Université Paris-Sud

Licence et Magistère de Physique

Travaux Dirigés
de
Mécanique Quantique

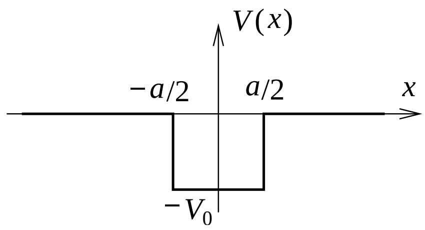
2008-2009

Table des matières

T.D. n^{o}1 : Équation de Schrödinger

A. Etats liés - Quantification de l'énergie.

On considère une particule plongée dans un potentiel $V(x)$ en forme de puits carré, c'est à dire défini par : $V(x) = -V_0 < 0$ pour $-a/2 < x < a/2$ et nul ailleurs.



1/ Quel est le mouvement d'une particule dans ce potentiel en mécanique classique ?

2/ On étudie le cas $-V_0 < E < 0$ (états liés).

a/ Ecrire l'équation de Schrödinger et la résoudre séparément dans chacune des trois zones. On pourra poser :

$$k_0 = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}}\,, \qquad k = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} \qquad \text{et} \qquad K = \sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}}\,. \tag{1}$$

b/ On peut montrer que, dans le cas d'une discontinuité de potentiel finie, les fonctions d'ondes restent bornées, continues et de dérivée continue. Ecrire les relations qui en découlent et en déduire que :

$$\left(\frac{k - \mathrm{i}K}{k + \mathrm{i}K}\right)^2 = \mathrm{e}^{2\mathrm{i}Ka}\,. \tag{2}$$

Quelle est la dimension de l'espace vectoriel des solutions, pour une valeur donnée de l'énergie ?

c/ On peut montrer que l'équation précédente est équivalente au système :

$$|\sin(\frac{Ka}{2})| = \frac{K}{k_0} \qquad \text{lorsque } \tan(\frac{Ka}{2}) < 0\,, \tag{3}$$

$$|\cos(\frac{Ka}{2})| = \frac{K}{k_0}\,. \qquad \text{lorsque } \tan(\frac{Ka}{2}) > 0 \tag{4}$$

Montrer par une méthode graphique simple qu'il y a quantification des énergies. Que se passe-t-il lorsque le puits devient très profond ?

B. Etats libres - Courant de probabilité – Réflexion, transmission

1/ Dans le cas du puits carré précédent, on étudie maintenant le cas $E > 0$ (états libres).

a/ Résoudre l'équation de Schrödinger dans chacune des trois zones et écrire les relations de raccordement.

b/ Montrer que pour toute énergie E, les solutions forment un espace vectoriel de dimension deux. Montrer que toute solution peut se décomposer en deux ondes planes qui se propagent en sens contraire. Peut-on normer ces solutions ?

2/ Soit $\phi(\vec{r},t)$ la fonction d'onde d'une particule de masse m placée dans un potentiel $V(\vec{r})$.

On définit la densité de probabilité de présence de la particule au point $\vec{r}$ et à l'instant t par :

$$\rho(\vec{r},t) = \mid \phi(\vec{r},t) \mid^2 = \overline{\phi}(\vec{r},t)\phi(\vec{r},t) \ . \tag{5}$$

a/ Montrer que cette densité satisfait à l'équation de *conservation* :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{J} = 0 \tag{6}$$

où le *courant de probabilité* $\vec{J}$ est donné par :

$$\vec{J} = \frac{\hbar}{2m\,\mathrm{i}} \left[\overline{\phi}\,(\vec{\nabla}\phi) - (\vec{\nabla}\overline{\phi})\,\phi \right] \ . \tag{7}$$

b/ Donner $\vec{J}$ pour une fonction d'onde de la forme :

$$\phi(\vec{r},t) = A\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}f(\vec{r},t)} \ . \tag{8}$$

c/ Préciser $\vec{J}$ dans le cas d'une onde plane, $f(\vec{r},t) = \vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t$.

3/ On considère une particule de masse m, soumise au potentiel à une dimension suivant :

$$V(x) = -V_0 \qquad \text{pour } x < 0 \ (V_0 > 0) \ , \tag{9}$$
$$V(x) = 0 \qquad \text{pour } x > 0 \ . \tag{10}$$

On s'intéresse dorénavant aux états stationnaires d'énergie positive, représentant une onde se propageant depuis $+\infty$, partiellement réfléchie en $x = 0$ et partiellement transmise.

a/ Expliquer brièvement pourquoi on choisira les fonctions d'onde sous la forme :

$$\phi(x) = A\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Kx} \qquad \text{pour } x < 0 \tag{11}$$
$$\phi(x) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} + B\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} \qquad \text{pour } x > 0 \tag{12}$$

où $K = \sqrt{2m(E+V_0)}/\hbar$ et $k = \sqrt{2mE}/\hbar$.

b/ Ecrire les conditions de raccordement en 0, et calculer A et B en fonction de K et k.

c/ Calculer le courant pour $x < 0$ puis $x > 0$. Identifier les courants incident J_i, réfléchi J_r et transmis J_t.

d/ On définit un coefficient de réflexion R et de transmission T par :

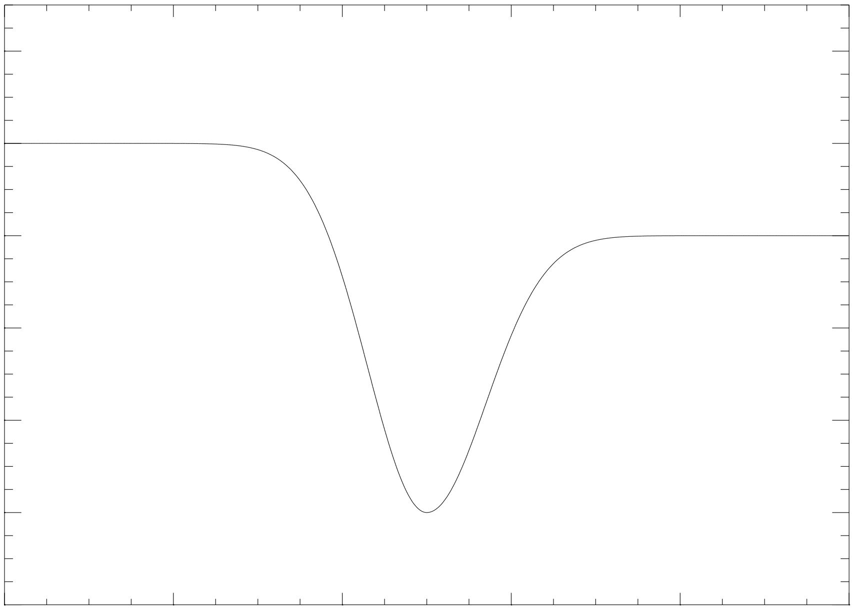
$$R = \left| \frac{J_r}{J_i} \right| \qquad \text{et} \qquad T = \left| \frac{J_t}{J_i} \right| \ . \tag{13}$$

Vérifier que $R + T = 1$.

e/ Calculer la limite de R et de T pour k tendant vers 0 et pour k tendant vers l'infini. Comparer avec les résultats de la mécanique classique.

T.D. n^{o}2 : États liés pour un puits quelconque – Origine de la quantification de l'énergie

On considère une particule sans spin plongée dans un potentiel $V(x)$ et caractérisée par une fonction d'onde $\phi(x)$ (problème à une dimension). Le puits de potentiel $V(x)$ a l'allure suivante :



1/ Rappeler l'équation de Schrödinger que vérifie la fonction d'onde décrivant un état stationnaire d'énergie E. Quelle est a priori la dimension de l'espace vectoriel des solutions ?

2/ Les cas $E < V_{\min}$ sont ils physiquement acceptables ? Discuter ensuite le cas $E = V_{\min}$ et comparer avec les résultats de la mécanique classique. Conclure que nécessairement $E > V_{\min}$.

3/ Quel est le comportement à l'infini de $\phi(x)$ selon les cas : $V_{\min} < E < V_2$; $V_2 < E < V_1$; $V_1 < E$. Quels sont les états liés et les états libres ?

4/ Dans le cas $V_{\min} < E < V_2$, on va montrer (de façon intuitive) qu'il y a quantification des états. Représenter schématiquement la fonction d'onde de l'état fondamental. En supposant arbitrairement que la fonction d'onde s'annule quand $x \to -\infty$, comment se déforme la solution de l'équation de Schrödinger si l'on augmente très légèrement E ? Parmi toutes les solutions, seul un nombre fini d'entre elles vérifie les conditions du 3). En particulier, remarquer que l'on peut ici caractériser chaque état lié par le nombre de zéros de la fonction d'onde.

(voir la résolution numérique jointe)

Pour la figure

T.D. n^{o}3 : Fonction d'onde dans l'espace des impulsions

A. Fonction d'onde dans l'espace des impulsions

DÉFINITIONS

Soit $\psi(x,t)$ la fonction d'onde normée à 1 d'une particule sur un axe et $\phi(k,t)$ sa transformée de Fourier (T.F.) :

$$\phi(k,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x,t)\, e^{-ikx} dx \ .$$

En utilisant la relation de de Broglie $\lambda = h/p \Longleftrightarrow p = \hbar k$, on définit la fonction :

$$\tilde{\psi}(p,t) = \frac{1}{\sqrt{\hbar}} \phi(p/\hbar, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x,t) \exp(-i\frac{px}{\hbar}) dx \ ,$$

où le facteur $1/\sqrt{\hbar}$ est introduit pour que $\tilde{\psi}(p,t)$ soit normée à l'unité)
$\tilde{\psi}(p,t)$ est la fonction d'onde dans l'espace des impulsions. On admet, ce qui n'est pas évident, que $|\tilde{\psi}(p,t)|^2$ est la densité de probabilité de p.
Remarques : il est facile de montrer que la fonction d'onde dans l'espace des positions s'obtient à partir de celle dans l'espace des impulsions par :

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}(p,t) \exp(i\frac{px}{\hbar}) dp.$$

La fonction d'onde dans l'espace des impulsions $\tilde{\psi}(p,t)$ définit complètement à elle seule l'état de la particule, aussi bien que $\psi(x,t)$, fonction d'onde dans l'espace des positions, puisqu'on passe de l'une à l'autre de façon univoque par T.F. ou T.F. inverse.

1/ Puits carré infini

a/ Calculer les énergies et les fonctions d'onde stationnaires, normées à l'unité, d'une particule dans un puits carré infini dont les bords sont situés en 0 et a. Tracer les fonctions d'onde associées aux 3 premiers niveaux.

b/ Montrer que les fonctions d'onde dans l'espace des impulsions s'écrivent :

$$\tilde{\psi}(p) = \frac{1}{2i}\sqrt{\frac{a}{\pi\hbar}} e^{i(n\pi/2 - pa/2\hbar)} \left[\mathrm{sinc}(\frac{pa}{2\hbar} - \frac{n\pi}{2}) + (-1)^{n+1} \mathrm{sinc}(\frac{pa}{2\hbar} + \frac{n\pi}{2}) \right]$$

avec :

$$\mathrm{sinc}(u) = \frac{\sin u}{u}$$

Représenter graphiquement $\mathrm{sinc}(u)$, indiquer l'abscisse du premier zéro de part et d'autre de l'origine. Puis représenter graphiquement $\mathrm{sinc}(\frac{pa}{2\hbar} - \frac{n\pi}{2})$ et $\mathrm{sinc}(\frac{pa}{2\hbar} + \frac{n\pi}{2})$ en fonction de p.

c/ Montrer que pour n grand on a :

$$|\tilde{\psi}(p)|^2 \simeq \frac{a}{4\pi\hbar} \left[\mathrm{sinc}^2(\frac{pa}{2\hbar} - \frac{n\pi}{2}) + \mathrm{sinc}^2(\frac{pa}{2\hbar} + \frac{n\pi}{2}) \right] \ .$$

d/ Indiquer sur un graphique l'allure de cette courbe. Donner les positions et l'écartement des deux pics principaux, ainsi que leur largeur à la base. Que deviennent l'écartement et la largeur des deux pics principaux quand n tend vers l'infini ?

e/ Décrire le mouvement d'une particule de même énergie $E = n^2\pi^2\hbar^2/2ma^2$ et de même masse dans le même potentiel en mécanique classique et donner la valeur de son impulsion en fonction de n, $\hbar$ et a.

f/ Indiquer, pour l'impulsion, ce qui est semblable et ce qui diffère en mécanique classique et en mécanique quantique, quand n tend vers l'infini.

