



Equipe de préparation
des concours
et des examens

موقع طريق المعرفة

Mécanique Quantique II
Année :2014-2015

Série d'exercices en mécanique quantique II

Semestre1

Année :2014-2015

Faculté des Sciences Semlalia



مع تحيات فريق إعداد الامتحانات و المباريات

موقع طريق المعرفة

www.rapideway.org

اي ملاحظات او مشاركات ترسل على :

rapideway@gmail.com

info@rapideway.org

Exercices relatifs au chapitre 1

I. Equation aux valeurs propres. E.C.O.C.

Tome 1

A/ Soit H un opérateur hermitique représenté, dans la base $\{| \phi_1 \rangle, | \phi_2 \rangle\}$, par une matrice d'ordre 2.

1) Montrer que H peut s'écrire sous la forme :

$$H = a_0 \mathbb{1} + \frac{H_{11} - H_{22}}{2} K$$

Exprimer a_0 et la matrice (K) représentant K en fonction des éléments H_{ij} .

2) Soient θ et φ deux angles définis à partir des éléments H_{ij} par :

$$\tan \theta = \frac{2|H_{21}|}{H_{11} - H_{22}} \quad \text{et} \quad H_{21} = |H_{21}| e^{i\varphi} \quad (0 < \theta < \pi, 0 < \varphi < 2\pi).$$

Exprimer (K) en fonction de θ et φ .

3) Déterminer les valeurs propres de K (à exprimer en fonction des H_{ij}) et en déduire celles de H .

4) Déterminer les vecteurs propres de H . Commenter.

B/ On considère un système physique dont l'espace des états ξ est de dimension 3 et soit $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$ une base orthonormée de ξ . Les kets de cette base sont des vecteurs propres de deux opérateurs A et B (indépendants du temps) :

$$A |1\rangle = a |1\rangle$$

$$A |2\rangle = a |2\rangle$$

$$A |3\rangle = 0$$

$$B |1\rangle = b |1\rangle$$

$$B |2\rangle = -b |2\rangle$$

$$B |3\rangle = -b |3\rangle$$

où a et b sont des constantes réelles non nulles.

L'opérateur hamiltonien H du système (aussi indépendant du temps) et tel que :

$$H |1\rangle = E |1\rangle + E\sqrt{3} |2\rangle; \quad H |2\rangle = E\sqrt{3} |1\rangle - E |2\rangle; \quad H |3\rangle = E |3\rangle$$

1) A et B sont-ils des observables ?

2) Les ensembles $\{A\}$, $\{B\}$, $\{A, B\}$ sont-ils des E.C.O.C. dans ξ ?

3) Ecrire la matrice représentant H dans la base $\{|i\rangle\}$, $i=1,2,3$. Déterminer les valeurs propres et les vecteurs propres de H .

4) Vérifier que H commute avec A et donner une base formée de vecteurs propres communs à H et A . Les ensembles $\{H\}$ et $\{A, H\}$ forment-ils des E.C.O.C. dans ξ .

II. Système conservatif à deux niveaux

On considère un système physique dont l'espace des états, à deux dimensions, est rapporté à la base orthonormée $\{| \phi_1 \rangle, | \phi_2 \rangle\}$ et soit H l'hamiltonien du système, somme de deux observables H_0 et V : $H = H_0 + V$, tels que :

$$H_0 | \phi_n \rangle = E_0 | \phi_n \rangle \quad (n = 1, 2)$$

$$V | \phi_1 \rangle = A | \phi_2 \rangle \quad \text{et} \quad V | \phi_2 \rangle = A | \phi_1 \rangle \quad (A \text{ est une constante réelle}).$$

1) Déterminer les valeurs propres (énergies E_n) et les kets propres $| \Phi_n \rangle$ de H .

2) L'évolution de l'état du système est décrite par le ket :

$$| \Psi_t \rangle = K_1(t) | \phi_1 \rangle + K_2(t) | \phi_2 \rangle$$

Déterminer $K_1(t)$ et $K_2(t)$ sachant qu'à l'instant $t = 0$, l'état du système est décrit par le ket $| \phi_1 \rangle$. Vérifier que le ket $| \Psi_t \rangle$ est normé à l'unité.

3) Montrer que $\langle H \rangle$ n'évolue pas dans le temps.

4) Quelle est la probabilité $\mathcal{P}$ de trouver le système à l'instant t dans l'état $| \phi_2 \rangle$? Comment varie $\mathcal{P}$ au cours du temps. Que vaut $\mathcal{P}$ quand V est nulle et que peut-on conclure ?

III. Evolution dans le temps d'une grandeur physique

Série

On considère un système physique dont l'espace des états est rapporté à la base orthonormée $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle\}$ et soit H le hamiltonien du système définie par :

$H = \omega A$ avec ω une constante réelle positive et A une observable définie par :

$$A |u_1\rangle = a |u_1\rangle \quad \text{et} \quad A |u_2\rangle = -a |u_2\rangle \quad \text{avec } a = \hbar/2$$

A l'instant $t=0$, l'état du système est décrit par le ket :

$$|\Psi_{t=0}\rangle = \cos\frac{\theta}{2} |u_1\rangle + \sin\frac{\theta}{2} |u_2\rangle \quad (0 \leq \theta \leq \pi)$$

- 1) Déterminer le ket $|\Psi_t\rangle$ décrivant l'état du système à l'instant t ultérieur.
- 2) Calculer la valeur moyenne $\langle A \rangle$ dans l'état $|\Psi_{t=0}\rangle$ et dans l'état $|\Psi_t\rangle$ de la grandeur A représentée par A . Que peut-on conclure ?
- 3) On s'intéresse maintenant à une grandeur B représentée par l'observable B telle que :

$$B |u_1\rangle = i a |u_2\rangle \quad \text{et} \quad B |u_2\rangle = -i a |u_1\rangle$$

a) Quelles valeurs peut-on trouver et avec quelles probabilités lorsqu'on mesure la grandeur B à l'instant $t=0$? et à l'instant t ?

b) La grandeur B est-elle une constante du mouvement ?

4) Le ket $|\Psi_t\rangle$ peut s'écrire $|\Psi_t\rangle = R(\omega t) |\Psi_{t=0}\rangle$ où $R(\omega t)$ est l'opérateur par lequel le vecteur d'état est transformé entre les instants 0 et t .

a) Déterminer la matrice représentant $R(\omega t)$. Vérifier que $R(\omega t)$ est unitaire.

b) Exprimer $R(\omega t)$ sous forme d'une combinaison linéaire de l'opérateur identité I et de l'hamiltonien H du système.

c) Sachant que $R(\omega t)$ commute avec A et non avec B , retrouver l'évolution dans le temps des grandeurs A et B .

IV. Particule dans un champ électrique

On considère un problème à trois dimensions où le système est une particule de masse m et de charge q plongée dans un champ électrique statique uniforme $\vec{E}$ parallèle à l'axe Oz d'un repère cartésien $Oxyz$. Le hamiltonien H du système s'écrit :

$$H = \frac{p^2}{2m} - qEz$$

- 1) Calculer les commutateurs : $[R_\mu, H]$; $[P_\mu, H]$ avec $\mu = x, y, z$.
- 2) En utilisant un résultat du cours que l'on précisera, calculer : $\frac{d}{dt}\langle \vec{r} \rangle$ et $\frac{d}{dt}\langle \vec{p} \rangle$ puis donner la loi de variation de $\langle \vec{r} \rangle$ dans le temps.

3) On désigne par $|\Phi\rangle$ un vecteur propre de H associé à la valeur propre E supposée simple.

a) Montrer que $|\Phi\rangle$ est aussi vecteur propre de P_x associé à une valeur propre que l'on notera α . Même question pour P_y avec β comme valeur propre.

b) Ecrire en représentation position l'équation aux valeurs propres de P_x et celle de P_y et montrer que l'on a : $\langle \vec{r} | \Phi \rangle = e^{i\alpha x/\hbar} e^{i\beta y/\hbar} \varphi(z)$

c) En utilisant la même représentation pour l'équation aux valeurs propres de H , montrer que l'équation différentielle vérifiée par $\varphi(z)$ se met sous la forme :

$$\frac{d^2 \varphi(z)}{dz^2} + k \varphi(z) = -\frac{2z^2}{\hbar^2} \varphi(z) \quad \text{avec} \quad k = 2mqE/\hbar^2 \quad \text{et} \quad \alpha^2 + \beta^2 + \lambda^2 = 2mE$$

V. Oscillateur harmonique à une dimension (Utilisation de la méthode polynomiale)

On considère un oscillateur harmonique à une dimension constitué par une particule de masse m soumise au potentiel $V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$. L'hamiltonien H du système est :

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \quad \text{avec} \quad H|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle$$

1) Ecrire en représentation $\{|x\rangle\}$ l'équation aux valeurs propres de l'hamiltonien H de l'oscillateur.

2) On se propose de déterminer les énergies E_n et les fonctions d'onde $\varphi_n(x)$ du système.

a) En introduisant la variable sans dimension $q = \sqrt{\alpha} x$ avec $\alpha = m\omega/\hbar$, montrer que l'équation précédente s'écrit :

$$\frac{d^2}{dq^2} \phi(q) + (\varepsilon - q^2) \phi(q) = 0 \quad (*) \quad \varepsilon \text{ étant un paramètre à déterminer}$$

b) Vérifier que $e^{-q^2/2}$ est solution de (*) pour $\varepsilon = 1$. Cette solution est-elle acceptable physiquement? Donner l'énergie E_0 associée.

c) Pour ε quelconque, on pose $\phi(q) = e^{-q^2/2} h(q)$, donner l'équation différentielle vérifiée par $h(q)$.

d) Pour résoudre cette équation, on peut chercher $h(q)$ sous forme d'une série entière, soit :

$$h(q) = \sum_{p=0}^{\infty} c_p q^p$$

i) Etablir une relation de récurrence entre les coefficients c_p .

ii) Montrer qu'avec une telle série la solution obtenue est physiquement inacceptable. La série doit être finie et donc se réduire à un polynôme de degré n fini. En déduire alors les valeurs permises de l'énergie.

iii) On définit le polynôme d'Hermite $H_n(z)$ de degré n par :

$$H_n(z) = (-1)^n e^{z^2} \frac{d^n}{dz^n} e^{-z^2} \text{ et il satisfait à l'équation différentielle : } \left(-\frac{d^2}{dz^2} - 2z \frac{d}{dz} + 2n \right) H_n(z) = 0$$

Ecrire les fonctions d'onde du système en fonction des polynômes d'Hermite puis expliciter les deux premières fonctions normées. On donne :

$$\int x^{2m} e^{-\alpha x^2} dx = \frac{(2m)!}{2^{2m} \alpha^m m!} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$$

3) La fonction génératrice $K(\lambda, x)$ des fonctions $\varphi_n(x)$ est définie par :

$$K(\lambda, x) = \sum_n \frac{1}{\sqrt{n!}} \lambda^n \langle x | \varphi_n \rangle \text{ avec } |\varphi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^+)^n |\varphi_0\rangle \text{ alors que celle des polynômes d'Hermite}$$

$$\text{est : } P(s, z) = \exp[s(2z-s)] = \sum_n H_n(z) \frac{s^n}{n!}$$

a) Montrer que $K(\lambda, x)$ peut s'écrire : $K(\lambda, x) = \exp\left(-\frac{\lambda^2}{2} + \lambda x \sqrt{2\alpha}\right) \varphi_0(x)$.

b) Trouver l'expression de $\varphi_n(x)$ en fonction du polynôme d'Hermite.

