

Table des matières

1	COURS : L'OSCILLATEUR HARMONIQUE ISOTROPE	3
1.1	Oscillateur à une dimension	3
1.2	Oscillateur à une dimension en notation de Dirac	4
1.2.1	Spectre de N	5
1.3	Oscillateur harmonique à p dimensions	7
1.4	Oscillateur harmonique à 3 dimensions	8
1.5	Mouvement de particules dans un champ de forces centrales	10
1.5.1	Séparation des variables	10
1.5.1.1	Particule libre	11
1.5.1.2	Cas général	11
1.5.2	Developpement de l'onde plane	12
1.5.3	Mouvement d'une particule dans un puits carré	12
1.5.3.1	Puits infiniment profond	12
1.5.3.2	Puits carré sphérique	13
1.5.4	Oscillateur harmonique sphérique symétrique	15
2	TRAVAUX DIRIGES : OSCILLATEUR HARMONIQUE	17
2.1	Oscillateur harmonique	17
2.1.1	Problème I : Interaction electron - champ électromagnétique	17
2.1.2	Oscillateur harmonique - Interaction dipolaire électrique	19
2.1.3	Oscillateurs couplés	20
2.1.3.1	PREMIÈRE PARTIE	20
2.1.4	Modèle nucléaire collectif -Moments quadrupolaire et d'inertie-	24
2.1.5	Oscillateur déformé	25
2.2	Oscillateur harmonique à une dimension	26
2.2.1	Notions de base :	26
2.2.2	Oscillateurs harmoniques couplés	26
2.3	Théorie des perturbations	27
2.3.1	Perturbation anharmonique	28

3	DEVOIR DE MÉCANIQUE QUANTIQUE -P4-	31
3.1	I - Oscillateur harmonique - notions de base	31
3.2	A - Formulation quantique de l'oscillateur harmonique	31
3.3	Vibrations d'une chaîne linéaire d'atomes	32
3.3.1	Modes propres de vibration de deux oscillateurs harmoniques à une dimension couplés	33
3.4	Vibrations élastiques d'une chaîne linéaire d'atomes	34
4	Solution du devoir	39
4.1	Vibrations d'une chaîne linéaire d'atomes	39
4.1.1	Modes propres de vibration de deux oscillateurs harmoniques à une dimension	39
4.2	Deuxième partie	40

Chapitre 1

COURS : L'OSCILLATEUR HARMONIQUE ISOTROPE

1.1 Oscillateur à une dimension

On considère un oscillateur harmonique, c'est à dire une particule de masse m soumise à une force de rappel $F = -kx$, c'est à dire un potentiel en x^2 . L'hamiltonien d'un tel système s'écrira donc :

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m}(p^2 + m^2\omega^2q^2) \quad (1.1)$$

Afin de ne pas transporter inutilement des constantes, posons :

$$\mathcal{H} = H\hbar\omega \quad (1.2)$$

$$p = (m\hbar\omega)^2 P \quad (1.3)$$

$$q = \left(\frac{\hbar}{\omega m}\right)^{\frac{1}{2}} Q \quad (1.4)$$

$$H\hbar\omega = \frac{1}{2m}m\hbar\omega P^2 + \frac{1}{2m}\frac{m^2\omega^2\hbar}{m\omega}Q^2 \quad (1.5)$$

$$H = \frac{1}{2}(P^2 + Q^2) \quad (1.6)$$

Les opérateurs p et q satisfont aux règles de commutation

$$[p, q] = -i\hbar \quad (1.7)$$

Ce qui donne pour P et Q la relation de commutation

$$[Q, P] = i \quad (1.8)$$

Il faut noter ici qu'on peut en principe résoudre l'équation aux valeurs propres de l'hamiltonien H en passant dans une représentation particulière, la représentation Q par exemple.

Le principe de correspondance donne

$$p \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial q} \quad (1.9)$$

$$(m\hbar\omega)^{\frac{1}{2}} P \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial Q} \frac{\partial Q}{\partial q} \Rightarrow P \rightarrow \frac{-i\hbar}{(m\hbar\omega)^{\frac{1}{2}}} \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{\partial}{\partial Q} \quad (1.10)$$

$$P \rightarrow -i \frac{\partial}{\partial Q} \quad (1.11)$$

L'équation aux valeurs propres de $Hu = \epsilon u$ devient ainsi :

$$\frac{1}{2} \left[-\frac{d^2}{dQ^2} + Q^2 \right] u(Q) = \epsilon u(Q) \quad (1.12)$$

1.2 Oscillateur à une dimension en notation de Dirac

Introduisons les opérateurs de création et d'annihilation par les relations :

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} (Q + iP) \quad (1.13)$$

$$a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} (Q - iP) \quad (1.14)$$

ces opérateurs 4.13 et 4.14 sont hermitiques conjugués l'un de l'autre. A partir 4.8 on peut évaluer leur relation de commutation.

$$[a, a^+] = \frac{1}{2} [Q + iP, Q - iP] \quad (1.15)$$

$$= \frac{1}{2} [Q, Q] + \frac{1}{2} [Q, -iP] + \frac{1}{2} [iP, -iP] + \frac{1}{2} [iP, Q] \quad (1.16)$$

$$= 0 - \frac{i}{2} [Q, P] + \frac{i}{2} [P, Q] + 0 \quad (1.17)$$

$$= -\frac{i}{2} (i) + \frac{i}{2} (-i) = 1 \quad (1.18)$$

$$(1.19)$$

$$[a, a^+] = 1$$

A partir des expressions 4.13 et 4.14 on peut exprimer Q et P à partir de a et de a⁺ c'est

à dire H en fonction de ces opérateurs. Il viendra :

$$aa^+ = \frac{1}{2}(Q + iP)(Q - iP) \quad (1.20)$$

$$= \frac{1}{2}[Q^2 - iQP + iPQ + P^2] = \frac{1}{2}[Q^2 + P^2 + 1] \quad (1.21)$$

$$aa^+ = H + \frac{1}{2} \quad (1.22)$$

$$aa^+ - a^+a = 1 \Rightarrow a^+a = H - \frac{1}{2} \quad (1.23)$$

$$\text{ce qui donne} \quad (1.24)$$

$$H = \frac{1}{2}(aa^+ + a^+a) \quad (1.25)$$

$$\text{en posant} \quad N = a^+a \quad (1.26)$$

$$H = N + \frac{1}{2} \quad (1.27)$$

la recherche des valeurs propres et des fonctions propres de H est donc ainsi ramenée à celle de l'opérateur $N = a^+a$.

1.2.1 Spectre de N

A partir de la relation de commutation de a et a^+ et de la définition de N on obtient :

$$Na = a^+aa = a(a^+a - 1) \quad (1.28)$$

$$Na = a(N - 1) \rightarrow [N, a] = -a \quad (1.29)$$

$$Na^+ = a^+(N + 1) \rightarrow [N, a^+] = a^+ \quad (1.30)$$

Soit $|\nu\rangle$ un vecteur propre de N correspondant à la valeur propre ν avec $N|\nu\rangle = \nu|\nu\rangle$.

Le spectre des valeurs propres de N est formé par la suite des nombres entiers non négatifs.

La suite de vecteurs propres orthonormés :

$|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, |3\rangle, \dots, |n\rangle$ correspondant aux valeurs propres : $0, 1, 2, 3, \dots, n$

Ils se déduisent les uns des autres par la relation de récurrence :

$$a^+|n\rangle = (n+1)^{\frac{1}{2}}|n+1\rangle \quad (1.31)$$

$$a|n\rangle = n^{\frac{1}{2}}|n-1\rangle \quad (1.32)$$

$$a|0\rangle = 0 \quad (1.33)$$

En effet : $\langle n|n\rangle = 1$ et $a^+|n\rangle = C_n|n+1\rangle$

$$(a^+|n\rangle) = |C_n|^2 \langle n+1|n+1\rangle = |C_n|^2$$

$$\langle n | aa^+ | n \rangle = \langle n | N + 1 | n \rangle = (n + 1) \langle n | n \rangle = |C_n|^2$$

Donc $|C_n|^2 = n + 1$, on choisit la phase de telle sorte que $C_n = \sqrt{n + 1}$.

Le vecteur $|n \rangle$ pourra se déduire du vecteur $|0 \rangle$ par la relation :

$$|n \rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^+)^n |0 \rangle \quad (1.34)$$

Les vecteurs $|0 \rangle$ $|1 \rangle$ $|2 \rangle$ $|3 \rangle$... $|n \rangle$ forment le système de base de la représentation $\{N\}$ définie par :

$$N|n \rangle = n|n \rangle \quad (1.35)$$

$$\langle n' | n \rangle = \delta_{nn'} \quad (1.36)$$

et par la relation 4.31.

Les matrices représentant N , a et a^+ dans cette représentation sont :

$$N = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots & \dots \\ 0 & 1 & 0 & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 2 & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & n \end{pmatrix}, \quad a = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \sqrt{n-1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \end{pmatrix}$$

$$\text{et} \quad a^+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \sqrt{n} & 0 \end{pmatrix}$$

avec

$$\mathcal{H} = \hbar\omega \left(N + \frac{1}{2} \right)$$

$$\begin{cases} p &= i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (a^+ - a) \\ q &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a^+ + a) \end{cases}$$

\mathcal{H} est diagonal dans la représentation $\{N\}$ ses valeurs propres sont $\hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$

les fonctions propres de \mathcal{H} seront les fonctions $\psi(q)$ telles que :

$$\mathcal{H}\psi(q) = E\psi(q) \quad (1.37)$$

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dq^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 q^2 \right) \psi(q) = E\psi(q) \quad (1.38)$$

les énergies sont donc $E = \frac{1}{2}\hbar\omega$, $\frac{3}{2}\hbar\omega \dots (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$

$$\langle Q|n \rangle = u_n(Q) = \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{\frac{1}{2}} \langle q|n \rangle = \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{\frac{1}{2}} \psi_n(q) \quad (1.39)$$

or $a|0 \rangle = 0$ donne en représentation $\{Q\}$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(Q + iP)\langle Q|0 \rangle = 0 \quad (1.40)$$

$$(Q + iP)u_0(Q) = 0 \quad (1.41)$$

$$\left[Q + i\left(-i\frac{d}{dQ}\right)\right]u_0(Q) = 0 \quad (1.42)$$

$$Qu_0 + \frac{du_0}{dQ} = 0 \rightarrow Qu_0 = \frac{du_0}{dQ}$$

$$u_0 = Ae^{-\frac{Q^2}{2}} \quad (1.43)$$

Après normalisation on obtient :

$$u_0 = \pi^{-\frac{1}{4}}e^{-\frac{Q^2}{2}} \quad (1.44)$$

$$u_n(Q) = \langle Q|n \rangle \text{ or } |n \rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^+)^n|0 \rangle$$

$$\langle Q|n \rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left[\frac{1}{\sqrt{2}}(Q - iP)\right]^n \langle Q|0 \rangle$$

$$u_n(Q) = \frac{1}{\sqrt{n!2^n\pi^{\frac{1}{2}}}} \left(Q - \frac{d}{dQ}\right)^n e^{-\frac{Q^2}{2}}$$

or $(Q - \frac{d}{dQ}) = -e^{\frac{1}{2}Q^2} \frac{d}{dQ} e^{-\frac{1}{2}Q^2}$ ce qui nous donne :

$$u_n(Q) = \frac{1}{\sqrt{n!2^n\pi^{\frac{1}{2}}}} e^{-\frac{1}{2}Q^2} H_n(Q) \quad (1.45)$$

où $H_n(Q)$ est un polynome d'Hermite d'ordre n. le système des $u_n(Q)$ est orthonormal complet c'est à dire verifie les relations ci-dessous :

$$\int_{-\infty}^{\infty} u_n(Q)u_p(Q)dQ = \delta_{np} \quad (1.46)$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} u_n^*(Q)u_n(Q) = \delta(Q - Q') \quad (1.47)$$

1.3 Oscillateur harmonique à p dimensions

C'est un système à p dimensions régit par l'hamiltonien

$$\mathcal{H} = \sum_{n=1}^N \mathcal{H}_i \quad \mathcal{H}_i = \frac{1}{2m}(p_i^2 + m^2\omega^2 q_i^2) \quad (1.48)$$

Soit \mathcal{E}_1 l'espace des états relatifs aux variables p_1 et q_1

\mathcal{E}_2 l'espace des états relatifs aux variables p_2 et q_2

L'espace des états dynamiques du système envisagé est le produit tensoriel des espaces précédents.

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2 \otimes \dots \otimes \mathcal{E}_p$$

Si $|n_i\rangle$ sont les vecteurs propres de l'hamiltonien \mathcal{H}_i opérant dans l'espace \mathcal{E}_i . les vecteurs propres de \mathcal{H} agissant dans \mathcal{E} seront :

$$|n_1 \dots n_p\rangle = |n_1\rangle \dots |n_p\rangle$$

$$n_1 = 0, 1, \dots, \infty, n_2 = 0, 1, \dots, \infty, \dots, n_p = 0, 1, \dots, \infty$$

On aura alors :

$$\mathcal{H}_1|n_1\rangle = (n_1 + \frac{1}{2})\hbar\omega|n_1\rangle \quad \mathcal{H}_2|n_2\rangle = (n_2 + \frac{1}{2})\hbar\omega|n_2\rangle \quad \mathcal{H}_p|n_p\rangle = (n_p + \frac{1}{2})\hbar\omega|n_p\rangle \quad (1.49)$$

$$\mathcal{H}|n_1 n_2 \dots n_p\rangle = (\mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2 + \dots + \mathcal{H}_p)|n_1 \dots n_p\rangle = \mathcal{H}|n_1 n_2 \dots n_p\rangle = (n_1 + n_2 + \dots + n_p + \frac{1}{2})\hbar\omega|n_1 n_2 \dots n_p\rangle \quad (1.50)$$

Les vecteurs propres sont repérés au moyen de p nombres quatiques $n_1 \dots n_p$ prenant les valeurs de 0 à ∞ tandis que l'énergie propre correspondante $(n + \frac{1}{2})\hbar\omega$ ne dépend que de la somme : $n = n_1 + n_2 + \dots + n_p$ de ces p nombres

Pour une valeur entière donnée $n \geq 0$ il existe :

$$C_{n+p-1}^n = \frac{(n+p-1)!}{n!(p-1)!}$$

valeurs distinctes pour la suite des nombres $n_1 \dots n_p$.

La valeur propre $(n + \frac{1}{2})\hbar\omega$ est donc C_{n+p-1}^n fois dégénérée. On peut introduire des opérateurs de création et d'annihilation de quanta du type i ce qui donne :

$$a_1|0\rangle = a_2|0\rangle = \dots = a_p|0\rangle = 0 \quad (1.51)$$

$$|n_1 n_2 \dots n_p\rangle = (n_1! n_2! \dots n_p!)^{-\frac{1}{2}} a_1^{+1} \dots a_p^{+p} |0\rangle \quad (1.52)$$

Les observables $n_i = a_i^+ a_i$ ont chacune pour spectre la suite des entiers non négatifs. Elles représentent le nombre de quanta du type i. Leur somme $N = \sum_i N_i$ est le nombre total de quantas.

$$\mathcal{H} = (N + \frac{1}{2}p)\hbar\omega$$

1.4 Oscillateur harmonique à 3 dimensions

On considère une particule située dans un puits de potentiel central proportionnel au carré de la distance au centre

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m}(p^2 + m^2\omega^2 r^2) \quad (1.53)$$

On peut écrire \mathcal{H} sous forme d'une somme de 3 termes $\mathcal{H}_x \mathcal{H}_y \mathcal{H}_z$.

