Méchanique Quantique - Séance 3

Oscillateur Harmonique à 3D (Partie 1)

L'équation Shrödinger stationnaire

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)\right]\varphi(r) = E\varphi(r)$$

Le potentiel qui correspond à une oscil. harm. à 3D est:

$$V(r) = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2$$

On sait que $\nabla^2 = \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}\cdot r - \frac{L^2}{\hbar^2 r^2}$ $\quad \left(L = \frac{\hbar}{i}\vec{r}\times\nabla\right)$

Donc finalement

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}\cdot r - \frac{L^2}{\hbar^2 r^2}\right) + \frac{1}{2}m\omega^2 r^2\right]\varphi(r) = E\varphi(r)$$

La forme séparable de l'équation de Shr. est

$$\varphi_{lm}(r) = R_l(r)\, Y_l^m(\theta,\varphi)$$

et on sait que $L^2\, Y_l^m(\theta,\varphi) = \hbar^2 l(l+1)\, Y_l^m(\theta,\varphi)$

Donc on a l'équation

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}\cdot r - \frac{l(l+1)}{r^2}\right) + \frac{1}{2}m\omega^2 r^2\right] R_l(r) = E\, R_l(r)$$

On introduire une novelle fonction radiale $R_l(r) = \frac{u_l(r)}{r} \Rightarrow u_l(r) = rR$

$$\left[\qquad\right]\frac{u_l(r)}{r} = E\,\frac{u_l(r)}{r} \Rightarrow r\left[\qquad\right]\frac{u_l(r)}{r} = E\, u_l(r)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\cancel{r}\,\frac{1}{\cancel{r}}\frac{\partial^2}{\partial r^2}\cdot r - \frac{r\,l(l+1)}{r^{\cancel{2}}}\right) + \frac{1}{2}m\omega^2 r^2\cdot r\right]\frac{u_l(r)}{r} = E\, u_l(r)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}\frac{r}{r} - \frac{l(l+1)}{r\, r}\right) + \frac{1}{2}\frac{m\omega^2 r^{\cancel{3}\,2}}{\cancel{r}}\right] u_l(r) = E\, u_l(r)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \underbrace{\frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 r^2}_{V_{eff}}\right] u_l(r) = E\, u_l(r)$$

ou $\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 r^2 - E\right] u_l(r) = 0$

Exercice 2

$[T], [E], [L]$, $\hbar, \omega, m = 1$

$[T] = \frac{1}{\omega} \left(= \frac{1}{2\pi f}\right) = \frac{1}{[\omega]} = 1 \quad \Big| \quad [E] = \hbar\omega = 1$

$E = mc^2 \Rightarrow [E] = M \frac{L^2}{T^2} \Rightarrow L = \sqrt{\frac{E\,T^2}{M}} = \sqrt{\frac{\hbar\omega}{m\omega^2}} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} = 1$

Donc l'éq. Shr. devient

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} - r^2 + 2E\right) u_l(r) = 0$$

Exercice 3

a)

$r \to \infty$: $u_l''(r) - r^2 u_l(r) = 0 \Rightarrow u_\infty(r) = e^{\pm r^2/2}$

$u_\infty(r)$ doit être bornée partout $\Rightarrow u_\infty(r) = e^{-r^2/2}$

b)

$u_l(r) = u_\infty(r) v_l(r) = e^{-r^2/2} v_l(r)$

l'éq. Shr. $\Rightarrow \dots \Rightarrow v_l''(r) - 2r\, v_l'(r) + \left(-1 - \frac{l(l+1)}{r^2} + 2E\right) v_l(r) = 0$

c)

$v_l(r) = r^s \sum_{i=0}^{\infty} a_i r^i \quad , a_0 \neq 0$

$v_l'(r) = \left(\sum_{i=0}^{\infty} a_i r^{(i+s)}\right)' = \sum_{i=0}^{\infty} a_i (i+s) r^{(i+s-1)}$

