Université Claude Bernard-Lyon I
UFR de Physique

Ecole Normale Supérieure de Lyon
Département des Sciences de la Matière

Licence de Physique, Parcours Sciences de la Matière, Année 2010-2011

Tutorats de Mécanique Quantique

FASCICULE

Fonctionnement des tutorats

Les groupes de tutorats sont constitués au début du semestre. Les étudiants ne doivent en aucun cas naviguer d'un groupe de tutorat à un autre. Les séances durent une heure avec 7 élèves environ (un groupe) et non deux heures avec 14 élèves.

Chaque groupe rencontre donc l'enseignant pendant une heure chaque semaine. Le travail à effectuer est donné en cours. Chaque étudiant doit préparer les exercices, puis le groupe doit se réunir une fois avant la séance de tutorat pour discuter et résoudre le maximum de problèmes entre étudiants.

La séance de tutorat doit être consacrée à discuter les problèmes liés au cours ou aux exercices. Il faut éviter que la séance de tutorat ne dérive vers une réécriture complète au tableau d'une solution des exercices de la part de l'enseignant.

La présence en tutorat est obligatoire. A chaque séance, l'enseignant doit vérifier la présence de tous les étudiants et conserver une information sur l'implication de chacun dans la préparation et le déroulement du tutorat. L'enseignant de tutorat est responsable du suivi et ne doit pas hésiter à " donner l'alerte " pour les élèves en difficulté, ou bien en cas d'absences non justifiées. Les enseignants de tutorat doivent conserver les informations, séance par séance, pour la discussion en jury en fin d'année.

Table des matières

Chapitre 1

Introduction, ordres de grandeur et effets quantiques

Liste des exercices

Sélection d'exercices tirée des examens

- Contrôle continu de novembre 2003 (7.1) : Recul d'un atome lors de l'émission d'un photon
- Contrôle continu de novembre 2004 (7.2) :
  - ⋆ Longueur d'onde de de Broglie
  - ⋆ Hypothèse de Bohr appliquée à un potentiel en r^k
- Contrôle continu de novembre 2005 (7.3) :
  - ⋆ Effet photoélectrique sur les métaux
  - ⋆ Neutrons monocinétiques
- Examen de janvier 2005 (8.2) : Effet de volume du noyau sur l'état fondamental d'un ion hydrogénoïde

Exercice I : Température caractéristique d'un oscillateur harmonique.

Nous verrons plus tard dans le cours que l'énergie d'un oscillateur harmonique quantique ne peut prendre que des valeurs discrètes :

$$\epsilon = \hbar\omega(n + 1/2), \quad n = 0, 1, 2, ..., \tag{1.1}$$

où ω est la fréquence caractéristique de l'oscillateur et $\hbar = h/2\pi$ est la constante de Planck. Nous verrons également que la valeur moyenne, $< n(T) >$, pour un oscillateur en contact avec un réservoir à température T est

$$< n >= \frac{1}{exp(\beta\hbar\omega) - 1}, \ \beta = 1/k_B T. \tag{1.2}$$

a) Développer une expression pour l'énergie moyenne de l'oscillateur, $< \epsilon >$. Tracer $< \epsilon(T) >$. Montrer que $< \epsilon(T) >$ ne suit plus la loi classique, $< \epsilon >= k_B T$ pour $T \lesssim \hbar\omega/k_B$.

b) Wien, en 1896, a remarqué que pour une température T donnée, la densité spectrale d'énergie d'un corps noir, $u(\omega, T)$, passe par un maximum. Ce maximum est obtenu pour une valeur de pulsation ω_{max} qui suit une loi universelle :

$$\hbar\omega_{max}/k_B T = \text{const.} \sim 3 \tag{1.3}$$

Expliquer qualitativement cette observation en termes d'oscillateurs quantiques (on admettra que les modes d'oscillation d'une cavité sont de la forme $\epsilon = \hbar\omega n$). En tenant compte du fait que la température du soleil est de l'ordre de 6000 K, expliquer pourquoi nos yeux sont sensibles à sa lumière.

Exercice II : Inégalité d'Heisenberg (1926).

L'inégalité $\delta r \,.\, \delta p \geqslant \hbar/2$ est un outil très puissant pour calculer des ordres de grandeur et comprendre certains phénomènes purement quantiques. A part pour le premier exercice, on considèrera toujours une particule de position et d'impulsion en moyenne nulles, ce qui veut dire que l'incertitude δr (resp. δp) est du même ordre de grandeur que la position caractéristique r (resp. p), soit $r \,.\, p \gtrsim \hbar$. Nous utiliserons les valeurs suivantes des constantes : $m_e = 9.11\, 10^{-31}$ kg, $m_p = 1.67\, 10^{-27}$ kg, $q = 1.60\, 10^{-19}$ C, $\epsilon_0 = 8.85\, 10^{-12}$ F/m et $\hbar = 1.05\, 10^{-34}$ J.s

a) Justifier en une phrase pourquoi la recherche de l'infiniment petit requiert des énergies de plus en plus grandes (et donc de plus en plus d'argent !). Le LHC (*Large Hadron Collider*) construit au CERN pourra produire des jets de protons jusqu'à une énergie de 14 TeV (10^{12} eV) ; jusqu'à quelle échelle pourra-t'on descendre ?
Rappel : relation entre l'énergie E et l'impulsion p pour une particule relativiste de masse m : $E^2 = m^2c^4 + p^2c^2$.

b) Parce que c'est généralement une bonne approximation physique (et aussi pour des raisons de simplicité mathématique !), on suppose souvent qu'un système de masse m oscillant autour d'une certaine position moyenne subit un potentiel extérieur parabolique $\frac{1}{2}m\omega_0^2\, r^2$, comme un oscillateur harmonique. En déduire que l'énergie *totale* d'une particule subissant un tel potentiel ne peut pas s'annuler.

c) Une des plus étonnantes conséquences de ces inégalités est la stabilité de la matière ; en effet, l'un des problèmes du début du XX siècle était qu'un électron en rotation autour de son noyau (image classique de l'époque) devait perdre de l'énergie par rayonnement (*Bremsstrahlung*) et donc s'écrouler très rapidement sur celui-ci.

En considérant l'énergie totale de l'électron

$$E = \frac{p^2}{2m_e} \; - \; \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0\, r} \tag{1.4}$$

en déduire son énergie minimum, ainsi que la position et la vitesse correspondantes, puis faites l'application numérique dans le cas de l'atome d'hydrogène : est-ce-que ça vous rappelle quelque chose (mettre l'énergie en eV et la position en pm ou $\AA$ si ça peut vous aider) ? L'électron est-il relativiste ou non ? Et pour finir, d'où vient la stabilité de la matière ?

Exercice III : Effet photoélectrique.

L'énergie maximale des électrons éjectés d'une photocathode par une radiation de longueur d'onde $\lambda = 253.7$ nm (respectivement 589.0 nm) est 3.14 eV (respectivement 0.36 eV).

En déduire :

1) La valeur de la constante de Planck.

2) L'énergie minimale d'extraction des électrons.

3) La longueur d'onde maximale produisant un effet photoélectrique sur cette photocathode.

Exercice IV : Energie et longueur d'onde de de Broglie.

L'énergie cinétique moyenne d'une particule d'un gaz sans interaction est :

$$E = \frac{3}{2} k_b T$$

Calculer la longueur d'onde de *de Broglie* λ pour une particule (non relativiste, de masse m) d'un tel gaz à température T.

Pour estimer la distance moyenne entre deux particules voisines, on supposera qu'elles sont disposées sur un réseau cubique. Exprimer cette distance en fonction de volume V et du nombre de particules N. On considère que les effets quantiques sont significatifs si $\lambda \gg d$. Déterminer la gamme de température correspondante pour les gaz suivants :

1) Hélium IV liquide (masse volumique $0.125\,10^3$ kg/m^3).
2) Gaz d'électrons libres dans un métal (N/V $\approx 10^{30}$ m^{-3}).

3) Gaz d'électrons libres dans un semi-conducteur (N/V $\approx 10^{21}$ m^{-3}).

Exercice V : Modèle de Bohr (1913).

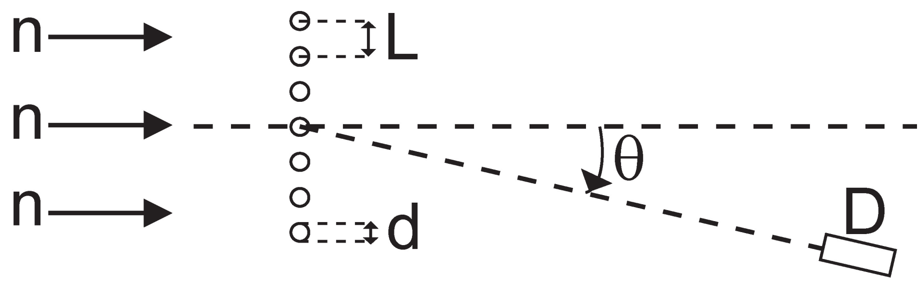
1) Calculer les niveaux d'énergie de l'hydrogène et la distance électron-proton correspondante, en supposant que l'électron se déplace sur une orbite circulaire dont la longueur est un multiple de la longueur d'onde de *de Broglie* (vérifier que cette condition respecte l'inégalité d'Heisenberg).
2) La différence entre deux niveaux d'énergie correspond à l'énergie des photons absorbés par l'hydrogène. En déduire la formule générale du spectre atomique de l'hydrogène, *i.e.* les valeurs possibles des fréquences qu'il absorbe.
   On l'appelle formule de Rydberg-Ritz, découverte expérimentalement en 1908, donc avant la naissance de la mécanique quantique.

Exercice VI : Accélérateur de particules.

Un accélerateur de particules produit un faisceau d'électron d'énergie égale à 1 GeV. Quelle est la longueur d'onde de *de Broglie* associée à ces électrons. En déduire la branche de physique pour laquelle est destiné cet accélerateur.
Rappel : relation entre l'énergie E et l'impulsion p pour une particule relativiste de masse m : $E^2 = m^2c^4 + p^2c^2$.

Exercice VII : Diffraction d'un faisceau de neutrons.

On envoie un jet de neutrons monocinétiques, d'énergie E, sur une chaîne linéaire de noyaux atomiques disposés régulièrement comme le montre la figure ci-après. On désigne par L la distance entre deux noyaux consécutifs et par d leur taille ($d \ll L$). On dispose au loin un détecteur de neutrons D dans une direction faisant un angle θ avec la direction des neutrons incidents.



1) Décrire qualitativement les phénomènes observés sur D lorsqu'on fait varier l'énergie E des neutrons incidents.

2) Le taux de comptage présente, en fonction de E, un maximum autour de $E = E_1$. Sachant qu'il n'y a pas d'autre maximum pour $E < E_1$, montrer que l'on peut en

déduire une détermination de L. Calculer L avec $\theta = 30°, E_1 = 1.3\ 10^{-20}$J.

3) À partir de quelles valeurs de E faudrait-il tenir compte de la dimension finie d des noyaux ?

Chapitre 2

Ondes de Matière

Liste des exercices

Sélection d'exercices tirée des examens

- Contrôle continu de novembre 2003 (7.1) : Modèle de l'effet Ramsauer-Townsend
- Contrôle continu de novembre 2004 (7.2) : Réfraction pour une particule quantique
- Contrôle continu de novembre 2006 (7.4) :
  - ⋆ Deuton
  - ⋆ Théorème de Bloch
- Contrôle continu de novembre 2007 (7.5) : Modèle de l'effet Ramsauer-Townsend
- Examen de seconde session Mai 2005 (8.3) :
  - ⋆ Etat fondamental de l'atome H
  - ⋆ Puits de potentiel asymétrique et noyau de deutérium

Exercice I : Dispersion, propagation.

1) l'équation de dispersion des ondes de vibration transverses dans une tige élastique (par exemple une branche de diapason, parallèle à Ox) s'écrit

$$\omega^2 = Ak^4$$

où A est une constante caractéristique de la section de la tige et du matériau. Quelle est l'équation de propagation du signal de déformation $y(x,t)$?

Comparer les fréquences émises par une branche de diapason et une corde vibrante de même fréquence fondamentale (avec conditions au bord fixes).

2) L'équation dite de "Sine-Gordon" décrit la propagation d'un signal $\theta(x,t)$ le long d'une chaîne unidimensionnelle de pendules pesants couplés par un fil de torsion. Elle s'écrit

$$\frac{\partial^2\theta}{\partial t^2} - c_0^2\frac{\partial^2\theta}{\partial x^2} + \omega_0^2 \sin\theta = 0$$

2.1) Peut on en général définir une relation de dispersion pour cette équation ? Pourquoi ?

2.2) Définir et calculer la relation de dispersion dans le cas de signaux petits.

2.3) L'équation admet (à vérifier) des solutions particulières de la forme

$$\theta(x,t) = 4\arctan\left[\exp\frac{\pm\omega_0(x-vt)}{\sqrt{c_0^2-v^2}}\right]$$

où $-c_0 < v < c_0$. Représenter la propagation d'une telle solution, et expliquer qualitativement pourquoi on peut observer une solution qui ne subit pas apparemment l'effet de la dispersion.

Exercice II : Déplacement d'un paquet d'ondes.

Question préliminaire : expliquer pourquoi une onde plane du type $e^{i(kx-wt)}$ (dont on pourra vérifier qu'elle est solution de l'équation de Schrödinger) ne peut pas représenter une particule libre. Justifier alors la nécessité d'introduire des paquets d'ondes. Le but de cet exercice va être d'étudier un paquet d'ondes à une dimension bien particulier : le paquet d'ondes gaussien.

Ce paquet d'ondes $\Psi(x,t)$ est formé par la superposition d'ondes monochromatiques :

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} g(k)e^{i[kx-\omega(k)t]}dk$$

où $\omega(k)$ est la pulsation d'une composante du paquet et $g(k)$ la pondération gaussienne centrée autour de k_0, donnée par :

$$g(k) = \left(\frac{a^2}{2\pi}\right)^{1/4} e^{-a^2(k-k_o)^2/4}$$

On se propose d'étudier l'évolution de ce paquet d'ondes au cours du temps.

1) On va tout d'abord s'intéresser au paquet d'ondes associé à un photon. Donner l'expression de la pulsation ω en fonction de k (relation de dispersion) pour un photon. Déterminer la vitesse de phase et la vitesse de groupe et montrer que le paquet d'ondes associé à un photon se déplace comme un objet rigide.

2) On s'intéresse maintenant au paquet d'ondes associé à une particule matérielle libre. Montrer que pour une particule libre non-relativiste de masse m, on a la loi de dispersion : $\omega(k) = \hbar k^2/2m$.

   Calculer la vitesse de phase et montrer que le paquet d'ondes gaussien se déforme au cours du temps. Calculer la vitesse de groupe et montrer que cette vitesse est celle qu'aurait la particule en mécanique classique. On va essayer de donner des ordres de grandeur de cet étalement.

3) Montrer que :

$$\Psi(x,0) = \left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{1/4} e^{ik_o x} e^{-x^2/a^2}$$

   Tracer la courbe $|\Psi(x,0)|^2$.

4) Pour une gaussienne $\exp(-x^2/b^2)$, on définit la largeur comme l'écart entre la position du maximum et le point où l'amplitude est divisée par $\sqrt{e}$.

   Calculer cette largeur. Calculer les largeurs Δx et Δk de $|\Psi(x,0)|^2$ et de $|g(k)|^2$. En déduire que $\Delta x \Delta k = 1/2$.

5) Après un calcul assez long, on trouve :

$$|\Psi(x,t)|^2 = \sqrt{\frac{2}{\pi a^2(1+4\hbar^2 t^2/m^2 a^4)}} \exp\left[\frac{-2a^2(x-\hbar k_o t/m)^2}{a^4+4\hbar^2 t^2/m^2}\right]$$

   5.1) Quelle est la vitesse de déplacement du maximum ?

5.2) Montrer qu'il y a étalement du paquet d'ondes. Calculer le temps au bout duquel l'étalement est double de sa valeur à $t = 0$ pour :

- une particule de masse 1 g s'étalant au départ sur 2 mm,

- un électron s'étalant au départ sur $1\mathring{A}$. Conclusion ?

Exercice III : Effet tunnel.

On considère une barrière de potentiel à une dimension, de largeur a et de hauteur U_0.
On envoie sur cette barrière, dans la direction des x croissants, un flux monocinétique de particules identiques d'énergie E comprise entre 0 et U_0.

1) Ecrire les solutions de l'équation de Schrödinger pour les différents domaines définis par ce potentiel.

2) Montrer que le coefficient τ de transmission en amplitude (complexe) de la barrière a pour expression :

$$\tau = \frac{4e^{-ika}}{\left(1+\frac{\alpha}{ik}\right)\left(1+\frac{ik}{\alpha}\right)e^{-\alpha a}+\left(1-\frac{\alpha}{ik}\right)\left(1-\frac{ik}{\alpha}\right)e^{\alpha a}}$$

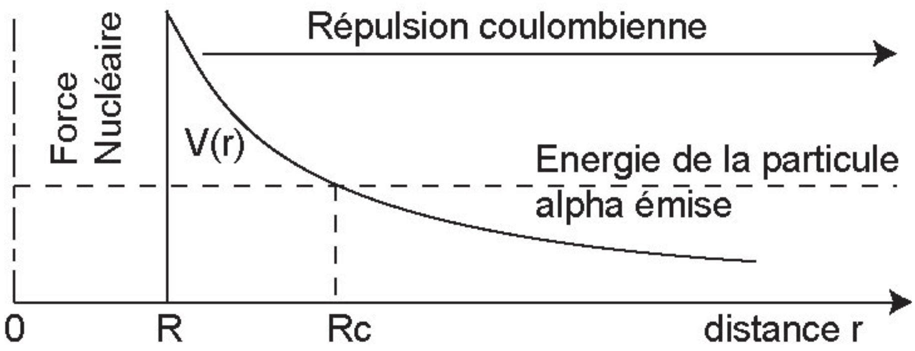
$$\text{avec} \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad \text{et} \quad \alpha = \frac{\sqrt{2m(U_0-E)}}{\hbar}$$

3) Calculer à partir de l'expression de τ le coefficient de transmission T du flux de particules dans l'approximation d'une barrière épaisse ($a \simeq 50/\alpha$). On exprimera T en fonction du rapport E/U_0 et du produit αa.

4) Quel est le résultat classique pour la valeur de T ? Comment le retrouve-t-on à partir du résultat quantique ?

Exercice IV : Radioactivité α

La radioactivité α, émission de particule α par un noyau, est observée pour un grand nombre de noyaux avec des périodes pouvant aller de $4,510^9$ années pour l'isotope de l'uranium $^{238}_{92}$U à 3 10^{-7}s pour l'isotope du polonium $^{212}_{84}$Po. Les particules α émises ont une énergie définie mais la valeur dépend du noyau émetteur (typiquement entre 4 - 10 MeV). L'expérience montre qu'il y a une forte corrélation entre la durée de vie d'un noyau et l'énergie de la particule α émise. Ce phénomène peut s'interpréter à partir de la transmission à travers une barrière de potentiel.



1) Potentiel vu par une particule α au voisinage d'un noyau

   Le potentiel vu par la particule α est modélisé de la manière suivante : A l'intérieur du noyau de rayon R le potentiel est dominé par la force nucléaire. A l'extérieur du noyau la force dominante est la répulsion électrostatique entre la particule α qui porte la charge +2e et le noyau résiduel de charge Z' qui reste après l'émission de la particule α.

   1.1) Donner l'expression du potentiel à l'extérieur du noyau.

   1.2) On considère une particule α émise avec l'énergie E. Dans la figure, on a introduit R_c la distance à laquelle la particule d'énergie E "quitte" la barrière. Comparer R_c et R dans le cas du radium ${}^{226}_{88}$Ra qui émet des particules α d'énergie 4,78 MeV. Le rayon d'un noyau est donné par la formule $R = r_0 A^{1/3}$ avec $r_0 = 1,2\ 10^{-15}$m.

2) Calcul du coefficient de transmission de la barrière

   2.1) Montrer que pour une barrière rectangle de largeur a et de hauteur V_0, la probabilité pour qu'une particule frappant la barrière la traverse peut s'écrire :

$$T \approx exp\left\{-2a\sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}\right\}$$

   Cette probabilité est appelée coefficient de transmission de la barrière.

   2.2) Montrer que le coefficient de transmission d'une barrière V(x) de forme quelconque peut s'écrire :

$$\ln T \approx -2\int_{-x'}^{x''} dx\sqrt{\frac{2m(V(x) - E)}{\hbar^2}}$$

   2.3) Montrer que le coefficient de transmission de la barrière coulombienne peut s'écrire :

$$\ln T \approx -2\int_{R}^{R_c} dr\sqrt{\frac{2m_\alpha(\frac{2e^2Z'}{r} - E)}{\hbar^2}}$$

2.4) En introduisant la variable d'intégration x = r/R mettre l'expression du coefficient de transmisssion sous la forme :

$$\ln T \approx -\frac{4e^2 Z'}{\hbar}\sqrt{\frac{2m_\alpha}{E}}\int_{x_c}^{1} dx\sqrt{\frac{1}{x}-1}$$

2.5) La quantité r/R$_c$ est en général assez petite. Montrer que l'on a :

$$\int_{x_c}^{1} dx\sqrt{\frac{1}{x}-1} = \int_0^1 dx\sqrt{\frac{1}{x}-1} - \int_0^{x_c} dx\sqrt{\frac{1}{x}-1} \approx \frac{\pi}{2} - 2\sqrt{\frac{R}{R_c}}$$

2.6) En prenant pour Z' et pour R les valeurs qui correspondent au cas du $^{226}_{88}$Ra, montrer que l'on obtient (E étant exprimée en MeV) :

$$\ln T \approx -\frac{148}{\sqrt{E}} + 32,5$$

3) Calcul de la période de l'émetteur α

Supposons qu'avant l'émission, la particule α rebondisse d'un coté et de l'autre du noyau. Soit τ_0 le temps entre deux collisions. A chaque collision, il y a une certaine chance pour que la particule traverse la barrière.

3.1) Exprimer la durée de vie τ de l'émetteur α en fonction de T et de τ_0

3.2) Exprimer τ_0 en fonction de E (on considèrera que la particule α se déplace à la même vitesse dans le noyau que hors du noyau. Faire l'application numérique dans le cas du radium.

3.3) Montrer que l'on a

$$\ln(\tau) = \frac{148}{\sqrt{E}} - 53,5$$

Le résultat du modèle est comparé aux données expérimentales dans le graphe présenté ci-dessous (l'ordonnée représente log(τ) et l'abscisse -1/$\sqrt{E}$). Commenter cette figure.

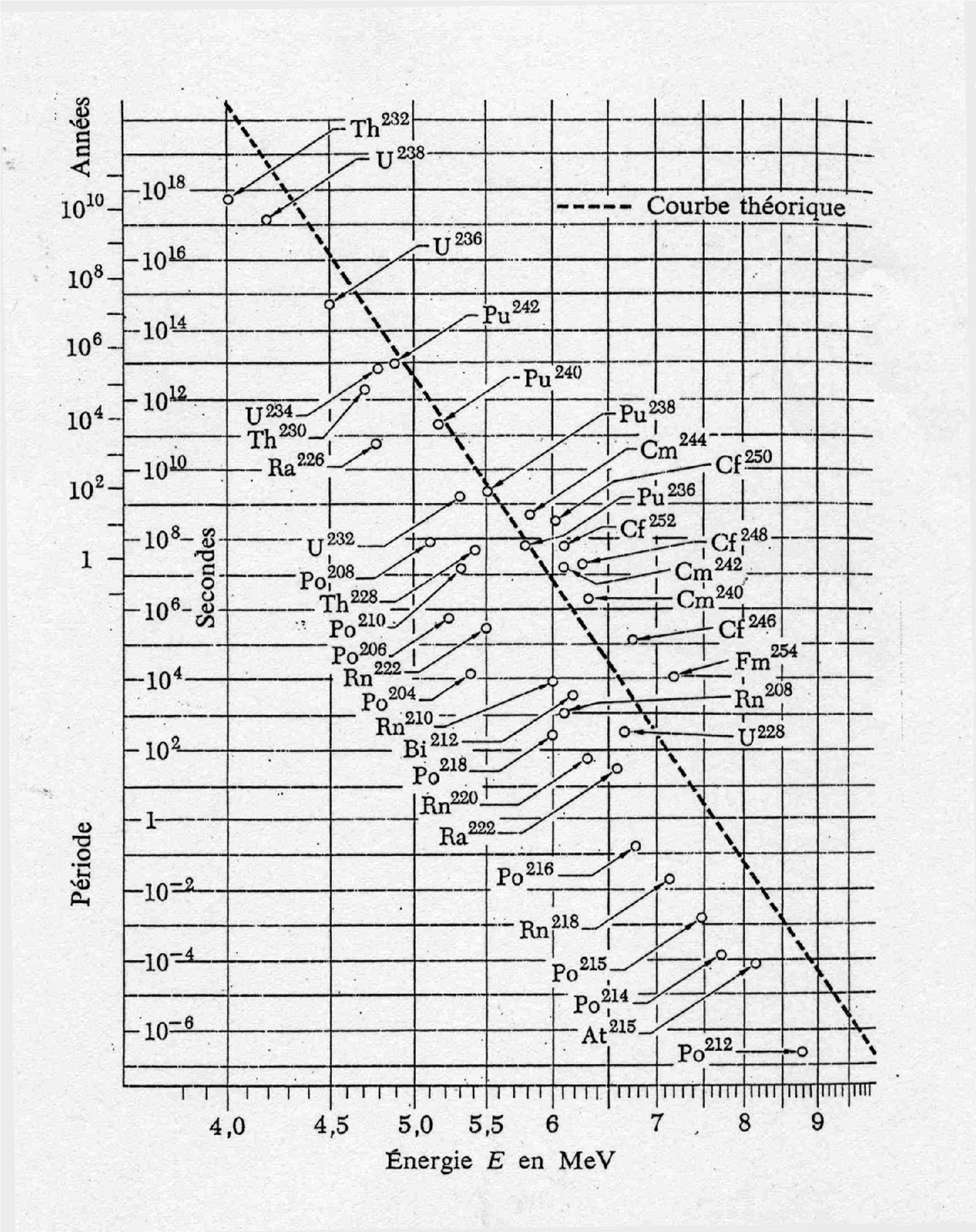


FIGURE 2.1 – Période des émetteurs α en fonction de l'énergie de la particule α émise

Exercice V : Le deuton.

