Année 2011-12,
Master de Physique M1,
Travaux dirigés de Mécanique Quantique

Les exercices marqués *, **, …sont plus difficiles. Ils permettent de pousser un peu plus loin les investigations.

Table des matières

Master de Physique
Travaux dirigés de Mécanique Quantique, TD -0-

Rappels et révisions

Exercice 1

Une particule de masse m, dans un espace à une dimension, est soumise à un potentiel $V(x)$ qui est *nul* dans un intervalle de longueur a et *infini* ailleurs. Écrire l'équation de Schrödinger, et trouver les niveaux d'énergie et les fonctions d'ondes propres correspondantes. Justifier le choix de l'origine des axes adoptée. Vérifier l'orthogonalité.

Exercice 2

On considère l'oscillateur harmonique à une dimension

$$H = \frac{P_{op}^2}{2m} + \frac{KX_{op}^2}{2} .$$

1) Écrire l'équation de Schrödinger pour la fonction d'onde dépendant du temps $\Psi(x, t)$.

2) On cherche un état stationnaire d'énergie E sous la forme

$$\Psi(X, t) = \psi(X) \exp(-iEt/\hbar)$$

Écrire l'équation différentielle satisfaite par $\psi(X)$.

3) Expliquer qualitativement pourquoi seules certaines valeurs de E permettent d'avoir une fonction d'onde normalisable

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(X)|^2 < +\infty .$$

4) On pose $X = (Km/\hbar^2)^{1/4}x$ et $\psi(X) = \phi(x)$. Montrer que ϕ satisfait $h\phi = \epsilon\phi$, avec $h = -\mathrm{d}^2/\mathrm{d}x^2 + x^2$ et préciser la relation entre h et H ainsi que ϵ et E.

5) On pose $p = -i\mathrm{d}/\mathrm{d}x$, $a = (x + ip)/\sqrt{2}$ et $a^\dagger = (x - ip)/\sqrt{2}$, ainsi que $N = a^\dagger a$. Donner les relations de commutation entre ces opérateurs. Montrer que $h = 2N + 1 = 2a^\dagger a - 1$.

6) On note n une valeur propre de N et $|n\rangle$ un vecteur propre associé, supposé normalisé. Montrer que n est forcément réel et non négatif.

7) Montrer que $a^\dagger|n\rangle$ est vecteur propre de N avec la valeur propre $n + 1$. Quelle est sa norme ?

8) Montrer que $a|n\rangle$ est soit nul, soit vecteur propre de N avec la valeur propre $n - 1$. Quelle est sa norme ?

9) Montrer que le spectre de N est formé des entiers positifs ou nuls, $n = 0, 1, 2, \ldots$. En déduire le spectre de H.

10) On cherche une solution *paire* de $-\phi''(x) + x^2\phi(x) = \epsilon x$ comme

$$\phi(x) = f(x) \exp(-x^2/2) .$$

Écrire l'équation différentielle satisfaite par $f(x)$. Si on cherche une solution comme série entière $f(x) = a_0 + a_1x^2 + \cdots + a_nx^{2n} + \cdots$, quelle est la relation de récurrence entre les a_n ?

11) Montrer qu'en général $a_{n+1}/a_n \simeq 1/n$ quand n est grand, et que $f(x) \sim \exp(x^2)$ quand $x \to \infty$.

12) Retrouver ainsi les énergies des états pairs.

13) Procéder de même pour les états impairs.

14) Les polynômes de Hermite $H_n(x)$ satisfont

$$H_n(x) = 2^n x^n + \cdots \;, \qquad H_n'' - 2xH_n + 2nH_n = 0$$
$$\int_{-\infty}^{+\infty} H_n H_m \exp(-x^2)\,\mathrm{d}x = \delta_{nm}\sqrt{\pi}2^n\, n! \;.$$

Exprimer les fonctions propres de h en termes des H_n.

Exercice 3

Dans la molécule d'ammoniac NH_3, l'azote peut osciller par effet tunnel d'un coté à l'autre du plan des atomes d'hydrogène. Classiquement, le potentiel est trop répulsif au milieu des deux points d'équilibre et la transition est interdite.

Soit x la distance algébrique de N au plan H_3, et μ la masse réduite N–H_3. Le potentiel (= énergie potentielle) est décrit très schématiquement comme

$$V(x) = \begin{cases} +\infty & \text{si} \quad x > b \;, \\ 0 & \text{si} \quad a < x < b \;, \\ V_0 & \text{si} \quad 0 \le x < a \;, \end{cases}$$

et symétriquement pour $x < 0$, où $V_0 > 0$ est la hauteur de la barrière, $(a+b)/2 > 0$ l'abscisse du point d'équilibre classique, $0 < b - a$ la largeur du puits, et $2a$ la largeur de la barrière.