$v_l''(r) = \sum_{i=0}^{\infty} a_i (i+s)(i+s-1) r^{(i+s-2)}$

finalement, l'éq. : $\sum_{i=0}^{\infty} \left[(i+s)(i+s-1) - l(l+1)\right] a_i r^{(i+s-2)}$

$+ \sum_{i=0}^{\infty} \left[2E - 2(i+s) - 1\right] a_i r^{(i+s)} = 0$

le coef de $r^{(i+s)}$ est

$\left[\left[2E - 2(i+s) - 1\right] a_i + \left[(i+2+s)(i+s+1) - l(l+1)\right] a_{i+2}\right] = 0$

car $\sum_{i=0}^{\infty} \underbrace{(\quad)}_{=0\ \forall i} r^{i+s} = 0$

Puisque r^{i+s-2}

(le coef pour $i=0$) $= 0$

Ex. 3 (d)

Donc $i=0 \Rightarrow s(s-1) - l(l+1) = 0 \Rightarrow s = l+1$, $s = -l$.

$i = 1 \Rightarrow \dots \Rightarrow a_1 = 0$

Pour que $v_l(r)$ soit borné $\Rightarrow s = l+1$.

$\underbrace{(\quad)}_{=0} r^{s+1} \Rightarrow a_{i+2} = \dots = -\dfrac{2E - 2i - 2l - 3}{\underbrace{i^2 + 5i + (2i+4)l + 6}_{(i+2)(i+2l+3)}} a_i$

$a_1 = 0 \Rightarrow$ tous les coef $a_{impair} = 0$

$a_{2i+2} = \dfrac{-2E + 4i + 2l + 3}{4i^2 + 10i + (4i+4)l + 6} a_{2i}$

Donc le $v_l = \sum_{i=0}^{\infty} a_i r^{i+s}$ devient $v_l = r^{l+1} \sum_{i=0}^{\infty} a_{2i} r^{2i}$

$r^{i+s} \to r^{i+l+1} = r^i r^{l+1}$, $i \to 2i$

$v_l = r^{l+1} \sum_{i=0}^{\infty} c_i r^{2i}$

$c_{i+1} = a_{2i+2}$

e)

i) $v_l(r) = r^{l+1} \sum_{i=0}^{\infty} c_i r^{2i}$

$\dfrac{1}{\sqrt{c}} = \lim_{i\to\infty} \left|\dfrac{c_{i+1}}{c_i}\right| = \lim_{i\to\infty} \left|\dfrac{a_{2i+2}}{a_{2i}}\right| = \lim_{i\to\infty} \dfrac{4i + 2l - 2E + 3}{4i^2 + 10i + (4i+4)l + 6} \sim \dfrac{1}{i}$

$c_{i+1} \underset{i\to\infty}{\sim} \dfrac{c_i}{i} \Rightarrow c_i \sim i\, c_{i+1}$

ou $\Rightarrow$ $c_i \underset{i\to\infty}{\sim} \dfrac{c_{i-1}}{i-1} \sim \dfrac{1}{i-1} \dfrac{c_{i-2}}{i-2} \sim \dots \sim \dfrac{1}{(i-1)!}$ const

Donc $v_l(r) \sim r^{l+1} \sum_{i=0}^{\infty} \dfrac{1}{(i-1)!} r^{2i} \cdot r^{-2} \cdot r^2 \underset{r\to\infty}{\sim} r^{l+3} \underbrace{\sum_{i=0}^{\infty} \dfrac{r^{2(i-1)}}{(i-1)!}}_{e^{r^2}} \sim r^{l+3} e^{r^2}$

$u_l(r) \underset{r\to\infty}{\sim} e^{-\frac{r^2}{2}} r^{l+3} e^{r^2} = e^{r^2/2} r^{l+3}$

$R_l(r) = \dfrac{u_l}{r} \underset{r\to\infty}{\sim} r^{l+2} e^{r^2/2}$ pas acceptable

Ça veut dire que les coef a_{2i} peuvent pas être tous $\neq 0$

On voit que si existe une coef $a_{2i} = 0 \Rightarrow$ tous les suivantes coef $= 0$