VI. Evolution dans le temps de la position d'un oscillateur harmonique

MP2

On se propose ici de trouver le comportement oscillant de la position par le traitement quantique. Considérons alors un oscillateur harmonique (à une dimension) de masse m et de pulsation ω . À l'instant $t=0$, l'état normé à l'unité de cet oscillateur (état le plus général) est donné par :

$$|\Psi_{t=0}\rangle = \sum_n c_n(t=0) |\phi_n\rangle$$

où les états $|\phi_n\rangle$ sont les états propres de l'opérateur hamiltonien H du système.

1) Exprimer $|\Psi_t\rangle$, état du système à un instant t ultérieur. $|\Psi_t\rangle$ et $|\Psi_{t=0}\rangle$ sont-ils physiquement indiscernables ? Justifier votre réponse.

2) Quelles sont les valeurs possibles d'une mesure de l'énergie du système, et quelles sont les probabilités correspondantes à l'instant $t = 0$? et à un instant t ultérieur ? En déduire la probabilité (totale) $\mathcal{P}$ pour qu'une mesure de l'énergie donne un résultat supérieur à $2\hbar\omega$.

3) On suppose à partir de maintenant que $\mathcal{P}$ est nulle.

a) Comment s'écrit alors $|\Psi_{t=0}\rangle$?

b) Calculer la valeur moyenne $\langle H \rangle_{t=0}$ de l'énergie.

c) En supposant en plus que $\langle H \rangle_{t=0} = \hbar\omega$, calculer les composantes de $|\Psi_{t=0}\rangle$ à un facteur de phase près.

4) Pour fixer les facteurs de phase, on choisit c_0 réel et positif, on pose $c_1 = |c_1|e^{i\theta}$ et on impose $\langle x \rangle_{t=0}$, valeur moyenne de la position x à $t=0$, égale à : $\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$. Déterminer alors θ .

5) $|\Psi_{t=0}\rangle$ étant ainsi déterminé, écrire $|\Psi_t\rangle$ puis en déduire la valeur moyenne $\langle x \rangle_t$ de la position à l'instant t . Réexprimer $\langle x \rangle_t$ en fonction de $\langle x \rangle_{t=0}$ et conclure.

VII. Oscillateur harmonique à une dimension soumis à un champ électrique

On considère un oscillateur harmonique à une dimension constitué par une particule de masse m soumise au potentiel $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$. L'hamiltonien H_0 du système est :

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad \text{avec} \quad H_0|\phi_n\rangle = E_n|\phi_n\rangle$$

1) Calculer la position et l'impulsion moyenne de la particule dans un état propre quelconque $|\phi_n\rangle$ de H_0 .

2) La particule porte une charge q et plongée dans un champ électrique uniforme $\mathcal{E}$, parallèle à Ox . Elle est soumise, en plus de l'énergie $V(x)$, au potentiel $W(x) = -q\mathcal{E}x$.

a) Donner l'Hamiltonien H du système.

b) Écrire l'équation aux valeurs propres de H dans la représentation $\{|x\rangle\}$ et montrer que cette équation peut se mettre sous la forme :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{du^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 u^2 \right] \phi'_n(u) = E'_n \phi'_n(u)$$

On donnera la relation entre u et x et, entre E'_n et E_n .

3) On considère maintenant qu'en plus du champ électrique $\mathcal{E}$, la particule est soumise à un champ magnétique qui dérive d'un potentiel vecteur $\vec{A}$ et tel que : $\mathcal{A}_x = \mathcal{A}_z = 0$ et $\mathcal{A}_y = \mathcal{B} \cdot x$. Dans ces conditions, l'hamiltonien total H_T du système s'écrit :

$$H_T = \frac{1}{2m} (\vec{p} - q\vec{A})^2 - q\mathcal{E}x \quad \text{avec} \quad \vec{A} \text{ l'observable représentant } \vec{A}.$$

- a) Réécrire l'hamiltonien H en fonction des opérateurs X, P_α ($\alpha=x,y,z$) et des champs $\mathcal{E}$ et $\mathcal{B}$.
- b) Parmi les opérateurs présents dans H_T sous forme de carré, lequel possède un commutateur avec K proportionnel à l'imaginaire i où K est défini par :
- $$K = q \mathcal{B} X - P_y - (m \mathcal{E} / \mathcal{B}) \hbar$$
- c) Montrer, en introduisant le carré de K , que H_T se décompose en deux termes H_1 et H_2 qui commutent et dont l'un peut se mettre sous la forme $\frac{1}{2}(Q^2 + P^2)$ avec $[Q, P] = i\hbar$.
- d) En déduire les valeurs propres de H_T .

VIII. Oscillateurs harmoniques couplés

Deux oscillateurs harmoniques linéaires de même pulsation ω et de même masse m sont couplés par une interaction de la forme kX_1X_2 où X_1 et X_2 sont les observables représentant les positions x_1 et x_2 des deux corps. On désigne par P_{x_1} et P_{x_2} les observables impulsions associées.

- 1) Ecrire l'hamiltonien H du système formé par les deux oscillateurs.
- 2) Soit E la valeur propre de H associée au vecteur propre $|q\rangle$. Pour résoudre l'équation aux valeurs de H , on peut utiliser les opérateurs U, V représentant les coordonnées normales (u, v) et les opérateurs impulsions associés P_u, P_v . Ces opérateurs sont définies par :

$$X_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(U + V) ; X_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(U - V) ; P_{x_1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(P_u + P_v) \text{ et } P_{x_2} = \frac{1}{\sqrt{2}}(P_u - P_v)$$

a) Montrer que la nouvelle équation est celle de deux oscillateurs linéaires indépendants de même masse m et de pulsations différentes ω_1 et ω_2 que l'on précisera.

b) En déduire les énergies E du système.

c) Ecrire le ket propre de H qui décrit l'état du système total et préciser l'expression de la fonction d'onde de l'état fondamental.

d) L'observable H forme t-elle E.C.O.C. dans l'espace des états du système total ? Justifier votre réponse.

Rappel : L'état d'un oscillateur harmonique linéaire est décrit par le ket :

$$|\varphi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\frac{a}{\hbar} \right)^n |\varphi_0\rangle \text{ avec } a^+ \text{ l'opérateur de création et } |\varphi_0\rangle, \text{ ket décrivant l'état fondamental, est associé à la}$$

fonction d'onde : $\varphi_0(x) = \left(\frac{\alpha}{\pi} \right)^{1/4} \exp\left(-\frac{\alpha x^2}{2}\right)$ avec $\alpha = \frac{m\omega}{\hbar}$; m étant la masse de l'oscillateur et ω sa pulsation.

IX. Oscillateur harmonique à 2 dimensions

A/ On considère un oscillateur harmonique à deux dimensions de masse m et de pulsation ω se déplaçant dans le plan xOy . On sait que l'hamiltonien H du système est la somme de deux hamiltoniens H_x et H_y associés aux mouvements suivant les axes Ox et Oy .

- 1) En utilisant les opérateurs création a_q^+ et annihilation a_q avec $q = x, y$, l'hamiltonien H_q

$$\text{s'écrit : } H_q = \hbar\omega \left(a_q^+ a_q + \frac{1}{2} \right) \text{ tel que : } [a_q, a_q^+] = 1$$

- a) Ecrire H en fonction des opérateurs création et annihilation et montrer que le ket $|\varphi_{n_x, n_y}\rangle \otimes |\varphi_{n_y, n_x}\rangle$, que l'on note $|n_x, n_y\rangle$, décrit un état propre de H avec la valeur propre E_{n_x, n_y} que l'on précisera.

On rappelle que $|\varphi_{n_q}\rangle$ est ket propre de l'opérateur $a_q^+ a_q$ associé à la valeur propre n_q telle que n_q est un entier ≥ 0 ; ($q=x, y$).

- b) Donner les énergies des trois premiers niveaux et leur dégénérescence.
 c) Dans l'espace $\xi = \xi_x \otimes \xi_y$, les ensembles $\{H\}$, $\{\tilde{H}_q\}$ et $\{H, \tilde{H}_q\}$ forment-ils des E.C.O.C.? Justifier vos réponses. $\tilde{H}_q$ désigne l'opérateur prolongement de H_q .
 d) Ecrire les relations d'orthonormalisation et de fermeture dans ξ .
 2) On considère maintenant les opérateurs X et Y définis à partir des opérateurs a_q^+ et a_q par :

$$X = \beta (a_x^+ + a_x) \text{ et } Y = \beta (a_y^+ + a_y) \quad (\beta \text{ est une constante réelle})$$

- a) Quelle est l'action de l'opérateur $\tilde{X}^2$ sur le ket $|n_x, n_y\rangle$ décrivant l'état du système ; en déduire la valeur moyenne de $\tilde{X}^2$ dans cet état.
 b) Mêmes questions pour l'observable $\tilde{X}\tilde{Y}$.

On rappelle : $a_q |n_q\rangle = \sqrt{n_q} |n_q-1\rangle$ et $a_q^+ |n_q\rangle = \sqrt{n_q+1} |n_q+1\rangle$ ($q=x,y$)

B/ Un oscillateur harmonique plan est constitué d'une particule de masse m et d'énergie potentielle $V(X,Y) = \frac{1}{2} m \omega^2 (X^2 + Y^2)$.

- 1) Ecrire l'hamiltonien H_{xy} du système.
 2) Sachant que les niveaux d'énergie et les états correspondant de l'hamiltonien à une dimension sont : $E_{n_j} = \hbar \omega (n_j + 1/2)$ et $|n_j\rangle$ avec $j = x, y$
 a) Donner les niveaux d'énergie et les états correspondants à H_{xy} .
 b) Donner la dégénérescence des niveaux d'énergie de H_{xy} .
 3) $\{H_{xy}\}$, $\{H_{xy}, \tilde{H}_x\}$ et $\{\tilde{H}_x, \tilde{H}_y\}$ forment-ils des E.C.O.C. dans l'espace des états du système ; justifier votre réponse.
 4) On introduit les opérateurs d'annihilation d'un quantum relatif à Ox et Oy définis par :

$$a_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\beta X + \frac{i p_x}{\beta \hbar} \right) \text{ et } a_y = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\beta Y + \frac{i p_y}{\beta \hbar} \right) \text{ avec } \beta = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

Avec $[a_x, a_x^+] = [a_y, a_y^+] = 1$ $a_j |n_j\rangle = \sqrt{n_j} |n_j-1\rangle$ $a_j^+ |n_j\rangle = \sqrt{n_j+1} |n_j+1\rangle$ avec $j = x, y$.

- a) Donner l'action des opérateurs $N_x = a_x^+ a_x$ et $N_y = a_y^+ a_y$ sur les états propres de H_{xy} .
 b) En déduire l'expression de H_{xy} en fonction de N_x et N_y .
 5) L'opérateur $L_z = X p_y - Y p_x$, montrer que l'on a : $L_z = i\hbar (a_x a_y^+ - a_x^+ a_y)$.
 6) Montrer que $[H_{xy}, L_z] = 0$. Conclure.

C/ E.C.O.C. pour un oscillateur harmonique à deux dimensions

On sait, (résultat du cours) que les énergies d'un oscillateur harmonique à deux dimensions sont dégénérées (sauf le niveau fondamental). On propose d'adjoindre une autre observable à l'hamiltonien H du système de manière à construire un E.C.O.C. dans l'espace des états ξ . Considérons alors une particule de masse M astreinte à rester dans le plan xOy et attirée par le centre O de telle sorte que son énergie potentielle soit de la forme $(M\omega^2 \rho^2)/2$ en un point N situé à la distance ρ du centre O ; ω est la pulsation classique de cet oscillateur harmonique à deux dimensions; N est repéré par ses coordonnées cartésiennes x, y et $ON = \rho$.