1) Représenter ce potentiel.

2) Écrire la forme de la fonction d'onde d'énergie $E = \hbar^2 k^2/(2\mu)$ dans chacune des régions. On posera $K = \sqrt{2\mu(V_0 - E)}/\hbar$.

3) Écrire les conditions de raccordement.

On se concentre désormais sur les deux premiers niveaux. Le premier est symétrique, d'énergie E_s et de fonction d'onde $\psi_s(x)$, le second d'énergie E_a et de fonction d'onde impaire $\psi_a(x)$ antisymétrique.

4) Montrer qu'à la limite où $V_0 \to \infty$, ces deux états sont dégénérés. Donner leur énegie commune et leurs fonctions d'onde.

5) On suppose que V_0 est grand, mais fini, de sorte que $k \ll K$ et $Ka \gg 1$. On pose $K_0 = \sqrt{2\mu V_0}/\hbar$. On utilisera les approximations bien connues $\tanh X \simeq 1 - 2\exp X$ pour X grand et $tan(\pi + \epsilon) \simeq \epsilon$ pour ϵ petit. Montrer qu'en première approximation

$$E_m = \frac{E_a + E_a}{2} = \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\pi^2}{(b-a)^2}\left[1 - \frac{2}{(b-a)K_0}\right] \;.$$
$$A = \frac{E_a - E_s}{2} = \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\pi^2}{(b-a)^2}\frac{4\exp(-2K_0 a)}{(b-a)K_0} \;.$$

6) Dans quel problème similaire trouverait-on un facteur $\exp(-2K_0 a)$ impliquant la hauteur et la largeur de la barrière ?

7) On suppose que $\psi_a(x) < 0$ pour $x < 0$. Décrire qualitativement l'allure des états $\psi_g = (\psi - s - \psi_a)/\sqrt{2}$ et $\psi_d = (\psi_s + \psi_a)/\sqrt{2}$.

8) Décrire l'évolution en temps d'un état $\phi(t)$ qui à $t = 0$ serait $\phi(0) = \psi_d$. Identifier la pulsation des oscillations et la calculer en fonction des caractéristiques du problème.

9) Vérifier que $\psi(x) = (1 + \sqrt{2}x^2)\exp(-x^4/4)$ est solution de $-\psi''(x) + (x^6 - 7x^2)\psi(x) = \epsilon\psi(x)$ avec $\epsilon = -2\sqrt{2}$. Représenter la fonction d'onde et le potentiel. Est-ce l'état fondamental ?

Exercice 4

1) Un système à deux niveaux $|1\rangle$ et $|2\rangle$, d'énergies respectives $E_1 < E_2$ est modifié par une contribution non diagonale constante (et réelle) si bien que l'hamiltonien devient

$$H = \begin{pmatrix} E_1 & b \\ b & E_2 \end{pmatrix}$$

Trouver les nouveaux états propres et leur énergie. Montrer sans calcul que l'écart entre les énergies est amplifié. Généraliser ce résultat.

2) Au temps $t = 0$, le système est dans l'état $|\psi(0)\rangle = |1\rangle$. Calculer la probabilité de le trouver dans l'état $|2\rangle$ au temps t.

3) On modélise l'excitation par laser par un terme non diagonal oscillant, soit

$$H = \begin{pmatrix} a & b\exp(+i\omega t) \\ b\exp(-i\omega t) & c \end{pmatrix}$$

On pose $|\psi(t)\rangle = x(t)|1\rangle + y(t)|2\rangle$. Écrire le système différentiel satisfait par $x(t)$ et $y(t)$. Le résoudre en utilisant le changement de fonction $X(t) = x(t)\exp(-i\omega t/2)$ et $Y(t) = y(t)\exp(+i\omega t/2)$. Au temps $t = 0$, le système est dans l'état $|\psi(0)\rangle = |1\rangle$. Calculer la probabilité de le trouver dans l'état $|2\rangle$ au temps t.

Master de Physique
Travaux dirigés de Mécanique Quantique. TD -1-

Ex. 1 : Modèle en couche du noyau atomique

L'étude de la structure des noyaux atomiques conduit à un modèle dans lequel les nucléons se meuvent indépendamment les uns des autres dans un potentiel attractif qui les confine à l'intérieur du noyau. Lorsqu'on cherche les premiers niveaux d'énergie du noyau, ce potentiel peut être décrit en bonne approximation par un potentiel harmonique à trois dimensions. L'hamiltonien d'un nucléon de masse M dans le noyau est alors donné par :

