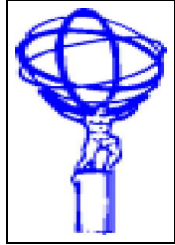




**FACULTE DES SCIENCES AIN CHOCK**  
**B.P.5366 MAARIF -CASABLANCA-**  
**MAROC**  
**TEL : 212-2-23-06-80/84**  
**FAX : 212-2-23-06-74**



Pôle de compétences  
POLYCOPIÉ DE MÉCANIQUE QUANTIQUE -P4-

Année De 1998 à 2004

Abdeslam Hoummada

28 novembre 2008

# Table des matières

<b>1</b>	<b>Avertissement</b>	<b>5</b>
<b>2</b>	<b>Naissance de la théorie Quantique</b>	<b>6</b>
2.1	INTRODUCTION - NOTIONS DE BASE . . . . .	6
2.2	Enigme du corps noir (Planck 1900) . . . . .	6
2.2.1	caractère corpusculaire de la lumière . . . . .	7
2.2.2	Effet Photoélectrique . . . . .	7
2.2.3	Effet Compton . . . . .	9
2.2.4	Théorie Semi-Quantique de l'Atome de Bohr . . . . .	11
<b>3</b>	<b>TRAVAUX DIRIGES : OSCILLATEUR HARMONIQUE</b>	<b>13</b>
3.1	Oscillateur harmonique . . . . .	13
3.1.1	Problème I : Interaction electron - champ électromagnétique . . . . .	13
3.1.2	Oscillateur harmonique - Interaction dipolaire électrique . . . . .	15
3.1.3	Oscillateurs couplés . . . . .	16
3.1.4	Modèle nucléaire collectif -Moments quadrupolaire et d'inertie- . . . . .	19
3.1.5	Oscillateur déformé . . . . .	20
3.2	Oscillateur harmonique à une dimension . . . . .	21
3.2.1	Notions de base : . . . . .	21
3.2.2	Oscillateurs harmoniques couplés . . . . .	22
3.3	Théorie des perturbations . . . . .	23
3.3.1	Perturbation anharmonique . . . . .	23
3.4	Moment cinétique . . . . .	25
3.4.1	Résonance Paramagnétique Electronique . . . . .	25
3.4.2	Théorème de projection . . . . .	26
3.4.3	Opérateurs Vectoriels . . . . .	26
3.4.4	Rapport gyromagnétique . . . . .	27
3.4.5	Composition de moments cinétiques - Coefficients de Clebsch-Gordan . . . . .	27
3.4.6	Facteur de Landé et théorème de projection . . . . .	27
3.4.7	Effet Zeeman - Transitions optiques . . . . .	28
3.4.8	Interaction quadrupolaire . . . . .	29
3.4.9	Interaction moment-champ magnétique . . . . .	30
3.5	Resonance Magnétique . . . . .	30
3.5.1	Symétrie cristalline . . . . .	30
3.6	Valeurs propres et vecteurs propres de spin . . . . .	31

3.6.1	Exercice-1. . . . .	31
3.6.2	solution . . . . .	31
3.7	Exercice -2 . . . . .	32
3.7.1	solution . . . . .	32
3.7.2	Exercice - 3 : . . . . .	34
3.7.3	solution . . . . .	34
3.8	Moment cinétique et Rotation . . . . .	35
3.8.1	Opérateur de rotation . . . . .	35
3.8.2	résonance magnétique . . . . .	35
3.8.3	Moments cinétiques couplés . . . . .	36
3.9	Oscillateur harmonique à une dimension . . . . .	37
3.9.1	Notions de base : . . . . .	37
3.9.2	Oscillateurs harmoniques couplés . . . . .	37
3.10	Théorie des perturbations . . . . .	38
3.10.1	Perturbation anharmonique . . . . .	39
3.10.2	Interaction électron-champ radiant . . . . .	40
3.11	Méthode WKB et méthode des variations . . . . .	40
3.11.1	Niveau d'énergie du potentiel $V(X) = V_0 x $ . . . . .	40
3.11.2	Niveaux d'énergie dans un champ gravitationnel . . . . .	40
3.12	Effet stark et polarisabilité . . . . .	41
3.13	Perturbations dépendantes du temps-transitions . . . . .	42
<b>4</b>	<b>Diffusion par un centre de force</b> . . . . .	<b>43</b>
4.1	Approximation de Born . . . . .	43
4.2	Section efficace par la règle d'or de Fermi . . . . .	43
4.3	Probleme : calcul des déphasages . . . . .	43
4.4	Compléments du cours de deuxième année . . . . .	44
4.4.1	Équation de continuité . . . . .	44
4.4.2	Solution . . . . .	44
4.5	Système de plusieurs particules . . . . .	45
4.5.1	Problème : Etoile à neutrons . . . . .	45
4.5.2	Gaz d'électrons . . . . .	46
4.6	Problèmes difficiles . . . . .	46
4.6.1	diffusion des neutrons sur la molécule d'hydrogène . . . . .	46
4.6.2	WKB . . . . .	47
4.6.3	Diffusion par un centre de force . . . . .	48
4.7	Problèmes : Niveau D.E.S.A. . . . .	48
4.7.1	Impuretés de Cobalt dans $MgF_2$ . . . . .	48
4.8	Solutions . . . . .	50
4.8.1	solution : modèle nucléaire collectif - moments quadrupolaire et d'inertie . . . . .	50
4.9	Transformations canoniques . . . . .	52
4.9.1	Rotation . . . . .	52
4.9.2	Translation . . . . .	53

<b>5</b>	<b>COURS : L'OSCILLATEUR HARMONIQUE ISOTROPE</b>	<b>55</b>
5.1	Oscillateur à une dimension . . . . .	55
5.2	Oscillateur à une dimension en notation de Dirac . . . . .	56
5.2.1	Spectre de N . . . . .	57
5.3	Oscillateur harmonique à p dimensions . . . . .	59
5.4	Oscillateur harmonique à 3 dimensions . . . . .	60
5.5	Mouvement de particules dans un champ de forces centrales . . . . .	61
5.5.1	Séparation des variables . . . . .	61
5.5.2	Developpement de l'onde plane . . . . .	63
5.5.3	Mouvement d'une particule dans un puits carré . . . . .	63
5.5.4	Oscillateur harmonique sphérique symétrique . . . . .	65
<b>6</b>	<b>DEVOIR DE MÉCANIQUE QUANTIQUE -P4-</b>	<b>68</b>
6.1	I - Oscillateur harmonique - notions de base . . . . .	68
6.2	A - Formulation quantique de l'oscillateur harmonique . . . . .	68
6.3	Vibrations d'une chaîne linéaire d'atomes . . . . .	69
6.3.1	<b>Modes propres de vibration de deux oscillateurs harmoniques à une dimension couplés</b> . . . . .	70
6.4	<b>Vibrations élastiques d'une chaîne linéaire d'atomes</b> . . . . .	71
<b>7</b>	<b>Solution du devoir</b>	<b>75</b>
7.1	Vibrations d'une chaîne linéaire d'atomes . . . . .	75
7.1.1	Modes propres de vibration de deux oscillateurs harmoniques à une dimension . . . . .	75
7.2	Deuxième partie . . . . .	76
<b>8</b>	<b>Moment cinétique</b>	<b>83</b>
8.1	Composition de moments cinétique . . . . .	83
<b>9</b>	<b>THEORIE DES PERTURBATIONS</b>	<b>86</b>
9.1	Perturbations stationnaires-cas non dégénéré . . . . .	86
9.1.1	Correction à l'ordre 1 . . . . .	87
9.1.2	Correction à l'ordre 1 du vecteur propre . . . . .	87
9.1.3	Correction à l'ordre 2 de l'énergie . . . . .	88
9.2	Problème : effet zeeman anormal et interaction dipolaire . . . . .	88
9.3	Calcul des perturbations pour les problemes dependants du temps . . . . .	89

# Chapitre 1

## Avertissement

Ce polycopié rassemble les travaux dirigés et les examens de mécanique quantique de quatrième année de la faculté des sciences Aïn Chock sur une période de plus de quinze années. Le choix des exercices et des problèmes répond à plusieurs exigences à savoir :

- compléter les connaissances et le programme du DEUG ;
- mettre à disposition des étudiants un support de travaux dirigés et de complément de cours ;
- les exercices corrigés ne sont pas traités en séance de travaux dirigés, les solutions proposées pour ces exercices sont des indications pour traiter les problèmes plus généraux
- encourager les étudiants au travail en groupe ;
- donner la possibilité aux étudiants de se mettre à niveau au cours des vacances d'été.
- ce document contient aussi des problèmes de D.E.S.A qui ont pour but de montrer aux étudiants désireux de poursuivre des études de troisième cycle les prérequis nécessaires.
- ce document remis à jour annuellement permet de capitaliser les efforts fournis annuellement pour élaborer les examens et les travaux dirigés.
- distribué dès le début de l'année aux étudiants il leur permet de préparer à l'avance les séances de travaux dirigés et de cours.
- ce document est installé sur le site web du pôle de compétences RUPHE ([http : ://196.200.164.170/cours/](http://196.200.164.170/cours/)) depuis 1999 Il est accessible à toutes les universités Marocaines et étrangères
- la bibliographie donnée à la fin du polycopié est disponibles à la faculté, certains ouvrages personnels peuvent être consultés par les étudiants au Laboratoire de Physique Nucléaire.

Ce document est corrigé annuellement par les étudiants, il peut persister encore quelques erreurs de frappe, vous êtes invités à les communiquer à l'adresse ci dessous.

Je tiens à remercier tous les étudiants qui ont ontribué de près ou de loin à son élaboration.

Pour toutes remarques ou suggestions prière de contacter :a.hoummada@fsac.ac.ma ou hoummada@cern.ch.

# Chapitre 2

## Naissance de la théorie Quantique

### 2.1 INTRODUCTION - NOTIONS DE BASE

William Thomson declara vers la fin du 19<sup>ieme</sup> siècle :

**la Science Physique forme aujourd'hui pour l'essentiel, un ensemble parfaitement harmonieux, un ensemble pratiquement achevé !.**

1865 Maxwell unifie l'électricité et le magnétisme : **Electromagnétisme**

Néanmoins il restait deux désaccords :

- Expérience de Michelson-Morley : Naissance de la relativité.
- Désaccord entre l'expérience et la loi de Rayleigh-Jeans.

### 2.2 Enigme du corps noir (Planck 1900)

Soit une enceinte maintenue à une température uniforme T. Les parois internes de cette enceinte emettent et absorbent du rayonnement thermique, c'est à dire électromagnétique, on fini atteindre un état stationnaire d'équilibre dans lequel les échanges entre la matière et le rayonnement se compensent.

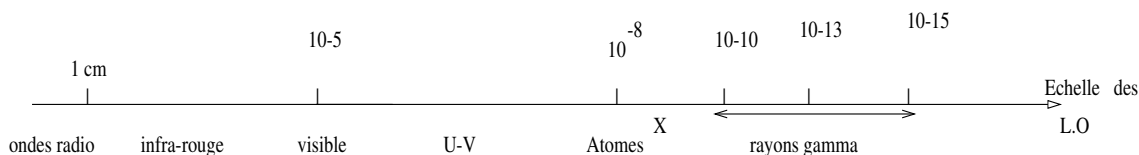


FIG. 2.1 – Echelle des Longueurs d'ondes

La densité d'énergie ( $U_\nu$ ) par intervalle de fréquence est donnée par la loi de Rayleigh-Jeans :

$$U_\nu = \frac{8\pi\nu^2 KT}{c^3}$$

$$U(T) = \int_0^\infty U_\nu(T) d\nu = \frac{8\pi KT}{c^3} \int_0^\infty \nu^2 d\nu = \infty$$

$U(\nu, T) \rightarrow \infty$  **C'est la catastrophe ultra-violette**

En prenant  $\overline{E}_\nu = KT$  énergie moyenne des résonnateurs électriques de matière.

Loi de R-J : l'énergie rayonnée est proportionnelle à T. Elle est conforme aux observations expérimentales pour les basses températures.