- 1) Montrer que l'hamiltonien H de la particule se met sous la forme : $H = H_x + H_y$ où H_x et H_y sont les opérateurs associés aux mouvements suivant les axes perpendiculaires Ox et Oy .

2) On introduit les opérateurs a_x et a_y définis par :

$$a_\mu = \sqrt{\frac{\alpha}{2}} R_\mu + \frac{i}{\hbar \sqrt{2\alpha}} P_\mu \quad \text{avec } \alpha = \frac{M\omega}{\hbar} \text{ et } \mu = x, y \quad (R_\mu = X, Y)$$

et on a alors $[a_\mu, a_\mu^\dagger] = 1$ où $a_\mu^\dagger$ est l'opérateur adjoint de a_μ et 1 l'opérateur identité.

a) Exprimer dans ce cas l'hamiltonien H en fonction des $N_\mu = a_\mu^\dagger a_\mu$; ($\mu = x, y$).

b) On désigne par $|k\rangle_{N_\mu}$ les états propres de l'opérateur N_μ dans l'espace ξ_μ .

Dans l'espace $\xi = \xi_x \otimes \xi_y$, les ensembles $\{|k\rangle_{N_\mu}\}$, $\{H\}$ et $\{H, \tilde{H}_\mu\}$ forment-ils des E.C.O.C.?

Justifier vos réponses.

3) On introduit l'opérateur L_z , composante de l'opérateur moment cinétique orbital L , associé aux rotations autour de l'axe Oz perpendiculaire au plan xOy et défini par : $L_z = XP_y - YP_x$.

a) Calculer L_z en fonction des a_μ et de leurs adjoints $a_\mu^\dagger$.

b) Montrer que H et L_z commutent.

4) Le résultat précédent suggère que l'on peut construire une base de vecteurs propres communs à H et L_z . Pour cela, il est commode d'introduire les opérateurs suivants :

$$D = \frac{1}{\sqrt{2}} (a_x - i a_y) \quad \text{et} \quad G = \frac{1}{\sqrt{2}} (a_x + i a_y)$$

et leurs adjoints. On établit alors que les seuls commutateurs non-nuls sont :

$$[D, D^\dagger] = 1 \quad \text{et} \quad [G, G^\dagger] = 1$$

a) Donner le spectre des valeurs propres des opérateurs $N_D = D^\dagger D$ et de $N_G = G^\dagger G$.

b) Exprimer H et L_z en fonction de N_D et N_G . En déduire que les états propres communs à H et L_z peuvent être décrits par : $|n_D, n_G\rangle (= |n_D\rangle \otimes |n_G\rangle)$ où $N_D |n_D\rangle = n_D |n_D\rangle$ avec $\beta = D, G$.

5) On pose : $m = n_D - n_G$ et $n = n_D + n_G$.

a) Faire un tableau donnant n_D , n_G et m pour $n = 0, 1, 2$ et 3 .

b) En exprimant m en fonction de n et n_G , donner les différentes valeurs que peut prendre la valeur propre de L_z lorsque la valeur propre de H est fixée. H et L_z forment-ils un E.C.O.C.?

X. Oscillateurs harmoniques découplés

Deux particules sans interaction sont assimilées à deux oscillateurs harmoniques linéaires de même masse M et de même pulsation ω ; on désigne par x_i et p_i la position et l'impulsion de la particule i ($i=1,2$).

1) a) Montrer que l'hamiltonien H du système des deux particules peut s'écrire $H = H_1 + H_2$ où H_i est l'hamiltonien de la particule i agissant dans l'espace ξ_i de ses états ; ($i=1,2$).

b) Dans $\xi = \xi_1 \otimes \xi_2$, on désigne par $|\Phi_{n,n}^{(1,2)}\rangle (= |\phi_n^{(1)}\rangle \otimes |\phi_n^{(2)}\rangle)$ les vecteurs propres communs aux prolongements $\tilde{H}_1$ et $\tilde{H}_2$ associés à des valeurs propres que l'on précisera. Déterminer les énergies du système des deux particules, leur degré de dégénérescence et les états correspondants. Faire application des trois premiers niveaux d'énergie.

c) Les ensembles $\{|\tilde{H}_i\rangle\}$ ($i=1,2$); $\{H\}$; $\{|\tilde{H}_1, \tilde{H}_2\rangle\}$ forment-ils des E.C.O.C. dans l'espace ξ ? Justifier vos réponses.

d) Écrire les relations d'orthonormalisation et de fermeture dans l'espace ξ .

2) A l'instant $t = 0$, l'état du système est décrit par :

$$|\Psi_{t=0}\rangle = \frac{1}{2} (|\Phi_{0,0}^{(1,2)}\rangle + |\Phi_{1,0}^{(1,2)}\rangle + |\Phi_{0,1}^{(1,2)}\rangle + |\Phi_{1,1}^{(1,2)}\rangle)$$

Quels résultats peut-on trouver, et avec quelles probabilités si on mesure à cet instant :

- l'énergie totale du système ?
- l'énergie de la particule 1 ?

3) On introduit l'opérateur P_e "échange des deux particules" défini par : $P_e \left| \Phi_{n,m}^{(1,2)} \right\rangle = \left| \Phi_{m,n}^{(1,2)} \right\rangle$.

a) Démontrer que $P_e^{-1} = P_e$ et que P_e est unitaire. Quelles sont les valeurs propres de P_e ?

b) Soit B une observable quelconque, sa transformée B' par P_e est définie par : $B' = P_e B P_e^+$.

Montrer que la condition $B' = B$ est équivalente à $[B, P_e] = 0$ (on dit que B est invariante par échange des deux particules).

c) Les transformées par P_e des observables $\tilde{X}_1$ et $\tilde{P}_1$ associées à la particule 1 donnent respectivement les observables $\tilde{X}_2$ et $\tilde{P}_2$ associées à la particule 2 et vice-versa. Démontrer une de ces transformées. En déduire que $P_e \tilde{H}_1 P_e^+ = \tilde{H}_2$ et que $P_e \tilde{H}_2 P_e^+ = \tilde{H}_1$. Donner une démonstration directe de ces deux dernières transformées ?

d) Vérifier que l'hamiltonien H du système est invariant par échange des deux particules. Construire alors une base de vecteurs propres communs à H et P_e . L'ensemble $\{H, P_e\}$ forme-t-il un E.C.O.C. dans l'espace ξ des états des deux particules ; justifier votre réponse.

Rappel : Pour l'oscillateur harmonique linéaire, on a :

$$X = \alpha (a^+ + a) \text{ et } P_x = i\beta (a^+ - a) \quad (\alpha \text{ et } \beta \text{ sont des constantes réelles})$$

$$a |\varphi_n\rangle = \sqrt{n} |\varphi_{n-1}\rangle \quad \text{et} \quad a^+ |\varphi_n\rangle = \sqrt{n+1} |\varphi_{n+1}\rangle$$

$$H |\varphi_n\rangle = E_n |\varphi_n\rangle \quad \text{avec} \quad E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right) \quad \text{avec } n \text{ entier } \geq 0.$$

XI. Particule dans un potentiel à 3 dimensions

On considère une particule de masse m soumise à un potentiel tridimensionnel $V(x, y, z) = V(x) + V(y) + V(z)$ tel que :

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 < x < a \\ \infty & \text{ailleurs} \end{cases}, \quad V(y) = \begin{cases} 0 & 0 < y < a \\ \infty & \text{ailleurs} \end{cases} \quad \text{et} \quad V(z) = \frac{1}{2} m \omega^2 z^2$$

1) Montrer que l'hamiltonien H du système s'écrit sous la forme $H = H_x + H_y + H_z$.

2) a) Ecrire, en représentation $|x\rangle$, l'équation aux valeurs propre de H_x .

b) Déterminer les niveaux d'énergie E_{n_x} de H_x et les fonctions d'ondes $\varphi_{n_x}(x)$ associées.

c) Quelle est la dégénérescence g_{n_x} du niveau E_{n_x} ?

d) Donner, sans démonstration, les valeurs propres E_{n_y} de H_y , les fonctions d'ondes associées $\varphi_{n_y}(y)$ et la dégénérescence g_{n_y} .

3) Donner, sans expliciter les fonctions d'onde $\varphi_{n_z}(z)$, l'expression des niveaux d'énergies E_{n_z} de H_z et leur dégénérescence g_{n_z} .

4) a) Déterminer les niveaux d'énergie de H et écrire les fonctions d'ondes associées.

b) Donner l'expression de E_1 (énergie du niveau fondamental) et celles des deux premiers niveaux d'énergie excités E_1 et E_2 . Faire un diagramme d'énergie, (on suppose que $\omega > \frac{3\pi^2 \hbar}{2ma^2}$).

c) Quelles sont les dégénérescences de E_0 , E_1 et E_2 ?

Exercices relatifs au chapitre 2 - Partie A

I. Observables du moment cinétique

A/ On considère les équations aux valeurs propres des opérateurs moments cinétiques $\vec{J}^2$ et J_z :

$$\vec{J}^2 |\Psi\rangle = \alpha \hbar^2 |\Psi\rangle \quad \text{avec } \alpha \text{ réel } \geq 0$$

$$\text{et } J_z |\Psi\rangle = m \hbar |\Psi\rangle \quad \text{avec } m \text{ réel.}$$

1) Sachant que : $J_+ J_- = \vec{J}^2 - J_z^2 + \hbar J_z$ et que : $J_- J_+ = \vec{J}^2 - J_z^2 - \hbar J_z$

a. Montrer les inégalités suivantes :

$$\alpha - m^2 + m \geq 0 \quad \text{et} \quad \alpha - m^2 - m \geq 0$$

b. En déduire que les valeurs de m sont dans l'intervalle $[-M_{\max}, M_{\max}]$; on précisera la valeur de $M_{\max}$ en fonction de α .

2) Sachant que les valeurs de m forment une suite discrète,

a. montrer que les valeurs de α sont de la forme $j(j+1)$ avec j entier ou demi entier.

b. En déduire alors que les valeurs de m sont comprise entre $-j$ et $+j$.

B/ On considère la base $\{|j, m\rangle\}$ orthonormée des kets propres de $\vec{J}^2$ et J_z .

1) Montrer que pour un opérateur de moment cinétique général $\vec{J}$, on a :

$$\langle j, m | J_x | j, m \rangle = \langle j, m | J_y | j, m \rangle = 0 \quad \text{et} \quad \langle j, m | J_x^2 | j, m \rangle = \langle j, m | J_y^2 | j, m \rangle = \frac{\hbar^2}{2} [j(j+1) - m^2]$$

2) Considérons le cas où le nombre quantique j est égal à 1.

a. Trouver les représentations matricielles des opérateurs $\vec{J}^2$ et J_z, J_+, J_-, J_x et J_y .

b. Trouver les valeurs propres et les kets propres communs à $\vec{J}^2$ et J_z , et vérifier que ces kets forment une base orthonormée.

c. Calculer les commutateurs $[(J_x), (J_y)], [(J_y), (J_z)],$ et $[(J_z), (J_x)],$ où $(J_x), (J_y)$ et (J_z) sont les matrices représentant les opérateurs J_x, J_y et J_z dans la base $\{|j, m\rangle\}$. Conclure.