$$H = \frac{\vec{P}^2}{2M} + \frac{1}{2} M\omega^2 \vec{R}^2$$

où $\vec{P}$ et $\vec{R}$ sont respectivement les opérateurs position et quantité de mouvement dans l'espace à trois dimensions. La théorie générale sur les potentiels centraux a permis de montrer à partir du fait que le hamiltonien commute avec les opérateurs de moment cinétique $\vec{L}$ et L^2, que l'étude de la partie radiale $\phi(r)$ de la fonction d'onde peut être séparée de celle de la partie angulaire $Y_l{}^m(\theta, \Phi)$. Le changement de fonction $U(r) = r\phi(r)$ permet alors d'écrire l'équation vérifiée par la partie radiale sous une forme équivalente à l'équation de Schrödinger d'une particule mobile dans un espace à une dimension :

$$\frac{\hbar^2}{2M}\left[-\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{l(l+1)}{r^2}\right] U(r) + \frac{M\omega^2 r^2}{2} U(r) = EU(r) \ ,$$

mais avec les conditions limites $U(0) = 0$ et $\lim_{r\to+\infty} U(r) = 0$ (il faut en fait que $\int^{\infty} U^2(r)\mathrm{d}r$ converge)

1) On définit un changement de variables : $\vec{r} = a\vec{\rho}$, où a est un constante dimensionnée et $\vec{\rho}$ une variable. Montrer qu'un choix approprié de a permet d'écrire l'équation radiale pour $u(\rho) = a^{1/2}U(r)$

$$-u''(\rho) + \frac{l(l+1)}{\rho^2} u(\rho) + \rho^2 u(\rho) = \epsilon u(\rho) \ ,$$

et préciser la valeur de a et le lien entre E et ϵ.

2) On effectue un changement de fonction inconnue en posant : $u(\rho) = f(\rho)\exp(-\rho^2/2)$. Déterminer l'équation vérifiée par $f(\rho)$.

3) On cherche la solution de cette équation sous la forme d'une série entière : $f(\rho) = \rho^s \sum_{p=0}^{\infty} C_p \rho^p$ où s est choisi pour que l'on ait $C_0 \neq 0$.

3.1) En considérant les termes de plus basses puissances, démontrer les relations : $s = l + 1$ et $C_1 = 0$.

3.2) En supposant la série infinie, établir une relation de récurrence sur les coefficients C_p. Montrer alors que le comportement de cette série pour $\rho \to +\infty$ est le même que celui de la fonction $\rho^2 \exp(\rho^2)$. Que pensez-vous de cette solution ?

3.3) Déduire du résultat précédent les états d'énergie du nucléon.

4) Donner la dégénérescence des états de plus basse énergie. Retrouver le résultat obtenu pour les premières valeurs propres et leur dégénérescence, en résolvant le problème en coordonnées cartésiennes.

5) Quand on étudie les énergies nécessaires pour extraire un nucléon du noyau, on constate des discontinuités pour des valeurs particulières du nombre de nucléons (2, 8, 20, 28, 50,...) appelées "nombres magiques". Le calcul effectué dans l'approximation harmonique permet d'interpréter les trois premiers "nombres magiques". Voyez-vous pourquoi ?

Ex. 2. Lois d'échelle

Une particule de masse μ subit le potentiel central $V(r) = \epsilon(\alpha) g r^\alpha$, où ϵ est la fonction signe et $g > 0$ (ce qui assure que l'interaction est attractive). *A priori* l'énergie d'un niveau de nombres quantiques $\{\ell, m, n\}$ dépend des constantes g, μ et $\hbar$ qui interviennent dans l'équation de Schrödinger.

1)* Montrer que pour chaque niveau $\{\ell, m, n\}$, l'énergie est de la forme

$$E = (m/\hbar^2)^\beta \, g^\gamma \, \eta \ ,$$

où η est l'énergie pour $g = m = \hbar = 1$, en précisant la valeur des exposants β et γ en fonction de α. Retrouver les résultats familiers de l'oscillateur harmonique et du potentiel coulombien comme cas particuliers.

2)** Montrer que pour un potentiel $g \ln r$, un changement de la masse μ décale l'ensemble du spectre d'une constante.

3)*** Montrer que les fonctions d'onde radiales réduites pour les états S ($\ell = 0$) d'un potentiel linéaire $V(r) = gr$ peuvent se déduire de la fonction d'Airy $\mathrm{Ai}(x)$, solution rgulière à $x \to +\infty$ de l'équation d'Airy

$$-y''(x) + x\,y(x) = 0 \ .$$

Relier les énergies propres de $V(r) = gr$ aux zéros de $\mathrm{Ai}(x)$ (situés sur le demi-axe $x < 0$).