Le deuton est composé d'un proton et d'un neutron. Son énergie de liaison est $E = -2.22$ MeV et il n'existe pas d'autres états liés. Dans le cas d'une fonction d'onde à symétrie sphérique, on peut modéliser l'interaction proton-neutron par un puits de potentiel à une dimension défini par :

$$\begin{cases} V(z) = +\infty \ \text{ pour } z < 0 \\ V(z) = -V_0 \ \text{ pour } 0 \leq z \leq R \qquad (V_0 > 0) \\ V(z) = 0 \ \text{ pour } z > R \end{cases}$$

La variable z représente la distance entre le proton et le neutron.

1) Ecrire l'équation aux valeurs propres de l'énergie.

2) On pose :

$$q = \frac{\sqrt{2\mu(E+V_0)}}{\hbar} \quad , \qquad k = \frac{\sqrt{-2\mu E}}{\hbar}$$

Montrer que les énergies des états liés sont solutions de l'équation :

$$qR \text{ cotan}(qR) = -kR$$

3) Etudier cette équation graphiquement en prenant $x = qR$ comme variable. Quelle est la condition pour que le système ait n états liés ?

4) Sachant que R ne peut excéder 1.5 Fm, en déduire une fourchette pour la solution x_0 de l'équation, puis pour la quantité V_0.

Exercice VI : Particule libre dans une boîte cubique

Pour confiner strictement une particule dans une boîte, il faut que le potentiel soit infini à l'extérieur de celle-ci.

$$\begin{cases} V(z) = -V_0 \ \text{ pour } 0 \leq x, y, z \leq L \\ V(z) = +\infty \ \text{ ailleurs} \end{cases}$$

Cela impose que la fonction d'onde, $\Psi(x, y, z)$, soit nulle sur les parois et à l'extérieur de la boîte, soit :

$$\begin{cases} \Psi(0,y,z) = \Psi(x,0,z) = \Psi(x,y,0) = 0 \\ \Psi(L,y,z) = \Psi(x,L,z) = \Psi(x,y,L) = 0 \\ \Psi(x,y,z) = 0 \text{à l'extérieur de la boîte} \end{cases}$$

1) En remarquant que l'hamiltonien du système est la somme de trois opérateurs hermitiques, on cherchera les états stationnaires à partir d'une fonction d'onde de la forme
$$\Psi(x,y,z) = \psi(x)\phi(y)\chi(z)$$
Montrer que le problème peut se ramener à trois problèmes distincts à une dimension.
2) Rappeler les résultats pour un puits carré à une dimension de largeur L centré en x=0 (puit carré symétrique) : Energie, expression de la fonction d'onde (normalisée), et nombre de zéros.
3) On remarquera que la boîte cubique n'est pas centrée sur l'origine. Pour utiliser les résultats du puits carré symétique à une dimension, on introduira une nouvelle variable X = x - L/2. Quelles sont les conséquences pour l'énergie, pour les fonctions d'ondes ?
4) Donner l'expression de l'énergie et des fonctions d'onde pour une particule libre dans la boîte cubique. Combien faut-il de nombres quantiques pour caractériser un état ? Quelless sont les valeurs de l'énergie des premiers niveaux, quelle est leur dégénérescence ?

Exercice VII : Potentiel en fonction *delta*.

1) On considère une particule de masse m, dont l'énergie potentielle s'écrit :
$$V(x) = -\alpha\delta(x) \qquad \text{où} \quad \alpha > 0$$
1.1) Intégrer l'équation aux valeurs propres du Hamiltonien entre $-\varepsilon$ et $+\varepsilon$. En faisant tendre ε vers 0, montrer que la dérivée de la fonction propre $\phi(x)$ subit, en $x = 0$, une discontinuité que l'on calculera en fonction de α, m et $\phi(0)$.
1.2) On suppose que l'énergie E est négative (état lié). On a alors :
$$\phi(x) = \begin{cases} A_1 e^{\rho x} + A_1' e^{-\rho x} & (x < 0) \\ B_1 e^{\rho x} + B_1' e^{-\rho x} & (x > 0) \end{cases}$$
où ρ est une constante à déterminer.

Donner les valeurs possibles de l'énergie.

2) On considère une particule de masse m, dont l'énergie potentielle s'écrit :

$$V(x) = -\alpha\delta(x) - \alpha\delta(x-l)$$

où $\alpha > 0$ et l est une longueur constante.

2.1) Calculer les états liés de la particule, en posant :

$$E = -\frac{\hbar^2\rho^2}{2m}$$

2.2) Montrer que les énergies possibles sont données par la relation :

$$e^{-\rho l} = \pm\left(1 - \frac{2\rho}{\mu}\right)$$

où μ est défini par $\mu = \dfrac{2m\alpha}{\hbar^2}$

2.3) Donner une résolution graphique de cette équation. Montrer qu'il existe un état fondamental symétrique et un état excité antisymétrique.

Exercice VIII : États quantiques d'une particule soumise au champ de pesanteur terrestre.

On se propose d'étudier les niveaux d'énergie d'une particule de masse m dans le champ de pesanteur terrestre : on suppose la particule se déplaçant verticalement suivant un axe Oz vers le haut et soumise au potentiel suivant :

$$\begin{cases} V(z) = +\infty \quad \text{pour } z < 0 \quad \text{(surface de la terre impénétrable)} \\ V(z) = mgz \quad \text{pour } z \geq 0 \quad \text{(potentiel classique de pesanteur)} \end{cases}$$

1) Ecrire l'équation de Schrödinger indépendante du temps qui détermine la fonction d'onde de cette particule.

2) À quelles conditions aux limites doivent satisfaire les fonctions d'onde ?

3) En posant $\xi = z/z_0$ et $\varepsilon = E/E_0$, transformer l'équation de Schrödinger en une équation aux variables sans dimension de la forme suivante :

$$-\frac{\mathrm{d}^2\phi}{\mathrm{d}\xi^2} + \xi\phi(\xi) = \varepsilon\phi(\xi)$$

Déterminer z_0 et E_0 en fonction des constantes du problème.

4) Par un changement de variable, montrer que cette équation se ramène à l'équation suivante :

$$\frac{\mathrm{d}^2 A}{\mathrm{d}u^2} - uA(u) = 0$$

5) Les solutions de cette équation sont des fonctions spéciales appelées fonctions d'Airy. Parmi celles-ci, la solution A(u) qui s'annule pour $u \to +\infty$ est représentée sur la figure ci-dessous :

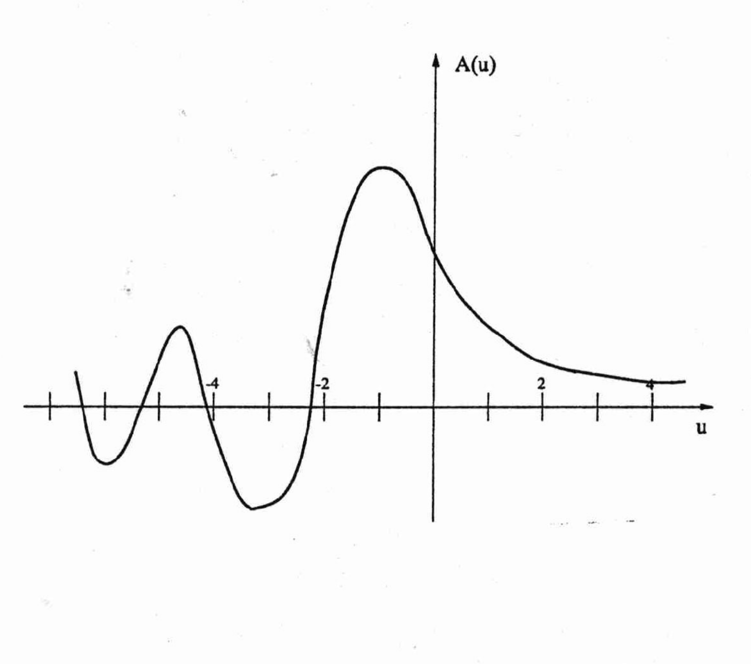


FIGURE 2.2 – Fonction d'Airy

Ses premiers zéros sont : $u_1 = -2,338, \quad u_2 = -4,088, \quad u_3 = -5,521.$

Quels sont les trois premiers niveaux d'énergie de la particule ? Comment se calculent les fonctions d'ondes correspondantes ?

6) Application numérique : on considère le cas d'un noyau d'hélium. Déterminer l'altitude où sa probabilité de présence est maximale quand il est dans l'état fondamental. Que peut-on prévoir pour une particule macroscopique ? (On donne : masse du proton $M = 1.6\ 10^{-27}$ kg)

Exercice IX : L'horloge à ammoniac.

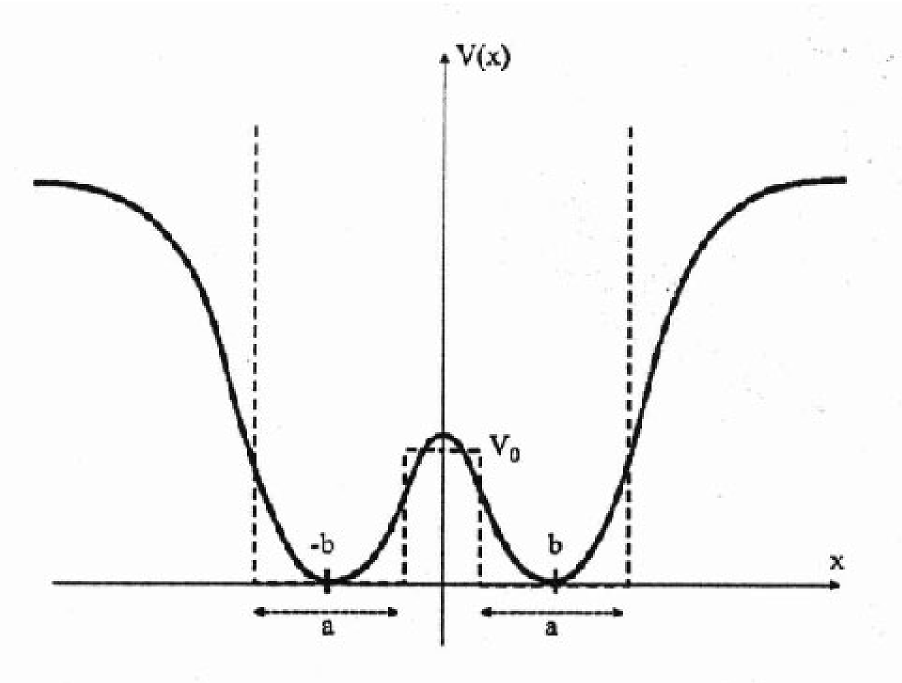
On étudie la molécule d'ammoniac au moyen d'un modèle simple. Dans cette molécule, les trois atomes d'hydrogène forment la base d'une pyramide dont l'atome d'azote occupe le sommet. Les caractéristiques du modèle choisi sont les suivantes :

i) L'atome d'azote, plus lourd que ses partenaires, est immobile.

ii) Les atomes d'hydrogène forment un triangle équilatéral de côté invariable dont l'axe passe toujours par l'atome d'azote.

iii) On néglige les effets dus à la rotation de la molécule.

A partir de ces hypothèses, l'étude de ce système peut se ramener à l'étude d'une particule fictive de masse réduite $m = \dfrac{3m_H m_N}{3m_H + m_N}$ soumise à l'action d'un potentiel à une seule dimension $V(x)$ qui a l'allure de la figure ci-dessous (courbe continue). La variable x représente la distance algébrique entre l'atome d'azote et le plan contenant les trois atomes d'hydrogène.



1) Qu'impose la symétrie du problème à la fonction $V(x)$? A quoi correspondent les deux minima de $V(x)$? Que traduit physiquement la hauteur de la barrière de potentiel en $x = 0$? Que traduit la croissance de $V(x)$ quand $|x| > b$?

2) Afin d'étudier quantitativement le système, on représente approximativement la forme du potentiel V par deux puits de largeur a centrés respectivement en $x = -b$ et $x = +b$ (ligne pointillée sur la figure). On suppose d'abord infinie la barrière de potentiel en $x = 0$.

   2.1) Calculer les fonctions propres et les valeurs propres du hamiltonien du système. Les niveaux d'énergie sont-ils dégénérés ?

   2.2) On donne $a = 0.113$ nm. Quel est le domaine spectroscopique associé aux transitions entre les premiers niveaux d'énergie de la molécule ?

3) On s'intéresse maintenant au cas d'une barrière de potentiel de hauteur finie V_0 en $x = 0$.

   3.1) En cherchant des fonctions propres du hamiltonien qui sont soit symétriques, soit antisymétriques, déterminer les relations exprimant la quantification de l'énergie.

   3.2) La dégénérescence qui apparaissait dans le cas d'une barrière infinie est-elle levée ?

   3.3) Vérifier que l'on retrouve bien les solutions précédentes dans le cas d'une barrière infinie.

   3.4) Avec $V_0 = 0.02$ eV et b=0.12 nm, faire une résolution numérique ou graphique des équations précédentes et déterminer le domaine spectroscopique associé aux transitions entre les niveaux symétriques et antisymétriques dans les cas n=1 et n=2.

4) **Cette partie devra être traitée après l'opérateur d'évolution.**

   4.1) A basse température, on peut réduire l'ensemble des états accessibles aux deux premiers états symétrique et antisymétrique. Discuter qualitativement.

   4.2) Tracer les amplitudes de densité de probabilité des solutions symétrique et antisymétrique. Comment les interprète-t-on ?

   4.3) Peut-on trouver des paquets d'ondes (superposition des fonctions symétrique et antisymétrique ici) qui signifieraient grossièrement : " le plan d'hydrogène est à gauche de l'azote " et " le plan d'hydrogène est à droite de l'azote " ?

   4.4) Supposons qu'à un instant initial t=0, le plan d'hydrogène soit à droite de l'azote. Calculer l'évolution temporelle de cet état. On observe l'apparition d'une fréquence ν. Cet état est-il stationnaire ?

   4.5) Application numérique : calculer ν. A quelle gamme spectrale correspond la fréquence ν.

Exercice X : Opérateurs de translation et de rotation.

1) Soit un système dans un espace à une dimension avec une fonction d'onde $\Phi(x)$ développable en série de Taylor. On considère l'opérateur $\hat{T}(x_0) = e^{-ix_0\hat{p}/\hbar}$ où x_0 est une longueur et $\hat{p}$ est l'opérateur impulsion. Montrer que $\hat{T}(x_0)$ est l'opérateur de translation le long de l'axe x, c'est à dire que :

$$\hat{T}(x_0)\Phi(x) = \Phi(x - x_0).$$

N.B. On pourra utiliser le développement $e^{i\hat{u}} = \sum_{n=0}^{\infty}(i\hat{u})^n/n!$

2) On considère maintenant un problème à deux dimensions dans un plan xy et on introduit la composante selon z de l'opérateur moment cinétique

$$\hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\theta},$$

où les coordonnées polaires r, θ sont définies par $r = (x^2+y^2)^{1/2}$ et $\theta =$arctan(y/x). Montrez que l'opérateur $\hat{R}(\alpha) = e^{-i\alpha\hat{L}_z/\hbar}$, où α est sans dimension, est tel que :

$$\hat{R}(\alpha)\Phi(r,\theta) = \Phi(r, \theta - \alpha).$$

Exercice XI : Evolution d'une particule dans une boîte

On considère une particule de masse m, à une dimension, dans un puits de potentiel infini :

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

Les états stationnaires sont décrits par les fonctions :

$$\phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \qquad \text{associées à} \qquad E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

1) A $t = 0$, la particule est dans l'état d'énergie $E_1 = \dfrac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$.

1.1) Quelle est la fonction d'onde à l'instant $t > 0$?

1.2) Quels sont les résultats possibles d'une mesure de l'énergie à t ?

2) À $t = 0$, la particule est dans l'état :

$$\psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{a}}\left(\sin\frac{\pi x}{a} + \sin\frac{3\pi x}{a}\right) \qquad \text{pour} \qquad 0 \leq x \leq a$$

2.1) Quelle est la fonction d'onde à l'instant $t > 0$? Quels sont les résultats possibles d'une mesure de l'énergie à t et avec quelles probabilités ?

2.2) On mesure effectivement l'énergie à l'instant t et on trouve $E_3 = \dfrac{9\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$. Quel résultat trouvera-t-on lors d'une mesure à un instant $t_1 > t$?

3) A $t = 0$, la particule est décrite par :

$$\psi(x) = \begin{cases} Ax(a-x) & \text{si } 0 \leq x \leq a \\ \\ 0 & \text{ailleurs} \end{cases}$$

3.1) Quelle est la probabilité de trouver l'énergie E_1 lors d'une mesure à $t = 0$?

3.2) Quelle serait la valeur moyenne des mesures effectuées sur un grand nombre de systèmes identiques, tous dans l'état $\psi(x)$?

4) On suppose que la particule dans le puits se trouve dans l'état stationnaire d'énergie E_n.

4.1) Quelle est la probabilité pour qu'une mesure de l'impulsion P donne un résultat entre p et $p + \mathrm{d}p$?

4.2) Donner la valeur moyenne de l'impulsion dans cet état et l'écart quadratique moyen Δp.

5) Si, à $t = 0$, la particule est dans l'état non stationnaire : $\psi(x) = \dfrac{1}{\sqrt{(2)}}(\phi_1(x) + \phi_2(x))$, quelle est l'évolution dans le temps de la valeur moyenne de l'impulsion ?

Chapitre 3

Formalisme général

Liste des exercices

Sélection d'exercices tirée des examens

- Contrôle continu de novembre 2006 (7.4) : Oscillateur harmonique
- Contrôle continu de novembre 2007 (7.5) : Système à trois états
- Examen de janvier 2004 (8.1) : système à 2 niveaux (Question de cours)
- Examen de seconde session Mai 2005 (8.3) : Molécule CO_2
- Examen de janvier 2008 (8.6) : Oscillateur harmonique à une dimension (Question de Cours)

Exercice I : Soient A, B deux opérateurs hermitiques. A quelle condition ce produit est-il hermitique ?

Exercice II : On suppose que $|i\rangle$ et $|j\rangle$ sont des kets propres d'un opérateur hermitique A. À quelle condition peut-on conclure que $|i\rangle + |j\rangle$ est aussi un ket propre de A ?

Exercice III : Projecteurs

1) Montrer qu'un projecteur $P_a = |a\rangle\langle a|$ est un opérateur hermitique. ($|a\rangle$ est un ket normé)

2) Montrer que $P_a^2 = P_a$.

3) On considère un ket quelconque $|b\rangle$. Montrer que $P_a|b\rangle$ est un vecteur propre de P_a et déterminer la valeur propre correspondante.

4) Trouver les valeurs propres de P_a.

Exercice IV : On appelle $|\Phi_n\rangle$ les kets propres (non dégénérés) d'un opérateur hermitique H et E_n les valeurs propres correspondantes (H est par exemple l'opérateur hamiltonien d'un système physique). On définit l'opérateur $U(m,n) = |\Phi_m\rangle\langle\Phi_n|$.

1) Calculer l'adjoint $U^\dagger(m,n)$ de $U(m,n)$.

2) Calculer le commutateur $[H, U(m,n)]$.

3) Démontrer la relation $U(m,n)U^\dagger(p,q) = \delta_{n,q}\, U(m,p)$

Exercice V : Soit A un opérateur hermitique dont les valeurs propres, notées a_i, sont connues. Donner l'expression sur la base propre de A de :

i) A^2

ii) L'opérateur $\exp[if(A)]$ où $f(A)$ est un polynôme en A. (L'exponentielle d'un opérateur est définie à partir du développement en série de l'exponentielle $\exp(x) = 1 + x + x^2/2! + ...$)

Exercice VI : L'opérateur hamiltonien d'un système à deux états est donné par :

$$H = a(\ |1\rangle\langle 1| - |2\rangle\langle 2| + |1\rangle\langle 2| + |2\rangle\langle 1|\ )$$

où a est un nombre qui a les dimensions d'une énergie et $|1\rangle$ et $|2\rangle$ sont deux kets orthonormés.

Trouver les énergies propres de ce système et les kets propres correspondants. On pourra utiliser une représentation de l'espace des états pour faire le calcul.

Exercice VII : On considère un système physique dont l'espace des états à 3 dimensions est rapporté à une base ($|\phi_1\rangle$, $|\phi_2\rangle$, $|\phi_3\rangle$). Dans cette base, l'opérateur hamiltonien H du système et un opérateur A sont représentés par :

$$H = \hbar\omega_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \qquad A = a \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

où ω_0 et a sont des constantes positives.

1) H et A sont-ils hermitiques ? Commutent-ils ?
2) Le système physique est à l'instant $t = 0$ dans l'état :

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\phi_1\rangle + \frac{1}{2}|\phi_2\rangle + \frac{1}{2}|\phi_3\rangle$$

On mesure l'énergie à cet instant. Quelles valeurs peut-on trouver et avec quelles probabilités ? Calculer $\langle H\rangle$ et l'écart quadratique moyen ΔH.

3) Le système étant toujours dans l'état $|\psi\rangle$, on mesure A. Quelle est la valeur de $\langle A\rangle$? Quels résultats peut-on trouver et avec quelles probabilités ? Quel est le ket d'état du système immédiatement après la mesure ?
4) On mesure H et on trouve $2\hbar\omega_0$, puis on mesure A et on trouve a. Quel est l'état du système après ces deux mesures ? On mesure à nouveau H. Combien trouve-t-on ?

Exercice VIII : Soit un système physique dont l'espace des états est à 4 dimensions. Soient deux opérateurs agissant dans cet espace et dont les représentations matricielles sont :

$$A = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -a & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -a & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a \end{pmatrix} \qquad B = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & b \\ 0 & 0 & ib & 0 \\ 0 & -ib & 0 & 0 \\ b & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

où a et b sont des constantes réelles.

1) A et B sont-ils hermitiques ? Commutent-ils ?
2) Déterminer les valeurs propres de A.
3) Déterminer les valeurs propres et kets propres de B (sans diagonaliser une matrice 4×4 !)
4) Donner une base commune à A et B. A et B forment-ils un "ensemble complet d'observables qui commutent" (ECOC), c'est-à-dire leur base propre commune est-elle déterminée de manière unique ?

Exercice IX : Molécule de benzène

Une molécule est formée de 6 atomes $A_1,\ A_2,\ ...,\ A_6$ formant un hexagone régulier. On considère un électron qui peut être localisé sur le $\text{n}^{\text{ième}}$ atome ($n = 1,\ 2,\ ...,\ 6$). L'état correspondant est alors noté $|\phi_n\rangle$. On se limitera pour les états de l'électron à l'espace engendré par les $|\phi_n\rangle$, qui sont supposés orthonormés.

1) On définit l'opérateur R par les relations :

$$R|\phi_1\rangle = |\phi_2\rangle \quad R|\phi_2\rangle = |\phi_3\rangle \quad ... \quad R|\phi_6\rangle = |\phi_1\rangle$$

Trouver les valeurs propres et les états propres de R. Montrer que les vecteurs propres de R forment une base orthonormée de l'espace des états.

2) Lorsqu'on néglige la possibilité pour l'électron de passer d'un site à l'autre, son énergie est décrite par l'hamiltonien H_0 qui admet pour états propres les états $|\phi_n\rangle$, avec la même valeur propre E_0. On décrit la possibilité pour l'électron de sauter d'un atome à l'autre en ajoutant une perturbation W à l'hamiltonien H_0. W est définie par :

$$\begin{array}{rcl} W(|\phi_1\rangle) & = & -a|\phi_6\rangle - a|\phi_2\rangle \\ W(|\phi_2\rangle) & = & -a|\phi_1\rangle - a|\phi_3\rangle \\ & ... & \\ W(|\phi_6\rangle) & = & -a|\phi_5\rangle - a|\phi_1\rangle \end{array}$$

Montrer que R commute avec l'hamiltonien total $H = H_0 + W$. En déduire les états propres et les valeurs propres de H. Dans les états propres, l'électron est-il localisé ? Appliquer ces considérations à la molécule de benzène.

Exercice X : Propriétés d'un opérateur unitaire

On appelle opérateur unitaire U un opérateur tel que $U^\dagger U = UU^\dagger = 1$

1) Montrer qu'un opérateur unitaire conserve le produit scalaire, c'est-à-dire que le produit scalaire de $U|\alpha\rangle$ par $U|\beta\rangle$ est égal au produit scalaire de $|\alpha\rangle$ par $|\beta\rangle$.
2) Montrer que les valeurs propres d'un opérateur unitaire sont de la forme $\lambda = \exp(i\theta)$ où θ est un nombre réel.
3) Montrer que, dans la représentation matricielle d'un opérateur unitaire sur une base, la somme des produits des éléments d'une colonne i par les conjugués des éléments correspondants d'une colonne j est égale à δ_{ij}.
4) Soit $\{\ |u_i\rangle\ \}$ une base orthonormée de l'espace des états. On pose $|v_i\rangle = U|u_i\rangle$. Montrer que les $|v_i\rangle$ forment une base orthonormée de l'espace des états.

Exercice XI : Théorème du viriel

1) Soit $F(z)$ une fonction de la variable z, développable en série entière dans un domaine donné :

$$F(z) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n z^n$$

Par définition, la fonction correspondante de l'opérateur A est l'opérateur $F(A)$, défini par une série ayant les mêmes coefficients :

$$F(A) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n A^n$$

1.1) Déterminer les commutateurs $[X, F(P_X)]$ et $[P_X, F(X)]$.

1.2) Si $|\psi_a\rangle$ est un vecteur propre de A avec la valeur propre a, montrer que $|\psi_a\rangle$ est vecteur propre de $F(A)$ et déterminer la valeur propre correspondante.

2) On considère, dans un problème à une dimension, le hamiltonien H d'une particule, défini par :

$$H = \frac{P_X^2}{2m} + V(X)$$

Les vecteurs propres de H sont désignés par $|\phi_n\rangle$, tels que $H|\phi_n\rangle = E_n|\phi_n\rangle$.

2.1) Montrer que :

$$\langle\phi_n|P_X|\phi_{n'}\rangle = \alpha\langle\phi_n|X|\phi_{n'}\rangle$$

où α est un coefficient qui ne dépend de E_n et $E_{n'}$ que par l'intermédiaire de leur différence.
Pour la démonstration on pourra considérer le commutateur $[X, H]$.