On rappelle : $J_{\pm} |j, m\rangle = C_{\pm}(j, m) |j, m \pm 1\rangle$ avec $C_{\pm}(j, m) = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)}$ et $J_{\pm} = J_x \pm iJ_y$.

C/ Soit un système physique quelconque dont l'espace des états est à 4 dimensions. Les vecteurs $|j, m\rangle$ communs à J^2 et J_z ($j=0$ ou 1 et $-j \leq m \leq j$) forment une base de cet espace.

1) Ecrire les matrices de J^2, J_z et J_x dans cette base. On rangera les vecteurs de la base dans l'ordre $|1, 1\rangle, |1, 0\rangle, |1, -1\rangle, |0, 0\rangle$.

2) On note par $|j, m\rangle_x$ les kets propres communs à J^2 et J_x . Exprimer $|j, m\rangle_x$ en fonctions des $|j, m\rangle$.

3) Soit $|\Psi\rangle$ un ket normé quelconque : $|\Psi\rangle = \alpha |1, 1\rangle + \beta |1, 0\rangle + \gamma |1, -1\rangle + \delta |0, 0\rangle$.

a. Calculer la valeur moyenne $\langle J_z \rangle$ de J_z lorsque le système est dans l'état $|\Psi\rangle$, ainsi que les probabilités des différents résultats possibles lors de la mesure de cette observable seule.

b. Mêmes questions pour J^2 .

c. Mêmes questions pour J_x .

d. On mesure "simultanément" J^2 et J_x . Quelle est la probabilité P de trouver $2\hbar^2$ pour la mesure de J^2 et $\hbar$ pour la mesure de J_x ?

Données : $J_{\pm} |j, m\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} |j, m \pm 1\rangle$ et $J_x = (J_+ + J_-)/2$

D/ On considère une particule dans un état de moment cinétique $j=1$ et soit $\vec{u}$ un vecteur unitaire réel de composantes u_x, u_y, u_z .

1) On désigne par $\{|\varphi_m\rangle\}$ la base engendrée par les vecteurs propres de J_z : $J_z |\varphi_m\rangle = m\hbar |\varphi_m\rangle$ et soit $|\Psi\rangle$ le vecteur propre normé de l'opérateur $\vec{J} \cdot \vec{u}$ associé à la valeur propre nulle. On posera $u_{\pm} = u_x \pm i u_y$.

- Déterminer, dans la base $\{|\varphi_m\rangle\}$, les composantes de $|\Psi\rangle$.
- Montrer que $|\Psi\rangle$ peut s'écrire sous la forme :

$$|\Psi\rangle = \sum_k u_k |\varphi_k\rangle \text{ avec } k = x, y, z.$$

et où les $|\varphi_k\rangle$ sont des combinaisons linéaires des $|\varphi_m\rangle$. Vérifier que les kets $|\varphi_k\rangle$ sont orthogonaux.

2) On considère maintenant la base $\{|\varphi_k\rangle\}$.

- Donner les matrices représentant les opérateurs J_k .
- Trouver les énergies de la particule sachant qu'elle est soumise à des forces qui se traduisent par un hamiltonien H de la forme :

$$H = \sum_k A_k J_k^2 \quad (\text{les } A_k \text{ sont des constantes réelles}).$$

Données : $J_{\pm} |j, m\rangle = \hbar \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} |j, m \pm 1\rangle$ et $J_+ = J_x + i J_y$

II. Observables moment cinétique orbital

A/ Une particule sans spin de moment cinétique orbital $\vec{L}$ se trouve dans un état $\{|\ell, m\rangle\}$ propre et commun à L^2 et L_z . Cette particule est soumise à un gradient de champ électrique et son hamiltonien s'écrit :

$$H = \frac{\omega_0}{\hbar} (L_u^2 - L_v^2)$$

où L_u et L_v sont les composantes de $\vec{L}$ sur les directions Ou et Ov du plan xOz faisant 45° avec Ox et Oz ; ω_0 est une constante réelle.

- Ecrire H en fonction des composantes L_x et L_z et donner la matrice représentant H dans la base $\{|\ell, m\rangle\}$.
- Déterminer les énergies et les états stationnaires de la particule.
- A l'instant $t=0$, la particule est dans l'état : $|\Psi_{t=0}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\ell, 1\rangle - |\ell, -1\rangle)$
 - Quel est l'état $|\Psi_t\rangle$?
 - L_z est-elle une constante de mouvement ?

B/ Considérons un système de moment cinétique orbital $\vec{L}$ dont l'espace des états est rapporté à la base $\{|\ell, m\rangle\}$ constituée par les vecteurs propres communs à L^2 et L_z . Dans tout le problème, on prendra $\hbar = 1$.

- Calculer, dans l'état $|\ell, m\rangle$, les valeurs moyennes $\langle L_q \rangle$ et $\langle L_q^2 \rangle$ avec $q = x, y, z$;
- En déduire que les écarts quadratiques moyens s'écrivent :

$$\Delta L_x = \Delta L_y = \sqrt{\frac{\ell(\ell+1) - m^2}{2}} \quad \text{et} \quad \Delta L_z = 0$$

3) Parmi les états $|\ell, m\rangle$ du système, quels sont ceux pour lesquels la somme : $\Delta L_x^2 + \Delta L_y^2 + \Delta L_z^2$ est minimale ?

4) Soit $\vec{u}$ un vecteur unitaire repéré, dans le trièdre Oxyz, par son angle polaire θ et son angle azimutal φ ; ($u_x = \sin\theta \cos\varphi$, $u_y = \sin\theta \sin\varphi$ et $u_z = \cos\theta$). On désigne par L_u la projection de $\vec{L}$ sur l'axe de vecteur unitaire $\vec{u}$: $L_u = \vec{L} \cdot \vec{u}$.

- Calculer, dans l'état $|\ell, m\rangle$, les valeurs moyennes $\langle L_u \rangle$, $\langle L_u^2 \rangle$ et en déduire ΔL_u .
- Montrer que pour les états de la question 3), ΔL_u s'écrit :

$$\Delta L_u = \sin\theta \sqrt{\frac{\ell}{2}}$$

5) On considère le cas $\ell = 1$, soit $m = -1, 0, 1$ les différentes valeurs propres de L_u . On note par $\mathcal{P}(m)$ la probabilité de trouver la valeur m lors d'une mesure de L_u .

En utilisant les résultats de la question 4) a- et les définitions suivantes :

$$\langle L_u \rangle = \sum_{m=-1}^{m=1} m \mathcal{P}(m) \quad \text{et} \quad \langle L_u^2 \rangle = \sum_{m=-1}^{m=1} m^2 \mathcal{P}(m)$$

Calculer $\mathcal{P}(1)$, $\mathcal{P}(-1)$ et $\mathcal{P}(0)$ en fonction de m et θ .

Données : $L_x = \frac{1}{2}(L_+ + L_-)$; $L_y = \frac{1}{2i}(L_+ - L_-)$; $L_+ L_- + L_- L_+ = 2(L^2 - L_z^2)$

$L_{\pm} |\ell, m\rangle = C_{\pm}(\ell, m) |\ell, m \pm 1\rangle$ avec $C_{\pm}(\ell, m) = \sqrt{\ell(\ell+1) - m(m \pm 1)}$

Dans l'état $|\ell, m\rangle$, $\langle L_p L_q \rangle = 0$ si $p \neq q$ ($p, q = x, y, z$).

L'écart quadratique moyen d'une observable A est : $\Delta A = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}$

C/ Harmoniques sphériques

Les $Y_{\ell}^m(\theta, \varphi)$, appelées harmoniques sphériques, sont des fonctions propres communes à L^2 et L_z . On rappelle (résultat du cours) que les valeurs propres de L_z ne peuvent valoir que $m\hbar$, avec m entier variant de $-\ell$ à $+\ell$ lorsque la valeur propre de L^2 est $\hbar^2 \ell(\ell+1)$. En outre, on peut montrer que pour $m = -\ell$, on a l'harmonique sphérique :

$$Y_{\ell}^{-\ell}(\theta, \varphi) = \frac{1}{2^{\ell} \ell!} \sqrt{\frac{(2\ell+1)!}{4\pi}} (\sin\theta)^{\ell} e^{-i\ell\varphi}$$

1) Comment calculerait-on $Y_{\ell}^m(\theta, \varphi)$ pour $m \neq -\ell$?

Application : donner les expressions de Y_1^{-1} , Y_1^0 et Y_1^1 .

2) a. Déterminer la relation entre $Y_{\ell}^{-\ell}(\pi-\theta, \pi+\varphi)$ et $Y_{\ell}^{-\ell}(\theta, \varphi)$.

2) b. Montrer que la même relation relie $Y_{\ell}^m(\pi-\theta, \pi+\varphi)$ et $Y_{\ell}^m(\theta, \varphi)$.

3) Montrer la relation : $Y_{\ell}^{-m}(\theta, \varphi) = (-1)^m [Y_{\ell}^m(\theta, \varphi)]^*$

4) Comment s'écrit la relation d'orthonormalisation de deux harmoniques sphériques?

Données : $L_{\pm} Y_{\ell}^m(\theta, \varphi) = \hbar \sqrt{\ell(\ell+1) - m(m \pm 1)} Y_{\ell}^{m \pm 1}(\theta, \varphi)$ et $L_{\pm} = \hbar e^{\pm i\varphi} \left[\pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot\theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right]$.

D/ Soit $U(\varphi) = e^{-i\varphi L_z/\hbar}$ un opérateur unitaire avec φ est un paramètre réel sans dimension et K un opérateur quelconque. On désigne par $\hat{K}$ la transformée de K par l'opérateur unitaire $U(\varphi)$; soit : $\hat{K} = U(\varphi) K U^\dagger(\varphi)$

- 1) Calculer $\hat{L}_+|\ell, m\rangle$, en déduire que L_+ et $\hat{L}_+$ sont proportionnels ; calculer la constante de proportionnalité. Même question pour L_- et $\hat{L}_-$.
- 2) Exprimer $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$ et $\hat{L}_z$ en fonction de L_x , L_y et L_z . Quelle transformation géométrique peut-on associer au passage de $\vec{L}$ à $\hat{\vec{L}}$?
- 3) Calculer les commutateurs $[X \pm iY, L_z]$ et $[Z, L_z]$. En déduire que les kets $(X \pm iY)|\ell, m\rangle$ et $Z|\ell, m\rangle$ sont des vecteurs propres de L_z avec des valeurs propres que l'on précisera. Quel relation doit exister entre m et m' pour que l'élément de matrice $\langle \ell', m' | X \pm iY | \ell, m \rangle$ ne soit pas nul ? Même question pour $\langle \ell', m' | Z | \ell, m \rangle$
- 4) Calculer $\hat{X}$, $\hat{Y}$ et $\hat{Z}$, en fonction de X , Y et Z . Interprétation géométrique.