Pour les grandes valeurs du quotient  $\frac{\nu}{T}$ , la loi de Rayleigh-Jeans perd sa validité et cède la place à la loi de Wien :

$$U(\nu, T) = A\nu^3 \cdot \exp\left(\frac{-B\nu}{T}\right)$$

## 2.2.1 caractère corpusculaire de la lumière

Une nouvelle Hypothèse : **Hypothèse des quantas de M. Planck** :

**Chaque résonnateur ne peut absorber ou émettre de l'énergie radiante que par quantités finies discrètes égales à  $h\nu$**

$$E_\nu = nh\nu \text{ avec } h = 6.62610^{-34} \text{ Joules.Secondes}$$

,  $h$  étant une nouvelle constante ayant la dimension d'une action (énergie  $\otimes$  temps)

Dans la statistique de Boltzmann, à l'état d'équilibre, la valeur  $E_\nu$  pour l'énergie du résonnateur apparaît avec la probabilité relative  $\exp\left(-\frac{E_\nu}{KT}\right)$

$$\overline{E}_\nu = \frac{\int_0^\infty E_\nu \exp\left(-\frac{E_\nu}{KT}\right) dE_\nu}{\int_0^\infty \exp\left(-\frac{E_\nu}{KT}\right) dE_\nu} = KT$$

Dans le calcul précédent il faut remplacer :  $\int_0^\infty$  par  $\sum_{n=0}^\infty$  et  $E_\nu = nh\nu$

$$\overline{E} = \frac{\sum_{n=0}^\infty [nh\nu] \exp\left(-\frac{nh\nu}{KT}\right)}{\sum_{n=0}^\infty \exp\left(-\frac{nh\nu}{KT}\right)} = \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{KT}} - 1}$$

Cette expression se réduit à  $KT$  pour les petites valeurs de  $\frac{\nu}{T}$

$$U(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^3 h}{c^3} \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{KT}} - 1}$$

C'est la loi de répartition spectrale de Planck

–  $\frac{\nu}{T}$  Petit  $\rightarrow U(\nu, T) \rightarrow$  Loi de R-J  $U_\nu = \frac{8\pi\nu^2 KT}{c^3}$

–  $\frac{\nu}{T}$  Grand  $\rightarrow U(\nu, T) \rightarrow$  Loi de Wien  $U(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^3 h}{c^3} e^{-\frac{h\nu}{KT}}$

## 2.2.2 Effet Photoélectrique

On constate :

- Il existe un seuil en fréquence  $\nu_0$  pour l'émission des électrons ce seuil dépend de la nature du métal.
- l'effet est instantané.
- L'énergie cinétique des électrons émis :  $E_{max} = C\nu + D$  indépendante de l'intensité du rayonnement.
- $i = k\Phi$  L'intensité du courant est proportionnelle au flux lumineux (intensité du rayonnement)

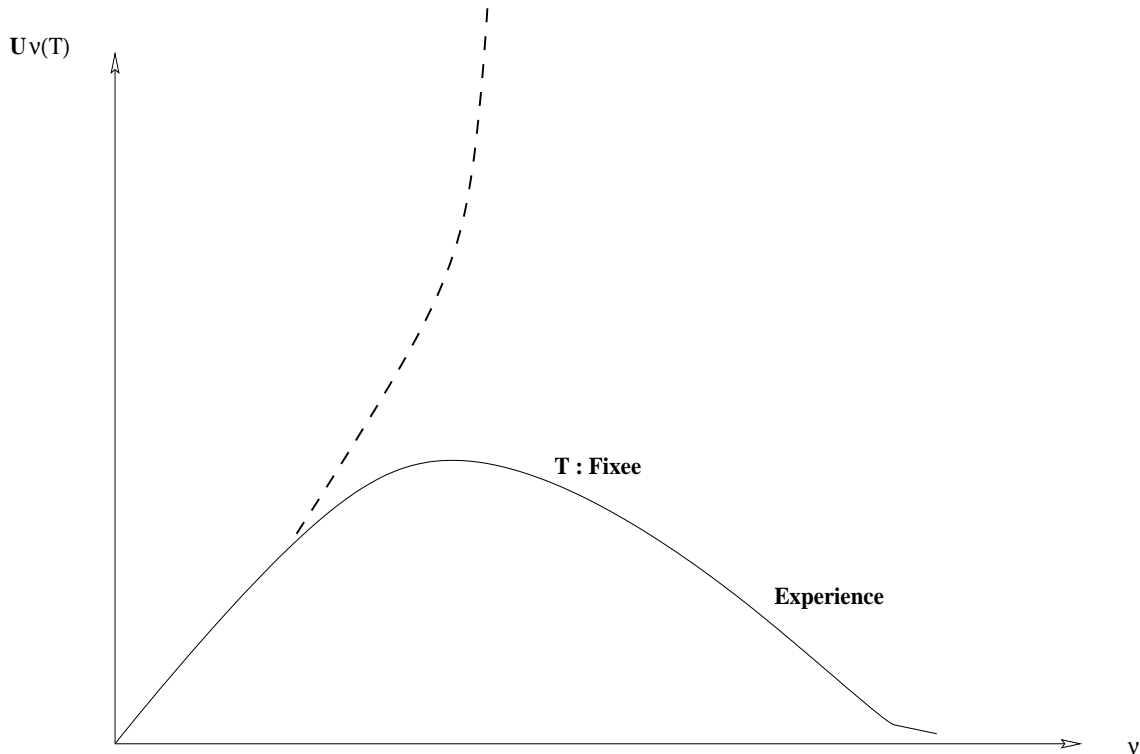


FIG. 2.2 – Loi de répartition spectrale de Planck

Ces observations sont inexplicables si classiquement on suppose l'énergie est distribuée d'une manière continue dans l'onde incidente. En effet l'émission serait retardée,  $E_{max} = f(\Phi)$ .

Expérience de Leonard (1902)

### Interpretation d'Einstein (1905) :

- Interprétation en généralisant l'hypothèse de Planck, non seulement les échanges sont quantifiés, mais aussi l'énergie des particules.
- hypothèse : l'énergie du champ électromagnétique est quantifiée.
- la lumière est constituée de grains : Les photons dont l'énergie est proportionnelle à la fréquence.
- Quelle que soit la distance parcourue par la lumière, celle-ci se présente sous forme de corpuscules d'énergie  $E_\gamma = h\nu$ .

Lorsqu'un photon heurte un électron du métal, il peut lui céder toute son énergie et s'annihiler. l'électron sort du métal si son énergie  $E_e = h\nu$  est supérieure à son énergie de liaison  $W$  dans le métal d'où :

- l'existence d'un seuil  $h\nu - W > 0 \rightarrow \nu > \nu_0 = \frac{W}{h}$
- l'émission est instantanée
- $E_{max} = h\nu - W$  énergie cinétique ( $h\nu = W + \frac{1}{2}mv^2$ )
- $i = k\Phi$

La constante  $W$  est caractéristique du métal. la constante  $h$  a bien la même valeur que celle déterminée par Planck dans l'expression du spectre du rayonnement du corps noir.

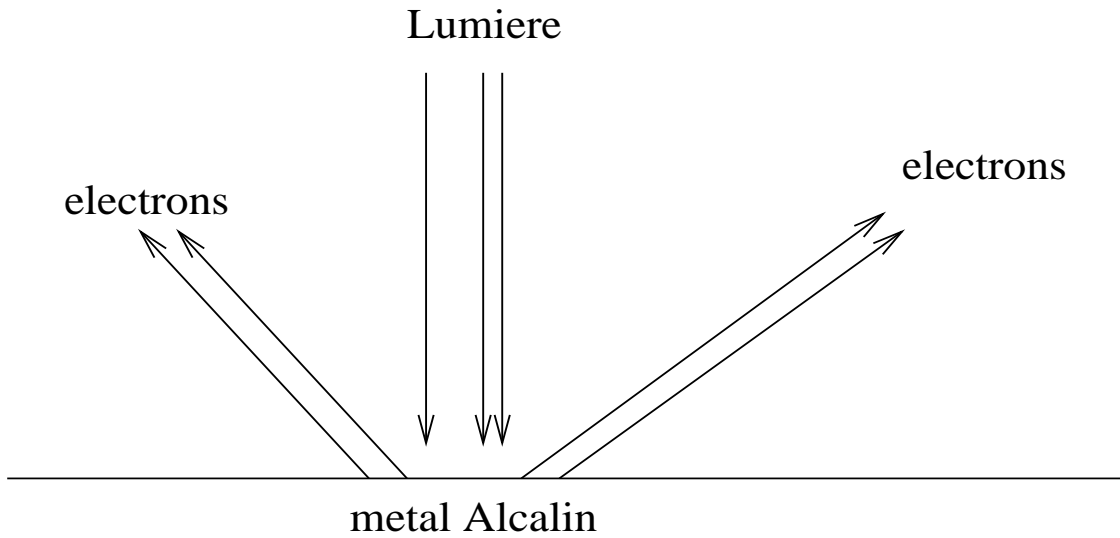


FIG. 2.3 – Effet Photoelectrique

### 2.2.3 Effet Compton

1923 par Compton

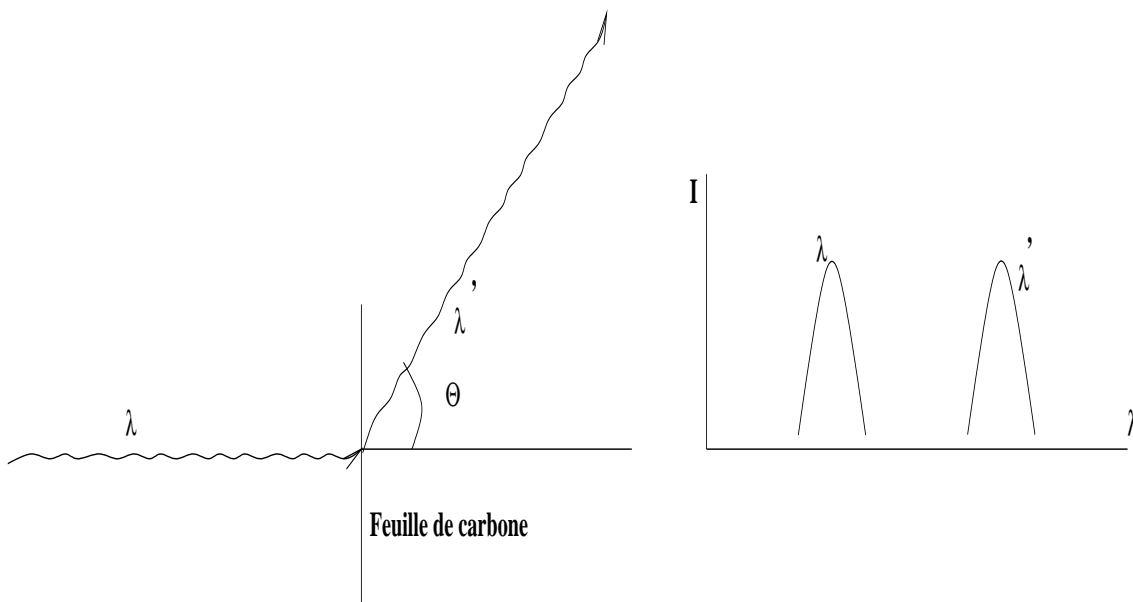


FIG. 2.4 – Effet Compton

$$\Delta = \lambda' - \lambda_0 = 2\lambda_0 \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)$$

$\lambda_0 = \frac{h}{mc} = 0.0242\text{\AA}$  est la longueur d'onde dite de Compton

L'effet Compton est une autre confirmation de la théorie du photon au détriment de la théorie ondulatoire.

Echec de l'interprétation classique

Le rayonnement de fréquence  $\nu'$  demeure inexpliqué car les ondes incidentes de fréquence  $\nu$  font osciller les électrons à la fréquence  $\nu$  qui réémettent des ondes de fréquence  $\nu$ .

### Interprétation de Compton

Le rayonnement incident est constitué de photons, dotés non seulement de l'énergie  $E = h\nu$  mais aussi de l'impulsion  $p = \frac{E}{c} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}$

$$E = h\nu \quad \Rightarrow \quad p = \frac{E}{c} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}$$

$$\gamma + e \quad \Rightarrow \quad \gamma' + e$$

Dans l'hypothèse d'Einstein on pour les photons  $E = pc$

Considérons une onde lumineuse plane monochromatique :

$$\psi = \exp\left[2\pi i \left(\frac{\vec{u} \cdot \vec{r}}{\lambda} - \nu.t\right)\right]$$

On introduit la fréquence circulaire ou pulsation :  $\omega = 2\pi\nu$  et le vecteur d'onde  $\vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda} \vec{u}$  de l'onde plane

$$\psi = \exp[i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega.t)]$$

avec  $p = \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{2\pi} \frac{2\pi}{\lambda}$

On écrit ensuite que l'impulsion et l'énergie sont conservées dans la collision photon-électron.

Soient  $\vec{p}$ ,  $\vec{p}'$  les impulsions initiale et finale du photon et  $\vec{p}_e$  l'impulsion de recul de l'électron.