Master de Physique
Travaux dirigés de Mécanique Quantique TD-2-

Moment cinétique

Exercice 1

Soit $\boldsymbol{J} = \boldsymbol{L} + \boldsymbol{S}$ l'opérateur de moment cinétique d'un système physique. Les vecteurs propres de J^2, J_z sont représentés par $|j, m\rangle$. On définit les opérateurs :

$$J_{\pm} = J_x \pm iJ_y$$

1) Calculer la norme des vecteurs $J^{\pm}|j, m\rangle$.
2) Donner l'expression de ces vecteurs dans la base $|j, m\rangle$.
3) Dans le cas où $j = 1$, donner la représentation de J_x dans la base $|j, m\rangle$.
4) On suppose que le système se trouve dans l'état $|j = 1, m_z = 1\rangle$. Quelle est la probabilité de le trouver dans l'état $|j = 1, m_x = 1\rangle$.
5) Quelles sont les valeurs de j possibles lorsque $l = 1$ et $s = 1/2$.
6) Exprimer, dans ce dernier cas, les vecteurs de la base couplée $|j, m\rangle$ à l'aide des vecteurs de la base découplée $|l, m_l, s, s_z\rangle$.
7) Montrer que l'opérateur $\boldsymbol{L}.\boldsymbol{S}$ est un opérateur diagonal dans la base $|j, m\rangle$.

Exercice 2

Un système a pour fonction d'onde :

$$\Psi(x, y, z) = N\,(x + y + z)\,\exp(-r^2/a^2)$$

où a, réel, est donné et N est une constante de normalisation.
1) On mesure sur ce système les observables L_z et L^2. Quelle probabilité a-t-on de trouver 0 pour la première et $2\hbar^2$ pour la deuxième ? On rappelle que : $Y_1^0(\theta, \phi) = (3/(4\pi))^{1/2}\cos\theta$.
2) En utilisant également le fait que :

$$Y_1^{\pm}(\theta, \phi) = \pm\left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/2}(-\sin\theta)\,\exp(\pm i\phi),$$

peut-on prévoir directement les probabilités de tous les résultats possibles des mesures de L_z et L^2 sur l'état de fonction d'onde de $\Psi(x, y, z)$?

Exercice 3

On considère les matrices de Pauli

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

1) Calculer la trace et le déterminant de chacune. En déduire leurs valeurs propres.
2) On pose $\sigma_1 = \sigma_x$, etc. Calculer $\sigma_j\,\sigma_k$. Vériifer que $\sigma_j\,\sigma_k = \delta_{jk} + i\epsilon_{ijk}\sigma_k$ en précisant la signification du tenseur ϵ.
3) En déduire que pour des vecteurs constants $\boldsymbol{A}$ et $\boldsymbol{B}$, on a l'identité

$$(\boldsymbol{\sigma}.\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}.\boldsymbol{B}) = \boldsymbol{A}.\boldsymbol{B} + i\,\sigma.(\boldsymbol{A} \wedge \boldsymbol{B})\ .$$

4) Calculer σ_k^n pour tout entier positif n. En déduire une expression simplifiée de $\exp(a\sigma_k)$ et de $\exp(ia\sigma_k)$, si $a \in \mathbb{R}$. 5) Soit $R = \exp(i\pi\sigma_y/4)$. Vérifier que $R\,\sigma_x\,R^{\dagger} = \sigma_z$ et donner l'interprétation physique.

Master de Physique M1, Travaux dirigés de Mécanique Quantique, TD -3-

Moment cinétique et rotation

Exercice 1

1) Quelles sont les valeurs possibles du spin total S dans l'addition de deux spins 1/2, soit $\vec{S} = \vec{s}_1 + \vec{s}_2$?
2) On fixe la phase de sorte que

$$|(1/2, 1/2)1, 1\rangle = |1/2, 1/2\rangle\, |1/2, 1/2\rangle$$

En déduire la décomposition des états $S = 1$ avec $S_z = 0$ et $S_z = -1$.
3) Par orthogonalité, quelle doit être, à une phase près, la décomposition de

$$|(1/2, 1/2)0, 0\rangle \ ?$$

Comment la phase est-elle fixée par convention ?
4) Récapituler les coefficients de Clebsh-Gordan pour le couplage de deux spins 1/2.
5) Indiquer les symétries ($m \leftrightarrow -m$, $s_1 \leftrightarrow s_2$).
6) Vérifier que la matrice des coefficients est orthogonale. En déduire son inverse.

Exercice 2

Reprendre l'exercice précédent pour l'addition d'un spin 1 et d'un spin 1/2.

Exercice 3

Reprendre l'exercice précédent pour l'addition de deux spins 1.

Exercice 4

On considère l'addition de trois spins 1/2, soit $\vec{S} = \vec{s}_1 + \vec{s}_2 + \vec{s}_3$.
1) Quelle est la multiplicité de l'espace de ces trois spins ?
2) Quelles sont les valeurs possibles de S ?
3) Constuire les états de spin total déterminé, notés

$$|(s_{12}, 1/2)S, S_z\rangle$$

vérifier la multiplicité et indiquer les propriétés de transformation de ces états vis-à-vis des permutations.
4) Montrer que les états $|(0, 1/2)1/2, 1/2\rangle$ et $|(1, 1/2)1/2, 1/2\rangle$ sont orthogonaux.

