



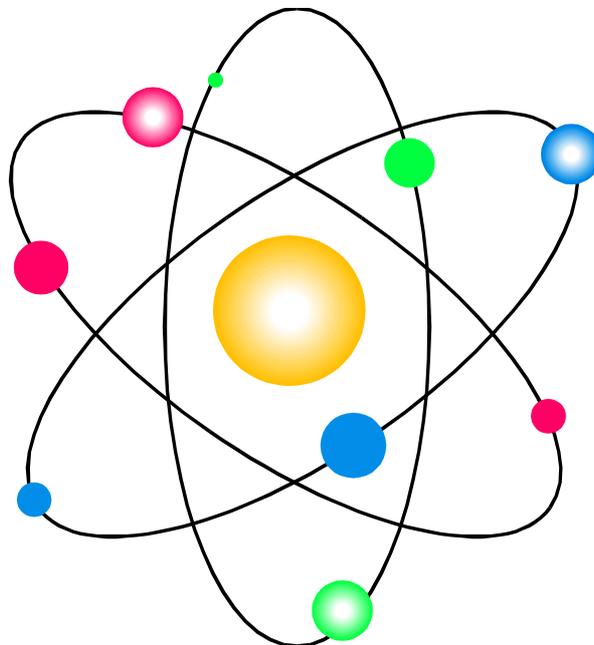
LABORATOIRE
DE PHYSIQUE QUANTIQUE

Daniel MARCHAND

ENONCES DES TRAVAUX DIRIGES

DE

PHYSIQUE QUANTIQUE



(Edition 2006/2007)

SOMMAIRE

- « POTENTIELS $\alpha\delta(x)$ 05
(HAMILTONIENS DONT LE POTENTIEL EST UNE DISTRIBUTION)
APPLICATION : un modèle simple de molécule et de solide unidimensionnels
- NOTATIONS ET SYNTAXE DE DIRAC.....07
Un exemple : l'opérateur parité – parité d'un opérateur
- LA MESURE EN MECANIQUE QUANTIQUE.....09
- L'OSCILLATEUR HARMONIQUE PERTURBE.....14
- PROBLEMES STATIONNAIRES.....24
Champ magnétique oscillant assurant des transitions entre états
- « DYNAMIQUE EN REFERENTIEL TOURNANT »
L'exemple de la RESONANCE MAGNETIQUE.....25
- PROBLEMES NON STATIONNAIRES.....26
Interaction scalaire de deux spins
- ADDITION DE DEUX MOMENTS CINETIQUES 1.....28

POTENTIELS $\alpha\delta(x)$

APPLICATION : un modèle simple de molécule et de solide unidimensionnels

1-/ Soit une particule de masse m placée dans un potentiel à une dimension

$$V(x) = \alpha\delta(x) \quad (\alpha < 0, \text{ potentiel attractif}) \quad (1)$$

où $\delta(x)$ est la distribution de Dirac $\left(\delta(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x \neq 0 \\ \infty & \text{si } x = 0 \end{cases} \right.$ avec $\left. \begin{cases} \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) dx = 1 \\ \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \delta(x-a) dx = f(a) \end{cases} \right)$

- Quelle est la dimension de α ?
- Montrer par des considérations de symétrie que la fonction d'onde $\psi(x)$ de la particule est **nécessairement paire**.
- Ecrire l'équation de Schrödinger de la particule $\forall x$. On s'intéresse aux **états liés** (bound states) de la particule (c'est-à-dire aux états d'énergie E négative). On pose

$$E = -\frac{\hbar^2 K^2}{2m} \quad \text{et} \quad \lambda_0 = -\frac{\hbar^2}{m\alpha} \quad (3)$$

Ecrire l'équation de Schrödinger précédente en fonction de K et λ_0 .

Donner son expression pour $x \neq 0$ et la forme générale $\psi(x)$ de sa solution.

Sachant que $\psi(x) \in L^2$, espace des fonctions de carré sommable, et que $\psi(x)$ est continue en $x = 0$, en déduire l'expression générale des états liés.

- En intégrant l'équation de Schrödinger, écrite pour $\forall x$, sur un intervalle de largeur 2ε centré sur l'origine, déduire que le « saut » de la dérivée première de la fonction d'onde est

$$\psi'(0^+) - \psi'(0^-) = -\frac{2}{\lambda_0} \psi(0) \quad (2)$$

Combien y a-t-il d'états liés ? De quelle énergie ?

Donner l'expression de la fonction d'onde.

- On s'intéresse maintenant aux **états de diffusion** (scattering states) de la particule ($E > 0$).

Calculer le coefficient de transmission T du puits de potentiel (1) en fonction de l'énergie E . En donner ses limites pour les grandes et les faibles valeurs de l'énergie.

2-/ Soit un double potentiel $\delta : V(x) = \alpha \left[\delta\left(x + \frac{d}{2}\right) + \delta\left(x - \frac{d}{2}\right) \right]$ ($\alpha < 0$).

- Ecrire la forme générale des fonctions d'onde pour les états liés. Quelle est la **condition de quantification** ?

- b) Discuter, à l'aide d'une résolution graphique, le nombre d'états liés en fonction de la distance d .
- c) Expliquer en quoi ce qui précède peut constituer un modèle simple de molécule unidimensionnelle (ion moléculaire H_2^+ par exemple).

3-/ On considère maintenant que la particule est soumise à un **peigne de Dirac**

$$V(x) = \alpha \sum_{n=-\infty}^{n=+\infty} \delta(x-na) \quad (\alpha < 0)$$

et on s'intéresse à ses états de diffusion.

- a) Ecrire l'équation de Schrödinger de la particule valable $\forall x$ en fonction de K et λ_0 .
- b) Le potentiel $V(x)$ étant périodique, de période a , $V(x) = V(x+a)$, les états propres de la particule doivent avoir la même symétrie. Vérifier qu'il en est ainsi en posant que $\psi(x) = u(x)e^{ikx}$, $\forall k$ et $u(x) = u(x+a)$. De telles fonctions sont appelées **fonctions de Bloch**.
- c) En utilisant l'équation de Schrödinger de la particule écrite pour $x \neq na$ et les conditions de passage vues précédemment (continuité de la fonction d'onde et saut fini de la dérivée première en $x = na$), montrer que la condition de quantification s'écrit

$$\left| \frac{a}{\lambda_0} \left(\frac{\sin Ka}{Ka} \right) + \cos Ka \right| \leq 1$$

Pour simplifier, on pourra prendre une solution de l'équation de Schrödinger sous la forme $\psi(x) = e^{ikx} + Ce^{-ikx}$

- d) Que peut-on en conclure quant à la répartition des états de diffusion d'un électron dans un tel solide unidimensionnel ?

Le modèle simple de solide unidimensionnel décrit ici est connu sous le nom de « **modèle de Krönig-Penney** ».

NOTATIONS ET SYNTAXE DE DIRAC

UN EXEMPLE : L'OPERATEUR PARITE

I- L'OPERATEUR PARITE

1-/ Considérons un système physique S dont l'espace des états est E_r ; l'opérateur parité $\hat{\Pi}$ est défini par son action sur les vecteurs de base $|r\rangle$ de E_r :

$$\hat{\Pi}|r\rangle = |-r\rangle$$

(on prendra garde à ne pas confondre $|-r_0\rangle$ et $-|r_0\rangle$; le premier est un vecteur propre de l'opérateur position R , de valeur propre $-r_0$ et de fonction d'onde $\xi_{-r_0}(r) = \delta(r+r_0)$; le second est un vecteur propre de R de valeur propre r_0 et de fonction d'onde $-\xi_{r_0}(r) = -\delta(r-r_0)$.)

- Calculer les éléments de matrice de $\hat{\Pi}$ en représentation $\{|r\rangle\}$.
- Montrer que l'action de $\hat{\Pi}$ en représentation $\{|r\rangle\}$ est de changer le vecteur r en $-r$.
- Soit $|\psi\rangle$ le vecteur d'état du système S . Que décrit le vecteur $\hat{\Pi}|\psi\rangle$?

2-/ Montrer que l'opérateur $\hat{\Pi}$ est **unitaire** ($\hat{\Pi}^{-1} = \hat{\Pi}^\dagger$) et déterminer ses valeurs propres et leur degré de dégénérescence.