Cette condition $\Rightarrow$ condition de quantification

$\Rightarrow$ une coef $= 0$ et le precedent $\neq 0 \Rightarrow$

on sait: $a_{2i+2} = \dfrac{2i + 2l - 2E + 3}{(4+2i)l + 6 + 5i + i^2} a_i$

Cond $\Rightarrow a_{2i+2} = 0$, $a_{2i} \neq 0$

$\Rightarrow 4i + 2l - 2E + 3 = 0 \Rightarrow E = 2i + l + \dfrac{3}{2} = n + \dfrac{3}{2}$

La condition d'annulation des coefficients à partir d'une valeur de i, conduit à une condition de quantification

Donc la condition que un coef. a_{2i+2} s'annule et que le coef precedent a_{2i} s'annule pas peut s'ecrit:

Ou soit que $a_{i+2} = \dfrac{2i + 2l - 2E + 3}{(4+2i)l + 6 + 5i + i^2} \cdot a_i$

Donc la condition dit : $a_{2i+2} = 0 \qquad a_{2i} \neq 0$

pour $i \to 2i$ le nominateur est $4i + 2l - 2E + 3$ et il faut que ca soit zero

$$4i + 2l - 2E + 3 = 0 \Rightarrow E = \underbrace{2i + l}_{n} + \frac{3}{2}$$

Cela montre que l'energie est quantifie puisqu'elle prendre des valeurs discrètes, dépendant de i et l.

Exercice 4

Etudier le spectre de ce problème

On definire le nombre principal $n = 2i + l$, $n = 0, 1, 2$

Donc $E = n + \frac{3}{2}$ ← condition de quantification d'énergie

$E_0 = \frac{3}{2}$ énergie fondamentale

Apart de cela, les niveaux sont dégénére

$n = 2i + l$. Pour le valeurs paires de n, il y a $\frac{n}{2} + 1$ possibilites de choix d'entiers pour i et l qui donnent le même n, la même énergie.

ie $n = 4$ $(l = 4, i = 0)$ $(i = 2, l = 0)$, $(i = 1, l = 2)$ $\to 3 = \frac{n}{2} + 1$

Pour les valeurs impaires de n, il y a $n/2 + \frac{1}{2}$ possibilites

Pour chaque valeur le l, il y a une dégénérescence $2l + 1$, relative au nomble quantique magnétique m. $m = -l, \ldots, l$

Pour déterminer l'expression de la dégénérescence:
On definit le nombre quantique $n_r = i$: le nombre de noeuds radiaux.

$$n = l + 2i = l + 2n_r \Rightarrow l = n - 2n_r$$

Deux cas i) n pair ii) n impair

i) Pour n pair $\quad n_r = \frac{n-l}{2}$ et $n_{r(max)} = n/2$ $\quad$ (n = pair $= 0, 2, 4 \ldots$

Donc $g_n = \sum_{n_r=0}^{n/2} (2l+1) \Big|_{l=2n_r+n} = \sum_{n_r=0}^{n/2} (2n - 4n_r + 1) = \sum_{n_r=0}^{n/2} (2n+1) - \underbrace{4 \sum_{n_r=0}^{n/2} n_r}_{4\frac{n/2}{2}(n/2+1)}$ $\quad$ pour $l=0$

$$\Rightarrow g_n = (2n+1)\left(\frac{n}{2}+1\right) - 4\frac{n}{4}\left(\frac{n}{2}+1\right) = \left(\frac{n}{2}+1\right)(n+1) = \frac{1}{2}(n+2)(n+1)$$

car $$\sum_{n_r=0}^{n/2} n_r = \frac{n/2}{2}\left(\frac{n}{2}+1\right)$$

Donc $$g_n = \frac{1}{2}(n+1)(n+2)$$

ii) Pour n impair $\quad n_r = \frac{n-l}{2}$ $\quad l_{min.} = 1$ car $n \to$ impair $\Rightarrow$ $n = 1, 3, 5, \ldots$ $\quad l = 0 \ldots n-1)$