2/ Densités de probabilité pour les états stationnaires
Montrer que, pour un état stationnaire, $|\psi(x,t)|^2$ et $|\tilde{\psi}(p,t)|^2$ sont indépendants du temps.

3/ Équation de Schrödinger dans l'espace des impulsions (*facultatif*)
En prenant la transformée de Fourier des deux membres de l'équation de Schrödinger dépendant du temps, indiquer à quelle équation obéit $\tilde{\psi}(p,t)$.

B. Relation d'Heisenberg position-impulsion

1/ Lien avec la transformée de Fourier
En utilisant les propriétés de la transformation de Fourier indiquées ci-dessous, retrouver la relation :

$$\Delta x \, \Delta p \;\geqslant\; \hbar/2 \;.$$

2/ Exemple : oscillateur harmonique
La fonction d'onde de l'état fondamental (état stationnaire de plus basse énergie) de l'oscillateur harmonique à une dimension ($V(x) = 1/2m\Omega^2x^2$), s'écrit :

$$\left(\frac{m\Omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left(-\frac{m\Omega x^2}{2\hbar}\right) \exp\left(-i\frac{Et}{\hbar}\right) \;.$$

Calculer Δx, Δp, $\Delta x \, \Delta p$ pour tout t.

3/ Exemple : puits carré infini (*facultatif*)
Dans le cas de la particule confinée dans un puits carré infini situé entre 0 et a, calculer Δx, Δp, $\Delta x \, \Delta p$.
Vers quelle valeur tend $\Delta x \, \Delta p$ quand l'énergie tend vers l'infini ? Préciser la signification de ce comportement en utilisant les résultats du A-1).

4/ Un argument heuristique pour estimer l'énergie du fondamental.(*facultatif*)
L'inégalité de Heisenberg montre que lorsqu'une particule est confinée dans une région de dimension L, son énergie cinétique $E_c = p^2/(2m)$ est d'ordre $E_c \sim \hbar^2/(mL^2)$. Utiliser cette remarque pour trouver l'ordre de grandeur de l'énergie du fondamental de :
a/ l'oscillateur harmonique unidimensionnel $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2$.
b/ L'atome d'Hydrogène $H = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r}$.

Propriétés de la transformation de Fourier

- *Définition :* soit $\psi(x)$ une fonction complexe de variable réelle telle que $\int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x)dx$ existe ($\Leftrightarrow$ ψ est sommable). Alors l'intégrale :
$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) e^{-ikx} dx$$
existe $\forall$ k et définit une nouvelle fonction $\tilde{\psi}(k)$ qui est par définition la transformée de Fourier de $\psi(x)$. On a de plus :
$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}(k) e^{ikx} dk$$
$\psi(x)$ est la transformée de Fourier inverse de $\tilde{\psi}(k)$.
- *Propriétés utiles de la transformation de Fourier :*

Fonction	Transformée de Fourier
$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}(k) e^{ikx} dk$	$\tilde{\psi}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) e^{-ikx} dx$
$\lambda\psi(x)$	$\lambda\tilde{\psi}(k)$
$\psi(ax)$ (a réel)	$\frac{1}{\lvert a\rvert}\ \tilde{\psi}(\frac{k}{a})$
$-ix\psi(x)$	$\frac{d\tilde{\psi}}{dk}$
$\frac{d\psi}{dx}$	$ik\tilde{\psi}(k)$
$e^{ik_0x}\psi(x)$	$\tilde{\psi}(k-k_0)$
$\psi(x+x_0)$	$e^{ikx_0}\tilde{\psi}(k)$
$e^{-\frac{x^2}{2}}$	$e^{-\frac{k^2}{2}}$

- *Formule de Parseval-Plancherel :*
$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^*(x)\psi_2(x)dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}_1^*(k)\tilde{\psi}_2(k)dk \qquad \text{(conservation du produit scalaire)}$$
$$\Rightarrow \quad \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |\tilde{\psi}(k)|^2 dk \qquad \text{(conservation de la norme)}$$
$$\tilde{\psi}(k) \ \rightarrow\ 0 \text{ quand } k \ \rightarrow\ \pm\infty$$
et :
$$\Delta x\ \Delta k \geqslant \frac{1}{2} \qquad \text{avec :}$$
$$\Delta x = \text{ écart type de } x = \left[\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 (x- < x >)^2 dx\right]^{\frac{1}{2}} ,$$
$$\Delta k = \text{ écart type de } k = \left[\int_{-\infty}^{+\infty} |\tilde{\psi}(k)|^2 (k- < k >)^2 dk\right]^{\frac{1}{2}} .$$

T.D. n^{o}4 : Représentation et notation de Dirac

A. Calcul formel en notation de Dirac

1/ Associativité

Soit λ un scalaire, $|u>$, $|v>$, $|w>$ des états physiques, on notera :

$$A = |u><v| \ , \qquad B = |w><u| \ , \qquad C \text{ un opérateur quelconque}$$

1. Vérifier que A et B sont des opérateurs puis calculer les produits AB et BA.
2. Donner la nature (scalaire, vecteur ou opérateur) des objets suivants et les simplifier, le cas échéant.
   - $C|u>$
   - $<v|\lambda C|w>$
   - $A \ <v|u><w|u>$
   - $AC\lambda B$
3. D'après ce qui précède, justifier que : $|u><v|C\lambda|w><u|$ a un sens.

2/ Conjugaison

Soit λ un scalaire, $|u>$, $|v>$, $|w>$ des états physiques, A un opérateur. La conjuguée hermitique d'une séquence donnée s'obtient en prenant la séquence dans **l'ordre inverse**, et en remplaçant chaque terme par son conjugué, suivant la correspondance suivante :

$$\begin{array}{ccc} \lambda & \longleftrightarrow & \bar{\lambda} \\ |x> & \longleftrightarrow & <x| \\ A & \longrightarrow & A^\dagger \end{array}$$

Calculer la conjuguée des objets suivants et préciser leur nature :
- $A|u>$
- $A|u><v|\lambda i$
- $|u><v|A|w><x|\lambda i|y><z|$

B. Changement de représentation

Soit $|1>$, $|2>$, $|3>$ une base canonique d'un espace à trois dimension. Dans cette base canonique, la représentation matricielle de ces vecteurs est donc :

$$|1> \leftrightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad |2> \leftrightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad |3> \leftrightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\text{On définit : } |u> = \frac{|1>}{\sqrt{2}} + \frac{|2>}{\sqrt{2}} \text{ et } |v> = \frac{|1>}{2} - \frac{|2>}{2} + \mathrm{i}\frac{|3>}{\sqrt{2}}$$

1. Donner la représentation matricielle de $|u>$, $<u|$ et $|v>$.
2. Donner la représentation matricielle de $|\phi> = \dfrac{|u>}{2} + \mathrm{i}\dfrac{\sqrt{3}}{2}|v>$.
3. Donner la représentation matricielle de $|u><v|$.

C. Commutateurs

Soit deux opérateurs A et B agissant dans un espace $\mathcal{E}$. On appelle commutateur de A et B l'opérateur $AB - BA$ et on le note $[A, B]$.

1/ Règles de calculs

On a les propriétés suivantes :

$$\begin{aligned}
[A,B] &= -[B,A] && (1)\\
[\lambda A,B] &= \lambda[A,B] && (2)\\
[A+B,C] &= [A,C]+[B,C] && (3)\\
[A,BC] &= B[A,C]+[A,B]C && (4)
\end{aligned}$$

- Démontrer ces propriétés.
- Calculer l'adjoint de l'opérateur correspondant à la matrice :

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 3 \\ 1 & 0 & i \\ 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}.$$

- Un opérateur A est dit hermitien (ou auto-adjoint) lorsqu'il vérifie $A = A^\dagger$. Lesquelles des matrices suivantes correspondent à des opérateurs hermitiens ?

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 3 \\ 0 & 0 & 2 \\ 3 & 2 & i \end{pmatrix} \quad , \qquad \begin{pmatrix} 1 & i \\ -i & 2 \end{pmatrix}$$

- Montrer que le produit de deux opérateurs hermitiens n'est hermitien que si ces deux opérateurs commutent. Donner des exemples.

2/ Application

Soit une particule de masse m dont la fonction d'onde est régie par le hamiltonien à une dimension : $\hat{H} = \hat{p}^2/(2m) + V(\hat{x})$

1. Montrer que $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$
2. Montrer que $[\hat{x}^n, \hat{p}] = ni\hbar x^{n-1}$
3. Montrer que $[V(\hat{x}), \hat{p}] = i\hbar \frac{\partial V}{\partial x}(\hat{x})$
4. Montrer que $[\hat{x}, \hat{p}^2] = 2i\hbar\hat{p}$
5. Déduire de ce qui précède les expressions de $[\hat{H}, \hat{p}]$, $[\hat{H}, \hat{x}]$ et $[\hat{H}, \hat{x}\hat{p}]$ en fonction de $\hat{x}$, $\hat{p}$ et $V(\hat{x})$.

T.D. n^{o}5 : Probabilités des résultats d'une mesure : Cas d'une observable de spectre discret ou continu

I. Rappel : Les postulats de la mesure

On mesure une grandeur physique représentée par l'observable A sur un système dans l'état $|\psi>$ normé.

1/ *Valeurs possibles du résultat*

Le résultat de la mesure ne peut être qu'une des valeurs propres de A.

2/ *Probabilités des différents résultats*

Soit a l'une quelconque des valeurs propres de A.
Dans tous les cas la probabilité ou la densité de probabilité de trouver a comme résultat de la mesure est le carré de la norme de la projection de $|\psi>$ sur le sous-espace associé à a.

- Si a appartient au domaine discret des valeurs propres et n'est pas dégénérée, la probabilité de trouver a comme résultat de la mesure est :

$$P(a) = |<a|\psi>|^2 \qquad \text{où } |a> \text{ est l'état propre normé associé à } a$$

- Si a appartient au domaine discret des valeurs propres et est dégénérée :

$$P(a) = \sum_{i=1}^{g} |<a,i|\psi>|^2 \qquad (g \text{ dégénérescence de } a)$$

  où $|a,i>$ est une base orthonormée quelconque du sous-espace associé à a.
- Si a appartient au domaine continu et n'est pas dégénérée, la probabilité pour que le résultat de la mesure soit compris entre a et $a+da$ est :

$$dP(a) = |<a|\psi>|^2 \, da$$

  où l'ensemble des $|a>$, états propres du continu, est orthonormé au sens large, c'est à dire tel que :

$$<a|a'>= \delta(a-a') \qquad \delta \text{ étant la distribution de Dirac}$$

- Si a appartient au domaine continu et est dégénérée :

$$dP(a) = \sum_{i=1}^{g} |<a,i|\psi>|^2 \, da \qquad \text{avec } <a,i|a',i'>= \delta(a-a')\,\delta_{ii'}$$

3/ *État après la mesure*

Dans tous les cas l'état $|\psi'>$ après la mesure est la projection normée de $|\psi>$ sur le sous-espace associé au résultat de la mesure.