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_x + \mathcal{H}_y + \mathcal{H}_z = \sum_i \mathcal{H}_i = \sum_i \frac{1}{2m} (p^2 + m^2 \omega^2 r^2) \quad (1.54)$$

D'après le paragraphe précédent les valeurs propres de \mathcal{H} seront $(n + \frac{3}{2})\hbar\omega$ et seront $C_{n+2}^n = \frac{(n+2)!}{n!2!} = \frac{1}{2}(n+1)(n+2)$ fois dégénérées.

Les observables N_x, N_y et N_z forment un ensemble complet de variables qui commutent et les vecteurs propres de \mathcal{H} seront définis par :

$$a_x|000\rangle = a_y|000\rangle = a_z|000\rangle = 0|n_x n_y n_z\rangle = (n_x! n_y! n_z!)^{-\frac{1}{2}} a_x^{+n_x} a_y^{+n_y} a_z^{+n_z} |000\rangle \quad (1.55)$$

Si on symétrise l'écriture de ces vecteurs et opérateurs on obtiendra :

$$[a_j, a_k] = \delta_{jk} [H, a_k^+] = a_k^+ [H, a_k] = -a_k |n_1 n_2 n_3\rangle = \Omega_{n_1 n_2 n_3} |000\rangle \quad \text{avec} \quad \Omega_{n_1 n_2 n_3} = \prod_1^3 \frac{a_1^{+n_i}}{\sqrt{n_i!}} \quad (1.56)$$

Introduisons le moment cinétique

Le potentiel étant central L^2 et L_z forment un ensemble complet de variables qui commutent. Les vecteurs propres $|nlm\rangle$ communs à ces trois observables vérifient les équations aux valeurs propres :

$$\mathcal{H}|nlm\rangle = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega|nlm\rangle \quad L^2|nlm\rangle = \hbar^2 l(l+1)|nlm\rangle \quad L_z|nlm\rangle = m\hbar|nlm\rangle \quad (1.57)$$

En représentation $\{r\}$ ces vecteurs $|nlm\rangle$ deviennent des fonctions :

$$\psi_{nlm}(r) = \frac{y_{nl}(r)}{r} Y_{lm}(\Omega) \quad (1.58)$$

Où $y_{nl}(r)$ est la solution nulle à l'origine et régulière à l'infini est solution de l'équation différentielle :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 r^2 \right] y_{nl}(r) = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega y_{nl}(r) \quad (1.59)$$

Les vecteurs $|nlm\rangle$ forment un ensemble complet de vecteurs propres de \mathcal{H} ils se déduisent de $|n_1 n_2 n_3\rangle$ par transformation unitaire c'est à dire :

$$|nlm\rangle = \sum_{n_1 n_2 n_3} A_{nlm}^{n_1 n_2 n_3} |n_1 n_2 n_3\rangle = \sum_{n_1 n_2 n_3} |n_1 n_2 n_3\rangle \langle n_1 n_2 n_3 | nlm\rangle \quad (1.60)$$

Le calcul de $A_{nlm}^{n_1 n_2 n_3}$ est compliqué.

1.5 Mouvement de particules dans un champ de forces centrales

1.5.1 Séparation des variables

On considère une particule de masse m dans un champ de forces centrales. Son hamiltonien :

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + V(r) \quad \text{et} \quad H\psi = E\psi \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right] \psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \quad (1.61)$$

l'hamiltonien en coordonnées sphériques est de la forme :

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\hbar^2}{2m r^2} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] + V(r) \quad (1.62)$$

$$L^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \quad \text{on peut donc écrire} \quad (1.63)$$

$$\mathcal{H} = \frac{P_r^2}{2m} + \frac{L^2}{2mr^2} + V(r) \quad \text{avec} \quad P_r = \frac{\hbar}{i} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r = \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) \quad (1.64)$$

On peut écrire alors l'équation sous la forme : $\left[\frac{P_r^2}{2m} + \frac{L^2}{2mr^2} + V(r) \right] \psi(r, \theta, \phi) = E\psi(r, \theta, \phi)$ (1.65)

L'opérateur L^2 a pour fonction propre les harmoniques sphériques $Y_{lm}(\theta, \phi)$:

$$L^2 Y_{lm}(\theta, \phi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (1.66)$$

On cherche donc les solutions propres communes aux opérateurs L^2 , L_z et \mathcal{H} du type

$$\psi_{lm}(r, \theta, \phi) = \chi_l(r) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (1.67)$$

On obtient alors l'équation différentielle :

$$\left[\frac{P_r^2}{2m} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m r^2} + V(r) - E \right] \chi_l(r) = 0 \quad \text{avec} \quad P_r^2 = -\hbar^2 \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r \quad \text{posons :} \quad y_l(r) = r \chi_l(r) - \frac{\hbar^2}{2m r} \frac{d^2}{dr^2} r \chi_l(r) + \dots \quad (1.68)$$

C'est une équation analogue à l'équation de Schrodinger à une dimension quand on rajoute le terme centrifuge $\frac{l(l+1)}{r^2}$ à l'opérateur Laplacien.

Norme des fonctions propres :

$$\langle \psi_{lm} | \psi_{lm} \rangle = \int d\Omega Y_{lm}^*(\Omega) Y_{lm}(\Omega) \int r^2 dr |\chi_l(r)|^2 = \int_0^\infty r^2 dr |\chi_l(r)|^2 = \int_0^\infty |Y_l(r)|^2 dr \quad (1.69)$$

On montre par ailleurs que l'opérateur P_r n'est hermitique que si on se limite aux fonctions de carré sommable qui satisfont à la condition $\lim_{r \rightarrow 0} r\psi(r) = 0$ c'est à dire si $Y_l(0) = 0$

D'autre part la solution $Y_l(r)$ doit rester bornée dans tout l'espace.

1.5.1.1 Particule libre

Supposons que le potentiel est nul $V(r) = 0$, on obtient l'équation différentielle :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + l(l+1) \frac{\hbar^2}{2m r^2} - E\right] Y_l(r) = 0 \quad \text{On pose} \quad k^2 = \frac{2m E}{\hbar^2} \left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2\right] Y_l(r) = 0 \quad (1.70)$$

Ondes s (c'est à dire $l = 0$)

L'équation se simplifie et on obtient :

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2\right] Y_0(r) = 0 \quad (1.71)$$

Soit $Y_0(r) = A \sin(kr) + B \cos(kr)$

comme d'autre part $Y_0(0) = 0$ il est nécessaire que $B = 0$ ce qui nous donne la solution non normalisée : $Y_0(r) = \sin(kr)$.

On peut normaliser cette fonction pour obtenir $Y_0(r)$.

$$A^2 \int_0^\infty \sin^2(kr) dr = 1 \quad \implies \quad A^2 = \frac{2}{\pi} \quad (1.72)$$

La solution générale pour cette onde $S = 0$ est donc

$$\chi_0(r) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\sin(kr)}{r} \quad (1.73)$$

1.5.1.2 Cas général

En revenant à l'équation avec $\chi_l(r)$ on obtiendra facilement :

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] \chi_l(r) = 0 \quad \text{on pose} \quad \xi = kr \quad \text{variable sans dimension} \quad \left[\frac{d^2}{d\xi^2} + \frac{2}{\xi} \frac{d}{d\xi} + \left[1 - \frac{l(l+1)}{\xi^2}\right]\right] \chi_l(\xi) = 0 \quad (1.74)$$

C'est une équation différentielle du second ordre qui a pour solution des fonctions de Bessel sphérique de première et deuxième espèce, c'est à dire :

$$\chi_l(r) = A j_l(kr) + B \eta_l(kr) \quad (1.75)$$

La fonction d'onde totale

$$\psi(r, \theta, \phi) = [A j_l(kr) + B \eta_l(kr)] Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (1.76)$$

Les constantes A et B seront déterminées par la normalisation et les conditions aux limites. Si la particule peut se mouvoir dans tout l'espace y compris le point $r = 0$ du fait que ψ doit être fini à $r = 0$ cela suppose que $B = 0$ et la solution $\psi_l = A j_l(kr)$ est une solution correspondant à une énergie donnée et un moment cinétique donné.

L'ensemble des ondes $\psi_{lm}(kr) = A j_l(kr) Y_{lm}(\theta, \phi)$ forme un système complet et on peut donc développer une onde plane sur cette base.

1.5.2 Développement de l'onde plane

$$e^{i\vec{r}\vec{k}} = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} a_{lm}(k) Y_{lm}(\theta, \phi) j_l(kr) \quad (1.77)$$

Choisissons l'axe des z suivant l'axe k. On obtient alors

$$e^{ikr \cos(\theta)} = \sum a_{lm} Y_{lm}(\theta, \phi) j_l(kr) \quad (1.78)$$

Le premier membre étant indépendant de ϕ le second également doit l'être ce qui impose $m = 0$ puisque la dépendance en ϕ de l'harmonique sphérique est en $e^{im\phi}$ et comme

$$Y_{l0}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{(2l+1)}{4\pi}} P_l(\cos(\theta)) \quad (1.79)$$

L'onde plane admet le développement suivant :

$$e^{i\vec{r}\vec{k}} = \sum_0^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos(\theta)) e^{i\vec{r}\vec{k}} = \sum_{lm} 4\pi i^l j_l(kr) Y_{lm}^* Y_{lm}(\theta, \phi) \quad \text{avec } P_l\left(\frac{\vec{r}\vec{k}}{|\vec{r}\vec{k}|}\right) = \sum_m \frac{4\pi}{2l+1} Y_{lm}^* Y_{lm}(\theta) \quad (1.80)$$

1.5.3 Mouvement d'une particule dans un puits carré

1.5.3.1 Puits infiniment profond

On considère une particule dans un puits à symétrie sphérique infiniment profond :

$$V(r) = \begin{cases} V(r) = 0 & \text{si } r \leq a \\ = \infty & \text{si } r > a \end{cases} \quad (1.81)$$

Quand $r \leq a$ la particule se meut à l'intérieur du puits, nous avons vu précédemment que la fonction d'onde était de la forme :

$$\psi_{klm} = A Y_{lm}(\theta, \varphi) j_l(kr) \quad \text{avec } E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (1.82)$$

Comme la particule ne peut pénétrer à l'intérieur du puits on écrira qu'au bord du puits la fonction d'onde est nulle c'est à dire : $j_l(ka) = 0$.

Si on appelle X_{nl} les racines $n = 1, 2, 3, \dots$ de la fonction de Bessel sphérique d'ordre l on obtient.

$$k = \frac{1}{a} X_{nl} \quad \text{ou} \quad E = \frac{\hbar^2}{2ma^2} X_{nl}^2 \quad (1.83)$$

On indiquera les états stationnaires d'énergie en spécifiant le nombre quantique $n = 1, 2, 3, \dots, \infty$ et le nombre quantique orbital s, p, d, f, \dots . On obtient ainsi.

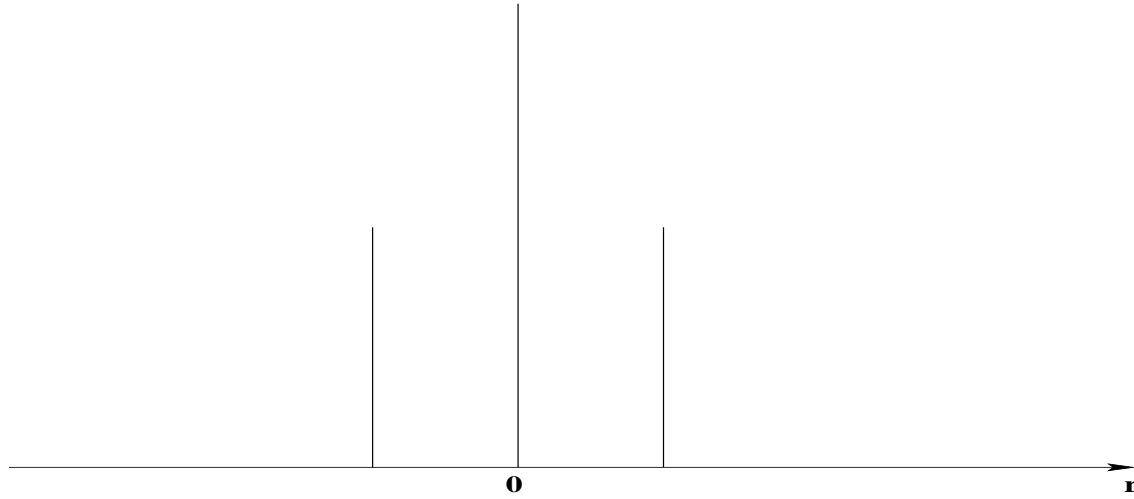


FIG. 1.1 – puits infiniment profond

<i>Etats</i>	1 s	1 p	1 d	2 s	1 f	2 p
X_{nl}	3.142	4.493	5.763	6.283	6.988	7.725

Ce qui nous donne l'ordre des différentes couches rencontrées, c'est ce que l'on appelle le modèle en couche.

1.5.3.2 Puits carré sphérique

On considère maintenant un puits sphérique non infini de la forme

$$V(r) = \begin{cases} V(r) = -V_0 & \text{si } r < a \\ = 0 & \text{si } r > a \end{cases} \quad (1.84)$$

La résolution de l'équation radiale est tout à fait analogue à celle du puits carré à une dimension. Soit E l'énergie de la particule. En posant $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E + V_0)$ on obtient pour $0 < r < a$ l'équation différentielle :

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \right] f_l(r) = 0 \quad \text{et en posant } \rho = kr \quad \left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho} + \left[1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] \right] f_l(\rho) = 0 \quad (1.85)$$

La solution générale est une combinaison linéaire de deux solutions particulières : $f_l = A j_l(kr) + B \eta_l(kr)$. Comme il n'existe qu'une seule solution régulière à l'origine :

$$\psi_l = A j_l(kr) \quad \text{pour } 0 < r < a \quad (1.86)$$

Pour $r > a$

- Si $E < 0$ on pose $X^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2}$ et la seule solution bornée à l'infini est une solution de Bessel qui se comporte comme une exponentielle décroissante c'est à dire pour $r > a$.

