

Mécanique quantique – L2

Soutien : L'oscillateur harmonique isotrope à trois dimensions

On cherche à trouver les niveaux d'énergie d'une particule de masse m dans un potentiel harmonique de la forme :

$$V(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}m\omega^2 (x^2 + y^2 + z^2) = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2.$$

Ce problème a déjà été traité lors du cours sur l'oscillateur harmonique. Mais nous allons l'aborder ici du point de vue d'une particule dans un potentiel central.

1 Rappel : étude en coordonnées cartésiennes

1. Rappeler la méthode de résolution de l'équation aux valeurs propres du hamiltonien correspondant.
2. Donner les niveaux d'énergie, leur dégénérescence et la forme des états propres correspondants.

2 Résolution de l'équation radiale

3. Que peut-on dire des trois composantes du moment cinétique orbital ? Montrer qu'on peut chercher des états propres communs à $\{H, L^2, L_z\}$.

Nous nous proposons maintenant de chercher les états stationnaires $\Phi(\mathbf{r})$ qui sont également états propres de L^2 et L_z en séparant les variables en coordonnées sphériques. Nous chercherons ensuite à relier les deux bases obtenues par les deux méthodes.

4. Ecrire le hamiltonien du système en coordonnées sphériques ; on rappelle que :

$$\Delta = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right).$$

On écrira le hamiltonien en fonction d'une dérivée radiale, de l'opérateur \mathbf{L} et du potentiel $V(r)$.

5. Ecrire l'équation différentielle à laquelle obéit $\Phi(\mathbf{r})$. Montrer que $\Phi(\mathbf{r})$ se met sous la forme d'un produit d'une fonction de r seul $R_k^l(r)$ par l'harmonique sphérique $Y_l^m(\theta, \varphi)$.
6. On introduit la fonction $u_{kl}(r) = rR_k^l(r)$; montrer qu'elle vérifie :

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} - \beta^4 r^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} + \varepsilon_{kl} \right) u_{kl}(r) = 0,$$

où $\beta = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$ et $\varepsilon_{kl} = \frac{2mE_{kl}}{\hbar^2}$, avec la condition à l'origine $u_{kl}(0) = 0$.

7. Montrer que le comportement pour $r \rightarrow \infty$ conduit à étudier la fonction $y_{kl}(r)$, telle que :

$$u_{kl}(r) = y_{kl}(r) e^{-\beta^2 r^2/2},$$

qui vérifie :

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - 2\beta^2 r \frac{d}{dr} + \left(\varepsilon_{kl} - \beta^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) \right] y_{kl}(r) = 0,$$

avec $y_{kl}(0) = 0$.

8. On cherche la fonction $y_{kl}(r)$ sous la forme d'un développement en série entière :

$$y_{kl}(r) = r^s \sum_{q=0}^{\infty} a_q r^q,$$

avec $a_0 \neq 0$.

(a) Montrer que $s = l + 1$.

(b) Montrer que la relation de récurrence entre les coefficients a_q est de la forme :

$$(q+2)(q+2l+3) a_{q+2} = [(2q+2l+3)\beta^2 - \varepsilon_{kl}] a_q.$$

9. Quel est le comportement du rapport a_{q+2}/a_q pour $q \rightarrow \infty$? Conclure sur la quantification de l'énergie des états stationnaires.

3 Niveaux d'énergie et fonctions d'onde stationnaires

10. Retrouver les niveaux d'énergie et leur dégénérescence.
11. Etude du niveau fondamental : comparer les fonctions d'onde obtenues par les deux méthodes.
12. Etude du premier niveau excité : relier les $\{\Phi_{0,1,m}\}$ obtenues ici aux fonctions $\{\Psi_{n_x, n_y, n_z}\}$.