Cours d'introduction à la chimie quantique

Chapitre 3 : Système simple
Partie 2 :Oscillateur harmonique

François Dion

2020

Le potentiel considéré est le cas où:

$$V(x) = kx^2 \tag{1}$$

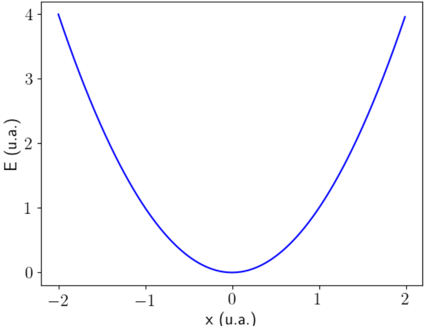


Figure: Shéma représentant le potentiel d'un oscillateur harmonique

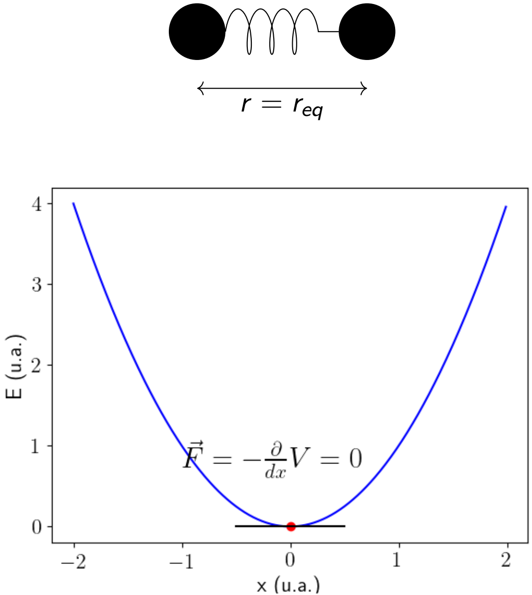
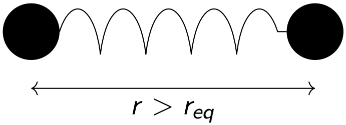


Figure: Shéma représentant le potentiel d'un oscillateur harmonique



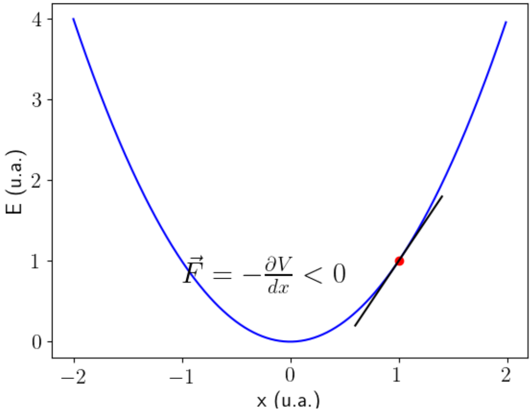
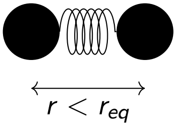


Figure: Shéma représentant le potentiel d'un oscillateur harmonique



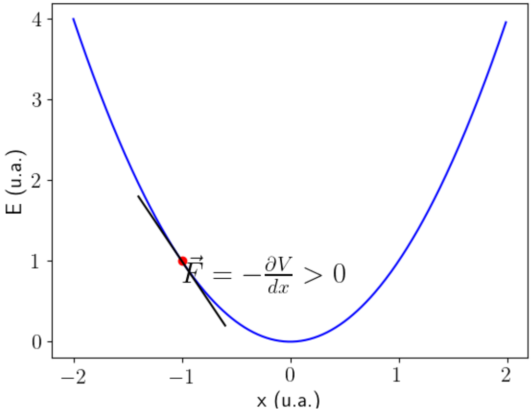


Figure: Shéma représentant le potentiel d'un oscillateur harmonique

Le potentiel

L'Hamiltonien général d'un système conservatif unidimensionnel est

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \hat{V}(x) \tag{2}$$

l'Hamiltonien

L'Hamiltonien de ce système est

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + k\hat{x}^2 \tag{2}$$

Équations de Shrodinger indépendante du temps

Rappelons l'équation de Shrodinger indépendante du temps

$$\hat{H}\Psi(x) = E\Psi(x) \tag{1}$$

Les solutions sont de la forme

$$\Psi_\nu(x) = N_\nu H_\nu(y) e^{\frac{-y^2}{2}} \tag{2}$$

oú N_ν est une constante de normalisation, $H_\nu(y)$ est un polynome d'Hermite et $y = \frac{x}{\alpha}, \alpha = (\frac{\hbar^2}{mk})^{\frac{1}{4}}$

Équations de Shrodinger indépendante du temps

Les premiers polynomes d'Hermite sont

n	$H(x)$
0	1
1	$2x$
2	$4x^2 - 2$
3	$8x^3 - 12x$
4	$16x^4 - 48x^2 + 12$

Équations de Shrodinger indépendante du temps

L'énegie de ces états est

$$E_\nu = \left(\nu + \frac{1}{2}\right)\hbar\nu \tag{3}$$

La différence d'énegie entre les états est constantes

$$E_{\nu+1} - E_\nu = \hbar\omega \tag{4}$$

Le potentiel