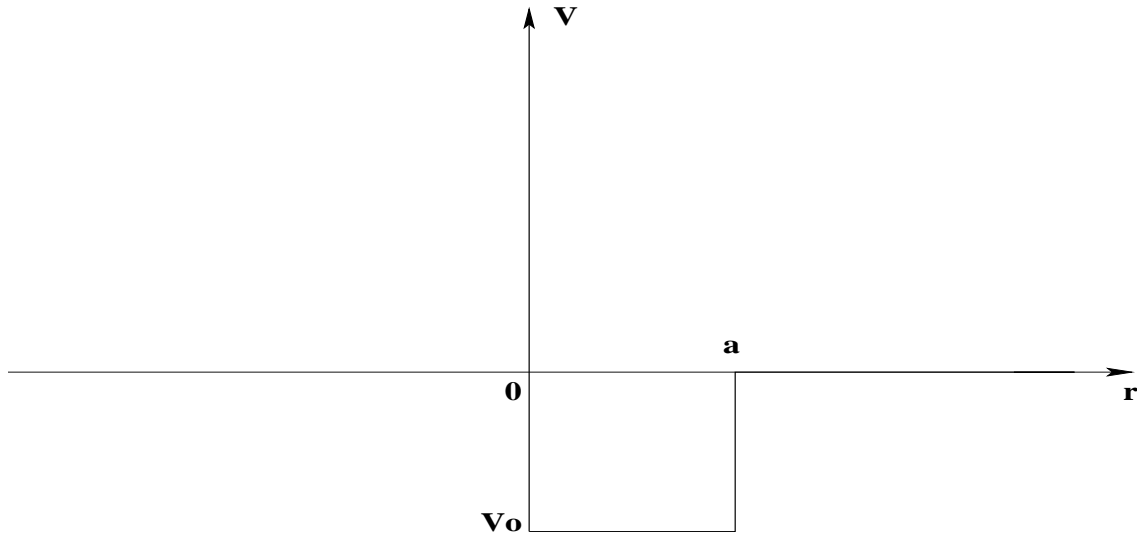


FIG. 1.2 – puits carré sphérique

$\psi_l = Bh_l^+(i\chi r)$. La continuité de la solution et de sa dérivé pour $r = a$ c'est à dire la continuité de la dérivé logarithmique pour $r = a$ fixe les états stationnaires d'énergie :

$$\left[\frac{1}{h_l^+(i\chi r)} \frac{d}{dr} h_l^+(i\chi r) \right]_{r=a} = \left[\frac{1}{j_l(kr)} \frac{d}{dr} j_l(kr) \right]_{r=a} \quad (1.87)$$

Il faut résoudre numériquement une telle équation pour en déduire les niveaux d'énergie. Remarquons que pour les ondes s ($l = 0$).

$$h_l^+(i\chi r) = \frac{e^{-\chi r}}{i\chi r} \quad \text{et} \quad j_0(kr) = \frac{\sin(kr)}{kr} \quad (1.88)$$

On retombe alors sur l'équation $-\chi a = ka \cot(ka)$ qui est analogue à la solution à une dimension .

– $E > 0$ on pose $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

la solution générale de l'équation de Schrodinger dans la zone externe est bornée partout. C'est une combinaison linéaire de $j_l(kr)$ et $\eta_l(kr)$. On l'écrira : $B(\cos(\delta_l)j_l(kr) + \sin(\delta_l)\eta_l(kr))$ tandis qu'à l'intérieur la solution sera toujours $Aj_l(kr)$. La continuité de la dérivé logarithmique fixe la valeur de δ_l et par conséquent le rapport $\frac{B}{A}$

$$\frac{kj_l'(ka)}{j_l(ka)} = k \frac{\cos \delta_l j_l'(ka) + \sin \delta_l \eta_l'(ka)}{\cos \delta_l j_l(ka) + \sin \delta_l \eta_l(ka)} \quad (1.89)$$

On appelle δ_l le déphasage de l'onde sphérique de moment cinétique l.

Dans le cas des ondes s l'équation précédente prend la forme :

$$k \cot(ka) = k \cot(ka + \delta_0) \quad (1.90)$$

1.5.4 Oscillateur harmonique sphérique symétrique

L'étude du modèle en couche en physique atomique ou nucléaire est basée sur la considération d'un potentiel harmonique de symétrie sphérique c'est à dire :

$$V(r) = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2 \quad (1.91)$$

L'équation de schrodinger pour un état de moment orbital bien défini devient dans ce cas :

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d}{dr^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 r^2 - E_{nl} \right] y_{nl} = 0 \quad (1.92)$$

On pose $a = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$, $\xi = \frac{r}{a}$ et $\varepsilon = \frac{E}{\hbar\omega}$.

$$\left(\frac{d^2}{d\xi^2} - \xi^2 - \frac{l(l+1)}{\xi^2} + 2\varepsilon \right) y(\xi) = 0 \quad (1.93)$$

Posons $\varepsilon = 2(n + s\frac{1}{4})$ et $l(l+1) = 4s(s - \frac{1}{2})$ et introduisons la nouvelle variable $Z = \xi^2$ et la nouvelle fonction $W(Z)$ par la relation $y(\xi) = e^{-\frac{Z}{2}} Z^s W(Z)$.

L'équation différentielle vérifiée par $W(Z)$ est alors :

$$\left[Z \frac{d^2}{dZ^2} + \left(2s + \frac{1}{2} - Z \right) \frac{d}{dZ} + n \right] W(Z) = 0 \quad (1.94)$$

La solution de cette équation différentielle du deuxième ordre est une série hypergéométrique confluyente :

$$W(Z) = F\left(-n, 2s + \frac{1}{2}, Z\right) \quad (1.95)$$

La fonction $y(\xi)$ devant tendre vers zéro tend vers l'infini il est nécessaire que la série hypergéométrique soit finie à l'infini. Cette équation est remplie si $n = 0, 1, 2, \dots$ et $s = \frac{1}{2}(l+1)$. On peut alors trouver les niveaux d'énergie

$$E_{nl} = \hbar\omega\varepsilon = 2\hbar\omega\left(n + s + \frac{1}{4}\right) = 2\hbar\omega\left(n + \frac{l}{2} + \frac{3}{4}\right) E_{nl} = \hbar\omega\left(2n + l + \frac{3}{2}\right) \quad \text{avec } n, l = 0, 1, 2, \dots \quad (1.96)$$

La fonction d'onde est donc :

$$y_{nl} = N_{nl} e^{-\frac{\xi^2}{2}} \xi^{(-l+1)} F\left(-n, l + \frac{3}{2}, \xi^2\right) \text{ et la fonction d'onde complète } \psi_{nlm} = \frac{1}{\xi} y_{nl}(\xi) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (1.97)$$

L'énergie E_{nl} ne dépend que de la combinaison $2n + l = N$ on peut donc appeler $N = 2n + l = 0, 1, 2, \dots$ le nombre quantique principal. chaque valeur de N peut être réalisée par différentes combinaisons de n et l ; pour $N \geq 2$ les états sont donc dégénérés.

Pour classer les états du puits harmonique on utilise la notation s, p, d, f, \dots pour $l = 0, 1, 2, \dots$ et le nombre $n+1$ où n est la puissance maximale du polynôme équivalent la série hypergéométrique. Par exemple l'état $1s$ correspond à $n = 0, l = 0$ et l'état $1p$ à

$n = 0, l = 1$

On peut alors déterminer les niveaux d'énergie d'un puits harmonique et les fonctions d'onde correspondantes.

$\frac{E_N}{\hbar\omega}$	$N = 2n + l$	$(n + 1)l$	$\pi^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\xi} y_{nl}(\xi)$
$\frac{3}{2}$	0	1 s	$2 \exp(-\frac{\xi^2}{2})$
$\frac{5}{2}$	1	1 p	$\sqrt{\frac{8}{3}} \xi \exp(-\frac{\xi^2}{2})$
$\frac{7}{2}$	2	2 s 1 d	$\sqrt{\frac{8}{3}} (\xi^2 - \frac{3}{2}) \exp(-\frac{\xi^2}{2})$
$\frac{9}{2}$	3	2 p 1 f	$\frac{4}{\sqrt{15}} (\xi^2) \exp(-\frac{\xi^2}{2})$

Il est intéressant de comparer la position des niveaux d'énergie dans un noyau pour un puits carré infini et un oscillateur harmonique. L'un et l'autre calcul ne rendant pas compte d'une façon suffisamment exacte de la situation expérimentale, Meyer et Jensen ont repris le calcul des niveaux à l'aide d'un puits fini et un couplage spin-orbite. L'accord avec l'expérience (modèles en couches) est remarquable.

Le modèle en couches avec un potentiel spin-orbite permet de retrouver les nombres magiques 2 8 14 20 28 pour lesquels il existe une plus grande stabilité du noyau

Chapitre 2

TRAVAUX DIRIGES : OSCILLATEUR HARMONIQUE

2.1 Oscillateur harmonique

2.1.1 Problème I : Interaction electron - champ électromagnétique

On considère un électron de masse m et de charge $-e$ plongé dans un champ magnétique \vec{B} et dans un champ électrique \vec{E} dérivant respectivement du potentiel vecteur $\vec{A}(\vec{r})$ et du potentiel scalaire $V(\vec{r})$. Soit \vec{r} le vecteur position de l'électron, \vec{P} sa quantité de mouvement et \vec{S} son moment cinétique de spin.

On montre que l'énergie d'un tel électron s'écrit sous la forme :

$$H = \frac{1}{2m} \left(\vec{P} + e \cdot \vec{A}(\vec{r}) \right)^2 - e \cdot V(\vec{r}) + g \cdot \frac{e}{2m} \vec{S} \cdot \vec{B}$$

Où g est le facteur de Landé de l'électron. On suppose que le potentiel scalaire $V(\vec{r})$ est tel que :

$$V(r) = -\frac{m}{e} \omega_z^2 (2z^2 - x^2 - y^2)$$

Où ω_z est la pulsation propre du mouvement axial de l'électron suivant l'axe $\vec{o}\vec{z}$ d'un référentiel galiléen $R(oxyz)$.

En choisissant la jauge $\vec{A}(\vec{r})$ telle que :

$$\vec{A}(\vec{r}) = \frac{1}{2} \vec{B} \wedge \vec{r}$$

L'expression de H devient :

$$H = \frac{1}{2m} \left\{ \vec{P} + \frac{m\omega_c}{2} \left(\vec{k} \wedge \vec{r} \right) \right\}^2 - \frac{m\omega_z^2}{4} (2z^2 - x^2 - y^2) + e \cdot V(\vec{r}) + g \cdot \frac{\omega_c}{2} \vec{S} \cdot \vec{k}$$

Où $\omega_c = \frac{eB}{m}$ est la pulsation cyclotron de l'électron et \vec{k} le vecteur unitaire porté par $\vec{o}\vec{z}$ et parallèle à \vec{B} . On désigne par $a_e = \frac{g-2}{2}$ l'anomalie gyromagnétique de g .

On donne $\hbar\omega_c = 10^{-3} eV$, $\hbar\omega_z = 10^{-3} eV$ et $a_e = 1.6 \cdot 10^{-3}$

1. Calcul Préliminaire

- (a) Exprimer H en fonction des composantes cartésiennes de \vec{p} et \vec{r} .
- (b) On associe aux grandeurs scalaires les observables correspondantes. Déterminer l'hamiltonien H de l'électron et montrer qu'il peut être décomposé en trois termes :
 $H = H_z + H_{xy} + H_s$ avec :

$$H_z = \frac{P_z^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_z^2 Z^2$$

$$H_{xy} = \frac{P_x^2 + P_y^2}{2m} + \frac{1}{2}m\Omega^2 (X^2 + Y^2) + \frac{\omega_c}{2} (XP_y - YP_x)$$

$$H_s = \frac{1}{2}g\omega_c \vec{S} \cdot \vec{k}$$

Expliciter Ω^2 en fonction de ω_c^2 et ω_z^2

- (c) Donner la signification physique de chacun des trois termes et expliquer pourquoi on peut les étudier séparément ?
2. Étude de l'Hamiltonien de spin H_s
- (a) On introduit les opérateurs de création et d'annihilation a_z définis par :
 $a_z^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\alpha \cdot Z - \frac{i}{\alpha \hbar} P_z \right)$ et $a_z = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\alpha \cdot Z + \frac{i}{\alpha \hbar} P_z \right)$, où $\alpha = \sqrt{\frac{m\omega_z}{\hbar}}$.
 Calculer l'observable nombre de quanta $N_z = a_z^+ a_z$; en déduire que $H_z = \hbar\omega_z \left(N_z + \frac{1}{2} \right)$.
- (b) Donner, sans démonstration les énergies propres de H_z .

3. Étude de l'hamiltonien de spin H_{xy} **A - Cas où $\omega_z = 0$**

On introduit les opérateurs annihilation de quanta circulaires droit et gauche respectivement définis par :

$$a_d = \frac{1}{2}[\beta(X - iY) + \frac{i}{\beta\hbar}(P_x - iP_y)] \text{ et } a_g = \frac{1}{2}[\beta(X + iY) + \frac{i}{\beta\hbar}(P_x + iP_y)]$$

et les opérateurs création associés a_d^+ et a_g^+ , avec $\beta = \sqrt{\frac{\omega_c}{2\hbar}}$

- (a) Calculer les opérateurs nombre de quanta circulaires gauche N_g et droit N_d définis par : $N_g = a_g^+ a_g$ et $N_d = a_d^+ a_d$
 En déduire que la composante L_z de l'opérateur moment cinétique de l'électron s'exprime par : $L_z = \hbar(N_d - N_g)$
- (b) Montrer que H_{xy} se met sous la forme :
 $H_{xy} = \hbar\omega_c \left(N_d + \frac{1}{2} \right)$
- (c) Donner les énergies propres de cet hamiltonien ainsi que leurs degrés de dégénérescence.
- (d) Pouvez vous expliquer pourquoi le spectre d'énergie ne dépend que d'un seul nombre quantique alors que l'hamiltonien initial avait deux degrés de liberté.

B - Cas où $\omega_z \neq 0$

On introduit maintenant les opérateurs a'_d et a'_g obtenus en remplaçant β par β' dans les expressions des opérateurs a_d et a_g ($\beta' = \sqrt{\frac{m\Omega}{\hbar}}$). On définit aussi les opérateurs nombre de quanta droit et gauche N'_d et N'_g tels que : ($N'_d = a'^+_d a'_d$ et $N'_g = a'^+_g a'_g$).

(a) Montrer que H_{xy} peut se mettre sous la forme :

$$H_{xy} = \hbar\omega'_c \left(N'_d + \frac{1}{2} \right) - \hbar\omega_m \left(N'_g + \frac{1}{2} \right)$$

(b) En identifiant l'expression précédente à celle donnée en 1 - b, exprimer ω'_c et ω_m en fonction de ω_c et de ω_m .

(c) Donner alors les énergies propres de H_{xy} et préciser leur degré de dégénérescence.

Conclusion

(a) Donner les énergies propres de l'hamiltonien total H .

(b) classer par ordre croissant les énergies propres $\hbar\omega'_c$, $\hbar\omega_m$, $\hbar\omega_L$, $\hbar\omega_z$. Tracer l'allure du spectre de l'hamiltonien H .

(c) Par rapport au cas où l'électron est soumis au seul champ \vec{B} , quels sont les effets du champ électrique \vec{E} ?

(d) En quoi le spectre de l'électron peut être comparé à un spectre atomique.

2.1.2 Oscillateur harmonique - Interaction dipolaire électrique

On considère un oscillateur harmonique à une dimension constitué par un électron soumis à un potentiel $V = \frac{1}{2}m\omega_o^2 X^2$. Cet oscillateur est perturbé par un champ électrique E fixe dans la direction de $X > 0$, ce qui se traduit par un potentiel eEx .

1. calculer les niveaux d'énergie du système en poussant le calcul jusqu'au deuxième ordre des perturbations.
2. Donner l'expression des fonctions d'ondes ψ_n perturbées au premier ordre dans la base des fonctions d'onde non perturbées ψ_n^o .
3. Donner la valeur moyenne du moment dipolaire $P = -ex$ dans les états ψ_n^o et ψ_n , en se limitant aux termes linéaires en E .
4. Montrer qu'en effectuant un changement de variable, il est possible de calculer rigoureusement les niveaux d'énergie du système précédemment caractérisé par l'hamiltonien :

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_o^2 X^2 + eEx$$

Donner l'expression rigoureuse des niveaux d'énergie du système ainsi que le moment dipolaire induit.