2.2) Vérifier que si $\{|\phi_n\rangle\}$ est une base de l'espace des états, alors $\sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n|$ est égal à l'opérateur identité. Cette relation est appelée relation de fermeture de la base.

2.3) En utilisant cette relation de fermeture, déduire l'égalité :

$$\frac{m^2}{\hbar^2}\sum_{n'}(E_n - E_{n'})^2|\langle\phi_n|X|\phi_{n'}\rangle|^2 \quad = \quad \langle\phi_n|P_X^2|\phi_n\rangle$$

3) Nous allons maintenant établir un équivalent quantique du théorème du viriel.

3.1) Soit A un opérateur quelconque. Montrer que :

$$\langle\phi_n|[A,H]|\phi_n\rangle = 0$$

3.2) Calculer en fonction de P_X, X et $V(X)$ les commutateurs : $[H,P_X]$, $[H,X]$ et $[H,XP_X]$.

3.3) Montrer que $\langle\phi_n|P_X|\phi_n\rangle = 0$.

3.4) Établir une relation entre :

$$E_c = \langle\phi_n|\frac{P_X^2}{2m}|\phi_n\rangle \qquad \text{et} \qquad \langle\phi_n|X.\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}X}|\phi_n\rangle$$

Relier alors E_c à la valeur moyenne de l'énergie potentielle dans l'état $|\phi_n\rangle$ lorsque le potentiel V est de la forme :

$$V(X) = V_0X^k \qquad \text{avec} \quad k = 2,\ 4,\ 6,\ ... \quad \text{et} \quad V_0 > 0$$

Exercice XII : Formule de Glauber

1) Soient A et B deux opérateurs. Montrer que si $[A,[A,B]] = 0$ alors pour tout nombre λ :

$$[e^{\lambda A}, B] = \lambda[A,B]e^{\lambda A}$$

2) Montrer que si $[A,[A,B]] = [B,[A,B]] = 0$ on a :

$$e^A\,e^B = e^{A+B+[A,B]/2}$$

Pour cela on cherchera une équation différentielle pour la fonction :

$$f(\lambda) = e^{\lambda A}\,e^{\lambda B}$$

Exercice XIII : Théorème de Ehrenfest.

1) *Préliminaire.* Soient une quantité physique A (qui peut dépendre explicitement du temps) et sa valeur moyenne $\langle a\rangle = \langle\Psi|A|\Psi\rangle$. Démontrer que l'évolution dans le temps de $\langle a\rangle$ est relié à l'hamiltonien $\hat{H}$ par la relation :

$$\frac{d}{dt}\langle a\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle\Psi|\left[\hat{A},\hat{H}\right]|\Psi\rangle + \langle\Psi|\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}|\Psi\rangle.$$

2) *Application aux observables* $\mathbf{R}$ *et* $\mathbf{P}$. Considérons une particule plongée dans un champ scalaire $V(\mathbf{r})$ avec son hamiltonien :

$$H = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V(\mathbf{R}).$$

Appliquer la relation précédente aux observables $\mathbf{R}$ et $\mathbf{P}$ pour trouver deux équations dont la forme rappelle les équations classiques du mouvement.

Exercice XIV : Théorème de Hellmann-Feynman.

Considérons un hamiltonien $H(\lambda)$ dépendant d'un paramètre réel λ. Soit $|\Psi(\lambda)\rangle$ un vecteur propre normé de $H(\lambda)$:

$$H(\lambda)|\Psi(\lambda)\rangle = E(\lambda)|\Psi(\lambda)\rangle$$

$$\langle\Psi(\lambda)|\Psi(\lambda)\rangle = 1.$$

Démontrer que

$$\frac{d}{d\lambda}E(\lambda) = \langle\Psi(\lambda)|\frac{d}{d\lambda}H(\lambda)|\Psi(\lambda)\rangle.$$

Exercice XV : Opérateur d'évolution.

1) On considère un système dont l'hamiltonien $\hat{H}$ est indépendant du temps. Montrer que le vecteur d'état à l'instant t, noté $|\Psi(t)\rangle$, se déduit du vecteur d'état à l'instant initial $|\Psi(t_0)\rangle$ par la formule :

$$|\Psi(t)\rangle = \hat{U}(t-t_0)|\Psi(t_0)\rangle \qquad \text{avec} \qquad \hat{U}(\tau) = e^{-i\hat{H}\tau/\hbar}.$$

On vérifiera que $|\Psi(t)\rangle$ *est solution de l'équation de Schrodinger.*

2) Soient $|\Psi_1\rangle$ et $|\Psi_2\rangle$ deux vecteurs propres normalisés d'un hamiltonien $\hat{H}$ correspondant à deux valeurs propres différentes E_1 et E_2. On pose $E_1 - E_2 = \hbar\omega$.

2.1) On considère le vecteur d'état $|\Psi_-\rangle = |\Psi_1\rangle - |\Psi_2\rangle$. Normer $|\Psi_-\rangle$ et calculer la valeur moyenne $\langle E\rangle$ de l'énergie pour cet état, ainsi que l'écart quadratique moyen ΔE.

2.2) On suppose qu'à $t = 0$ le système se trouve dans l'état $|\Psi(t=0)\rangle = |\Psi_-\rangle$. Quel est le vecteur d'état $|\Psi(t)\rangle$ du système à l'instant t ?

2.3) On considère l'observable $\hat{A}$ possédant les propriétés suivantes :

$$\hat{A}|\Psi_1\rangle = |\Psi_2\rangle \qquad \hat{A}|\Psi_2\rangle = |\Psi_1\rangle.$$

Quels sont les vecteurs propres et les valeurs propres de $\hat{A}$?

2.4) On suppose qu'à l'instant $t = 0$ le système se trouve dans l'état $|\Psi_-\rangle$ relatif à la valeur propre $a = -1$. Quelle est la probabilité lors d'une mesure de la grandeur A effectuée à l'instant t de trouver la valeur $a = -1$?

Exercice XVI : Oscillateur harmonique.

Cet exercice propose d'effectuer les calculs permettant d'établir le spectre d'énergie d'un oscillateur harmonique d'hamiltonien

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{P}_x^2 + \frac{1}{2}m\omega 2\hat{X}^2 \ . \tag{3.1}$$

1) On définit les opérateurs

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\Big(\hat{X} + i\frac{\hat{P}_x}{m\omega}\Big) \tag{3.2}$$

$$\hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\Big(\hat{X} - i\frac{\hat{P}_x}{m\omega}\Big) \tag{3.3}$$

Vérifier que $\hat{a}^\dagger$ est bien l'opérateur adjoint de $\hat{a}$ et donc que ces deux opérateurs ne sont pas hermitiques.
Montrer que $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$

2) On définit l'opérateur $\hat{N} = \hat{a}^\dagger\hat{a}$. Vérifier que $\hat{N}$ est hermitique et que l'hamiltonien peut s'écrire

$$\hat{H} = \hbar\omega\big(\hat{N} + \frac{1}{2}\big) \ . \tag{3.4}$$

Si on note n les valeurs propres de l'opérateur $\hat{N}$, les valeurs propres de $\hat{H}$ s'écriront donc

$$E_n = \hbar\omega\big(n + \frac{1}{2}\big) \ , \tag{3.5}$$

et les opérateurs $\hat{N}$ et $\hat{H}$ auront les mêmes kets propres. On notera $|n\rangle$ le ket propre correspondant à la valeur propre n de $\hat{N}$.

A ce niveau, la seule information dont on dispose sur n est qu'il est réel puisque l'opérateur $\hat{N}$ est hermitique. On se propose de montrer que n est entier positif ou nul. Il faut d'abord établir des résultats intermédiaires.

3) Signification des opérateurs $\hat{a}$ et $\hat{a}^\dagger$.

3.1) Montrer que

$$[\hat{N}, \hat{a}] = -\hat{a} \qquad \text{et} \qquad [\hat{N}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger \tag{3.6}$$

3.2) Montrer que les opérateurs $\hat{a}^\dagger$ et $\hat{a}$ permettent de "monter" ou de "descendre" dans les valeurs propres de $\hat{N}$ (ou $\hat{H}$) en transformant un ket propre associé à la valeur propre n en un ket propre associé à la valeur propre $n \pm 1$

$$\hat{N}\big(\hat{a}^\dagger|n\rangle\big) = (n+1)\, \hat{a}^\dagger|n\rangle \quad \text{et} \quad \hat{N}\big(\hat{a}|n\rangle\big) = (n-1)\, \hat{a}|n\rangle \ . \tag{3.7}$$

A chaque opération l'énergie de l'oscillateur augmente (ou diminue) de la quantité $\hbar\omega$. Ainsi $\hbar\omega$ apparaît comme le *quantum d'énergie* que l'oscillateur peut gagner ou perdre.

4)

4.1) En calculant $\langle n|\hat{N}|n\rangle$ et en pensant à l'expression de $\hat{N}$, montrer que

$$n \geq 0 \ . \tag{3.8}$$

4.2) Les kets propres de l'hamiltonien $\hat{H}$ sont non dégénérés (résultat général pour les états localisés d'une particule mobile à une dimension). En calculant $\big\|\hat{a}|n\rangle\big\|$, montrer que

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}\ |n-1\rangle \tag{3.9}$$

$|n-1\rangle$ est le ket propre de $\hat{N}$ associé à la valeur propre $n-1$.
Démontrer de même que

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}\ |n+1\rangle \ . \tag{3.10}$$

On notera que l'obtention de l'équation (3.9) nécessite le choix d'un facteur de phase. Un fois que l'on a choisi le facteur de phase liant les kets associés aux valeurs propres n aux kets associés aux valeurs propres inférieures d'une unité, on ne doit plus faire un choix arbitraire de facteur de phase quand on passe de n à $n+1$. Il faut donc établir la relation (3.10) par calcul direct sans passer par le calcul d'une norme.

4.3) On applique l'opérateur de descente $\hat{a}$ de manière itérative à un ket $|n\rangle$. Montrer que si n est un nombre entier le processus s'arrête au bout d'un certain nombre d'applications de $\hat{a}$ alors que si n est non entier on parvient à un résultat en contradiction avec la condition (3.8).
On en déduit donc que n doit être un entier positif ou nul. L'état fondamental est donc le ket $|0\rangle$ (attention ce n'est pas le ket nul !) et les énergies des états stationnaires de l'oscillateur harmonique sont

$$E_n = \big(n + \frac{1}{2}\big)\hbar\omega \quad \text{avec} \quad n = 0, 1, 2, 3, \ldots \tag{3.11}$$

5) On peut obtenir tous les kets propres de l'hamiltonien à partir du ket propre de l'état fondamental. Montrer que le ket normé correspondant à l'énergie $\big(n+\frac{1}{2}\big)\hbar\omega$ est

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\big(\hat{a}^\dagger\big)^n\ |0\rangle \ . \tag{3.12}$$

6) Donner les expressions des éléments matriciels des opérateurs $\hat{X}$ et $\hat{P}_x$ dans la base $|n\rangle$ (base propre de l'hamiltonien).

7) Fonctions d'onde de l'oscillateur harmonique.
La résolution directe de l'équation de Schrödinger en terme de fonctions d'onde n'est pas immédiate car on obtient une équation du second ordre à coefficients non constants (elle est présentée dans le livre de Mécanique Quantique de Cohen-Tannoudji, Diu, Laloe). Il y a une méthode beaucoup plus simple pour obtenir les fonctions d'onde de l'oscillateur harmonique. Elle consiste à chercher d'abord celle de l'état fondamental puis à former les autres par application de l'opérateur de montée $\hat{a}^\dagger$.

7.1) L'équation donnant le ket propre de l'état fondamental est

$$\hat{a}|0\rangle = 0 \; . \tag{3.13}$$

Compte tenu de l'expression de $\hat{a}$ en fonction de $\hat{X}$ et $\hat{P}_x$, écrire cette équation en terme de fonctions d'onde, c'est-à-dire l'équation différentielle donnant la fonction $\psi_0(x)$, représentation x de $|0\rangle$. C'est une équation différentielle du 1er ordre. Montrer que sa solution est

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}x^2\right) \; . \tag{3.14}$$

7.2) On peut obtenir les autres fonctions d'onde par action de l'opérateur de montée. Montrer par exemple que la fonction d'onde du 1er état excité est

$$\psi_1(x) = \left[\frac{4}{\pi}\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^3\right]^{1/4} x \exp\left(-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}x^2\right) \tag{3.15}$$

en écrivant en termes de fonctions d'onde la relation $|1\rangle = \hat{a}^\dagger|0\rangle$.
On notera que, tandis que $\psi_0(x)$ n'avait pas de racine et était paire, $\psi_1(x)$ a une racine et est impaire. On retrouve un résultat général pour les états liés d'une particule à une dimension dans tout potentiel qui présente cette symétrie de parité : les fonctions d'ondes sont alternativement paires et impaires (l'état fondamental étant pair) et le nombre de racines correspond au degré d'excitation.

Exercice XVII : États quasi-classiques de l'oscillateur harmonique.
On considère un oscillateur harmonique d'hamiltonien :

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

On se propose d'étudier les états propres $|\alpha\rangle$ de l'opérateur annihilation $a = \sqrt{m\omega/2\hbar}\ [X + iP/(m\omega)]$, tels que $a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$.

1) On décompose $|\alpha\rangle$ sur la base $|n\rangle$ des états stationnaires de H,

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n(\alpha)|n\rangle.$$

En utilisant la relation $a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$, montrer que, pour toute valeur de α complexe, il existe une relation de récurrence simple entre les $c_n(\alpha)$ permettant de les calculer tous à partir de $c_o(\alpha)$.

En déduire que tout nombre complexe α est valeur propre de a associée à un état propre $|\alpha\rangle$. Calculer les $c_n(\alpha)$ correspondants pour que $|\alpha\rangle$ soit normé.

2) Quelle est la probabilité de trouver $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$ lors de la mesure de l'énergie de l'oscillateur s'il est dans l'état $|\alpha\rangle$?

3) Calculer la valeur moyenne de l'énergie $\langle E\rangle$, $\langle E^2\rangle$ et l'écart quadratique ΔE dans l'état $|\alpha\rangle$. On pourra écrire l'hamiltonien sous la forme $H = \hbar\omega(N + \frac{1}{2})$ où $N = a^\dagger a$. Vérifier que la valeur relative de l'énergie est d'autant mieux définie que $|\alpha|$ est grand.

4) Calculer $\langle x\rangle$, Δx, $\langle p\rangle$ et Δp dans l'état $|\alpha\rangle$. Que vaut dans cet état $\Delta x \times \Delta p$? Que pensez-vous de ce résultat ?

5) On suppose qu'à l'instant t_o, l'oscillateur est dans un état $|\alpha\rangle$ avec $\alpha(t_o) = \alpha_o \exp(i\phi)$. Montrer qu'à un instant ultérieur t, il est dans un autre état propre de l'opérateur a, $|\alpha(t)\rangle$, et donner la valeur de $\alpha(t)$.

6) Que valent, à l'instant t, $\langle x\rangle$, Δx, $\langle p\rangle$ et Δp ?
Pourquoi, d'après vous, appelle-t-on les états $|\alpha\rangle$, pour $\alpha \gg 1$, états "quasi-classiques" ?

Exercice XVIII : Etats stationnaires d'un électron confiné dans l'espace.

Pour confiner un électron dans l'espace, on doit utiliser simultanément un champ électrostatique et un champ magnétique car le champ électrostatique, qui obéit à l'équation de Laplace, ne peut pas avoir d'extrémum. Une méthode consiste à utiliser un potentiel quadrupolaire

$$V(x, y, z) = C(x^2 + y^2 - 2z^2)$$

(où C est une constante positive) qui tend à confiner la particule selon z. Le confinement latéral est obtenu en ajoutant un champ magnétique uniforme $\overrightarrow{B_0}$ parallèle à Oz.

1) Vérifier que le champ $\overrightarrow{B_0}$ peut être obtenu à partir du potentiel vecteur

$$\overrightarrow{A} = \frac{1}{2}\,\overrightarrow{B_0} \wedge \overrightarrow{r}\ .$$

2) Si l'on ne tient pas compte du spin de l'électron (qui conduirait à un dédoublement des états stationnaires que nous allons obtenir), l'hamiltonien de l'électron est

$$\widehat{H} = \frac{1}{2m}\left(\widehat{\overrightarrow{P}} + e\overrightarrow{A}(\widehat{X},\widehat{Y},\widehat{Z})\right)^2 - eV(\widehat{X},\widehat{Y},\widehat{Z})$$

en désignant par m la masse de l'électron et $-e$ sa charge.
Montrer que cet hamiltonien peut s'écrire comme la somme de deux opérateurs

$$\widehat{H} = \widehat{H}_z + \widehat{H}_{xy}$$

avec

$$\begin{aligned} \widehat{H}_z &= \frac{1}{2m}\widehat{P}_z^2 + \alpha\widehat{Z}^2 \\ \widehat{H}_{xy} &= \frac{1}{2m}\left(\widehat{P}_x^2 + \widehat{P}_y^2\right) + \frac{1}{2}m\Omega^2(\widehat{X}^2 + \widehat{Y}^2) + \frac{1}{2}\omega_c\left(\widehat{X}\widehat{P}_y - \widehat{Y}\widehat{P}_x\right)\ , \end{aligned} \tag{3.16}$$

où α, Ω, ω_c sont des constantes que l'on déterminera.

3) En travaillant en base $|\overrightarrow{r}\rangle$ (fonctions d'ondes) montrer que l'on peut étudier séparément les hamiltoniens $\widehat{H}_z$ et $\widehat{H}_{xy}$ et que les énergies des états stationnaires de $\widehat{H}$ s'obtiennent sous la forme $E = E_z + E_{xy}$, somme d'une valeur propre de $\widehat{H}_z$ et d'une valeur propre de $\widehat{H}_{xy}$.

4) Donner les valeurs possibles pour E_z et leur dégénérescence.

5) Etude de l'hamiltonien $\widehat{H}_{xy}$.
On introduit des opérateurs $\widehat{a}_d$ et $\widehat{a}_g$ (dits opérateurs annihilation de quanta circulaires) définis par

$$\begin{aligned} \widehat{a}_d &= \frac{1}{2}\left\{\beta(\widehat{X} - i\widehat{Y}) + i\frac{1}{\beta\hbar}(\widehat{P}_x - i\widehat{P}_y)\right\} \\ \widehat{a}_g &= \frac{1}{2}\left\{\beta(\widehat{X} + i\widehat{Y}) + i\frac{1}{\beta\hbar}(\widehat{P}_x + i\widehat{P}_y)\right\} \end{aligned} \tag{3.17}$$

où β est une constante réelle.

5.1) Donner l'expression de leurs adjoints $\widehat{a}_d^\dagger$, $\widehat{a}_g^\dagger$ et des opérateurs nombre de quanta circulaires $\widehat{N}_d = \widehat{a}_d^\dagger \widehat{a}_d$ et $\widehat{N}_g = \widehat{a}_g^\dagger \widehat{a}_g$.

5.2) Montrer que l'observable $\widehat{L}_z$ associée à la composante z du moment cinétique de la particule s'exprime simplement en fonction de $\widehat{N}_d$ et $\widehat{N}_g$.

5.3) Montrer que, en l'absence de potentiel quadrupolaire ($C = 0$), l'hamiltonien $\widehat{H}_{xy}$ s'écrit

$$\widehat{H}_{xy} = \hbar\omega_c\,(\widehat{N}_d + \frac{1}{2})\ ,$$

si l'on choisit convenablement β.

5.4) Calculer le commutateur $\left[\widehat{a}_d, \widehat{a}_d^\dagger\right]$ et en déduire (sans faire de calculs) que, dans ce cas particulier où $C = 0$, les valeurs propres de $\widehat{H}_{xy}$ sont de la forme

$$E_{xy} = \hbar\omega_c(n_d + \frac{1}{2})\ ,$$

où n_d entier ($n_d \geq 0$).

5.5) En présence du potentiel quadrupolaire ($C \neq 0$), montrer que l'on peut écrire $\widehat{H}_{xy}$ sous la forme

$$\widehat{H}_{xy} = \hbar\omega_c' \left(\widehat{N}_d + \frac{1}{2}\right) - \hbar\omega_m' \left(\widehat{N}_g + \frac{1}{2}\right)$$

en donnant au paramètre β une nouvelle valeur, et où ω_c' et ω_m' sont des constantes à déterminer.
En déduire l'expression des valeurs propres de $\widehat{H}_{xy}$.

6) On donne $\hbar\omega_c = 10^{-5}$ eV, $\hbar\sqrt{4eC/m} = 10^{-6}$ eV.
6.1) Représenter qualitativement le spectre d'énergie de l'électron, en indiquant pour chaque niveau d'énergie les nombres quantiques qui le caractérisent.

6.2) Dans quelle mesure les résultats obtenus pour l'énergie des états stationnaires de l'électron traduisent-ils le fait que l'électron est confiné dans l'espace ?

Chapitre 4

Moments cinétiques

Liste des exercices

Sélection d'exercices tirée des examens

- Examen de janvier 2005 (8.2) : Spin 1/2 et RMN (Question de cours)
- Examen de janvier 2006 (8.4) :
  - ⋆ moments cinétique (Question de cours)
  - ⋆ Inégalité de Bell et résultat d'une mesure quantique
- Examen de janvier 2007 (8.5) :
  - ⋆ Spins 1/2 et opérateur d'évolution
  - ⋆ Réflexion de neutrons sur un matériau ferromagnétique
- Examen de janvier 2008 (8.6) : Etude d'une horloge atomique (partie 1)

Exercice I : Résonance magnétique

1) Traitement Classique

On rappelle que le moment cinétique d'un système placé dans un champ magnétique $\vec{B}_0 = B_0\vec{e}_z$ évolue selon l'équation suivante :

$$\frac{\mathrm{d}\vec{J}}{\mathrm{d}t} = \vec{\mu} \times \vec{B}_0 \qquad \text{avec} \qquad \vec{\mu} = \gamma\vec{J}$$

1.1) Montrer que, pour un champ magnétique fixe $\vec{B}_0$, $\vec{J}$ effectue un mouvement de précession autour de $\vec{B}_0$ avec une vitesse angulaire ω_0 que l'on déterminera.

1.2) On rajoute au champ magnétique fixe précédent $\vec{B}_0$ un nouveau champ faible $\vec{B}_1$ perpendiculaire à $\vec{B}_0$ et tournant à la vitesse ω.

1.2.1) En se plaçant dans le référentiel tournant associé à $\vec{B}_1$, montrer que le mouvement de $\vec{J}$ est celui d'une précession autour d'un champ effectif $\vec{B}_{eff}$ fixe avec une vitesse $\vec{\Omega}$ que l'on déterminera.

1.2.2) On suppose qu'à l'instant $t_0 = 0$, le moment cinétique est $\vec{J} = J_0\vec{e}_z$. Montrer qu'à un instant $t \geq 0$ sa composante suivant l'axe Oz peut s'écrire de la manière suivante :

$$J_z = J_0 \left(\frac{(\omega_0 - \omega)^2}{\Omega^2} + \frac{\omega_1^2}{\Omega^2} \cos(\Omega t) \right) \qquad \text{où} \qquad \omega_1 = -\gamma B_1$$

2) Traitement Quantique

Soit un système de spin $s = 1/2$ placé dans un champ magnétique :

$$\vec{B} = B_0\vec{e}_z + B_1\vec{u}(t) \qquad \text{avec} \qquad \vec{u}(t) = \cos(\omega t)\vec{e}_x + \sin(\omega t)\vec{e}_y$$

L'état du système est défini par un ket $|\psi(t)\rangle$. Afin d'étudier l'évolution du système avec le temps, nous introduisons l'opérateur :

$$R(t) = exp\left(i\frac{\omega t}{\hbar} S_z \right) \qquad \text{et on définit} \qquad |\tilde{\psi}(t)\rangle = R(t)|\psi(t)\rangle$$

2.1) Montrer que l'évolution de $|\tilde{\psi}(t)\rangle$ est régie par l'équation suivante :

$$i\hbar\frac{d|\tilde{\psi}(t)\rangle}{dt} = H_{eff}|\tilde{\psi}(t)\rangle \qquad \text{avec} \qquad H_{eff} = (\omega_0 - \omega)S_z + \omega_1 S_x$$

2.2) Déterminer les valeurs propres et les vecteurs propres de cet hamiltonien effectif.

2.3) En déduire l'évolution dans le temps du ket $|\tilde{\psi}(t)\rangle$.

2.4) Déterminer alors la probabilité de trouver le système à l'instant t dans l'état $|-\rangle_z$ lorsqu'à l'instant $t_0 = 0$, il est dans l'état $|\psi(t_0)\rangle = |+\rangle_z$.

Exercice II : Résonance magnétique nucléaire de deux protons en interaction dipolaire statique

On se propose dans ce problème d'étudier le spectre de résonance magnétique nucléaire (RMN) d'un système de deux protons (doublet de protons). On considère ces protons comme fixes (ils sont par exemple bloqués dans un réseau cristallin) : on peut donc négliger leur mouvement et traiter le système comme un ensemble de deux spins discernables $I_1 = I_2 = 1/2$.

1) Premième partie : Le doublet est plongé dans un champ magnétique statique $\vec{B}_0$. On néglige dans cette première partie l'interaction magnétique entre les protons.

   1.1) En désignant par γ le rapport gyromagnétique du proton, écrire le hamiltonien $\hat{H}_0$ du système, puis donner l'expression des niveaux d'énergie et des états stationnaires correspondants (on choisira l'axe Oz suivant $\vec{B}_0$). Traitez aussi la question en introduisant le spin total $\vec{\hat{I}} = \vec{\hat{I}}_1 + \vec{\hat{I}}_2$.

   1.2) On veut induire des transitions entre ces niveaux d'énergie au moyen d'un champ magnétique alternatif $\vec{B}_1 \cos\omega t$. Quelle est la direction optimale de $\vec{B}_1$? Donner les règles de sélection pour ces transitions, c'est-à-dire indiquer quelles sont les transitions possibles.

   1.3) En pratique, la pulsation ω du champ alternatif est fixée et on fait varier l'intensité B_0 du champ statique. Pour quelles valeurs de B_0 obtient-on des raies de résonance ?

2) Deuxième partie : structure fine due au couplage dipolaire magnétique entre les protons

   On étudie dans cette seconde partie les modifications que l'interaction magnétique entre les protons apporte aux résultats précédents.