- Dans le cas du spectre discret :

$$|\psi'>=|a> \qquad \text{ou} \qquad |\psi'>= \frac{\sum_{i=1}^{g} |a,i><a,i|\psi>}{\sqrt{P(a)}}\ .$$

- Dans le cas du spectre continu et lorsqu'on mesure a avec une précision Δa :

$$|\psi'>=\frac{\int_{a-\Delta a/2}^{a+\Delta a/2} |a'><a'|\psi> \ da'}{\sqrt{P(a-\Delta a/2,\ a+\Delta a/2)}}$$

avec :

$$P(a-\Delta a/2,\ a+\Delta a/2)=\int_{a-\Delta a/2}^{a+\Delta a/2} |<a'|\psi>|^2 \ da'$$

si a n'est pas dégénérée et les mêmes formules avec somme sur i si a est dégénérée.

Remarques :
$\star$ ces expressions ne sont valables que si $|\psi>$ est normé et si les $|a>$ sont orthonormés, au sens large s'il s'agit du spectre continu.
$\star$ on peut étendre ces expressions au cas où la dégénérescence est continue.

II. Exercices

A) On considère un système dont l'espace des états, qui est à trois dimensions, est rapporté à la base orthonormée formée par les trois kets $|1>$, $|2>$, $|3>$. Dans la base de ces trois vecteurs, l'opérateur hamiltonien H du système et deux observables A et B s'écrivent :

$$H=e\begin{pmatrix}1&0&0\\0&2&0\\0&0&2\end{pmatrix}\ ,\qquad A=a\begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&1\\0&1&0\end{pmatrix}\ ,\qquad B=b\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&0\\0&0&1\end{pmatrix}$$

où e, a et b sont des constantes réelles positives.

1/ Indiquer les valeurs propres et les sous espaces propres associés de ces trois opérateurs.

2/ Montrer :
a/ aucun des trois opérateurs n'est un E.C.O.C. à lui seul.
b/ H et A forment un E.C.O.C.
c/ B ne peut former un E.C.O.C. ni avec H ni avec A.

3/ *Mesure de A puis B.* Le système se trouve dans l'état $|\varphi\rangle=|1\rangle$. On effectue une mesure de A puis une mesure de B. Quels sont les résultats de mesure possibles et l'état du système après mesure ?

4/ Reprendre la question précédente lorsqu'on mesure d'abord B puis A.

5/ A $t=0$ on place le système dans l'état :

$$|\psi(0)\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle+\frac{1}{2}|2\rangle+\frac{1}{2}|3\rangle\ .$$

On mesure l'énergie du système à $t=0$. Quelles valeurs peut-on trouver et avec quelles probabilités ?
Calculer, toujours à $t=0$ la valeur moyenne $<H>_{|\psi(0)\rangle}$ de l'énergie dans l'état $|\psi(0)\rangle$ ainsi que l'écart quadratique moyen ΔH.

6/ On mesure A à $t=0$. Quels résultats peut-on trouver et avec quelles probabilités ?
Quel est le vecteur d'état immédiatement après la mesure ?

7/ Même question en remplaçant A par B.

8/ *Mesure et évolution temporelle.* Le système se trouve initialement dans l'état $|\,\psi(0)\,\rangle$. Son état quantique évolue au cours du temps. Calculer le vecteur d'état $|\,\psi(t)\,\rangle$ à l'instant t.

9/ Reprendre les questions 7/ et 8/ en se plaçant à un instant t quelconque et non plus à l'instant $t = 0$.

10/ Calculer les valeurs moyennes $< A >_{|\,\psi(t)\,\rangle}$ et $< B >_{|\,\psi(t)\,\rangle}$ de A et B à l'instant t.

B) Normalisation des bases continues
Calculer les fonctions d'onde propres de l'impulsion normées au sens large par rapport à k puis par rapport à p.
Facultatif : Calculer les fonctions d'onde propres de l'énergie normées au sens large par rapport à E pour une particule libre.

C) *Facultatif :* Une particule est dans un état $|\,\psi\,\rangle$ quelconque (normé) à $t = 0$, et son hamiltonien H est indépendant du temps.

1/ Montrer que les probabilités des différents résultats possibles d'une mesure de l'énergie (distribution statistique de l'énergie), sont indépendantes de l'instant t auquel on effectue la mesure.

2/ Généraliser ce résultat au cas de la mesure d'une observable A commutant avec le hamiltonien : $[A, H] = 0$.

D) *Facultatif :* Calculer la densité de probabilité en énergie à un instant quelconque t pour un paquet d'onde gaussien libre dont la fonction d'onde à l'instant $t = 0$ est :

$$\psi(x,0) = \left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{1/4} \; e^{ik_0 x} \;\; e^{-x^2/a^2} \;\; .$$

E) *Facultatif :* Montrer que les règles énoncées au I) contiennent en particulier les deux résultats suivants :

- la densité de probabilité des positions est le carré du module de la fonction d'onde $\psi(x)$.
- la densité de probabilité des impulsions est le carré du module de :

$$\tilde{\psi}(p,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-i\frac{px}{\hbar}) \; \psi(x,t) \; dx$$

F) *Facultatif :* Une particule a la fonction d'onde quelconque $\psi(x)$ (normée) à un instant donné. On mesure sa position avec une précision Δx.
Quelle est la probabilité d'obtenir le résultat dans l'intervalle $[x_0 - \Delta x/2, \; x_0 + \Delta x/2]$?
Quelle est la fonction d'onde $\psi^f(x)$ après la mesure ?
Dans le cas où $\psi(x)$ est réelle indiquer comment le graphe de $\psi^f(x)$ se déduit de celui de $\psi(x)$.

T.D. n^{o}6 : Symétries et loi de conservation – Système à 2 niveaux

I. Transformations en Mécanique Quantique

DÉFINITION (A. Messiah, Tome 2 chap. XV) : effectuer une transformation $\mathcal{T}$ sur un système physique, c'est remplacer chacune de ses variables par une nouvelle variable, chacun de ses états par un nouvel état, *tout en conservant les propriétés physiques du système.*

Soit un système physique décrit par un vecteur d'état $|\,\psi\,\rangle$ appartenant à un espace de Hilbert $\mathcal{H}$. À une transformation $\mathcal{T}$ donnée correspond un opérateur $\hat{T}$ agissant dans l'espace de Hilbert. Effectuer une transformation $\mathcal{T}$ du système physique consiste à appliquer l'opérateur $\hat{T}$ sur l'état $|\,\psi\,\rangle$: $|\,\psi\,\rangle \to |\,\psi'\,\rangle = \hat{T}|\,\psi\,\rangle$.

1. Soit $\hat{A}$ une observable. À quelle condition $\{\hat{A}\}$ est-il un E.C.O.C ?
   On supposera cette condition vérifiée par la suite. On notera $|\,\varphi_1\,\rangle, ..., |\,\varphi_n\,\rangle$ les vecteurs propres de A et $a_1, ..., a_n$ les valeurs propres correspondantes.
2. Rappeler l'expression de la probabilité P_i de trouver la valeur a_i comme résultat de la mesure de $\hat{A}$.
3. On note $|\,\varphi_i'\,\rangle = \hat{T}|\,\varphi_i\,\rangle$. Donner l'expression de la probabilité P_i' d'observer le système décrit par $|\,\psi'\,\rangle$ dans l'état $|\,\varphi_i'\,\rangle$.
4. Par définition, une transformation $\mathcal{T}$ conserve les propriétés physiques du système. En déduire que $\hat{T}$ est un opérateur unitaire, c'est à dire que $\hat{T}^\dagger\hat{T} = I$, où I est l'opérateur identité.
5. La transformation agit également sur les observables. Considérons à présent l'observable $\hat{A}$ et sa transformée $\hat{A}'$. Comme $\mathcal{T}$ conserve les propriétés physiques du système, elle conserve aussi la valeur moyenne de $\hat{A}$ dans l'état $|\,\psi\,\rangle$. En déduire que $\hat{A}' = \hat{T}\hat{A}\hat{T}^\dagger$.
6. On dit que l'observable $\hat{A}$ est invariante sous la transformation $\hat{T}$ si $\hat{A}' = \hat{A}$. Montrer que dans ce cas $[\hat{A}, \hat{T}] = 0$.
7. On considère le cas particulier du hamiltonien $\hat{H}$. Montrer que si H est invariant sous une transformation $\hat{T}$ et que $\hat{T}$ ne dépend pas explicitement du temps, alors :

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\,\psi(t)\,|\hat{T}|\,\psi(t)\,\rangle = 0\,. \tag{1}$$

II. Principe d'invariance et loi de conservation

1/ Groupe continu de transformations. Considérons un groupe de transformations dépendant d'un paramètre continu (par exemple une rotation). On note l'opérateur unitaire $\hat{T}(\epsilon)$ où ϵ est un paramètre réel (dans le cas des rotations, ϵ serait l'angle). Considérons une transformation infinitésimale

$$\hat{T}(\epsilon) = I - \mathrm{i}\epsilon\hat{G} + ...$$

où ϵ est infiniment petit. **On négligera les termes d'ordre supérieur en ϵ^n avec $n \geq 2$ dans la suite**. I est l'opérateur identité.

1. Montrer que $\hat{G}$ est hermitique : $\hat{G} - \hat{G}^\dagger = 0$.
2. En reprenant le résultat de la question I.5), montrer que : $\hat{A}' = \hat{A} - \mathrm{i}\epsilon[\hat{G}, \hat{A}] + \cdots$

2/ Groupe des translations. Considérons à présent la translation infinitésimale d'une quantité a le long de l'axe $0x$. L'opérateur correspondant est noté $\hat{T}(a)$.
Soit $|\,x\,\rangle$ un vecteur propre de l'opérateur position $\hat{x}$ (c'est-à-dire $\hat{x}|\,x\,\rangle = x|\,x\,\rangle$).
On a par définition : $\hat{T}(a)|\,x\,\rangle = |\,x'\,\rangle$ avec $\hat{x}|\,x'\,\rangle = (x+a)|\,x'\,\rangle$.

1. Montrer que $[\hat{T}(a)]^{-1} = \hat{T}(-a)$.
2. Sachant que la mesure des distances est la même, toute chose étant égale par ailleurs, qu'elle soit faite à Paris ou à Orsay, ou d'un point de vue mathématique, en utilisant l'invariance par translation de la mesure des longueurs, vérifier que $\hat{x}' = \hat{x} - aI$. Justifier le signe $-$ dans cette dernière l'expression.
3. En notant $\hat{G}$ l'opérateur hermitique associé à $\hat{T}(a)$, déduire de la question précédente que : $\hat{G} = \hat{p}_x/\hbar$. Où $\hat{p}_x$ est l'opérateur impulsion.
4. Considérons maintenant le système constitué d'une particule libre, expliquer pourquoi l'invariance par translation du hamiltonien implique que l'impulsion est une constante du mouvement (on utilisera le résultat de la question I-7)).
5. **Généralisation au cas de N particules.** (*facultatif*) Soit N particules en interaction (se déplaçant sur une ligne pour simplifier) dont la dynamique est décrite par le hamiltonien $\hat{H} = \sum_i \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \frac{1}{2}\sum'_{i,j} V(\hat{x}_i - \hat{x}_j)$, où $V(x)$ est une fonction *paire*. $\hat{x}_i$ et $\hat{p}_i$ sont les opérateurs position et impulsion de la particule i (la somme primée porte sur tous les couples (i,j) t.q. $i \neq j$). Montrer que l'impulsion totale $\hat{P} = \sum_i \hat{p}_i$ commute avec $\hat{H}$. Que peut-on déduire sur $\langle\,\psi(t)\,|\hat{P}|\,\psi(t)\,\rangle$, où $|\,\psi(t)\,\rangle$ décrit l'état du système ?