Exercice 4

1) Vérifier que les trois matrices $[3\times3]$ définies par : $[S_i]_{jk} = -i\hbar\epsilon_{ijk}$ satisfont les relations de commutation du moment angulaire.
2) Trouver 3 matrices $[2 \times 2]$ qui satisfont ces relations.
3) Calculer $\vec{S}^2$ dans les deux cas. Conclusion ?

Exercice 5

1) Soit un vecteur $\vec{r}$ auquel on applique une rotation infinitésimale d'angle ϵ autour de $\hat{n}$. Exprimer le résultat de cette rotation à l'aide de $\vec{r}, \hat{n}$ et ϵ.
2) Soit $R(\epsilon) = 1 - (i\hbar)\epsilon\, \hat{n}.\vec{J}_{op}$, l'opérateur représentant cette rotation dans l'espace de Hilbert d'une particule, avec $\vec{J}_{op}$ l'opérateur moment angulaire. Si la particule est dans état propre $|\vec{r}\rangle$ de la position $\vec{r}_{op}$, quel doit être la valeur propre de l'état $R(\epsilon)|\vec{r}\rangle$ qui, par définition, représente l'état de la particule après la rotation, En déduire que l'on doit avoir :

$$R^{-1}(\epsilon)\vec{r}_{op}R(\epsilon) = \vec{r}_{op} + \epsilon\hat{n} \times \vec{r}_{op} + O(\epsilon^2)$$

Faire le même raisonnement pour l'impulsion $\vec{p}_{op}$.
3) En déduire les relations de commutation :

$$[J^i_{op}, r^j_{op}] = i\hbar\epsilon_{ijk}\, r^k_{op}\ ,$$
$$[J^i_{op}, p^j_{op}] = i\hbar\epsilon_{ijk}\, p^k_{op}\ ,$$

4) Montrer alors que l'on a :

$$\vec{J}_{op} = \vec{r}_{op} \times \vec{p}_{op} + \vec{S}_{op}$$

où $\vec{S}_{op}$ est un opérateur dont il faut préciser la nature.

Exercice 6

Soit un opérateur vectoriel $\vec{V}$.
1) Rappeler comment se transforment les composantes cartésiennes de cet opérateur lors d'une rotation R. Trouver les relations de commutation de ces composantes avec l'opérateur moment angulaire en utilisant une rotation infinitésimale ϵ.
2) À l'aide des composantes standard de cet opérateur vectoriel définies comme suit :

$$V^{1,\pm1} = \mp\frac{1}{\sqrt{2}}\,(V_x \pm iV_y)\ , \qquad V^{1,0} = V_z$$

Montrer que $\vec{V}$ se transforme comme un OTI de rang 1.

Exercice 7

L'opérateur vectoriel représentant le moment magnétique d'un système est défini par la relation suivante :

$$\vec{\mu} = \frac{\mu_B}{\hbar}(\vec{L} + 2\vec{S})$$

où $\vec{L}$ et $\vec{S}$ sont le moment angulaire total et le spin total du système et μ_B est le magnéton de Bohr : $\mu_B = e/(2m_e)$ avec e (< 0) et m la charge et la masse de l'électron.

1) Montrer que le moment magnétique peut être relié au moment cinétique total du système $\vec{J}$ par la relation

$$\vec{\mu} = g\frac{\mu_B}{\hbar}\vec{J}$$

où g est un facteur appelé le facteur de Landé.

2) Déterminer l'expression de g à l'aide de J, L et S.

Master de Physique
Travaux dirigés de Mécanique Quantique
TD -4-

Matrices de rotation

Exercice 1

La rotation R d'un système peut être paramétrée à l'aide des angles d'Euler α, β et γ. Dans ce cas là, l'opérateur rotation s'écrit :

$$D(R) = D(\alpha, \beta, \gamma) = \exp(-i\alpha J_z/\hbar)\exp(-i\beta J_y/\hbar)\exp(-i\gamma J_z/\hbar) \;,$$

où $\vec{J}$ est le moment angulaire total du système. On définit les matrices de rotation :

$$D^j_{mm'}(\alpha, \beta, \gamma) = \langle jm|D(\alpha, \beta, \gamma)|jm'\rangle$$

et les matrices de rotation réduites :

$$d^j_{mm'}(\beta) = D^j_{mm'}(0, \beta, 0)$$

1) Soit a l'ensemble des valeurs propres des opérateurs qui commutent avec $\vec{J}$. Montrer que l'on a :

$$\langle ajm|D(\alpha, \beta, \gamma)|a'j'm'\rangle = \delta(a - a')\delta(j - j')D^j_{mm'}(\alpha, \beta, \gamma)$$

où les états $\{|ajm\rangle\}$ sont supposés être normalisés. En déduire :

$$D(R)|ajm\rangle = \sum_{m'} D^j_{m'm}(\alpha, \beta, \gamma)|ajm'\rangle$$

puis :

$$Y_{lm}(R^{-1}(\hat{r})) = \sum_{m'} D^l_{m'm}(\alpha, \beta, \gamma)Y_{lm'}(\hat{r})$$