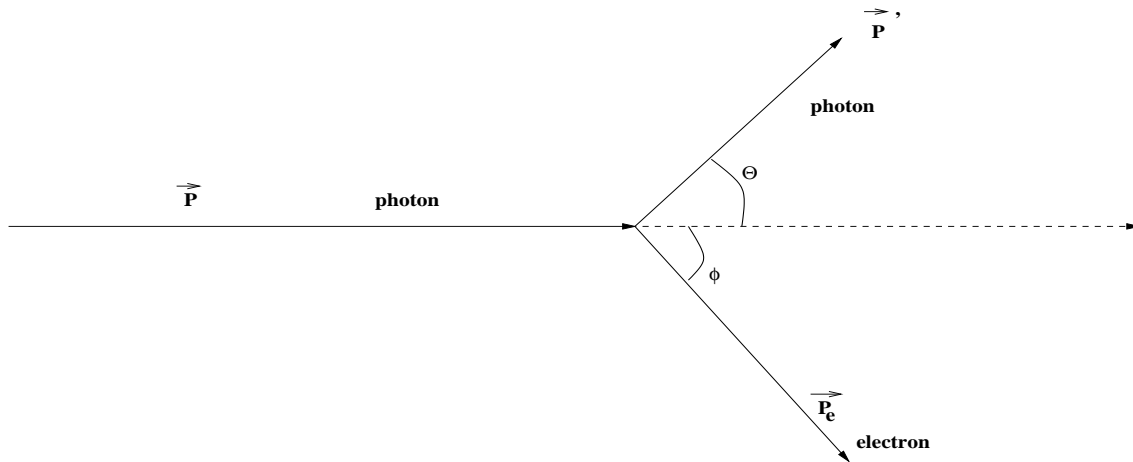


FIG. 2.5 – Conservation de l'impulsion

Conservation de l'impulsion :  $\vec{p} = \vec{p}' + \vec{p}_e$

Conservation de l'énergie :  $E = E' + E_e$

On considère que l'électron est libre ou très peu lié.

$$\frac{h\nu}{c} = \frac{h\nu'}{c} \cos(\theta) + p_e \cos(\phi)$$

$$0 = \frac{h\nu'}{c} \sin(\theta) - p_e \sin(\phi)$$

$$\nu' < \nu \quad \Rightarrow \quad \lambda' > \lambda$$

## 2.2.4 Théorie Semi-Quantique de l'Atome de Bohr

Atomes hydrogénoïdes : Un électron tournant autour du noyau.

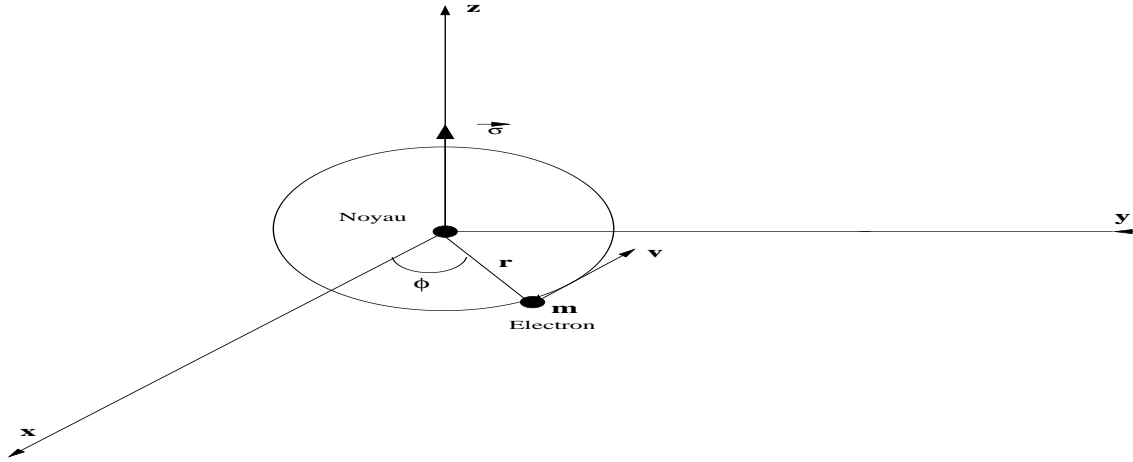


FIG. 2.6 – Atome Hydrogénoïde

L'existence des raies spectrales fines ainsi que la stabilité des atomes sont inexplicables par la théorie classique.

la série de raies spectrales la plus anciennement connue est la série de Balmer émise par l'atome d'hydrogène.

Elle est formée de quatre raies principales.

$$H_\alpha, \lambda_\alpha = 6563 \text{ \AA}, H_\beta, \lambda_\beta = 4861 \text{ \AA}, H_\gamma, \lambda_\gamma = 4340 \text{ \AA}, H_\delta, \lambda_\delta = 4101 \text{ \AA}$$

Balmer (1885) a réussi à trouver la formule empirique suivante qui donne les fréquence de ces raies :

$$\nu_m = R \left[ \frac{1}{4} - \frac{1}{m^2} \right]$$

avec  $m = 3, 4, 5, 6$

et  $R = 109737 \text{ cm}^{-1}$

D'autres séries de raies découvertes postérieurement dans le spectre non-visible de l'H suivent des lois analogues

$$\nu = \frac{1}{\lambda} = R \left[ \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right] = T_n - T_m$$

Avec  $n > m$  et  $T_n$  portent le nom de termes spectraux.

- $n = 1$  Série de Lyman (Ultra-Violet)
- $n = 2$  Série de Balmer (visible)
- $n = 3$  Série de Paschen (infra-rouge)
- $n = 4$  Série de Brackett (ifra-rouge)

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r^2}$$

L'énergie du mouvement s'écrit :

$$E = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r}$$

Moment Cinétique de l'électron :

$$\sigma = rmv = n\hbar \text{ et } \sigma^2 = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} mZe^2 r$$

**principe de combinaison de Ritz :**

La fréquence de toute raie spectrale est égale à la différence de deux termes spectraux  $T_n$  caractéristiques du corps considéré :

$$\nu = T_n - T_m, \quad \nu_{np} = \frac{c}{\lambda_{np}} = cT_n - cT_m = \nu_{nm} - \nu_{pm}$$

# Chapitre 3

## TRAVAUX DIRIGES : OSCILLATEUR HARMONIQUE

### 3.1 Oscillateur harmonique

#### 3.1.1 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  $\omega_z$  est la pulsation propre du mouvement axial de l'électron suivant l'axe  $\vec{oz}$  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  $\vec{oz}$  et parallèle à  $\vec{B}$ . On désigne par  $a_e = \frac{g-2}{2}$  l'anomalie gyromagnétique de  $g$ .

On donne  $\hbar\omega_c = 10^{-3} \text{ eV}$ ,  $\hbar\omega_z = 10^{-3} \text{ eV}$  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  $\Omega^2$  en fonction de  $\omega_c^2$  et  $\omega_z^2$

- (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 :

$$a_z^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha Z - \frac{i}{\alpha \hbar} P_z) \text{ et } a_z = \frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha Z + \frac{i}{\alpha \hbar} P_z), \text{ où } \alpha = \sqrt{\frac{m\omega_z}{\hbar}}.$$

Calculer l'observable nombre de quanta  $N_z = a_z^+ a_z$  ; en déduire que  $H_z = \hbar\omega_z (N_z + \frac{1}{2})$ .

- (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 :

$$H_{xy} = \hbar\omega_c (N_d + \frac{1}{2})$$

- (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  $\beta$  par  $\beta'$  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  $\omega'_c$  et  $\omega_m$  en fonction de  $\omega_c$  et de  $\omega_m$ .
- (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.

### 3.1.2 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  $\psi_n$  perturbées au premier ordre dans la base des fonctions d'onde non perturbées  $\psi_n^o$ .
3. Donner la valeur moyenne du moment dipolaire  $P = -ex$  dans les états  $\psi_n^o$  et  $\psi_n$ , 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  $\tau$  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  $\tau$  et de l'inverse de la pulsation de l'oscillateur  $\frac{1}{\omega_o}$ .

### 3.1.3 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.

#### 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 :

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

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 :  $U_1(X_1, X_2) = \frac{1}{2}C.(X_2 - X_1 - a)^2$  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  $\omega_+$  et  $\omega_-$  dont on donnera les valeurs en fonction de  $\omega$ ,  $C$  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  $\omega_-$  est fonction de  $C$  alors que  $\omega_+$  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  $n^{ieme}$  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 voisines 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, combinons 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  $4\nu$  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 :

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

cette propriété permet de limiter les valeurs de  $k$  qui fournissent des valeurs indépendantes des variables à un domaine (1<sup>ere</sup> zone de brillouin) auquel on se restreindra par la suite :

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

Donner les  $N$  valeurs de  $\nu$  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<sup>ere</sup> 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 :

$$\begin{aligned} \hat{\epsilon}_k &= \frac{1}{2} \left( \hat{Q}_k + \hat{Q}_k^+ \right) + \frac{i}{m\Omega_k} \left( \hat{P}_k + \hat{P}_k^+ \right) \\ \text{et } \hat{\pi}_k &= \frac{1}{2} \left( \hat{P}_k + \hat{P}_k^+ \right) - im\Omega_k \left( \hat{Q}_k - \hat{Q}_k^+ \right) \end{aligned} \quad (3.1)$$

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  $\Omega_k$ , 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  $\Omega_k$ .
  - 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  $\omega$  et la relation entre  $\beta_k$  et  $\alpha_{-k}$ . Montrer que la valeur moyenne  $q_n(t)$  du déplacement  $q_n$  de la  $n^{ième}$  particule peut s'écrire sous la forme d'une superposition d'ondes planes monochromatiques de pulsation  $\Omega$  et de vecteur d'onde  $k$  :

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

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 :

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

### 3.1.4 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  $\omega_0$ .

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  $a$  :

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

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 :

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

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  ${}^8_4\text{Be}$  :

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

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 ?

### 3.1.5 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 :

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2) \quad (3.2)$$

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 :  $N_i = \langle \sum_{i=1}^n (n_i + \frac{1}{2}) \rangle$ ;  $i = (x, y, z)$

1. 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  $\langle R^2 \rangle = \langle \sum_{i=1}^A r_i^2 \rangle$

2. Calculer les énergies cinétiques :  $\langle \frac{P_x^2}{2m} \rangle$ ,  $\langle \frac{P_y^2}{2m} \rangle$ ,  $\langle \frac{P_z^2}{2m} \rangle$ .

3. 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  $\omega_i, i = (x, y, z)$ .

4. 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.
5. 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.
6. 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  $\delta = 0.6$ .
7. 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  $^{20}\text{Ne}$ .

## 3.2 Oscillateur harmonique à une dimension

### 3.2.1 Notions de base :

On utilise les coordonn ées 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 satisfont à  $\eta = 0$  et  $\chi = 0$ .
3. Calculer  $\chi, \bar{\omega}$  et  $\eta$  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  $\chi, \bar{\omega}$  et  $\eta$  seront ils indépendants du temps, comparer  $\Delta P.\Delta Q$  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  $\Delta E$ .

### 3.2.2 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 :

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

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  $\omega_+$  et  $\omega_-$  dont on donnera les valeurs en fonction de  $\omega$ ,  $C$  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  $\omega_-$  est fonction de  $C$  alors que  $\omega_+$  en est indépendant.

### 3.3 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  $\lambda_1$  et  $\lambda_2$  sont des constantes et  $W_1$  et  $W_2$  ont pour expression :

$$W_1 = m\omega^2 xy, W_2 = \hbar\omega \left( \frac{L_z^2}{\hbar^2} - 2 \right) \quad (3.3)$$

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

1. Indiquer les valeurs propres de  $H_o$ , leur degré de dégénérescence et les vecteurs propres associés. Dans la suite du problème on s'intéressera uniquement au deuxième niveau excité de  $H_o$ , 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  $H_o$ .
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  $H_o$ .
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  $H_o$ .
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  $\lambda_1 W_1$ .

#### 3.3.1 Perturbation anharmonique

Une particule de masse  $m$  se déplace sur l'axe  $X$  dans un potentiel harmonique  $V(X) = \frac{m\omega_o^2}{2} X^2$ . 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 :

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

- A-** Calculer, au premier ordre en  $\lambda$ , les fonctions d'onde des états propres perturbés ainsi que les corrections au premier ordre de l'énergie.
3. Quelles sont à l'ordre  $\lambda^2$ , les énergies des trois premiers états.