$$n_r = \frac{n-l}{2} = \frac{n-1}{2} = \frac{n}{2} - \frac{1}{2}$$

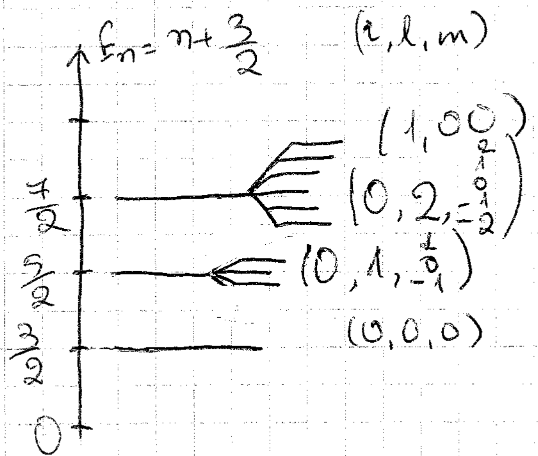
$$g_n = \sum_{n_r=0}^{n/2-1/2} (2l+1) \Big|_{l=-2n_r+n} = \sum_{n_r=0}^{n/2-1/2} (2n - 4n_r + 1) \Rightarrow \sum_{n_r=0}^{n/2-1/2} (2n+1) - 4\sum_{n_r=0}^{n/2-1/2} n_r$$

$$\Rightarrow g_n = (2n+1)\left(\frac{n}{2} - \frac{1}{2} + 1\right) - 4\left(\frac{\frac{n}{2}-\frac{1}{2}}{2}\right)\left(\frac{n}{2} - \frac{1}{2} + 1\right)$$

$$= \left(\frac{n}{2} + \frac{1}{2}\right)(2n + 1 - n + 1) = \frac{1}{2}(n+1)(n+2)$$

Donc $$g_n = \frac{1}{2}(n+1)(n+2)$$

Finalement $\quad g_n = \frac{1}{2}(n+1)(n+2) \quad \forall n$



Dégénérescence	(n_x, n_y, n_z)
6	(110)(011)(101) (200)(020)(002)
3	(100)(010)(001)
1	(0,0,0)

Rétrouver ces résultats à partir de l'oscillateur harmonique à une dimension

$$V(\vec{r}) = V_1(x) + V_2(y) + V_3(z) = \frac{1}{2} m\omega_x^2 x^2 + \frac{1}{2} m \cdot \omega_y^2 y^2 + \frac{1}{2} m\omega_z^2 z^2.$$

Les équations Schrödinger ont la forme

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 X(x)}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega_x^2 x^2 X(x) = E_x X(x) \quad , etc \qquad (1)$$

car l'equation peut s'écrire

$$\left\{\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_1(x)\right] + \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + V_2(y)\right] + \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_3(z)\right]\right\} \psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

Donc on peut écrire : $\psi(\vec{r}) = X(x) Y(y) Z(z)$

Donc on aura

$$Y(y) Z(z) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} X(x) + V_1(x)\right] + X(x) Z(z) \left[\ \ldots\ \right] + X(z) Y(y) \left[\ \ \right] = EXYZ$$

En divisant par XYZ, on a les résultats (1)

avec la condition $E = E_x + E_y + E_z$

La forme de les équations (1) est celle de l'oscillateur harmonique à une dimension.

On connait alors que : $E_{x,y,z} = (n_{x,y,z} + \frac{1}{2}) \hbar\omega_{x,y,z}$

Et donc $E_{n_x, n_y, n_z} = (n_x + \frac{1}{2}) \hbar\omega_1 + (n_y + \frac{1}{2}) \hbar\omega_2 + (n_z + \frac{1}{2}) \hbar\omega_3$

On a le cas d'un oscillateur harmonique $\Rightarrow$

$\omega_1 = \omega_2 = \omega_3 = \omega$ et si on choisit les unités naturelles ($\hbar = \omega = 1 = m$)

on obtient le spectre

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \left(n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2}\right) = n + \frac{3}{2}$$