2) Montrer que les matrices de rotation sont unitaires.
3) Montrer par récurrence que :

$$\langle jm|(J_y)^n|jm'\rangle = \langle j - m'|(J_y)^n|j - m\rangle$$

puis, en utilisant une rotation de π autour de l'axe z :

$$d^j_{mm'}(-\beta) = (-1)^{m-m'}d^j_{mm'}(\beta)$$

En déduire la relation :

$$D^j_{mm'}(\alpha, \beta, \gamma)^* = (-1)^{m-m'}D^j_{-m-m'}(\alpha, \beta, \gamma)$$

4) En utilisant le fait qu'un vecteur unitaire d'angle (θ, ϕ) s'obtient par rotation du vecteur unitaire porté par l'axe Oz, montrer que, pour ψ arbitraire :

$$Y^*_{lm}(\theta, \phi) = D^l_{m0}(\phi, \theta, \psi)\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}$$

5) En appliquant la même rotation à 2 systèmes indépendants, montrer que :

$$\begin{aligned} D^{j_1}_{m_1m'_1}(R)D^{j_2}_{m_2m'_2}(R) &= \sum_{jmm'} \langle j_1m_1, j_2m_2|jm\rangle\langle j_1m'_1, j_2m'_2|jm'\rangle D^j_{mm'}(R) \\ &= \sum_{j_3m_3m'_3} (2j_3+1) \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m'_1 & m'_2 & m'_3 \end{pmatrix} D^{*j}_{m_3m'_3}(R) \end{aligned}$$

6) En déduire la relation :

$$Y_{l_1m_1}(\theta,\phi)Y_{l_2m_2}(\theta,\phi) = \sum_{lm}\sqrt{\frac{(2l_1+1)(2l_2+1)(2l+1)}{4\pi}}\times$$
$$\left(\begin{array}{ccc} l_1 & l_2 & l \\ m_1 & m_2 & m \end{array}\right)\left(\begin{array}{ccc} l_1 & l_2 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{array}\right)Y^*_{lm}(\theta,\phi)$$

Master de Physique
Travaux dirigés de Mécanique Quantique
TD -5-

Système à deux nucléons

Exercice 1

Nous proposons d'étudier les états stationnaires d'un système à deux nucléons. l'interaction entre deux nucléons peut être donnée par le potentiel suivant :

$$V = V_1(r) + V_2(r)\,\vec{S}_1.\vec{S}_2 + V_3(r)\,\vec{L}.\vec{S} + V_4(r)\,S_{12}$$

où $r = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$ est la distance entre les deux nucléons et $\vec{S}_1, \vec{S}_2$ leurs spins. $\vec{L}, \vec{S}$ sont respectivement le moment angulaire et le spin total du système. S_{12} est un tenseur d'ordre 2 donné par l'expression :

$$S_{12} = 4\left(\frac{3\vec{S}_1.\vec{r}\vec{S}_2.\vec{r}}{r^2} - \vec{S}_1.\vec{S}_2\right)$$

1) Donner l'expression du hamiltonien de ce système.
2) Montrer que l'étude des états stationnaires de ce système peut se limiter à l'étude du hamiltonien relatif H_r.
3) En l'absence du terme tensoriel, montrer que le hamiltonien relatif réduit H_r^0 commute avec S^2, L^2, J^2 et J_z où $\vec{J}$ est le moment cinétique total du système.
4) Donner, dans ce cas, l'expression des états propres en tenant compte de la question précédente.
5) Le hamiltonien H_r^0 commute-t-il avec l'opérateur parité P ? Quelles sont les conséquences sur la parité des états stationnaires du système ? Peut-on exprimer la parité de ces états en fonction des nombres quantiques associés ?