III. La molécule d'ammoniac

A. Description du modèle et symétrie

On considère une molécule d'ammoniac (NH_3) constituée de 3 atomes d'hydrogène formant un triangle équilatéral dans un plan ; l'axe perpendiculaire au plan et passant au centre du triangle porte l'atome d'azote. La molécule peut se trouver dans deux états quantiques possibles, notés $|\,\psi_1\,\rangle$ et $|\,\psi_2\,\rangle$, correspondant aux deux positions **symétriques** de l'atome d'azote de part et d'autre du plan des atomes d'hydrogène.

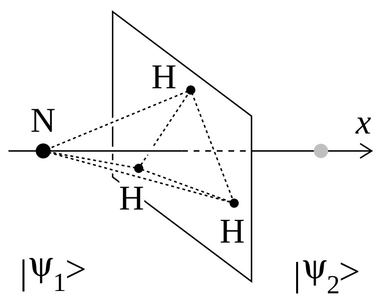


FIG. 1 – **Structure de la molécule NH_3 :** *L'état quantique $|\,\psi_1\,\rangle$ correspond à la situation représentée, lorsque l'atome* N *est à gauche du plan. L'état $|\,\psi_2\,\rangle$ correspond au cas où l'atome* N *est à droite du plan (position symétrique indiquée en gris).*

On supposera que $\{|\,\psi_1\,\rangle, |\,\psi_2\,\rangle\}$ forment une base orthonormée de l'espace de Hilbert décrivant l'état quantique de la molécule. Les deux états ne sont pas des états stationnaires car l'atome d'azote peut passer d'un côté à l'autre par effet tunnel. La forme la plus générale de la matrice qui représente le hamiltonien $\hat{H}_0$ est donc

$$H_0 = \begin{pmatrix} E_1 & E_{12} \\ E_{12}^* & E_2 \end{pmatrix} , \tag{2}$$

où E_1, $E_2 \in \mathbb{R}$ et $E_{12} \in \mathbb{C}$. Nous allons voir que la symétrie du problème impose des contraintes sur ces trois paramètres.

1/ On note $\hat{R}$ l'opérateur décrivant la réflexion par rapport au plan des atomes H. Donner la matrice 2×2, notée R, représentant $\hat{R}$ dans la base $\{|\,\psi_1\,\rangle, |\,\psi_2\,\rangle\}$.

2/ D'après le paragraphe d'introduction, quelle doit être la valeur du commutateur $[\hat{R}, \hat{H}_0]$? En déduire des conditions sur les paramètres E_1, E_2 et E_{12}.

B. États propres et évolution temporelle

Dans la base $\{|\,\psi_1\,\rangle, |\,\psi_2\,\rangle\}$, le hamiltonien $\hat{H}_0$ est représenté par la matrice

$$H_0 = \begin{pmatrix} E_0 & -\Delta \\ -\Delta & E_0 \end{pmatrix} \tag{3}$$

où E_0, $\Delta \in \mathbb{R}$ avec $\Delta > 0$.

1/ Donner les vecteurs propres, notés $|\,S\,\rangle$ et $|\,A\,\rangle$, et les valeurs propres associées, notées E_S et E_A, du hamiltonien $\hat{H}_0$ ($|\,S\,\rangle$ désigne l'état de plus basse énergie).

2/ Quelle est l'action de $\hat{R}$ sur $|\,S\,\rangle$ et $|\,A\,\rangle$? Pouvez-vous justifier le signe de Δ ?

3/ Initialement la molécule se trouve dans l'état $|\,\psi(t = 0)\,\rangle = |\,\psi_1\,\rangle$. Exprimer $|\,\psi(t)\,\rangle$ dans la base $\{|\,S\,\rangle, |\,A\,\rangle\}$ puis dans la base $\{|\,\psi_1\,\rangle, |\,\psi_2\,\rangle\}$.

4/ Quelle est la probabilité $\mathcal{P}_1(t)$ pour que l'atome d'azote se trouve à gauche du plan à l'instant t ? Décrire la dynamique du système.

5/ La longueur d'onde du rayonnement émis par un maser à ammoniac est $\lambda = 1{,}25\,\text{cm}$. Calculer la fréquence correspondante et en déduire Δ en eV (on rappelle que $h = 6{,}64 \times 10^{-34}$ J·s).

T.D. n^{o}7 : Oscillateur harmonique – Produit tensoriel

A. Rappels : l'oscillateur harmonique à une dimension

L'énergie potentielle d'une particule de masse m dans un potentiel d'oscillateur harmonique à une dimension de pulsation ω centré à l'origine est :

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \ .$$

Les énergies propres de la particule sont :

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega \qquad \text{avec } n \text{ entier} \geqslant 0 \qquad \text{(niveaux équidistants)} \ .$$

Aucune des énergies n'est dégénérée et les fonctions propres associées sont de la forme :

$$\varphi_n(x) = \text{polynôme (d'Hermite) de degré } n \ \times \text{gaussienne} \ (\propto H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x\right) e^{-m\omega x^2/2\hbar}) \ .$$

Il n'y a pas de partie continue dans le spectre. Tous les états sont liés et les fonctions d'onde normalisables.
On passe de $\varphi_n(x)$ à $\varphi_{n-1}(x)$ grâce à un opérateur dit d'*annihilation* noté a. L'opérateur conjugué $a^\dagger$, appelé opérateur de *création*, permet de passer de $\varphi_n(x)$ à $\varphi_{n+1}(x)$:

$$a\,|\,n\,\rangle \ = \ \sqrt{n}\,|\,n-1\,\rangle \ , \tag{1}$$
$$a^\dagger\,|\,n\,\rangle \ = \ \sqrt{n+1}\,|\,n+1\,\rangle \ . \tag{2}$$

B. L'oscillateur harmonique comme solution approchée pour les états liés de plus basses énergies d'un potentiel quelconque

Soit le puits de potentiel :

$$V(x) = -\frac{V_0}{\mathrm{ch}^2(x/a)}. \tag{3}$$

a/ Montrer que pour une certaine valeur de λ, $\psi(x) = \mathrm{ch}^\lambda(x/a)$ est solution de l'équation de Schrödinger stationnaire. Quelle est l'énergie associée ? Pourquoi l'état décrit par $\psi(x)$ est l'état fondamental.

b/ Que devient l'énergie du fondamental quand le puits devient très profond ?

c/ Retrouver le résultat précédent à l'aide d'une approximation harmonique pour $V(x)$.

C. États cohérents

Nous considérons un oscillateur harmonique à une dimension décrit par le hamiltonien :

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\,\hat{X}^2 \ . \tag{4}$$

Si on introduit les opérateurs $\hat{x}$ et $\hat{p}$ reliés à $\hat{X}$ et $\hat{P}$ par :

$$\hat{X} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\,\hat{x} \qquad \text{et} \qquad \hat{P} = \sqrt{\hbar m\omega}\,\hat{p} \ . \tag{5}$$

les opérateurs d'annihilation et de création sont définis par

$$\hat{x} = \frac{\hat{a} + \hat{a}^\dagger}{\sqrt{2}} \qquad \text{et} \qquad \hat{p} = \frac{\hat{a} - \hat{a}^\dagger}{\mathrm{i}\sqrt{2}} \,. \tag{6}$$

0/ Oscillateur classique.– Donner la solution $x_{\text{class}}(t)$ des équations du mouvement classiques pour des conditions initiales $x(0) = x_0$ et $p(0) = 0$. Tracer la trajectoire dans l'espace des phases (x, p).

1/ États propres de $\hat{H}$.– Calculer les valeurs moyennes de $\hat{x}$ et $\hat{p}$ dans un état propre $|\,\varphi_n\,\rangle$. Calculer les fluctuations correspondantes : Δx_{φ_n} et Δp_{φ_n} (on rappelle que $\Delta A^2_\varphi \stackrel{\text{def}}{=} \langle\,\varphi\,|\hat{A}^2|\,\varphi\,\rangle - \langle\,\varphi\,|\hat{A}|\,\varphi\,\rangle^2$). Calculer le produit $\Delta x_{\varphi_n} \Delta p_{\varphi_n}$.

2/ États cohérents.– Les états cohérents sont définis comme les états propres de l'opérateur d'annihilation :

$$\hat{a}\,|\,\alpha\,\rangle = \alpha\,|\,\alpha\,\rangle \tag{7}$$

où α est un nombre complexe. Dans cette question on cherche comment $|\,\alpha\,\rangle$ se décompose sur les états propres de $\hat{H}$.

a/ Calculer la valeur moyenne de l'operateur nombre $\hat{N} = \hat{a}^\dagger\hat{a}$ dans l'état $|\,\alpha\,\rangle$ ainsi que ses fluctuations $\Delta N_{|\,\alpha\,\rangle}$. En déduire la valeur moyenne de l'énergie et ses fluctuations.

b/ Calculer les valeurs moyennes $\langle\hat{x}\rangle_{|\,\alpha\,\rangle}$ et $\langle\hat{p}\rangle_{|\,\alpha\,\rangle}$, ainsi que les fluctuations $\Delta x_{|\,\alpha\,\rangle}$ et $\Delta p_{|\,\alpha\,\rangle}$. Calculer le produit $\Delta x_{|\,\alpha\,\rangle}\,\Delta p_{|\,\alpha\,\rangle}$. Comparer ces résultats à ceux de la question **1**.

c/ En écrivant $|\,\alpha\,\rangle = \sum_n c_n|\,\varphi_n\,\rangle$, trouver une relation de récurrence sur les coefficients c_n. En déduire comment c_n est relié à c_0.

d/ *Normalisation.–* En utilisant la normalisation $\langle\alpha|\alpha\rangle = 1$, déduire l'expression de c_0. Que devient l'état cohérent pour $\alpha = 0$?

e/ *Facultatif :* Remarquons que $|\,\varphi_n\,\rangle$ peut être obtenu en appliquant plusieurs fois $\hat{a}^\dagger$ sur le vide $|\,\varphi_0\,\rangle$. Donner explicitement cette relation. Déduire que l'état cohérent peut être obtenu en appliquant un opérateur sur le vide :

$$|\,\alpha\,\rangle = \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2}\,\mathrm{e}^{\alpha\,\hat{a}^\dagger}\,|\,\varphi_0\,\rangle \,. \tag{8}$$

3/ Évolution temporelle.– À l'instant $t = 0$, le système se trouve dans l'état $|\,\psi(0)\,\rangle = |\,\alpha\,\rangle$.

a/ Donner l'expression de l'état à un instant quelconque $|\,\psi(t)\,\rangle$. En particulier on montrera qu'il est possible de tenir compte de l'évolution de l'état à travers une simple dépendance temporelle du paramètre complexe $\alpha \to \alpha(t)$, à une phase près.

b/ Représenter l'évolution de $\alpha(t)$ dans le plan complexe pour une condition initiale $\alpha(0) = a \in \mathbb{R}$.

c/ Rappeler le sens physique des parties réelle et imaginaire ? Illustrer la dispersion de x et p sur la figure (cf. question **2.e**). Justifier la dénomination d'états "quasi-classiques".

D. Fonction d'onde dans l'espace à trois dimensions, fonction d'onde de plusieurs particules

1/ Propriétés importantes :

- Soient $\varphi_k(x)$, $\chi_l(x)$, $\psi_m(x)$ des bases de l'espace des fonctions d'onde d'une particule dans l'espace à une dimension (sur un axe).
  Alors $\varphi_k(x)\chi_l(y)\psi_m(z)$ est une base de l'espace des fonctions d'onde d'une particule dans l'espace à trois dimensions repéré par les trois axes orthogonaux Ox, Oy, Oz.
- Tout opérateur qui ne dépend que de l'une des coordonnées commute avec tous les opérateurs qui ne dépendent que des deux autres.

  Remarque : on peut évidemment prendre la même base sur les trois axes.
- On a exactement la même propriété quand on passe d'une à plusieurs particules : si $f_i(\vec{r})$, $g_j(\vec{r})$ sont des bases de l'espace des fonctions d'onde d'une particule (par exemple dans l'espace à trois dimensions), $f_i(\vec{r_1})g_j(\vec{r_2})$ est une base de l'espace des fonctions d'onde à deux particules.
- Tout opérateur qui ne dépend que de l'une des particules commute avec tous les opérateurs qui ne dépendent que de l'autre.