   2.1) On rappelle qu'à l'approximation dipolaire, le champ magnétique $\vec{B}$ produit à la distance $\vec{r}$ par un moment magnétique $\vec{M}$ est donné par :

$$\vec{B} = -\frac{\mu_0}{4\pi}\vec{\nabla}\left(\frac{\vec{M}.\vec{r}}{r^3}\right)$$

   En déduire que le hamiltonien d'interaction $\hat{H}_{int}$ entre deux protons peut s'écrire

$$\hat{H}_{int} = \frac{\mu_0\gamma^2}{4\pi r^3}\left[\vec{\hat{I}}_1.\vec{\hat{I}}_2 - 3\left(\vec{\hat{I}}_1.\frac{\vec{r}}{r}\right)\left(\vec{\hat{I}}_2.\frac{\vec{r}}{r}\right)\right]$$

   où $\vec{r}$ est un vecteur joignant l'un des protons à l'autre.

   2.2) Exprimer $\hat{H}_{int}$ à l'aide des opérateurs $\hat{I}_1^z$, $\hat{I}_2^z$, $\hat{I}_1^\pm$ et $\hat{I}_2^\pm$ (on prendra un système de coordonnées sphériques (r,θ,ϕ)

   2.3) On suppose que le champ magnétique statique $\vec{B}_0$ de la première partie est suffisamment fort pour que $\hat{H}_{int}$ puisse être considéré comme une petite correction à $\hat{H}_0$. Déterminer alors les nouveaux niveaux d'énergie au premier ordre de la théorie des perturbations, ainsi que les états stationnaires correspondants à l'ordre zéro.

2.4) Reprendre les questions 2) et 3) de la première partie. Quels renseignements peut-on en principe tirer du spectre obtenu ?

3) Troisième partie : application à l'étude de l'eau d'hydratation dans un cristal de gypse

On réalise une expérience de RMN sur un monocristal de gypse, de formule $CaS0_4$, $2H_20$. Les isotopes naturels de Ca, S, et 0 ayant un spin nul dans leur état fondamental, seuls seront alors observables les noyaux d'hydrogène (protons) des molécules d'eau. En outre, on supposera ces molécules d'eau suffisamment éloignées les unes des autres pour que le cristal se comporte comme un ensemble de doublets de protons indépendants.

3.1) Le champ statique B_0 est produit par un électro-aimant qui autorise des variations de faible amplitude autour de la valeur 0,6823 Tesla. Par ailleurs, le rapport gyromagnétique du proton est connu, et vaut $\gamma = 2{,}675.10^8 \text{rd.s}^{-1}.\text{T}^{-1}$. Quelle doit être alors la fréquence $\omega/2\pi$ du champ alternatif ?

3.2) La fréquence du champ alternatif est fixée désormais à la valeur déterminée à la question précédente. Pour une orientation donnée du cristal, le spectre expérimental a alors, en général, l'allure donnée sur la figure 4.1. Interpréter ce résultat.

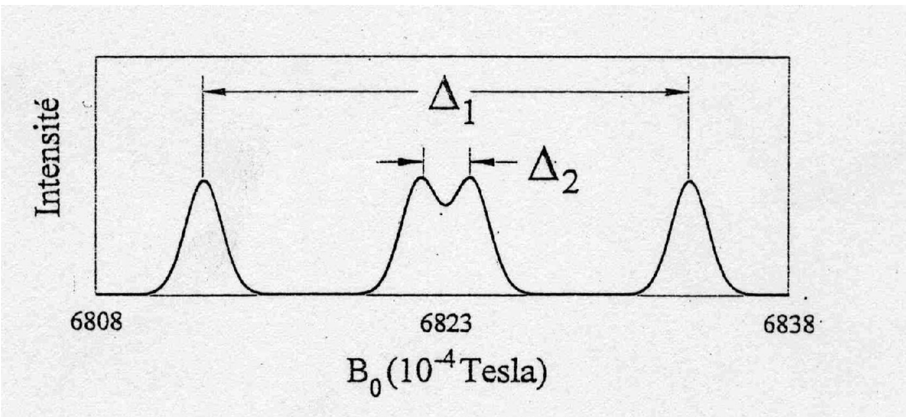


FIGURE 4.1 – spectre expérimental

3.3) L'étude de la dépendance angulaire de Δ_1 et Δ_2 montre que ces grandeurs atteignent approximativement leur maximum lorsque $\vec{B}_0$ est dans le plan engendré par deux vecteurs $\vec{a}$ et $\vec{b}$ connus du réseau cristallin. Dans ce plan, et en fonction de l'angle φ entre $\vec{B}_0$ et $\vec{a}$, la variation de Δ_1 et Δ_2 a l'allure donnée sur la figure 4.2. Déduire de ces résultats les orientations et les longueurs des axes proton-proton des molécules d'eau du gypse.

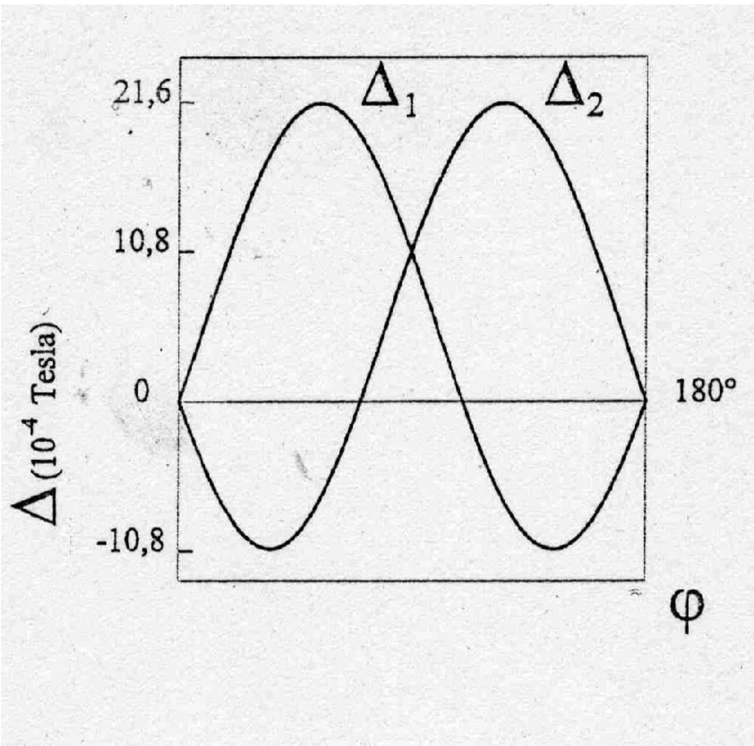


FIGURE 4.2 – Δ_1 et Δ_2

Exercice III : Polarisation, Projecteur et Non-commutation

Cette exercice doit être réalisé avec trois polariseurs et un projecteur.

Les ondes lumineuses sont considérées transversales. On peut représenter les états de polarisation des photons individuels, qui composent un faisceau lumineux, dans un espace de Hilbert de dimension 2. Pour décrire un état de polarisation, on peut donc choisir la base **orthonormée** $|H\rangle$, $|V\rangle$ formée par les états de polarisation linéaire orientés suivant l'horizontale $|H\rangle$ et la verticale $|V\rangle$.

1) Exprimer dans la base $|H\rangle$, $|V\rangle$ le ket normé $|\theta\rangle$ associé à l'état de polarisation linéaire formant un angle θ avec l'horizontale.
2) On considère un polariseur linéaire orienté dans la direction θ.
   2.1) Exprimer le projecteur P_θ, projetant un état de polarisation quelconque, sur le sous espace engendré par l'état $|\theta\rangle$.
   2.2) On considère un photon de polarisation $|H\rangle$. Exprimer en fonction de θ la probabilité pour que le photon soit transmis par le polariseur. Quel est le lien avec le projecteur ? En déduire que le résultat est identique pour un polariseur placé à l'horizontale et un photon de polarisation $|\theta\rangle$.

3) Deux polariseurs linéaires sont placés à 90° l'un par rapport à l'autre.
   3.1) On regarde une lampe à travers ce dispositif. Que voit-on ?
   3.2) On dispose d'un troisième polariseur. Que se passe-t'il si on le place (1) avant les deux autres, (2) entre les deux autres et (3) après les deux autres ? Interpréter en termes de projecteurs et de commutation.
4) Montrer que les états $|+45\rangle$ (θ= 45 degrés) et $|-45\rangle$ (θ= -45 degrés) forment une base orthonormée.
5) Les opérateurs $\hat{\mathrm{I}}_1$ et $\hat{\mathrm{I}}_3$ seront exprimés dans la base $|H\rangle$, $|V\rangle$.
   5.1) Écrire l'opérateur $\hat{\mathrm{I}}_3$ ayant pour vecteurs propres les kets $|H\rangle$ et $|V\rangle$ associés respectivement aux valeurs propres 1 et -1.
   5.2) Écrire l'opérateur $\hat{\mathrm{I}}_1$ ayant pour vecteurs propres les kets $|+45\rangle$ et $|-45\rangle$ associés respectivement aux valeurs propres 1 et -1.
6) Exprimer le produit de commutation $[\hat{\mathrm{I}}_3,\hat{\mathrm{I}}_1]$ sous la forme $2\mathrm{i}\times\hat{\mathrm{I}}_2$. Que valent les produits de commutation $[\hat{\mathrm{I}}_1,\hat{\mathrm{I}}_2]$ et $[\hat{\mathrm{I}}_2,\hat{\mathrm{I}}_3]$. Le triplet d'opérateurs $(\hat{\mathrm{I}}_1,\hat{\mathrm{I}}_2,\hat{\mathrm{I}}_3)$ vous est-il familier ?
7) Calculer les valeurs propres et les vecteurs propres de $\hat{\mathrm{I}}_2$. A quelles polarisations correspondent les vecteurs propres de $\hat{\mathrm{I}}_2$?

Structure hyperfine du spectre de l'atome d'hydrogène et composition de deux spins 1/2.

Lorsqu'on tient compte du spin de l'électron et du proton le niveau fondamental de l'atome d'hydrogène, d'énergie E_0 est légérement modifié. Cet exercice étudie cette modification qui résulte de l'interaction entre les spins des deux particules. Pour cela on travaille dans une base orthonormée qui décrit les deux états possibles $+\frac{1}{2}$ et $-\frac{1}{2}$ pour le spin de chacune des particules.

Notations et définitions préliminaires :

Les kets de base, définis par un produit tensoriel d'états de spin de l'électron et du proton, sont notés :

Etat	Spin de l'électron	Spin du proton
$\|1\rangle = \|++\rangle$	$+\frac{1}{2}$	$+\frac{1}{2}$
$\|2\rangle = \|+-\rangle$	$+\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$
$\|3\rangle = \|-+\rangle$	$-\frac{1}{2}$	$+\frac{1}{2}$
$\|4\rangle = \|--\rangle$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$

On définit les opérateurs de spin pour l'électron $\hat{S}^e_x$, $\hat{S}^e_y$, $\hat{S}^e_z$ et le proton $\hat{S}^p_x$, $\hat{S}^p_y$, $\hat{S}^p_z$. La base $\{\,|+\rangle, |-\rangle\,\}$ relative ˆchaque particule, utilisée pour former les états $|1\rangle \ldots |4\rangle$ est la base propre de $\hat{S}_z$, de sorte que les opérateurs de spin agissent sur les kets $|+\rangle$, $|-\rangle$ de la manière suivante

$$\hat{S}_z|+\rangle = +\hbar 2|+\rangle \quad \hat{S}_z|-\rangle = -\hbar 2|-\rangle \tag{1}$$
$$\hat{S}_x|+\rangle = +\hbar 2|-\rangle \quad \hat{S}_x|-\rangle = +\hbar 2|+\rangle \tag{2}$$
$$\hat{S}_y|+\rangle = +i\hbar 2|-\rangle \quad \hat{S}_y|-\rangle = -i\hbar 2|+\rangle \tag{3}$$

1) Indiquer comment sont obtenues les équations 2 et 3 ˆ partir des propriétés des opérateurs de moment cinétique (la démonstration complète de ces relations n'est pas demandée).

   L'action d'un produit d'opérateurs $\hat{S}^e\hat{S}^p$ sur un ket de la base $|1\rangle \ldots |4\rangle$ est définie par les règles habituelles pour un produit tensoriel d'opérateurs. Ainsi par exemple :

$$\hat{S}^e_x\hat{S}^p_z\,|4\rangle = \hat{S}^e_x\hat{S}^p_z\,|--\rangle = \left(\frac{\hbar}{2}\right)\left(-\frac{\hbar}{2}\right)|+-\rangle = -\frac{\hbar^2}{4}\,|2\rangle\ . \tag{4}$$

   L'hamiltonien décrivant le niveau fondamental de l'atome d'hydrogène en tenant compte de l'interaction entre les spins de l'électron et du proton est

$$\hat{H}_0 = E_0\,\mathbb{I} + A\,\overrightarrow{\hat{S}^e}\cdot\overrightarrow{\hat{S}^p} = E_0\,\mathbb{I} + A\left(\hat{S}^e_x\hat{S}^p_x + \hat{S}^e_y\hat{S}^p_y + \hat{S}^e_z\hat{S}^p_z\right) \tag{5}$$

   ou E_0 (énergie de l'état fondamental) et A sont des scalaires réels ($A > 0$) et $\mathbb{I}$ désigne l'opérateur identité.

Calcul de la modification du niveau fondamental.

2) On définit les trois composantes du moment cinétique total par

$$\vec{\hat{S}^T} = \vec{\hat{S}^e} + \vec{\hat{S}^p}$$

Donner les lois de commutation des composantes de $\vec{\hat{S}^T}$ et montrer que $\vec{\hat{S}^T}^2$ commute avec les trois composantes de $\vec{\hat{S}^T}$ et donc aussi avec $\hat{H}_0$.

3) Donner une base complète formée à partir des états propres de $\hat{S}^T_z$ et $\vec{\hat{S}^T}^2$. Si on écrit les valeurs propres de $\vec{\hat{S}^T}^2$ comme $\hbar^2 j(j+1)$, quelles sont les valeurs que prend j ? Interprétation ? Donner l'action de $\hat{H}_0$ sur les éléments de cette base et en déduire les niveaux d'énergie.

4) Représenter sur un schèma l'évolution du niveau fondamental E_0 quand on tient compte du couplage entre spins $A\ \vec{\hat{S}^e} \cdot \vec{\hat{S}^p}$, en indiquant la dégénérescence de chaque niveau obtenu.

5) L'atome est dans l'état décrit par le ket

$$|\alpha\rangle = \frac{1}{2}(|1\rangle - \sqrt{2}|2\rangle + |4\rangle)\ . \tag{6}$$

On mesure son énergie. Quelles valeurs peut-on trouver, et avec quelles probabilités ?

6) L'électron est dans le plus haut des états d'énergie trouvés en 3). Il effectue une transition vers l'état ayant l'énergie la plus basse et la différence d'énergie est mise sous forme d'un photon. Quelle est la longueur d'onde de l'onde électromagnétique correspondante ? On donne $A = 8,4706\ 10^{43}$ units SI (Quelle est l'unité de A ?), $h = 6,6262\ 10^{-34}$ J.s et la vitesse de la lumière dans le vide $c = 2.998\ 10^8$ m.s^{-1}

Pouvez vous citer un exemple dans lequel cette radiation particulière est utilisée ?

7) A l'instant $t = 0$ l'atome est dans l'état $|\alpha_1\rangle = |1\rangle$. Dans quel tat sera-t-il à un instant $t > 0$?

8) L'atome est maintenant dans l'état $|\alpha_2\rangle = |2\rangle$ à l'instant $t = 0$. Donner l'expression dans la base $|1\rangle \ldots |4\rangle$ de son ket d'état à un instant $t > 0$.

9) (Sans faire de calculs) Lorsque l'atome est placé dans un champ magnétique dirigé selon l'axe z, on doit ajouter à l'hamiltonien précédent $\hat{H}_0$ le terme

$$\hat{H}' = -\left(\gamma_e \hat{S}^e_z + \gamma_p \hat{S}^p_z\right) B \tag{7}$$

o γ_e et γ_p sont les rapports gyromagnétiques de l'électron et du proton, que l'on supposera différents et B le scalaire correspondant à la composante du champ magnétique selon z. L'hamiltonien associé est donc maintenant $\hat{H}_1 = \hat{H}_0 + \hat{H}'$. L'opérateur $\vec{\hat{S}^T}^2$ est-il toujours une bonne observable (*i.e.* commute avec $\hat{H}_1$) ?

10) Quel terme pourrait-on ajouter à $\hat{H}_0$ pour que la base déjà utilisée reste une base d'états propres du Hamiltonien tout en "levant" la dégénérescence ?

Chapitre 5

Perturbations et méthodes d'approximation

Liste des exercices

Sélection d'exercices tirée des examens

- Contrôle continu de novembre 2005 (7.3) : Oscillateur dans un champ électrique
- Examen de janvier 2004 (8.1) : Rotateur rigide dans le plan
- Examen de janvier 2005 (8.2) : Electron élastiquement lié dans un champ électrique oscillant
- Examen de janvier 2006 (8.4) : Démarrage adiabatique d'une perturbation
- Examen de janvier 2007 (8.5) : Perturbation dépendant du temps
- Examen de janvier 2008 (8.6) : Etude d'une horloge atomique

Exercice I : Méthode des variations appliquée à l'oscillateur harmonique

On va utiliser la méthode des variations pour trouver des solutions approchées de l'oscillateur harmonique.

1) Sachant que la fonction d'onde de l'état fondamental doit avoir une forme en cloche, considérons une fonction d'essai $\varphi_\alpha(x) = \exp(-\alpha x^2)$, avec $\alpha > 0$. Déterminer la valeur approchée de l'énergie E_0 de l'état fondamental de l'oscillateur harmonique. Comparer avec la valeur exacte.

2) On note $|\psi_n\rangle$ les vecteurs propres de l'hamiltonien H de l'oscillateur. Soit $|\varphi_\beta\rangle$ un vecteur orthogonal à $|\psi_0\rangle$. Montrer qu'en prenant comme vecteur d'essai $|\varphi_\beta\rangle$, on a alors $\langle H\rangle(\beta) \geq E_1$.

3) Soit $\varphi_\beta(x) = x \exp(-\beta x^2)$, avec $\beta > 0$. Cette fonction est elle orthogonale à $\varphi_\alpha(x)$?

4) Calculer $\langle H \rangle(\beta)$ avec $\varphi_\beta(x)$ comme fonction d'essai. Déterminer la valeur approchée de E_1 et la comparer à sa valeur exacte.

5) Les fonctions précédentes ont été choisies de façon à obtenir des valeurs exactes de l'énergie. Considérons à présent une autre fonction d'essai ayant également une forme en cloche, telle la fonction dite de Lorentz :

$$\varphi_\gamma(x) = \frac{1}{x^2 + \gamma} \quad ; \quad \gamma > 0 \tag{1}$$

Déterminer $\langle H \rangle(\gamma)$ et la valeur approchée de E_0. Quelle est l'erreur relative, par rapport à $\hbar\omega$, obtenue entre les valeurs E_0 exacte et approchée ?

Chapitre 6

Particules identiques

Liste des exercices

Sélection d'exercices tirée des examens

- Examen de janvier 2007 (8.5) : Particules identiques dans un potentiel harmonique

Exercice I : Vérifier les résultats de la section 1.2 du Chapitre 16 du Basdevant et Dalibard.

Exercice II : Question 1 du chapitre 16 du Basdevant et Dalibard.

Exercice III : Question 4 du chapitre 16 du Basdevant et Dalibard.
Dans la partie c) de cette question : montrer que le clivage, en présence d'interactions, du premier état excité (de dégénérescence 4 en absence d'interaction) se fait en terme d'un triplet d'états de spin total $S = S_1 + S_2 = 1$ et d'un singulet de spin $S = 0$. Montrer que l'état triplet a l'énergie la plus basse ($E = 5E_1$) et que l'état singulet a une énergie de $E = 5E_1 + 2g/L$, où E_1 est l'énergie du fondamental pour une particule.

Exercice IV : Densité d'états

1) Calculer les niveaux d'énergie pour une particule piégée dans une boîte cubique de dimension macroscopique L.

2) Considérer un système de N$\gg$1 particules de spin 1/2 sans interaction. Montrer que la densité d'états s'écrit :

$$\omega(p) = \frac{8\pi p^2}{h^3}, \tag{6.1}$$

où $p = |\overrightarrow{p}|$ est la quantité de monvement (scalaire).

3) Calculer la densité d'états $g(\epsilon)$ en fonction de l'énergie cinétique ϵ.

4) Trouver une expression pour l'énergie de Fermi ϵ_F. Estimer ϵ_F pour des électrons de conduction dans un échantillon de cuivre en utilisant le modèle des électrons libres. Commenter votre résultat.

Chapitre 7

Contrôles continus

Cette partie regroupe les contrôles continus donnés de novembre 2003 à novembre 2009

Liste des exercices

Ecole Normale Supérieure de Lyon *Université Lyon I*

Magistère de Sciences de la Matière
Introduction au monde quantique
Contrôle continu du 18 Novembre 2003 (2h)

NB *: Un poids important sera accordé aux applications numériques*.

1) **Recul d'un atome lors de l'émission d'un photon**
Un électron d'un ion ou atome hydrogénoide (1 électron, un noyau de charge Ze et de masse M) se trouve dans un état qui correspond à l'orbite de Bohr avec n=3. L'atome est initialement immobile dans le référentiel du laboratoire. Il émet un photon qui fait passer l'électron dans le niveau correspondant à l'orbite de Bohr n=1.

(a) En faisant un bilan de quantité de mouvement, calculer approximativement la vitesse de l'atome après l'émission du photon. Faire l'application numérique.
(b) Quelle est la longueur d'onde du rayonnement émis ? Application numérique, donner le domaine du spectre électromagnétique concerné.
(c) Calculer l'énergie cinétique de l'atome après émission du photon. A quelle fraction de l'énergie de la transition 3 vers 1 correspond t'elle ? Cela justifie t'il une des approximation (laquelle ?) faite pour répondre au (a) ?

On fera les applications numériques pour le cas où le noyau est un noyau d'hélium (on étudie donc un ion He+) Z=2, M=4 x (masse du proton).

2) **Modèle de l'effet Ramsauer-Townsend**
On considère le potentiel à une dimension schématisé sur la figure 1. Le puits de potentiel a une largeur L, une profondeur U (U>0). Un flux de particules (électrons) de masse m, d'énergie E>0, arrive de la gauche. On notera exp(ikx) l'amplitude de probabilité associée à ce faisceau incident. On écrit l'amplitude de probabilité sous la forme

$\psi(x)=\exp(ikx) + B \exp(-ikx)$ (région I)
$\psi(x)=C \exp(iKx) + D \exp(-iKx)$ (region II)
$\psi(x)=B' \exp(ik(x-L))$ (région III)

(a) Préciser les valeurs de k et K en fonction de E et U.
(b) Exprimer les conditions limites appropriées en x=0 et x=L.
(c) Calculer les coefficients B,C,D et B'.
(d) Montrer que le coefficient de réflexion passe par des minima pour certaines valeurs de l'énergie que l'on précisera.
(e) Interpréter ce phénomène en termes d'interférences entre ondes réfléchies par les différentes marches de potentiel.
(f) Effet Ramsauer-Townsend : lorsqu'on envoie un faisceau d'électrons dans une vapeur de Xénon, on observe que la transmission passe par un premier maximum pour une énergie des électrons égale à 0,7eV . Sachant que la taille de l'atome de Xénon est d'environ 0,3nm, en déduire un modèle schématique pour le potentiel d'interaction entre électron et atome Xe. (faire l'application numérique, donner le résultat en eV).

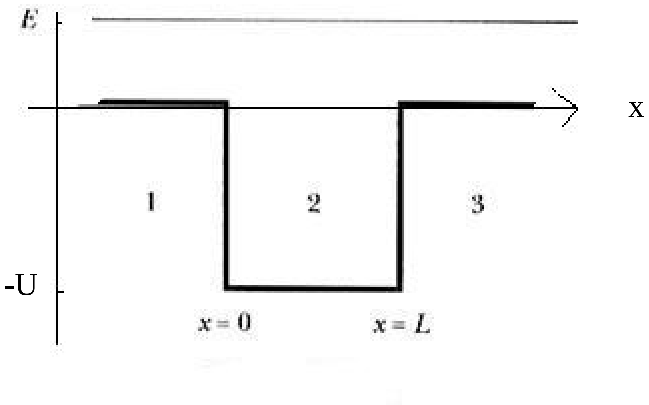


FIGURE 1

Rappel de valeurs numériques utiles

Masse du proton : 1,67 10^{-27} kg
Masse de l'électron : 9,1 10^{-31} kg
Constante de Planck : 6,6 10^{-34} J.s
Charge de l'électron : -1,6 10^{-19} C
Energie d'ionisation de l'atome d'hydrogène : 13,6 eV
Vitesse de la lumière : 3,0 10^{8} m/s

Université Claude Bernard Lyon I
Ecole Normale Supérieure de Lyon

Licence $3^{ème}$ année, Parcours Sciences de la Matière
Introduction au monde quantique
Contrôle continu du Novembre 2004 (2h)

1) **Réfraction pour une particule quantique**

Quand un neutron lent pénètre dans un matériau, il est soumis de la part du matériau à un potentiel moyen V_0 que l'on considère comme uniforme.
On considère une situation ou le matériau occupe la région z<0. Un faisceau de neutrons d'énergie E arrive avec un angle d'incidence ? ??
?
?a) Faire un schéma de la situation. Indiquer les différents faisceaux de neutrons qui peuvent exister.
b) Démontrer que les neutrons qui pénètrent dans le matériau (réfractés) le font avec un angle de réfraction ? ?que l'on calculera en fonction de E, V_0 et ? ??
?
Application numérique : E=0,01eV, ? = ? /4, V_0 =0,005eV

2) **Longueur d'onde de de Broglie**

Un électron et un photon ont chacun une longueur d'onde de 0,2nm. Calculez :
(a) leur quantité de mouvement.
(b) leur énergie cinétique.

3) **Modèle de Bohr**

Utilisez les règles de quantification de Bohr pour calculer les niveaux d'énergie dans un potentiel donné par $V(r) = V0\ (r/a)^k$

Dans la limite où k est très grand, représentez qualitativement la forme du potentiel et discuter le comportement des niveaux d'énergie.