III. Le moment cinétique de spin

A/ Dans la base orthonormée $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ des vecteurs propres des opérateurs S^2 et S_z , l'état de spin d'une particule est représenté par le vecteur :

$$|\Psi\rangle = \alpha |+\rangle + \beta |-\rangle$$

- 1) Déterminer les valeurs et vecteurs propres de S_x et S_y dans la base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$.
- 2) Quelles sont les probabilités pour que les mesures des grandeurs représentées par S_x et S_y dans l'état $|\Psi\rangle$ donnent les valeurs $+\hbar/2$ et $-\hbar/2$.
- 3) a) Déterminer les valeurs et vecteurs propres de l'opérateur $S_u = \vec{S} \cdot \vec{u}$ ($\vec{u}$ étant un vecteur unitaire définissant un axe quelconque et de composantes : u_x, u_y, u_z).
b) En repérant le vecteur $\vec{u}$ par l'angle polaire θ et azimutal φ , montrer que ces vecteurs propres peuvent s'écrire :

$$|+\rangle_u = \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi/2} |+\rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{i\varphi/2} |-\rangle \quad \text{et} \quad |-\rangle_u = \sin \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi/2} |+\rangle - \cos \frac{\theta}{2} e^{i\varphi/2} |-\rangle$$

B/ Evolution dans le temps d'un spin 1/2

On considère un moment cinétique $\vec{S}$ de spin de valeur $s=1/2$ et on note $|+\rangle_u$ et $|-\rangle_u$ les états propres communs à S^2 et $S_u = \vec{S} \cdot \vec{u}$ où $\vec{u}$ est un vecteur unitaire repéré, dans le trièdre Oxyz, par son angle polaire θ et son angle azimutal φ . Sur la base des kets propres $|+\rangle$ et $|-\rangle$ de S_z associées respectivement aux valeurs propres $\hbar/2$ et $-\hbar/2$, on a montré que l'on a :

$$|+\rangle_u = \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi/2} |+\rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{i\varphi/2} |-\rangle \quad \text{et} \quad |-\rangle_u = \sin \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi/2} |+\rangle - \cos \frac{\theta}{2} e^{i\varphi/2} |-\rangle$$

- 1) Trouver, à partir des expressions précédentes, les kets propres communs à S^2 et S_x . Même question pour les kets propres communs à S^2 et S_y . (on éliminera tout facteur de phase n'ayant pas de signification physique).
- 2) Un système est dans l'état $|+\rangle_u$, ket propre de S_u . En se rappelant que S_x et S_u ont les mêmes valeurs propres que S_z , calculer les probabilités des différents résultats de mesure de S_x . Même question pour S_u .
- 3) On suppose maintenant que le système est préparé dans l'état $|+\rangle_u$, quelles sont les valeurs moyennes de S_x , S_y et S_z .

4) On plonge le système dans un champ magnétique uniforme statique $\vec{B}_0$ orienté suivant Oz . L'interaction du moment magnétique $\vec{M}$ ($\vec{M} = \gamma \vec{S}$) du système avec le champ magnétique peut être décrite par l'hamiltonien H défini par : $H = - \vec{M} \cdot \vec{B}_0$

a. Déterminer les vecteurs propres de H et les valeurs propres associées. On appellera B_0 le module de B_0 et on posera $\omega_0 = -\gamma B_0$.

b. Si le système est décrit au temps $t=0$ par le ket $|\chi_{t=0}\rangle = |+\rangle_u$, quel sera son état de spin $|\chi_t\rangle$ à l'instant t . On posera $\varphi(t) = \varphi + \omega_0 t$.

c. Déterminer l'évolution dans le temps de $\langle \vec{S} \rangle$, on calculera explicitement les valeurs $\langle S_x \rangle$, $\langle S_y \rangle$ et $\langle S_z \rangle$. Commenter.

d. Considérons l'instant t tel que $\omega_0 t = \alpha$. En comparant l'expression de $|\chi_t\rangle$ avec celle de $|\chi_{t=0}\rangle$, déterminer la matrice $R(\alpha)$ d'ordre 2 par laquelle le vecteur d'état est transformé entre les instants 0 et t : $|\chi_t\rangle = R(\alpha) |\chi_{t=0}\rangle$.

Exprimer $R(\alpha)$ sous forme d'une combinaison linéaire de I (matrice identité) et de la matrice σ_z .
e. Donner l'expression de $|\chi_t\rangle$ en fonction de $|\chi_{t=0}\rangle$ dans les deux cas particuliers suivants : $\alpha = 2\pi$ et $\alpha = 4\pi$. Commenter le résultat obtenu.

Données : ♦ L'opérateur de spin $\vec{S}$ de valeur $s = 1/2$ peut s'écrire : $\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$ avec $\vec{\sigma}$ opérateur sans dimension dont les composantes sont les matrices de Pauli :

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

♦ Le vecteur unitaire $\vec{u}$, tel qu'il a été défini, a pour composantes :

$$u_x = \sin \theta \cos \varphi \quad u_y = \sin \theta \sin \varphi \quad u_z = \cos \theta$$

♦ Relations utiles : $\sin 2\theta = 2 \sin \theta \cos \theta$; $\cos 2\theta = 1 - 2 \sin^2 \theta$

C/ Mesures de spin

On considère un montage formé de deux appareils de Stern et Gerlach disposés l'un derrière l'autre; (la direction de propagation est Oy). Le premier fonctionne en polariseur : le jet qui en sort est constitué d'atomes qui sont tous dans le même état de spin, par exemple $|+\rangle_u$ où $\vec{u}$ est la direction du gradient de champs magnétique. Le second fonctionne en analyseur et sert à mesurer la composante du moment cinétique de spin dans la direction $\vec{v}$.

On réalise les trois expériences suivantes :

Expérience n° 1 : $\vec{u} // \vec{v} // Oz$.

Expérience n° 2 : $\vec{u} // Oz$ et $\vec{v} // Ox$.

Expérience n° 3 : $\vec{u}$ est dans le plan (x,z) faisant un angle θ avec Oz et $\vec{v}$ est parallèle à Oz .

Dans chacune des expériences, décrire le phénomène attendu en précisant :

- l'état du spin à la sortie du polariseur ;
- les résultats de mesure de la composante de spin et leurs probabilités ;
- le nombre de taches que l'on peut observer sur une plaque placée à la sortie de l'analyseur ;
- et enfin calculer la valeur moyenne de la composante de spin analysée.

Exercices relatifs au chapitre 2 - Partie B

I. Choix d'une représentation

Soient deux particules ayant chacune un spin $1/2$ représentés par les opérateurs :

$$\vec{\sigma}_1 = 2\vec{S}_1 \quad \text{et} \quad \vec{\sigma}_2 = 2\vec{S}_2 \quad (\text{en unité } \hbar)$$

où $\vec{\sigma}_i$ représentent les matrices de Pauli $(\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ associées à la particule i .

L'énergie de ces deux particules est représentée par le hamiltonien :

$$H = a(\sigma_{1z} + \sigma_{2z}) + b \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 \quad (a \text{ et } b \text{ sont des constantes positives})$$

1) Représentation (S^2, S_z, S_1^2, S_2^2) :

- Ecrire H en fonction des observables S^2 et S_z
- Déterminer les valeurs propres et les états propres de H

2) Représentation $(S_1^2, S_{1z}, S_2^2, S_{2z})$:

- Ecrire H sous forme de la somme de deux observables dont l'un est représenté par une matrice diagonale.
- Donner les valeurs propres et les états propres de H .

3) Conclure.

II. L'addition de deux moments de spin $1/2$

Trouver les coefficients de Clebsch-Gordan associés au couplage du spin de l'électron et de celui du proton de l'atome d'hydrogène dans son état fondamental ($\ell = 0$).

III. Composition de deux moments cinétiques orbitaux

On considère deux particules, sans spin, de moments cinétiques $\vec{L}_1$ et $\vec{L}_2$ et tel que : $\ell_1 = \ell_2 = 1$.

On désigne par $\vec{L}$ le moment cinétique total.

- Ecrire les éléments de la base découplée : $\{|\ell_1, \ell_2; m_1, m_2\rangle\}$ que l'on note $\{|m_1, m_2\rangle\}$.
- Ecrire les éléments de la base couplée : $\{|\ell_1, \ell_2, \ell, m\rangle\}$, notée $\{|\ell, m\rangle\}$.
 - Exprimer les kets $|\ell, m\rangle$ en fonction des kets $|m_1, m_2\rangle$. On utilisera la table des coefficients de Clebsch-Gordan.
- L'hamiltonien du système est donné par :

$$H = \frac{\epsilon_1}{\hbar^2} (\vec{L}_1 + \vec{L}_2) \cdot \vec{L}_2 + \frac{\epsilon_2}{\hbar^2} (L_{1z} + L_{2z})^2$$

ϵ_1 et ϵ_2 sont des constantes ayant chacune la dimension d'une énergie.

- Exprimer H en fonction des observables L^2, L_z^2, L_1^2, L_2^2 et des constantes $\epsilon_1, \epsilon_2, \hbar^2$.
- Montrer que les kets $|\ell, m\rangle$ sont des vecteurs propres de H associés à des valeurs propres que l'on précisera et que l'on notera $E_{\ell, m}$.
- Expliciter les valeurs de $E_{\ell, m}$ et les états correspondants. On rassemblera les résultats dans un tableau qui donne les valeurs de ℓ et celles de m , les valeurs de $E_{\ell, m}$ et les états $|\ell, m\rangle$ associés ainsi que la dégénérescence de chaque niveau.

III. Le couplage spin-orbite

On considère un système (électron 2p d'un atome) constitué d'un moment cinétique orbital $\vec{L}$ de nombre quantique $\ell = 1$ et d'un moment cinétique de spin $\vec{S}$ ($s=1/2$), dont l'hamiltonien se réduit au terme W_{s-o} décrivant l'interaction spin-orbite et est donné par :

$$W_{s-o} = a \vec{L} \cdot \vec{S}$$

où a est une constante réelle et positive (la constante de spin-orbite).

On désigne par $\{|\ell, m_\ell\rangle \otimes |s, m_s\rangle\}$ que l'on notera $\{|m_\ell, m_s\rangle\}$ la base des kets propres communs à $\vec{L}^2$, L_z , $\vec{S}^2$ et S_z ; (base découplée). $|m_\ell\rangle = |1\rangle, |0\rangle, |-1\rangle$ kets propres de L_z de valeur propre respectivement $+\hbar, 0, -\hbar$ et $|m_s\rangle = |+\rangle, |-\rangle$ kets propres de S_z de valeur propre $+\hbar/2, -\hbar/2$ respectivement.

1. En introduisant les relations usuelles sur les opérateurs $L_\pm$ et $S_\pm$, à savoir :

$$L_\pm = L_x \pm iL_y \quad \text{et} \quad S_\pm = S_x \pm iS_y$$

Écrire W_{s-o} en fonction des opérateurs L_+ , L_- , S_+ , S_- , L_z et S_z .

2. On rappelle les relations suivantes :

$$L_+ |m_\ell\rangle = \hbar \sqrt{2} |m_\ell+1\rangle \quad \text{avec } m_\ell = -1 \text{ ou } 0 \quad \text{et } L_+ |1\rangle = 0$$

$$L_- |m_\ell\rangle = \hbar \sqrt{2} |m_\ell-1\rangle \quad \text{avec } m_\ell = +1 \text{ ou } 0 \quad \text{et } L_- |-1\rangle = 0$$

$$S_+ |-\rangle = \hbar |+\rangle; \quad S_- |+\rangle = \hbar |-\rangle \quad \text{et} \quad S_+ |+\rangle = S_- |-\rangle = 0$$

et on posera dans la suite $\epsilon = a \hbar^2/2$.

2.a. Montrer que $|1, +\rangle$ et $|-1, -\rangle$ sont des kets propres de W_{s-o} avec la même valeur propre que l'on déterminera.

2.b. Donner la matrice représentant W_{s-o} dans le sous-espace engendré par les kets $|1, -\rangle$ et $|0, +\rangle$; (on remarquera que W_{s-o} laisse invariant ce sous-espace). Déterminer ses valeurs propres et ses vecteurs propres normés que l'on notera $|\Psi'\rangle$ et $|\Psi''\rangle$.