  Remarque : la généralisation à n particules est immédiate.

2/ Application au puits infini à trois dimensions (particule dans une boîte)

On considère une particule piégée dans une boîte de côtés de longueurs a, b et c (potentiel nul à l'intérieur de la boîte et infini à l'extérieur).

a/ Rappeler les énergies propres et les fonctions d'onde propres associées dans le cas du puits infini à une dimension.

b/ En déduire les énergies et les fonctions d'onde propres associées dans le cas de la boîte à trois dimensions.

c/ Les énergies sont elles dégénérées ? Discuter les cas $a = b \neq c$ puis $a = b = c$. Interpréter.

3/ Application à l'oscillateur harmonique à trois dimensions

On considère une particule dans un potentiel d'oscillateur harmonique totalement anisotrope :

$$V(\vec{r}) = \frac{1}{2}m(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2) \ .$$

les trois pulsations ω_x, ω_y, ω_z, étant différentes deux à deux.
Indiquer les énergies et les fonctions d'onde propres associées. Quelle est la dégérescence des énergies ?
Même question pour l'oscillateur harmonique isotrope : $\omega_x = \omega_y = \omega_z$.

4/ Application à un système de deux particules

On place deux particules de même masse μ dans le même potentiel d'oscillateur harmonique isotrope de pulsation ω. Les deux particules sont sans interaction entre elles.

a/ Ecrire le hamiltonien du système.

b/ Indiquer les énergies avec leur degré de dégénérescence et les fonctions d'onde propres associées.

c/ On ajoute une interaction entre les deux particules de la forme :

$$V_{12} = \frac{1}{2}\mu\lambda\omega^2|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|^2 \ .$$

Ecrire le hamiltonien du système.

d/ On fait le changement de variable : $\vec{r}_\pm = (\vec{r}_1 \pm \vec{r}_2)/\sqrt{2}$.
Calculer les moments conjugués $\vec{p}_\pm$ et exprimer le hamiltonien en fonction de ces nouvelles variables.

e/ Indiquer les énergies avec leur degré de dégénérescence et les fonctions d'onde propres associées.

T.D. n^{o}8 : Moments cinétiques – spin

A. Harmoniques sphériques

Soit un système sans spin, placé dans l'état $|\psi\rangle$, soit $\vec{L}$ le moment cinétique orbital. On suppose que :

$$\langle\vec{r}|\psi\rangle = [A + C(x + 2y + 3z)]\, e^{-(x^2+y^2+z^2)/a_0^2} \ ,$$

où C est une constante de normalisation, donnée par $C^2 = \frac{2}{7}(\frac{2}{\pi})^{3/2}\frac{1}{a_0^5}$ lorsque $A = 0$, et a_0 une longueur de référence.

1. Exprimer $\psi(\vec{r})$ en coordonnées sphériques (r, θ, ϕ).
2. On donne :
$$Y_1^0(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta \ , \qquad Y_1^{\pm 1}(\theta,\phi) = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{\pm i\phi} \ .$$
Écrire $\psi(\vec{r})$ sous la forme : $\sum_\ell f_\ell(r)\sum_m C_{\ell,m}Y_\ell^m(\theta,\phi)$, en calculant les coefficients $C_{\ell,m}$.
3. Que vaut la projection de $|\psi\rangle$ sur le sous-espace propre associé à la valeur propre ℓ et m des opérateurs $\vec{L}^2$ et L_z ? (on donnera sa fonction d'onde).
4. On mesure $\vec{L}^2$ et L_z. Calculer les résultats possibles et leur probabilité, ainsi que l'état du système après la mesure.

B. Expérience de Stern et Gerlach

Soit un atome d'argent de masse m et de spin $s = 1/2$. On va le faire passer dans trois machines successives, de type Stern et Gerlach. On ne s'intéresse qu'à sa partie de spin. On suppose que l'atome d'argent est initialement dans l'état $s_z = 1/2$ et se propage librement le long d'un axe $y'y$. Les trois machines sont disposées sur cet axe aux positions 0, d_1 et d_2.

1. La première machine mesure la composante de spin selon l'axe $z'z$ et ne laisse passer que les atomes de spin $s_z > 0$. Quelle est la probabilité que l'atome d'argent soit arrêté ?
2. Calculer l'état de la particule juste avant de franchir la seconde machine. Celle-ci mesure la composante de spin selon $x'x$ et ne laisse passer que les atomes d'argent de spin $s_x > 0$. Quelle est la probabilité que l'atome soit arrêté ?
3. Calculer l'état de l'atome juste avant de franchir la troisième machine. Celle-ci est identique à la première. Quelle est la probabilité que l'atome soit arrêté ? Conclusions ?

C. Précession d'un spin dans un champ magnétique uniforme et constant

On considère une particule **non** chargée de spin 1/2 soumise à un champ magnétique uniforme et constant. On note $\vec{S}$ l'opérateur de spin. Dans un premier temps on s'intéresse uniquement à l'évolution des variables de spin. La partie orbitale de l'état quantique sera discutée dans la dernière partie.

1ère partie.–

1. Soit le vecteur unitaire $\vec{u}$ pointant dans la direction spécifiée par les angles (θ, φ) des coordonnées sphériques. Calculer la matrice $S_{\vec{u}}$ représentant la composante du spin selon l'axe de vecteur unitaire $\vec{u}$.

2. Calculer $S_{\vec{u}}^2$.
3. Calculer les valeurs propres et les vecteurs propres de $S_{\vec{u}}$, notés $|\,\vec{u},+\,\rangle$ et $|\,\vec{u},-\,\rangle$, dans la base des vecteurs propres de S_z. Ces derniers seront notés plus simplement : $|+\rangle \equiv |\,\vec{u}_z,+\,\rangle$ et $|-\rangle \equiv |\,\vec{u}_z,-\,\rangle$.
4. Calculer les valeurs moyennes des trois composantes du spin et montrer que

$$\langle\vec{S}\rangle_{|\,\vec{u},+\,\rangle} = \frac{\hbar}{2}\vec{u}\ . \tag{1}$$

5. *Questions facultatives :* **Fluctuations.–**

   a/ Calculer $\left\langle S_x^2\right\rangle_{|\,\psi\,\rangle}$, $\left\langle S_y^2\right\rangle_{|\,\psi\,\rangle}$ et $\left\langle S_z^2\right\rangle_{|\,\psi\,\rangle}$ pour un état $|\,\psi\,\rangle$ arbitraire.

   b/ Déduire, par un argument simple $\left\langle S_u^2\right\rangle_{|\,\psi\,\rangle}$.

   c/ Soit $\vec{v}$ un autre vecteur unitaire. On note $\Delta S_{v|\,\vec{u},+\,\rangle} = \sqrt{\langle S_v^2\rangle_{|\,\vec{u},+\,\rangle} - \langle S_v\rangle^2_{|\,\vec{u},+\,\rangle}}$. Calculer $\Delta S_{v|\,\vec{u},+\,\rangle}$ en fonction du produit scalaire $\vec{u}\cdot\vec{v}$. Quand les fluctuations de la composante S_v sont-elles maximales ?

2ème partie : évolution temporelle.–

1. L'énergie d'un moment magnétique $\vec{\mathcal{M}}$ placé dans un champ magnétique $\vec{B}$ est

$$H_{\text{magn}} = -\vec{\mathcal{M}}\cdot\vec{B}$$

   Le moment magnétique est proportionnel au spin : $\vec{\mathcal{M}} = \gamma\vec{S}$ où γ est appelé le *facteur gyromagnétique*.
   Dans l'exercice on considère : $\vec{B} = B\vec{u}_z$. Écrire le hamiltonien (on introduira la pulsation de Larmor $\omega = \gamma B$). À quelle transformation (géométrique) correspond l'opérateur d'évolution temporelle $\mathcal{U}(t) = \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\vec{\mathcal{M}}\cdot\vec{B}\,t}$?
2. On note $|\,\chi(t)\,\rangle$ le vecteur représentant l'état de spin de la particule à l'instant t. Écrire l'équation différentielle satisfaite par $|\,\chi(t)\,\rangle$. On choisit $|\,\chi(0)\,\rangle = |\,\vec{u},+\,\rangle$. Calculer $|\,\chi(t)\,\rangle$ dans la base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ des états propres de S_z.
3. En utilisant les résultats de la 1ère partie, montrer que $|\,\chi(t)\,\rangle \propto |\,\vec{u}(t),+\,\rangle$ où $\vec{u}(t)$ est un vecteur unitaire qui évolue au cours du temps et dont on précisera la direction.
4. Quel est le mouvement de $\langle\vec{S}\rangle_{\chi(t)}$? Préciser la période T de rotation.
5. Comparez $|\,\chi(t)\,\rangle$, $|\,\chi(t+T)\,\rangle$ et $|\,\chi(t+2T)\,\rangle$. Commentaire ?

3ème partie : mouvement orbital.–

1. On s'intéresse à la partie de la fonction (notée $|\,\phi(t)\,\rangle$) décrivant l'état des variables d'espace. Initialement $|\,\phi(0)\,\rangle$ est état propre de l'impulsion avec la valeur propre $\vec{p}_0$. Le vecteur d'état (de spin et orbital) est donc initialement

$$|\,\Psi(0)\,\rangle = |\,\phi(0)\,\rangle \otimes |\,\chi(0)\,\rangle = |\,\vec{p}_0\,\rangle \otimes |\,\vec{u},+\,\rangle\ .$$

   Écrire le hamiltonien total. Montrer qu'à tout instant l'état de la particule reste sous la forme d'un produit tensoriel $|\,\Psi(t)\,\rangle = |\,\phi(t)\,\rangle \otimes |\,\chi(t)\,\rangle$ d'un état des coordonnées spatiales (noté $|\,\phi(t)\,\rangle$) par un état de spin $|\,\chi(t)\,\rangle$. Exprimer $|\,\Psi(t)\,\rangle$.

Rappel : Dans la base des états propres de S_z, les composantes de l'opérateur de spin sont représentées par les matrices :

$$S_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\ , \qquad S_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}\ , \qquad \text{et} \qquad S_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\ .$$

T.D. n^{o}9 : Particules identiques (ou indiscernables)

I. Règles

Lorsqu'un système est constitué de particules identiques, son état doit posséder la propriété suivante lorsque l'on permute les particules :

- si les particules sont des bosons (spins entiers), être invariant (on dit que cet état est *symétrique*)
- si les particules sont des fermions (spins demi-entiers), être multiplié par la parité de la permutation (on dit que cet état est *antisymétrique*)

Pour construire ces états :

1. on commence par les calculer comme s'il s'agissait de particules discernables repérées par des numéros.
2. on applique aux états déterminés au 1) l'opérateur de symétrisation S s'il s'agit de bosons, A s'il s'agit de fermions ;

$$S = \frac{1}{N!} \sum_{\alpha} P_{\alpha} \ , \qquad A = \frac{1}{N!} \sum_{\alpha} \epsilon_{\alpha} P_{\alpha} \ .$$

   La somme a lieu sur les $N!$ permutations P_{α} possibles, ϵ_{α} étant la parité de la permutation.

3. on norme l'état ainsi obtenu.

Les observables doivent être, quant à elles, symétriques, donc invariantes par rapport à toute permutation des particules, qu'il s'agisse de bosons ou de fermions.

La règle d'antisymétrisation pour les fermions entraîne le principe de Pauli : deux fermions identiques ne peuvent se trouver dans le même état.

II. Exercices

A) Un système de deux particules discernables est dans l'état $|1:\phi\rangle|2:\chi\rangle$, les états $|\phi\rangle$ et $|\chi\rangle$ étant orthogonaux ou égaux.