4. En déduire à l'ordre  $\lambda$  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 expliciter les intégrales).
7. On excite maintenant l'oscillateur à l'aide de la force  $F$ , de fréquence  $\omega$ , 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  $\omega'$ ). Quelle est, en fonction de  $\omega$ , la puissance dissipée par la force  $F$ ? discuter le résultat.

## 3.4 Moment cinétique

### 3.4.1 Résonance Paramagnétique Electronique

On considère un système formé d'un spin électronique  $\vec{S}$  et de deux spin nucléaires  $\vec{I}_1$  et  $\vec{I}_2$ .

On suppose que  $\vec{S}$ ,  $\vec{I}_1$  et  $\vec{I}_2$  sont tous trois de spin  $\frac{1}{2}$ ; l'espace des états du système des trois spins est rapporté à la base orthonormée des huit kets  $|\epsilon_s, \epsilon_1, \epsilon_2\rangle$ , vecteurs propres communs à  $S_z, I_{1z}, I_{2z}$  de valeurs propres respectives  $\frac{\hbar\epsilon_s}{2}, \frac{\hbar\epsilon_1}{2}, \frac{\hbar\epsilon_2}{2}$  (avec  $\epsilon_s = \pm, \epsilon_1 = \pm, \epsilon_2 = \pm$ ), par exemple, le ket  $|+, -, +\rangle$  correspond aux valeurs propres  $+\frac{\hbar}{2}$  pour  $S_z, -\frac{\hbar}{2}$  pour  $I_{1z}, +\frac{\hbar}{2}$  pour  $I_{2z}$ .

1. On commence par négliger tout couplage entre les trois spins. On suppose par contre qu'ils sont plongés dans un champ magnétique uniforme  $\vec{B}$  parallèle à oz. Les facteurs gyromagnétiques de  $\vec{I}_1$  et  $\vec{I}_2$  étant égaux, l'hamiltonien  $H_o$  du système s'écrit :

$$H_o = \Omega.S_z + \omega.I_{1z} + \omega.I_{2z}$$

Où  $\Omega$  et  $\omega$  sont des constantes réelles, positives, proportionnelles à  $|\vec{B}|$ . On suppose  $\Omega > 2\omega$ .

Quelles sont les énergies possibles du système des trois spins et leur degré de dégénérescence ? Tracer le diagramme d'énergie.

2. On tient compte maintenant d'un couplage entre les spins, qui est décrit par l'hamiltonien :

$$W = a\vec{S}.\vec{I}_1 + a\vec{S}.\vec{I}_2$$

Où  $a$  est une constante réelle positive ( le couplage direct entre  $\vec{I}_1$  et  $\vec{I}_2$  est négligeable).

A quelles conditions doivent satisfaire  $\epsilon_s, \epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon'_s, \epsilon'_1, \epsilon'_2$  pour que  $a\vec{S}.\vec{I}_1$  ait un élément de matrice non-nul entre  $|\epsilon_s, \epsilon_1, \epsilon_2\rangle$  et  $|\epsilon'_s, \epsilon'_1, \epsilon'_2\rangle$  ?

Même question pour  $a\vec{S}.\vec{I}_2$ .

3. On suppose que  $a\hbar^2 \ll \hbar\Omega(\hbar\omega)$ , de sorte que  $W$  peut être traité comme une perturbation vis-à-vis de  $H_o$ .

– Quelles sont à l'ordre 1 en  $W$ , les valeurs propres de l'hamiltonien total  $H = H_o + W$  ?  
 – quels sont les états propres de  $H$ , à l'ordre 0 en  $W$  ? Tracer le diagramme d'énergie.

4. Dans le cadre de l'approximation de la question précédente, déterminer les fréquences de Bohr susceptibles d'apparaître dans l'évolution de  $\langle S_x \rangle$  lorsqu'on tient compte du couplage  $W$  entre les spins.

Dans une expérience de R.P.E (Résonance Paramagnétique Electronique), les fréquences des raies de résonance observées sont égales aux fréquences de Bohr précédentes. Quelle est l'allure du spectre R.P.E observé sur le système des trois spins ? Comment peut-on déterminer, à partir de ce spectre, la constante de couplage  $a$  ?

5. On suppose maintenant que le champ magnétique  $\vec{B}$  est nul, de sorte que  $\Omega = \omega = 0$ . L'hamiltonien se réduit alors à  $W$ .

- Soit  $I = I_1 + I_2$  le spin nucléaire total. Quelles sont les valeurs propres de  $I^2$  et leur degré de dégénérescence? Montrer que  $W$  n'a pas d'éléments de matrice entre des états propres de  $I^2$  de valeurs propres différentes.
- Soit  $\vec{J} = \vec{S} + \vec{I}$  le spin total. Quelles sont les valeurs propres de  $J^2$  et leur degré de dégénérescence? Déterminer les valeurs propres de l'énergie du système des trois spins et leur degré de dégénérescence. L'ensemble  $\{J^2, J_z\}$  forme-t-il un E.C.O.C? Même question pour  $\{I^2, J^2, J_z\}$ .

### 3.4.2 Théorème de projection

On considère une particule dont :

- $\vec{L}$  est le moment cinétique orbital.
- $\vec{S}$  est le moment cinétique de spin.
- $\vec{J}$  est le moment cinétique total.

$$\vec{\mu} = \mu_o \times (g_L \vec{L} + g_s \vec{S})$$

est le moment magnétique  $\mu_o$ ,  $g_L$  et  $g_s$  sont des constantes.

Soit  $|l, s, j, m\rangle$  noté  $|j m\rangle$  un système de kets propres communs à  $\vec{L}^2$ ,  $\vec{S}^2$ ,  $\vec{J}^2$ ,  $J_z$ .

1. Montrer que  $\vec{L}^2$ ,  $\vec{S}^2$ ,  $\vec{J}^2$  sont des opérateurs scalaires. Montrer que  $\vec{\mu}$  est un opérateur vectoriel?
2. On se propose de calculer l'élément de matrice  $\langle j m' | \vec{\mu} | j m \rangle$  On rappelle que :  
 $\langle j m' | \vec{\mu} | j m \rangle = g(j) \times \langle j m' | \vec{J} | j m \rangle$   
 Le coefficient  $g(j)$  est obtenu grâce au théorème de projection.

Calculer  $g(j)$  en fonction de  $\mu_o$ ,  $g_L$  et  $g_s$ , L, S, J.

3. La particule considérée est un proton dans l'état p(l=1).  
 On donne  $g_L = 1$  et  $g_s = 5.58$

- (a) Calculer  $g(j)$  en fonction de  $\mu_o$  pour la valeur maximale de j.
- (b) Calculer en fonction de  $\mu_o$  la valeur moyenne de  $\mu_z$  dans l'état  $|j j\rangle$  pour la valeur maximale de j.

### 3.4.3 Opérateurs Vectoriels

Soit  $\vec{A}$  un opérateur vectoriel :

1. Montrer que  $\vec{A}$  vérifie les relations de commutation suivantes :

$$[J^2, \vec{A}] = 2i\hbar[\vec{J} \wedge \vec{A} - i\hbar\vec{A}]$$

$$[J^2, [J^2, \vec{A}]] = 2\hbar^2[J^2\vec{A} + \vec{A}J^2] - 4\vec{J}(\vec{J} \cdot \vec{A})\hbar^2$$

2. Montrer que la valeur moyenne  $\langle \vec{A} \rangle$  dans un état  $|JM\rangle$  normalisé est proportionnelle à celle de  $\vec{J}$  :  $\langle \vec{A} \rangle = g \langle \vec{J} \rangle$ .

3. A l'aide des relations précédentes déterminer la valeur moyenne :  $\langle \vec{\mu} \rangle$  de l'opérateur  $\vec{\mu} = g_1 \vec{J}_1 + g_2 \vec{J}_2$  en fonction de  $\langle \vec{J} \rangle$  sachant que  $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$ , donner l'expression de  $g$  en fonction de  $g_1$  et  $g_2$ .

### 3.4.4 Rapport gyromagnétique

1. Montrer que le rapport gyromagnétique pour un nucléon dans l'état  $l, j$  est :

$$g_j = g_l \pm \frac{g_s - g_l}{2l + 1}$$

Où le signe  $\pm$  correspond à  $j = l \pm \frac{1}{2}$

2. Calculer le moment magnétique dans les états  $S_{\frac{1}{2}}, P_{\frac{1}{2}}, P_{\frac{3}{2}}$ , pour un neutron ( $g_l = 0, g_s = -3.826$ ) et pour un proton ( $g_l = 1, g_s = 5.586$ )
3. Déterminer le moment cinétique  $j$  pour un proton dans l'état  $f$ , sachant que son moment magnétique dans cet état est  $\mu = 5.79\mu_N$ .
4. En utilisant le modèle en couches, déterminer les moments magnétiques des noyaux :  ${}^3H, {}^3He, {}^3H, {}^{17}O$  et  ${}^{39}K$ .
5. Les électrons atomiques produisent un champ magnétique  $\vec{H}_e$  dont la direction coïncide avec celle du moment angulaire total  $\vec{J}$  de ces électrons. En considérant l'énergie d'interaction supplémentaire entre le moment magnétique  $\vec{\mu}$  du noyau et le champ magnétique  $\vec{H}_e$ , montrer que l'espacement des niveaux de la structure hyperfine qui en résulte varie comme :  $F + 1, F + 2, \dots$ , où  $\vec{F} = \vec{I} + \vec{J}$  moment angulaire total de l'atome. Quel le nombre de ces niveaux ?

### 3.4.5 Composition de moments cinétiques - Coefficients de Clebsch-Gordan

A l'aide de la table des coefficients de Clebsch-Gordan donner la composition des deux moments cinétiques :  $J_1 = \frac{1}{2}$  et  $J_2 = \frac{3}{2}$ .

### 3.4.6 Facteur de Landé et théorème de projection

La configuration fondamentale d'un atome de Sodium ( $Z = 11$ ) est  $1S^2 2S^2 2P^6 3S^1$  et sa première configuration excitée est  $1S^2 2S^2 2P^6 3P^1$ . par suite, le fondamental du sodium est un état  $S_{\frac{1}{2}}$  et ses deux premiers états excités sont  $P_{\frac{1}{2}}, P_{\frac{3}{2}}$ .

L'atome est placé dans un champ magnétique  $\vec{B}_0$  constant dirigé suivant l'axe  $oz$ , si l'on tient compte de l'interaction spin-orbite l'hamiltonien total devient :

$$H = H^0 + H^1 \text{ avec } H^1 = \gamma \vec{L} \cdot \vec{S} + \frac{\mu_B \cdot B}{\hbar} (L_z + 2S_z)$$

1. En considérant  $H^1$  comme un hamiltonien de perturbations par rapport à  $H^0$  dont les états propres sont états propres de  $L^2, S^2, L_z, S_z$  (nombres quantiques :  $L, S, m_L, m_S$ ), étudier les niveaux d'énergie du système, après avoir montré la relation suivante :

$$\vec{L} \cdot \vec{S} = L_z S_z + \frac{1}{2} (L_+ S_- + L_- S_+)$$

2. En déduire les facteurs de Landé de ces niveaux.
3. Que deviennent les résultats précédents si :

(a)  $\mu_B \cdot B \ll \frac{\gamma \hbar^2}{2}$

(b)  $\mu_B \cdot B \gg \frac{\gamma \hbar^2}{2}$

### 3.4.7 Effet Zeeman - Transitions optiques

La configuration électronique de l'atome  $Zn^+$  (atome une fois ionisé  $Z = 29$ ) est, dans l'état fondamental :

$$1S^2 \quad 2S^2 \quad 2P^6 \quad 3S^2 \quad 3P^6 \quad 3D^{10} \quad 4S \quad (\text{un électron de valence})$$

L'atome est placé dans un champ magnétique  $\vec{B}$  constant dirigé suivant l'axe oz, si l'on tient compte de l'interaction spin-orbite l'hamiltonien total devient :  $H = H^0 + H^1$  avec

$$H^1 = \gamma \vec{L} \cdot \vec{S} + \frac{\mu_B \cdot B}{\hbar} (L_z + 2S_z)$$

1. En considérant  $H^1$  comme un hamiltonien de perturbations par rapport à  $H^0$  dont les états propres sont états propres de  $L^2$ ,  $S^2$ ,  $L_z$ ,  $S_z$  (nombres quantiques :  $L$ ,  $S$ ,  $m_L$ ,  $m_S$ ), étudier les niveaux d'énergie du système, après avoir montré la relation suivante :

$$\vec{L} \cdot \vec{S} = L_z S_z + \frac{1}{2} (L_+ S_- + L_- S_+)$$

2. En déduire les facteurs de Landé de ces niveaux.
3. Que deviennent les résultats précédents si :

(a)  $\mu_B \cdot B \ll \frac{\gamma \hbar^2}{2}$  (effet Zeeman "anormal")

(b)  $\mu_B \cdot B \gg \frac{\gamma \hbar^2}{2}$  (effet Paschen-Back)

Dans ce dernier cas quelles sont les règles de sélection sur  $\mathbf{l}$ ,  $m_l$  et  $m_s$  pour les transitions permises induites par interaction dipolaire.