5. On considère maintenant que le champ électrique dépend du temps et est donné par :

$$E = \frac{A}{\tau\sqrt{\pi}} e^{-\frac{t^2}{\tau^2}}$$

A et τ sont des constantes. Si à $t \rightarrow -\infty$ l'oscillateur est dans son état fondamental, trouver en première approximation, la probabilité pour qu'il soit dans son premier état excité à $t \rightarrow +\infty$.

Discuter cette probabilité suivant les valeurs relatives de τ et de l'inverse de la pulsation de l'oscillateur $\frac{1}{\omega_0}$.

2.1.3 Oscillateurs couplés

Cet exercice a pour objet l'étude des états dynamiques d'un système formé d'un grand nombre N de particules disposées régulièrement sur un axe et coulées de proche en proche. Ce modèle simple permet de dégager des notions physiques importantes qui restent valables pour l'étude des excitations élastiques d'un cristal réel : quanta d'énergie associés aux *modes propres* d'excitation ou *phonons*, *dispersion* du milieu, *vitesse de propagation du son*.

Un corps solide est constitué d'un grand nombre d'atomes dont les positions d'équilibre sont disposées régulièrement aux nœuds d'un réseau cristallin. Pour simplifier on suppose que ce réseau est à une dimension et assimilable à une chaîne linéaire d'atomes dont on étudie les oscillations en admettant que la force de couplage entre deux atomes voisins est proportionnelle à la différence de leurs déplacements par rapport à leurs positions d'équilibre.

Pour préparer l'étude plus complexe du système de N particules et introduire la notion de *variable normale* et de *mode propre de vibration* on étudiera, dans une première partie, le mouvement de deux oscillateurs harmoniques, à une dimension, couplés. Dans la deuxième partie les mêmes notions et méthodes seront appliquées à la chaîne de N atomes couplés.

2.1.3.1 PREMIÈRE PARTIE

Modes propres de vibrations de deux oscillateurs harmoniques à une dimension couplés.

I- On considère deux particules (par exemple 2 atomes) *discernables* (1) et (2) de même masse se déplaçant sur l'axe Ox, où elles sont repérées par leurs abscisses X_1 et X_2 . On suppose d'abord les particules *indépendantes*, c'est à dire sans interaction mutuelle, mais rappelées par des forces extérieures à des positions d'équilibre respectives $-\frac{a}{2}$ et $+\frac{a}{2}$. leur énergie potentielle est alors :

$$U_0(X_1, X_2) = \frac{1}{2}m\omega^2\left(X_1 + \frac{a}{2}\right)^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\left(X_2 - \frac{a}{2}\right)^2$$

On désigne par $q_1 = X_1 + \frac{a}{2}$ et $q_2 = X_2 - \frac{a}{2}$ les déplacements des particules par rapport à leurs positions d'équilibre et par p_1 et p_2 leur impulsion.

1. Ecrire l'hamiltonien \hat{H}_o en fonction des observables \hat{q}_i et \hat{p}_i ($i = 1, 2$) dont on donnera les relations de commutation
2. Montrer que les valeurs possibles $E_o(n)$ de l'énergie du système s'expriment en fonction d'un entier n positif ou nul. Quel est le degré de dégénérescence d des niveaux d'énergie ? représenter le schéma de ces niveaux pour le fondamental et les deux premiers excités en indiquant les valeurs des nombres quantiques de d et de $E_o(n)$. On suppose maintenant que les deux particules sont couplées et qu'au potentiel extérieur U_o s'ajoute le potentiel d'interaction mutuelle : $U_1(X_1, X_2) = \frac{1}{2}C \cdot (X_2 - X_1 - a)^2$ avec $C > 0$ réel et positif correspondant à une force qui rappelle les deux particules à la distance a lorsque leurs déplacements les en écartent.
3. Ecrire le nouvel hamiltonien \hat{H} du système en fonction de $\hat{q}_1, \hat{p}_1, \hat{q}_2$ et \hat{p}_2 .
4. On introduit les nouvelles variables :

$$\hat{Q}_\pm = \frac{1}{2}(\hat{q}_2 \pm \hat{q}_1) \text{ et } \hat{P}_\pm = \frac{1}{2}(\hat{p}_2 \pm \hat{p}_1) \quad \text{dites variables normales.}$$

Calculer les quatres commutateurs :

$$[\hat{Q}_+, \hat{P}_+] , [\hat{Q}_-, \hat{P}_-] , [\hat{Q}_+, \hat{P}_-] , [\hat{Q}_-, \hat{P}_+]$$

5. Exprimer l'hamiltonien \hat{H} en fonction des variables normales. Montrer qu'il peut s'écrire comme la somme de deux hamiltoniens décrivant des modes d'oscillations indépendants. Les modes propres du système, de pulsation ω_+ et ω_- dont on donnera les valeurs en fonction de ω, C et m .
6. Montrer que les valeurs possibles de l'énergie $E(n_+, n_-)$ du système décrit par \hat{H} s'expriment en fonction de deux nombres entiers n_+ et n_- positifs ou nuls. Représenter le schéma des niveaux d'énergie dans la limite du couplage faible ($C \ll \frac{1}{2}m\omega^2$) de façon à le comparer au schéma obtenu au 2°. Que devient ce schéma dans la limite du couplage fort ($C \gg \frac{1}{2}m\omega^2$).
7. Donner brièvement une interprétation physique des deux modes de vibration $+$ et $-$ qui permet de comprendre intuitivement pourquoi ω_- est fonction de C alors que ω_+ en est indépendant.

Deuxième partie

Vibrations élastiques d'une chaîne linéaire d'atomes

On considère maintenant une chaîne linéaire de N particules (atomes) discernables de même masse m repérées par un indice n prenant des valeurs entières de 1 à N (on supposera N pair). Sur l'axe Ox on repère la position de la $n^{ième}$ particule par son déplacement q_n par rapport au point de référence d'abscisse $x_n = na$ où a est le pas de la chaîne.

les variables dynamiques du système sont les q_n et les impulsions p_n des particules.

Dans le système étudié dans cette seconde partie chaque particule n'est soumise qu'aux seules forces d'interaction mutuelle avec ses voisins immédiates résultant d'un potentiel

analogue au potentiel (1) de la première partie. Les particules $n = 1$ et $n = N$ des deux extrémités n'ont qu'une seule voisine et la force qu'elles subissent est différente de celle auxquelles sont soumises l'ensemble des autres particules de la chaîne et il en résulte des effets de bords qui compliquent le problème. Ces effets sont d'autant moins importants que le nombre N de particules est plus grand et, si l'on s'intéresse uniquement au comportement de la chaîne loin des extrémités, on peut les négliger en utilisant un artifice qui permet de simplifier les calculs tout en conservant l'essentiel des propriétés physiques du système. On imagine que les N particules sont réparties sur un très grand cercle de telle manière que le dernier point x_n est encore à la distance a du premier x_1 . Pour une telle chaîne les déplacements q_n obéissent à la *condition cyclique* : $q_{n+N} = q_n$ puisque l'indice $n+N$ représente la même particule que l'indice n . Dans ces conditions toutes les particules de la chaîne sont soumises aux mêmes forces et on vérifie facilement que l'hamiltonien du système s'écrit :

$$\hat{H} = \sum_{n=1}^N \frac{1}{2m} \hat{P}^2 + \sum_{n=1}^N \frac{1}{2} C (\hat{q}_{n+1} - \hat{q}_n)^2$$

C réel non nul et positif ($C > 0$)

1. Comme dans la première partie on introduit des variables normales, combinaisons linéaires des anciennes variables dans le but de faire apparaître les modes propres de vibrations du système. On pose :

$$\hat{Q}_k = \sum_{n=1}^N \hat{q}_n f_k^n$$

$$\hat{P}_k = \sum_{n=1}^N \hat{P}_n f_k^n$$

Où les f_k^n sont des fonctions complexes du nombre réel k . Les propriétés d'invariance du système, qu'on ne discutera pas ici, conduisent à poser :

$$f_k^n = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{-ikx_n} \text{ où } x_n = na$$

Montrer que la condition cyclique ($q_{n+N} = q_n$) appliquée aux f_k^n , c'est à dire que les valeurs de k forment un ensemble discret de nombres $k_\nu = \nu.k_1$, où 4ν est un entier ou zéro et k_1 une constante dont on donnera la valeur.

Montrer que les nouvelles variables vérifient également une condition de périodicité :

$$Q_{k+\frac{2n}{a}\nu'} = Q_k, \quad \nu' : \text{entier ou zéro}$$

cette propriété permet de limiter les valeurs de k qui fournissent des valeurs indépendantes des variables à un domaine (1^{ere} zone de brillouin) auquel on se restreindra par la suite :

$$-\frac{\pi}{a} < k \leq \frac{\pi}{a}$$

Donner les N valeurs de ν correspondantes.

2. Montrer que les coefficients f_k^n satisfont aux relations d'orthogonalité :

$$\sum_n f_k^{n*} f_{k'}^n = \delta_{kk'} \text{ et } \sum_k f_k^n f_k^{n'*} = \delta_{nn'}$$

où n varie de 1 à N et k dans la 1^{ère} zone de Brillouin.

En déduire l'expression des variables \hat{q}_n et \hat{p}_n en fonction des variables normales \hat{Q}_k et \hat{P}_k .

3. Quelles relations sont imposées entre les \hat{Q}_k et \hat{Q}_{-k}^+ et entre les \hat{P}_k et \hat{P}_{-k}^+ par le fait que les \hat{q}_n et \hat{p}_n sont des observables? Calculer les commutateurs $[\hat{Q}_k, \hat{P}_{k'}^+]$, $[\hat{Q}_k, \hat{P}_{k'}]$.
4. Exprimer l'hamiltonien \hat{H} en fonction des variables normales. Montrer qu'il peut s'écrire sous la forme d'une somme d'hamiltoniens \hat{H}_k indépendants dont on donnera l'expression en fonction des opérateurs \hat{Q}_k , \hat{Q}_k^+ , \hat{P}_k et \hat{P}_k^+ .
5. Donner l'expression de \hat{H}_0 en fonction de l'opérateur \hat{P}_0 . A quelles grandeurs physiques correspondent les observables \hat{Q}_0 et \hat{P}_0 ? Quel type de mouvement du système est décrit par le mode $k = 0$?
6. pour $k \neq 0$ on pose $\Omega_k = 2\sqrt{\frac{c}{m}} |\sin \frac{ka}{2}|$ et l'on introduit de nouveaux opérateurs $\hat{\epsilon}_k$ et $\hat{\pi}_k$ définis par :

$$\begin{aligned} \hat{\epsilon}_k &= \frac{1}{2} \left(\hat{Q}_k + \hat{Q}_k^+ \right) + \frac{i}{m\Omega_k} \left(\hat{P}_k + \hat{P}_k^+ \right) \\ \text{et } \hat{\pi}_k &= \frac{1}{2} \left(\hat{P}_k + \hat{P}_k^+ \right) - im\Omega_k \left(\hat{Q}_k - \hat{Q}_k^+ \right) \end{aligned} \quad (2.1)$$

Vérifier que les $\hat{\epsilon}_k$ et $\hat{\pi}_k$ sont des observables. calculer le commutateur $[\hat{\epsilon}_k, \hat{\pi}_k]$.

En exprimant \hat{H}_k en fonction de $\hat{\epsilon}_k$, $\hat{\pi}_k$ et Ω_k , montrer que \hat{H} se ramène à une somme d'hamiltoniens de formes connues. Quels types de mouvements sont décrits par les modes $k \neq 0$?

– Représenter graphiquement les variations de Ω_k .

– Quelles sont les valeurs possibles de l'énergie totale E de la chaîne?

7. Pour $k \neq 0$, on désigne par $Q_k(t)$ la valeur moyenne de \hat{Q}_k dans un état $|\psi(t)\rangle$. A l'aide du théorème d'Ehrenfest et des résultats précédents des questions (3) et (4), montrer que l'évolution au cours du temps de $Q_k(t)$ est gouvernée par une équation différentielle du second ordre. En déduire que $Q_k(t)$ est de la forme :

$$Q_k(t) = \alpha_k e^{-i\omega_k t} + \beta_k e^{+i\omega_k t}$$

Où l'on demande de déterminer ω et la relation entre β_k et α_{-k} . Montrer que la valeur moyenne $q_n(t)$ du déplacement q_n de la $n^{\text{ième}}$ particule peut s'écrire sous la forme d'une superposition d'ondes planes monochromatiques de pulsation Ω et de vecteur d'onde k :

$$q_n(t) = \text{Re} \sum_k e^{i(kx_n - \Omega_k t)}$$

On appelle **phonons** des particules fictives d'impulsion $\hbar k$ et d'énergie $\hbar\Omega_k$, associées aux quanta d'oscillation élastique de la chaîne.

8. On suppose que l'onde élastique qui représente les $q_n(t)$ en fonction de la position considérée x_n et du temps est un paquet d'ondes dont les longueurs d'ondes sont grandes devant le pas a du réseau, c'est à dire qu'on a $|k|a \ll 2\pi$. Justifier cette dernière relation. Montrer que l'oscillation de la particule n est la même que celle de la particule $n = 0$ mais décalée du temps que met l'onde à parcourir la distance $x_n = na$ qui sépare en moyenne les deux particules, c'est à dire que l'on a :

$$q_n(t) = q_0 \left(t - \frac{x_n}{v} \right)$$

Où v est une vitesse de propagation dont on demande l'expression en fonction de m , C , et a .

Que devient cette vitesse lorsque les longueurs d'onde dans le paquet d'ondes sont de l'ordre de a et en particulier lorsqu'on atteint les limites de la première zone de Brillouin ?

