

ORDRE DES INGÉNIEURS DU QUÉBEC

14-PH-A4 — Mécanique quantique

SESSION DE NOVEMBRE 2016

- Toute documentation permise.
- Calculatrices : modèles autorisés seulement.
- Durée de l'examen : 3 heures.
- L'examen comprend quatre questions sur cinq pages pour un total de 20 points.

1 Questions générales (*4 points*)

Répondez aux questions suivantes en quelques mots ou quelques lignes seulement, tout en justifiant votre réponse.

- Donner l'expression du commutateur $[\hat{H}, \hat{p}]$, où \hat{H} et \hat{p} sont les opérateurs hamiltonien et quantité de mouvement d'un électron.
- Les trois états $|\psi_i\rangle$ sont-ils mutuellement orthogonaux ?

$$\begin{aligned}|\psi_1\rangle &= i|\phi_1\rangle + 2|\phi_2\rangle \\|\psi_2\rangle &= 2i|\phi_1\rangle - |\phi_2\rangle + i|\phi_3\rangle \\|\psi_3\rangle &= |\phi_2\rangle - i|\phi_3\rangle\end{aligned}$$

On suppose la base $|\phi_i\rangle$ orthonormée.

- Ré-écrire la fonction d'onde suivante de façon normalisée.

$$\Psi(x) = \begin{cases} (a^2 - x^2) \exp(ipx) & |x| \leq a \\ 0 & |x| > a \end{cases}$$

- Supposons qu'un puits de potentiel contient trois particules dans les états $n = 1, 2, 5$ respectivement. Les particules sont-elles des bosons, des fermions, ou n'importe-laquelle de ces deux alternatives ?

Question 2 : Puits de potentiel (5 points)

Un électron se trouve au niveau dans le premier niveau excité $n = 1$ d'un puits de potentiel parabolique

$$V(x) = \frac{m\omega^2}{2}x^2.$$

Au temps $t = 0$, ce potentiel est soudainement ramené à $V(x) = 0$. La particule devient donc libre. Sa fonction d'onde peut s'exprimer en fonction de sa position x ou de son nombre d'onde k .

Répondre aux questions suivantes.

- Calculer la fonction d'onde $\psi(k)$ en fonction du nombre d'onde k au temps $t = 0$.
- Décrire une interprétation physique de cette fonction d'onde $\psi(k)$.
- Calculer l'énergie de cet électron libre en $t > 0$.

On donne, pour référence, les fonctions d'ondes des états stationnaires de l'oscillateur harmonique

$$\begin{aligned}\psi_{n=0}(x) &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right) \\ \psi_{n=1}(x) &= \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} x \psi_{n=0}(x)\end{aligned}$$

et l'identité

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-ax^2 + bx + c) dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \exp\left(\frac{b^2}{4a} + c\right).$$

Question 3 : Moments angulaires (6 points)

La fonction d'onde d'une particule est donnée par l'expression

$$|\Psi\rangle = \sum_{m=-1,0,1} \frac{m+2}{\sqrt{14}} |1, m\rangle_z$$

où $|\ell, m\rangle_z$ sont les harmoniques sphériques projetées sur un plan orthogonal à l'axe z .

Répondre aux questions suivantes.

- Si on mesure \hat{L}_z , quels résultats peuvent être obtenus et avec quelle probabilité ?
- Si on mesure \hat{L}^2 , quels résultats peuvent être obtenus et avec quelle probabilité ?
- Calculer $\langle \hat{L}_z \rangle$ et $\langle \hat{L}^2 \rangle$.
- Si une mesure de \hat{L}^2 a donné le résultat $2\hbar^2$, quel est alors la fonction d'onde ?
- Si une mesure de \hat{L}_z a donné le résultat $m = 0$, quel est alors la fonction d'onde ?

Les questions suivantes se rapportent à la fonction d'onde trouvée comme résultat de la question (e).

- Si on mesure \hat{L}_x , quels résultats peuvent être obtenus et avec quelle probabilité ?
- Si on mesure \hat{L}^2 , quels résultats peuvent être obtenus et avec quelle probabilité ?
- Calculer $\langle \hat{L}_z \rangle$ et $\langle \hat{L}^2 \rangle$.