2.c. Même question avec les kets $|-1, +\rangle$ et $|0, -\rangle$; on notera par $|\Phi\rangle$ et $|\Phi'\rangle$ les vecteurs propres normés obtenus.

2.d. Résumer les résultats des questions précédentes dans un diagramme en précisant les valeurs des énergies, les dégénérescences des niveaux et les kets propres correspondants. (Pour compléter ce diagramme, on peut considérer qu'en absence du couplage spin-orbite l'énergie du système est une constante notée E_0 : valeur propre d'un hamiltonien atomique H_0 à symétrie sphérique et formant E.C.O.C. avec L^2 , L_z , S^2 et S_z).

3. On introduit le moment cinétique total $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ caractérisé par ses nombres quantiques j et m .

3.a. Donner, sans démonstration, les valeurs possibles de j et les valeurs de m correspondantes. On désigne par $\{|\ell, s, j, m\rangle\}$ que l'on notera $\{|j, m\rangle\}$ la base des kets communs à L^2 , S^2 , J^2 et J_z ; (base couplée).

3.b. Écrire W_{s-o} en fonction de J^2 , L^2 et S^2 .

3.c. Montrer que W_{s-o} est diagonal dans la base $\{|j, m\rangle\}$ et retrouver les valeurs propres de W_{s-o} . Commenter.

IV. Interaction spin-spin & l'effet Zeeman

On étudie dans ce problème la structure hyperfine de systèmes du type hydrogénoïdes : atome d'hydrogène, muonium ou positronium.

Soit $s_1=1/2$ le spin de l'électron, $s_2=1/2$ celui de l'autre particule.

La structure hyperfine du système est due à des interactions magnétiques entre les spins des deux particules. L'opérateur associé à cette interaction est :

$$H_S = A \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$$

où $\vec{S}_1$ et $\vec{S}_2$ sont les opérateurs moments cinétiques de spin associés aux particules et A une constante qui dépend du système étudié.

On introduit le moment cinétique total $\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$ et les équations aux valeurs propres de S^2 et S_z : $S^2 |s, m\rangle = s(s+1) \hbar^2 |s, m\rangle$ et $S_z |s, m\rangle = m \hbar |s, m\rangle$

où S_z est la composante de $\vec{S}$ suivant l'axe Oz choisi comme axe de quantification.

1) Calculer les commutateurs : $[H_S, S^2]$ et $[H_S, S_z]$. Que peut-on en déduire ?

2) a. Déterminer les valeurs et les vecteurs propres de H_S . Quelle est la dégénérescence des niveaux ?

b. Calculer (en cm) la longueur d'onde de la radiation correspondante à la transition entre les niveaux d'énergie hyperfin de l'hydrogène pour lequel $A \hbar^2$ vaut $5,87 \times 10^{-6}$ eV.

Commentaire : l'observation de cette raie par les radioastronomes a permis de déterminer la teneur en hydrogène des galaxies et de faire ainsi des progrès dans l'étude de la structure, de la formation et de l'évolution de celles-ci.

4) On applique à présent un champ magnétique statique $\vec{B}$ parallèle à Oz. Il faut alors ajouter à l'hamiltonien hyperfin H_S , l'hamiltonien Zeeman H_B qui décrit le couplage avec $\vec{B}$ des moments magnétiques de spin de chacune des deux particules ; soit :

$$H_B = \omega_1 S_{1z} + \omega_2 S_{2z}$$

avec $\omega_i = -\gamma_i B$ ($i=1,2$) où les γ_i sont les facteurs gyromagnétiques.

a. Exprimer les kets de la base "couplée" $\{|s, m\rangle\}$ en fonction des kets de la base "découplée" $\{|s_1, m_1\rangle \otimes |s_2, m_2\rangle\}$ que l'on notera pour alléger l'écriture : $\{|m_1, m_2\rangle\}$ avec :

$\{|m_1, m_2\rangle\} = \{|+, +\rangle, |+, -\rangle, |-, +\rangle, |-, -\rangle\}$. On rappelle : $J_{\pm} |j, m\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) \mp m(m \pm 1)} |j, m \pm 1\rangle$.

b. Calculer les matrices représentatives de S_{1z} et S_{2z} dans la base $\{|s, m\rangle\}$. En déduire celle de l'opérateur $H = H_S + H_B$. On adoptera l'ordre : $|1, 1\rangle, |1, -1\rangle, |1, 0\rangle, |0, 0\rangle$

c. Calculer les valeurs propres, E_k , de H. On posera : $A \hbar^2 / 2 = \alpha$, $(\omega_1 + \omega_2) / 2 = \omega_0$ et $(\omega_1 - \omega_2) / 2 = \beta / \hbar$. (Il est utile d'utiliser une diagonalisation par bloc).

4) Quelle est la dégénérescence des valeurs propres de H dans les trois cas suivants :

a. Le système des deux particules est un muonium (électron e^- et muon μ^+) où $\omega_1 \neq \omega_2$.

b. Le système des deux particules est un hydrogène où $\omega_1 = 2\omega_{hyd}$ et $\omega_2 = 0$; ($\omega_{hyd} = e/2m_e B_0$).

c. Le système des deux particules est un positronium (électron e^- et positron e^+) où $\omega_1 = -\omega_2$ que l'on pose égale à ω_p .

5) Tracer, pour l'hydrogène, la variation des niveaux d'énergie en fonction de $\hbar\omega_{hyd}$ dans chacune des situations suivantes :

a. Le champ B est faible ; soit $\beta < \alpha$.

b. Le champ B est fort ; soit $\beta > \alpha$ (comportement asymptotique).

Commenter ces diagrammes.

6) Quel est, pour le positronium, le comportement asymptotique des niveaux d'énergie en fonction de $\hbar\omega_p$. Commenter le diagramme.

Exercices relatifs au chapitre 3

I. Equation radiale

Soit une particule (sans spin) de masse m soumise à un potentiel à symétrie sphérique $V(r)$.

1. Montrer qu'en représentation position, l'équation de Schrödinger admet des solutions stationnaires à variables séparées de la forme:

$$\Psi(r, \theta, \varphi, t) = R(r) G(\theta, \varphi) e^{-iEt/\hbar}$$

E désigne l'énergie totale de la particule.

2. A quelle équation satisfait la fonction $G(\theta, \varphi)$? Quelles en sont les solutions? (on rappellera les résultats sans démonstration).

3. En posant $R(r) = u(r)/r$

a. écrire l'équation radiale "modifiée" à laquelle doit obéir $u(r)$ et donner les conditions de régularité que doit satisfaire $u(r)$ en supposant que l'expression du potentiel autorise la particule à se trouver dans tout l'espace.

b. résoudre cette équation pour une particule (sans spin) de moment orbital nul et enfermée dans une sphère de rayon ρ à paroi infranchissable (ceci correspond à un puit de potentiel rectangulaire: $V(r)$ est nul si $r < \rho$ et $V(r)$ est infini ailleurs).

4. Dans l'état $\Psi_{2,1,\pm 1}(\vec{r})$ où la fonction radiale est donnée par :

$$R_{2,1,\pm 1}(r) = \frac{r}{\sqrt{24}a_0^5} e^{-r/2a_0}$$

Calculer la valeur moyenne de r et la comparer avec la valeur de r où la densité de probabilité est maximale; c'est-à-dire la plus probable. Commenter.

On donne: $\int_0^\infty x^n e^{-ax} dx = n! / a^{n+1}$

et On rappelle l'expression de l'opérateur laplacien en coordonnées sphériques:

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

II. Potentiel "moléculaire"

On considère une particule de masse m plongée dans potentiel de la forme :

$$V(r) = \frac{A}{r^2} - \frac{B}{r} \quad (A, B > 0)$$

1. Montrer que l'équation radiale est formellement identique à celle de l'atome d'hydrogène; on vérifiera en particulier le comportement à l'infini.

2. Montrer que les énergies accessibles sont de la forme :

$$E_{p, \ell} = - \frac{2B^2 m / \hbar^2}{\left[2p + 1 + \sqrt{(2\ell + 1)^2 + 8mA / \hbar^2} \right]^2} \quad \text{où } p \text{ et } \ell \text{ sont des entiers positifs ou nuls.}$$

3. Ecrire l'expression de la fonction radiale.

III. Potentiel central

A/ On considère un oscillateur harmonique plan de masse μ et de pulsation ω . En représentation position, l'équation aux valeurs propres de l'hamiltonien H du système s'écrit :

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_{\vec{\rho}} + \frac{1}{2} \mu \omega^2 \rho^2 \right\} \Phi(\rho, \varphi) = E \Phi(\rho, \varphi)$$

ρ et φ désignent les coordonnées polaires de la position de l'oscillateur et $\Phi(\rho, \varphi) = R(\rho)G(\varphi)$.

- 1) Sachant que $\Delta_{\vec{\rho}} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) - \frac{L_z^2(\varphi)}{\hbar^2 \rho^2}$ et $L_z(\varphi)G(\varphi) = m\hbar G(\varphi)$ avec m un entier relatif,

Établir l'équation radiale que doit satisfaire la fonction radiale $R(\rho)$; on posera $\varepsilon = \frac{2\mu}{\hbar^2} E$.

- 2) Le comportement asymptotique de la solution impose que la fonction radiale doit s'écrire :

$R(\rho) = \rho^\alpha e^{-\beta \rho^2} U(\rho)$ où l'équation que vérifie $U(\rho)$ est :

$$U''(\rho) + \left(\frac{2\alpha+1}{\rho} - 4\beta\rho \right) U'(\rho) + [\varepsilon - 4\beta(\alpha+1)] U(\rho) = 0.$$

En posant $U(\rho)$ sous la forme d'une série entière $U(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k$, montrer que le terme en ρ^k est tel que : $(k+2)(k+2\alpha+2)a_{k+2} + [\varepsilon - 4\beta(k+\alpha+1)]a_k = 0$

- 3) Montrer que la série $U(\rho)$ converge comme $e^{2\beta\rho^2}$ et que la fonction radiale résultante $R(\rho)$ est physiquement inacceptable. Que doit-on faire pour disposer d'une solution acceptable physiquement. Justifier votre réponse.

- 4) Sachant que $\alpha = |m|$ et que $\beta = +\frac{\mu\omega}{2\hbar}$, montrer que l'on retrouve l'expression bien connue de l'énergie E de l'oscillateur harmonique plan, à savoir : $E_n = \hbar\omega(n+1)$ avec n entier ≥ 0 .

B/ On considère un oscillateur harmonique à trois dimensions de masse m et de pulsation ω . On sait que les énergies de ce système sont quantifiées et prennent la forme $(n + 3/2)\hbar\omega$ où n est un entier positif ou nul. On se propose de retrouver ce résultat en traitant le système comme un problème de potentiel central.

$$\text{On considère l'hamiltonien: } H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 R^2$$

où P et R sont les observables impulsion et position ($R^2 = x^2 + y^2 + z^2$).

