

Mécanique quantique – L2

Antoine Bourget – Alain Comtet - Antoine Tilloy

Séance du 22 octobre 2014 - www.lkb.ens.fr/rubrique327

TD de soutien 2

1 Molécule triatomique linéaire

On considère les états d'un électron localisé sur un des trois atomes G, C, D d'une molécule triatomique linéaire. Les distances GC et CD sont égales et sont notées d . On note $|\psi_G\rangle$, $|\psi_C\rangle$ et $|\psi_D\rangle$ les états propres de l'observable \hat{B} , correspondants à l'électron localisé au voisinage des atomes G, C et D. On a donc :

$$\begin{aligned}\hat{B}|\psi_G\rangle &= -d|\psi_G\rangle \\ \hat{B}|\psi_C\rangle &= 0 \\ \hat{B}|\psi_D\rangle &= d|\psi_D\rangle\end{aligned}$$

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

$$\begin{pmatrix} E_0 & -a & 0 \\ -a & E_0 & -a \\ 0 & -a & E_0 \end{pmatrix}$$

1. Calculer les énergies et les états propres de \hat{H}
2. Dans l'état fondamental, quelles sont les probabilités d'avoir l'électron en G, C ou D ?
3. On considère un électron dans l'état $|\psi_G\rangle$, et on mesure son énergie. Que peut-on trouver, et avec quelle probabilité ? En déduire $\langle E \rangle$ et ΔE .

2 Molécule d'ammoniac

La molécule d'ammoniac est constituée d'un atome d'azote et de 3 atomes d'hydrogène, organisés sous forme de pyramide, l'atome d'azote occupant le sommet et les atomes d'hydrogène formant la base en triangle équilatéral. Il existe deux positions équivalentes possibles pour l'atome d'azote, d'un côté ou de l'autre du plan contenant les atomes d'hydrogène. On se restreint dans cet exercice à ces deux états, notés $|\phi_1\rangle$ et $|\phi_2\rangle$.

1. On suppose que $|\phi_1\rangle$ et $|\phi_2\rangle$ sont des états stationnaires du hamiltonien, d'énergie U_0 . Ecrire le hamiltonien développé sur la base des opérateurs $|\phi_i\rangle\langle\phi_i|$; $i, j = 1, 2$.
2. Ces deux états sont en fait couplés par effet tunnel, si bien que le hamiltonien s'écrit dans la base $|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle$

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} U_0 & -V \\ -V & U_0 \end{pmatrix}$$

Calculer les états stationnaires $|g\rangle$ (état fondamental) et $|e\rangle$ (état excité) de ce hamiltonien. Sont-ils toujours dégénérés ?

3. Les états $|\phi_1\rangle$ et $|\phi_2\rangle$ possèdent un moment dipolaire non nul, respectivement égal à d et $-d$ selon la direction Oz perpendiculaire au plan des atomes d'hydrogène. Plus précisément, on définit un opérateur moment dipolaire par

$$\hat{d} = d|\phi_1\rangle\langle\phi_1| - d|\phi_2\rangle\langle\phi_2|$$

Quels sont les moments dipolaires de $|g\rangle$ et $|e\rangle$?

4. On plonge la molécule d'ammoniac dans un champ électrique de norme E , orienté selon Oz . L'interaction entre la molécule et le champ électrique est décrite par un terme supplémentaire $-\hat{d}E$ dans le hamiltonien. Calculer les nouvelles énergies propres pour toutes les valeurs de E , ainsi que les états stationnaires et leur moment dipolaire dans les limites $dE \ll V$ et $dE \gg V$. Quelle est la polarisabilité de l'état fondamental ?