Nous allons à présent étudier les conséquences du terme tensoriel.
6) Montrer que S_{12} peut s'écrire sous la forme suivante :

$$S_{12} = 2(3(\vec{S}.\hat{r})^2 - S^2)$$

7) S_{12} commute-t-il avec L^2 et avec P ? Quelles sont les conséquences sur la nature des états stationnaires ?
8) Le hamiltonien H_r est-il invriant en échangeant les deux spins $\vec{S}_1$ et $\vec{S}_2$? Quelles sont les conséquences sur l'état de spin du système ?
9) Le deuton est un système lié de deux nucléons avec un moment cinétique $J = 1$ et de parité positive. Montrer que l'état fondemental du deuton lorsque la projection de moment cinétique dans la direction Oz est égale à $\hbar$, peut s'écrire sous la forme : *

$$\psi = f(r)Y_{0,0}\,\chi_{1,1} + g(r)\big(Y_{2,0}\,\chi_{1,1} + \lambda Y_{2,1}\,\chi_{1,0} + \mu Y_{2,2}\,\chi_{1,-1}\big)$$

où f et g deux fonctions réelles.
10) Déterminer les valeurs de λ et de μ.
11) Donner la norme de ψ.
12) Dans la suite on remplace $f(r)$ par $\psi_S(r)\cos\omega$ et $g(r)$ par $\psi_D(r)\sin\omega/\sqrt{10}$ avec :

$$\int_0^\infty r^2\psi_S^2\,\mathrm{d}r = \int_0^\infty r^2\psi_D^2\,\mathrm{d}r = 1$$

Montrer que :

$$\psi = \frac{\chi_{1,1}}{\sqrt{4\pi}}\big\{\psi_S(r)\cos\omega + \frac{1}{2\sqrt{2}\hbar^2}\psi_D(r)\sin\omega S_{12}\big\}$$

13) Écrire l'équation de Schrödinger satisfaite par ψ. En déduire que ψ_S et ψ_D satisfont deux équations différentielles couplées que l'on demande de préciser.
14) * Montrer que l'énergie du deuton est *inférieure* à celle obtenue dans l'approximation où le couplage S-D est négligé.
15) ** Quelle serait la simplification de la dynamique dans la limite où $V_4(r)$ est très grand ?

Master de Physique
Travaux dirigés de Mécanique Quantique

TD -6-

Méthode variationnelle

Exercice 1

On assimile la molécule HCl à un oscillateur harmonique linéaire. On ne s'occupera pas des vibrations des noyaux de la molécule. L'hamiltonien qui représente le mouvement relatif des noyaux peut s'écrire :

$$H_0 = \frac{1}{2\mu} P_x^2 + \frac{\mu\omega^2}{2} X^2$$

où μ est la masse réduite des deux atomes de la molécule et ω la fréquence classique.
1) Recherche de l'état fondamental et du premier état excité :
a) On prend comme fonction d'essai de l'état fondamental :

$$\psi_0^\alpha(x) = \exp(-\alpha x^2) \qquad\qquad (\alpha > 0)$$

En prenant α comme paramètre d'essai, déterminer l'énergie de l'état fondamental et la fonction d'onde correspondante.
b) On choisit maintenant la fonction $\psi_1^\alpha(x) = x\exp(-\alpha x^2)$. Cette fonction ψ_1 étant orthogonale à la fonction d'onde de l'état fondamental, on peut obtenir une approximation du premier état excité. Déterminer son énergie et la fonction d'onde correspondante.
2) On place la molécule dans un champ électrique $\vec{E}$, uniforme et constant. La molécule s'aligne avec le champ. L'hamiltonien en présence du champ devient :

$$H = H_0 + qEx$$

Soient $u_0(x), u_1(x)$ les fonctions d'onde exactes respectivement de l'état fondamental et du premier état excité en champ nul. On choisit la fonction d'essai :

$$\psi^{a_0,a_1}(x) = a_0 u_0(x) + a_1 u_1(x)$$

Quelle énergie trouve-t-on pour l'état fondamental de molécule en présence du champ ?
Quel est le sens de l'approximation ?
Quelle est la valeur approchée du premier niveau excité ?
Comparer avec la valeur exacte de ces deux niveaux.

Exercice 2

1) En négligeant l'interaction répulsive entre les deux électrons dans l'atome d'hélium, déterminer l'énergie de l'état fondamental.

2) En utilisant la fonction d'essai

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{z^3}{\pi a_0^3} \exp\left[-z\frac{r_1 + r_2}{a_0}\right] \qquad\qquad a_0 = \frac{\hbar}{mc\alpha}$$

avec z comme paramètre d'essai, déterminer l'énergie de l'état fondamental en tenant compte de l'interaction entre les deux électrons.

3) Quelle est la contribution relative de ce terme à l'énergie de l'atome d'hélium ?

4) Quelle est l'interprétation physique de la valeur de z qui assure la meilleure énergie ?

5) Montrer que l'approximation sera meilleure si l'Hélium est remplacé par un ion à deux électrons de charge nucléaire $Z > 2$.

6) On fait varier Z continûment. Montrer que l'approximation précédente est limitée à $Z > Z_0$, avec Z_0 (que l'on calculera) supérieur à 1, et donc ne peut expliquer la stabilité de l'ion H^-.