3-/ Considérons les opérateurs hermitiques (respectivement appelés **symétriseur** et

antisymétriseur) \hat{P}_+ et \hat{P}_- , tels que :

$$\begin{cases} \hat{P}_+ = \frac{1}{2}(\hat{I} + \hat{\Pi}) \\ \hat{P}_- = \frac{1}{2}(\hat{I} - \hat{\Pi}) \end{cases} \quad \text{où } \hat{I} \text{ est l'opérateur identité.}$$

- Montrer que ces opérateurs sont respectivement les projecteurs sur deux sous-espaces orthogonaux et supplémentaires E_+ et E_- de E_r .

4-/ Considérons les kets $|\psi_+\rangle$ et $|\psi_-\rangle$ tels que :

$$\begin{cases} |\psi_+\rangle = \hat{P}_+|\psi\rangle \\ |\psi_-\rangle = \hat{P}_-|\psi\rangle \end{cases}$$

- Montrer que $|\psi_+\rangle$ et $|\psi_-\rangle$ sont respectivement **pair** et **impair**. En déduire que les fonctions d'onde $\psi_+(r)$ et $\psi_-(r)$ sont respectivement paire et impaire.

II- OPERATEURS PAIRS ET IMPAIRS

1-/ Montrer que l'opérateur \tilde{B} , transformé par l'opérateur unitaire $\hat{\Pi}$ d'un opérateur \hat{B} quelconque, s'écrit : $\tilde{B} = \hat{\Pi}\hat{B}\hat{\Pi}$.

(on rappelle que l'opérateur transformé a mêmes éléments de matrice dans la base transformée, que l'opérateur dans la base initiale).

Par définition, si $\tilde{B} = +\hat{B}$, l'opérateur B est dit **pair**, si $\tilde{B} = -\hat{B}$, l'opérateur \hat{B} est dit **impair**.

- Montrer qu'un opérateur pair commute avec $\hat{\Pi}$ et qu'un opérateur impair anticommute avec $\hat{\Pi}$.

2-/ Montrer que les éléments de matrice d'un opérateur pair sont nuls entre vecteurs de parité opposée. Montrer de même que les éléments de matrice d'un opérateur impair sont nuls entre vecteurs de même parité.

- En déduire en particulier que la valeur moyenne d'un opérateur impair est nulle si l'état dans lequel elle est prise a une parité déterminée.
- Montrer que les opérateurs position \hat{R} et impulsion \hat{P} sont impairs.

3-/ Considérons une observable quelconque \hat{B}_+ paire et un vecteur propre $|\phi_b\rangle$ de \hat{B}_+ , de valeur propre b . Quelle est la parité de $|\phi_b\rangle$ dans les deux cas suivants :

- b est non dégénérée. Que vaut dans ce cas la valeur moyenne d'un opérateur \hat{B}_- prise dans cet état ?
- b est dégénérée

4-/ Soit le Hamiltonien $\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + V(\hat{R})$, tel que la fonction $V(r)$ soit paire.

- En déduire que les états propres de H sont à rechercher parmi les états pairs ou impairs.
- Citer des systèmes physiques où cette simplification se rencontre dans la recherche de leurs états propres.

LA MESURE EN MECANIQUE QUANTIQUE

I- / On considère le mouvement d'une particule sans spin régi par un Hamiltonien \hat{H} . On suppose connue l'équation aux valeurs propres de \hat{H} :

$$\hat{H}|n_1, n_2\rangle = (n_1^2 + n_2^2)|n_1, n_2\rangle \quad \text{avec : } \langle n'_1, n'_2 | n_1, n_2\rangle = \delta_{n_1, n'_1} \delta_{n_2, n'_2}$$

où n_1 et n_2 sont des entiers positifs.

On suppose qu'à l'instant $t = 0$ la particule est dans l'état normalisé à l'unité :

$$|\psi(t=0)\rangle = a|1,1\rangle + b|1,2\rangle$$

où a et b sont des constantes réelles positives.

1- / Déterminer a et b sachant que la valeur moyenne de l'énergie à l'instant $t = 0$ est 3.

2- / Déterminer l'état $|\psi(t)\rangle$ de la particule à un instant $t > 0$.

3- / Soient \hat{A} et \hat{B} deux observables de la particule telles que :

$$\begin{cases} \hat{A}|n_1, n_2\rangle = n_1|n_1, n_2\rangle \\ \hat{B}|n_1, n_2\rangle = n_2|n_1, n_2\rangle \end{cases}$$

Quelles sont, à un instant $t > 0$, les valeurs possibles des résultats de mesures de A et B et leurs probabilités respectives ?

II- / On considère un système physique S dont une grandeur P_1 est représenté dans une base orthonormée $\{| \psi_1 \rangle, | \psi_2 \rangle, | \psi_3 \rangle\}$ par la matrice

$$A = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{3} & 0 \\ \sqrt{3} & -2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

1- / On mesure P_1 , quelles valeurs peut-on trouver ?

2- / Si l'on prépare le système S dans l'état $|\psi_1\rangle$, qu'obtient-on comme résultat de mesure et avec quelle probabilité ?

3- / Une seconde grandeur P_2 du système S est représentée dans la même base $\{| \psi_1 \rangle, | \psi_2 \rangle, | \psi_3 \rangle\}$ par la matrice

$$B = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

On mesure P_2 , quelles valeurs peut-on obtenir ?

4- / On mesure P_1 , dans quel état se trouve le système ? On mesure ensuite P_2 , qu'obtient-on suivant le résultat de mesure de P_1 ?

5-/ On mesure P_2 , dans quel état se trouve le système ? On mesure ensuite P_1 , qu'obtient-on suivant le résultat de mesure de P_2 ?

6-/ On considère une troisième grandeur P_3 représentée dans la base $\{|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, |\psi_3\rangle\}$ par la matrice

$$C = \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & \sqrt{3} \\ -1 & \sqrt{3} & 1 \end{pmatrix}$$

On mesure P_3 , qu'obtient-on ? Dans quels états se trouve le système ?

Puis on mesure P_2 , qu'obtient-on ?

7-/ On mesure P_3 puis P_1 , qu'obtient-on ?

8-/ On mesure P_3 , quelle est la valeur moyenne de P_1 dans chacun des états possibles du système ?

9-/ On considère une 4ème grandeur P_4 représentée dans la base $\{|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, |\psi_3\rangle\}$ par la matrice

$$D = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Peut-on mesurer P_4 ?

Les outils...



1-/ Description de l'état d'un système :

A un instant donné t_0 fixé, l'état d'un système est défini par la donnée d'un ket $|\psi(t_0)\rangle$ appartenant à l'espace des états E .

Remarque : E étant un espace vectoriel, ce postulat implique un **principe de superposition** : une combinaison linéaire de vecteurs d'état est un vecteur d'état.

2-/ Description des grandeurs physiques :

Toute grandeur physique mesurable A est décrite par un opérateur \hat{A} agissant dans E ; cet opérateur est une **observable**.

3-/ Mesure des grandeurs physiques :

a) résultats possibles

La mesure d'une grandeur physique A ne peut donner comme résultat qu'une des valeurs propres de l'observable \hat{A} correspondante.

Remarque : une mesure de A donnera toujours une valeur réelle puisque \hat{A} est par définition hermitique.

b) principe de décomposition spectrale

b-1) cas d'un spectre discret non dégénéré :

Lorsqu'on mesure la grandeur physique A sur un système dans l'état $|\psi\rangle$ normé, la probabilité $P(a_n)$ d'obtenir comme résultat la valeur propre non dégénérée a_n de l'observable \hat{A} correspondante est : $P(a_n) = |\langle u_n | \psi \rangle|^2$ où $|u_n\rangle$ est le vecteur propre normé de \hat{A} associé à la valeur propre a_n .

b-2) cas où a_n est dégénérée : (de degré de dégénérescence g_n)

$P(a_n) = \sum_{i=1}^{g_n} |\langle u_n^i | \psi \rangle|^2$ où $\{|u_n^i\rangle\}$ ($i = 1 \dots g_n$) est un système orthonormé de vecteurs formant une base dans le sous-espace propre E_n associé à la valeur propre a_n .

b-3) cas d'un spectre continu non dégénéré :

La probabilité $dP(\alpha)$ d'obtenir un résultat compris entre α et $\alpha + d\alpha$ vaut :
 $dP(\alpha) = |\langle v_\alpha | \psi \rangle|^2 d\alpha$ où $|v_\alpha\rangle$ est le vecteur propre correspondant à la valeur propre α de l'observable \hat{A} associée à A .