1. Construire l'état correspondant s'il s'agit de bosons ou de fermions identiques. Retrouver le principe de Pauli.
2. Même question avec trois particules dans les trois états $|\phi\rangle$, $|\chi\rangle$, $|\psi\rangle$.

B) On considère un système de deux particules qui sont dans le même état spatial $|k\rangle$ et qui ont même spin s. Quels sont les états possibles :

1. si elles sont discernables ?
2. si ce sont des bosons identiques de spin 0 ou 1 ?
3. si ce sont des fermions identiques de spin 1/2 ?

C) *Spectre du problème à trois corps.*– Soit h_0 le hamiltonien d'une particule. On suppose que h_0 n'agit que sur les états orbitaux, et possède trois niveaux équidistants, respectivement d'énergie 0, ε_0 et $2\varepsilon_0$. Ces trois niveaux sont non dégénérés dans l'espace $\mathcal{E}_r$ des états orbitaux (dans l'espace des états total, la dégénérescence de chacun de ces niveaux est égale à $2s+1$, s étant le spin de la particule).

1/ Bosons.– On considère un système de trois bosons identiques et indépendants de spin nul. L'hamiltonien s'écrit

$$H = h_0^{(1)} + h_0^{(2)} + h_0^{(3)} \ , \tag{1}$$

Donner les états propres et les valeurs propres de H.

2/ Fermions.– On considère un système de trois électrons indépendants. Le hamiltonien du système a la même forme que précédemment.

a) Donner les valeurs propres et vecteurs propres de H. Analyser les dégénérescences. Pour chaque état, on précisera la projection du spin total sur la direction $\vec{u}_z$.

b) *Effet Zeeman.*– Le système est soumis à un champ magnétique uniforme $\vec{B} = B\vec{u}_z$. Le hamiltonien est maintenant

$$H_\mathrm{Z} = H - \gamma B S_z \tag{2}$$

où $\vec{S}$ est le spin total du système et γ le facteur gyromagnétique. Tracer l'allure du spectre en fonction de B.

D) Soit $\{|k\rangle\}$ une base d'états à une particule :

1. Comment peut-on construire une base d'états à N particules discernables ?
2. Comment peut-on construire une base d'états à N particules identiques ?

T.D. n^{o}10 : Atome d'hydrogène

I. Potentiel Central : Généralités

On considère une particule soumise à un potentiel central, c'est-à-dire tel que :

$$V(\vec{r}) \equiv V(x,y,z) = V(||\vec{r}||) \equiv V(r) \quad . \tag{1}$$

Cette symétrie implique que l'équation de Schrödinger

$$H\psi(\vec{r}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + V(r)\right]\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \tag{2}$$

qui fait intervenir de manière symétrique les trois coordonnées x, y et z, est elle-même invariante par rotation. Cette invariance par rotation peut être explicitée en passant des coordonnées cartésiennes aux coordonnées sphériques r, θ et φ et en utilisant la décomposition de l'opérateur $\vec{\nabla}^2$ ci-dessous

$$\vec{\nabla}^2 = \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r - \frac{1}{r^2}\frac{\vec{L}^2}{\hbar^2} \ , \tag{3}$$

où

$$\vec{L} = \vec{r} \wedge \vec{P} = -i\hbar\, \vec{r} \wedge \vec{\nabla} \tag{4}$$

est l'opérateur vectoriel associé au moment cinétique dont les trois composantes L_x, L_y et L_z ne font intervenir que les coordonnées angulaires θ et φ.

L'opérateur $\vec{L}^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$ admet pour valeurs propres $\hbar^2 l(l+1)$, où l est un entier quelconque positif ou nul. Les opérateurs $\vec{L}^2$ et L_z - ou, tout aussi bien, $\vec{L}^2$ et L_x (ou L_y) - commutent. On peut donc définir des fonctions $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ telles que

$$\vec{L}^2 Y_{lm} = \hbar^2 l(l+1)\, Y_{lm} \tag{5}$$

$$L_z Y_{lm} = \hbar m\, Y_{lm} \tag{6}$$

$$\int Y_{lm}^* Y_{l'm'} \mathrm{d}\Omega = \delta_{l,l'}\delta_{m,m'} \tag{7}$$

et on peut montrer que m prend les $2l+1$ valeurs : $-l \leqslant m \leqslant l$ où l est un entier positif ou nul. La méthode de séparation des variables s'applique, c'est-à-dire que l'on peut chercher les solutions de l'équation de Schrödinger (2) sous la forme

$$\psi(\vec{r}) = R(r)\,\phi(\theta,\varphi) \ . \tag{8}$$

II. L'atome d'hydrogène.

On considère une paire proton-électron dans un état lié. La masse du proton est, dans un premier temps, considérée comme infinie. L'équation de Schrödinger du système est alors donnée par (2), avec

$$V(r) = -\frac{e^2}{r} \quad \text{et} \quad e^2 = \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0} \ . \tag{9}$$

1/ On pose $\psi(\vec{r}) = R(r)\phi(\theta,\varphi)$ selon les notations du I, et on choisit $\phi(\theta,\varphi) \sim Y_{lm}(\theta,\varphi)$. Montrer que la fonction intermédiaire $\chi(r) \equiv rR(r)$ obéit à une équation de Schrödinger à une dimension

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\chi}{\mathrm{d}r^2} + V_{\text{eff}}(r)\chi(r) = E\chi(r) \ , \tag{10}$$

où le potentiel effectif $V_{\text{eff}}(r)$ est la somme de $V(r)$ et d'une composante *centrifuge* :

$$V_{\text{eff}}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2} \ . \tag{11}$$

2/ *Comportement pour $r \to 0$.*
On se propose de démontrer que, dans la limite $r \to 0$, on a $\chi(r) \sim r^{l+1}$. Soit donc $\chi(r) \simeq \alpha r^{\lambda}$ un équivalent de $\chi(r)$ au voisinage de l'origine,

a/ En considérant la condition de normalisation de l'état lié $\psi(\vec{r})$, montrer que $\lambda > -1/2$.

b/ Déduire de l'expression approchée de l'équation de Schrödinger que vérifie χ au voisinage de l'origine que $\lambda = l+1$, si $l \neq 0$. Le cas $l = 0$ est traité ci-dessous.

c/ Appliquer le théorème de Gauss ($\int_V \mathrm{d}v\, \vec{\nabla}\cdot\vec{A} = \int_S \mathrm{d}\vec{s}\cdot\vec{A}$) au champ $\vec{A} = \vec{\nabla} r^{-\gamma}$ et au volume V défini par une sphère de rayon R. En considérant la limite $R \to 0$, obtenir la relation

$$\vec{\nabla}^2 \frac{1}{r} = -4\pi\delta(\vec{r}) \tag{12}$$

puis, en l'injectant dans l'équation (1), montrer que $\lambda = l+1$ est l'unique solution, même pour $l = 0$.

d/ En conclure que la donnée de l'énergie E, de l et de m définit entièrement une solution de l'équation de Schrödinger. En d'autres termes $H, \vec{L}^2, L_z$ forment un ensemble complet d'observables qui commuttent (E.C.O.C.).

3/ Montrer que le comportement asymptotique de $\chi(r)$ est

$$\chi(r) \sim \mathrm{e}^{-kr} \quad (r \to \infty) \quad \text{avec} \quad k = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} \ . \tag{13}$$

4/ On définit la fonction $y(r)$ par $\chi(r) = y(r) r^{l+1} e^{-kr}$. On cherche $y(r)$ sous la forme d'un développement en série entière :

$$y(r) = \sum_{i=0}^{\infty} \alpha_i r^i \quad \text{avec} \quad \alpha_0 \neq 0 \ . \tag{14}$$

Montrer que les coefficients α_i obeissent à la formule de récurrence

$$\alpha_i = \frac{2[(i+l)kr_0 - 1]}{i(i+2l+1)}\ \frac{1}{r_0}\ \alpha_{i-1} \tag{15}$$

5/ On raisonne par l'absurde en supposant qu'il n'existe aucune valeur de i telle que $\alpha_i = 0$.

a/ Montrer que cela implique le comportement asymptotique $y(r) \sim e^{+2kr}$ $(r \to \infty)$.

b/ En conclure que les énergies des états liés sont données par la série discrète

$$E_n = -E_I \frac{1}{n^2} \quad \text{avec} \quad E_I = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r_0^2} = \frac{me^4}{2\hbar^2} = 13.6\ eV \quad \text{où} \quad n \geq l+1 \ . \tag{16}$$

6/ Approximation harmonique.–

a/ Donner une représentation graphique approchée du potentiel effectif V_{eff} pour $l \neq 0$. On définit le *rayon de Bohr* par $r_0 = \hbar^2/me^2 = 0.529$ Å et r_* le rayon où V_{eff} atteint son minimum. Exprimer r_* en fonction de l et de r_0.

b/ Effectuer un développement limité au deuxième ordre de V_{eff} au voisinage de r_* et en déduire une expression approchée pour les niveaux d'énergie. Discuter la validité de l'approximation harmonique.

7/ Discussion.

a/ Comparer le résultat exact de la question 5 avec le résultat approché de la question 6.

b/ Quel est le degré de dégénérescence du niveau d'énergie E_n ?

c/ Une partie de cette dégénérescence est dite *accidentelle* ... pourquoi ?

d/ Un photon d'énergie $\hbar\omega$ entre en interaction avec un atome d'hydrogène dans son niveau fondamental. Quelle condition doit être satisfaite pour que le photon soit capable d'ioniser l'atome ?

8/ (*facultatif*) On définit les polynômes de *Laguerre* par

$$L_p(x) = e^x \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^p [x^p e^{-x}] = \sum_{k=0}^{p} (-1)^k \frac{(p!)^2}{(k!)^2 (p-k)!} \, x^k \tag{17}$$

et les polynômes de Laguerre *généralisés*, par

$$L_p^q = (-1)^q \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^q L_{p+q} = ((p+q)!)^2 \sum_{k=0}^{p} (-1)^k \frac{1}{k!(p-k)!(q+k)!} \, x^k \ . \tag{18}$$

Déduire de (15) l'expression

$$y(r) \propto L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{nr_0}\right) \ . \tag{19}$$

9/ (*facultatif*) On souhaite prendre en compte la masse finie du proton ($m_p \simeq 1826 \ m_e$). On note $\vec{r}_p$ et $\vec{r}_e$ les coordonnées du proton et celles de l'électron.

a/ Ecrire l'équation de Schrödinger complète du système.

b/ On définit les variables

$$\begin{aligned} \vec{R} &= \frac{m_p \vec{r}_p + m_e \vec{r}_e}{m_p + m_e} \quad \text{coordonnées du centre de masse} \ . \\ \vec{r} &= \vec{r}_e - \vec{r}_p \quad \text{position de l'électron relativement à celle du proton} \ . \end{aligned}$$

En utilisant l'expression - avec des notations évidentes -

$$(\partial_p)_i \equiv \frac{\partial}{\partial(\vec{r}_p)_i} = \frac{\partial(\vec{R})_i}{\partial(\vec{r}_p)_i} \frac{\partial}{\partial(\vec{R})_i} + \frac{\partial(\vec{r})_i}{\partial(\vec{r}_p)_i} \frac{\partial}{\partial(\vec{r})_i} \tag{20}$$

ainsi que l'expression analogue de $(\partial_e)_i$, montrer que la méthode de séparation des variables s'applique encore à la résolution de l'équation de Schrödinger complète. Donner l'expression des niveaux d'énergie, corrigée de l'effet de la masse finie du proton.