4) **Théorème du Viriel**

En une dimension, on considère une particule d'Hamiltonien

$H=P^2/2M+V(X)$

Où X, P désignent les opérateurs position et impulsion, M la masse, et $V(X) = A\ X^n$

a) Calculer le commutateur [H,XP].
b) Déduire du résultat une relation simple entre les énergies cinétiques et potentielles moyennes d'un état stationnaire de H.

Université Claude Bernard Lyon I
Ecole Normale Supérieure de Lyon

Licence 3ème année, Parcours Sciences de la Matière
Introduction au monde quantique

Contrôle continu du 8 Novembre 2005 (2h)

1 Effet photoélectrique sur les métaux

On réalise avec une photocathode en potassium les mesures suivantes:

- Avec une radiation ultraviolette (raie du mercure) $\lambda = 253{,}7$ nm, on constate que l'énergie maximale des photoélectrons éjectés est de 3,14 eV.
- Avec une radiation visible (raie jaune du sodium) $\lambda = 589{,}0$ nm, l'énergie maximale des électrons est alors 0,36 eV.

1) Retrouver la valeur de la constante de Planck.
2) Calculer l'énergie minimale d'extraction des électrons du potassium.
3) Calculer la longueur d'onde maximale des radiations produisant un effet photoélectrique sur le potassium.

2 Neutrons monocinétiques

On envoie un faisceau de neutrons thermiques refroidis sur un cristal et on sélectionne un faisceau émergent de longueur d'onde de de Broglie $\lambda = 0{,}433$ nm.
1) Quelle est l'énergie de ces neutrons ?
2) Quelle est leur vitesse ?
($hc/2\pi \sim 200$ *eV.nm,* $m_ec^2 \sim 5\ 10^5$ *eV et* $m_n \sim 2000\ m_e$)

3 Oscillateur dans un champ électrique

On considère un oscillateur harmonique à une dimension, de pulsation ω, formé d'une particule chargée de masse m, élastiquement liée à l'origine suivant l'axe Ox. L'hamiltonien du système est

$$H_0 = p^2/2m + (1/2)m\omega^2x^2.$$

On note $\phi_n(x)$, n=0,1,… ses fonctions propres.

1) Donner l'expression des valeurs propres E_n correspondantes.
2) Donner la forme des fonctions propres $\phi_n(x)$ et leur parité. Donner l'expression des fonctions d'ondes normées $\phi_0(x)$ et $\phi_1(x)$ *(NB : il n'est pas nécessaire de répondre à cette question pour faire les suivantes).*
3) A l'instant t = 0 le système est décrit par la fonction d'onde

$$\varphi(x, t=0) = \cos\theta\ \phi_0(x) + \sin\theta\ \phi_1(x) \text{ avec } 0< \theta < \pi$$

a) Montrer que cette fonction d'onde est normalisée.
b) Quelle est la fonction d'onde $\varphi(x, t)$ représentant l'état du système à l'instant t ?

4) La particule a une charge électrique q. On applique un champ électrique constant uniforme $\mathcal{E}$ parallèle à Ox. Si la position de la particule est x, son moment dipolaire est $d = qx$.

a) Ecrire l'énergie potentielle de l'oscillateur dans le champ.

b) Ecrire l'hamiltonien du système en présence du champ.

5) Quels sont les niveaux d'énergie W_n du système dans le champ $\mathcal{E}$? (On rappelle que $x^2 + 2ax = (x+a)^2-a^2$)

6) Exprimer en fonction des $\{\phi_n(x)\}$ les nouvelles fonctions propres $\{\psi_n(x)\}$ en présence du champ.

7) Quelle est la valeur moyenne du moment dipolaire $\langle d \rangle$ dans l'état ψ_n (x) ? Interpréter le résultat.

8) Lorsqu'un atome d'un milieu acquiert un moment dipolaire électrique sous l'action d'un champ électrique extérieur $\mathcal{E}$, le vecteur polarisation du milieu est $\mathcal{P} = N_v\mathbf{d}$ où N_v est le nombre d'atome par unité de volume. La susceptibilité électrique χ du milieu est définie par

$$\mathcal{P} = \varepsilon_0 \chi \mathcal{E}$$

où ε_0 est la permittivité du vide. Pour un gaz d'atomes d'argon dans des conditions normales de température et de pression, on mesure $\chi = 5{,}17\ 10^{-4}$. Pour de petites perturbations de l'atome par rapport à son état fondamental, on assimile un électron externe d'un atome d'argon à une particule liée au reste de l'atome par un potentiel harmonique de pulsation ω. La particule à une masse $m = m_e$ et une charge -e.

a) En utilisant la valeur de χ mesurée, calculer la pulsation ω.
b) Calculer l'énergie correspondant à la transition de l'état fondamental au premier état excité pour cet oscillateur. L'énergie d'excitation de l'atome d'argon de son état fondamental vers son premier état excité est de 8,8 eV. Commenter.

$m_e = 9{,}1\ 10^{-31}$ kg, $e = 1{,}6\ 10^{-19}$ C, $\varepsilon_0 = 8{,}854\ 10^{-12}$ Fm^{-1}, Volume molaire du gaz parfait dans les conditions normales $V_m = 22{,}4\ 10^{-3}$ m^3mol^{-1}, nombre d'Avogadro $N_A = 6\ 10^{23}$ mol^{-1}

Université Claude Bernard-Lyon I
UFR de Physique

Ecole Normale Supérieure de Lyon
Département des Sciences de la Matière

Licence de Physique, Parcours Sciences de la Matière, Année 2006-2007
Contrôle continu, 8 Novembre 2006 (2h)

1 Oscillateur harmonique

Soit un oscillateur harmonique unidimensionnel de masse m et de fréquence ωw. On rappelle que la fonction d'onde de l'état fondamental, dénoté par $|0\rangle$ est

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar})$$

1. Rappeler la définition des opérateurs a et $a\dagger$, en fonction des opérateurs sans dimension $\hat{X} = \sqrt{(m\omega/\hbar)}x$ et $\hat{P} = p/\sqrt{(m\omega\hbar)}$. Vérifier que l'Hamiltonien du système s'écrit simplement en utilisant ces deux opérateurs et démontrer la relation de commutation entre a et $a\dagger$.

2. En utilisant les résultats connus pour l'action de a et $a\dagger$ sur un état propre, calculer la fonction d'onde de l'oscillateur dans le premier et le deuxième état excité. Faire une représentation schématique des fonctions d'onde pour le fondamental et les deux premiers niveaux excités.

3. Calculer l'écart quadratique moyen de la position dans l'état fondamental. Faire une application numérique pour le cas d'un cristal d'Hélium (on prendra dans ce cas $\omega = 10^1 3rad/s$, $m = 510^{-27}$kg). Comparer à une distance interatomique.

2 Deuton

On considère une particule de masse m dans un potentiel de la forme
$V(x) = +\infty$ pour $x < 0$
$V(x) = -V_0$ pour $0 < x < a$
$V(x) = 0$ pour $a < x$
V_0 est un nombre positif.

1. Etablir l'équation qui permet de déterminer les fonctions d'ondes des états liés (si ils existent). Quelle est la condition sur V_0 et a pour que un tel état existe ?

2. Montrer l'analogie avec la détermination des états liés impairs dans un puits carré symétrique de largeur $2a$ et de profondeur V_0.

3. le puits précédent schématise le potentiel d'interaction entre un proton et un neutron. Dans ce cas la masse de la particule à considérer est la masse réduite du système, $m = 0.837\ 10^{-27}$kg. Sachant que $a = 2.\ 10^{-15}$m et que il existe un seul état lié d'énergie $E = -2,22$MeV, quelle valeur prendre pour V_0 ?

3 Théorème de Bloch

Le théorème de Bloch est un théorème important en physique des solides cristallins. Il permet de rechercher les fonctions d'onde d'une particule dans un potentiel périodique parmi une classe

très restreinte de fonctions. On considère ici uniquement des particules (électrons) dans un espace unidimensionnel.
Opérateur translation: On appelle opérateur translation de vecteur a l'opérateur T_a défini par son action sur une fonction d'onde:

$$(T_a\psi)(x) = \psi(x - a)$$

1. Montrer que si λ est une valeur propre de T_a, alors $\lambda = \exp(i\phi)$ où ϕ est un nombre réel (on pourra pour cela comparer les normes de $T_a\psi$ et de ψ).

2. En déduire que toute fonction propre de T_a peut s'écrire sous la forme $\psi(x) = \exp(ikx)u(x)$, où k est un nombre réel que l'on exprimera en fonction de ϕ, et $u(x)$ une fonction périodique de période a

3. Supposons que une particule (électron) est soumise à un potentiel périodique de période a, $V(x)$. Expliquer qualitativement l'origine du potentiel périodique

4. Quelle est la propriété essentielle de l'Hamiltonien H de la particule par rapport à l'opérateur T_a ?

5. Que peut on en déduire pour les fonctions propres de H ?

6. Si on considère un état propre de H d'énergie décrit par une fonction propre $\psi(x) = \exp(ikx)u(x)$, où $u(x)$ est de période a, écrire l'équation vérifiée par $u(x)$. En quoi cette équation est elle plus simple que l'équation de Schrödinger de départ ?

Ecole Normale Supérieure de Lyon Université Claude Bernard – Lyon 1

L3 « Sciences de la Matière »
U.E. « Introduction au Monde Quantique »
Contrôle Partiel, Mercredi 7 novembre 2007

Durée 2h30
Les documents sont interdits
Calculettes autorisées pour les applications numériques

Premier problème : Modèle de l'effet Ramsauer-Townsend

On considère le potentiel à une dimension schématisé sur la figure 1. Le puits de potentiel a une largeur L et une profondeur -U (U>0). Un flux de particules (des électrons) de masse m, d'énergie E>0, arrive de la gauche de la figure. On notera exp(ikx) l'amplitude de probabilité associée à ce faisceau incident. On écrit l'amplitude de probabilité sous la forme :

$\psi(x) = \exp(ikx) + A\exp(-ikx)$ Dans la région I

$\psi(x) = B\exp(i\rho x) + C\exp(-i\rho x)$ Dans la région II

$\psi(x) = D\exp(ik(x-L))$ Dans la région III

1) Préciser les valeurs de k et ρ en fonction de E et U.
2) Ecrire les conditions limites appropriées en x = 0 et x = L.
3) Calculer les coefficients A et D.
4) Montrer que le coefficient de réflexion passe par des minima pour certaines valeurs de l'énergie E que l'on précisera.
5) Interpréter ce phénomène en termes d'interférences entre ondes réfléchies par les différentes marches de potentiel.
6) <u>Effet Ramsauer-Townsend</u> : lorsqu'on envoie un faisceau d'électrons dans une vapeur de xénon, on observe que la transmission passe par un premier maximum pour une énergie des électrons égale à 0,7 eV. Sachant que la taille de l'atome de xénon est d'environ 0,3 nm, en déduire un modèle schématique pour le potentiel d'interaction entre un électron et un atome de xénon. Faire l'application numérique, donner le résultat en eV et commenter brièvement.

<u>Rappel de valeurs numériques utiles</u>

Masse du proton : $M = 1{,}67\ 10^{-27}$ kg
Masse de l'électron : $m = 9{,}1\ 10^{-31}$ kg
Constante de Planck : $h = 6{,}6\ 10^{-34}$ J.s
Charge de l'électron : $q = -1{,}6\ 10^{-19}$ C
Energie d'ionisation de l'atome d'hydrogène : $E_I = 13{,}6$ eV
Vitesse de la lumière : $c = 3{,}0\ 10^{8}$ m/s

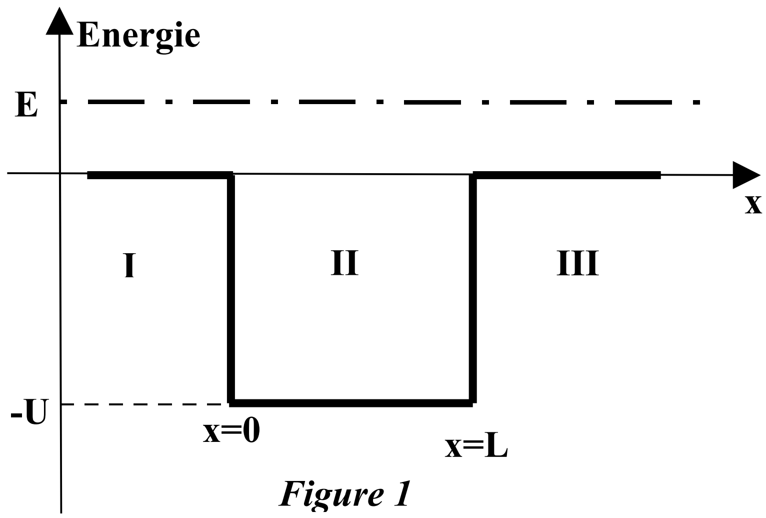


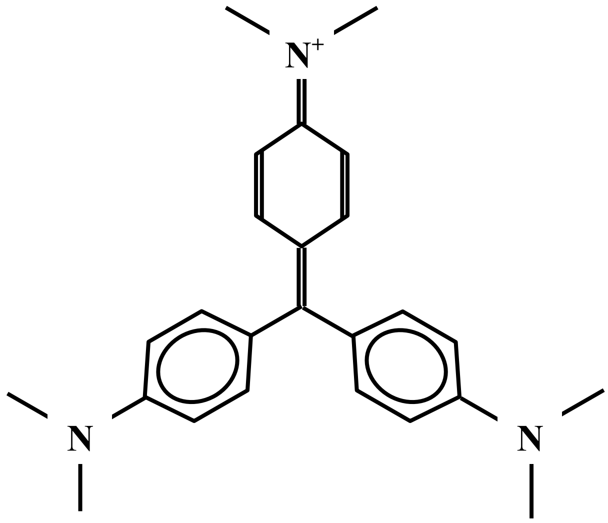
Figure 1

Second problème : Système à trois états

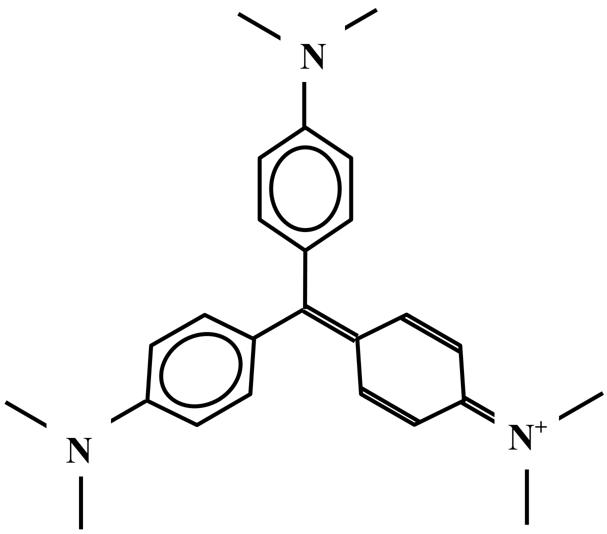
Le principe actif du colorant 42555 (« violet cristallisé ») est le cation organique monovalent $C[C_6H_4N(CH_3)^2]_3^+$. Le squelette de cet ion est constitué de trois branches identiques, le déficit électronique responsable de la charge + pouvant être prélevé sur l'une quelconque de ces trois branches. On peut traiter l'état électronique de cet ion comme un système à trois états (voir figure). Le hamiltonien H n'est pas diagonal dans la base $\{|1\rangle,|2\rangle,|3\rangle\}$ (supposée orthonormée) en raison du passage par effet tunnel de l'une à l'autre de ces configurations classiques.

1) En choisissant l'origine des énergies telle que l'on ait $\langle 1|H|1\rangle=\langle 2|H|2\rangle=\langle 3|H|3\rangle=0$, et en posant égaux à –A (A>0) les éléments non diagonaux, écrire la matrice de H dans la base $\{|1\rangle,|2\rangle,|3\rangle\}$.
2) On considère l'état $|\Phi\rangle=(|2\rangle-|3\rangle)/\sqrt{2}$. Calculer la valeur moyenne $\langle E\rangle$ de l'énergie et son écart quadratique ΔE dans cet état. Interpréter le résultat.
3) Déterminer les niveaux d'énergie du système. Donner une base propre orthonormée simple correspondante. Cette base propre est-elle unique ?
4) On a $A \approx 0{,}75$ eV. Pourquoi cet ion est-il de couleur violette ? On rappelle que les couleurs du spectre de la lumière blanche sont, dans l'ordre des énergies croissantes ($E = hc/\lambda$) : rouge (de ≈ 1,65 à 2,0 eV) ; orangé (de ≈ 2,0 à 2,1 eV) ; jaune (de ≈ 2,1 à 2,3 eV) ; vert (de ≈ 2,3 à 2,55 eV) ; bleu (de ≈ 2,55 à 2,65 eV) ; violet (de ≈ 2,65 à 3,1 eV). Les couples principaux de « couleurs complémentaires » qui, associées, restituent la lumière blanche sont jaune-violet, rouge-vert et bleu-orange.
5) On remplace le groupement $N(CH_3)_2$ de l'extrémité de la branche supérieure par un hydrogène. On suppose que cette substitution n'a pour effet que d'élever $\langle 1|H|1\rangle$ d'une quantité $\Delta > 0$, en laissant les autres éléments de matrice inchangés.
   a. Quels sont les niveaux d'énergie du nouveau système ?
   b. Que deviennent-ils dans les limites $\Delta \ll A$ et $\Delta \gg A$?
   c. Tracer leur graphe en fonction de Δ.
6) Cet ion modifié (colorant 42000 « vert malachite ») absorbe la lumière à deux longueurs d'onde : $\lambda \approx 620$ nm et $\lambda \approx 425$ nm. Essayez d'en déduire une valeur de Δ et commenter l'accord entre l'expérience et notre modèle théorique.

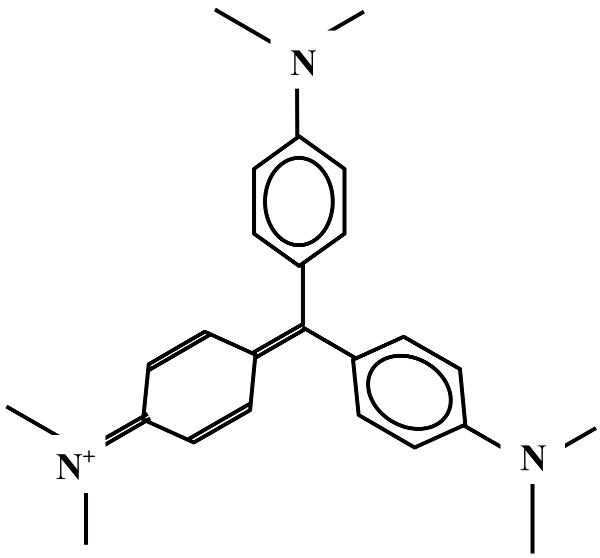
On rappelle la valeur numérique : $hc \approx 1240$ eV.nm



|1>



|2>



|3>

Ecole Normale Supérieure de Lyon Université Claude Bernard – Lyon 1

L3 « Sciences de la Matière »
U.E. « Introduction au Monde Quantique »

Contrôle Partiel, Mercredi 5 novembre 2008

Durée 2h

Documents et calculatrices interdits

Premier problème : Marche de potentiel et retard à la réflexion

On s'intéresse au mouvement à une dimension d'une particule de masse m et d'énergie totale E évoluant dans le potentiel V(x) en forme de marche schématisé sur la figure 1. Cette marche est positionnée en x = 0 et sa hauteur est V_0.

Partie I. Flux permanent de particules ; description en ondes planes.

On envoie sur cette marche de potentiel, venant de la gauche de la figure, un flux permanent monocinétique de particules (masse m, énergie E). On se place dans la situation $0 < E < V_0$. On notera exp(ikx) l'onde plane associée à ce faisceau incident et, dans la région I, on écrira la "fonction d'onde" stationnaire représentant le système sous la forme :

$$\psi(x) = \exp(ikx) + B\exp(-ikx)$$

1) Justifier brièvement que, dans la région II, la "fonction d'onde" stationnaire s'écrive : $\Psi(x) = C\exp(-\rho x)$. Donner les expressions de k et ρ en fonction de E et V_0.
2) Enoncer les conditions de passage en x = 0 et en déduire les expressions des amplitudes B et C en fonction de k et de ρ. Que vaut |B| ? Pouvait-on prévoir ce résultat ? Quelle est la signification physique de la "fonction d'onde" dans la région II.
3) On pose : $B = \exp(-i\phi)$. Exprimer $\mathrm{tg}(\phi/2)$ en fonction de E et de V_0. En déduire les expressions de ϕ et de $\frac{d\phi}{dE}$ en fonction de E et de V_0.

Partie II. Une particule incidente individuelle ; description en paquet d'ondes.

L'onde incidente est maintenant un paquet d'ondes représentant une particule individuelle :

$$\psi_i(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int A(k)\exp(ikx - i\omega(k)t)dk \quad (1) \quad \text{(valable pour } x < 0)$$

A(k) est une fonction réelle, normalisée à 1, qui présente un maximum pour $k = k_0$ et qui ne prend de valeurs importantes que dans un petit intervalle Δk autour de k_0. A k_0 correspond l'énergie $E_0 = \hbar^2 k_0^2/2m$. Enfin A(k) est nul pour $k \geq K_0 = \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar}$ (voir figure 2).

1) Montrer que le paquet d'ondes défini par (1) représente bien une particule incidente. Pour cela on calculera la vitesse de déplacement du "maximum" de ce paquet $x_M(t)$ pour t < 0. Pour faire ce calcul on utilisera la méthode dite de la phase stationnaire que l'on justifiera brièvement.
2) Ecrire l'expression du paquet d'onde $\Psi_r(x,t)$ correspondant à la particule après réflexion sur la barrière (valable pour x < 0).

3) En étudiant la propagation du maximum de ce paquet d'ondes réfléchi pour $t > 0$, montrer que la réflexion de la particule sur la barrière se fait avec un retard τ que l'on exprimera en fonction de $\frac{d\phi}{dE}$ puis en fonction de E_0 et de V_0.

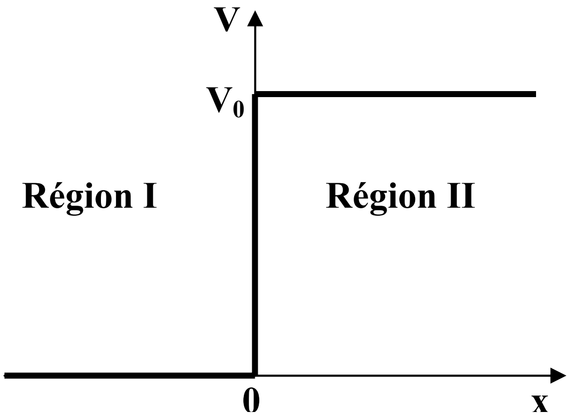


Figure 1

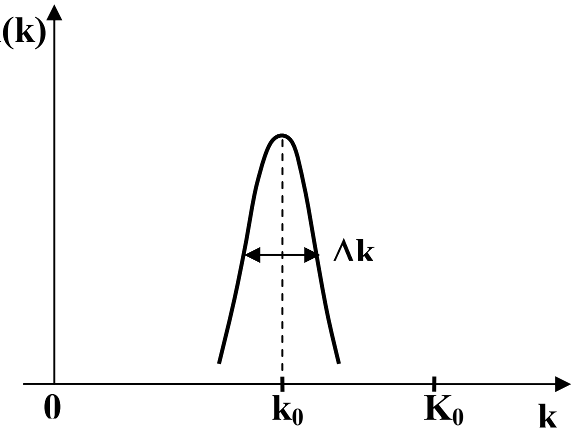


Figure 2

Second problème : Molécule de benzène

On étudie une molécule formée de 6 atomes identiques $A_0, A_1, \ldots, A_5$ formant un hexagone régulier. On considère un électron qui peut être localisé sur l'un quelconque de ces atomes. On appelle $|\phi_n\rangle$ l'état quantique correspondant à l'électron localisé sur l'atome A_n. On se limitera pour l'espace des états $\mathcal{E}$ de l'électron à l'espace engendré par les six états $|\phi_n\rangle$, qui, de plus, seront supposés orthonormés : $\langle\phi_n|\phi_m\rangle = \delta_{nm}$.

1) On définit l'opérateur R par les relations : $R|\phi_n\rangle = |\phi_{n+1}\rangle$ (avec la "convention cyclique" : si $n = 5$, $n + 1 = 6 \equiv 0$). Montrer que les valeurs propres de l'opérateur R sont les six racines sixièmes de l'unité : $\lambda_k = \exp(2ik\pi/6)$ avec $k = 0, 1, \ldots, 5$
2) On note $|\psi_k\rangle$ le vecteur propre de R associé à λ_k. Dans la base des $|\phi_n\rangle$, $|\psi_k\rangle$ s'écrit : $|\psi_k\rangle = \sum_n c_{kn}|\phi_n\rangle$. Trouver la relation de récurrence reliant les c_{kn} et déterminer ces coefficients en normalisant $|\psi_k\rangle$ et en fixant c_{k0} réel positif.
3) Vérifier que les $|\psi_k\rangle$ ainsi déterminés forment une base orthonormée de $\mathcal{E}$.

Lorsqu'on néglige la possibilité pour l'électron de passer d'un site à un site voisin, son énergie est décrite par un hamiltonien H_0 qui admet pour états propres les états $|\phi_n\rangle$ avec tous la même valeur propre E_0. On prend en compte la possibilité pour l'électron de sauter d'un atome à l'autre en remplaçant H_0 par $H = H_0 + W$ où la perturbation W est défini par : $W|\phi_n\rangle = -A\left(|\phi_{n+1}\rangle + |\phi_{n-1}\rangle\right)$ avec, là encore, la convention cyclique : si $n = 5$, $n + 1 = 6 \equiv 0$ et si $n = 0$, $n - 1 = -1 \equiv 5$). A est une constante positive.

4) Montrer que R commute avec H. En déduire quels sont les états propres de H
5) Trouver les valeurs propres de H correspondant à ces états propres. Discuter les dégénérescences des niveaux d'énergie du système. Dans les états propres trouvés l'électron est il localisé ou délocalisé ?
6) La molécule de benzène C_6H_6 correspond à la géométrie discutée ici. Quelles réflexions qualitatives vous inspirent les résultats de cet exercice sur les propriétés électroniques de la molécule de benzène dans son état de plus basse énergie (état électronique fondamental)?

