow \qquad n_r = 0 \quad \text{et} \quad l = 1$$

La fonction d'onde est donc

$$\psi_{0,1,m}(\vec{r}) = R_{0,1}(r)Y_1^m(\theta,\phi) = e^{-r^2/2} r c_0 \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\sqrt{\frac{3(1-m)!}{2(1+m)!}} P_{1,m}(cos\theta)e^{im\phi}$$

avec

$$P_{1,m}(x) = \frac{(-1)^{m+1}}{2}(1-x^2)^{m/2}(\theta)\frac{d^{1+m}}{dx^{1+m}}(x^2-1)$$

Puisque les harmoniques sphériques sont déjà normalisées, on ne s'occupe que de la partie radiale et on a donc

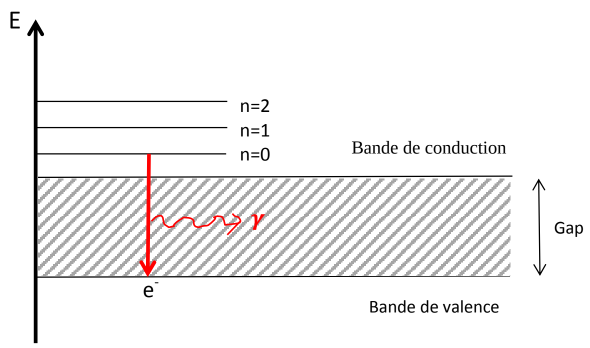
$$\begin{aligned}
1 &= \int dr\, r^2 |R_{0,1}|^2 \\
&= \int_0^\infty dr\, r^2 |c_0|^2 e^{-r^2} r^2 \\
&= |c_0|^2 \int_0^\infty dr\, r^4 e^{-r^2} \\
&= |c_0|^2 \int_o^\infty \frac{dt}{2\sqrt{t}} t^2 e^{-t} \qquad \text{en posant } t = r^2 \;\Rightarrow\; dt = 2rdr \\
&= \frac{|c_0|^2}{2} \int_o^\infty t^{3/2} e^{-t} \\
&= \frac{|c_0|^2}{2} \Gamma(5/2) \\
&= \frac{|c_0|^2}{2} \frac{3}{2} \frac{1}{2} \Gamma(1/2) \\
&= \frac{3|c_0|^2}{8} \sqrt{\pi}
\end{aligned}$$

Et donc $|c_0| = \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{3}\pi^{1/4}}$ et la fonction d'onde normalisée s'écrit

$$\psi_{0,1,m}(\vec{r}) = \frac{\sqrt{2}}{\pi^{3/4}} e^{-r^2/2} r \sqrt{\frac{(1-m)!}{(1_m)!}} P_{1,m}(\cos\theta) e^{im\phi}$$

Exercice 3

Un électron ne peut prendre comme valeur d'énergie, que celles comprises dans une certaine bande. La dernière bande complètement remplie est la bande de valence. Celle-ci est pleine d'électrons, mais ne contribue pas au phénomène de conduction. La bande permise d'énergies suivante est la bande de conduction. C'est elle qui permet aux électrons de circuler. Entre les deux bandes, il y a une bande interdite dénommée gap (voir la figure). Cette bande est inexistante dans les métaux conducteurs.



Puisque les électrons sont soumis à un potentiel harmonique, les énergies admissibles sont $E_n = \hbar\omega(n+3/2)$ et en particulier, l'énergie fondamentale est

$$E_0 = \frac{3}{2}\hbar\omega = \frac{3}{2}4meV = 6meV$$

L'énergie minimale qu'aura un photon émis par un électron passant de l'état de conduction le plus bas à l'état de valence le plus élevé sera donc :

$$E_{min} = E_0 + E_{gap} = 6meV + 1.42eV = 6 \times 10^-3eV + 1.42eV = 1.426eV$$

On peut calculer sa longueur d'onde :

$$\begin{aligned}
E_\gamma = 1.426\,eV = h\nu \quad &\Leftrightarrow \quad \nu = \frac{1.426\,eV}{h} \\
&\Leftrightarrow \quad \nu = \frac{1.426 \times 1.60217653 \times 10^{-19}\,J}{6,62606957 \times 10^{-34} J.s} \\
&\Leftrightarrow \quad \nu = 3.448 \times 10^{14}\,Hz \\
&\Leftrightarrow \quad \lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{299\,792\,458\,m/s}{3.448 \times 10^{14}\,Hz} \\
&\Leftrightarrow \quad \lambda = 869\,nm
\end{aligned}$$

ce qui se situe dans l'infrarouge..