4. On applique les résultats précédents à la transition optique **4D** - **4P** ( D correspond à  $L=2$ , P à  $L=1$ ) induite par interaction dipolaire électrique. Etablir que si  $B=0$ , cette transition correspond à un triplet de longueurs d'onde  $\lambda_1$ ,  $\lambda_2$ ,  $\lambda_3$ . Quelles sont les règles de sélection sur  $\mathbf{l}$  et  $\mathbf{j}$ , avec  $j = l \pm \frac{1}{2}$ .
5. L'atome est placé dans un champ  $B = 2T$ . Sachant que  $\lambda_1 = 2100.53 \text{ \AA}$ ,  $\lambda_2 = 2102.88 \text{ \AA}$ ,  $\lambda_3 = 2064.93 \text{ \AA}$ .

(a) Montrer que l'on est dans les conditions de l'effet Zeeman "anormal".

(b) Calculer le facteur de Landé relatif à chaque niveau initial.

(c) Etudier la décomposition de chacune des raies initiales.

– Quelles sont les transitions permises et les règles de sélection sur  $\mathbf{l}$ ,  $\mathbf{j}$  et  $m_j$

Données numériques :  $h = 6.62 \cdot 10^{-34} \text{ J.s}^{-1}$ ,  $\mu_B = 9.2741 \cdot 10^{-24} \text{ J.T}^{-1}$ ,  $c = 2.997925 \cdot 10^8 \text{ m.s}^{-1}$

### 3.4.8 Interaction quadrupolaire

On considère un noyau de spin  $J = \frac{3}{2}$ , dont l'espace des états est sous-tendu par les vecteurs  $|\frac{3}{2}m\rangle$ ; ( $J_z|\frac{3}{2}m\rangle = m|\frac{3}{2}m\rangle$ ) vecteurs propres communs à  $J^2$  et  $J_z$ . dans tout le problème on prendra  $\hbar = 1$ .

Ce noyau est placé à l'origine des coordonnées dans un champ électrique non-uniforme dérivant d'un potentiel  $U(x, y, z)$ . Les directions des axes sont choisies de telle sorte que, à l'origine :

$$\left(\frac{\partial^2 U}{\partial x \partial y}\right)_o = \left(\frac{\partial^2 U}{\partial y \partial z}\right)_o = \left(\frac{\partial^2 U}{\partial x \partial z}\right)_o = 0$$

$$\left(\frac{\partial^2 U}{\partial x^2}\right)_o = a_x; \left(\frac{\partial^2 U}{\partial y^2}\right)_o = a_y; \left(\frac{\partial^2 U}{\partial z^2}\right)_o = a_z$$

Avec  $\Delta U = a_x + a_y + a_z = 0$

L'hamiltonien d'interaction entre le gradient de champ électrique à l'origine et le moment quadrupolaire électrique s'écrit :

$$H_o = \frac{eQ}{2J(2J-1)} (a_x J_x^2 + a_y J_y^2 + a_z J_z^2)$$

Q : Constante

1. Montrer que  $H_o$  peut se mettre sous la forme :

$$H_o = A (3J_z^2 - J^2) + B (J_+^2 + J_-^2)$$

A et B constantes que l'on déterminera en fonction de  $a_x$ ,  $a_y$  et  $a_z$

2. Quelle est la représentative de  $H_o$  dans la base  $\{|jm\rangle\}$ , montrer qu'elle se décompose en deux sous-matrices  $2 \times 2$ . Déterminer les valeurs propres de  $H_o$  et leur degré de dégénérescence.
3. Que devient  $H_o$  si  $U(x, y, z)$  a la symétrie de révolution autour de Oz, qui correspond à  $a_x = a_y = -\frac{a_z}{2}$   
- Donner dans ce cas les niveaux d'énergie, leur degré de dégénérescence et les états propres, faire un diagramme.

Dans toute la suite du problème on considèrera que  $U(x, y, z)$  est de symétrie de révolution.

4. En plus du champ électrostatique, on soumet le noyau à un champ magnétique  $\vec{H}$  parallèle à OZ.  
- Quel terme d'interaction faut-il ajouter à  $H_o$ .  
- Quels sont les niveaux d'énergie obtenus, donner les états propres associés à ces niveaux.
5. Pour observer les transitions entre ces niveaux, on utilise le phénomène de résonance magnétique. On applique un champ faible  $\vec{H}_1(t)$  oscillant à la fréquence  $\nu$  :  $|\vec{H}_1(t)| = H_1 \cos(\nu.t)$ .  $\vec{H}_1(t)$  est parallèle à OX, quels sont les transitions observées.

### 3.4.9 Interaction moment-champ magnétique

Une particule de masse  $m$ , électriquement neutre et de spin  $\frac{1}{2}$  est placée dans un champ magnétique  $\vec{B}(t)$  uniforme et variable dans le temps.

L'hamiltonien du système peut s'écrire :

$$H = H_0 - \mu_m \times \vec{\sigma} \times \vec{B}(t)$$

$\mu_m$  : moment magnétique de la particule de spin  $\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$ .

1. Montrer que l'on peut séparer l'équation de schrodinger en deux équations décrivant l'évolution des fonctions d'onde radiale et de spin  $\psi_o(\vec{r}, t)$  et  $\psi_s(t)$  on posera  $\psi(\vec{r}, s, t) = \psi_o(\vec{r}, t) \times \psi_s(t)$   
à un instant  $t$  on aura :  $\psi_s = \lambda_1(t) |\frac{1}{2} \frac{1}{2} \rangle + \lambda_2(t) |\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \rangle$   
Déterminer les équations permettant de calculer  $\lambda_1(t)$  et  $\lambda_2(t)$ .
2. On suppose que  $\vec{B}(t)$  est parallèle à l'axe OZ.

$$\vec{B} = B_0 \times e^{-at} \times \vec{e}_z \quad (3.4)$$

Donner les expressions de  $\lambda_1(t)$  et  $\lambda_2(t)$  ainsi que les probabilités d'avoir les états  $|\frac{1}{2} \frac{1}{2} \rangle$  et  $|\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \rangle$ .

Que deviennent ces expressions pour :  $at \gg 1$  et  $at \ll 1$ .

## 3.5 Résonance Magnétique

### 3.5.1 Symétrie cristalline

On considère un atome de moment angulaire total  $J = \frac{3}{2}$  dans son état fondamental. Il est soumis à un potentiel de nature cristalline, de symétrie axiale autour de l'axe oz, d'hamiltonien :

$$H = A[J_z^2 - \frac{1}{3}J^2] \quad (3.5)$$

1. Quel est la décomposition du niveau fondamental de l'atome sous l'effet de  $H$ . Donner l'énergie des niveaux, leur dégénérescence et les états propres. faire un diagramme pour schématiser cette décomposition.
2. Le système précédent est soumis à un champ magnétique extérieur  $\vec{H}$  dont l'hamiltonien d'interaction avec l'atome est :

$$H' = g \cdot \mu_B \cdot \vec{H} \cdot \vec{J}$$

On pose  $\epsilon = \mu_B \cdot g \cdot |\vec{H}|$   $\mu_B, g, |\vec{H}|$  sont des constantes.

Si  $\vec{H}$  est parallèle à oz, quels sont les niveaux d'énergie obtenus en fonction de A et de  $\epsilon$ . Montrer qu'on observe des dégénérescences accidentelles (croisement de niveaux) pour  $\epsilon = A$  et  $\epsilon = 2A$ . Faire un diagramme des niveaux.

3. Pour observer des transitions entre ces niveaux, on utilise le phénomène de résonance magnétique. Pour cela, on applique un champ faible  $\vec{H}_1(t)$ , avec  $|\vec{H}_1(t)| \ll |\vec{H}|$  oscillant à la fréquence  $\nu$  :

$$|\vec{H}_1(t)| = H_1 \times \cos(\nu.t)$$

L'interaction de  $\vec{H}_1(t)$  avec l'atome ( $g.\mu_B.\vec{H}_1(t).\vec{J}$ ) induit des transitions entre deux niveaux  $|i\rangle$  et  $|j\rangle$  d'énergie  $E_i$  et  $E_j$  si la fréquence  $\nu$  est telle que  $h\nu = E_i - E_j$  et l'élément de matrice  $\langle i | g.\mu_B.\vec{H}_1(t).\vec{J} | j \rangle$  est différent de zéro.

$\vec{H}_1$  étant parallèle à ox, quelles sont les transitions permises pour le système de la question 2. Faire un schéma. Combien de raies distinctes peut-on observer ? Quelle est leur énergie  $h\nu$  en fonction de A et de  $\epsilon$ .

## 3.6 Valeurs propres et vecteurs propres de spin

### 3.6.1 Exercice-1.

1. Trouver les valeurs propres et les états propres de l'opérateur de spin  $\vec{S}$  d'un électron dans la direction d'un vecteur unitaire  $\vec{n}$  dans le plan XOZ.
2. Trouver la probabilité pour mesurer la valeur propre  $\hat{S}_z = +\frac{\hbar}{2}$ .

### 3.6.2 solution

1. le vecteur unitaire est donné par :  $\vec{n} = (\sin\theta \vec{i} + \cos\theta \vec{k})$  avec  $0 \leq \theta \leq \pi$

$$\vec{n}.\vec{S} = (\sin\theta \vec{i} + \cos\theta \vec{k}).(S_x \vec{i} + S_y \vec{j} + S_z \vec{k}) = S_x \sin\theta + S_z \cos\theta$$

en utilisant les matrices :

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

On peut donc écrire :

$$\vec{n}.\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \sin\theta + \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \cos\theta = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ \sin\theta & -\cos\theta \end{pmatrix}$$

La diagonalisation de cette matrice donne l'équation suivante :

$$-\frac{\hbar^2}{4} (\cos\theta - \lambda) (\cos\theta + \lambda) - \frac{\hbar^2}{4} \sin^2\theta = 0$$

Les solutions de cette sont donc :  $\lambda = \pm \frac{\hbar}{2}$

Le vecteur propre correspondant à  $\lambda = +\frac{\hbar}{2}$  peut être obtenu à partir :

$$\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

Cette matrice se réduit à  $a \sin \frac{\theta}{2} = b \cos \frac{\theta}{2}$ . En introduisant la condition de normalisation  $|a|^2 + |b|^2 = 1$  on a alors  $a = \cos \frac{\theta}{2}$  et  $b = \sin \frac{\theta}{2}$ , le vecteur propre correspondant à la valeur propre  $\lambda = +\frac{\hbar}{2}$  est alors :

$$|\lambda_+ \rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$$

De la même façon nous obtenons le vecteur propre correspondant à  $\lambda = -\frac{\hbar}{2}$

$$|\lambda_- \rangle = \begin{pmatrix} -\sin \frac{\theta}{2} \\ \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$$

2. Ecrivons  $|\lambda_{\pm} \rangle$  en utilisant les états up et down

$$|\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ et } |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$|\lambda_+ \rangle = \cos \frac{\theta}{2} |\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \rangle + \sin \frac{\theta}{2} |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle$$

$$|\lambda_- \rangle = -\sin \frac{\theta}{2} |\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \rangle + \cos \frac{\theta}{2} |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle$$

La probabilité de mesurer la valeur propre  $\hat{S}_z = +\frac{\hbar}{2}$  est donnée par :

$$|\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | \lambda_+ \rangle|^2 = \cos^2 \frac{\theta}{2}$$

## 3.7 Exercice -2

1. Trouver les valeurs propres et les états propres de l'opérateur de spin  $\vec{S}$  d'un électron suivant la direction du vecteur unitaire arbitraire  $\vec{n}$ .
2. Trouver la probabilité de mesurer  $\hat{S}_z = -\frac{\hbar}{2}$
3. En considérant que les vecteurs propres de spin calculés dans la question 1 correspondent à  $t = 0$ , trouver ces états à un instant quelconque  $t$ .