École Normale Supérieure de LYON

Université Claude Bernard - LYON 1

L3 Sciences de la matière
Introduction au Monde Quantique

Contrôle partiel, Mercredi 4 Novembre 2009

Durée 2h00

La théorie des bandes en physique des solides

Le but de cet exercice est d'introduire de manière simple quelques unes des notions clés de la physique des solides. En effet, dans un solide cristallin, le mouvement des électrons est assujetti au potentiel périodique vu par ceux-ci. Une des conséquences de la périodicité de ce potentiel est l'apparition de bandes énergétiques interdites dans la relation de dispersion $E(k)$ des électrons, où E est l'énergie des électrons et k leur vecteur d'onde.

Le traitement suivant est basé sur l'application d'un théorème central en matière condensée et qui est rappelé ici : c'est le **théorème de Bloch**.

Théorème 1 (Théorème de Bloch). *Soit Φ un état stationnaire dans un potentiel périodique V de période l :*

$$V(x+l) = V(x) \tag{1}$$

Le théorème de Bloch nous indique que ces états stationnaires se mettent sous la forme :

$$\varphi_{sq}(x) = e^{\imath qx} u_{sq}(x), \tag{2}$$

où la fonction u_{sq} a la même périodicité que le potentiel. s est un indice qui labelle les états ayant une même valeur de quasi-impulsion q.

Application du théorème de Bloch

1) On considère un électron dans un potentiel périodique unidimensionnel $V(x)$. Écrire l'équation de Schrödinger stationnaire de ce système unidimensionnel. On notera $E_{s,q}$ l'énergie associée à l'état $\varphi_{sq}(x)$.

2) En déduire l'équation différentielle dont est solution la fonction u_{sq}, en fonction de q, et de l'énergie $E_{s,q}$ dans cet état.

3) La fonction d'onde dans un potentiel périodique s'obtient en résolvant l'expression précédente dans l'intervalle $[0; l]$ par exemple. q est appelée une quasi-impulsion (car de dimension identique à k). Supposons que le potentiel est pair. Comment se comparent les deux énergies $E_{s,q}$ et $E_{s,-q}$? Que peut-on en déduire sur la dégénérescence des niveaux, c'est-à-dire sur les différentes valeurs $E_{s,q}$ de l'énergie des états stationnaires ?
Indication : penser à utiliser la transformation $x \longrightarrow -x$ et $q \longrightarrow -q$.

La théorie des bandes dans un solide

On considère un potentiel en créneaux comme représenté sur la figure 1. Chaque créneau de largeur a est centré en $x = pl$ avec p entier relatif. Le but de cet exercice est de déterminer la relation de dispersion d'un électron dans un tel potentiel. Pour cela, on considère le créneau n ($p = n$), et on étudie l'allure des solutions de l'équation déterminée à la question 1) dans les zones où V est nul, à droite et à gauche du créneau considéré. On note avec un indice n les amplitudes à gauche du créneau et avec $n+1$ celles à droite du créneau. On s'intéresse dans cet exercice à des particules de masse m avec une énergie E positive et inférieure à V_0.
D'après les notations de la figure 1, la fonction d'onde $\varphi(x)$ d'un électron à gauche de ce créneau n est de la forme :

$$\varphi(x) = A_n e^{\imath kx} + B_n e^{-\imath kx} \tag{3}$$

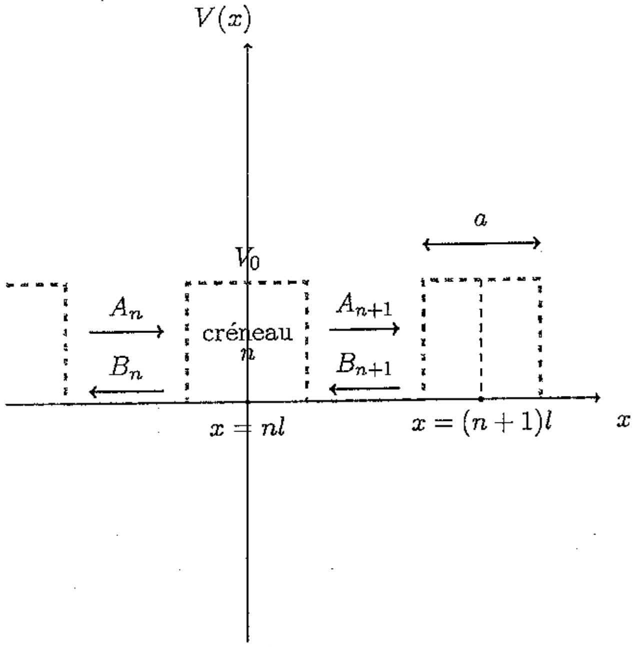


FIGURE 1 – Potentiel périodique $V(x)$ créé par le réseau et vu par les électrons. La matrice de passage par effet tunnel M lie les amplitudes A_n et B_n, aux amplitudes A_{n+1} et B_{n+1}. l est la périodicité spatiale du potentiel. V_0 est l'amplitude du potentiel, a est la largeur de chaque barrière de potentiel.

Dans le créneau, la fonction d'onde sera prise sous la forme :

$$\varphi(x) = C_n e^{\rho x} + D_n e^{-\rho x}. \tag{4}$$

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \qquad \text{et} \qquad \rho^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}. \tag{5}$$

4) La matrice de passage M lie les amplitudes A_n et B_n aux amplitudes A_{n+1} et B_{n+1} sous la forme suivante :

$$\begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} A_{n+1} \\ B_{n+1} \end{pmatrix} \qquad \forall n \in \mathbb{Z}.$$

La matrice M est de la forme

$$M = \begin{pmatrix} \gamma & \delta \\ \delta^* & \gamma^* \end{pmatrix}.$$

Vérifier que

$$\gamma = e^{\imath ka}\left(\cosh(\rho a) - \imath \frac{k^2 - \rho^2}{2k\rho} \sinh(\rho a)\right). \tag{6}$$

Trouver l'expression de δ et vérifier que $|\gamma|^2 - |\delta|^2 = 1$.
ATTENTION : pour simplifier les calculs au maximum, considérer la cas $n = 0$ (créneau centré en $x = 0$).

5) En utilisant le théorème de Bloch, montrer que l'on a :

$$e^{\imath ql}\begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} = DM^{-1}\begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix}.$$

Donner la forme de la matrice D.
Interpréter l'équation précédente en terme de valeur propre et de vecteur propre de $\tilde{M} = DM^{-1}$.

6) Écrire l'équation aux valeurs propres de la matrice $\tilde{M}$. (On tirera profit de la relation $\det M = |\gamma|^2 - |\delta|^2 = 1$ pour inverser M).

7) Discuter les résultats trouvés pour les 2 valeurs propres en fonction du paramètre $x = \mathrm{Re}\left(\gamma^* e^{\imath kl}\right)$. À quelle condition ces valeurs propres sont-elles conformes à ce que l'on attend d'après la question 5).

8) On va s'intéresser à un cas particulier de potentiel. On considèrera par la suite que V est un peigne de Dirac, c'est-à-dire que :

$$V(x) = \sum_{p=-\infty}^{+\infty} \frac{\hbar^2 g}{2m}\delta(x - pl). \tag{7}$$

Ce type de potentiel est un cas limite du potentiel en créneau périodique présenté sur la figure 1, que l'on obtient en faisant tendre vers 0 la largeur a de chaque barrière de potentiel, tout en maintenant le produit $V_0 a$ constant, où V_0 est l'amplitude du potentiel.
Montrer, à l'aide de l'équation (5) que :

$$\rho \to \sqrt{\frac{g}{a}} \qquad \text{et} \qquad \gamma \to 1 + \imath\frac{g}{2k}. \tag{8}$$

9) En déduire l'expression du paramètre x défini à la question 7). Conclure qualitativement sur la notion de bande d'énergie interdite. On rappelle que $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$.

Étude quantitative (rapide).

Pour étudier quantitativement l'apparition de bandes énergétiques interdites, on va étudier la fonction :

$$f : y \to \cos y + \frac{gl}{2y}\sin y, \tag{9}$$

où $y = kl$.

10) *Étude de la première bande interdite.* Quelle est la valeur de $f(0)$? En déduire l'apparition d'un intervalle $0 \leq y \leq y_0$ ou $0 \leq k \leq k_0$ interdit. Donner les estimations analytiques de y_0 ou k_0, en considérant l'approximation $gl \ll 1$.

11) *Autres bandes interdites.* Montrer qu'il existe d'autres zones interdites en considérant $y = n\pi + \varepsilon$, où $|\varepsilon| \ll 1$, et en calculant $|f(y)|$ à l'ordre 1 en ε.

12) Tracer qualitativement f en fonction de y et déterminer ainsi l'alternance des différentes zones interdites et permises.

13) On s'intéresse à la zone $k \gtrsim k_0$. Montrer que dans cette situation on peut relier q^2 et $(k - k_0)$ par la relation :

$$\frac{1}{2}q^2 l^2 = -(k - k_0)f'(y_0). \tag{10}$$

En déduire que la relation entre q et l'énergie se met sous la forme :

$$E - E_0 = \frac{\hbar^2 q^2}{2m^*}, \tag{11}$$

où $E_0 = E(k_0)$ et m^* est appelée "masse effective" de l'électron. Exprimer m^* en fonction de $|f'(y_0)|$ et des paramètres du système. En déduire l'effet, en première approximation au voisinage de k_0, du réseau cristallin sur les électrons de conduction.

FIN DU PROBLÈME.

Chapitre 8

Examens

Cette partie regroupe les examens donnés de janvier 2004 à janvier 2010

Liste des exercices

Magistère de Sciences de la Matière
année 2003-2004

Introduction au monde quantique
Examen de Janvier 2004, 3h

Les parties I et II sont entièrement indépendantes.

1 Question de cours: système à 2 niveaux

1. On modèlise la molécule d'ammoniac par un système à 2 niveaux. Expliquer rapidement:
-quels états sont ignorés dans cette modélisation
-la représentation de l'Hamiltonien du système dans la base ($|\psi_S>$,$|\psi_A>$) (état symétrique et antisymétrique) est une matrice 2x2 $\begin{pmatrix} -A & 0 \\ 0 & A \end{pmatrix}$ ($A > 0$). On justifiera qualitativement pourquoi l'état $|\psi_S>$ a une énergie inférieure à $|\psi_A>$.

2. Définir les états droite et gauche $|\psi_d>$ et $|\psi_g>$ à partir des états ($|\psi_S>$,$|\psi_A>$). Donner la représentation de l'Hamiltonien dans la base $|\psi_d>$, $|\psi_g>$.

3. Interpréter le paramètre A, et donner qualitativement sa variation en fonction de l'épaisseur de la barrière qui sépare les puits de droite et de gauche.

4. On place la molécule dans un champ électrique $\mathcal{E}$ parallèle à son axe (perpendiculaire au plan des hydrogènes). Sachant que l'état $|\psi_d>$ correspond à un dipôle $+d$, et l'état $|\psi_g>$ à un dipôle $-d$, écrire l'Hamiltonien du système dans la base ($|\psi_d>$, $|\psi_g>$).

5. Calculer les niveaux d'énergie en présence du champ. Rappeler le principe d'un appareil permettant de "préparer" les molécules dans l'état $|\psi_S>$ ou $|\psi_A>$. On fera un schéma précis, en indiquant la direction du gradient de champ et le sens de déviation pour chaque état.

2 Rotateur rigide dans le plan

On considère un système constitué d'un objet linéaire rigide (par exemple une molécule H_2 qui a pour seul mouvement une rotation dans le plan xOy autour de l'axe Oz fixe. La position de cet objet est repérée par l'angle ϕ que fait son axe avec l'axe des x. Son énergie cinétique s'écrit, classiquement $L_z^2/2J$ où L_z est le moment cinétique suivant Oz, J le moment d'inertie par rapport à l'axe Oz.
En physique quantique, on représente l'état du rotateur à l'instant t par une fonction d'onde $\psi(\phi, t)$, **périodique de période 2π par rapport à la variable ϕ**

1. Justifier que l'opérateur associé au moment cinétique $\hat{L}_z$ a pour action sur une fonction $\psi(\phi, t)$
$$\hat{L}_z\psi(\phi, t) = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\phi}\psi(\phi, t)$$
(On pourra se rappeler l'expression $\mathbf{L} = \mathbf{r} \wedge \mathbf{p}$ et l'exprimer en coordonnées cylindriques). Le gradient en coordonnées cylindriques s'écrit $(\frac{\partial}{\partial r}, r^{-1}\frac{\partial}{\partial\phi}, \frac{\partial}{\partial z})$.

2. Ecrire l'équation de Schrödinger pour la fonction $\psi(\phi, t)$.

3. Montrer qu'une base d'états stationnaires est donnée par les fonctions d'ondes

$$\psi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(im\phi)$$

   où m est un entier (positif ou négatif).

   Quelle est l'énergie associée E_m associée à l'état représenté par ψ_m (l'exprimer en fonction de m, J et $\hbar$)? Quelle est la dégénérescence de cette énergie ?

4. La fonction d'onde $\psi(\phi, t_0)$ à l'instant t_0. est proportionnelle à $\cos^3 \phi$. Donner les résultats possibles d'une mesure de l'énergie du rotateur à l'instant t_0, ainsi que leurs probabilités.

5. Si la fonction d'onde à l'instant $t = 0$ est $\psi_0(\phi)$, écrire la formule générale de décomposition sur les états propres qui permet de calculer son évolution dans le temps. On précisera la formule permettant de calculer les coefficients.

6. Le rotateur passe de l'état ψ_1 à l'état ψ_0 en émettant un photon dans la direction z. Discuter les propriétés (énergie, moment cinétique, impulsion, domaine de longueur d'onde) de ce photon. Application numérique: le rotateur est une molécule H_2, pour laquelle la distance entre les 2 protons est $0,08nm$. masse du proton $1,610^{-27}$kg.

7. Le rotateur a maintenant une énergie potentielle

$$V(\phi) = \epsilon \cos(2\phi)$$

   ϵ étant supposé petit, on souhaite traiter $V(\phi)$ en perturbation.

   A quelle énergie comparer ϵ pour savoir si $V(\phi)$ peut effectivement être considéré comme "petit" ?

8. Calculer en perturbation au premier ordre
   -l'énergie de l'état fondamental
   -la fonction d'onde associée.

9. On cherche maintenant à faire un calcul variationnel de l'énergie de l'état fondamental en présence de $V(\phi)$. On choisit une fonction d'onde d'essai de la forme

$$\psi_e(\phi) = \cos\alpha\ \psi_0(\phi) + \frac{1}{\sqrt{2}} \sin\alpha\ \psi_2(\phi) + \frac{1}{\sqrt{2}} \sin\alpha\ \psi_{-2}(\phi)$$

   où α est le paramètre variationnel.

   Justifier qualitativement ce choix pour la fonction d'essai.

   Calculer l'énergie variationelle et la valeur optimale de α (on pourra remarquer que $\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_2(\phi) + \psi_{-2}(\phi))$ est une fonction propre de l'hamiltonien non perturbé.).

Université Claude Bernard-Lyon I
UFR de Physique

Ecole Normale Supérieure de Lyon
Département des Sciences de la Matière

Licence de Physique, Parcours Sciences de la Matière, Année 2004-2005
Examen de première session, Janvier 2005 (3h)

Les parties I,II et III sont entièrement indépendantes.

1 Question de cours

On considère un système de spin 1/2 de moment magnétique μ placé dans un champ magnétique fixe $\vec{B}_0$ parallèle à Oz. On superpose à ce champ fixe un champ tournant dans le plan xOy, avec une amplitude B_1 et une pulsation ω.

1. Ecrire la représentation de l'hamiltonien dans une base de l'espace des états que l'on précisera.
2. Ecrire et résoudre les équations décrivant l'évolution du système.
3. On prépare un système dans l'état $|+>_z$. Quelle est la probabilité de le trouver dans l'état $|->_z$ après un temps t? Expliquer qualitativement ce qui se produit à la fréquence de résonance magnétique.
4. Expliquer le principe d'une expérience de résonance magnétique nucléaire. On précisera en particulier les points suivants: ordre de grandeur des fréquences électromagnétiques mises en jeu, origine du déséquilibre entre populations qui fait que le système absorbe de l'énergie.

2 Effet de volume du noyau sur l'état fondamental d'un ion hydrogénoide

On veut décrire l'influence du fait que le noyau atomique a un volume fini sur l'état fondamental d'un ion hydrogénoide. Pour cela on représente le noyau par une sphère uniformément chargée de rayon R_n, de charge Ze. Le potentiel créé par cette sphère est

$$V(r) = \frac{-Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad \text{pour} \quad r > R_n \tag{1}$$

$$V(r) = \frac{Ze^2}{8\pi\epsilon_0 R_n}\left[\left(\frac{r}{R_n}\right)^2 - 3\right] \quad \text{pour} \quad r < R_n \tag{2}$$

On note a_0 le rayon de Bohr et $E_H = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 a_0} = -13,6eV$ l'énergie du niveau fondamental de H (avec un noyau ponctuel). On suppose que l'on connaît les énergies et états propres correspondant au cas du noyau ponctuel.

1. Représenter sur une figure les énergies potentielles correspondant à un noyau ponctuel et à un noyau de rayon R_n fini. Formuler le problème de la détermination des niveaux d'énergie en termes d'un hamiltonien de référence et d'un hamiltonien de perturbation.
2. La correction due au volume fini du noyau va t'elle être plus importante (en valeur absolue) pour les états de haute ou de basse énergie ? Expliquer votre réponse brièvement et sans calcul.

3. Pour un noyau ponctuel, l'état fondamental est non dégénéré et sa fonction d'onde est $\psi_0(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} \exp(-r/a)$, avec $a = a_0/Z$. Son énergie est $E_0 = -Z^2 E_H$ Calculer au premier ordre de la méthode des perturbations le déplacement en énergie ΔE de l'état fondamental. Pour évaluer simplement l'intégrale obtenue, on pourra faire l'approximation que $a \gg R_n$ ce qui permet de remplacer la fonction d'onde par sa valeur à l'origine.

4. Montrer que $\Delta E/E$ s'exprime simplement en fonction de R_n et a.

5. En supposant que R_n est proportionnel à $Z^{1/3}$ montrer que le changement relatif de l'énergie du niveau fondamental est proportionnel à Z^{α}, où α est un exposant que l'on calculera.

6. Si on considère deux noyaux "isotopiques" de même charge Z mais de rayons R_n différents, l'effet étudié ici aura pour conséquence un petit déplacement du niveau fondamental. Un autre effet classique cause également un déplacement "isotopique": lequel ? Discuter, en fonction de la masse du noyau, lequel de ces effets est prépondérant.

3 Electron élastiquement lié dans un champ électrique oscillant

On considère un oscillateur harmonique unidimensionnel de pulsation ω. Cet oscillateur porte une charge q et est soumis à un champ électrique oscillant $\mathcal{E}\cos(\Omega t)$. L'hamiltonien s'écrit

$$H = \frac{1}{2m}\hat{P}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{X}^2 - q\mathcal{E}\hat{X}\cos(\Omega t)$$

On note $|\phi_n>$ l'état stationnaire d'énergie $E_n = (n+1/2)\hbar\omega$ de l'oscillateur en l'absence du champ oscillant. On note $|\psi(t)>$ l'état du système à l'instant t.

1. On suppose que à $t = 0$, $|\psi(t)> = |\phi_0>$. Utiliser la théorie des perturbations dépendant du temps au premier ordre pour calculer $|\psi(t)>$.

2. On veut calculer la valeur moyenne à l'instant t du dipôle électrique $D(t) = <\psi(t)|q\hat{X}|\psi(t)>$. Montrer que à l'ordre linéaire en $\mathcal{E}$, celle ci contient un terme oscillant à la fréquence Ω qui s'écrit
$$D(t) = \frac{2q^2}{\hbar}\mathcal{E}\cos(\Omega t)\sum_{n\neq 0}\frac{n\omega}{(n\omega)^2-\Omega^2}|<\phi_n|\hat{X}|\phi_0>|^2$$

3. Discuter les similarités et différences avec ce qui se passe pour un oscillateur harmonique classique de pulsation ω.

On rappelle que pour une perturbation dépendant du temps $W(t)$, le coefficient de l'état $|\phi_n>$ va s'écrire au premier ordre en perturbation (en supposant qu'à l'instant $t = 0$ le système est dans l'état $|\phi_0>$):

$$c_n(t) = \frac{1}{i\hbar}\exp(-iE_nt/\hbar)\int_0^t <\phi_n|W(s)|\phi_0> \exp(i(E_n-E_0)s/\hbar)ds$$

Pour la première question on rappellera le raisonnement qui permet d'obtenir ce résultat.

Université Claude Bernard-Lyon I
UFR de Physique

Ecole Normale Supérieure de Lyon
Département des Sciences de la Matière

Licence de Physique, Parcours Sciences de la Matière, Année 2004-2005
Examen de seconde session, Mai 2005 (3h)

Les parties I,II et III sont entièrement indépendantes.

1 Etat fondamental de l'atome H

La fonction d'onde de l'électron de l'atome d'hydrogène dans son état fondamental est de la forme
$$\psi(\vec{r}) = A\exp(-r/a_0)$$
où a_0 est le rayon de Bohr.
On notera bien que $\vec{r}$ désigne un point dans un espace **à 3 dimensions**.

1. Calculer la constante A en fonction de a_0

2. Calculer la valeur moyenne de l'énergie potentielle et de l'énergie cinétique de l'électron. Pour l'énergie cinétique on utilisera le fait que $\vec{\text{grad}}\ \psi(r)$ est purement radial, et égal à $\psi'(r)\vec{e}_r$. On exprimera les résultats en fonction de a_0 et de constantes universelles.

3. Rappeler (sans calcul) les valeurs numériques de l'énergie de liaison de l'électron et du rayon de Bohr a_0. Vérifier que ces valeurs sont cohérentes avec le résultat ci dessus.

On donne $e = 1.6\ 10^{-19}$C, $m_e = 9.\ 10^{-31}$kg, $1/(4\pi\epsilon_0) = 9.\ 10^9$SI

2 Puits de potentiel asymétrique et noyau de deutérium

Le deuton est composé d'un proton et d'un neutron. Son énergie de liaison est $E = -2.22$ MeV et il n'existe pas d'autres états liés. Dans le cas d'une fonction d'onde à symétrie sphérique, on peut modéliser l'interaction proton-neutron par un puits de potentiel **à une dimension** défini par :

$$\begin{cases} V(z) = +\infty \quad \text{pour } z < 0 \\ V(z) = -V_0 \quad \text{pour } 0 \leq z \leq R (V_0 > 0) \\ V(z) = 0 \quad \text{pour } z > R \end{cases}$$

La variable z représente la distance entre le proton et le neutron.

1. Ecrire les équations qui doivent être vérifiées par l'énergie E et la fonction d'onde $\psi(z)$ d'un état stationnaire dans les différentes régions de l'espace.

2. On pose :

$$q = \frac{\sqrt{2\mu(E+V_0)}}{\hbar} \quad , \qquad k = \frac{\sqrt{-2\mu E}}{\hbar}$$

Montrer que les énergies des états liés sont solutions de l'équation :

$$qR\ \mathrm{cotan}(qR) = -kR$$

3. Etudier cette équation graphiquement en prenant $x = qR$ comme variable. On remarquera que k^2+q^2 est une constante. Quelle est la condition pour que le système ait n états liés ?

3 Molécule CO_2

La molécule de CO_2 est représentée par un **modèle unidimensionnel** de 3 points reliés par des ressorts de raideur k. On appelle atome 1 le premier atome O,2 l'atome C et 3 le second atome O. La masse des O est M, celle de C est m.

1. On appelle u_i le déplacement de l'atome i par rapport à sa position d'équilibre. Justifier que l'énergie potentielle du système est

$$\frac{k}{2}((u_1-u_2)^2+(u_2-u_3)^2)$$

2. Ecrire les équations du mouvement classiques pour les grandeurs u_1,u_2 et u_3. En introduisant les quantités $U = u_1 - u_3$, $V = u_1 + u_3 - 2u_2$, $W = (Mu_1 + mu_2 + Mu_3)/(m+2M)$ montrer que ces équations sont équivalentes à celles du centre de gravité, et de deux oscillateurs harmoniques indépendants dont on précisera les fréquences.

3. On admet que le problème quantique se résout de la même manière, et introduit les mêmes oscillateurs harmoniques indépendants. Donner les énergies des 3 premiers niveaux excités de la molécule.

4. A quel type de mouvement correspondent, respectivement, des mouvements pour lesquels U ou V sont nuls ?

5. Expliquer pourquoi seulement un des deux types de vibration (lequel ?) va conduire à une absorption du champ électromagnétique.

6. Sachant que la molécule absorbe le rayonnement infra-rouge à une longueur d'onde de 4,2μm, donner une valeur de la constante k. On donne $m = 12m_p$, $M = 16m_p$, $m_p = 1,67\ 10^{-27}$kg.

Université Claude Bernard-Lyon I
UFR de Physique

Ecole Normale Supérieure de Lyon
Département des Sciences de la Matière

Licence de Physique, Parcours Sciences de la Matière, Année 2005-2006
Examen de première session, Janvier 2006 (3h)

Les parties I,II et III sont entièrement indépendantes.

1 Question de cours

1. Quelles sont les relations de commutation qui caractérisent les trois composantes J_x, J_y, J_z d'un opérateur moment cinétique ?
2. Démontrer en particulier ces relations pour le moment cinétique orbital d'une particule.
3. Quelle propriété de J^2 et J_z (à démontrer) permet de dire que ces deux opérateurs ont une base propre commune?
4. Quelles sont les valeurs propres possibles pour les opérateurs J^2 et J_z (on ne demande pas de démonstration)?
5. Quelle est la dimension de l'espace des états pour un moment cinétique dans lequel on observe que la mesure de J_z donne un résultat au maximum égal à $2\hbar$? Même question pour $5\hbar/2$?