9. Les longueurs d'ondes acoustiques vérifient la condition du début de la question précédente, v est alors la vitesse du son dans le réseau cristallin. Calculer cette vitesse pour :

$$C = 10 \text{Newton/m}, m \approx 10^{-25} \text{kg} \text{ et } a \approx 5 \text{\AA}$$

2.1.4 Modèle nucléaire collectif - Moments quadrupolaire et d'inertie-

1. Dans le cadre du modèle en couches avec un potentiel moyen d'oscillateur harmonique sans spin-orbite, montrer que la configuration la plus basse du noyau de ${}^4_2\text{He}$ est sphérique alors que celle du ${}^8_4\text{Be}$ est déformée mais possède la symétrie axiale. on suppose $\omega_x = \omega_y \neq \omega_z$ avec la condition $\omega_x \times \omega_y \times \omega_z = \omega_0^3$
2. Calculer le moment quadrupolaire intrinsèque Q_0 du ${}^8_4\text{Be}$: $Q_0 = \langle \psi | \sum_{i=1}^A (2Z_i^2 - (X_i^2 + Y_i^2)) | \psi \rangle$ en fonction de $\langle Z^2 \rangle = \langle \sum_{i=1}^A Z_i^2 \rangle$ et on exprimera $\langle Z^2 \rangle$ au moyen d'une longueur formée avec ω_0 .
3. Calculer le rayon carré moyen de ${}^4_2\text{He}$ et de ${}^8_4\text{Be}$ défini par :

$$R^2 = \frac{1}{A} \left\langle \sum_{i=1}^A r_i^2 \right\rangle$$

4. Calculer le moment d'inertie du ${}^8_4\text{Be}$ autour de son axe de rotation en supposant la même distribution de matière que précédemment.
5. Après avoir retrouvé la fonction d'onde de l'état fondamental de l'oscillateur à une dimension à l'aide de l'opérateur d'annihilation a :

$$a | \psi_0(\bar{x}) \rangle = (\bar{x} + i\bar{p}) | \psi_0(\bar{x}) \rangle = \left(\bar{x} + \frac{d}{d\bar{x}} \right) | \psi_0(\bar{x}) \rangle = 0 \quad \text{avec } \bar{x} = \sqrt{\frac{m\omega_x}{\hbar}} x$$

construire la fonction d'onde normalisée d'un état $1S$ à l'aide de la longueur fondamentale précédente. Construire ensuite explicitement la fonction d'onde de l'état fondamental de ${}^4_2\text{He}$ qui correspond au modèle précédent. On rappelle que si :

$$I_n = \int_0^\infty x^n e^{-\alpha x^2} dx \quad \text{avec } I_0 = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \text{ et } I_n = \frac{n-1}{2\alpha} I_{n-2}$$

6. Calculer la valeur moyenne $\langle \rho_{op}(r) \rangle$ de l'opérateur densité défini par

$$\rho_{op}(r) = \sum_{i=1}^A \delta(r_i - r)$$

Déduire l'expression $\langle \rho_{op}(0) \rangle$ de la densité au centre du noyau.

7. En supposant que le moment quadrupolaire intrinsèque de ${}^8_4\text{Be}$ et son moment d'inertie sont fixés comme dans la question 2 donner le spectre de rotation du ${}^8_4\text{Be}$ en fonction de son moment d'inertie. Expérimentalement on mesure les énergies d'excitation suivantes pour ${}^8_4\text{Be}$:

$$E_{2+} - E_{0+} = 2.9 \text{ MeV}; E_{4+} - E_{0+} = 11.4 \text{ MeV}$$

Comparer au spectre rotationnel. En déduire une valeur possible pour le paramètre $\hbar\omega_0$ de ${}^8_4\text{Be}$, puis la valeur $\langle \rho_{op}(0) \rangle$ de la densité nucléaire au centre. Conclusion ?

2.1.5 Oscillateur déformé

On se propose d'approcher l'état fondamental d'un noyau par un état $|\Phi_0\rangle$ de particules indépendantes composé d'orbitales $|\lambda\rangle$ d'un oscillateur harmonique déformé :

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2) \quad (2.2)$$

On suppose que chaque orbite $|n_x^\lambda n_y^\lambda n_z^\lambda\rangle$ de la mer de Fermi est occupé par deux neutrons et deux protons. On pose : $N_i = \langle \sum_{i=1}^n (n_i + \frac{1}{2}) \rangle ; i = (x, y, z)$

- Calculer les valeurs moyennes $\langle x^2 \rangle = \langle \sum_{i=1}^A x_i^2 \rangle$, $\langle y^2 \rangle$, $\langle z^2 \rangle$, et $\langle R^2 \rangle = \langle \sum_{i=1}^A r_i^2 \rangle$
- Calculer les énergies cinétiques : $\langle \frac{P_x^2}{2m} \rangle$, $\langle \frac{P_y^2}{2m} \rangle$, $\langle \frac{P_z^2}{2m} \rangle$.
- Calculer l'énergie du fondamental, en imposant la condition, $\omega_0^3 = \omega_x \omega_y \omega_z$, justifier le choix de cette condition. Quelle relation exist-t-il entre N_i et $\omega_i, i = (x, y, z)$.
- Les fréquences $\omega_x, \omega_y, \omega_z$ peuvent être écrites sous la forme : $\omega_x = \exp(\alpha) \omega_0$, $\omega_y = \exp(\beta) \omega_0$, $\omega_z = \exp(-(\alpha + \beta)) \omega_0$
Calculer l'énergie cinétique moyenne $\langle T(\alpha, \beta) \rangle$ et montrer que le minimum de $\langle T(\alpha, \beta) \rangle$ est obtenu uniquement si la relation $N_x \omega_x = N_y \omega_y = N_z \omega_z$ est satisfaite.
- La déformation d'un noyau peut être déterminée par le rapport : $\frac{Q_0}{R^2}$ où $Q_0 = \langle \psi | \sum_{i=1}^A (2Z_i^2 - (X_i^2 + Y_i^2)) | \psi \rangle$.
Calculer ce rapport pour un oscillateur isotrope et un oscillateur féformé en fonction de N_x, N_y et N_z seulement.
- montrer que le ${}^{20}\text{Ne}$ admet une symétrie axiale, calculer le rapport $\frac{Q_0}{R^2}$ dans les deux cas de la question N°.5. Comparer ce rapport à la valeur expérimentale de la déformation $\delta = 0.6$.
- Calculer le moment d'inertie du ${}^{20}\text{Ne}$ autour de son axe de rotation perpendiculaire à l'axe de symétrie. Comparer au spectre rotationnel ci-dessous et déduire une valeur possible pour le paramètre $\hbar\omega_0$ du ${}^{20}\text{Ne}$.

2.2 Oscillateur harmonique à une dimension

2.2.1 Notions de base :

On utilise les coordonnées sans dimension : $Q = \frac{a+a^+}{\sqrt{2}}$, $P = \frac{a-a^+}{\sqrt{2}}$, $[Q, P] = QP - PQ = i$

1. Etudier l'évolution au cours du temps des valeurs moyennes $\langle Q \rangle$ et $\langle P \rangle$, comparer au cas classique.

2. Etudier l'évolution au cours du temps de :

$$\chi = \langle Q^2 \rangle - \langle Q \rangle^2, \bar{\omega} = \langle P^2 \rangle - \langle P \rangle^2, \eta = \langle PQ \rangle + \langle QP \rangle - 2 \langle P \rangle \langle Q \rangle$$

Montrer que ces quantités sont constantes au cours du temps si et seulement si leur valeur initiale satisfait à $\eta = 0$ et $\chi = 0$.

3. Calculer χ , $\bar{\omega}$ et η pour le vecteur d'état décrit par la fonction d'onde :

$$F(Q) = (2\pi\sigma)^{-\frac{1}{4}} e^{i\langle P \rangle Q - \frac{(Q - \langle Q \rangle)^2}{4\sigma}}$$

À quelles conditions χ , $\bar{\omega}$ et η seront ils indépendants du temps, comparer $\Delta P \cdot \Delta Q$ à la limite de Heisenberg.

4. En utilisant deux fois la relation de Glauber $e^A e^B = e^{A+B} e^{\frac{[A,B]}{2}}$, montrer que le vecteur d'onde précédent peut s'écrire $|F\rangle = \lambda e^{\alpha a^+} |0\rangle$, où $|0\rangle$ est le fondamental de l'oscillateur harmonique et $\alpha = \frac{\langle Q \rangle + i \langle P \rangle}{\sqrt{2}}$. On établira au préalable l'expression $|F\rangle = e^{i\langle P \rangle Q} e^{-i\langle Q \rangle P} |0\rangle$

5. calculer à une phase près les coefficients du développement de $|F\rangle$ sur les états propres de l'oscillateur harmonique. En déduire l'évolution de $|F\rangle$ au cours du temps.

6. Calculer la valeur moyenne de l'énergie et comparer au cas classique, calculer ΔE .

2.2.2 Oscillateurs harmoniques couplés

On considère deux particules discernables (1) et (2) de même masse m se déplaçant sur l'axe OX , où elles sont repérées par leurs abscisses X_1 et X_2 . On suppose d'abord les particules indépendantes c'est à dire sans interaction mutuelle, mais rappelées par des forces extérieures à des positions d'équilibre respectives $-\frac{a}{2}$ et $+\frac{a}{2}$. Leur énergie potentielle est alors :

$$U_0(X_1, X_2) = \frac{1}{2} m \omega^2 (X_1 + \frac{a}{2})^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 (X_2 - \frac{a}{2})^2$$

On désigne par $q_1 = X_1 + \frac{a}{2}$ et $q_2 = X_2 - \frac{a}{2}$ les déplacements des particules par rapport à leurs positions d'équilibre et par p_1 et p_2 leur impulsion.

1. Ecrire l'hamiltonien \hat{H}_0 en fonction des observables \hat{q}_i et \hat{p}_i ($i = 1, 2$) dont on donnera les relations de commutation.

2. Montrer que les valeurs possibles $E_o(n)$ de l'énergie du système s'expriment en fonction d'un entier n positif ou nul. Quel est le degré de dégénérescence d des niveaux d'énergie ? représenter le schéma de ces niveaux pour le fondamental et les deux premiers excités en indiquant les valeurs des nombres quantiques de d et de $E_o(n)$. On suppose maintenant que les deux particules sont couplées et qu'au potentiel extérieur U_o s'ajoute le potentiel d'interaction mutuelle : $U_1(X_1, X_2) = \frac{1}{2}C \cdot (X_2 - X_1 - a)^2$ avec $C > 0$ réel et positif correspondant à une force qui rappelle les deux particules à la distance a lorsque leurs déplacements les en écartent.
3. Ecrire le nouvel hamiltonien \hat{H} du système en fonction de $\hat{q}_1, \hat{p}_1, \hat{q}_2$ et \hat{p}_2 .
4. On introduit les nouvelles variables :

$$\hat{Q}_\pm = \frac{1}{2}(\hat{q}_2 \pm \hat{q}_1) \text{ et } \hat{P}_\pm = \frac{1}{2}(\hat{p}_2 \pm \hat{p}_1) \quad \text{dites variables normales.}$$

Calculer les quatres commutateurs :

$$[\hat{Q}_+, \hat{P}_+], [\hat{Q}_-, \hat{P}_-], [\hat{Q}_+, \hat{P}_-], [\hat{Q}_-, \hat{P}_+]$$

5. Exprimer l'hamiltonien \hat{H} en fonction des variables normales. Montrer qu'il peut s'écrire comme la somme de deux hamiltoniens décrivant des modes d'oscillations indépendants. Les modes propres du système, de pulsation ω_+ et ω_- dont on donnera les valeurs en fonction de ω, C et m .
6. Montrer que les valeurs possibles de l'énergie $E(n_+, n_-)$ du système décrit par \hat{H} s'expriment en fonction de deux nombres entiers n_+ et n_- positifs ou nuls. Représenter le schéma des niveaux d'énergie dans la limite du couplage faible ($C \ll \frac{1}{2}m\omega^2$) de façon à le comparer au schéma obtenu au 2°. Que devient ce schéma dans la limite du couplage fort ($C \gg \frac{1}{2}m\omega^2$).
7. Donner brièvement une interprétation physique des deux modes de vibration $+$ et $-$ qui permet de comprendre intuitivement pourquoi ω_- est fonction de C alors que ω_+ en est indépendant.

2.3 Théorie des perturbations

On considère une particule m , assujettie à se déplacer dans le plan XOY , ayant pour hamiltonien :

$$H_o = \frac{P_x^2}{2m} + \frac{P_y^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 (x^2 + y^2)$$

On veut étudier l'effet sur cette particule d'une perturbation W donnée par :

$$W = \lambda_1 W_1 + \lambda_2 W_2$$

Où λ_1 et λ_2 sont des constantes et W_1 et W_2 ont pour expression :

$$W_1 = m\omega^2 xy \quad W_2 = \hbar\omega \left(\frac{L_z}{\hbar^2} - 2 \right) \quad (2.3)$$

L_z : Composante sur OZ du moment cinétique orbital de la particule.

1. Indiquer les valeurs propres de H_0 , leur degré de dégénérescence et les vecteurs propres associés. Dans la suite du problème on s'intéressera uniquement au deuxième niveau excité de H_0 , d'énergie $3\hbar\omega$.
2. Calculer les matrices représentant les restrictions de W_1 et W_2 au sous-espace propre de la valeur propre $3\hbar\omega$ de H_0 .
3. On pose $\lambda_2 = 0$ et $\lambda_1 = 1$, calculer par la théorie des perturbations l'effet du terme $\lambda_1 W_1$ sur le deuxième niveau excité de H_0 .
4. On suppose $\lambda_2 \ll \lambda_1 \ll 1$, en considérant les résultats de la question (3) comme une nouvelle situation non-perturbée, calculer l'effet du terme $\lambda_2 W_2$.
5. On suppose maintenant que $\lambda_1 = 0$ et $\lambda_2 \ll 1$, calculer par la théorie des perturbations l'effet du terme $\lambda_2 W_2$ sur le deuxième niveau excité de H_0 .
6. On suppose enfin que $\lambda_1 \ll \lambda_2 \ll 1$, en considérant les résultats de la question (5) comme une nouvelle situation non perturbée, calculer l'effet du terme $\lambda_1 W_1$.

2.3.1 Perturbation anharmonique

Une particule de masse m se déplace sur l'axe X dans un potentiel harmonique $V(X) = \frac{m\omega_0^2}{2}X^2$. On lui applique une perturbation de la forme $F(X) = F\omega.X$. La particule est initialement dans son état fondamental.

1. Quels sont les éléments de matrice de l'opérateur X entre deux états propres de l'oscillateur harmonique. En déduire à l'ordre le plus bas en F , la probabilité de transition P_n pour passer directement dans l'état à n quanta.
2. on suppose maintenant que l'oscillateur harmonique est soumis à une perturbation, $W(X) = \lambda.X^3$, le potentiel anharmonique est donné par :

$$V(X) = \frac{m\omega_0^2}{2}X^2 + \lambda.X^3$$

- A-** Calculer, au premier ordre en λ , les fonctions d'onde des états propres perturbés ainsi que les corrections au premier ordre de l'énergie.
3. Quelles sont à l'ordre λ^2 , les énergies des trois premiers états.
 4. En déduire à l'ordre λ les probabilités P_n pour passer directement dans un état à n quanta. Montrer que certaines transitions précédemment interdites deviennent possibles.
 5. Pouvez-vous, sans calcul, dire comment ces résultats seraient modifiés pour une perturbation du type $\lambda.X^4$ au lieu de $\lambda.X^3$.

L'oscillateur est de nouveau harmonique ($\lambda = 0$). Il est couplé à un gaz d'électrons libres de masse m , par un potentiel central : $V = \sum_i V(\vec{r} - \vec{r}_i)$, \vec{r} est la position de l'oscillateur (qui ici se réduit à son abscisse x), \vec{r}_i la position du i^{ieme} électron. Les

électrons sont libres. On néglige leur interaction mutuelle. On suppose que l'amplitude de \vec{r} est faible devant la portée de V . Le gaz d'électron est initialement dans son état fondamental caractérisé par son vecteur d'onde de Fermi k_F .

6. Montrer que le premier état excité de l'oscillateur harmonique a une durée de vie finie que l'on exprimera à l'aide des composantes de Fourier V_q du potentiel (on ne cherchera pas à expliquer les intégrales).
7. On excite maintenant l'oscillateur à l'aide de la force F , de fréquence ω , défini précédemment. Ecrire, à l'ordre le plus bas en F et en V l'équation d'évolution de la fonction d'onde du système (oscillateur + électrons). En déduire la fonction de réponse donnant le déplacement $X(t)$ dû à la force $F(t')$ (on aura intérêt à considérer le problème comme une oscillation forcée de la fonction d'onde à la fréquence ω'). Quelle est, en fonction de ω , la puissance dissipée par la force F ? discuter le résultat.