### 3.7.1 solution

1. Nous avons à résoudre l'équation

$$\vec{n} \cdot \vec{S} = \frac{\hbar}{2} |\lambda \rangle$$

Où  $\vec{n}$  est un vecteur unitaire suivant une direction quelconque, est donné en coordonnées sphériques :

$$\vec{n} \cdot \vec{S} = (\sin \theta \cos \varphi \vec{i} + \sin \theta \sin \varphi \vec{j} + \cos \theta \vec{k}) \cdot (S_x \vec{i} + S_y \vec{j} + S_z \vec{k})$$

En utilisant les matrices de Pauli on trouve :

$$\vec{n} \cdot \vec{S} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & e^{-i\varphi} \sin \theta \\ e^{i\varphi} \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix}$$

La diagonalisation de cette matrice donne l'équation séculaire suivante :

$$-\frac{\hbar^2}{4} (\cos \theta - \lambda) (\cos \theta + \lambda) - \frac{\hbar^2}{4} \sin^2 \theta = 0$$

Les solutions de cette sont donc :  $\lambda = \pm \frac{\hbar}{2}$

Le vecteur propre correspondant à  $\lambda = +\frac{\hbar}{2}$  peut être obtenu à partir :

$$\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & e^{-i\varphi} \sin \theta \\ e^{i\varphi} \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

Qui donne donc :  $a \cos \theta + b e^{-i\varphi} \sin \theta = 0$

ou  $a(1 - \cos \theta) = b e^{-i\varphi} \sin \theta$

En utilisant la relation  $(1 - \cos \theta) = 2 \sin^2 \frac{\theta}{2}$  et  $\sin \theta = 2 \cos \frac{\theta}{2} \sin \frac{\theta}{2}$

$$b = a \tan \frac{\theta}{2} e^{i\varphi}$$

la combinaison de cette équation avec la condition de normalisation  $|a|^2 + |b|^2 = 1$  on a alors  $a = \cos \frac{\theta}{2}$  et  $b = e^{-i\varphi} \sin \frac{\theta}{2}$ , ainsi le vecteur propre correspondant à la valeur propre  $\lambda = +\frac{\hbar}{2}$  est :

$$|\lambda_+ \rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ e^{i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$$

De la même façon nous obtenons le vecteur propre correspondant à  $\lambda = -\frac{\hbar}{2}$

$$|\lambda_- \rangle = \begin{pmatrix} -\sin \frac{\theta}{2} \\ e^{i\varphi} \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$$

2. On écrit  $|\lambda_- \rangle$  dans la base :

$$\begin{aligned} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ et } \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ |\lambda_+ \rangle &= \cos \frac{\theta}{2} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + e^{i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \\ |\lambda_- \rangle &= -\sin \frac{\theta}{2} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + e^{i\varphi} \cos \frac{\theta}{2} \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \end{aligned}$$

La probabilité de mesurer la valeur propre  $\hat{S}_z = -\frac{\hbar}{2}$  est donnée par :

$$\left| \left\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \middle| \lambda_- \right\rangle \right|^2 = \cos^2 \frac{\theta}{2}$$

3. L'état propre de spin à un instant t est donné par :

$$\begin{aligned} |\lambda_+(t) \rangle &= e^{\frac{i\hbar t}{2}} \cos \frac{\theta}{2} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + e^{i(\varphi - \frac{\hbar t}{2})} \sin \frac{\theta}{2} \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \\ |\lambda_-(t) \rangle &= -e^{\frac{i\hbar t}{2}} \sin \frac{\theta}{2} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + e^{i(\varphi - \frac{\hbar t}{2})} \cos \frac{\theta}{2} \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \end{aligned}$$

### 3.7.2 Exercice - 3 :

L'hamiltonien d'un système est  $\hat{H} = \varepsilon \vec{\sigma} \cdot \vec{n}$ , avec  $\varepsilon$  une constante ayant la dimension d'une énergie,  $\vec{n}$  vecteur unitaire arbitraire et  $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$  et  $\sigma_z$  sont les matrices de Pauli

1. Trouver les valeurs propres et les vecteurs propres de  $\hat{H}$
2. Trouver la matrice de transformation qui permet de diagonaliser  $\hat{H}$ .

### 3.7.3 solution

1. En utilisant les matrices de Pauli et un vecteur unitaire arbitraire  $\vec{n} = (\sin \theta \cos \varphi \vec{i} + \sin \theta \sin \varphi \vec{j} + \cos \theta \vec{k})$ , l'hamiltonien peut être réécrit sous la forme :

$$\hat{H} = \varepsilon \vec{\sigma} \cdot \vec{n} = \varepsilon (\sin \theta \cos \varphi \sigma_x + \sin \theta \sin \varphi \sigma_y + \cos \theta \sigma_z)$$

La représentative de  $\hat{H}$  est donc :

$$\hat{H} = \varepsilon \begin{pmatrix} \cos \theta & e^{-i\varphi} \sin \theta \\ e^{i\varphi} \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix}$$

Les valeurs propres de  $\hat{H}$  sont obtenues par la résolution de l'équation séculaire  $\det(H - E) = 0$  :

$$(\varepsilon \cos \theta - E)(-\varepsilon \cos \theta - E) - \sin^2 \theta = 0$$

ce qui donne deux valeurs propres  $E_1 = \varepsilon$  et  $E_2 = -\varepsilon$  les vecteurs propres sont donnés par

$$\varepsilon \begin{pmatrix} \cos \theta & e^{-i\varphi} \sin \theta \\ e^{i\varphi} \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

Pour le cas  $E = E_1 = \varepsilon$  l'équation donne :

$$(\cos \theta - 1)x + y \sin \theta \exp(-i\varphi) = 0$$

qui donne :

$$\frac{x}{y} = \frac{\sin \theta \exp(-i\varphi)}{1 - \cos \theta} = \frac{\cos \frac{\theta}{2} \exp(-i\frac{\varphi}{2})}{\sin \frac{\theta}{2} \exp(i\frac{\varphi}{2})}$$

et donc :

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \exp(-i\frac{\varphi}{2}) \cos(\frac{\theta}{2}) \\ e^{i\frac{\varphi}{2}} \sin(\frac{\theta}{2}) \end{pmatrix}$$

Ce vecteur est normé, dans le cas de  $E = E_2 = -\varepsilon$  on a

$$\begin{pmatrix} x_2 \\ y_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\exp(-i\frac{\varphi}{2}) \sin(\frac{\theta}{2}) \\ e^{i\frac{\varphi}{2}} \cos(\frac{\theta}{2}) \end{pmatrix}$$

2. Une transformation  $U$  qui diagonalise  $\hat{H}$  peut être obtenue à partir de deux vecteurs propres  $U_{11} = x_1$ ,  $U_{21} = y_1$ ,  $U_{12} = x_2$  et  $U_{22} = y_2$

$$\begin{pmatrix} \exp(-i\frac{\varphi}{2}) \cos(\frac{\theta}{2}) & -\exp(-i\frac{\varphi}{2}) \sin(\frac{\theta}{2}) \\ e^{i\frac{\varphi}{2}} \sin(\frac{\theta}{2}) & e^{i\frac{\varphi}{2}} \cos(\frac{\theta}{2}) \end{pmatrix}$$

Notons que la matrice est unitaire, car  $U^+ = U^{-1}$  et  $\det(U) = 1$

$$\hat{U} \hat{H} \hat{U}^+ = \begin{pmatrix} \varepsilon & 0 \\ 0 & -\varepsilon \end{pmatrix}$$

## 3.8 Moment cinétique et Rotation

### 3.8.1 Opérateur de rotation

Soit  $R_u(\alpha)$  l'opérateur tel que  $|\psi'\rangle = R_u(\alpha)|\psi\rangle$ .  $R_u(\alpha)$  est l'opérateur rotation de l'angle  $\alpha$  autour de l'axe  $\vec{Ou}$ . Si  $J$  est le moment cinétique total du système, sa composante  $J_u$  suivant l'axe  $\vec{Ou}$  est liée à l'opérateur de rotation infinitésimale (angle  $d\alpha$ ) autour de cet axe par la relation :

$$R_u(\alpha) = 1 - \left(\frac{i}{\hbar}\right)J_u d\alpha$$

1. Justifier la relation précédente dans le cas où  $J = L$  est un moment cinétique orbital.
2. Montrer en utilisant la conservation de la norme de  $|\psi\rangle$  dans la rotation  $R_u(\alpha)$  que  $R$  est un opérateur unitaire.
3. Soit  $A$  un opérateur hermétique représentant une grandeur physique et  $A'$  sa transformée dans une rotation  $R$ .

En écrivant que la valeur moyenne de  $A$  dans l'état  $|\psi\rangle$  est la même que la valeur moyenne de  $A'$  dans l'état  $|\psi'\rangle$ , établir que :

$$A' = R^+ A R$$

En déduire que, si  $A$  est invariant par rotation (cas d'un scalaire par exemple), on a :  
 $[A, J_u] = 0$  et  $[A, J^2] = 0$

### 3.8.2 résonance magnétique

Le phénomène de résonance magnétique est dû à l'absorption par un système doté d'un spin et d'un moment magnétique, de l'énergie fournie par un champ magnétique tournant à la vitesse angulaire  $\omega$  autour de la direction d'un champ magnétique uniforme  $\vec{H}_0$  :

$$\vec{H}_0(0, 0, H_0), \vec{H}_1(H_1 \cos(\omega.t), H_1 \sin(\omega.t), 0)$$

L'évolution de la fonction d'onde de spin est alors donnée par :

$$i\hbar \frac{\partial \chi(t)}{\partial t} = -\gamma \hbar [H_0 S_z + H_1 (S_x \cos(\omega.t) + S_y \sin(\omega.t))] \chi(t)$$

avec  $S_x = \sigma_x/2$ ,  $S_y = \sigma_y/2$ ,  $S_z = \sigma_z/2$

( $\hbar$  est prise égale à 1, l'opérateur de rotation est donné dans ce cas par :  $R(\vec{e}_z, \omega.t) = e^{-i\omega.t.S_z}$   
 On posera  $\omega_0 = -\gamma.H_0$ ,  $\omega_1 = -\gamma.H_1$ .)

1. En se plaçant dans le référentiel tournant avec le champ  $\vec{H}_1$  la fonction d'onde de spin  $|\chi(t)\rangle$  ainsi que les observables subissent une rotation  $(-\omega.t)$ . Montrer que l'équation d'évolution de la fonction d'onde de Spin  $|\chi'(t)\rangle = R(\vec{e}_z, -\omega.t)|\chi(t)\rangle$  dans le référentiel tournant est donnée par :

$$i \frac{\partial \chi'(t)}{\partial t} = [(\omega_0 - \omega).S_z + \omega_1 (S'_x \cos(\omega.t) + S'_y \sin(\omega.t))] \chi'(t)$$

$S'_x, S'_y$  : étant les opérateurs  $S_x, S_y$  dans le référentiel tournant.

2. En prenant  $|\chi'(t)\rangle = |s\ \mu\rangle$ , et après avoir intégré l'équation d'évolution de  $|\chi'(t)\rangle$ , montrer que  $|\chi(t)\rangle$  peut se mettre sous la forme :

$$|\chi(t)\rangle = e^{-(i\omega_s z t)} \cdot e^{-(ia \cdot \vec{n} \cdot \vec{s} t)} |\chi(0)\rangle$$

Avec  $a = \sqrt{(\omega_o - \omega)^2 + \omega_1^2}$ ,  $\vec{n} : (\sin \theta, 0, \cos \theta)$ ,  $\sin \theta = \frac{\omega_1}{a}$ ,  $\cos \theta = \frac{\omega_o - \omega}{a}$

3. Au temps  $t = 0$  le système est dans l'état  $|\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle$ , calculer la probabilité de le trouver au temps  $t$  dans l'état  $|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$  sachant que celle-ci est donnée par :

$$P_{\mu \rightarrow \mu'} = P_{+\frac{1}{2} \rightarrow -\frac{1}{2}} = \left| \langle -\frac{1}{2} | \chi_{+\frac{1}{2}}(t) \rangle \right|^2$$

4. Reprendre la même question par la méthode des perturbations dépendantes du temps en prenant comme hamiltoniens :  $H = \hbar\omega_o S_z$  et comme hamiltonien de perturbation  $H_1 = \hbar\omega_1 [S_x \cos \omega t + S_y \sin \omega t]$

### 3.8.3 Moments cinétiques couplés

On considère un système constitué par deux particules de spin  $S_1$  et  $S_2$  et soumises à une interaction dont l'hamiltonien est donné par  $H_1$  :

$$H_1 = A \cdot \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \text{ où } A \text{ est une constante positive.}$$