7) ** Montrer que la fonction d'onde (non normalisée)

$$\phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \exp(-\alpha r_1/a_0 - \beta r_2/a_0) + \exp(-\beta r_1/a_0 - \alpha r_2/a_0)$$

permet d'établir la stabilité de l'ion H^-.

Master de Physique
Travaux dirigés de Mécanique Quantique TD -7-

Méthodes de perturbation

Exercice 1

Calculer au premier ordre en perturbation la correction à l'énergie de l'état fondamental d'un atome hydrogénoïde due à la taille finie du noyau. On suppose que la charge du noyau est répartie uniformément dans un volume sphérique de rayon R, où R est beaucoup plus petit que le rayon de Bohr.
Quel est le sens de l'approximation par rapport à ce que serait un calcul exact ?
Cette correction est-elle plus grande ou plus petite pour les atomes muoniques, où un électron est remplacé par un muon environ 200 fois plus lourd.

Exercice 2

Un rotateur rigide sphérique ayant un moment d'inertie I et un moment dipolaire électrique $\vec{d} = d\hat{r}$ est placé dans un champ électrique uniforme $\vec{E}$. En considérant le champ électrique comme une perturbation, calculer la première correction non nulle aux niveaux d'énergie du rotateur.
On donne :

$$\int d\hat{r} Y_{l_1 m_1}(\hat{r}) Y_{l_2 m_2}(\hat{r}) Y_{l_3 m_3}(\hat{r}) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} [(2l_1+1)(2l_2+1)(2l_2+1)]^{1/2} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

avec

$$\begin{pmatrix} l & 1 & l+1 \\ m & 0 & -m \end{pmatrix} = (-1)^{l+m+1} \left[\frac{(l+m+1)(l-m+1)}{(2l+1)(2l+2)(2l+3)} \right]^{1/2}$$

Exercice 3

Calculer au premier ordre en perturbation le déplacement des niveaux d'énergie d'un atome hydrogénoïde produit par l'augmentation d'une unité de la charge nucléaire (émission d'un β^-). On rappelle que la valeur moyenne de $1/r$ sur un état n de l'atome d'hydrogène est $1/(n^2 a_0)$ où a_0 est le rayon de Bohr.

Exercice 4 (*)

Un système de masse réduite μ interagit au moyen du potentiel

$$V(r) = -a/r + br^2 \ ,$$

où a et b sont deux constantes positives. Il pourrait s'agir d'un modèle pour les mésons composés d'un quark et d'un antiquark. On se demande lequel des deux termes pourrait être traité comme une perturbation par rapport à l'autre, pour évaluer l'énergie de l'état fondamental.
1) Si vous avez fait les deux calculs, lequel choisissez-vous ?
2) Quelle approximation sera la meilleure selon que μ est très grand ou très petit ?
3) Faire le calcul explicitement.

Exercice 5 (**)

Soit $H_0 + \lambda V$ un hamiltonien perturbé, dont on suit l'évolution d'un état propre supposé non dégénéré,

$$E = E_0 + \lambda E_1 + \lambda^2 E_2 + \cdots \quad \psi = \psi_0 + \lambda \psi_1 + \cdots$$

On suppose que $\langle\psi_0|\psi_n\rangle = \delta_{n0}$.
1) Montrer que $E_1 = \langle\psi_0|V|\psi_0\rangle$.
2) * Montrer que $E_2 = \langle\psi_0|V|\psi_1\rangle$.
3) **** Montrer que $E_3 = \langle\psi_1|V - E_1|\psi_1\rangle$.
4) Un oscillateur harmonique est perturbé par un terme impair, soit après simplification (voir TD -1-) $H = -\mathrm{d}^2/\mathrm{d}x^2 + x^2 + \lambda V(x)$ en représentation de configuration, $E_0 = 1$ et $\psi_0(x) = \pi^{-1/4}\exp(-x^2/2)$. Montrer que $\psi_1(x)$ est solution d'une équation différentielle inhomogène (équation de Sternheimer ou de Dalgarno-Lewis).
5) Résoudre cette équation pour $V(x) = x$. En déduire E_2.
6) Retrouver E_2 par sommation sur les états non perturbés.
7) **Résoudre l'équation de Sternheimer pour $V(x) = \sin(\alpha x)$, et en déduire la correction d'énergie au deuxième ordre.
8) ***** Montrer que pour V quelconque

$$E_2 = -\int_{-\infty}^{+\infty} v(x)\psi_0(x)^2\,\mathrm{d}x\left[\int_0^x \frac{\mathrm{d}x'}{\psi_0(x')^2}\left(\int_{x'}^{+\infty} v(x'')\psi_0(x'')^2\,\mathrm{d}x''\right)\right] .$$

9) Discuter des mérites respectifs de la sommation sur les états non perturbés et de l'équation de Sternheimer .