Annexe : Premières fonctions radiales

La partie radiale des états propres est de la forme : $R_{nl}(r) = r^l\, y_{nl}(r)\, \mathrm{e}^{-kr}$.
Si l'on pose

$$\rho \stackrel{\text{def}}{=} \frac{2\,r}{n\,r_0} \tag{21}$$

alors :

$$\begin{aligned}
R_{10}(r) &= 2\,r_0^{-3/2}\mathrm{e}^{-\rho/2} \\
R_{20}(r) &= \frac{1}{2\sqrt{2}}\,r_0^{-3/2}\,(2-\rho)\,\mathrm{e}^{-\rho/2} \\
R_{21}(r) &= \frac{1}{2\sqrt{6}}\,r_0^{-3/2}\,\rho\,\mathrm{e}^{-\rho/2} \\
R_{30}(r) &= \frac{1}{9\sqrt{3}}\,r_0^{-3/2}\,(6-6\rho+\rho^2)\,\mathrm{e}^{-\rho/2} \\
R_{31}(r) &= \frac{1}{9\sqrt{6}}\,r_0^{-3/2}\,\rho(4-\rho)\,\mathrm{e}^{-\rho/2} \\
R_{32}(r) &= \frac{1}{9\sqrt{30}}\,r_0^{-3/2}\,\rho^2\,\mathrm{e}^{-\rho/2}
\end{aligned}$$

T.D. n^{o}11 : Composition des moments cinétiques

A. Composition de deux spins 1/2 – Structure hyperfine du niveau 1s$_{1/2}$ de l'atome H

Dans son état fondamental, l'électron de l'atome d'Hydrogène se trouve dans un état de spin total 1/2. Le spin de l'électron se couple au spin nucléaire par un terme dit de "couplage hyperfin" $H_{\rm hf} = \mathcal{A}\,\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$, où $\vec{S}_1$ et $\vec{S}_2$ sont les spins de l'électron et du proton. L'étude du spectre du hamiltonien hyperfin peut se faire très simplement à l'aide des propriétés générales de la composition des moments cinétiques.

Composition de deux spins 1/2

Dans un premier temps nous allons retrouver les propriétés générales de la composition de deux moments cinétiques à travers le cas particulier des deux spins 1/2.

Soit donc deux particules, chacune de spin 1/2, par exemple l'électron et le proton. On note :

- $\vec{S}_1$, l'opérateur de spin de la particule (1)
- $\vec{S}_2$, l'opérateur de spin de la particule (2)
- $\vec{S}$, l'opérateur de spin total associé aux deux particules (1) et (2) : $\vec{S} \equiv \vec{S}_1 + \vec{S}_2$.

Pour simplifier la discussion, on suppose que les deux opérateurs $\{\vec{S}_1^2, S_{1z}\}$ forment un E.C.O.C. de l'espace de Hilbert $\mathcal{H}_1$ associé à la particule (1), et que, de même, les deux opérateurs $\{\vec{S}_2^2, S_{2z}\}$ forment un E.C.O.C. de l'espace de Hilbert $\mathcal{H}_2$ associé à la particule (2). Suivant en cela la notation standard, on note $|\, s_1, s_{1z}\,\rangle$ les états de base de $\mathcal{H}_1$ et $|\, s_2, s_{2z}\,\rangle$ les états de base de $\mathcal{H}_2$.

1. Expliciter la liste des vecteurs de base de $\mathcal{H}_1$.
2. Quelle est la dimension de l'espace produit $\mathcal{H}_{12} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$?
3. Donner la base "naturelle" de $\mathcal{H}_{12}$. On notera plus simplement $|\, s_{1z}, s_{2z}\,\rangle \equiv |\, s_1, s_{1z}\,\rangle \otimes |\, s_2, s_{2z}\,\rangle$ ($|\, + +\rangle$, $|\, + -\rangle$,...) les vecteurs de cette base.
4. Montrer que l'opérateur $\vec{S}$ est bien un opérateur moment cinétique.
5. Calculer le commutateur $[\vec{S}^2, S_z]$.
6. Calculer les commutateurs $[\vec{S}^2, \vec{S}_1^2]$, $[S_z, S_{1z}]$, $[\vec{S}^2, S_{1z}]$ et $[\vec{S}_1^2, S_z]$. En déduire les observables qui forment une E.C.O.C.
7. Exprimer $\vec{S}^2$ en fonction de $\vec{S}_1^2$, $\vec{S}_2^2$, S_{1z}, S_{2z} et des opérateurs $(S_{1,2})_\pm$. En déduire la matrice représentant l'opérateur $\vec{S}^2$ dans la base $|\, s_{1z}, s_{2z}\,\rangle$. Vérifier que les valeurs propres de $\vec{S}^2$ sont bien celles attendues.
8. On notera $|\, s, m\,\rangle$ les vecteurs d'une nouvelle base de $\mathcal{H}_{12}$ qui sont vecteurs propres de $\vec{S}^2$ et de S_z. Quelles sont les valeurs propres correspondantes ?
9. Ecrire la décomposition formelle des vecteurs $|\, s, m\,\rangle$ dans la base $|\, s_{1z}, s_{2z}\,\rangle$ en termes des produits scalaires $\langle s_{1z}, s_{2z}|\, s, m\,\rangle$.
10. En utilisant la définition de $S_z = S_{1z} + S_{2z}$, préciser les produits scalaires qui sont nécessairement nuls.

On se propose maintenant de retrouver les états $|\, s,m\,\rangle$ par la méthode plus générale présentée dans le cours, *i.e.* en calculant les coefficients de Clebsh-Gordan $\langle s_{1z}, s_{2z}|\, s,m\,\rangle$.

11. Soit $|\,1,1\,\rangle$ l'un des vecteurs propres de $\vec{S}^2$ et de S_z. Expliciter sa décomposition (triviale) dans la base $|\,s_{1z}, s_{2z}\,\rangle$ (On fera le choix de phase le plus simple).
12. En déduire l'expression du vecteur $|\,1,0\,\rangle$, puis celle de $|\,1,-1\,\rangle$.
13. L'opérateur $\vec{S}^2$ étant auto-adjoint, en déduire la valeur de $\langle 0,0|\,1,m\,\rangle$ puis l'expression de $|\,0,0\,\rangle$ dans la base $|\,s_{1z}, s_{2z}\,\rangle$.
14. Montrer que l'état 'singulet' ($s = 0$) est 'antisymétrique', dans le sens où il change de signe sous l'action de l'opérateur d'"échange" P_{12} qui opère l'échange des deux particules. Formellement P_{12}, appliqué à une expression faisant intervenir les deux particules (1) et (2), effectue l'échange des nombres quantiques attachés aux deux particules. A l'inverse, montrer que les états du 'triplet' ($s = 1$) sont 'symétriques'.

Spectre hyperfin du niveau $\mathbf{1s_{1/2}}$: Raie à 21cm.

Revenons à la question introduite dans le premier paragraphe.

1/ Le couplage hyperfin $H_{\mathrm{hf}} = \mathcal{A}\,\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$ induit une levée de dégénérescence du niveau $1\mathrm{s}_{1/2}$. Étudier l'allure du spectre hyperfin de ce niveau.

2/ Sachant que la transition correspond à une longueur d'onde $\lambda = 21$cm, déduire la valeur de $\mathcal{A}\hbar^2$ en eV.

Cette transition joue un rôle très important en astrophysique : bien que peu probable, la transition ne requiert qu'une énergie extrêmenent faible. Elle permet en effet d'observer les gaz d'hydrogène très froids du milieu interstellaire.

B. Interaction radiale entre deux particules.

On considère deux particules (1) et (2) — sans spin — placées dans un potentiel $V(r)$ à symétrie sphérique. Les particules étant supposées sans interaction (pour commencer) le hamiltonien qui décrit le système s'écrit :

$$H_0 = \frac{\vec{P}_1^2}{2m_1} + V(r_1) + \frac{\vec{P}_2^2}{2m_2} + V(r_2) \quad ,$$

où $r_{1,2} = \sqrt{\vec{r}^{\,2}_{1,2}}$ sont les distances à l'origine des deux particules (1) et (2).

1. Rappeler la définition de l'opérateur moment cinétique orbital $\vec{L}$.
2. Vérifier que $\vec{L}$ satisfait bien à la définition générale d'un moment cinétique.
3. Pour une des deux particules, calculer $[L_i, r_j]$.
4. Montrer que
$$[H_0, \vec{L}_1] = [H_0, \vec{L}_2] = 0 \quad .$$

On prend en compte maintenant l'interaction mutuelle des deux particules. On suppose qu'elle ne dépend que de la distance qui les sépare et qu'elle peut être décrite par un potentiel d'interaction noté U. Le hamiltonien total prend alors la forme

$$H_{\mathrm{tot}} = \frac{\vec{P}_1^2}{2m_1} + V(r_1) + \frac{\vec{P}_2^2}{2m_2} + V(r_2) \quad + U(|\,\vec{r}_1 - \vec{r}_2\,|) \quad .$$

5. Montrer que $[H_{\text{tot}}, \vec{L}_1] \neq 0$.
6. Calculer $[H_{\text{tot}}, \vec{L}_1 + \vec{L}_2]$ et commenter.

C. Couplage spin-orbite.

On considère une particule — avec spin (s)— placée dans un potentiel $V(r)$ à symétrie sphérique. Le hamiltonien qui décrit le système s'écrit :

$$H_{\text{tot}} = \frac{\vec{P}^2}{2m} + V(r) + w(r)\vec{L}\cdot\vec{S} \quad ,$$

où le terme $w(r)\vec{L}\cdot\vec{S}$ est appelé "terme d'interaction spin-orbite".

1. Montrer que $[H_{\text{tot}}, \vec{L}] \neq 0$.
2. Montrer que $[H_{\text{tot}}, \vec{S}] \neq 0$.
3. Calculer $[H_{\text{tot}}, \vec{L} + \vec{S}]$ et commenter.

   Pour permettre un calcul simple, on se place dans le cas où la fonction $w(r)$ est une constante ($w(r) = w$). Pour $w = 0$, on suppose connu le spectre des valeurs propres.

4. Justifier le fait que les états propres du hamiltonien peuvent être pris sous la forme $|n, l, m\rangle \otimes |s, s_z\rangle$, où n est un nombre quantique dont la donnée, combinée à celle de l, permet de définir les niveaux d'énergie $E_{nl}(w = 0)$.
5. Calculer le spectre des valeurs propres $E_{nlsj}(w)$ de H_{tot} quand le terme spin-orbite est présent.

T.D. n^{o}12 : Perturbation indépendante du temps

A. Perturbation d'un oscillateur harmonique à une dimension.

On considère un oscillateur harmonique à une dimension, c'est-à-dire un système décrit par le hamiltonien :

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \ .$$

Rappel : Les valeurs propres de H_0 sont non dégénérées et de la forme

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega \quad , \quad \text{avec } n \geq 0$$

On note $\mid n >$ l'état propre associé à la valeur propre E_n. On définit les opérateurs d'annihilation et de création a et $a^\dagger$ par

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,x + \mathrm{i}\frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\,p \quad , \quad a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,x - \mathrm{i}\frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\,p$$

Inversement, on a $x = x_0(a + a^\dagger)$ et $p = -ip_0(a - a^\dagger)$ où on a posé $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$ et $p_0 = \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}$. Les opérateurs a et $a^\dagger$ vérifient

$$a \mid n >= \sqrt{n} \mid n-1 > \quad , \quad a^\dagger \mid n >= \sqrt{n+1} \mid n+1 >$$

1/ Calculer les éléments de matrice $< n \mid x \mid m >$ et $< n \mid x^2 \mid m >$.

2/ On applique une perturbation de la forme $W = \alpha x$. Calculer, pour toutes valeurs de n :

a/ la variation des états au premier ordre,

b/ la variation des énergies au premier et au second ordre,

c/ la valeur exacte des niveaux d'énergie, à comparer à l'approximation ci-dessus.

d/ l'expression exacte des états propres de $H = H_0 + W$, à comparer à l'approximation ci-dessus.

3/ Reprendre les questions a/, b/ et c/ ci-dessus, mais pour une perturbation de la forme $W = \mu x^2$.