1. Montrer que les états propres du système sont donnés par  $|F\ m_F\rangle$  où  $\vec{F} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$  - Dans le cas de deux particules de spin  $\frac{1}{2}$  (Atome d'Hydrogène) calculer les niveaux d'énergie du système.
2. Cet atome est soumis à un champ magnétique  $\vec{B}_o$  parallèle à OZ. Le nouvel hamiltonien est alors donné par :

$$H_2 = A \cdot \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 + \omega_1 \cdot S_{1z} + \omega_2 \cdot S_{2z}$$

- Donner la représentative de  $H_2$  dans la base  $|F\ m_F\rangle$ , on donne  $\omega_1 = -\gamma_1 \cdot B_o$  et  $\omega_2 = -\gamma_2 \cdot B_o$

3. Quelles sont les énergies du système, en prenant  $\hbar \cdot (\omega_1 - \omega_2) \gg A \cdot \hbar^2$
4. Représenter sur un schéma la variation des niveaux d'énergie en fonction de  $B_o$ .
5. On reprend le système sans le champ magnétique  $B_o$  l'hamiltonien est alors  $H_1(t) = A(t) \cdot \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$ . La fonction  $A(t)$  n'a de valeurs notables que dans l'intervalle  $[-\frac{\tau}{2}, +\frac{\tau}{2}]$  et  $A(t) \rightarrow 0$  pour  $|t| \rightarrow \infty$ .  
- À  $t = -\infty$ , le système est dans l'état  $(|+\ -\rangle)$  (état propre de  $S_{1z}$  et  $S_{2z}$  avec les valeurs propres  $+\frac{\hbar}{2}$  et  $-\frac{\hbar}{2}$ ). - Calculer sans approximation l'état du système à  $t = +\infty$ .  
- Montrer que la probabilité  $P(|+\ -\rangle \rightarrow |-\ +\rangle)$  de trouver à  $t = +\infty$ , le système dans l'état  $|-\ +\rangle$  ne dépend que de l'intégrale  $\int_{-\infty}^{+\infty} A(t) dt$ .
6. Calculer  $P(|+\ -\rangle \rightarrow |-\ +\rangle)$  en utilisant la théorie des perturbations dépendantes du temps, comparer au résultat de la question précédente.

7. On introduit le champ magnétique  $\vec{B}_o$  parallèle à OZ, l'hamiltonien du système est alors :

$$H_2(t) = A(t) \cdot \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 - B_o(\gamma_1 \cdot S_{1z} + \gamma_2 \cdot S_{2z})$$

$$A(t) = a_o \cdot e^{-\frac{t^2}{\tau^2}}$$

- Calculer  $P(|+ - \rangle \rightarrow |- + \rangle)$  par la théorie des perturbations dépendantes du temps ( $a_o$  et  $\tau$  sont des constantes). Discuter les variations de  $P(|+ - \rangle \rightarrow |- + \rangle)$  avec  $B_o$ .

## 3.9 Oscillateur harmonique à une dimension

### 3.9.1 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  $\chi$ ,  $\bar{\omega}$  et  $\eta$  pour le vecteur d'état décrit par la fonction d'onde :

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

À quelles conditions  $\chi$ ,  $\bar{\omega}$  et  $\eta$  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  $|F \rangle = \lambda \cdot e^{\alpha \cdot a^+} |0 \rangle$ , 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  $\Delta E$ .

### 3.9.2 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 :

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

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  $\omega_+$  et  $\omega_-$  dont on donnera les valeurs en fonction de  $\omega, C$  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  $\omega_-$  est fonction de  $C$  alors que  $\omega_+$  en est indépendant.

### 3.10 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  $\lambda_1$  et  $\lambda_2$  sont des constantes et  $W_1$  et  $W_2$  ont pour expression :

$$W_1 = m\omega^2 xy$$

$$W_2 = \hbar\omega \left( \frac{L_z}{\hbar^2} - 2 \right)$$

$L_z$  : 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  $\lambda_1 W_1$ .

### 3.10.1 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  $F(X) = F\omega_0 X$ . 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  $\lambda$ , les fonctions d'onde des états propres perturbés ainsi que les corrections au premier ordre de l'énergie.
3. Quelles sont à l'ordre  $\lambda^2$ , les énergies des trois premiers états.
  4. En déduire à l'ordre  $\lambda$  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  $k_F$ .

- 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).
- On excite maintenant l'oscillateur à l'aide de la force  $F$ , de fréquence  $\omega$ , 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  $\omega'$ ). Quelle est, en fonction de  $\omega$ , la puissance dissipée par la force  $F$ ? discuter le résultat.

### 3.10.2 Interaction électron-champ radiant

Soit  $H = \frac{e}{m} \vec{A} \cdot \vec{P}$  hamiltonien décrivant l'interaction d'un électron atomique avec un champ radiant.

$$A(\vec{r}, t) = A_0 e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} + A_0^* e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}$$

$\vec{P}$  : Impulsion

- Donner l'expression de la probabilité de transition de l'état initial  $\psi_i$  d'énergie  $E_i$  à l'état  $\psi_j$  d'énergie  $E_j$ .
- Que devient cette probabilité dans les deux cas suivants :  $E_j - E_i \simeq \hbar\omega$  et  $E_j - E_i \simeq -\hbar\omega$
- En faisant l'approximation  $e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \simeq 1$  montrer que la probabilité de transition peut s'exprimer en fonction du moment dipolaire électrique  $\langle \psi_j | r | \psi_i \rangle = d$   
On donne  $[r, H_0] = rH_0 - H_0r = i\hbar \frac{P}{m}$

$H_0$  : hamiltonien non perturbé :  $H_0|\psi\rangle = E_i|\psi\rangle$

## 3.11 Méthode WKB et méthode des variations

### 3.11.1 Niveau d'énergie du potentiel $V(X) = V_0|x|$

- déterminer, à l'aide de la méthode WKB, les niveaux d'énergie d'une particule dans les puits de potentiel ci-dessous :

$$V(X) = V_0|x| \quad V_0 < 0$$

- Retrouver le niveau fondamental ainsi que le premier état excité par la méthode des variations.  
- Comparer les résultats des deux méthodes.

### 3.11.2 Niveaux d'énergie dans un champ gravitationnel

Une particule de masse  $m$  se déplace dans le champ gravitationnel homogène au dessus de la surface terrestre, celle-ci étant considérée comme une paroi parfaitement réfléchissante. On traite ce problème de manière quantique, c'est à dire que l'on a un puits de potentiel.

$V(x) = mgx$ , pour  $x > 0$  et une paroi dure en  $x = 0$

1. Trouver les niveaux d'énergie du fondamental de ce système par la méthode WKB.
  - Quelle serait l'énergie du fondamental par cette méthode. Dans cette question comme dans les suivantes, il sera commode d'exprimer les résultats en unité d'énergie  $\epsilon = (\hbar^2 mg^2)^{\frac{1}{3}}$ .
2. On cherche une valeur approchée de l'énergie du fondamental de la particule dans le puits par la méthode des variations. On prend une fonction d'essai du type :  $\psi(x) = A.x.e^{-\frac{\lambda}{2}.x^2}$ 
  - (a) Justifier le choix de cette fonction d'essai.
  - (b) Calculer l'énergie du fondamental en unité  $\epsilon$ .
3. On veut résoudre le problème rigoureusement :
  - (a) Montrer qu'en effectuant le changement de variable  $\xi = \frac{x}{l} - \lambda$  il est possible de ramener l'équation de Schrödinger à la forme :

$$\frac{\partial^2 \psi(\xi)}{\partial \xi^2} - \xi \psi(\xi) = 0$$

$l$  étant une longueur caractéristique que l'on déterminera et  $\lambda$  un paramètre qui s'exprimera en fonction de l'énergie réduite  $\frac{E}{\epsilon}$ . La solution  $\psi(\xi)$  de cette équation dans la région permise classique est fonction de la combinaison linéaire des fonctions de Bessel :  $J_{\frac{1}{3}}(\frac{2}{3}(-\xi)^{\frac{3}{2}})$  et  $J_{-\frac{1}{3}}(\frac{2}{3}(-\xi)^{\frac{3}{2}})$

- (b) Montrer que la recherche des niveaux d'énergie se ramène à la recherche des valeurs de  $\lambda$  telles que :

$$J_{\frac{1}{3}}(\frac{2}{3}(\lambda)^{\frac{3}{2}}) + J_{-\frac{1}{3}}(\frac{2}{3}(\lambda)^{\frac{3}{2}}) = 0$$

- (c) La première racine de cette équation est  $\lambda_1 = 2.338$ . En déduire l'énergie du fondamental du puits en unité  $\epsilon$ .
- (d) Comparer le calcul rigoureux du fondamental avec ceux obtenus par la méthode WKB et la méthode des variations.

### 3.12 Effet stark et polarisabilité

On se propose de calculer la polarisabilité  $\alpha$  (Rapport du moment dipolaire induit et le champ électrique  $E$ ) de l'atome d'hydrogène dans son état fondamental  $\psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi.a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}}$  sous l'action d'un champ électrique  $\vec{E}$  dirigé selon OZ qui provoque une interaction Stark donnée par l'hamiltonien perturbateur  $eEz = eEr \cos \theta$  ( $r$  et  $\theta$  sont les coordonnées de l'électron). Pour cela nous devons évaluer la correction  $E^{(2)}$  du 2<sup>eme</sup> ordre sur l'énergie et la correction  $\psi^1$  au premier ordre sur la fonction d'onde du niveau fondamental dues à l'effet du champ  $\vec{E}$ . Nous avons donc, en tenant compte du fait que l'effet Stark du premier ordre est nul dans  $\psi_{1s}$ , l'énergie  $E$  et la fonction  $\psi$  du système qui sont donnés par :  $E = -R + E^{(2)}$  et  $\psi = \psi_{1s} + \psi^1$  où  $R = Rydberg = \frac{e^2}{2a_0} = \frac{\hbar^2}{2ma_0^2}$

Le calcul par les méthodes habituelles est difficile et nous allons déterminer  $\psi^1$  par la méthode suivante.

1. Montrer à partir des principes élémentaires de base du calcul des perturbations que  $\psi^1$  obéit à l'équation :

$$\left[ \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{e^2}{r} + \frac{e^2}{2a_0} \right] \psi^1 = \frac{-e \cdot E \cdot r \cos \theta}{\sqrt{\pi} \cdot a_0^3} \cdot e^{\frac{-r}{a_0}}$$

2. Pour résoudre cette équation on passe aux coordonnées sphériques et on cherche une solution du type  $\psi^1 = f(r) \cos \theta$ . Justifier la dépendance angulaire cherchée.

Montrer que  $\mathbf{f}(\mathbf{r})$  satisfait à l'équation différentielle :

$$\frac{\partial^2 f(r)}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial f(r)}{\partial r} - \frac{2}{r^2} f(r) + \frac{2}{ra_0} f(r) - \frac{1}{a_0^2} f(r) = \frac{2 \cdot E \cdot r}{e \cdot a_0 \sqrt{\pi} \cdot a_0^3} \cdot e^{\frac{-r}{a_0}}$$

On rappelle que  $\cos \theta$  est proportionnel à  $Y_1^0$ .

3. On cherche une solution de l'équation précédente du type  $f(r) = e^{\frac{-r}{a_0}} \cdot U(r)$ . A quelle condition doit obéir  $U(r)$  ?
4. On cherche pour  $U(r)$  un développement en série entière  $U(r) = \sum_{k=1}^{\infty} C_k r^k$ . - Montrer que pour obtenir une solution physiquement acceptable il est nécessaire de limiter la série à  $U(r) = C_1 r + C_2 r^2$ ,  $C_1$  et  $C_2$  étant deux coefficients que l'on calculera. Ecrire alors l'expression de  $\psi^1$ .
5. En déduire la correction  $E^{(2)}$  sur les niveaux d'énergie du fondamental dûe à l'effet Stark.
6. Calculer le moment dipolaire induit  $P = -ez$  dans l'état fondamental en se limitant aux termes linéaires en  $E$ .
7. Donner la valeur de la polarisabilité  $\alpha$  de l'hydrogène dans son état fondamental, vérifier que la correction au deuxième ordre sur l'énergie est donnée par  $E^{(2)} = \frac{-1}{2} \alpha E^2$ .