4-/ Réduction du paquet d'ondes (ou : « théorème de projection »)

Si la mesure de la grandeur physique A sur le système dans l'état $|\psi\rangle$ donne le résultat a_n , l'état du système immédiatement après la mesure est la projection normée

$$\frac{\hat{P}_n |\psi\rangle}{\sqrt{\langle \psi | \hat{P}_n | \psi \rangle}}$$

de $|\psi\rangle$ sur le sous espace propre associé à a_n .

5- Evolution dans le temps :

L'évolution dans le temps du vecteur d'état $|\psi(t)\rangle$ est régie par l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle \quad \text{où } \hat{H}(t) \text{ est l'observable associée à l'énergie totale du système.}$$

6- Règles de quantification :

Pour une particule sans spin soumise à un potentiel scalaire :

* à la position $\vec{r}(x, y, z)$ de la particule est associée l'observable $\hat{\mathbf{R}}(\hat{X}, \hat{Y}, \hat{Z})$

* à l'impulsion $\vec{p}(p_x, p_y, p_z)$ de la particule est associée l'observable $\hat{\mathbf{P}}(\hat{P}_x, \hat{P}_y, \hat{P}_z)$

$$\text{telles que : } \begin{cases} [\hat{R}_i, \hat{R}_j] = [\hat{P}_i, \hat{P}_j] = 0 \\ [\hat{R}_i, \hat{P}_j] = i\hbar \delta_{ij} \end{cases}$$

L'observable \hat{A} qui décrit une grandeur physique A définie classiquement, s'obtient en remplaçant dans l'expression convenablement symétrisée de \hat{A} , \vec{r} et \vec{p} par les observables $\hat{\mathbf{R}}$ et $\hat{\mathbf{P}}$ respectivement.

7- Principe de superposition et prévisions physiques :

a) Soient $|\psi_1\rangle$ et $|\psi_2\rangle$ deux états normés et orthogonaux : $\begin{cases} \langle \psi_1 | \psi_1 \rangle = \langle \psi_2 | \psi_2 \rangle = 1 \\ \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = 0 \end{cases}$

$|\psi_1\rangle$ et $|\psi_2\rangle$ sont par exemple deux états propres d'une même observable \hat{B} associés à deux valeurs propres différentes b_1 et b_2 .

Considérons un état normé $|\psi\rangle$, superposition linéaire de $|\psi_1\rangle$ et $|\psi_2\rangle$: $|\psi\rangle = \lambda_1 |\psi_1\rangle + \lambda_2 |\psi_2\rangle$ ($|\lambda_1|^2 + |\lambda_2|^2 = 1$) ; alors la probabilité de trouver b_1 lors d'une mesure de \hat{B} est $|\lambda_1|^2$, celle de trouver b_2 est $|\lambda_2|^2$.

b) Si deux observables \hat{A} et \hat{B} (correspondant à deux grandeurs physiques A et B) **commutent**

$$[\hat{A}, \hat{B}] = 0 \quad \text{alors } \exists \text{ une base commune } \{|\psi_n\rangle\}, \text{ soit : } \begin{cases} \hat{A} |\psi_n\rangle = \alpha_n |\psi_n\rangle \\ \hat{B} |\psi_n\rangle = \beta_n |\psi_n\rangle \end{cases}$$

Pour prédire les résultats de mesure de A et B , **on développe l'état $|\psi\rangle$ du système sur la base $\{|\psi_n\rangle\}$ des états propres communs à \hat{A} et \hat{B} :** $|\psi\rangle = \sum_n a_n |\psi_n\rangle$.

Si mesure(A) $\rightarrow \alpha_i$ avec la probabilité $|a_i|^2$, le système immédiatement après la mesure est dans l'état $|\psi_i\rangle$, état propre de \hat{B} . La mesure de B donnera donc β_i avec la probabilité $|a_i|^2$ **et réciproquement.**

\Rightarrow **la prédiction des résultats de mesures est alors indépendante de l'ordre des mesures.**

c) Si $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$

Il faut alors décomposer l'état $|\psi\rangle$ du système sur la base des vecteurs propres de \hat{A} ou \hat{B} selon que l'on mesure d'abord A ou B .

$$\begin{cases} \hat{A}|\psi_n\rangle = \alpha_n |\psi_n\rangle \\ \hat{B}|\Phi_n\rangle = \beta_n |\Phi_n\rangle \end{cases} \quad \text{et} \quad |\psi\rangle = \sum_n a_n |\psi_n\rangle = \sum_n b_n |\Phi_n\rangle$$

Si mesure(A) $\rightarrow \alpha_i$ avec la probabilité $|a_i|^2$, le système immédiatement après la mesure est dans l'état $|\psi_i\rangle$. Comme $|\psi_i\rangle$ n'est pas un vecteur propre de \hat{B} , il faut décomposer $|\psi_i\rangle$ sur la base $\{|\Phi_n\rangle\}$, soit : $|\psi_i\rangle = \sum_n c_n |\Phi_n\rangle$. La mesure de B donnera donc β_i avec la probabilité $|c_i|^2$ et le système, immédiatement après la mesure sera dans l'état $|\Phi_i\rangle$. Si on mesure de nouveau A , il faudra de nouveau décomposer $|\Phi_i\rangle$ sur la base $\{|\psi_n\rangle\}$.

\Rightarrow La prédiction des résultats de mesures est donc dépendante cette fois de l'ordre des mesures.

d) E.C.O.C.

On appelle « Ensemble Complet d'Observables qui Commutent » un ensemble minimal d'observables qui commutent deux à deux et tel que la donnée d'un jeu de leurs valeurs propres suffit à déterminer sans ambiguïté un vecteur propre unique de leur base commune de vecteurs propres.

OSCILLATEUR HARMONIQUE PERTURBE

1./ Perturbation stationnaire

Une particule de masse m est soumise à un potentiel harmonique $\hat{V}^{(0)} = \frac{1}{2}k\hat{x}^2$. Une faible perturbation $\hat{V}^{(1)} = \frac{1}{2}\delta k\hat{x}^2$ s'ajoute à $\hat{V}^{(0)}$.

1-/ Montrer que les corrections en énergie, au premier et au second ordre (au sens de la théorie des perturbations) de l'état fondamental de l'oscillateur sont respectivement :

$$E^{(1)} = \frac{1}{4} \frac{\delta k}{k} \hbar \omega \quad \text{et} \quad E^{(2)} = -\frac{1}{16} \left(\frac{\delta k}{k} \right)^2 \hbar \omega$$

où ω est la fréquence angulaire de l'oscillateur : $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$

2-/ Montrer, par un calcul exact, que les expressions précédentes représentent une très bonne approximation de l'énergie de l'oscillateur.

On donne :

L'expression de l'opérateur position \hat{X} en fonction des opérateurs création et annihilation \hat{a}^\dagger et \hat{a} :

$$\hat{X} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)$$

dont les actions sur un état $|n\rangle$ de l'oscillateur non perturbé sont respectivement :

$$\begin{cases} \hat{a}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle \\ \hat{a} |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle \end{cases}$$

2./ Perturbation dépendant du temps

Oscillateur harmonique perturbé par un champ électrique créneau

On considère un oscillateur harmonique à une dimension x , de masse m et de pulsation ω_0 , de charge q . Soient $|\phi_n\rangle$ et $E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_0$ les états propres et valeurs propres de son Hamiltonien \hat{H}_0 . Pour $t < 0$, l'oscillateur est dans l'état fondamental $|\phi_0\rangle$. A $t = 0$, il est soumis à un « créneau » de champ électrique de durée τ ; la perturbation correspondante s'écrit :

$$\hat{V}(t) = \begin{cases} -q\mathcal{E}\hat{x} & \text{pour } 0 \leq t \leq \tau \\ 0 & \text{pour } t < 0 \text{ et } t > \tau \end{cases}$$

\mathcal{E} est l'amplitude du champ. Soit $P_{0 \rightarrow n}$ la probabilité de trouver l'oscillateur dans l'état $|\phi_n\rangle$ après la fin du créneau.

(a) Calculer $P_{0 \rightarrow 1}$ en utilisant la théorie des perturbation dépendant du temps au premier ordre. Comment varie $P_{0 \rightarrow 1}$ avec τ , ω_0 étant fixé.