B. Perturbation d'un oscillateur harmonique isotrope à trois dimensions.

On considère un oscillateur harmonique isotrope à trois dimensions, c'est-à-dire un système décrit par le hamiltonien :

$$H_0 = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\vec{r}^{\,2} \ .$$

On introduit une perturbation de la forme $W = \frac{1}{2}m\lambda z^2$. Calculer :

1/ le déplacement en énergie, au premier ordre, pour le niveau fondamental et pour le premier niveau excité,

2/ les valeurs exactes des niveaux d'énergie, à comparer aux approximations ci-dessus.

C. Levée de dégénérescence

On considère un système décrit par le hamiltonien H_0 possédant deux valeurs propres E_1 et E_2 dégénérées. Le système est soumis à une perturbation extérieure W. Dans une base appropriée les deux opérateurs prennent la forme :

$$H_0 = \begin{pmatrix} E_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & E_2 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad W = \begin{pmatrix} 0 & \Delta & E_0 & 0 & E_0 \\ \Delta & 0 & 0 & E_0 & 0 \\ E_0 & 0 & 0 & 0 & \Delta \\ 0 & E_0 & 0 & \Delta & 0 \\ E_0 & 0 & \Delta & 0 & 0 \end{pmatrix} . \qquad (1)$$

À l'aide de la théorie des perturbations, étudier les valeurs propres et les vecteurs propres du hamiltonien $H = H_0 + W$.

D. Effet Stark sur l'atome d'hydrogène.

On considère un atome d'hydrogène au repos placé dans un champ électrique $\vec{E}$ constant, orienté suivant $\vec{z}$ ($\| \vec{E} \| = \mathcal{E}$). On se propose de calculer les déplacements des deux premiers niveaux d'énergie induits par cette perturbation du système.
Rappel : En l'absence de $\vec{E}$, les niveaux d'énergie sont donnés par

$$E_n = -E_I \frac{1}{n^2} \quad , \quad \textit{avec} \quad n \geq 1 \quad \textit{et} \quad E_I \simeq 13.6\ eV \ .$$

Les états propres sont de la forme

$$< \vec{r} \mid nlm >= R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \phi) \quad , \quad \textit{avec} \quad l \leq n-1$$

où les coordonnées r, θ, ϕ sont les coordonnées relatives électron-proton : $\vec{r} = \vec{r}_e - \vec{r}_p$.

1/ Calculs préliminaires :

a/ Donner l'expression de la perturbation $W = f(x, y, z, \mathcal{E}, q)$ où q est la charge électrique du proton.
b/ En utilisant la loi de transformation des états propres sous l'action de l'opérateur parité P

$$P \mid nlm >= (-1)^l \mid nlm >$$

et en remarquant que $PWP^{-1} = -W$, établir la règle (dite de sélection)

$$< nlm \mid W \mid n'l'm' >= 0 \quad , \quad \text{pour} \quad l + l' \quad \text{pair} \ .$$

c/ Déduire du commutateur $[L_z, z]$ la deuxième règle de sélection

$$< nlm \mid W \mid n'l'm' >= 0 \quad , \quad \text{pour} \quad m \neq m' \ .$$

d/ Exprimer W en fonction de r et de $Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta$.
e/ A partir de l'expression $Y_l^m \propto P_l^m(\cos\theta) \mathrm{e}^{im\phi}$ retrouver la deuxième règle de sélection.

2) Traitement de l'état fondamental

a/ Calculer la correction au premier ordre du niveau d'énergie.

b/ En utilisant le résultat 1.d, $Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$ et les relations d'orthogonalité des fonctions Y_l^m, établir

$$< nlm \mid W \mid 100 >= 0 \quad , \qquad \text{pour} \qquad l \neq 1$$

c/ Calculer la correction au deuxième ordre du niveau d'énergie. On utilisera la notation

$$u_n = \int_0^\infty R_{n1}(r)\ R_{10}(r)\ r^3 \mathrm{d}r\ .$$

d/ En partant de l'expression du terme correctif au deuxième ordre

$$-\Delta^2 E_1 = \sum_{n>1,lm} \frac{|< nlm \mid W \mid 100 >|^2}{E_I} \frac{n^2}{n^2-1}$$

et en utilisant la relation de fermeture $\sum_{nlm} \mid nlm >< nlm \mid = 1$ ainsi que le résultat 2.b, établir

$$\delta < -\Delta^2 E_1 < \frac{4}{3}\delta$$

avec

$$\delta = \frac{1}{3E_I}(q\mathcal{E})^2 < 100 \mid r^2 \mid 100 > \ .$$

e/ Calculer l'élément de matrice $< 100 \mid r^2 \mid 100 >$ en utilisant :

$$\begin{aligned} R_{10}(r) &= 2r_0^{-\frac{3}{2}} \mathrm{e}^{-\frac{r}{r_0}} \\ k! &= \int_0^\infty t^k \mathrm{e}^{-t} \mathrm{d}t \end{aligned}$$

où $r_0 \simeq 0.5$ Å est le rayon de Bohr.

f/ Donner l'expression au premier ordre de l'état fondamental perturbé.
g/ On définit le moment électrique dipolaire du système par $\vec{d} = -q\vec{r}$. Calculer le moment dipolaire moyen induit par le champ électrique au premier ordre.

3) Traitement du niveau $n = 2$.

a/ Quel est le degré de dégénérescence de ce niveau.
b/ Calculer l'intégrale

$$\int_0^\infty r^3\ R_{20}(r)\ R_{21}(r)\ \mathrm{d}r$$

en utilisant les expressions :

$$\begin{aligned} R_{20}(r) &= \frac{1}{2\sqrt{2}} r_0^{-\frac{3}{2}} \left(2 - \frac{r}{r_0}\right) \mathrm{e}^{-\frac{r}{2r_0}}\ , \\ R_{21}(r) &= \frac{1}{2\sqrt{6}} r_0^{-\frac{3}{2}} \left(\frac{r}{r_0}\right) \mathrm{e}^{-\frac{r}{2r_0}}\ . \end{aligned}$$

c/ En déduire les éléments de matrice $< 2lm \mid W \mid 2l'm' >$.
d/ Calculer les déplacements d'énergie au premier ordre.
e/ Donner l'expression, à l'ordre zéro, des états perturbés.

T.D. n^{o}13 : Perturbation dépendante du temps

A. Rappels : Calcul des probabilités de transition

On considère un système dont le hamiltonien s'écrit :

$$H = H_0 + W(t) \quad ,$$

où H_0 est un hamiltonien indépendant du temps, dont on connait le spectre des valeurs propres ainsi que les états propres associés, et $W(t)$ est une perturbation, fonction du temps.

Au plus bas ordre, la probabilité que la perturbation $W(t)$ permette, au temps t, une transition d'un état initial $\mid \phi_i\rangle \equiv\mid \Psi(0)\rangle$, état propre de H_0 (de valeur propre E_i), vers un état final $\mid \phi_n\rangle$ (différent de $\mid \phi_i\rangle$) lui aussi état propre de H_0 (de valeur propre E_n) s'écrit :

$$\mathcal{P}_{\phi_i \to \phi_n} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t \mathrm{e}^{i\omega_{ni}t'} \langle \phi_n \mid W(t') \mid \phi_i\rangle \; dt' \right|^2 \quad ,$$

où on a posé $\hbar\omega_{ni} \stackrel{\text{def}}{=} (E_n - E_i)$.

Si l'état $\mid \phi_n\rangle$ est un élément du continuum de l'espace de Hilbert, la probabilité ci-dessus, qui doit alors être comprise comme une *densité* de probabilité, prend la forme d'une distribution.

Règle d'or de Fermi :

Pour une perturbation de la forme

$$W(t) = W_0 \; \mathrm{e}^{-i\omega_0 t} \quad ,$$

la densité de probabilité de transition par unité de temps d'un état du spectre discret vers un état du continuum, est :

$$\frac{d\mathcal{P}_{\phi_i}}{dt} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\beta_j} |\langle k(E_f), \beta_j \mid W_0 \mid \phi_i\rangle|^2 \;\; \rho(E_f) \quad ,$$

avec $E_f = E_i + \hbar\omega_0$, et où les kets $\mid k(E_f), \beta_j\rangle$ décrivent les états du continu, et $\rho(E) \equiv |\partial k/\partial E|$ est la densité d'états finals.

B. Exemple de transition entre états d'un spectre discret

On considère une particule chargée, de masse M et de charge q, dont on peut assimiler le hamiltonien à un oscillateur harmonique, de pulsation ω, à une dimension (notée x) ; le spectre d'énergie est discret et non dégénéré.

A $t < 0$ la particule est dans l'état fondamental $\mid 0\rangle$. A l'instant t, elle est soumise à un champ électrique $\vec{\mathcal{E}} = \mathcal{E}\vec{u}_x$, homogène et de durée τ.

Donner l'expression du terme de perturbation $W(t)$ correspondant.

1/ Calcul au premier ordre

Calculer la probabilité $\mathcal{P}_{0\to n}$ d'observer la particule dans un état $|n\rangle$, à l'issu de la période d'excitation, au plus bas ordre en $\mathcal{E}$.

2/ Calcul exact

Montrer que l'expression exacte de cette probabilité est donnée par

$$\mathcal{P}_{0\to n} = \left| \sum_k \langle\, n \,|\Phi_k\rangle\langle\Phi_k|\,0\,\rangle \mathrm{e}^{-i\tilde{E}_k t/\hbar} \right|^2 \quad ,$$

où l'on a posé

$$\tilde{E}_n \equiv (n + \frac{1}{2})\hbar\omega - \frac{q^2\mathcal{E}^2}{2M\omega} \quad ,$$

et où les états $|\,\Phi_n\,\rangle$ sont définis par leur fonction d'onde

$$\langle x|\,\Phi_n\,\rangle \equiv \langle x - \frac{q\mathcal{E}}{M\omega^2}\mid n\rangle \quad .$$

3/ Comparaison

Retrouver le résultat au premier ordre à partir de la formule ci-dessus.

C. Exemple de transition d'un état du spectre discret vers un état du spectre continu

On se limite encore à un modèle à une dimension, dans lequel la même particule que précédemment est piégée dans un potentiel (caricatural) à un état lié.

1/ Etude du potentiel de Dirac

Montrer que le potentiel de Dirac

$$V(x) = -a\delta(x) \quad , \qquad \text{avec } a > 0$$

possède un seul état lié, dont on précisera l'énergie, e_0, et la fonction d'onde associée, $\varphi_0(x)$.

2/ Densité d'états

On considère un continuum d'états de la forme :

$$\begin{aligned} \langle x \mid \phi_k^+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}(\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} - r\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}) \quad , \text{ pour} \quad x < 0 \quad , && (1) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\, t\,\mathrm{e}^{ikx} \quad , \text{ pour} \quad x > 0 \quad . && (2) \end{aligned}$$

a/ À quel processus correspond une transition de l'état $|\,\varphi_0\rangle$ vers un état $|\,\phi_k^+\rangle$?

b/ Quels autres états $|\,\phi_k^-\rangle$ doit-on prendre pour compléter la base de l'espace de Hilbert.

c/ Calculer les deux coefficients r et t de façon à ce que ces états soient bien des états physiques.

d/ Vérifier que les états $|\,\phi_k^\pm\rangle$ sont normalisés au sens large, par rapport à k.

e/ Calculer la densité d'états $\rho(E)$.

3/ Application

La particule, initialement dans l'état φ_0, est soumise à l'action du champ électrique de l'exercice précédent, maintenant oscillant à la pulsation Ω :

$$\vec{\mathcal{E}(t)} = \mathcal{E}\vec{u}_x \cos(\Omega t) \quad .$$

a/ À quelle condition portant sur Ω pourra-t-on observer une transition vers un état du continuum ?

b/ Calculer l'élément de matrice de transition $\langle \phi_k^+ \mid x \mid \varphi_0 \rangle$.

c/ Calculer la probabilité "d'ionisation" par unité de temps.