- 1) Soient E_n et $|\Psi_n\rangle$ les énergies propres discrètes et états propres correspondants de H .

a. Montrer que l'équation de Schrödinger se ramène, en représentation position, à l'équation radiale dont la solution est notée $R(r)$.

b. En effectuant le changement de variable: $q = r\sqrt{\alpha}$ avec $\alpha = m\omega/\hbar$, vérifier que l'équation radiale s'écrit :

$$\left[\frac{d^2}{dq^2} + \frac{2}{q} \frac{d}{dq} - q^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{q^2} + 2\varepsilon \right] R(q) = 0 \text{ avec } \varepsilon = \frac{E_n}{\hbar\omega}$$

On rappelle qu'en coordonnées sphériques, l'opérateur laplacien s'écrit :

$$\Delta_{\vec{r}} = \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{L^2}{r^2 \hbar^2} \text{ avec } L^2 \Psi(\vec{r}) = \ell(\ell+1) \hbar^2 \Psi(\vec{r}); \ell \text{ est entier } \geq 0$$

2) En passant à la variable $\rho = q^2$, le comportement asymptotique impose que R prenne la forme: $R(\rho) \propto e^{-\rho/2} \cdot \rho^{\ell/2} \cdot \Phi(\rho)$ où $\Phi(\rho)$ est solution de l'équation :

$$4\rho \frac{d^2\Phi}{d\rho^2} + 4(\ell - 1 - \rho) \frac{d\Phi}{d\rho} + (2\varepsilon - 2\ell - 3)\Phi = 0$$

a. On peut chercher $\Phi(\rho)$ sous forme d'une série entière en principe infinie:

$$\Phi(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k. \text{ Etablir une relation de récurrence entre les coefficients } a_k.$$

b. Montrer qu'avec une telle série, la solution $R(\rho)$ obtenue est physiquement inacceptable. La série doit être finie et donc se réduire à un polynôme de degré p . Dans ces conditions,

i) Montrer que les énergies sont bien de la forme $(n + 3/2)\hbar\omega$ et préciser les relations entre les entiers n et ℓ .

ii) Calculer les énergies des trois premiers niveaux et donner leur dégénérescence.

C/ On considère un potentiel central de la forme :

$$V(r) = \frac{A}{r^2} + Br^2 \quad (A \text{ et } B \text{ sont des constantes positives})$$

On veut déterminer les niveaux d'énergie d'une particule de masse m plongée dans $V(r)$.

1. Ecrire l'équation que doit satisfaire la fonction radiale $R(r)$.

On rappelle qu'en coordonnées sphériques, l'opérateur laplacien s'écrit :

$$\Delta_{\vec{r}} = \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{L^2}{r^2\hbar^2} \quad \text{avec} \quad L^2 \Psi(\vec{r}) = \ell(\ell+1)\hbar^2 \Psi(\vec{r}); \quad \ell \text{ est entier } \geq 0$$

2. On pose $\lambda(\lambda+1) = \ell(\ell+1) + 2mA/\hbar^2$ et on effectue le changement de variable :

$$q = r\sqrt{\sigma} \quad \text{avec} \quad \sigma = \sqrt{2mB}/\hbar; \quad R(r) \rightarrow S(q).$$

Vérifier que l'équation radiale s'écrit :

$$\left[\frac{d^2}{dq^2} + \frac{2}{q} \frac{d}{dq} - q^2 - \frac{\lambda(\lambda+1)}{q^2} + 2\varepsilon \right] S(q) = 0$$

où ε est une quantité sans dimension que l'on précisera.

3. En passant à la variable $\rho = q^2$, le comportement asymptotique impose que la solution soit de la forme: $e^{-\rho/2} \cdot \rho^{\lambda/2} \cdot \Phi(\rho)$ où $\Phi(\rho)$ est solution de l'équation :

$$4\rho \frac{d^2\Phi}{d\rho^2} + 4(\lambda - 1 - \rho) \frac{d\Phi}{d\rho} + (2\varepsilon - 2\lambda - 3)\Phi = 0$$

On peut chercher $\Phi(\rho)$ sous forme d'une série entière en principe infinie :

$$\Phi(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k$$

a. Etablir une relation de récurrence entre les coefficients a_k .

b. Montrer qu'avec une telle série, la solution obtenue est physiquement inacceptable.

4. Pour avoir une solution acceptable physiquement, il faut que la série soit finie et donc se réduire à un polynôme de degré p . Dans ces conditions, montrer que les énergies E de la particule s'écrivent :

$$E = \hbar \sqrt{\frac{2B}{m}} \left[(2p+1) + \sqrt{\left(\ell + \frac{1}{2}\right)^2 + \frac{2mA}{\hbar^2}} \right] \text{ avec } p=0,1,2,\dots$$

5. Utiliser la formule ci-dessus pour retrouver l'expression bien connue de l'énergie quantifiée de l'oscillateur harmonique à trois dimensions de masse m et de pulsation ω .

(On rappelle qu'un tel système est soumis à un champ de forces qui dérive de l'énergie potentielle $V(r) = \frac{1}{2} m \omega^2 r^2$).

VI. Dépendance des niveaux d'énergie en fonction d'un paramètre

1. Soit $H(k)$ un hamiltonien dépendant d'un paramètre k , $E(k)$ une valeur propre de $H(k)$ et $|\Psi(k)\rangle$ le vecteur propre normalisé correspondant.

Montrer que $\frac{dE(k)}{dk} = \langle \Psi(k) | \frac{\partial H}{\partial k} | \Psi(k) \rangle$

2. Pour une particule dans un potentiel central $V(r)$

a. Ecrire l'Hamiltonien de la particule et l'équation de Schrödinger pour ses états stationnaires.

b. Comment se transforme cette équation dans une homothétie $\vec{r} \rightarrow k\vec{r}$? On posera $\varphi(\vec{r}) = \Psi(k\vec{r})$ et on remarquera que la valeur propre E ne change pas dans cette transformation.

c. On suppose que le potentiel a la forme particulière $V = V_0 r^\alpha$.

Montrer que dans ce cas on a la relation : $2 \langle T \rangle = \alpha \langle V \rangle$

si ces valeurs moyennes sont prises sur un état propre de H (on utilisera le résultat de la question 1 et on fera $k=1$ dans l'expression obtenue).

3. On peut utiliser les résultats des questions précédentes pour étudier les niveaux d'énergie d'atomes semblables à l'atome d'hydrogène.

Les niveaux d'énergie de l'atome d'hydrogène sont $E_n = -\frac{E_1}{n^2}$ où $E_1 = 13,6 \text{ eV}$ et n est un entier positif, les longueurs d'ondes des rayonnements émis par cet atome sont données par la formule de Balmer :

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2} \right) \quad \text{où } n \text{ et } n' \text{ sont des entiers et } R = 109737 \text{ cm}^{-1}.$$

a. On remplace dans l'atome d'hydrogène l'électron par un lepton μ qui a les mêmes propriétés que l'électron mais dont la masse est 200 fois plus grande. Quelles sont les longueurs d'onde des rayonnements que peut émettre ce système?

b. Même question si l'on conserve l'électron et que l'on remplace le proton par un ion dont la charge est Z fois celle du proton.

Exercices relatifs au chapitre 4

I. PERTURBATION D'UN NIVEAU SIMPLE

A/ Perturbation en X^4

On considère l'hamiltonien H_0 de l'oscillateur harmonique à une dimension de masse m et de pulsation ω , perturbé par un terme W . On note H l'hamiltonien total: $H = H_0 + W$ avec :

$$W = (\sqrt{\lambda} X^2)^2$$

On rappelle les équations aux valeurs propres et vecteurs propres :

$$a^+ |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle \quad \text{et} \quad a^- |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle$$

$$H_0 |n\rangle = (n + 1/2) \hbar \omega |n\rangle \quad \text{avec} \quad n = \{0, 1, \dots\}$$

où a^+ et a^- sont les opérateurs de création et d'annihilation.

$$\text{On rappelle aussi: } X = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a^- + a^+)$$

Calculer la valeur de l'énergie au premier ordre en λ de l'état fondamental ($n=0$).

B/ Perturbation par un champ électrique ζ

Le terme de perturbation à H_0 vaut maintenant : λX (avec $\lambda = -q\zeta$).

1. Calculer au premier ordre de la théorie des perturbations l'énergie E_n du système correspondant à un état $|n\rangle$: $E_n = \varepsilon_n^{(0)} + \lambda \varepsilon_n^{(1)}$

2. Calculer au 2^{ème} ordre l'énergie $E_n = \varepsilon_n^{(0)} + \lambda \varepsilon_n^{(1)} + \lambda^2 \varepsilon_n^{(2)}$, on explicitera $\varepsilon_n^{(2)}$.

3. Retrouver E_n à partir d'un calcul exact. Commenter.

C/ Oscillateur anharmonique

A l'hamiltonien H_0 de l'oscillateur harmonique, on ajoute la perturbation $W = \lambda \hbar \omega X^3$ où λ est un nombre réel très petit devant 1. Trouver au premier ordre l'énergie et l'état du système. Discuter l'effet de W .

II. PERTURBATION D'UN NIVEAU DEGENERE

A/ Oscillateur harmonique à 2 dimensions

Soit H_0 l'hamiltonien non perturbé d'un oscillateur harmonique à deux dimensions :

$$H_0 = H_x + H_y \quad \text{où} \quad H_\mu = (N_\mu + 1/2) \hbar \omega \quad \text{et} \quad N_\mu = a_\mu^+ a_\mu^- \quad (\mu = x, y)$$

$$\text{avec} \quad a_\mu^+ |n_\mu\rangle = \sqrt{n_\mu + 1} |n_\mu + 1\rangle \quad \text{et} \quad a_\mu^- |n_\mu\rangle = \sqrt{n_\mu} |n_\mu - 1\rangle$$

1. Calculer $H_x |n_x\rangle$ et $H_y |n_y\rangle$. On considère l'état $|n_x n_y\rangle = |n_x\rangle \otimes |n_y\rangle$.

Montrer que $H_0 |n_x n_y\rangle = E_{n_x n_y} |n_x n_y\rangle$ et expliciter $E_{n_x n_y}$.

2. On perturbe H_0 par $H' = \lambda XY$ où X et Y sont donnés par :

$$X = \alpha (a_x^- + a_x^+) \quad \text{et} \quad Y = \alpha (a_y^- + a_y^+), \quad \alpha \text{ étant un réel.}$$

Quel est l'effet de H' au premier ordre sur le niveau d'énergie $E_{n_x n_y} = 2\hbar\omega$? On étudiera explicitement la levée de la dégénérescence s'il y a lieu.

B/ L'effet Zeeman sur l'Hydrogène

Dans un champ magnétique d'induction uniforme B (dirigé le long de oz), la perturbation est de la forme :

$$W = \gamma_0 \vec{B} \cdot \vec{L} \quad \text{avec } \gamma_0 = -e/2m \text{ et on posera } \omega_0 = \gamma_0 B$$

Sachant que : $L_z |n, \ell, m\rangle = m\hbar |n, \ell, m\rangle$ avec $-\ell \leq m \leq \ell$ et $\ell = 0, 1, 2, \dots, n-1$.

Etudier l'effet de W , au 1^{er} ordre, sur les niveaux $n=1$ et $n=2$ de l'atome d'hydrogène ; (on ne tiendra pas compte du spin). La dégénérescence est-elle levée complètement ?

C/ On considère un système dont l'espace des états est à trois dimensions. Sur la base qu'on convient de noter $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle\}$, le hamiltonien H du système est représenté par la matrice :

$$H = \hbar\omega \begin{pmatrix} 1 & \lambda & 0 \\ \lambda & 1 & \lambda \\ 0 & \lambda & 2 \end{pmatrix} = H_0 + W$$

où H_0 est représenté par une matrice diagonale et λ un paramètre sans dimension.