Chapitre 3

DEVOIR DE MÉCANIQUE QUANTIQUE -P4-

3.1 I - Oscillateur harmonique - notions de base

En mécanique classique, l'énergie totale E d'un oscillateur harmonique de masse m de pulsation ω est égale à :

$$E = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

Où x désigne la position et p l'impulsion (ou quantité de mouvement).

En mécanique quantique, l'énergie d'un tel système est décrite par l'observable H (hamiltonien du système) obtenue à partir des observables position x et impulsion p .

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

L'étude quantique de ce système est donc ramené à la résolution de l'équation aux valeurs propres :

$$|\varphi_\lambda \rangle = E_\lambda |\varphi_\lambda \rangle \text{ ou encore } \langle x|H||\varphi_\lambda \rangle = E_\lambda \langle x|\varphi_\lambda \rangle$$

3.2 A - Formulation quantique de l'oscillateur harmonique

On se propose de calculer les énergies propres E_λ associées aux vecteurs propres $|\varphi_\lambda \rangle$ et de déduire par la suite les fonctions d'onde correspondantes $\varphi_\lambda(x) = \langle x|\varphi_\lambda \rangle$.

On introduit les opérateurs (sans dimension) \hat{x} , \hat{P} , a et a^+ tels que :

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x, \hat{P} = \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}} P, a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x} + i\hat{P}) \text{ et } a^+ : \text{ adjoint de } a.$$

a est l'opérateur d'annihilation et a^+ l'opérateur de création.

1. Exprimer H en fonction de \hat{x} , \hat{P} et vérifier que $[\hat{x}, \hat{P}] = i$
2. On définit l'opérateur hermétique $N = a^+a$.
 - Montrer que $[N, a] = -a$ et $[N, a^+] = a^+$.
 - Etablir la relation qui existe entre H et N , donner la valeur des commutateurs $[H, a^+]$ et $[H, a]$ et montrer que la recherche des valeurs propres de H revient à la recherche des valeurs propres de N .
3. Si $|\varphi_\lambda\rangle$ est vecteur propre de N pour la valeur propre $\lambda : N|\varphi_\lambda\rangle = \lambda|\varphi_\lambda\rangle$
 - Montrer que $\lambda \geq 0$ et que si $\lambda = 0$ alors $a|\varphi_0\rangle = 0$.
 - Montrer que $a|\varphi_\lambda\rangle$ est vecteur propre de N pour la valeur propre $\lambda - 1$.
 - Sachant que $a^p|\varphi_\lambda\rangle$ est vecteur propre de N pour la valeur propre $\lambda - p$:
 $N(a^p|\varphi_\lambda\rangle) = (\lambda - p)a^p|\varphi_\lambda\rangle$; où p est un nombre entier.
 Montrer que le spectre de N (ensemble des valeurs propres de N) est constitué des nombres entiers $(\lambda - n)$ et de la valeur 0. En déduire les valeurs des énergies propres E_n .
 - Puisque $H|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle$, quelles sont les énergies propres associées au vecteur $a|\varphi_n\rangle$ et $a^+|\varphi_n\rangle$, justifier l'appellation opérateur de création a^+ et d'annihilation a .
4. Le vecteur $|\varphi_n\rangle$ est défini à partir de $|\varphi_0\rangle$ par la relation $|\varphi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}a^n|\varphi_0\rangle$
 Donner l'expression de la fonction d'onde propre $|\varphi_1(x)\rangle = \langle x|\varphi_1\rangle$ qui correspond au premier état excité d'énergie E_1 , sachant que l'état du fondamental est décrit par la fonction d'ondes :

$$\varphi_0(x) = A^{\frac{1}{4}}e^{-bx^2}$$

$$\text{avec } A = \frac{m\omega}{\pi\hbar} \text{ et } b = \frac{m\omega}{2\hbar}$$

5. En mécanique classique l'état d'énergie E la plus basse est obtenue pour $E = 0$, ce qui correspond à la particule immobile en $x = 0$ (énergie cinétique et énergie potentielle également nulle). Qu'en est-il en mécanique quantique pour l'énergie à l'état fondamental, commentez votre résultat en tenant compte de la relation d'incertitude d'Heisenberg.

3.3 Vibrations d'une chaîne linéaire d'atomes

Cet exercice a pour objet l'étude des états dynamiques d'un système formé d'un grand nombre N de particules disposées régulièrement sur un axe et couplées de proche en proche. Ce modèle simple permet de dégager des notions physiques importantes qui restent valables pour l'étude des excitations élastiques d'un cristal réel : quanta d'énergie associés aux **modes propres** d'excitation ou **phonons**, **dispersion** du milieu, **vitesse de propagation du son**.

Un corps solide est constitué d'un très grand nombre d'atomes dont les positions d'équilibre sont disposées régulièrement aux noeuds d'un réseau cristallin. Pour simplifier on suppose que ce réseau est à une dimension et assimilable à une chaîne linéaire d'atomes dont on étudie les oscillations en admettant que la force de couplage entre atomes voisins est proportionnelle à la différence de leurs déplacements par rapport à leurs positions d'équilibre.

Pour préparer l'étude plus complexe du système de N particules et introduire la notion de **variable normale et de mode propre de vibration** on étudiera, dans une première partie, le mouvement de deux oscillations harmoniques, à une dimension couplés. Dans la deuxième partie les mêmes notions et méthodes seront appliquées à la chaîne de N atomes couplés.

PREMIERE PARTIE

3.3.1 Modes propres de vibration de deux oscillateurs harmoniques à une dimension couplés

On considère deux particules discernables (1) et (2) de même masse m se déplaçant sur l'axe OX , où elles sont repérées par leurs abscisses X_1 et X_2 . On suppose d'abord les particules indépendantes c'est à dire sans interaction mutuelle, mais rappelées par des forces extérieures à des positions d'équilibre respectives $-\frac{a}{2}$ et $+\frac{a}{2}$. Leur énergie potentielle est alors :

$$U_o(X_1, X_2) = \frac{1}{2}m\omega^2(X_1 + \frac{a}{2})^2 + \frac{1}{2}m\omega^2(X_2 - \frac{a}{2})^2$$

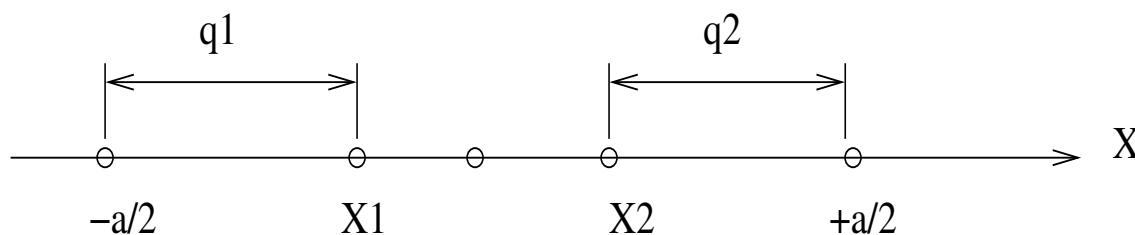


FIG. 3.1 -

On désigne par $q_1 = X_1 + \frac{a}{2}$ et $q_2 = X_2 - \frac{a}{2}$ les déplacements des particules par rapport à leurs positions d'équilibre et par p_1 et p_2 leur impulsion.

1. Ecrire l'hamiltonien \hat{H}_o en fonction des observables \hat{q}_i et \hat{p}_i ($i = 1, 2$) dont on donnera les relations de commutation.
2. Montrer que les valeurs possibles $E_o(n)$ de l'énergie du système s'expriment en fonction d'un entier n positif ou nul. Quel est le degré de dégénérescence d des niveaux d'énergie ? représenter le schéma de ces niveaux pour le fondamental et les deux premiers excités en indiquant les valeurs des nombres quantiques de d et de $E_o(n)$.

On suppose maintenant que les deux particules sont couplées et qu'au potentiel extérieur U_0 s'ajoute le potentiel d'interaction mutuelle :

$$U_1(X_1, X_2) = \frac{1}{2}C.(X_2 - X_1 - a)^2$$

Avec $C > 0$ réel et positif correspondant à une force qui rappelle les deux particules à la distance a lorsque leurs déplacements les en écartent.

3. Ecrire le nouvel hamiltonien \hat{H} du système en fonction de $\hat{q}_1, \hat{p}_1, \hat{q}_2$ et \hat{p}_2 .
4. On introduit les nouvelles variables :

$$\hat{Q}_\pm = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{q}_2 \pm \hat{q}_1) \text{ et } \hat{P}_\pm = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{p}_2 \pm \hat{p}_1) \quad \text{dites variables normales.}$$

Calculer les quatres commutateurs :

$$[\hat{Q}_+, \hat{P}_+], [\hat{Q}_-, \hat{P}_-], [\hat{Q}_+, \hat{P}_-], [\hat{Q}_-, \hat{P}_+]$$

5. Exprimer l'hamiltonien \hat{H} en fonction des variables normales. Montrer qu'il peut s'écrire comme la somme de deux hamiltoniens décrivant des modes d'oscillations indépendants. Les modes propres du système, de pulsation ω_+ et ω_- dont on donnera les valeurs en fonction de ω, C et m .
6. Montrer que les valeurs possibles de l'énergie $E(n_+, n_-)$ du système décrit par \hat{H} s'expriment en fonction de deux nombres entiers n_+ et n_- positifs ou nuls. Représenter le schéma des niveaux d'énergie dans la limite du couplage faible ($C \ll \frac{1}{2}m\omega^2$) de façon à le comparer au schéma obtenu au 2°. Que devient ce schéma dans la limite du couplage fort ($C \gg \frac{1}{2}m\omega^2$).
7. Donner brièvement une interprétation physique des deux modes de vibration $+$ et $-$ qui permet de comprendre intuitivement pourquoi ω_- est fonction de C alors que ω_+ en est indépendant.

DEUXIEME PARTIE

3.4 Vibrations élastiques d'une chaîne linéaire d'atomes

On considère maintenant une chaîne linéaire de N particules (atomes) discernables de même masse m repérées par un indice n prenant des valeurs entières de 1 à N (on supposera N pair). Sur l'axe Ox on repère la position de la n^{ieme} particule par son déplacement q_n par rapport au point de référence d'abscisse $x_n = n.a$ où a est le pas de la chaîne.

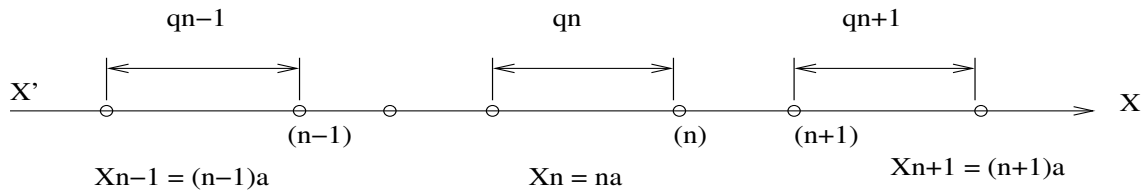


FIG. 3.2 -

Les variables dynamiques du système sont les q_n et les impulsions p_n des particules.

Dans le système étudié dans cette seconde partie chaque particule n'est soumise qu'aux seules forces d'interaction mutuelle avec ses voisines immédiates résultant d'un potentiel analogue au potentiel de la première partie. Les particules $n=1$ et $n=N$ des deux extrémités n'ont qu'une seule voisine et la force qu'elles subissent est différente de celle auxquelles sont soumises l'ensemble des autres particules de la chaîne et il en résulte des effets de bord qui compliquent le problème. Ces effets sont d'autant moins importants que le nombre N de particules est plus grand et, si l'on s'intéresse uniquement au comportement de la chaîne loin des extrémités, on peut les négliger en utilisant un artifice qui permet de simplifier les calculs tout en conservant l'essentiel des propriétés physiques du système.

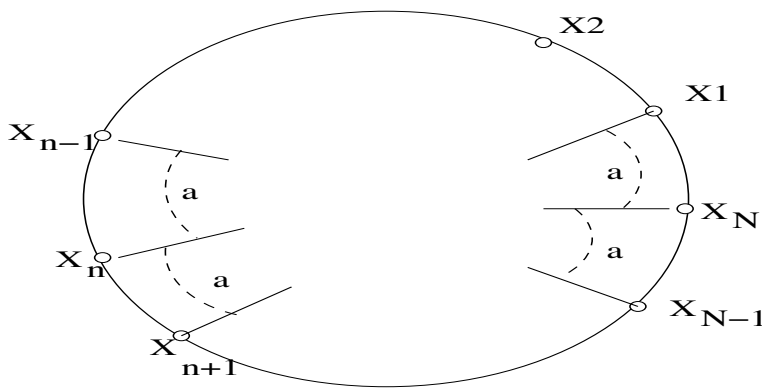


FIG. 3.3 -

On imagine que les N particules sont réparties sur un très grand cercle de telle manière que le dernier point x_n est encore à la distance a du premier x_1 . pour une telle chaîne les déplacements obéissent à la condition cyclique : $q_{n+N} = q_n$ puisque l'indice $n + N$ représente la même particule que l'indice n . Dans ces conditions toutes les particules de la chaîne sont soumises aux mêmes forces et on vérifie facilement que l'hamiltonien s'écrit :

$$\hat{H} = \sum_{n=1}^N \frac{1}{2m} \hat{p}_n^2 + \sum_{n=1}^N \frac{1}{2} C (\hat{q}_{n+1} - \hat{q}_n)^2$$

C réel > 0

- Comme dans la 1^{ère} partie on introduit des variables (*variables normales*, combinaisons linéaires des anciennes variables dans le but de faire apparaître les *modes propres* de vibrations du système. On pose :

$$\hat{Q}_k = \sum_{n=1}^N \hat{q}_n f_k^n \text{ et } \hat{P}_k = \sum_{n=1}^N \hat{p}_n f_k^n$$

Où les f_k^n sont des fonctions complexes du nombre réel k . Les propriétés d'invariance du système, qu'on ne discutera pas ici, conduisent à poser :

$$f_k^n = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{-ikx_n}$$

Où $x_n = na$

Montrer que la condition cyclique (2) appliquée aux f_k^n , c'est à dire $f_k^{n+N} = f_k^n$, implique que les valeurs de k forment un ensemble discret de nombres $k_n = \nu \cdot k_1$, où ν est un entier ou zéro et k_1 une constante dont on donnera la valeur.

montrer que les nouvelles variables vérifient également une condition de périodicité :

$$Q_{k+\frac{2n\nu'}{a}} = Q_k, \nu' : \text{entier ou zéro}$$

cette propriété permet de limiter les valeurs de k qui fournissent des valeurs indépendantes des variables à un domaine (1^{ère} zone de Brillouin) auquel on se restreindra par la suite :

$$-\frac{\pi}{a} < k \leq \frac{\pi}{a}$$

Donner les N valeurs de ν correspondantes.

- Montrer que les coefficients f_k^n satisfont aux relations d'orthogonalité :

$$\sum_n f_k^{n*} f_{k'}^n = \delta_{kk'}$$

et

$$\sum_k f_k^{n'} f_k^{n*} = \delta_{n'n}$$

Où n varie de 1 à N et k dans la 1^{ère} zone de Brillouin.