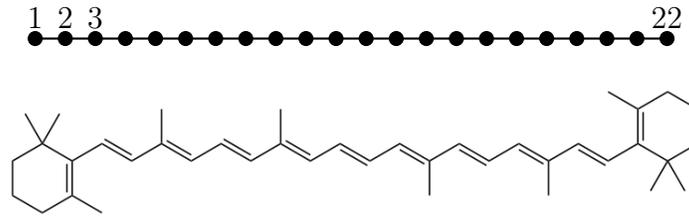
On donne, à titre de référence, la projection des harmoniques sphériques selon l'axe z

$$\begin{aligned} |0, 0\rangle_z &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{\pi}} \\ |1, -1\rangle_z &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin(\theta) \exp(-i\varphi) \\ |1, 0\rangle_z &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \cos(\theta) \\ |1, 1\rangle_z &= \frac{-1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin(\theta) \exp(i\varphi) \\ |2, -2\rangle_z &= \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin^2(\theta) \exp(-2i\varphi) \\ |2, -1\rangle_z &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin(\theta) \cos(\theta) \exp(-i\varphi) \\ |2, 0\rangle_z &= \frac{1}{4} \sqrt{\frac{5}{\pi}} [3 \cos^2(\theta) - 1] \\ |2, 1\rangle_z &= \frac{-1}{2} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin(\theta) \cos(\theta) \exp(i\varphi) \\ |2, 2\rangle_z &= \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin^2(\theta) \exp(2i\varphi) \end{aligned}$$

ainsi que la projection des harmoniques sphériques selon l'axe x

$$\begin{aligned}
|0, 0\rangle_x &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \\
|1, -1\rangle_x &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} [\cos(\theta) - i \sin(\theta) \cos(\varphi)] \\
|1, 0\rangle_x &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \sin(\theta) \sin(\varphi) \\
|1, 1\rangle_x &= \frac{-1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} [\cos(\theta) + i \sin(\theta) \cos(\varphi)] \\
|2, -2\rangle_x &= \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} [\cos^2(\theta) - \cos^2(\varphi) \sin^2(\theta) - 2i \cos(\theta) \sin(\theta) \cos(\varphi)] \\
|2, -1\rangle_x &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} [\cos(\theta) \sin(\theta) \sin(\varphi) - i \cos(\varphi) \sin^2(\theta) \sin(\varphi)] \\
|2, 0\rangle_x &= \frac{1}{4} \sqrt{\frac{5}{\pi}} [3 \sin^2(\theta) \sin^2(\varphi) - 1] \\
|2, 1\rangle_x &= \frac{-1}{2} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} [\cos(\theta) \sin(\theta) \sin(\varphi) + i \cos(\varphi) \sin^2(\theta) \sin(\varphi)] \\
|2, 2\rangle_x &= \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} [\cos^2(\theta) - \cos^2(\varphi) \sin^2(\theta) + 2i \cos(\theta) \sin(\theta) \cos(\varphi)].
\end{aligned}$$

Question 4 : Modèle d'une longue molécule (5 points)



Le modèle de la particule dans la boîte peut s'avérer utile pour étudier la structure électronique des longues molécules linéaires possédant des liaisons doubles conjuguées. Par exemple, la molécule de β -carotène de longueur L possède 22 atomes de carbone conjugués, et la distance effective séparant deux (2) atomes de carbone (points sur la ligne droite de la figure ci-dessous) est d'environ 0,09 nm. La couleur du β -carotène vient du fait qu'elle absorbe la lumière bleue (460 nm) et qu'elle réfléchit toutes les autres couleurs ; ainsi, elle nous apparaît orange. On considère un électron de masse m_e dans cette boîte.

- Si l'absorption de lumière bleue est due à une excitation équivalente de l'état $n = 11$ vers l'état $n = 12$ dans le modèle de la particule dans la boîte, calculer l'énergie de cette transition. Vérifier qu'il s'agisse bien de la lumière bleue.
- Quelle est la probabilité que l'on trouve un électron de la molécule entre l'atome de carbone 1 et 4 lorsqu'il est dans l'état $n = 1$?
- Si on étire instantanément la molécule de 10%, quelle est la probabilité qu'un électron à $n = 1$ passe dans l'état $n = 2$ après étirement ?