(b) Montrer que pour obtenir $P_{0 \rightarrow 2}$, il faut pousser le calcul de perturbation dépendant du temps au moins jusqu'au second ordre. Calculer $P_{0 \rightarrow 2}$ à cet ordre de perturbation.

Les outils...



I-/ RAPPEL DE COURS SUR L'OSCILLATEUR HARMONIQUE

- Hamiltonien de l'oscillateur harmonique non perturbé : $\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \hat{X}^2$

on pose : $\varepsilon = \frac{E}{\hbar\omega}$ (sans dimension) $\rightarrow \frac{\hat{H}}{\hbar\omega} = \frac{1}{2} \left[\frac{\hat{P}^2}{m\hbar\omega} + \frac{\hat{X}^2}{\frac{\hbar}{m\omega}} \right]$ et :

$$\begin{cases} \hat{\tilde{X}} = \frac{\hat{X}}{\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}} \\ \hat{\tilde{P}} = \frac{\hat{P}}{\sqrt{m\hbar\omega}} \end{cases} \text{ variables réduites}$$

$$[\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar \Rightarrow [\hat{\tilde{X}}, \hat{\tilde{P}}] = i$$

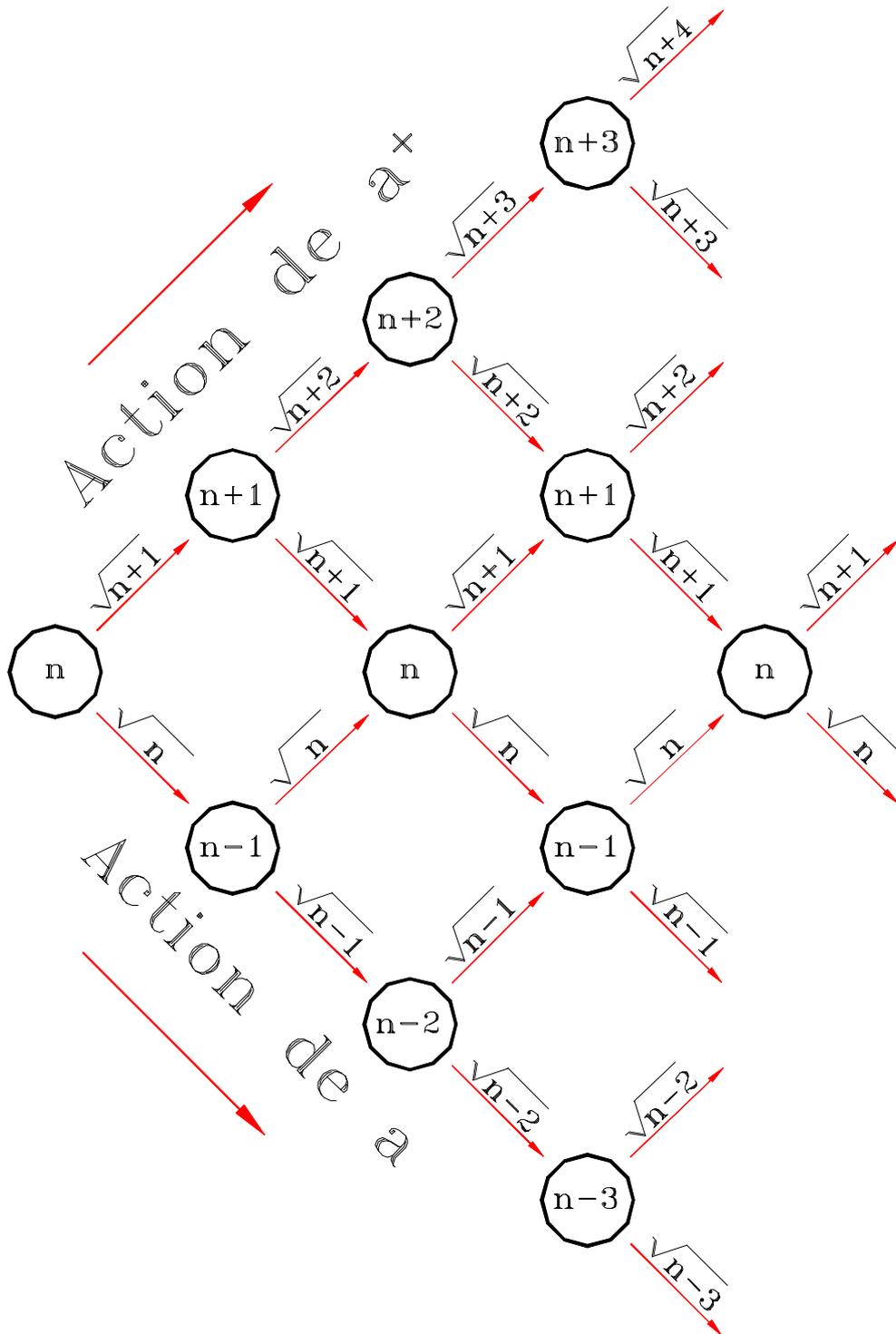
$$\hat{H} = \frac{1}{2}(\hat{P}^2 + \hat{X}^2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\underbrace{\hat{\tilde{X}} - i\hat{\tilde{P}}}_{\hat{a}^\dagger}) \frac{1}{\sqrt{2}}(\underbrace{\hat{\tilde{X}} + i\hat{\tilde{P}}}_{\hat{a}}) - \frac{i}{2}[\underbrace{\hat{\tilde{X}}, \hat{\tilde{P}}}_i]$$

$$\hat{H} = \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) \rightarrow \hat{H} = \hbar\omega \left(\underbrace{\hat{a}^\dagger \hat{a}}_{\hat{N}} + \frac{1}{2} \right) = \left(\hat{N} + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega$$

$$\begin{cases} \hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\tilde{X}} - i\hat{\tilde{P}}) \\ \hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\tilde{X}} + i\hat{\tilde{P}}) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \hat{\tilde{X}} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \\ \hat{\tilde{P}} = \frac{i}{\sqrt{2}}(\hat{a}^\dagger - \hat{a}) \end{cases} \text{ d'où : } \begin{cases} \hat{X} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \\ \hat{P} = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(\hat{a}^\dagger - \hat{a}) \end{cases}$$

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{1}$$

$$\begin{cases} \hat{a}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle \\ \hat{a} |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle \end{cases} \text{ où } \hat{a}^\dagger \text{ et } \hat{a} \text{ sont les opérateurs } \textit{création} \text{ et } \textit{annihilation}.$$



II- / Problèmes stationnaires

I- / Théorie des perturbations stationnaires - Définition :

L'étude quantique des systèmes physiques **conservatifs** (c'est-à-dire dont l'hamiltonien ne dépend pas explicitement du temps) est basée sur l'équation aux valeurs propres de l'opérateur hamiltonien.

La théorie des perturbations stationnaires est une méthode d'approximation qui permet dans certains cas, d'obtenir **analytiquement** des solutions approchées de cette équation aux valeurs propres.

résultats de la théorie :

La théorie est applicable lorsque l'hamiltonien \hat{H} du système étudié peut être mis sous la forme

$$\hat{H} = \underbrace{\hat{H}_0}_{\text{hamiltonien non perturbé}} + \underbrace{\hat{W}}_{\text{perturbation}} \quad (\hat{W} \ll \hat{H}_0)$$

- **Perturbation d'un niveau non dégénéré $E_n^{(0)}$:**

- **-Correction au premier ordre à l'énergie :**

La correction au **premier ordre** à une énergie non dégénérée $E_n^{(0)}$ est simplement égale à la valeur moyenne du terme de perturbation \hat{W} dans l'état propre non perturbé $|\varphi_n\rangle$.

$$E_n = E_n^{(0)} + \underbrace{\langle \varphi_n | \hat{W} | \varphi_n \rangle}_{E_n^{(1)}}$$

- **-Correction au premier ordre au vecteur propre :**

$$|\psi_n\rangle = |\varphi_n\rangle + \underbrace{\sum_{p \neq n} \frac{\langle \varphi_p | \hat{W} | \varphi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_p^{(0)}} |\varphi_p\rangle}_{\text{correction au 1er ordre}}$$

- **-Correction au second ordre à l'énergie :**

$$E_n^{(2)} = \sum_{p \neq n} \frac{|\langle \varphi_p | \hat{W} | \varphi_n \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_p^{(0)}}$$

d'où, à l'ordre 2 :

$$E_n = E_n^{(0)} + \underbrace{\langle \varphi_n | \hat{W} | \varphi_n \rangle}_{E_n^{(1)}} + \underbrace{\sum_{p \neq n} \frac{|\langle \varphi_p | \hat{W} | \varphi_n \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_p^{(0)}}}_{E_n^{(2)}}$$

- **Perturbation d'un niveau dégénéré $E_n^{(0)}$:**

La correction au premier au premier ordre de l'énergie est obtenue en diagonalisant la perturbation dans le sous-espace de dégénérescence associé à $E_n^{(0)}$. Les vecteurs propres correspondent à l'approximation d'ordre 0.

