

EXAMEN DE MECANIQUE QUANTIQUE

Durée 2h, aucun document autorisé, calculatrices interdites

I Etats de rotation de la molécule NO

On se propose d'étudier les excitations rotationnelles de la molécule NO, considérée comme rigide et, dans un premier lieu, *sans état de vibration*. L'atome N, de masse m_N , et l'atome O, de masse m_O , sont séparés par la distance r . On note G, le centre de masse du système et r_1 et r_2 les distances (N,G) et (O,G). Le centre de masse est tel que : $r_1/m_O = r_2/m_N = r/(m_N + m_O)$.

1) Exprimer la masse réduite μ du système en fonction de m_N et m_O .

Le moment d'inertie de la molécule peut se mettre sous la forme $I = \mu r^2$. On utilisera les coordonnées sphériques (r, θ, ϕ) pour décrire le mouvement de ce rotateur rigide. On appellera \mathcal{L} le moment cinétique classique du système ; $L(L_x, L_y, L_z)$ est l'opérateur correspondant en mécanique quantique, \mathcal{L}^2 est le carré de \mathcal{L} et L^2 l'opérateur correspondant, en mécanique quantique.

2) Etablir le hamiltonien quantique H de la molécule NO en rotation libre en fonction de L et de I. (On pourra faire la correspondance avec le système classique dont on considèrera l'énergie cinétique de rotation).

3) On donne la forme de L_z et L^2 en coordonnées sphériques (voir fin du document). On notera $Y_l^m(r, \theta, \phi)$ une fonction propre commune à L^2 et L_z . Le ket correspondant peut s'écrire $|lm\rangle$. Quelle est l'équation aux valeurs propres correspondant à L^2 ? Même question pour L_z . (on considèrera que l et m sont positifs).

4) Montrer que la solution de ces équations concernant les vecteurs propres ne dépend pas de r.

5) On écrira cette solution $Y_l^m(\theta, \phi)$. Montrer que l et m sont entiers.

6) Quelles sont les énergies propres de cette molécule en rotation ? On les exprimera en fonction de l et de la constante $C = \hbar^2/(2\mu r)$. Quelles est l'unité (SI) de C?

7) Calculer en fonction de l et C la différence d'énergie entre deux niveaux successifs. Tracer le schéma de niveaux correspondant.

8) Comment évoluerait ce spectre si on tenait compte, en plus de la rotation, des états de vibration de cette molécule ? On pourra répondre qualitativement à cette question.

II Etats liés d'une particule de masse m dans un puits de potentiel infiniment profond

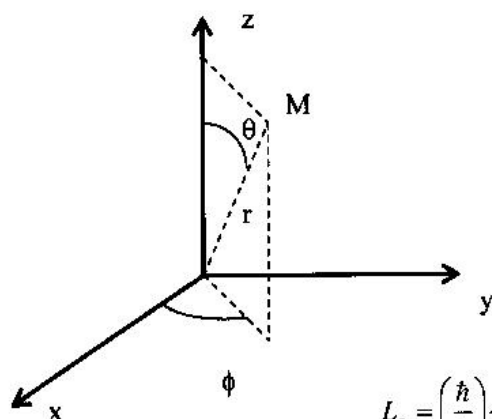
Une particule de masse m se déplace suivant l'axe (x'x) et est soumise au potentiel V(x) suivant :

$$V(x) = \begin{cases} \infty & -\infty < x < 0 \text{ (région I)} \\ 0 & 0 \leq x \leq a \text{ (région II)} \\ \infty & a < x < \infty \text{ (région III)} \end{cases}$$

- 1) Ecrire l'équation de Schrödinger indépendante du temps pour cette particule.
- 2) Montrer que la fonction d'onde s'annule dans les régions I et III.
- 3) Montrer que les fonctions propres du hamiltonien H pour cette particule dans la région II sont de la forme $\psi(x) = A \sin(kx)$. On déterminera ensuite A et k grâce aux conditions de raccordement et de normalisation : on montrera ainsi que ces solutions s'écrivent $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi(n+1)x}{a}$ où n est un entier positif (n = 0 correspond à l'état fondamental).
- 4) Quelles sont les énergies permises à cette particule dans la région II ?
- 5) Quelle est la probabilité de trouver la particule dans l'intervalle [a/4, a] ? Que devient cette probabilité aux grandes énergies ?
- 6) Généraliser le résultat de la question précédente pour un intervalle quelconque $[x_1, x_2]$.

Formulaire

L^2, L_z en coordonnées sphériques (r, θ , ϕ).



$$L_z = \left(\frac{\hbar}{i} \right) \frac{\partial}{\partial \phi}$$

$$L^2 = -\hbar^2 \left[\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right]$$