2 Démarrage adiabatique d'une perturbation

On considère un système d'Hamiltonien H_0 connu, avec un spectre d'énergies dénotées par E_n et des vecteurs d'états associés $|\phi_n\rangle$. On suppose que pour $t \to -\infty$ le système est dans l'état fondamental de H_0, $|\phi_0\rangle$, d'énergie E_0, supposé non dégénéré.
Le système est soumis dans l'intervalle de temps $]-\infty, 0]$ à une perturbation dépendant du temps de la forme $W(t) = H_1 \exp(t/\tau)$, où τ est une constante de temps fixée et H_1 une perturbation indépendante du temps. On pourra noter W_{0n} l'élément de matrice $\langle\phi_0|H_1|\phi_n\rangle$, $\omega_{0n} = (E_n - E_0)/\hbar$

1. Utiliser la théorie des perturbations dépendant du temps pour calculer la probabilité $P_{0\to n}(0)$ de trouver le système dans l'état $|\phi_n\rangle$ à l'instant $t = 0$.
2. Calculer en utilisant la théorie des perturbations indépendantes du temps le vecteur d'état décrivant l'état fondamental de l'Hamiltonien (indépendant du temps) $H_0 + H_1$
3. Comparer les résultats des questions précédentes. A quelle condition sur le temps τ peut on considérer que le système reste toujours dans son état fondamental (conditions dites "adiabatiques")? Interpréter en terme des composantes de Fourier (en fréquence) de la fonction $\exp(t/\tau)$. Application numérique: un atome d'hydrogène, animé d'une vitesse de 1000m/s, passe à une distance de 1nm d'un ion H^+. Va t'il passer dans un état excité?

3 Inégalité de Bell et résultat d'une mesure quantique

Les trois premières questions sont de l'ordre de la question de cours. Les suivantes ne demandent aucun calcul complexe, mais une certaine réflexion. Il est donc indispensable de rédiger très clairement vos réponses

On considère une paire de particules différentes, qui portent chacun un spin 1/2. Ces particules sont préparées **dans un état initial où le moment cinétique total $\vec{S}_1 + \vec{S}_2$ est nul**, et s'éloignent l'une de l'autre, sans que l'ensemble du système $1+2$ ne subisse d'interaction. Une fois que les particules sont éloignées, on mesure séparément la composante de leur moment cinétique suivant un axe z.
On mesure d'abord la composante S_{1z} du moment cinétique de la particule 1 suivant Oz. On obtient alors le résultat $+\hbar/2$ ou $-\hbar/2$, avec des probabilités 1/2.

1. Si la mesure du moment cinétique S_{1z} pour la particule 1 donne le résultat $+\hbar/2$, quels sont les résultats possibles pour une mesure du moment cinétique suivant z de la particule 2? En déduire l'état quantique de la particule 2 après une mesure sur 1 qui donne le résultat $+\hbar/2$.

2. Après avoir effectué la mesure de S_{1z} sur la particule 1, on mesure pour la particule 2 la composante $S_{2\phi}$ du moment cinétique suivant un axe noté ϕ, qui est contenu dans le plan xOz fait l'angle ϕ avec l'axe Oz. Quels sont les deux résultats que l'on peut obtenir ? Avec quelles probabilités ? On rappelle l'égalité $S_{2\phi} = \cos\phi\ S_{2z} + \sin\phi\ S_{2x}$ valable pour les opérateurs.

3. En considérant les probabilités respectives pour les 4 résultats possibles de mesures consécutives de S_{1z} et $S_{2\phi}$, déduire la quantité
$$F(\phi) =< S_{1z}S_{2\phi} >$$
Le fait que cette quantité est non nulle est caractéristique de l'existence d'une *corrélation* entre les résultats des deux mesures faites séparément sur la particule 1 et la particule 2.

4. Le résultat précédent implique que la physique quantique est "non locale". La mesure faite sur 1 influence le résultat de la mesure faite sur 2, même si les deux particules sont très éloignées.

   Cette "non localité" pourrait être évitée en faisant l'hypothèse que la corrélation entre les résultats de deux mesures dénote l'existence d'une cause commune, appelée "variable cachée" qui est déterminée par la préparation initiale de l'état des deux particules. Dans cette hypothèse le résultat de la mesure de S_{1z} devient une simple fonction, $s_{1z}(\lambda)$ de cette "variable cachée", dénotée par λ. **Cette fonction peut prendre uniquement les valeurs** $\pm\hbar/2$; de même, la mesure de $S_{2\phi}$ est une fonction $s_{2\phi}(\lambda)$. **Comme les deux particules ont un spin total nul, on a $s_{2\phi}(\lambda) = -s_{1\phi}(\lambda)$ pour toutes valeurs de ϕ et λ.**

   Justifier alors que
$$F_{loc}(\phi) =< S_{1z}S_{2\phi} >= \int d\lambda s_{1z}(\lambda)s_{2\phi}(\lambda)p(\lambda)$$
   où $p(\lambda)$ est la distribution de probabilité de la variable λ lors de la préparation du système.

5. Montrer que si on considère deux angles ϕ et ϕ' on va avoir l'inégalité (dite inégalité de Bell):
$$|F_{loc}(\phi) - F_{loc}(\phi')| \leq \frac{\hbar^2}{4} + F_{loc}(\phi - \phi')$$
   .

   Indications: on utilisera (en le justifiant) que:
   (i) $s_{1z}(\lambda)^2 = s_{2\phi}(\lambda)^2 = s_{2\phi'}(\lambda)^2 = \hbar^2/4$
   (ii) $s_{1z}(\lambda)s_{2\phi'}(\lambda) = -(4/\hbar^2)s_{1z}(\lambda)s_{2\phi}(\lambda)s_{1\phi}(\lambda)s_{2\phi'}(\lambda)$
   (iii) $p(\lambda) \geq 0$
   (iv) $\int d\lambda p(\lambda)|s_{1z}(\lambda)s_{2\phi}(\lambda)| \leq \hbar^2/4$

6. Montrer que cette inégalité n'est pas vérifiée en général par le résultat quantique obtenu à la question 2. On pourra considérer le cas particulier $\phi' = 2\phi$. Conclusions ?

Université Claude Bernard-Lyon I
UFR de Physique

Ecole Normale Supérieure de Lyon
Département des Sciences de la Matière

Licence de Physique, Parcours Sciences de la Matière, Année 2005-2006
Examen de première session, Janvier 2007 (3h)

Les différentes parties sont entièrement indépendantes.

1 Perturbation dépendant du temps

On considère un système d'Hamiltonien H_0, dont les états propres et énergies propres seront notés $|\phi_n>$ et E_n. On soumet ce système à une perturbation dépendant du temps représentée par un opérateur $V(t)$. L'élément de matrice $\langle\phi_n|V(t)|\phi_m\rangle$ est noté $V_{nm}(t)$.

1. Sachant que à $t = 0$ le système est dans l'état $|\phi_n>$, établir au premier ordre en perturbation l'expression de la probabilité $P_{kn}(t)$ de trouver le système dans l'état $|\phi_k>$ à l'instant t.
2. On considère le cas particulier où le système est un oscillateur harmonique d'Hamiltonien $H_0 = P^2/2M + M\omega^2X^2/2$, et la perturbation est de la forme $AXf(t)$. A l'instant initial, le système est dans l'état fondamental. Montrer que, si on se limite au premier ordre, la probabilité de passer dans un état d'énergie $(n + 1/2)\hbar\omega$ est nulle si n est différent de 1.
3. Dans le cas de l'oscillateur harmonique ci dessus, on suppose que l'on peut se limiter à considérer les 3 états $|\phi_0>$, $|\phi_1>$ et $|\phi_2>$. Proposer un calcul de perturbation au second ordre qui permette de calculer la probabilité $P_{02}(t)$. On exprimera le résultat en fonction des éléments de matrice $X_{01} =< \phi_0|X|\phi_1>$, $X_{12} =< \phi_1|X|\phi_2>$, et d'une intégrale double portant sur la fonction $f(t)$, $I(t) = \int_0^t ds f(s)\exp(i\omega s)\int_0^s ds' f(s')\exp(i\omega s')$
4. Discuter le résultat, en considérant le cas particulier d'une perturbation sinusoidale $f(t) = \exp(i\Omega t)$. En quoi le résultat de l'oscillateur harmonique est il particulier, par rapport à un système où le niveau intermédiaire $|\phi_1>$ ne serait pas équidistant en énergie des deux autres niveaux ?

2 Spins 1/2

On considère un système formé de deux particules discernables de spin 1/2. L'Hamiltonien du système est

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

L'état du système à $t = 0$ est $|\psi>= \frac{1}{\sqrt{2}}(|+->+|-+>)$. Si on effectue une mesure de $S^2 = (S_1 + S_2)^2$ à un instant $t > 0$, quels résultats peut on trouver, et avec quelles probabilités ?

3 Réflexion de neutrons sur un matériau ferromagnétique

Un jet de neutrons d'énergie E est envoyé, en incidence normale, sur un matériau ferromagnétique. Le matériau occupe le demi-espace $x > 0$. Il y règne un champ magnétique parallèle à z, d'intensité B_0. Dans la partie $x < 0$, les neutrons se propagent dans le vide et le champ magnétique est supposé nul.
On suppose que dans le matériau les neutrons sont soumis à deux types d'interaction: un potentiel uniforme $V_0 > 0$ et un potentiel d'origine magnétique, $-\gamma S_z B_0$, où S_z est la composante suivant z du moment magnétique. On se placera toujours dans la situation où $0 < \gamma\hbar B_0/2 < V_0$.

1. On suppose que le faisceau initial est constitué de 50% de particules dans l'état $|+>$ et de 50% de particules dans l'état $|->$. Montrer que pour une énergie des neutrons incidents telle que $V_0 - \gamma\hbar B_0/2 < E < V_0 + \gamma\hbar B_0/2$, le faisceau réfléchi sera polarisé, et calculer son taux de polarisation (différence entre les pourcentages de neutrons dans l'état $|+>$ et dans l'état $|->$.

2. Montrer, par un argument qualitatif, que le faisceau réfléchi ne sera pas polarisé si $E < V_0 - \gamma\hbar B_0/2$

3. On considère maintenant un faisceau incident de particules polarisées suivant x (état de spin incident $|+>_x$). On se place dans une situation de réflexion totale, soit $E < V_0 - \gamma\hbar B_0/2$. Construire l'état qui décrit les particules réfléchies, et montrer que la valeur moyenne de S_y dans cet état est en général non nulle. Interpréter.

4 Particules identiques

On considère trois particules identiques de masse M, à une dimension, qui sont soumises à un potentiel harmonique $M\omega^2 X^2/2$.

1. Donner l'expression de la fonction d'onde de l'état fondamental, ainsi que son énergie, quand les 3 particules ont un spin 0.

2. Quelle est l'énergie de l'état fondamental, si les particules ont un spin 1/2. Quelle est la dégénérescence de cet état fondamental? Donner, sous forme de déterminant, l'expression d'une fonction d'onde correspondant à cet état. On notera $|n,+>$ l'état correspondant à une particule dans l'état n du puits harmonique ($n = 0, 1, 2...$), et dans l'état de spin $|+>$ suivant Oz.

3. On suppose que les particules de la question précédente ont un moment magnétique μ, et que l'on applique un champ magnétique B suivant Oz. Quelle devrait être la valeur B du champ magnétique pour que, dans l'état fondamental, le deuxième état excité du puits harmonique (d'énergie $5\hbar\omega/2$) soit occupé ?

Ecole Normale Supérieure de Lyon Université Claude Bernard – Lyon 1

L3 « Sciences de la Matière »
U.E. « Introduction au Monde Quantique »
Contrôle Final, Mardi 15 Janvier 2008

Durée 3h
Les documents et calculatrices sont interdits

Question de Cours : Oscillateur harmonique à une dimension

Une particule de masse m pouvant se déplacer selon la coordonnée x est soumise à une force de rappel F = -kx. En mécanique quantique l'hamiltonien de cette particule s'écrit : $H=\frac{P_x^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2X^2$, où l'on a introduit la pulsation $\omega=\sqrt{k/m}$ et où P_x et X sont les opérateurs impulsion et position habituels. On rappelle que X et P_x vérifient la règle de commutation : $[X,P_x]=i\hbar$.

1) On définit l'opérateur a par $a=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}X+\frac{i}{\sqrt{m\omega\hbar}}P_x\right)$. Cet opérateur est-il hermitique ? Donner l'expression de l'opérateur $a^\dagger$, adjoint de a, en fonction des opérateurs X et P_x.

2) Montrer que le commutateur de a et $a^\dagger$ vaut : $[a, a^\dagger] = +1$.

3) Exprimer l'hamiltonien H en fonction des opérateurs a et $a^\dagger$. Pour cela on pourra introduire l'opérateur $N = a^\dagger.a$, opérateur "nombre de quantums de vibration".

4) Calculer les commutateurs [N, a] et $[N, a^\dagger]$.

5) On note ν et $|\phi_\nu^i\rangle$ les valeurs propres et vecteurs propres de l'opérateur N (l'indice i permet de prendre en compte une dégénérescence éventuelle) : $N|\phi_\nu^i\rangle=\nu|\phi_\nu^i\rangle$. En utilisant les résultats des questions précédentes, déterminer le spectre des valeurs propres de N puis celui des valeurs propres de H. Représenter sur un diagramme les niveaux d'énergie de l'oscillateur harmonique.

6) Montrer qu'au plus bas niveau d'énergie correspond une seule fonction d'onde (pas de dégénérescence) dont on donnera l'expression en fonction de x à un facteur de normalisation près, que l'on ne calculera pas. Montrer ensuite qu'il en est de même pour tous les autres niveaux (un seul état par niveau : l'indice i est donc inutile). Introduire la notation conventionnelle, n et $|n\rangle$, pour les valeurs propres et vecteurs propres de N. Comment agissent les opérateurs $a^\dagger$ et a sur les kets propres $|n\rangle$ de N.

$$a^\dagger|n\rangle = ? \quad \text{et} \quad a|n\rangle = ?$$

Justifier les noms que l'on donne conventionnellement à ces deux opérateurs.

Problème : Etude d'une horloge atomique

On s'intéresse ici au niveau d'énergie fondamental de l'électron externe d'un atome alcalin (rubidium, césium,…). Du point de vue orbital, comme pour le niveau fondamental de l'atome d'hydrogène, cet électron (spin S = 1/2) est dans un état s (moment cinétique orbital nul, $\ell = 0$). Le noyau atomique a lui aussi un spin noté I (I = 3/2 pour ^{87}Rb, I = 7/2 pour ^{133}Cs), auquel est associé un moment magnétique $\boldsymbol{\mu}_I$. Comme on va le montrer, ce niveau fondamental est clivé en plusieurs sous-niveaux par l'interaction entre le moment magnétique de l'électron externe $\boldsymbol{\mu}_e$ et le moment magnétique du noyau $\boldsymbol{\mu}_I$. Ce clivage du niveau fondamental permet de réaliser des horloges de très grande précision : les horloges atomiques.

N.B. Dans tout le problème, les effets liés aux électrons du cœur interne seront négligés.

Rappel : De façon générale, pour un opérateur moment cinétique **J** quelconque on rappelle l'action des composantes $J_+ = J_x + iJ_y$ et $J_- = J_x - iJ_y$ sur les états propres $|j,m\rangle$ de J^2 est J_z :

$$J_\pm|j,m\rangle = \sqrt{j(j+1)-m(m\pm1)}\,\hbar\,|j,m\pm1\rangle$$

1) Le clivage hyperfin du niveau fondamental

1.1) Donner, pour le rubidium et pour le césium, la dégénérescence du niveau fondamental si on néglige l'effet de l'interaction magnétique entre le noyau et l'électron de valence. Dans la suite du problème les kets de base de l'espace du spin total (électron externe + noyau) $|S,m_S\rangle\otimes|I,m_I\rangle$ seront notés de façon simplifiée $|m_S;m_I\rangle$ ou, encore plus simplement, $|\pm\,;m_I\rangle$ avec + pour $m_S = +1/2$ et – pour $m_S = -1/2$.

1.2) On prend maintenant en compte l'interaction entre le moment magnétique de l'électron $\boldsymbol{\mu}_e$ et le moment magnétique du noyau $\boldsymbol{\mu}_I$. On peut écrire l'hamiltonien d'interaction correspondant (restreint au niveau fondamental) :

$$H = (A/\hbar^2)\mathbf{S}.\mathbf{I}$$

Où A est une constante qui a la dimension d'une énergie, et où **S** et **I** désignent respectivement les opérateurs spin de l'électron et du noyau. On va chercher les énergies propres de cet hamiltonien. Pour cela on introduit les opérateurs $S_\pm = S_x \pm iS_y$ et $I_\pm = I_x \pm iI_y$

1.2a) Montrer que : $H = \dfrac{A}{2\hbar^2}\left(S_+I_- + S_-I_+ + 2S_zI_z\right)$

1.2b) Montrer que les deux états $|+;I\rangle$ et $|-;-I\rangle$ sont états propres de H avec des valeurs propres que l'on précisera.

1.2c) Déterminer l'action de H sur les états $|+;m_I\rangle$ avec $m_I \neq I$ et $|-;m_I\rangle$ avec $m_I \neq -I$.

1.2d) En déduire que la recherche des énergies propres de H se ramène à la diagonalisation de matrices 2x2 du type :

$$\frac{A}{2}\begin{pmatrix} m_I & \sqrt{I(I+1)-m_I(m_I+1)} \\ \sqrt{I(I+1)-m_I(m_I+1)} & -(m_I+1) \end{pmatrix}$$

1.3) Montrer que H clive le niveau fondamental en deux sous-niveaux d'énergies E_1 et E_2 avec $E_1 = E_0 + AI/2$ et $E_2 = E_0 - A(I+1)/2$ où E_0 est l'énergie du niveau non clivé. Retrouver le cas particulier du niveau fondamental de l'hydrogène.

1.4) Quelles sont les dégénérescences des deux sous-niveaux E_1 et E_2 ?

1.5) Montrer que les états d'énergie E_1 et E_2 sont des états propres de l'opérateur $F^2 = \mathbf{F.F}$, carré de l'opérateur spin total $\mathbf{F} = \mathbf{S} + \mathbf{I}$. Indiquer le spin total F associé à chaque sous-niveau. Retrouver ainsi le résultat de la question précédente.

2) La fontaine atomique

Les atomes sont préparés dans le niveau d'énergie E_1, puis lancés vers le haut (figure 1). A la montée puis à la descente, ils traversent une cavité dans laquelle on injecte une onde électromagnétique de pulsation ω, proche de $\omega_0 = (E_1 - E_2)/\hbar$. On détecte à la fin de la descente le nombre d'atomes ayant basculé du niveau E_1 vers le niveau E_2. Dans toute la suite, le mouvement des atomes dans l'espace (chute libre) est traité classiquement. Seule l'évolution de leur état interne est traitée quantiquement.

Pour simplifier, on ne considèrera qu'un seul état dans le sous-niveau d'énergie E_1. Cet état, noté $|1\rangle$, est couplé par l'onde électromagnétique à un seul état, noté $|2\rangle$, du sous-niveau E_2. On fixe par convention l'origine des énergies en $(E_1 + E_2)/2$, de sorte que:

$$E_1 = \hbar\omega_0/2 \quad \text{et} \quad E_2 = -\hbar\omega_0/2.$$

On suppose que la durée ε de la traversée de la cavité est très brève et que cette traversée fait évoluer le vecteur d'état de l'atome de la manière suivante :

$$|\psi(t)\rangle = \alpha|1\rangle + \beta|2\rangle \rightarrow |\psi(t+\varepsilon)\rangle = \alpha'|1\rangle + \beta'|2\rangle \,,$$

$$\text{avec : } \begin{pmatrix} \alpha' \\ \beta' \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -ie^{-i\omega t} \\ -ie^{i\omega t} & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}.$$

2.1) De même pour une évolution libre du système pendant un temps τ (durée du vol libre) le vecteur d'état de l'atome se transforme de la façon suivante :

$$|\psi(t)\rangle = \gamma|1\rangle + \delta|2\rangle \rightarrow |\psi(t+\tau)\rangle = \gamma'|1\rangle + \delta'|2\rangle \,,$$

$$\text{avec : } \begin{pmatrix} \gamma' \\ \delta' \end{pmatrix} = M \cdot \begin{pmatrix} \gamma \\ \delta \end{pmatrix} \quad \text{où M est une matrice que l'on explicitera.}$$

2.2) L'état initial de l'atome est $|\psi(0)\rangle = |1\rangle$. On considère un aller-retour de durée T, comportant une première traversée de la cavité entre les instant t = 0 et t = e, puis un temps d'évolution libre de durée $T - 2\varepsilon$, suivi d'une deuxième traversée de la cavité entre les instants $T - \varepsilon$ et T. En prenant la limite $\varepsilon \to 0$, montrer que l'état de l'atome après cet aller-retour est donné par :

$$|\psi(T)\rangle = ie^{-i\omega T/2} \sin\big((\omega-\omega_0)T/2\big)|1\rangle - ie^{i\omega T/2} \cos\big((\omega-\omega_0)T/2\big)|2\rangle$$

2.3) Donner la probabilité $P(\omega)$ de trouver un atome dans l'état $|2\rangle$ à l'instant T. Déterminer la demie largeur à mi-hauteur $\Delta\omega$ de $P(\omega)$ autour de la résonance $\omega = \omega_0$. Que vaut $\Delta\omega$ pour une fontaine de 1 mètre de haut ? On prendra pour accélération de la pesanteur $g \approx 10\ \text{ms}^{-2}$ et on ne demande qu'un calcul numérique approché (sans calculette).

Ecole Normale Supérieure de Lyon Université Claude Bernard – Lyon 1

L3 « Sciences de la Matière »
U.E. « Introduction au Monde Quantique »
Contrôle Final, Mardi 13 Janvier 2009

Durée 3h
Les documents sont interdits
Les calculatrices sont interdites

Questions de Cours :

I) Moment cinétique et addition de deux moments cinétiques

I-1) Quelles sont les relations de commutation qui caractérisent les trois composantes J_x, J_y, J_z d'un opérateur moment cinétique **J** ?

I-2) Dans le cas particulier du moment cinétique orbital **L** d'une particule, démontrer une de ces relations de commutation, par exemple $[L_x, L_y] = ?$

I-3) Démontrer que l'on peut trouver une base propre commune à J^2 et J_z.

I-4) On considère l'addition de deux moments cinétiques $\mathbf{J} = \mathbf{j_1} + \mathbf{j_2}$ avec $j_1 = 3$ et $j_2 = 2$. L'espace des états $\mathcal{E}_1$ associé à j_1 est de dimension 7 (base $|j_1,m_1\rangle$), l'espace des états $\mathcal{E}_2$ associé à j_2 est de dimension 5 (base $|j_2,m_2\rangle$). Quelle est la dimension de l'espace des états $\mathcal{E}$ du système total ? Pour décrire cet espace $\mathcal{E}$ on pourra utiliser soit la base découplée $\{|j_1,m_1,j_2,m_2\rangle\}$ soit la base couplée $\{|J,M\rangle\}$. Quelles sont les valeurs de J qui sont réalisées ? Vérifier que l'on trouve bien le nombre convenable de vecteurs de base pour la base couplée.

II) Méthode des variations appliquée à l'oscillateur harmonique.

On se propose d'utiliser la méthode des variations pour trouver des solutions approchées de l'oscillateur harmonique (oscillateur à une dimension selon l'axe x).

Sachant que la fonction d'onde de l'état fondamental doit avoir une forme en cloche, considérons comme famille de fonctions d'essai les fonctions : $\varphi_\alpha(x) = \exp(-\alpha x^2)$, avec α réel positif. Déterminer la valeur approchée de l'énergie E_0 de l'état fondamental de l'oscillateur harmonique. Comparer avec la valeur exacte.

On donne les résultats suivants sur la famille d'intégrales $I_n = \int_0^\infty t^n \exp\left(-at^2\right)dt$:

$$I_{n+2} = \frac{n+1}{2a} I_n \quad ; \quad I_0 = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad ; \quad I_1 = \frac{1}{2a}$$

Problème : Structure hyperfine et effet Zeeman du muonium

Valeurs numériques de quelques constantes physiques :

Constante de Planck : $h = 6{,}63 \times 10^{-34}$ Js
Charge de l'électron : $q_e = -e = -1{,}6 \times 10^{-19}$ C
Masse de l'électron $m_e = 9{,}1 \times 10^{-31}$ kg
Masse du muon μ_+ : $m_\mu = 207\ m_e$
Charge du muon μ_+ : $q_\mu = e = 1{,}6 \times 10^{-19}$ C
Magnéton de Bohr : $\mu_B = eh/4\pi m_e = 9{,}27 \times 10^{-24}$ J/Tesla
Masse du proton : $m_p = 1836\ m_e$

Enoncé :

De façon générale, on définit pour un opérateur moment cinétique **J** quelconque les composantes $J_+ = J_x + iJ_y$ et $J_- = J_x - iJ_y$. Les actions de J_+ et J_- sur les états propres $|J,m\rangle$ de J^2 et J_z sont : $J_+|J,m\rangle = \hbar\sqrt{J(J+1) - m(m+1)}\,|J,m+1\rangle$ $\quad J_-|J,m\rangle = \hbar\sqrt{J(J+1) - m(m-1)}\,|J,m-1\rangle$

L'atome d'hydrogène est un système physique composé d'un électron et d'un proton liés entre eux sous l'effet de l'interaction électrostatique. Le muonium est un système similaire à l'atome d'hydrogène dans lequel le proton est remplacé par un muon μ_+ (charge : + e ; masse m_μ). Dans ce problème on s'intéressera uniquement à la structure du niveau électronique fondamental due à l'existence de spins pour les deux particules et à leur couplage.

I) Structure hyperfine du muonium

I-1) Soient $\mathbf{S_1}$ et $\mathbf{S_2}$ les opérateurs de spin de l'électron et du muon (ces deux particules sont des particules de spin ½). Le niveau électronique fondamental du muonium est le niveau 1s ($\ell = 0$) comme pour l'hydrogène. Si on tient compte des états de spin des deux particules quelle est la dégénérescence de ce niveau ?