III- / Problèmes non stationnaires

le développement en perturbation

Les 3 représentations :

- Soit $|\psi_s(t_0)\rangle$ un vecteur d'état en **représentation de Schrödinger**, i.e. son évolution dans le temps est régie par l'équation de Schrödinger. La représentation de Schrödinger emploie une transformation unitaire **ACTIVE** :

$$|\psi_S(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0)|\psi_S(t_0)\rangle = \hat{U}^\dagger(t_0, t)|\psi_S(t_0)\rangle$$

où $\hat{U}(t, t_0)$ est l'opérateur d'évolution.

Le vecteur est transformé mais tous les opérateurs sont constants dans le temps (à moins qu'ils ne dépendent EXPLICITEMENT du temps). Les vecteurs de base sont inchangés. Les opérateurs sont définis par leur action sur les vecteurs de base.

• La **représentation de Heisenberg** utilise une transformation unitaire équivalente mais **PASSIVE**. Le vecteur d'état est constant :

$$|\psi_H\rangle = |\psi_S(t_0)\rangle = \hat{U}(t_0, t)|\psi_S(t)\rangle = \hat{U}^\dagger(t, t_0)|\psi_S(t)\rangle$$

Les vecteurs de base sont modifiés et par conséquent, les opérateurs aussi. L'opérateur $\hat{A}_H(t)$ (dans la nouvelle base) s'exprime en fonction de $\hat{A}_S(t)$ (dans l'ancienne base) par la relation :

$$\hat{A}_H(t) = \hat{U}(t_0, t)\hat{A}_S(t)\hat{U}^\dagger(t_0, t) = \hat{U}^\dagger(t, t_0)\hat{A}_S(t)\hat{U}(t, t_0)$$

Passage d'une représentation à l'autre :

La représentation de Heisenberg est obtenue par une transformation unitaire, pour tout instant t , à partir de la représentation de Schrödinger :

$$|\psi_H\rangle = \hat{U}(t_0, t)|\psi_S(t)\rangle = \hat{U}^\dagger(t, t_0)|\psi_S(t)\rangle = |\psi_S(t_0)\rangle$$

Les éléments de matrice de tout opérateur \hat{A} sont indépendants de la représentation.

$$\begin{aligned} \langle \psi_S(t) | \hat{A}_S(t) | \Phi_S(t) \rangle &= \langle \psi_S(t) | \hat{U}(t, t_0) \hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{A}_S(t) \hat{U}(t, t_0) \hat{U}^\dagger(t, t_0) | \Phi_S(t) \rangle \\ &= \langle \psi_H | \hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{A}_S(t) \hat{U}(t, t_0) | \Phi_H \rangle = \langle \psi_H | \hat{A}_H(t) | \Phi_H \rangle \end{aligned}$$

Les prédictions de la mécanique quantique sont indépendantes de la représentation.

• La **représentation d'interaction** (dite : intermédiaire)

Supposons que le Hamiltonien d'un système quelconque soit $\hat{H}_{0S}(t)$ (en représentation de Schrödinger) et l'opérateur (unitaire) d'évolution correspondant, soit $\hat{U}_0(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_{0S}(t-t_0)}$. Nous avons :

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{U}_0(t, t_0) = \hat{H}_{0S}(t) \hat{U}_0(t, t_0) \text{ avec } \hat{U}_0(t_0, t_0) = \hat{I} \text{ et } \hat{U}_0(t, t_0) \hat{U}_0^\dagger(t, t_0) = \hat{I} \quad (1)$$

Supposons maintenant que le système soit perturbé de telle façon que son Hamiltonien devienne $\hat{H}_S(t) = \hat{H}_{0S}(t) + \hat{W}_S(t)$. Pour un tel système, le vecteur d'état en représentation d'interaction, $|\psi_I(t)\rangle$ est défini à partir du vecteur d'état en représentation de Schrödinger par :

$$\boxed{|\psi_I(t)\rangle = \hat{U}_0^\dagger(t, t_0) |\psi_S(t)\rangle}$$

Comment évolue $|\psi_I(t)\rangle$?

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_I(t)\rangle = i\hbar \frac{d}{dt} \hat{U}_0^\dagger(t, t_0) |\psi_S(t)\rangle = i\hbar \left[\left(\frac{d}{dt} \hat{U}_0^\dagger(t, t_0) \right) |\psi_S(t)\rangle + \hat{U}_0^\dagger(t, t_0) \frac{d}{dt} |\psi_S(t)\rangle \right]$$

$$= -\hat{U}_0^\dagger(t, t_0) \hat{H}_{0S}(t) |\psi_S(t)\rangle + \hat{U}_0^\dagger(t, t_0) \hat{H}_S(t) |\psi_S(t)\rangle$$

(où nous avons utilisé (1)[†] = $-i\hbar \frac{d}{dt} \hat{U}_0^\dagger(t, t_0) = \hat{U}_0^\dagger(t, t_0) \hat{H}_0(t)$)

Nous pouvons maintenant écrire :

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_I(t)\rangle = -\underbrace{\hat{U}_0^\dagger \hat{H}_{0S}(t) \hat{U}_0}_{\hat{H}_{0I}(t)} \underbrace{\hat{U}_0^\dagger}_{|\psi_I(t)\rangle} |\psi_S(t)\rangle + \underbrace{\hat{U}_0^\dagger \hat{H}_S(t) \hat{U}_0}_{\hat{H}_I(t)} \underbrace{\hat{U}_0^\dagger}_{|\psi_I(t)\rangle} |\psi_S(t)\rangle$$

$$= -\hat{H}_{0I}(t) |\psi_I(t)\rangle + \left[\underbrace{\hat{H}_{0I}(t) + \hat{W}_I(t)}_{\hat{H}_I(t)} \right] |\psi_I(t)\rangle = \hat{W}_I(t) |\psi_I(t)\rangle$$

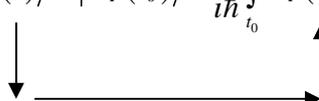
c'est-à-dire :

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_I(t)\rangle = \hat{W}_I(t) |\psi_I(t)\rangle$$

qu'on peut encore écrire sous la forme d'une équation intégrale :

$$d|\psi_I(t)\rangle = \frac{1}{i\hbar} \hat{W}_I(t) |\psi_I(t)\rangle dt$$

$$\int_{t_0}^t d|\psi_I(t')\rangle = \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t \hat{W}_I(t') |\psi_I(t')\rangle dt'$$

$$|\psi_I(t)\rangle = |\psi_I(t_0)\rangle + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t \hat{W}_I(t') |\psi_I(t')\rangle dt'$$


équation intégrale qui peut être résolue par itérations.

Le ket $|\psi_I(t)\rangle$ peut alors être développé en série de puissances de la forme :

$$|\psi_I(t)\rangle = \left\{ I + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{W}_I(t') + \frac{1}{(i\hbar)^2} \int_{t_0}^t dt' \hat{W}_I(t') \int_{t_0}^{t'} dt'' \hat{W}_I(t'') + \dots \right\} |\psi_I(t_0)\rangle$$

La représentation d'interaction assigne une dépendance en temps aux vecteurs et aux opérateurs.

Quand doit-on utiliser la représentation d'interaction ?