- 1) Ecrire la matrice représentant H_0 et celle représentant la perturbation W .
- 2) Donner les valeurs propres et les vecteurs propres de H_0 et préciser la dégénérescence des niveaux.
- 3) On suppose que $\lambda \ll 1$. Déterminer, au premier ordre en λ , les énergies et les états du système. Résumer vos résultats dans un diagramme et commenter.

D/ Particule enfermée dans une boîte

Une particule de masse m est plongée dans un puits de potentiel infini à trois dimensions de côté a :

$$V(x, y, z) = \begin{cases} 0 & \text{si } 0 \leq x \leq a, 0 \leq y \leq a, 0 \leq z \leq a \\ +\infty & \text{partout ailleurs} \end{cases}$$

- 1) Pour l'état fondamental et le premier état excité, déterminer les énergies et les fonctions d'ondes correspondantes. (On note E_1^0 l'énergie de l'état fondamental et E_1^1 celui du premier état excité).

On suppose que cette particule est soumise à une perturbation W constituée par le potentiel :

$$W(x) = a^3 w_0 \delta(x - a/4) \delta(y - 3a/4) \delta(z - a/4)$$

où w_0 est une constante réelle, ayant les dimensions d'une énergie.

- 2) Calculer, au premier ordre en w_0 , l'énergie perturbée du niveau fondamental.
- 3) Ecrire la matrice représentant W dans la base engendré par E_1^0 .
- 4) Calculer, au premier ordre en w_0 , les modifications apportées par $W(x)$ au premier niveau excité E_1^1 .

III. Perturbation d'un système de moment cinétique $j=1$

On considère un système de moment cinétique $\vec{J}$. On se limite dans tout l'exercice à un sous-espace à trois dimensions, sous-tendu par les kets $|1, 1\rangle$, $|0, 0\rangle$ et $|1, -1\rangle$, états propres communs à J^2 ($v.p. = 2\hbar^2$) et J_z ($v.p. = +\hbar, 0, -\hbar$). L'hamiltonien du système est :

$$H_0 = a J_z + \frac{b}{\hbar} J_z^2$$

où a et b sont deux constantes positives, ayant les dimensions d'une pulsation.

1) Quels sont les niveaux d'énergie du système? Pour quelle valeur du rapport b/a y a-t-il dégénérescence?

2) On applique un champ magnétique statique $\vec{B}_0$ dans la direction u d'angles polaires θ et ϕ . L'interaction avec $\vec{B}_0$ du moment magnétique du système ($\vec{M} = \gamma \vec{J}$) est décrite par :

$$W = \omega_0 J_u$$

où $\omega_0 = -\gamma B_0$ est la pulsation de Larmor dans $\vec{B}_0$, J_u est la composante de $\vec{J}$ sur la direction $\vec{u}$ et γ est le rapport gyromagnétique.

a) Ecrire la matrice représentant W dans la base des trois kets propres de H_0 .

b) On suppose que $b = 2a$ et que l'on a $\omega_0 \ll a$

i) Déterminer les énergies du système à l'ordre 2.

ii) Quel est, dans la base de H_0 , le développement de l'état fondamental $|\Psi_0\rangle$ de $H_0 + W$ au premier ordre inclus en ω_0 .

c) On suppose maintenant que $b=a$ avec toujours $\omega_0 \ll a$. En prenant $\vec{u}$ parallèle à l'axe ox , déterminer les énergies à l'ordre 1 et l'état à l'ordre 0. Conclure.

VI. Perturbation d'un système à deux niveaux

On considère un système physique dont l'espace des états est de dimension 2 et soit H_0 son hamiltonien "non perturbé". On notera par $|\Phi_1\rangle$ et $|\Phi_2\rangle$ les deux états propres de H_0 de valeurs propres respectives E_1 et E_2 supposées simples et telle que $E_2 > E_1$.

Si le système est soumis à une interaction W (perturbation), les états $|\Phi_1\rangle$ et $|\Phi_2\rangle$ cessent en général d'être états propres. On notera le hamiltonien total $H = H_0 + W$, ses états propres $|\Psi_+\rangle$ et $|\Psi_-\rangle$ et ses valeurs propres E_+ et E_- avec $E_+ > E_-$. Dans la base des états $|\Phi_1\rangle$ et $|\Phi_2\rangle$, la matrice de W la plus générale s'écrit :

$$\begin{pmatrix} W_{11} & W_{12} \\ W_{21} & W_{22} \end{pmatrix} \quad \text{avec} \quad W_{12} = W_{21}^*$$

1) Quel serait l'effet de la perturbation si W_{12} et W_{21} sont nuls?

2) À partir de maintenant, nous considérons que W_{12} et W_{21} sont non nuls et que :

$W_{11} = W_{22} = 0$. On posera $E_m = (E_1 + E_2)/2$ et $\Delta = (E_1 - E_2)/2$.

a) Calculer les valeurs propres E_+ et E_- de H en fonction de E_m , Δ et $|W_{12}|$ puis comparer $E_+ - E_-$ à $E_2 - E_1$.

b) Que deviennent les expressions de E_+ et E_- dans les deux cas limites suivants:

i) Couplage faible : $|W_{12}| \ll \Delta$? ii) Couplage fort : $|W_{12}| \gg \Delta$?

3) On pose $\tan \theta = |W_{21}|/\Delta$ et $W_{12} = |W_{12}| e^{-i\alpha}$ avec $0 \leq \theta < \pi$ et $0 \leq \alpha < 2\pi$.

a) Montrer que, dans la base des états $|\Phi_1\rangle$ et $|\Phi_2\rangle$, les états $|\Psi_+\rangle$ et $|\Psi_-\rangle$ normés à l'unité peuvent s'écrire:

$$|\Psi_+\rangle = e^{-i\alpha/2} \sin \frac{\theta}{2} |\Phi_1\rangle + e^{i\alpha/2} \cos \frac{\theta}{2} |\Phi_2\rangle \quad \text{et}$$

$$|\Psi_-\rangle = e^{-i\alpha/2} \cos \frac{\theta}{2} |\Phi_1\rangle - e^{i\alpha/2} \sin \frac{\theta}{2} |\Phi_2\rangle$$

- b) Que deviennent les expressions de $|\Psi_+\rangle$ et $|\Psi_-\rangle$ dans les limites des couplages faible et fort.
- 4) On suppose qu'à l'instant $t = 0$, le système est dans l'état $|\Phi_1\rangle$.
- a) Exprimer $|\Phi_1\rangle$ en fonction de $|\Psi_+\rangle$ et $|\Psi_-\rangle$ puis écrire l'état $|\Psi_t\rangle$ du système à un instant t ultérieur.
- b) Calculer la probabilité $\mathcal{P}_{1\rightarrow 2}(t)$ de trouver le système à l'instant t dans l'état $|\Phi_2\rangle$. Tracer $\mathcal{P}_{1\rightarrow 2}(t)$.

V. METHODE VARIATIONNELLE

A/ Oscillateur harmonique

- Rappeler le théorème de Ritz et les étapes d'utilisation de la méthode variationnelle.
- Application :
 - Tester la méthode dans le cas de l'oscillateur harmonique à une dimension en utilisant la fonction d'essai suivante :

$$\Psi_{\text{essai}}(x, a) = Ce^{-ax^2} \quad \text{où } a \text{ désigne le paramètre variationnel.}$$

- b) Commenter vos résultats.

On donne :
$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^{2m} e^{-\beta x^2} dx = \frac{(2m)!}{2^{2m} \beta^m m!} \sqrt{\frac{\pi}{\beta}} \quad (m \text{ est un entier } \geq 0).$$

B/ Particule dans le champ de pesanteur

Une particule de masse m est en mouvement dans le champ de pesanteur g . Le potentiel est défini par :

$$V(z) = \begin{cases} mgz & \text{pour } z > 0 \\ +\infty & \text{pour } z \leq 0 \end{cases}$$

On se propose de calculer à présent l'énergie E_f de l'état fondamental par la méthode des variations. On choisit comme fonction d'essai :

$$\Psi_a(z) = \begin{cases} Aze^{-az} & \text{pour } z > 0 \\ 0 & \text{pour } z \leq 0 \end{cases} \quad \text{où } a \text{ est le paramètre de variation.}$$

- Justifier ce choix de la fonction d'essai.
- Calculer l'énergie moyenne de l'hamiltonien $\langle H \rangle(a)$ dans cet état.
- Déterminer la valeur optimale de a_0 .
- En déduire l'énergie du niveau fondamental que donne la méthode des variations.

C/ Potentiel exponentiel

L'interaction entre le proton et le neutron peut être décrite par le potentiel :

$$V(r) = -A e^{-r/r_0} \quad (\text{avec } A=32 \text{ MeV et } r_0=2,2 \text{ Fermi})$$

En utilisant le principe variationnel de Ritz, déterminer l'énergie de l'état fondamental de la particule relative. Prendre pour fonction d'essai : $R(r) = C e^{-\alpha r/2r_0}$ dépendant du paramètre réel $\alpha > 0$. La valeur de la constante C résulte de la condition de normalisation et on donne :

$$I_k = \int_0^{\infty} x^k e^{-\alpha x} dx = \frac{k!}{\alpha^{k+1}}; \text{ avec } \alpha > 0$$

D/ L'atome d'hydrogène

Un calcul exact des niveaux d'énergie de l'atome d'hydrogène donne $E = -E_1/n^2$ avec n entier ≥ 1 et $E_1 = \hbar^2/2mr_B^2 = 13,6 \text{ eV}$ (r_B étant le rayon de la 1^{ère} orbite de Bohr). Ainsi, pour l'état fondamental ($n=1$) on a $E_f = -E_1$ et la fonction d'onde associée a pour expression:

$$\Psi_f(r) = C_1 e^{-r/r_B} \quad \text{avec } C_1 = 1/\sqrt{\pi r_B^3}$$

On se propose de retrouver E_f et $\Psi_f(r)$ en utilisant la méthode variationnelle (afin d'apprécier la précision de la méthode).

Pour ce faire, utiliser la fonction d'essai : $\Psi_a^H(r) = A e^{-a r/r_B}$

Refaire le calcul avec les fonctions suivantes :

$$\Psi_a(r) = A r e^{-a r/r_B} \quad \text{et} \quad \Psi_a(r) = A / [a^2 + (r/r_B)^2]$$

Conclure.

E/ Atome à deux électrons

On veut appliquer la méthode variationnelle à l'atome d'hélium ($Z=2$) en utilisant la fonction d'essai :

$$\Psi_a^{He}(r_1, r_2) = \Psi_a^H(r_1) \Psi_a^H(r_2) \quad \text{avec } \Psi_a^H(r_i) = A e^{-a r_i/r_B} \quad (i=1,2)$$

- 1) Le choix de $\Psi_a^{He}(r_1, r_2)$ est-il compatible avec la forme de l'hamiltonien du système?
- 2) Déterminer l'énergie de l'état fondamental sachant que le terme bi-électronique a pour moyenne $5a E_1/4$; (E_1 étant le potentiel d'ionisation de l'atome d'hydrogène).

$$\text{On donne : } \int_0^\infty z^n e^{-bz} dz = n! / b^{n+1}$$

- 3) Comparer la valeur obtenue avec celle de la méthode de perturbation stationnaire en supposant que le terme bi-électronique est une perturbation du système et que sa valeur moyenne dans l'état non perturbé vaut $\frac{5}{2} E_1$. Sachant qu'expérimentalement l'énergie de l'hélium fondamental vaut $-78,6 \text{ eV}$, la supposition précédente est-elle justifiée.



avant Louis de Broglie

après Louis de Broglie

d'après un dessin de Plantu