En déduire l'expression des variables \hat{q}_n et \hat{p}_n en fonction des variables normales \hat{Q}_k et \hat{P}_k .

- Quelles relations sont imposées entre les \hat{Q}_k et \hat{Q}_{-k}^+ et entre les \hat{P}_k et \hat{P}_{-k}^+ par le fait que les \hat{q}_n et \hat{p}_n sont des observables? Calculer les commutateurs $[\hat{Q}_k, \hat{P}_{k'}^+]$ et $[\hat{Q}_k, \hat{P}_{k'}]$.
- Exprimer l'hamiltonien \hat{H} en fonction des *variables normales*. Montrer qu'il peut s'écrire sous la forme d'une somme d'hamiltoniens \hat{H}_k indépendants dont on donnera l'expression en fonction des opérateurs $\hat{Q}_k, \hat{Q}_{-k}^+, \hat{P}_k$ et $\hat{P}_{k'}^+$.
- Donner l'expression de l'hamiltonien \hat{H}_0 en fonction de l'opérateur \hat{P}_0 . A quelle grandeur physique correspondent les observables \hat{Q}_0 et \hat{P}_0 ? Quel type de mouvement du système est décrit par le mode $k = 0$?

6. Pour $k \neq 0$ on pose $\Omega_k = 2\sqrt{\frac{C}{m}}|\sin(\frac{ka}{2})|$ et l'on introduit de nouveaux opérateurs $\hat{\epsilon}_k$ et $\hat{\pi}_k$ définis par :

$$\hat{\epsilon}_k = \frac{1}{2}|(\hat{Q}_k + \hat{Q}_k^+) + \frac{i}{m\Omega_k}(\hat{P}_k + \hat{P}_k^+)|$$

et

$$\hat{\pi}_k = \frac{1}{2}|(\hat{P}_k + \hat{P}_k^+) + i.m\Omega_k(\hat{Q}_k + \hat{Q}_k^+)|$$

Vérifier que les $\hat{\epsilon}_k$ et les $\hat{\pi}_k$ sont des observables. Calculer le commutateur $[\hat{\epsilon}_k, \hat{\pi}_k]$.

En exprimant \hat{H}_k en fonction de $\hat{\epsilon}_k$, $\hat{\pi}_k$ et Ω_k montrer que \hat{H} se ramène à une somme d'hamiltoniens de formes connues. Quels types de mouvement sont décrits par les modes $k \neq 0$?

Représenter graphiquement les variables de Ω_k .

Quelles sont les valeurs possibles de l'énergie totale E de la chaîne ?

7. Pour $k \neq 0$, on désigne par $Q_k(t)$ la valeur moyenne de $Q_k(t)$ et \hat{Q}_k dans un état $|\psi(t)\rangle$. A l'aide du théorème d'Ehrenfest et des résultats des 3° et 4°, montrer que l'évolution au cours du temps de $Q_k(t)$ est gouvernée par une équation différentielle du second ordre. En déduire que $Q_k(t)$ est de forme :

$$Q_k(t) = \alpha_k.e^{-i\omega.t} + \beta_k.e^{+i\omega.t}$$

où l'on demande de déterminer ω et la relation entre β_k et α_{-k} .

montrer que la valeur moyenne $q_n(t)$ du déplacement $q_n(t)$ de la n^{ieme} particule peut s'écrire sous la forme d'une superposition d'ondes planes monochromatiques de pulsations Ω_k et de vecteur d'onde k :

$$q_n(t) = \Re \sum_k \varphi_k e^{i(k.x_n - \Omega_k t)}$$

On appelle *phonons* des particules *fictives* d'impulsions $\hbar\Omega_k$, associées aux quantas d'oscillations élastique de la chaîne.

8. On suppose que l'onde élastique qui représente les $q_n(t)$ en fonction de la position considérée x_n et du temps est un paquet d'ondes dont les longueurs d'onde sont grandes devant les pas a du réseau, c'est à dire qu'on a $|\vec{k}|a \ll 2\pi$. justifier cette dernière relation. Montrer que l'oscillation de la particule n est la même que celle de la particule $n = 0$ mais décalée du temps que met l'onde à parcourir la distance $x_n = n.a$ qui sépare en moyenne les deux particules, c'est à dire que l'on a :

$$q_n = q_0(t - \frac{x_n}{v})$$

où v est une vitesse de propagation dont on demande l'expression en fonction de m , C et a .

Que devient cette vitesse lorsque les longueurs d'onde dans le paquet d'ondes sont de l'ordre de a et en particulier lorsqu'on atteint les limites de la première zone de Brillouin ?

9. les longueurs d'ondes acoustiques vérifient la condition du début de la question précédente, v est alors la vitesse du son dans le réseau cristallin. Calculer cette vitesse pour :
 $C = 10 \text{Newton/m}$, $m \simeq 10^{-25} \text{ kg}$ et $a \simeq 5\text{\AA}$.

Chapitre 4

Solution du devoir

4.1 Vibrations d'une chaîne linéaire d'atomes

4.1.1 Modes propres de vibration de deux oscillateurs harmoniques à une dimension

1. $\hat{H} = \hat{H}_o + \hat{U}_1$ où $\hat{U}_1 = \frac{1}{2}C(\hat{q}_2 - \hat{q}_1)$

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}_1^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{q}_1^2 + \frac{\hat{P}_2^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{q}_2^2 + \frac{1}{2}C(\hat{q}_2 - \hat{q}_1)^2$$

2. Compte tenu de $[\hat{q}_i, \hat{q}_j] = i\hbar\delta_{ij}$ où $i, j = 1, 2$ on a alors $[\hat{Q}_\pm, \hat{P}_\pm] = i\hbar$ et $[\hat{Q}_+, \hat{P}_-] = [\hat{Q}_-, \hat{P}_+] = 0$

3. En inversant les équations de définition des variables normales :

$$\hat{q}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{Q}_+ + \hat{Q}_-) \text{ et } \hat{q}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{Q}_+ - \hat{Q}_-)$$

$$\hat{p}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{P}_+ + \hat{P}_-) \text{ et } \hat{p}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{P}_+ - \hat{P}_-)$$

$$\hat{p}_1^2 + \hat{p}_2^2 = \hat{P}_+^2 + \hat{P}_-^2 \text{ et } \hat{q}_1^2 + \hat{q}_2^2 = \hat{Q}_+^2 + \hat{Q}_-^2$$

$$\hat{U}_1^2 = \frac{1}{2}C.2.\hat{Q}_-^2$$

d'où

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}_+^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{Q}_+^2 + \frac{1}{2m}\hat{P}_-^2 + \frac{1}{2}m\left(\omega^2 + \frac{2C}{m}\right)\hat{Q}_-^2$$

c'est à dire :

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}_+^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_+^2\hat{Q}_+^2 + \frac{1}{2m}\hat{P}_-^2 + \frac{2C}{m}\omega_-^2\hat{Q}_-^2$$

Avec $\omega_+ = \omega$ et $\omega_- = +\sqrt{\omega^2 + \frac{2C}{m}}$

4. Les relations de commutation sont celles de paire indépendantes de variables dynamiques canoniquement conjuguées. \hat{H} est donc la somme de 2 oscillateurs harmoniques

indépendants. On a donc :

$$E(n_+, n_-) = (n_+ + \frac{1}{2})\hbar\omega_+ + (n_- + \frac{1}{2})\hbar\omega_- \text{ avec } n_+ \text{ et } n_- \text{ entier } \geq 0$$

5. L'excitation seule du mode + correspond classiquement à une oscillation en bloc de l'ensemble des 2 particules restent séparées de la distance \mathbf{a} , la force de rappel ne dépend pas alors de C et par conséquent ω_+ non plus. Au contraire l'excitation du seul mode - correspond des particules, leur centre de masse reste au repos, la force de couplage intervient dans la force de rappel et ω_- dépend de C.

4.2 Deuxième partie

1. La condition cyclique : $f_k^{n+N} = f_k^n$ donne compte tenu de $x_n = na$

$$f_k^{n+N} = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{-ikx_{n+N}} = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{-ik(n+N)a} = f_k^n = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{-ikna}$$

d'où $e^{-ikNa} = 1$ et $kNa = 2\pi\nu$ ou encore $k_\nu = \nu k_1$ avec $k_1 = \frac{2\pi}{Na}$ et ν entier

Si on pose $k' = k + \frac{2\pi}{a}\nu'$ où ν' est un entier on a :

$$f_{k'}^n = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{-i(k + \frac{2\pi}{a}\nu')na} = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{-i(kna)} e^{-i(2\pi\nu'n)} = f_k^n$$

avec $e^{-i(2\pi\nu'n)} = 1$

De sorte que :

$$\hat{Q}_{k'} = \sum_{n=1}^N \hat{q}_n f_{k'}^n = \hat{Q}_k$$

Ce qui vérifie la propriété de périodicité avec la période $\frac{2\pi}{a}$. On peut donc restreindre l'intervalle de variation de k à :

$$-\frac{\pi}{a} < k = \frac{2\pi\nu}{Na} \leq \frac{\pi}{a}$$

A cette intervalle correspond le nombre entier $\nu = \frac{kNa}{2\pi}$ L'intervalle $-\frac{N}{2} < \nu \leq \frac{N}{2}$ N pair (Zone de Brillouin)

2. On a

$$f_k^n = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{-ikx_n} = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{-i\frac{2\pi\nu}{Na}na}$$

d'où

$$\sum_{n=1}^N f_k^n f_{k'}^n = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N e^{i\frac{2n\pi}{N}(\nu-\nu')} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \left[e^{i\frac{2\pi}{N}(\nu-\nu')} \right]^n$$

Si $k = k'$ c'est à dire $\nu = \nu'$ la somme sur n donne N.

Si $k \neq k'$ alors $(\nu - \nu')$ est un entier et en prenant $z = e^{i\frac{2\pi}{N}(\nu - \nu')}$ on voit que $z^n = 1$ et qu'on peut écrire

$$\sum_{n=1}^N f_k^{n'} f_{k'}^n = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} z^n = \frac{1}{N} \frac{1 - z^N}{1 - z} = 0$$

$$\sum_{n=1}^N f_k^n f_{k'}^n = \delta_{kk'}$$

La démonstration de la 2^{ieme} relation est similaire, la somme sur k doit être en fait une somme sur les N valeurs de ν

$$\sum_k f_k^{n'} f_k^n = \delta_{nn'}$$

En projetant \hat{Q}_k sur f_k^n on a alors :

$$\sum_k f_k^{n'} \hat{Q}_k = \sum_{n'} \sum_k f_k^{n'} f_k^n \hat{q}_{n'} = \sum_{n=1} \delta_{nn'} \hat{q}_{n'} = \hat{q}_n$$

On a donc

$$\hat{q}_n = \sum_k \hat{Q}_k f_k^n$$

et

$$\hat{p}_n = \sum_k \hat{P}_k f_k^n$$

Où la somme sur k est étendue aux valeurs de la 1^{ere} zone de Brillouin

3. De la définition de f_k^n on déduit immédiatement que :

$$f_k^n = f_{-k}^n$$

Compte tenu de $\hat{q}_n^+ = q_n$ on trouve

$$\hat{Q}_k^+ = \sum_n \hat{q}_n^+ f_k^n = \sum_n \hat{q}_n f_{-k}^n = \hat{Q}_k^-$$

$$\hat{Q}_k^+ = \hat{Q}_k^- \text{ et } \hat{P}_k^+ = \hat{P}_k^-$$

On a donc :

$$\left[\hat{Q}_k^+, \hat{P}_k^+ \right] = \sum_n \sum_{n'} [\hat{q}_n, \hat{p}_{n'}] f_k^n f_{k'}^{n'*} = i\hbar \sum_n \sum_{n'} \delta_{nn'} f_k^n f_{k'}^{n'*} = i\hbar \sum_n f_k^n f_{k'}^{n'*}$$

$$\left[\hat{Q}_k, \hat{P}_k^+ \right] = i\hbar \delta_{kk'}$$

Comme $\hat{P}_{-k'}^+ = \hat{P}_{+k'}^+$ on déduit que

$$\left[\hat{Q}_k, \hat{P}_{k'}^+ \right] = i\hbar \delta_{k,-k'}$$

4. Pour transformer \hat{H} on a besoin de calculer :

$$\sum_n \hat{P}_n^2 = \sum_n \sum_k \sum_{k'} \hat{P}_k f_k^{n*} \hat{P}_{k'} f_{k'}^{n*}$$

$$\sum_n \hat{P}_n^2 = \sum_n \sum_k \sum_{k'} \hat{P}_k f_k^{n*} \hat{P}_{k'} f_{-k'}^n$$

$$\sum_n \hat{P}_n^2 = \sum_k \sum_{k'} \hat{P}_k \hat{P}_{k'} \delta_{k,-k'}$$

$$\sum_n \hat{P}_n^2 = \sum_k \hat{P}_k \hat{P}_{-k} = \sum_k \hat{P}_k \hat{P}_k^+$$

De même on a :

$$\hat{q}_{n+1} - \hat{q}_n = \sum_k \hat{Q}_k (f_k^{(n+1)*} - f_k^{n*})$$

$$f_k^{n+1} = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{-ik(n+1)a} = e^{-ika} \frac{1}{\sqrt{N}} e^{-ikna} = e^{-ika} f_k^n$$

$$f_k^{(n+1)*} = e^{ika} f_k^{n*}$$

$$\hat{q}_{n+1} - \hat{q}_n = - \sum_k \hat{Q}_k f_k^{n*} (1 - e^{ika})$$

$$\sum_n (\hat{q}_{n+1} - \hat{q}_n)^2 = \sum_n \sum_k \sum_{k'} \hat{Q}_k f_k^{n*} (1 - e^{ika}) \hat{Q}_{k'} f_{k'}^{n*} (1 - e^{ik'a})$$

$$\sum_n (\hat{q}_{n+1} - \hat{q}_n)^2 = \sum_n \sum_k \sum_{k'} \hat{Q}_k f_{k'}^{n*} f_{-k}^n (1 - e^{ika}) (1 - e^{ik'a}) \hat{Q}_{k'}$$

$$\sum_n (\hat{q}_{n+1} - \hat{q}_n)^2 = \sum_k \sum_{k'} \hat{Q}_k \hat{Q}_{k'} \delta_{k,-k'} (1 - e^{ika}) (1 - e^{ik'a})$$

$$\sum_n (\hat{q}_{n+1} - \hat{q}_n)^2 = \sum_k \hat{Q}_k \hat{Q}_{-k} (1 - e^{ika}) (1 - e^{-ika})$$

$$\sum_n (\hat{q}_{n+1} - \hat{q}_n)^2 = \sum_k \hat{Q}_k \hat{Q}_k^+ (2 - e^{ika} - e^{-ika})$$

$$\sum_n (\hat{q}_{n+1} - \hat{q}_n)^2 = 2 \sum_k (1 - \cos ka) \hat{Q}_k \hat{Q}_k^+$$

D'où :

$$\hat{H} = \sum_k \left\{ \frac{1}{2m} \hat{P}_k \hat{P}_k^+ + C(1 - \cos ka) \hat{Q}_k \hat{Q}_k^+ \right\}$$

On a donc bien : $\hat{H} = \sum_k \hat{H}_k$

$$\hat{H}_k = \frac{1}{2m} \hat{P}_k \hat{P}_k^+ + C(1 - \cos ka) \hat{Q}_k \hat{Q}_k^+$$

5. Dans le cas particulier $k = 0$ on a $\hat{Q}_\circ = \hat{Q}_\circ^+$ et $\hat{P}_\circ = \hat{P}_\circ^+$ et aussi $\cos ka = 1$

De sorte

$$\hat{H}_\circ = \frac{1}{2m} \hat{P}_\circ \hat{P}_\circ^+$$

De plus on a : $f_\circ^n = \frac{1}{\sqrt{N}}$ d'où l'on déduit que :

$$\hat{Q}_\circ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N \hat{q}_n \text{ et } \hat{P}_\circ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N \hat{p}_n$$

Or la position \hat{X} du centre de masse de la chaîne est donnée par :

$$\hat{X}_G = \frac{m \sum_{n=1}^N \hat{q}_n}{Nm} = \frac{\sum_{n=1}^N \hat{q}_n}{N} = \frac{1}{\sqrt{N}} \hat{Q}_\circ$$

L'impulsion totale \hat{P} de la chaîne est donnée par :

$$\hat{P} = \sum_n \hat{p}_n = \sqrt{N} \hat{P}_\circ$$

Donc \hat{Q}_\circ correspond à un facteur \sqrt{N} près à la position \hat{X}_G du centre de masse de la chaîne et \hat{P}_\circ correspond au facteur \sqrt{N} près à l'impulsion totale \hat{P} de la chaîne de masse totale (Nm).