La représentation d'interaction est souvent utilisée lorsque \hat{H}_{0S} est indépendant du temps et $\hat{W}_S(t)$ une petite correction par rapport à \hat{H}_{0S} . Supposons que le problème gouverné par \hat{H}_{0S} ait déjà été résolu, soit exactement, soit de façon approchée. Supposons que $\hat{W}_S(t) = 0$ pour $t \leq 0$. Alors $|\psi_I(0)\rangle = |\psi_S(0)\rangle$. En négligeant les termes d'ordre supérieur, à 1, nous avons :

$$|\psi_I(t)\rangle = |\psi_I(0)\rangle + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t \hat{W}_I(t') |\psi_I(0)\rangle dt'$$

avec $\hat{W}_I(t) = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} \hat{W}_S(t) e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t}$

Soit $\{|n\rangle\}$ une base propre orthonormée de \hat{H}_0 et soit $|m\rangle$ l'état du système à $t = 0$, i.e. $|\psi_I(0)\rangle = |m\rangle$. Nous avons : $\hat{H}_0 |m\rangle = E_m |m\rangle$.

La probabilité $P(E_k, t)$ de trouver le système dans l'état propre $|k\rangle$ de \hat{H}_0 à l'instant t , i.e. la probabilité de trouver la valeur propre E_k , est $|\langle k | \psi_I(t) \rangle|^2$ (les prédictions en mécanique quantique sont indépendantes de la représentation).

$$\langle k | \psi_I(t) \rangle = \langle k | m \rangle + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t \langle k | \hat{W}_I(t') | m \rangle dt' = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t e^{\frac{i}{\hbar} (E_k - E_m) t'} \langle k | \hat{W}_S(t') | m \rangle dt'$$

avec $\langle k | m \rangle = 0$. Nous avons donc :

$$P(E_k, t) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t e^{\frac{i}{\hbar} (E_k - E_m) t'} \langle k | \hat{W}_S(t') | m \rangle dt' \right|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t e^{i\omega_{km} t'} \langle k | \hat{W}_S(t') | m \rangle dt' \right|^2$$

où $\omega_{km} = \frac{E_k - E_m}{\hbar}$ est la pulsation de Bohr de la transition $|k\rangle \leftrightarrow |m\rangle$.

C'est le résultat au **premier ordre**, de la théorie des perturbations dépendant du temps. $P(E_k, t)$ est la probabilité de transition $|k\rangle \leftrightarrow |m\rangle$ pour une durée t de l'interaction.

Si t est la durée de la perturbation « branchée » à l'origine $t = 0$ alors :

$$\int_0^t e^{i\omega_{km} t'} \langle k | \hat{W}_S(t') | m \rangle dt' = \int_0^\infty e^{i\omega_{km} t'} \langle k | \hat{W}_S(t') | m \rangle dt'$$

Et, au facteur $\frac{1}{\hbar^2}$ près, la probabilité au premier ordre est le module au carré de la transformée de Fourier de l'élément de matrice de la perturbation, transformée de Fourier prise pour la pulsation de Bohr $\omega_{km} = \frac{E_k - E_m}{\hbar}$ de la transition considérée.

Si $\hat{W}_S(t)$ est indépendant du temps, i.e., un terme petit **et constant** est ajouté au temps $t = 0$ à l'Hamiltonien, alors :

$$P(E_k, t) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \langle k | \hat{W}_S | m \rangle \right|^2 \left| \frac{e^{\frac{i}{\hbar}(E_k - E_m)t} - 1}{\frac{i}{\hbar}(E_k - E_m)} \right|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \langle k | \hat{W}_S | m \rangle \right|^2 \left| \frac{e^{-\frac{i}{\hbar}E_m t} - e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t}}{\frac{i}{\hbar}(E_k - E_m)} \right|^2$$

$$= \frac{\left| \langle k | \hat{W}_S | m \rangle \right|^2}{(E_k - E_m)^2} \left| 2 \sin \frac{E_k - E_m}{2\hbar} t \right|^2 = \frac{\left| \langle k | \hat{W}_S | m \rangle \right|^2}{(\hbar \omega_{km})^2} 4 \sin^2 \left(\frac{\omega_{km} t}{2} \right)$$

où nous avons utilisé le fait que $|e^{i\theta} - e^{i\varphi}| = 2 \sin \left(\frac{\theta - \varphi}{2} \right)$

Au second ordre :

$$|\psi_I^{(2)}(t)\rangle = |\psi_I(t_0)\rangle + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{W}_I(t') |\psi_I(t_0)\rangle + \frac{1}{(i\hbar)^2} \int_{t_0}^t dt' \hat{W}_I(t') \int_{t_0}^{t'} dt'' \hat{W}_I(t'') |\psi_I(t_0)\rangle$$

Supposons comme précédemment que $\hat{W}_S(t) = 0$ pour $t \leq 0$. Alors $|\psi_I(0)\rangle = |\psi_S(0)\rangle = |m\rangle$

$$\langle k | \psi_I^{(2)}(t) \rangle = \underbrace{\langle k | m \rangle}_{=0} + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' \langle k | \hat{W}_I(t') | m \rangle + \frac{1}{(i\hbar)^2} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \langle k | \hat{W}_I(t') \hat{W}_I(t'') | m \rangle$$

En injectant la relation de fermeture $\sum_j |j\rangle \langle j|$ de la base $\{|n\rangle\}$ de états propres de l'Hamiltonien

non perturbé \hat{H}_{0S} entre $\hat{W}_I(t')$ et $\hat{W}_I(t'')$, on obtient :

$$\langle k | \psi_I^{(2)}(t) \rangle = \underbrace{\langle k | m \rangle}_{=0} + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' \langle k | \hat{W}_I(t') | m \rangle + \dots$$

$$\dots \frac{1}{(i\hbar)^2} \sum_j \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \langle k | \hat{W}_I(t') | j \rangle \langle j | \hat{W}_I(t'') | m \rangle$$

Soit en repassant en représentation de Schrödinger :

$$\text{(En se rappelant que } \hat{W}_I(t) = \underbrace{e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_{0S}t}}_{U^\dagger(t,0)} \hat{W}_S(t) \underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_{0S}t}}_{U(t,0)})$$

$$\langle k | \psi_I^{(2)}(t) \rangle = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' e^{\frac{i}{\hbar}(E_k - E_m)t'} \langle k | \hat{W}_S(t') | m \rangle + \dots$$

$$\dots \frac{1}{(i\hbar)^2} \sum_j \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' e^{\frac{i}{\hbar}(E_k - E_j)t'} \langle k | \hat{W}_S(t') | j \rangle \langle j | \hat{W}_S(t'') | m \rangle e^{\frac{i}{\hbar}(E_j - E_m)t''}$$

Au second ordre interviennent des états propres $|j\rangle$ intermédiaires entre les états $|k\rangle$ et $|m\rangle$ susceptibles d'être couplés avec ces états.

PROBLEMES STATIONNAIRES

Soit le Hamiltonien : $\hat{H} = \frac{D}{\hbar^2} \left(\hat{S}_z^2 - \frac{\hat{S}^2}{3} \right) + \frac{E}{2\hbar^2} (\hat{S}_+^2 + \hat{S}_-^2)$ où D et E sont des constantes et où

le spin S est égal à 1.

- a) Quels sont les niveaux d'énergie du système dont le Hamiltonien est \hat{H} .
- b) On applique un champ magnétique oscillant d'amplitude $B \cos \omega t$ pour assurer des transitions entre ces différents états.
Donner le nombre de raies susceptibles d'être observées suivant la structure du champ magnétique.

« DYNAMIQUE EN REFERENTIEL TOURNANT »

L'EXEMPLE DE LA RESONANCE MAGNETIQUE

1.- Hamiltonien de spin

On considère une particule de spin $\frac{1}{2}$ placée dans un champ magnétique statique $\vec{B}_0 = B_0 \vec{u}_z$ et un champ tournant à la vitesse angulaire constante ω , de faible amplitude b_1

$$\vec{b}_1(t) = b_1 (\cos \omega t \vec{u}_x + \sin \omega t \vec{u}_y)$$

• **En faisant abstraction des variables spatiales, montrer que le Hamiltonien de spin de la particule s'écrit**

$$\hat{H}(t) = \frac{\hbar}{2} \left[\omega_L \hat{\sigma}_z + \frac{\omega_1}{2} (e^{-i\omega t} \hat{\sigma}_+ + e^{i\omega t} \hat{\sigma}_-) \right]$$

où $\hat{\sigma}$ est l'opérateur de spin de Pauli, $\omega_L = -\gamma B_0$ (pulsation de Larmor), $\omega_1 = -\gamma b_1$ et γ le rapport gyromagnétique.