I-2) les interactions magnétiques entre $\mathbf{S_1}$ et $\mathbf{S_2}$ conduisent à un hamiltonien d'interaction, appelé hamiltonien de structure hyperfine, de la forme $H_{hfs} = \frac{A}{\hbar^2}\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$, où A est une constante. Ceci va lever la dégénérescence du niveau fondamental. On appelle $\mathbf{F} = \mathbf{S_1} + \mathbf{S_2}$ le spin total du système. Dans la suite on sera amené à travailler soit avec la base découplée $\{|\pm,\pm\rangle\}$, base commune aux opérateurs S_1^2, S_{1z}, S_2^2, S_{2z}, soit avec la base couplée $\{|F,m_F\rangle\}$, base commune aux opérateurs S_1^2, S_2^2, F^2, F_z. On donne les expressions des kets de la base couplée en fonction des kets de la base découplée :

$$|1,1\rangle = |+,+\rangle \;;\; |1,0\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(|+,-\rangle + |-,+\rangle\right) \;;\; |1,-1\rangle = |-,-\rangle \;;\; |0,0\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(|+,-\rangle - |-,+\rangle\right)$$

Exprimer H_{hfs} en fonction des opérateurs S_{1+}, S_{1-}, S_{1z}, S_{2+}, S_{2-} et S_{2z} puis en fonction des opérateurs F^2, S_1^2 et S_2^2.

I-3) Montrer que le niveau fondamental se décompose en deux sous-niveaux hyperfins pour lesquels on précisera la dégénérescence et la valeur de F associée. Quel est l'écart d'énergie ΔE entre ces deux sous-niveaux. Numériquement, l'écart en fréquence des deux sous-niveaux est $\Delta\nu \approx 4{,}5$ GHz. Déterminer une valeur approchée (en joules) de la constante hyperfine A.

II) Effet Zeeman du muonium

II-1) Au spin $\mathbf{S_1}$ de l'électron est associé le moment magnétique $\vec{\mu}_e = -g_S\mu_B\vec{S}_1/\hbar = \gamma_1\vec{S}_1$ avec $g_S = 2$. Au spin $\mathbf{S_2}$ du muon μ_+ est associé le moment magnétique

$\vec{\mu}_I = g_I \mu_B \vec{S}_2 / \hbar = \gamma_2 \vec{S}_2$ avec g_I = 9,66x10^{-3}. A partir des valeurs numériques données dans l'énoncé justifier l'ordre de grandeur de la valeur numérique de g_I donnée ci-dessus.

II-2) Le système est maintenant placé dans un champ magnétique $\mathbf{B_0}$ uniforme, d'amplitude B_0 et de direction parallèle à l'axe Oz du repère de référence Oxyz. Justifier que l'hamiltonien H du système s'écrive alors : $H = \frac{A}{\hbar^2}\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 + \omega_1 S_{1z} + \omega_2 S_{2z} = H_{hfs} + H_Z$. Les deux derniers termes constituent l'hamiltonien Zeeman H_Z. Préciser l'expression des constantes ω_1 et ω_2 en fonction des données de l'énoncé.

II-3) Le champ B_0 est peu intense de sorte que $H_Z << H_{hfs}$. On prendra donc en compte H_Z par la théorie des perturbations. Montrer que l'on a maintenant quatre sous niveaux distincts et donner l'expression de l'énergie de chacun d'eux en fonction de B_0 et des données de l'énoncé.

II-4) On va maintenant calculer exactement l'énergie des différents sous-niveaux pour B_0 quelconque. Pour cela on opèrera dans la base découplée $\{|\pm,\pm\rangle\}$.

II-4a) Calculer les éléments de matrice de H_{hfs} puis de H_Z dans cette base découplée.

II-4b) Montrer que la matrice de H se réduit à deux éléments diagonaux isolés et à une matrice 2x2 centrée sur la diagonale. Pour simplifier les notations on pourra poser $A = \hbar\omega$ et exprimer les résultats en fonction de ω, ω_1 et ω_2.

II-4c) Donner les énergies propres des quatre sous-niveaux du niveau fondamental. Montrer que, compte tenu des données de l'énoncé, ils se regroupent deux par deux en champ B_0 «fort», c'est-à-dire lorsque $H_Z >> H_{hfs}$.

II-5) Tracer un diagramme approximatif des quatre énergies propres en fonction de B_0. Si l'on appelle E_a et E_b les deux énergies propres qui sont des fonctions croissantes de B_0, montrer que les courbes représentatives de E_a et E_b se coupent pour une valeur non nulle B_1 de B_0.

Exercice : Particules identiques traversant une lame séparatrice.

On considère une particule préparée à un instant initial t_i dans un état correspondant au paquet d'onde $\psi_1(\mathbf{r},t_i) = \phi_1(\mathbf{r})$ arrivant sur une lame séparatrice 50%-50% (voir figure). A un instant ultérieur t_f, le paquet d'onde a traversé la lame et l'état de la particule peut s'écrire $\psi_1(\mathbf{r},t_f) = (\phi_3(\mathbf{r}) + \phi_4(\mathbf{r}))/\sqrt{2}$, où ϕ_3 et ϕ_4 désignent des paquets normalisés se propageant dans chacune des voies de sortie. On a $<\phi_3|\phi_4> = 0$ (séparation spatiale des deux paquets d'onde).

1) On prépare une particule identique à la première dans l'état $\psi_2(\mathbf{r},t_i) = \phi_2(\mathbf{r})$, symétrique de $\phi_1(\mathbf{r})$ par rapport à la lame, c'est-à-dire arrivant sur la séparatrice par la deuxième voie d'entrée. On a $<\phi_1|\phi_2> = 0$ (séparation spatiale des deux paquets d'onde). L'état de cette particule à l'instant t_f pourra s'écrire : $\psi_2(\mathbf{r},t_f) = \alpha\phi_3(\mathbf{r}) + \beta\phi_4(\mathbf{r})$ où α et β sont deux constantes complexes inconnues pour le moment. Montrer que si deux états d'un système gouverné par un hamiltonien H sont orthogonaux à un instant initial t_i, ils restent orthogonaux dans leur évolution ultérieure. On admettra que la traversée de la lame correspond bien à une évolution hamiltonienne. En déduire la valeur des coefficients α et β ci-dessus (à une phase globale près).

2) On prépare maintenant des systèmes composés de deux particules. Un système constitué de deux particules discernables, l'une dans l'état $|\phi_i>$, l'autre dans l'état $|\phi_j>$, sera représenté par le ket produit tensoriel $|1 : \phi_i>\otimes|2 : \phi_j>$. On prépare à l'instant t_i un système de deux fermions identiques, donc, en particulier, de même état de spin (S_z), l'un dans l'état $\phi_1(\mathbf{r})$, l'autre dans l'état $\phi_2(\mathbf{r})$. Comment doit-on écrire le ket représentatif de cet état ?

3) Le passage à travers la lame séparatrice est sans influence sur l'état de spin de chaque particule et dans ce processus les deux particules sont supposées sans interaction. Quel est l'état final du système à l'instant t_f après la traversée de la séparatrice ? Peut-on détecter les deux fermions dans la même voie de sortie ?

4) On reprend l'expérience précédente avec deux bosons identiques, également préparés dans le même état de spin, l'un dans l'état $\phi_1(\mathbf{r})$, l'autre dans l'état $\phi_2(\mathbf{r})$. Montrer que les deux bosons sortent toujours dans la même voie après la séparatrice.

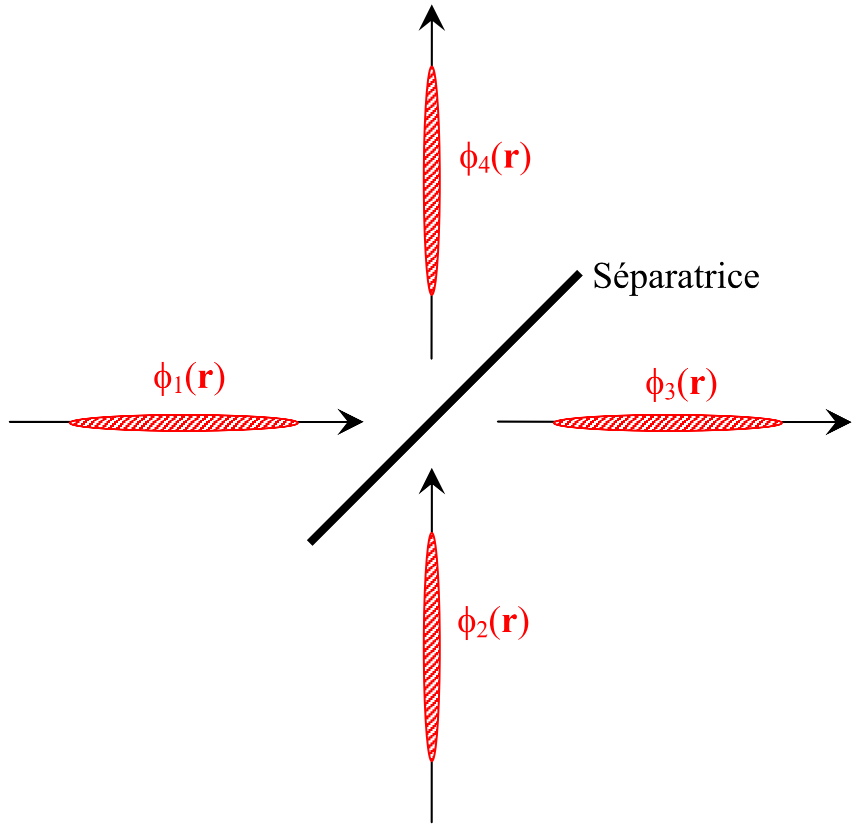


Figure : Un paquet d'ondes incident $\phi_1(\mathbf{r})$ ou $\phi_2(\mathbf{r})$ traverse la lame séparatrice 50%-50% pour donner une superposition cohérente de deux paquets d'ondes émergents $\phi_3(\mathbf{r})$ et $\phi_4(\mathbf{r})$.

Ecole Normale Supérieure de Lyon Université Claude Bernard – Lyon 1

L3 « Sciences de la Matière »
U.E. « Introduction au Monde Quantique »

Contrôle Final, Mercredi 13 Janvier 2010

Durée 3h

Les documents sont interdits

Les calculatrices sont interdites

Question de cours et exercice d'application :

I) Question de Cours

I-1) Expliquer en quelques phrases (environ une demi-page) en quoi consiste dans ses grandes lignes la méthode des perturbations stationnaires et dans quel type de situation on peut l'utiliser.

I-2) Donner, sans démonstration, l'expression des termes de correction à l'énergie propre au premier et au second ordre pour un état propre du système non perturbé $|\varphi_n>$ non dégénéré, d'énergie propre $E_n^{(0)}$. On précisera la signification des autres notations utilisées dans ces formules.

II) Application à l'étude d'un oscillateur anharmonique.

Une particule de masse m peut se déplacer selon l'axe x'x. Elle est soumise au potentiel suivant : $V(x) = (1/2)m\omega^2x^2 + cx^4$ où le second terme (terme anharmonique) sera considéré comme étant petit devant le premier. Le but de l'exercice est de déterminer, au premier ordre des perturbations, la modification $E_n^{(1)}$ apportée par ce second terme à l'énergie propre $E_n^{(0)}$ de l'état $|n>$ de l'oscillateur harmonique.

II-1) Quel est le spectre des énergies propres de l'oscillateur harmonique ?

II-2) On rappelle la définition des opérateurs a et $a^\dagger$ à partir des opérateurs X et P :

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}X + i\frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}}P\right) \quad \text{et} \quad a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}X - i\frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}}P\right)$$

Calculer X^2 puis X^4 en fonction des opérateurs a et $a^\dagger$ (X^4 sera une somme de 16 termes produits de quatre opérateurs a ou $a^\dagger$).

II-3) Utiliser le résultat précédent pour calculer $E_n^{(1)}$. On tirera profit, pour faire ce calcul, du fait qu'une majorité de termes composant X^4 donnent une contribution nulle à $E_n^{(1)}$.

II-4) Quel serait l'effet, au premier ordre des perturbations, d'un terme supplémentaire en X^3 dans le potentiel ?

Problème : La cryptographie quantique

Le but de la cryptographie est d'envoyer un message à un correspondant en minimisant les risques de voir celui-ci intercepté par un tiers. Ce problème montre comment la mécanique quantique peut fournir une procédure répondant à cet objectif. Plus précisément, on suppose ici qu'Alice (A) souhaite envoyer à Bob (B) une certaine information codée en binaire, par exemple : $++---++--+-$….. (1)

On notera n le nombre de bits de ce message. Alice ne veut transmettre ce message que si elle s'est préalablement assurée que la communication n'est pas écoutée par un(e) espion(ne) qu'on appellera Eve (E) dans la suite du problème.

I) Etats de spin 1/2

On s'intéresse à une particule de spin 1/2. Soit $\mathbf{S} = (\hbar/2)\boldsymbol{\sigma}$ l'opérateur vectoriel de spin de la particule, où les composantes de $\boldsymbol{\sigma}$ sont les matrices de Pauli*. On note $|\pm\rangle$ les états propres de S_z associés aux valeurs propres respectives $\pm\,\hbar/2$.

Considérons une particule dans l'état de spin $|+\rangle$. On effectue la mesure de la composante du spin suivant un axe u situé dans le plan xOz et défini par le vecteur unitaire :

$$\mathbf{e}_u = \mathrm{Cos}\theta\,\mathbf{e}_z + \mathrm{Sin}\theta\,\mathbf{e}_x.$$

On rappelle que l'observable associée à cette grandeur s'écrit $S_u = \mathbf{S}.\mathbf{e}_u$.

I.1) Montrer que les résultats possibles pour la mesure de S_u sont $\pm\,\hbar/2$.

I.2) Montrer que les états propres de S_u s'écrivent :

$$|+\rangle_u = \mathrm{Cos}\phi|+\rangle + \mathrm{Sin}\phi|-\rangle \quad \text{pour la valeur propre } +\hbar/2$$
$$|-\rangle_u = -\mathrm{Sin}\phi|+\rangle + \mathrm{Cos}\phi|-\rangle \quad \text{pour la valeur propre } -\hbar/2$$

Exprimer ϕ en fonction de θ. En déduire les probabilités $\mathcal{P}_u^{\pm}$ d'obtenir $\pm\,\hbar/2$ pour la mesure de S_u, le système étant initialement dans l'état $|+\rangle$.

I.3) Quels sont les états de spin après une mesure ayant donné $\pm\,\hbar/2$?

I.4) Immédiatement après cette mesure, on mesure la composante du spin suivant l'axe z.

a) Donner les résultats possibles et leurs probabilités en fonction du résultat obtenu précédemment le long de u.

b) Montrer que la probabilité de retrouver la même valeur $S_z = +\,\hbar/2$ que dans l'état initial est $P_{++}(\theta) = (1+\mathrm{Cos}^2\theta)/2$. Pour arriver à ce résultat on pourra utiliser les identités : $\mathrm{Cos}^2(\theta/2) = (1+\mathrm{Cos}\theta)/2$ et $\mathrm{Sin}^2(\theta/2) = (1-\mathrm{Cos}\theta)/2$.

c) L'état initial étant maintenant l'état $|-\rangle$, quelle est, dans la même séquence de mesures, la probabilité $P_{--}(\theta)$ de retrouver la même valeur $S_z = -\,\hbar/2$ pour la seconde mesure ?

---

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

II) Etat intriqué de deux spins 1/2

On dispose d'une source $\mathcal{S}$ qui produit une paire (a, b) de particules de spin 1/2, préparée dans l'état $|\psi\rangle = \varphi(\vec{r}_a, \vec{r}_b)|\Sigma\rangle$, c'est-à-dire que les variables spatiales et les variables de spin sont indépendantes. L'état de spin des deux particules est :

$$|\Sigma\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|+\rangle^a \otimes |+\rangle^b + |-\rangle^a \otimes |-\rangle^b\right) \qquad (2)$$

Dans tout le problème, on ne s'intéresse qu'aux mesures de spin. Dans la notation des kets de spin relatifs à une particule $|\pm\rangle_m^i$ l'indice supérieur précise la particule (i = a ou b), l'indice inférieur la direction de la composante de spin considérée (m = x ou u ou pas d'indice inférieur pour m = z).

II-1) Montrer que cet état de spin peut également s'écrire :

$$|\Sigma\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|+\rangle_x^a \otimes |+\rangle_x^b + |-\rangle_x^a \otimes |-\rangle_x^b\right) \qquad (3)$$

II-2) La paire de particules (a, b) étant préparée dans l'état de spin $|\Sigma\rangle$, ces particules sont séparées spatialement (figure 1) **sans que l'état de spin soit affecté** (tant qu'aucune mesure n'intervient). La source est située à proximité d'Alice. Alice réceptionne la particule a et mesure sa composante de spin. Bob fera de même avec la particule b mais plus tard compte tenu du temps de propagation.

a) En premier lieu, Alice mesure la composante du spin de a suivant un axe u_a, d'angle θ_a. Quels sont les résultats de mesure et les probabilités correspondantes pour les deux cas $\theta_a = 0$ (axe z) et $\theta_a = \pi/2$ (axe x)? On présentera ces résultats sous forme d'un tableau (voir ci-dessous).

b) Compléter le tableau en indiquant, pour chaque cas, quel est l'état final de spin (normalisé) du système (a, b) après la mesure d'Alice.

Axe	Résultat de la mesure	Probabilité	Etat final de spin (normalisé)
z			
z			
x			
x			

Suivant les cas, on pourra utiliser soit (2) soit (3) pour écrire l'état initial.

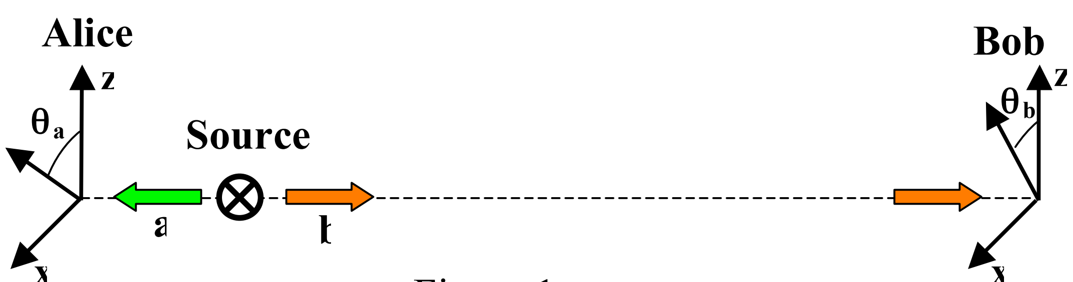


Figure 1

II-3) Après cette mesure d'Alice, Bob mesure la composante du spin de b suivant un axe u_b d'angle θ_b. Déterminer les résultats de mesure possibles de Bob et leurs probabilités, en fonction du résultat d'Alice, dans les quatre configurations suivantes :

a) $\theta_a = 0$ et $\theta_b = 0$

b) $\theta_a = 0$ et $\theta_b = \pi/2$

c) $\theta_a = \pi/2$ et $\theta_b = 0$

d) $\theta_a = \pi/2$ et $\theta_b = \pi/2$

Dans quel(s) cas la mesure sur a et celle sur b donnent-elles avec certitude le même résultat ?

II-4) On se place dans la situation $\theta_a = 0$. On suppose qu'une espionne, nommée Eve dans la suite, positionnée entre la source $\mathcal{S}$ et Bob, mesure « incognito » la composante du spin b suivant un axe u_e d'angle θ_e (figure 2).

a) Quels sont, en fonction de θ_e et du résultat de mesure d'Alice, les résultats de mesure d'Eve et leurs probabilités ?

b) Après cette mesure d'Eve, Bob mesure la composante du spin de b suivant l'axe défini par $\theta_b = 0$. Que trouve-t-il, avec quelle probabilité, en fonction du résultat trouvé par Eve ?

c) Quelle est la probabilité $P(\theta_e)$ qu'Alice et Bob trouvent le même résultat ?

d) Reprendre les points **a**, **b**, **c** avec le même angle θ_e mais avec $\theta_a = \theta_b = \pi/2$.

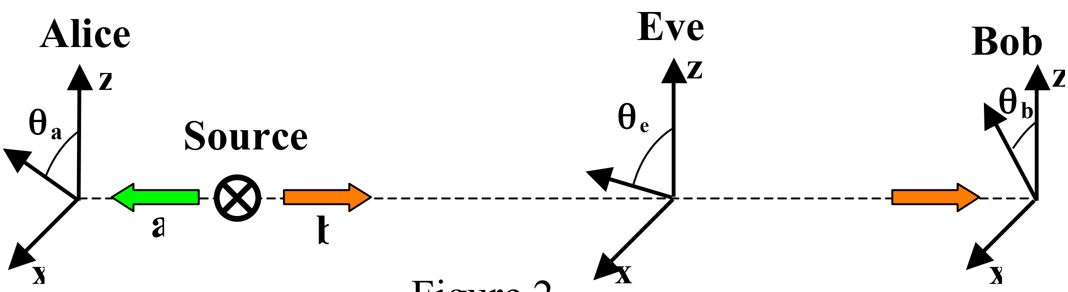


Figure 2

III) Protocole de codage d'un message confidentiel

On souhaite utiliser les résultats qui précèdent pour la transmission confidentielle d'information. Alice et Bob utilisent alors la procédure détaillée dans l'encadré ci-dessous.

1. Alice et Bob décident d'un choix d'axes x et z qui leur serviront de directions d'analyse.
2. Alice, qui dispose de la source $\mathcal{S}$, prépare une séquence ordonnée de N paires de spins 1/2 dans l'état $|\Sigma\rangle$. N est très supérieur à n le nombre de bits du message. Elle envoie les spins b à Bob et garde les spins a.
3. Alice et Bob font, pour chacun des spins dont ils disposent, la mesure de la composante x ou z. Le choix entre x et z se fait de manière aléatoire et équiprobable pour chaque spin, et il n'y a pas de corrélation, pour une paire donnée, entre la direction d'analyse choisie par Alice et celle choisie par Bob. Ils stockent chacun l'ensemble de leurs résultats.

4. Bob sélectionne une partie FN de ses mesures et il communique publiquement à Alice (par radio, par internet, etc…) le numéro d'ordre dans la liste complète, la direction d'analyse choisie (x ou z) et le résultat obtenu pour chacune des mesures de cet ensemble. En pratique, $F \approx 0,5$.
5. Alice compare pour cet ensemble FN de données ses directions et ses résultats avec ceux que vient de lui communiquer Bob. Elle peut alors détecter avec une efficacité quasi parfaite la présence d'Eve si FN est un nombre assez grand. Si la présence d'Eve est repérée, la procédure s'arrête et une recherche « physique » de l'espion(ne) doit avoir lieu. Sinon :
6. Alice annonce publiquement qu'elle est convaincue que la communication n'a pas été écoutée par une tierce personne. Bob lui transmet alors, toujours publiquement, ses directions d'analyse pour les $(1 - F)N$ spins restants. En revanche, il ne communique pas ses résultats correspondants.
7. …..

III-1) Expliquer comment, à l'étape 5 de la procédure ci-dessus, Alice peut se convaincre de la présence d'un(e) espion(ne) ? Sur quelles comparaisons de résultats doit elle fonder sa conviction ?

III-2) On considère une quelconque des FN mesures de spin effectuée par Alice est Bob. On rappelle qu'Alice choisit la direction de mesure du spin de a de façon aléatoire et équiprobable entre x ($\theta_a = \pi/2$) et z ($\theta_a = 0$). Bob fait de même, et de façon totalement indépendante pour la mesure du spin de b. En utilisant les résultats trouvés dans la partie **II**, déterminer la probabilité $P(\theta_e)$ qu'Eve, bien que présente sur la ligne de transmission, ne soit malgré tout pas détectée ? Commentez ce résultat. En particulier Eve peut-elle gagner en « invisibilité » si elle connaît à l'avance le système d'axes Oxz retenu par Alice et Bob pour effectuer leurs mesures ? Et si oui, comment ?

III-3) Alice recherche la présence d'Eve sur FN = 400 mesures de couples de spin. Quelle est la probabilité qu'Eve échappe à la recherche d'Alice et reste « invisible » ? Pour donner une valeur numérique de cette probabilité on pourra utiliser les valeurs données en bas de page. Commentez brièvement.

III-4) L'étape 7 est la dernière étape du protocole de transmission du message codé. Compléter l'encadré ci-dessus en indiquant en quelques phrases (deux ou trois) comment Alice doit procéder pour envoyer son message (1) à Bob en utilisant les $(1 - F)N$ paires de spins restantes déjà produites et analysées par Bob et par elle-même. Pour que cela marche il faut $N >> n$. Pour fixer les idées on supposera $n = 100$ et $N = 1000$.

Quelques valeurs numériques éventuellement utiles :

$$\left(\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}\right)^{100} = 5{,}03.10^{-22} \qquad \left(\frac{7}{8}\right)^{400} = 6{,}36.10^{-24} \qquad \left(\frac{3}{4}\right)^{200} = 1{,}03.10^{-25}$$

$$\left(\frac{8}{15}\right)^{100} = 5{,}01.10^{-28} \qquad \left(\frac{1}{2}\right)^{100} = 7{,}89.10^{-31}$$

Bibliographie

[1] J.-L. Basdevant et J. Dalibard, Mécanique Quantique, *Éditions de l'Ecole Polytechnique* (**2006**).
numéro ISBN : 2-73020914-X.
note : Cet ouvrage sera utilisé comme support de cours.

[2] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu et F. Laloë, Mécanique Quantique (2 tomes), *Éditions Hermann* (**1997**).
numéros ISBN Tomes 1 et 2 : 2-70566074-7 et 2-70566121-2.
note : Cet ouvrage plus complet sera utilisé comme support de cours en complément du Basdevant et Dalibard.

[3] R. P. Feynman, Lectures on Physics Tome 3,
Ce cours est disponible traduit en français chez Dunod (**2003**).
numéro ISBN : 2-10004934-8.

[4] M. Le Bellac, Physique quantique, *Éditions EDP Sciences / CNRS* (**2003**).
numéro ISBN : 2-86883655-0.

[5] J.-M. Lévy-Leblond et F. Balibar, Quantique : Rudiments, *Éditions Dunod* (**2006**).
numéro ISBN : 2-10050860-1.

[6] Outils mathématiques :
M. Abramowitz et I. A. Stegun, Handbook of mathematical functions, *Éditions Dover* (**1972**).
numéro ISBN : 0-486-61272-4.
note : l'intégralité du handbook est en ligne http ://www.math.sfu.ca/∼cbm/aands/

[7] Valeurs des constantes :
http ://www.physics.nist.gov/cuu/Constants/index.html

[8] Un site regroupant des liens vers des sites scientifiques (Encyclopédies, constantes, nomenclatures, biographies, histoire...).
http ://urfist.univ-lyon1.fr/constant.html