L'hamiltonien \hat{H}_\circ représente l'énergie cinétique du centre de masse de la chaîne

$$\hat{H}_\circ = \frac{1}{2Nm} \hat{P}^2 = \frac{N \hat{P}_\circ^2}{2Nm} = \frac{\hat{P}_\circ^2}{2m}$$

Le mode $k = 0$ décrit une translation uniforme de la chaîne

6. Les degrés de liberté intérieurs du système sont donnés par $k \neq 0$, les modes correspondants décrivent les excitations du système

On a aussi les observables : $\hat{\mathcal{E}}_k^+ = \hat{\mathcal{E}}_k$ et $\hat{\pi}_k^+ = \hat{\pi}_k$ pour calculer $[\hat{\mathcal{E}}_k, \hat{\pi}_k]$ on calcule d'abord :

$$\frac{1}{4} [\hat{Q}_k + \hat{Q}_k^+, \hat{P}_{k'} + \hat{P}_{k'}^+] = \frac{1}{4} [\hat{Q}_k + \hat{Q}_{-k}, \hat{P}_{k'} + \hat{P}_{-k'}] = -\frac{i\hbar}{2} (\delta_{k,-k'} + \delta_{k,k'})$$

$$\frac{1}{4} [\hat{P}_k - \hat{P}_k^+, \hat{Q}_{k'} - \hat{Q}_{k'}^+] = \frac{1}{4} [\hat{P}_k - \hat{P}_{-k}, \hat{Q}_{k'} - \hat{Q}_{-k'}] = -\frac{i\hbar}{2} (\delta_{k,-k'} - \delta_{k,k'})$$

On trouve $[\hat{\mathcal{E}}_k, \hat{\pi}_k] = i\hbar \delta_{k,-k'}$ les observables $\hat{\mathcal{E}}_k$ et $\hat{\pi}_k$ sont donc des variables conjugués.

En inversant les équations de définition de $\hat{\mathcal{E}}_k$ et $\hat{\pi}_k$ on trouve compte tenu de $\Omega_k = \Omega_{-k}$

$$\hat{\mathcal{E}}_k = \frac{1}{2} \left\{ (\hat{Q}_k + \hat{Q}_k^+ + \frac{i}{m\Omega_k} (\hat{P}_k - \hat{P}_k^+)) \right\}$$

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{E}}_{-k} &= \frac{1}{2} \left\{ (\hat{Q}_k^+ + \hat{Q}_k - \frac{i}{m\Omega_k} (\hat{P}_k - \hat{P}_k^+)) \right\} \\
\hat{Q}_k + \hat{Q}_k^+ &= \hat{\mathcal{E}}_k + \hat{\mathcal{E}}_{-k} \\
\hat{P}_k - \hat{P}_k^+ &= -im\Omega_k (\mathcal{E}_k - \hat{\mathcal{E}}_{-k}) \\
\hat{\pi}_k &= \frac{1}{2} \{ (\hat{P}_k + \hat{P}_k^+) + im\Omega_k (\hat{Q}_k - \hat{Q}_k^+) \} \\
\hat{\pi}_{-k} &= \frac{1}{2} \{ (\hat{P}_{-k} + \hat{P}_{-k}^+) + im\Omega_k (\hat{Q}_{-k} - \hat{Q}_{-k}^+) \} = \frac{1}{2} \{ (\hat{P}_k^+ + \hat{P}_k) - im\Omega_k (\hat{Q}_k - \hat{Q}_k^+) \} \\
\hat{Q}_k &= \frac{1}{2} \left\{ (\hat{\mathcal{E}}_k + \hat{\mathcal{E}}_{-k}) - \frac{i}{m\Omega_k} (\hat{\pi}_k - \hat{\pi}_{-k}) \right\} \\
\hat{P}_k &= \frac{1}{2} \{ (\hat{\pi}_k + \hat{\pi}_{-k}) - im\Omega_k (\hat{\mathcal{E}}_k - \hat{\mathcal{E}}_{-k}) \} \\
\hat{Q}_k^+ &= \frac{1}{2} \left\{ (\hat{\mathcal{E}}_k + \hat{\mathcal{E}}_{-k}) + \frac{i}{m\Omega_k} (\hat{\pi}_k - \hat{\pi}_{-k}) \right\} \\
\hat{P}_k^+ &= \frac{1}{2} \{ (\hat{\pi}_k + \hat{\pi}_{-k}) + im\Omega_k (\hat{\mathcal{E}}_k - \hat{\mathcal{E}}_{-k}) \} \\
\hat{H} &= \sum_{k \neq 0} \left(\frac{1}{2m} \hat{\pi}_k^2 + \frac{1}{2} m\Omega_k^2 \hat{\mathcal{E}}_k^2 \right) + \frac{\hat{P}_\circ}{2m}
\end{aligned}$$

Remarque

Le mode $k = \frac{\pi}{a}$ est inclus dans la première zone de Brillouin

Cependant comme :

$$f_{\frac{\pi}{a}}^n = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{-ina\frac{\pi}{a}} = \frac{1}{\sqrt{N}} (-1)^n$$

est réel et

$$\hat{Q}_{\frac{\pi}{a}}^+ = \hat{Q}_{\frac{\pi}{a}}, \hat{P}_{\frac{\pi}{a}}^+ = \hat{P}_{\frac{\pi}{a}}, \hat{\mathcal{E}}_{\frac{\pi}{a}} = \hat{Q}_{\frac{\pi}{a}} \text{ et } \hat{\pi}_{\frac{\pi}{a}} = \hat{P}_{\frac{\pi}{a}}$$

L'hamiltonien se présente sous la forme d'une somme d'hamiltoniens d'oscillateurs harmoniques indépendants à une dimension de pulsation Ω_k pour $k \neq 0$ et d'un hamiltonien de particule libre. Les modes $k \neq 0$ décrivent donc des vibrations harmoniques du système.

Dans la première zone de Brillouin on obtient le graphe suivant pour Ω_k

Dans l'expression de l'hamiltonien le dernier terme représente l'énergie cinétique de translation du centre de masse a pour valeur $\frac{P_\circ^2}{2m}$ où $\sqrt{N}P_\circ$ est l'impulsion totale de la chaîne. Les hamiltoniens correspondants aux modes $k \neq 0$ ont pour valeurs propres $(n_k + \frac{1}{2})\hbar\Omega_k$ où les n_k sont des entiers positifs ou nuls. On a donc :

$$E = \frac{P_\circ^2}{2m} + \sum_{k \neq 0} (n_k + \frac{1}{2})\hbar\Omega_k$$

Où la somme sur k est étendue sur la première zone de Brillouin excepté $k = 0$.

7. D'après le théorème d'Ehrenfest on a \hat{Q}_k ne dépendant pas explicitement du temps :

$$\frac{d}{dt}Q_k(t) = \frac{1}{i\hbar} \langle \psi(t) | [\hat{Q}_k, \hat{H}] | \psi(t) \rangle$$

$$[\hat{Q}_k, \hat{H}] = \frac{i\hbar}{m} \hat{P}_k$$

$$\frac{d}{dt}Q_k(t) = \frac{1}{m} \langle \psi(t) | \hat{P}_k | \psi(t) \rangle$$

De même compte tenu de $\Omega_k^2 = \frac{4C}{m} \sin \frac{ka^2}{2}$

$$\langle \psi(t) | \frac{d}{dt} \hat{P}_k(t) | \psi(t) \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle \psi(t) | [\hat{P}_k, \hat{H}] | \psi(t) \rangle = im\hbar\Omega_k^2 \hat{Q}_k$$

$$\frac{d^2}{dt^2}Q_k(t) = \frac{1}{m} \left(-\frac{im\hbar}{i\hbar} \Omega_k^2 \langle \psi(t) | \hat{Q}_k | \psi(t) \rangle \right) = -\Omega_k^2 Q_k(t)$$

$$\left(\frac{d^2}{dt^2} + \Omega_k^2 \right) Q_k(t) = 0$$

Qui a pour solution générale :

$$Q_k(t) = \alpha_k e^{-i\Omega_k t} + \beta_k e^{i\Omega_k t}$$

En posant $\omega = \Omega_k$ cependant on a aussi :

$$\langle \psi(t) | \hat{Q}_k^+ | \psi(t) \rangle = Q_k^*(t) = \langle \psi(t) | \hat{Q}_{-k} | \psi(t) \rangle$$

et $\Omega_k = \Omega_{-k}$

$$Q_k(t) = \alpha_{-k} e^{-i\Omega_k t} + \beta_{-k} e^{i\Omega_k t} = \alpha_k^* e^{i\Omega_k t} + \beta_k^* e^{-i\Omega_k t}$$

$\beta_{-k} = \alpha_k^*$

$$Q_k(t) = \alpha_k e^{-i\Omega_k t} + \alpha_{-k}^* e^{i\Omega_k t}$$

Remarque

dans la cas particulier $k = \frac{\pi}{a}$ on a vu que $\hat{Q}_{\frac{\pi}{a}}$ est hermitique sa valeur moyenne est donc réelle $Q_{\frac{\pi}{a}}(t) = Q_{\frac{\pi}{a}}^*(t)$ On a alors $\beta_{\frac{\pi}{a}} = \alpha_{\frac{\pi}{a}}^*$ c'est à dire :

$$Q_{\frac{\pi}{a}}(t) = \alpha_{\frac{\pi}{a}} e^{-i\Omega_{\frac{\pi}{a}} t} + \alpha_{\frac{\pi}{a}}^* e^{i\Omega_{\frac{\pi}{a}} t}$$

La valeur moyenne du déplacement est alors :

$$q_n(t) = \langle \psi(t) | \hat{q}_n | \psi(t) \rangle = \sum_k \langle \psi(t) | \hat{Q}_k | \psi(t) \rangle f_k^{n*}$$

$$q_n(t) = \sum_k \{ \alpha_k e^{-i\Omega_k t} f_k^{n*} + \alpha_{-k}^* e^{i\Omega_k t} f_k^{n*} \}$$

$$q_n(t) = \sum_k \{ \alpha_k e^{-i\Omega_k t} f_k^{n*} + \alpha_{-k}^* e^{i\Omega_{-k} t} f_{-k}^n \}$$

$$q_n(t) = \sum_k \{ \alpha_k e^{-i\Omega_k t} f_k^{n*} + \alpha_k^* e^{i\Omega_k t} f_k^n \}$$

car $f_k^{n*} = f_{-k}^n$ et $\Omega_k = \Omega_{-k}$

$$q_n(t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \{ \alpha_k e^{i(kx_n - \Omega_k t)} + \alpha_k^* e^{-i(kx_n - \Omega_k t)} \}$$

En prenant $\alpha_k = a_k + ib_k$ et en prenant $(kx_n - \Omega_k t) = g_{kn}$

$$q_n(t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \{ (a_k + ib_k)(\cos g_{kn} + i \sin g_{kn}) + (a_k - ib_k)(\cos g_{kn} - i \sin g_{kn}) \}$$

$$q_n(t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k 2 \{ a_k \cos g_{kn} - b_k \sin g_{kn} \}$$

$$\Re \sum_k \{ \alpha_k e^{i(kx_n - \Omega_k t)} \} = \Re \sum_k \{ (a_k + ib_k)(\cos g_{kn} + i \sin g_{kn}) \}$$

$$\Re \sum_k \{ \alpha_k e^{i(kx_n - \Omega_k t)} \} = \sum_k \{ (a_k \cos g_{kn} - b_k \sin g_{kn}) \}$$

$$q_n(t) = \frac{2}{\sqrt{N}} \Re \sum_k \{ \alpha_k e^{i(kx_n - \Omega_k t)} \} = \Re \sum_k \frac{2\alpha_k}{\sqrt{N}} e^{i(kx_n - \Omega_k t)}$$

$$\varphi_k = \frac{2\alpha_k}{\sqrt{N}}$$

$$q_n(t) = \frac{2}{\sqrt{N}} \Re \sum_k \{ \alpha_k e^{i(kx_n - \Omega_k t)} \} = \Re \sum_k \varphi_k e^{i(kx_n - \Omega_k t)}$$

8. La condition imposée est $\lambda = \frac{2\pi}{|k|} \gg a$ il en résulte $|k|a \ll 2\pi$, on a alors approximativement

$$\Omega_k = 2\sqrt{\frac{C}{m}} \left| \sin \frac{ka}{2} \right| \simeq \sqrt{\frac{C}{m}} a |k| = -v|k|$$

avec $v = a\sqrt{\frac{C}{m}}$

Si dans le paquet d'ondes n'interviennent que de faibles valeurs de k (de même signe positives par exemple) on a :

$$q_n(t) = \sum_{\frac{n\pi}{a} \gg k > 0} \varphi_k e^{ik(x_n - vt)} + \text{Complexe conjugué} = g\left(t - \frac{x_n}{v}\right)$$

$$q_n(t) = g(t) \text{ et } q_n(t) = g_\circ\left(t - \frac{x_n}{v}\right)$$

Si λ est de l'ordre de a , la vitesse de propagation est alors donnée par la vitesse de groupe :

$$v = \frac{d\Omega_k}{dk}$$

En particulier on voit sur le graphe de Ω_k qu'aux limites de la première zone de Brillouin, c'est à dire pour $k = \pm \frac{\pi}{a}$ ou ($\lambda \simeq 2a$) on a $v = 0$ et il n'y a plus de propagation de l'onde élastique

9. La vitesse du son dans réseau cristallin est alors :

$$v = 5.10^{-10} \sqrt{10.10^{25}} = 5.10^3 m/s$$

N.B

$$\Omega_k = 2\sqrt{\frac{C}{m}} \sin \frac{ka}{2}$$

$$v = \frac{d\Omega_k}{dk} = a\sqrt{\frac{C}{m}} \cos \frac{ka}{2}$$

pour $\frac{ka}{2} \ll \pi$ on a $v \simeq a\sqrt{\frac{C}{m}}$

pour $\frac{ka}{2} = \pm\pi$ on a $v = 0$