2.- Hamiltonien dans le référentiel tournant

On effectue un changement de base défini par la transformation unitaire $\hat{U}(t,0) = e^{-i\frac{\omega t}{2} \hat{\sigma}_z}$ et on note $|\widetilde{\Psi}(t)\rangle$ le transformé par \hat{U}^\dagger du vecteur $|\Psi(t)\rangle$ représentant l'état de spin de la particule.

- Montrer que dans cette nouvelle base le Hamiltonien s'écrit $\hat{H}' = -\frac{\hbar}{2} \delta \hat{\sigma}_z + \frac{\hbar \omega_1}{2} \hat{\sigma}_x$ où $\delta = \omega - \omega_L$.
- En déduire que dans cette nouvelle base le spin précesse autour d'un champ magnétique efficace \vec{B}_{eff} constant dont on déterminera l'expression.
- Déterminer l'évolution temporelle de l'état de spin $|\widetilde{\Psi}(t)\rangle = b_+(t)|+\rangle + b_-(t)|-\rangle$.

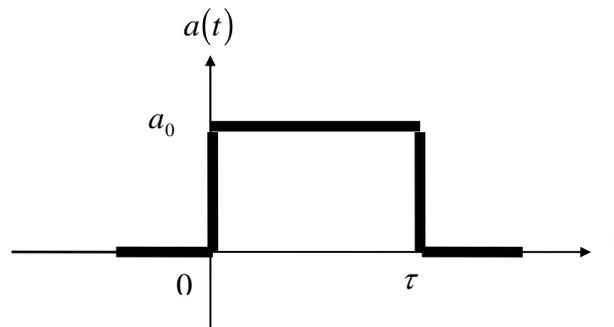
3.- Résonance magnétique

On suppose que le spin est initialement dans l'état $|+\rangle$.

- Calculer la probabilité de basculement du spin au temps t et montrer le caractère résonnant de cette probabilité.

PROBLEMES NON STATIONNAIRES

On considère deux spins $\frac{1}{2}$, \hat{S}_1 et \hat{S}_2 , couplés par une interaction scalaire de la forme $a(t)\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2$; $a(t)$ est une fonction du temps représentée ci-dessous :



(Il s'agit, par exemple, d'un modèle simple de collision entre deux spins $\frac{1}{2}$ où les degrés de liberté externes sont traités classiquement et « quantiquement » les degrés de liberté de spin. La constante de couplage a est alors une fonction rapidement décroissante de la distance r qui sépare les deux particules. Comme r varie au cours du temps, il en est de même de a . Le maximum de $a(t)$ correspond à l'instant où la distance entre les deux particules est minimale. Pour simplifier les raisonnements on remplace la courbe réelle par le "créneau" représenté ci-dessus)

1-/

A $t = -\infty$, le système est dans l'état $|+, -\rangle$ (état propre de \hat{S}_{1z} et \hat{S}_{2z} avec les valeurs propres $+\frac{\hbar}{2}$ et $-\frac{\hbar}{2}$).

Calculer **sans approximation** :

a) l'état du système à $t = +\infty$.

(On se rappellera que multiplier un vecteur d'état par un facteur de phase global est sans importance physique)

b) la probabilité $P_{(|+, -\rangle \rightarrow |-, +\rangle)}$ de trouver à $t = +\infty$, le système dans l'état $|-, +\rangle$.

2-/

Calculer $P_{(|+, -\rangle \rightarrow |-, +\rangle)}$ **en utilisant la théorie des perturbations dépendant du temps au premier ordre.**

Discuter les conditions de validité d'une telle approximation en comparant les résultats obtenus à ceux de la question précédente.

Table de coefficients de CLEBSCH-GORDAN $\frac{1}{2} \times \frac{1}{2}$

Notation	S S ... M M ...
$m_1 \ m_2$ $m_1 \ m_2$	coefficient sans $\sqrt{\quad}$

Note : la racine carrée s'applique à chaque coefficient dans ces tables.

Par exemple $-\frac{1}{2}$ doit être lu $-\sqrt{\frac{1}{2}}$.

On démontre la propriété suivante pour ces coefficients :

$$\langle S_1, m_1, S_2, m_2 | S, M, S_1, S_2 \rangle = (-1)^{S-S_1-S_2} \langle S_2, m_2, S_1, m_1 | S, M, S_2, S_1 \rangle$$

				$\frac{1}{2} \times \frac{1}{2}$		
				1		
		+1		1 0		
$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	1		0 0		
	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	1
	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	-1
		$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$			1

ADDITION DE DEUX MOMENTS CINÉTIQUES

Soient deux moments cinétiques \hat{J}_1 et \hat{J}_2 de nombres quantiques respectifs $j_1 = j_2 = 1$. On désigne par C_1 l'espace des états de \hat{J}_1 et par C_2 celui des états de \hat{J}_2 . On note $|j_1, m_1\rangle$ (resp. $|j_2, m_2\rangle$) les vecteurs propres communs à $\{\hat{J}_1^2, \hat{J}_{1z}\}$ (resp. $\{\hat{J}_2^2, \hat{J}_{2z}\}$). On effectue le produit tensoriel $C_{12} = C_1 \otimes C_2$ et on note $|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle$ les nouveaux vecteurs de base. On a donc

$$|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle = |j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle$$

1-/ Quelles valeurs peuvent prendre m_1 et m_2 ? Quelle est la dimension de C_{12} ? Quelle est l'action des opérateurs $\hat{J}_1^2, \hat{J}_{1z}, \hat{J}_2^2, \hat{J}_{2z}$ sur les nouveaux vecteurs de base $|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle$?

On introduit le moment cinétique total $\hat{J} = \hat{J}_1 + \hat{J}_2$ et on note $\{|j_1, j_2, J, M\rangle\}$ la base commune à l'ECOC $\{\hat{J}_1^2, \hat{J}_2^2, \hat{J}^2, \hat{J}_z\}$.

2-/ Quelles sont les valeurs possibles de J ? Quelle est la dimension de la base $\{|j_1, j_2, J, M\rangle\}$?

Remarque :

j_1 et j_2 étant fixés ($j_1 = j_2 = 1$) on adoptera la notation simplifiée suivante :

$$|j_1, j_2, J, M\rangle \equiv |J, M\rangle \text{ et } |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle \equiv |m_1, m_2\rangle$$

On désigne par P la matrice de passage de la base $|J, M\rangle$ à la base $|m_1, m_2\rangle$. Les coefficients de cette matrice s'appellent "**coefficients de Clebsch-Gordan**".

3-/ A l'aide de la relation $M = m_1 + m_2$, déterminer les coefficients de Clebsch-Gordan non nuls.

4-/ On adopte la convention de phase : $\langle j_1, J - j_1 | J, J \rangle$ réel > 0 .

Calculer $|J, J\rangle$ en utilisant cette convention de phase.

5-/ En déduire $|J, J - 1\rangle$ en utilisant l'action de l'opérateur $\hat{J}^- = \hat{J}_1^- + \hat{J}_2^-$ sur le ket $|J, J\rangle$ ($\in C_{12}$).

6-/ Obtenir $|J - 1, J - 1\rangle$ en utilisant la structure de la matrice de passage P .

7-/ Obtenir les autres vecteurs de proche en proche à l'aide de l'opérateur \hat{J}^- .

8-/ Ecrire la matrice de passage P .

9-/ Retrouver directement les résultats obtenus ci-dessus à l'aide d'une table de coefficients de Clebsch-Gordan.

Table de coefficients de Clebsch-Gordan relative à l'addition de deux moments cinétiques 1

$$\langle m_1, m_2 | \quad | J, M \rangle$$

		1x1		2													
				+2		2		1									
+1		+1		1		+1		+1									
		+1		0		$\sqrt{\frac{1}{2}}$		$\sqrt{\frac{1}{2}}$		2		1		0			
		0		+1		$\sqrt{\frac{1}{2}}$		$-\sqrt{\frac{1}{2}}$		0		0		0			
				+1		-1		$\sqrt{\frac{1}{6}}$		$\sqrt{\frac{1}{2}}$		$\sqrt{\frac{1}{3}}$					
				0		0		$\sqrt{\frac{2}{3}}$		0		$-\sqrt{\frac{1}{3}}$		2		1	
				-1		+1		$\sqrt{\frac{1}{6}}$		$-\sqrt{\frac{1}{2}}$		$\sqrt{\frac{1}{3}}$		-1		-1	
								0		-1		$\sqrt{\frac{1}{2}}$		$\sqrt{\frac{1}{2}}$		2	
								-1		0		$\sqrt{\frac{1}{2}}$		$-\sqrt{\frac{1}{2}}$		-2	
												-1		-1		1	

Remarque : La table est à double entrée et permet le passage d'une base de représentation standard à l'autre : $\{|J, M\rangle\} \leftrightarrow \{|m_1, m_2\rangle\}$

Exemple :

$$\{|J, M\rangle\} \rightarrow \{|m_1, m_2\rangle\} \quad |2,1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\{|1,0\rangle + |0,1\rangle\}$$

$$\{|J, M\rangle\} \leftarrow \{|m_1, m_2\rangle\} \quad |1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\{|2,1\rangle + |1,1\rangle\}$$

Les outils...

Moments cinétiques -



« orbital » noté L s'il possède un équivalent classique

« spin » noté S s'il s'agit d'un moment intrinsèque sans équivalent classique

1-/ Définition et principales propriétés :

On appelle moment cinétique \hat{J} tout ensemble de trois observables $\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z$ vérifiant les

$$\text{relations de commutation : } \begin{cases} [\hat{J}_x, \hat{J}_y] = i\hbar\hat{J}_z \\ [\hat{J}_y, \hat{J}_z] = i\hbar\hat{J}_x \\ [\hat{J}_z, \hat{J}_x] = i\hbar\hat{J}_y \end{cases} \quad (\text{qu'on peut résumer par } \hat{J} \wedge \hat{J} = i\hbar\hat{J})$$

Soit $\hat{J}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2$ l'opérateur carré scalaire du moment cinétique \hat{J} . Cet opérateur est hermitique (puisque $\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z$ le sont). \hat{J}^2 commute avec les composantes de \hat{J} : $[\hat{J}^2, \hat{J}] = 0$

$\Rightarrow \hat{J}^2$ et \hat{J}_z admettent un système de vecteurs propres communs $\{|k, j, m\rangle\}$, les équations aux valeurs propres étant les suivantes :

$$\begin{cases} \hat{J}^2 |k, j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2 |k, j, m\rangle \\ \hat{J}_z |k, j, m\rangle = m\hbar |k, j, m\rangle \end{cases}$$

(l'indice k est nécessaire car dans le cas général, \hat{J}^2 et \hat{J}_z ne constituent pas un ECOC)

- Les seules valeurs possibles pour j sont les nombres entiers (moments orbitaux) ou demi-entiers positifs ou nul ($0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots$) (spins).
- Pour une valeur fixée de j , les seules valeurs possibles pour m sont les $(2j+1)$ nombres $(-j, -j+1, \dots, j-1, j)$; m est donc entier si j est entier, demi-entier si j est demi-entier.

Remarques :

1) Au lieu d'utiliser les composantes J_x et J_y du moment cinétique J , il est plus commode d'introduire les combinaisons linéaires $J_{\pm} = J_x \pm iJ_y$. On a alors $[J^2, J_{\pm}] = [J^2, J_z] = 0$ et :

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

2) En représentation $\{|r\rangle\}$ les fonctions propres de J^2 et J_z sont les harmoniques sphériques $Y_l^m(\theta, \varphi)$.

2-/ Composition (ou addition) des moments cinétiques :

2-1/ Définition : $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{J}}_1 + \hat{\mathbf{J}}_2$ est défini comme le moment cinétique somme des moments cinétiques partiels $\hat{\mathbf{J}}_1$ et $\hat{\mathbf{J}}_2$

2-2/ Utilité : On connaît une base de l'espace des états constituée des vecteurs propres communs à $\hat{\mathbf{J}}_1^2, \hat{J}_{1z}, \hat{\mathbf{J}}_2^2, \hat{J}_{2z}$. Cependant $\hat{\mathbf{J}}_1$ et $\hat{\mathbf{J}}_2$ ne sont pas généralement des constantes du mouvement $\left(\left[\hat{H}, \hat{\mathbf{J}}_1 \right] \neq 0, \left[\hat{H}, \hat{\mathbf{J}}_2 \right] \neq 0 \right)$ alors que $\hat{\mathbf{J}}^2$ et \hat{J}_z le sont $\left(\left[\hat{H}, \hat{\mathbf{J}}^2 \right] = \left[\hat{H}, \hat{J}_z \right] = 0 \right)$.

On cherche donc à construire une nouvelle base formée de vecteurs propres communs à $\hat{\mathbf{J}}^2$ et \hat{J}_z à partir de la base précédente.

L'intérêt de cette nouvelle base se comprend aisément. Pour déterminer les états stationnaires du système, c'est-à-dire les états propres de \hat{H} , il est plus simple de diagonaliser la matrice représentant \hat{H} dans cette nouvelle base. En effet, comme $\left[\hat{H}, \hat{\mathbf{J}}^2 \right] = \left[\hat{H}, \hat{J}_z \right] = 0$, cette matrice se décompose en autant de blocs qu'il y a de sous-

espaces propres associés aux divers ensembles de valeurs propres de $\hat{\mathbf{J}}^2$ et \hat{J}_z . Sa structure (diagonale par blocs) est beaucoup plus simple que celle de la matrice représentant \hat{H} dans la base des vecteurs propres communs à $\hat{\mathbf{J}}_1^2, \hat{J}_{1z}, \hat{\mathbf{J}}_2^2, \hat{J}_{2z}$ puisque ni \hat{J}_{1z} ni \hat{J}_{2z} ne commutent en général avec \hat{H} .

3-/ Les deux bases standards possibles :

a) Celle constituée des vecteurs propres communs à $\hat{\mathbf{J}}_1^2, \hat{J}_{1z}, \hat{\mathbf{J}}_2^2, \hat{J}_{2z}$: notée :

$$\{|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle\} \equiv \{|j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle\} \equiv \{|m_1, m_2\rangle\} \text{ à } j_1 \text{ et } j_2 \text{ fixés}$$

$$\text{telle que : } \begin{cases} \hat{\mathbf{J}}_1^2 |m_1, m_2\rangle = j_1(j_1 + 1)\hbar^2 |m_1, m_2\rangle \\ \hat{J}_{1z} |m_1, m_2\rangle = m_1\hbar |m_1, m_2\rangle \end{cases} \quad \text{et} \quad \begin{cases} \hat{\mathbf{J}}_2^2 |m_1, m_2\rangle = j_2(j_2 + 1)\hbar^2 |m_1, m_2\rangle \\ \hat{J}_{2z} |m_1, m_2\rangle = m_2\hbar |m_1, m_2\rangle \end{cases}$$

b) Celle constituée des vecteurs propres communs à $\hat{\mathbf{J}}_1^2, \hat{\mathbf{J}}_2^2, \hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_z$: notée :

$$\{|j_1, j_2, j, m\rangle\} \equiv \{|j, m\rangle\} \text{ à } j_1 \text{ et } j_2 \text{ fixés}$$

$$\text{telle que : } \begin{cases} \hat{\mathbf{J}}^2 |j, m\rangle = j(j + 1)\hbar^2 |j, m\rangle \\ \hat{J}_z |j, m\rangle = m\hbar |j, m\rangle \end{cases} \quad \text{et} \quad \begin{cases} \hat{\mathbf{J}}_1^2 |j, m\rangle = j_1(j_1 + 1)\hbar^2 |j, m\rangle \\ \hat{\mathbf{J}}_2^2 |j, m\rangle = j_2(j_2 + 1)\hbar^2 |j, m\rangle \end{cases}$$

Avec : $|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2$ et $-j \leq m \leq j$ par saut d'une unité ($(2j + 1)$ valeurs)

4-/ Passage d'une base à l'autre :

Par « injection » de la relation de fermeture de l'autre base

$$|j, m\rangle = \hat{I} |j, m\rangle = \sum_{m_1=-j_1}^{+j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{+j_2} |m_1, m_2\rangle \underbrace{\langle m_1, m_2 | j, m \rangle}_{\text{coefficients de Clebsch-Gordan}} \quad \text{et réciproquement :}$$

$$|m_1, m_2\rangle = \hat{I} |m_1, m_2\rangle = \sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \sum_{m=-j}^{+j} |j, m\rangle \underbrace{\langle j, m | m_1, m_2 \rangle}_{\text{coefficients de Clebsch-Gordan}}$$