### 3.13 Perturbations dépendantes du temps-transitions

On considère un atome de moment cinétique  $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$  placé dans un champ magnétique  $\vec{B}_0$  parallèle à l'axe des  $Z$ . L'hamiltonien d'interaction de cet atome avec  $B_0$  est donné par :

$$H_1 = \omega_0 (L_z + 2S_z) \quad \text{avec } \omega_0 = \frac{-qB_0}{2m} = \frac{-\mu_b B_0}{\hbar}, \quad \mu_b \text{ magnéton de Bohr.}$$

1. Montrer que  $H_1$  peut être mis sous la forme :  $H_1 = g_J \omega_0 J_z$  où  $g_J$  est le facteur de Landé.
2. On suppose que cet atome admet un électron célibataire sur une couche  $S(L = 0, J = \frac{1}{2})$ . Initialement au repos il est dans un état  $|- \rangle$ , au voisinage de l'origine il traverse une zone où règne un champ magnétique oscillant  $\vec{B}_1(t)$  dont les composantes sont :

$$B_{1x} = B_1 e^{\frac{-z}{a}} \cos[\omega(t - \frac{z}{c})], \quad B_{1y} = B_1 e^{\frac{-z}{a}} \sin[\omega(t - \frac{z}{c})], \quad B_{1z} = 0$$

Où  $r = \sqrt{x^2 + y^2}$  et  $B_1 = cste \ll |\vec{B}_0|$  On suppose que le mouvement spatial de cet atome est donné par :  $x = vt$ ,  $y = 0$  et  $z = 0$ . - Quel est l'hamiltonien  $H_2(t)$  d'interaction de l'atome avec  $B_1(t)$ , écrire la matrice représentative  $2 \times 2$  représentant  $H_2(t)$  dans la base  $[|+ \rangle, |- \rangle]$ .

3. En appliquant la théorie des perturbations dépendantes du temps, calculer la probabilité  $P_{-+}$  de trouver l'atome dans l'état  $|+ \rangle$  à  $t = +\infty$  sachant qu'à  $t = -\infty$  il était dans l'état  $|- \rangle$ . tracer  $P_{-+}$  en fonction de  $(2\omega_0 - \omega)$ .

# Chapitre 4

## Diffusion par un centre de force

### 4.1 Approximation de Born

Une particule de masse  $m$ , d'énergie  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$  est diffusée élastiquement par un potentiel de la forme :

$$V(r) = \frac{V_0}{r} e^{-\alpha r}$$

Où  $V_0$  et  $\alpha$  sont des constantes réelles  $\alpha > 0$

1. On suppose que  $V_0$  est petit, donner l'amplitude de diffusion  $f(\theta, \phi)$  dans l'approximation de Born et calculer la section efficace différentielle  $\frac{\partial \sigma}{\partial \Omega}$  et totale  $\sigma$ .
2. Expliquer pourquoi on doit prendre  $V_0$  petit.
3. Qu'obtient-on si on prend :  $\alpha = 0$  et  $V_0 = Z_1 Z_2 e^2$  avec  $e$  : Charge élémentaire.

### 4.2 Section efficace par la règle d'or de Fermi

On considère la diffusion d'une particule de masse  $m$  par un potentiel dont les éléments de matrice en représentation  $\{|r\rangle\}$  sont donnés par :

$$\langle r|v(r)|r'\rangle = v(r)\delta(r - r')$$

On suppose que l'état initial est donné par :

$$|\psi(t=0)\rangle = |\vec{k}_i\rangle \text{ et } \langle r|k_i\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} e^{i \cdot \vec{k}_i \cdot \vec{r}}$$

1. En appliquant la règle d'or de Fermi, calculer  $W(\vec{k}_i, \vec{k}_f)$ , probabilité de  $\vec{k}_i \rightarrow \vec{k}_f$ , avec  $W(|\vec{k}_i| = |\vec{k}_f|)$ , sachant que la densité d'états est  $\rho = m\sqrt{2mE}$ .
2. Calculer la quantité :  $\frac{W(\vec{k}_i, \vec{k}_f)}{J}$ , avec  $J = [\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*]$  est le courant de probabilité. Comparer ce résultat à la section efficace dans l'approximation de Born.

### 4.3 Probleme : calcul des déphasages

On considère une diffusion par un potentiel répulsif décrit par :

$$V(r) = \begin{cases} V_0 & \text{pour } r < a \\ 0 & \text{pour } r \geq a \end{cases} \quad (4.1)$$

1. Donner l'expression du déphasage  $\varphi_0$  (onde S) en fonction de l'impulsion  $k$  et de  $a$ . Calculer  $\varphi_0$  dans le cas où  $V_0 \rightarrow \infty$ . Calculer la section efficace de diffusion dans le cas où l'énergie est très faible de telle sorte qu'on puisse avoir  $ka \ll 1$ .
2. Trouver une relation entre  $k, a, V_0$  et  $E$  permettant de calculer le déphasage  $\varphi_1$  ( $l = 1$ , onde p). Montrer que le cas où  $V_0 \rightarrow \infty$ ,  $\varphi_1$  varie comme  $(ka)^3$ . Comparer  $\varphi_1$  et  $\varphi_0$ .
3. Déterminer l'amplitude de diffusion pour  $V_0 \rightarrow \infty$  et pour des énergies très faibles tel que  $(ka)^n \approx 0$  pour  $n = 3, 4, \dots$   
En déduire la section efficace différentielle  $\frac{\partial \sigma}{\partial \Omega}$ .

### Formulaire

$$\lim_{\rho \rightarrow 0} J_\nu(\rho) = \frac{1}{\nu!} \left(\frac{\rho}{2}\right)^\nu$$

$$N_{l+\frac{1}{2}} = (-1)^{l+1} J_{-l-\frac{1}{2}}$$

$$\frac{1}{2^3} \frac{\left(-\frac{3}{2}\right)!}{\left(\frac{3}{2}\right)!} = -\frac{1}{3}$$

$$P_1(\cos \theta) = \cos \theta$$

et

$$P_0(\cos \theta) = 1$$

## 4.4 Compléments du cours de deuxième année

### 4.4.1 Équation de continuité

on considère une particule décrite par la fonction d'onde  $\psi(r, t)$ . Calculer la dérivée par rapport au temps  $\frac{\partial \rho(r, t)}{\partial t}$ , où  $\rho(r, t)$  est la densité de probabilité. Montrer que l'équation de continuité  $\frac{\partial \rho(r, t)}{\partial t} + \nabla \cdot J(r, t) = 0$  est satisfaite. Où  $J(r, t)$  est le courant de probabilité égal à  $\frac{1}{m} \text{Re}[\psi^* (\frac{\hbar}{i} \nabla \psi)]$ .

### 4.4.2 Solution

En utilisant l'équation de Schrodinger

$$i\hbar \frac{\partial \psi(r, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(r, t) + V(r, t) \psi(r, t)$$

En considérant  $V(x)$  réel, le conjugué de l'équation de Schrodinger est donné par

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^*(r, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^*(r, t) + V(r, t) \psi^*(r, t)$$

En se basant sur la définition  $\rho(r, t) = \psi^* \psi(r, t)$

$$\frac{\partial \rho(r, t)}{\partial t} = \frac{\partial \psi(r, t)}{\partial t} \psi(r, t) + \psi^*(r, t) \frac{\partial \psi(r, t)}{\partial t}$$

$$\frac{\partial \rho(r, t)}{\partial t} = \left[ \frac{\hbar^2}{2mi} \nabla^2 \psi^*(r, t) \right] \psi(r, t) - \frac{1}{i\hbar} V(r, t) \psi^*(r, t) \psi(r, t) - \psi^*(r, t) \left[ \frac{\hbar}{2mi} \nabla^2 \psi(r, t) \right] + \frac{1}{i\hbar} \psi^*(r, t) V(r, t) \psi(r, t)$$

$$\frac{\partial \rho(r, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2mi} [\psi^*(r, t) \nabla^2 \psi(r, t) - \psi(r, t) \nabla^2 \psi^*(r, t)]$$

. Le courant de probabilité est donné par :

$$J(r, t) = \frac{1}{m} \text{Re}[\psi^* (\frac{\hbar}{i} \nabla \psi)] = \frac{\hbar}{2mi} [\psi^*(r, t) \nabla \psi(r, t) - \psi(r, t) \nabla \psi^*(r, t)]$$

En utilisant le théorème  $\nabla \cdot (UA) = (\nabla U) \cdot A + U(\nabla \cdot A)$  on a

$$\nabla \cdot J(r, t) = \frac{\hbar}{2mi} [(\nabla \psi^*) \cdot (\nabla \psi) + \psi^* (\nabla^2 \psi) - (\nabla \psi) \cdot (\nabla \psi^*) - \psi (\nabla^2 \psi^*)] = \frac{\hbar}{2mi} [\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^*]$$

et donc :

$$\frac{\partial \rho(r, t)}{\partial t} + \nabla \cdot J(r, t) = 0$$

## 4.5 Système de plusieurs particules

### 4.5.1 Problème : Etoile à neutrons

On considère une étoile à neutrons sphérique de rayon  $\mathbf{R}$  et de masse  $M = 2 \cdot 10^{33}$  g égale à la masse du soleil. On néglige les effets dus à la surface de l'étoile de sorte qu'on assimile celle-ci à un grand morceau de matière nucléaire composée uniquement de neutrons. On suppose que les neutrons individuels sont décrits par des ondes planes d'impulsion  $\hbar k$  avec  $k \leq k_F$  où  $k_F$  est le moment de Fermi.

1. Sachant que la masse du neutron est égale à  $m = 1.67 \times 10^{-24}$  g montrer que le rayon de l'étoile à neutrons est relié au moment de fermi  $k_F$  par la relation :  $k_F \times R = 2 \times 10^{19}$
2. Montrer que l'énergie cinétique moyenne  $\langle T \rangle$  des neutrons peut s'écrire sous la forme :  $\langle T \rangle = \frac{A}{R^2}$  où A est une constante que l'on déterminera. On donne  $\frac{\hbar^2}{m} = 41.47 \text{ MeV} \cdot \text{fm}^2$
3. On néglige d'abord les interactions nucléaires entre les neutrons et on suppose que l'interaction entre deux neutrons est purement gravitationnelle dont le potentiel est donné par :  $V_g = -\frac{Gm^2}{r}$  où  $Gm^2 = 1.15 \times 10^{-36} \text{ MeV} \cdot \text{fm}$  et où r est la distance entre les deux neutrons. Montrer que l'énergie d'interaction gravitationnelle est égale à :  $\mathbf{V}_g = -\frac{\mathbf{B}}{\mathbf{R}}$ .  
Où  $\mathbf{B} = \frac{3Gm^2 \mathbf{N}^2}{5}$  et  $\mathbf{N}$  est le nombre de neutrons de l'étoile.
4. Calculer le rayon d'équilibre de l'étoile à neutrons en ne considérant que l'énergie cinétique et l'énergie potentielle due à la gravitation.  
– Comparer la densité d'équilibre de l'étoile à la densité d'équilibre.
5. En utilisant la formule de Weizsäcker qui donne l'énergie de liaison  $\mathbf{B}(\mathbf{N}, \mathbf{Z})$  de l'état fondamental d'un noyau  $(\mathbf{A}, \mathbf{Z})$ , avec  $a_v = 16 \text{ MeV}$ ,  $a_a = 24 \text{ MeV}$ , montrer qu'à la densité normale au centre d'un noyau, l'énergie d'un système infiniment grand et composé uniquement de neutrons est égale à **9 Mev/neutron**. Ce système est-il lié?

## 4.5.2 Gaz d'électrons

1. Sachant que la masse du soleil ( $M = 2.10^{33}g$ ) est constituée par 75% d'Hydrogène et 25% d'Hélium, calculer le nombre d'électrons. On donne le nombre d'Avogadro  $N = 6.10^{23}$ .
2. Si ces électrons sont contenus dans une sphère de rayon  $R = 2.10^9 \text{ cm}$ , calculer l'énergie de Fermi  $\epsilon_F$ .
3. Si, ces électrons sont ultra-relativistes ( $E = cp$ ), calculer  $\epsilon_F$  et montrer que si ils sont contenus dans un pulsar de rayon  $R = 10 \text{ km}$ , on a alors  $\epsilon_F \approx 10^8 \text{ eV}$ .

## 4.6 Problèmes difficiles

### 4.6.1 diffusion des neutrons sur la molécule d'hydrogène

1. Soient  $\vec{\sigma}_1$  et  $\vec{\sigma}_2$  les opérateurs à deux fermions. Déterminer les états propres et les valeurs propres de l'opérateur  $(\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2)$ . En déduire les projecteurs  $P_s$  et  $P_t$  sur les états singulet et triplet.
2. L'une des 2 particules est un neutron, l'autre un proton, leur potentiel d'interaction s'écrit :

$$V = P_s V_s + P_t V_t$$

où  $V_s$  et  $V_t$  sont respectivement deux potentiels agissant dans les états singulet et triplet respectivement. montrer que le potentiel d'interaction d'un neutron avec une molécule d'Hydrogène s'écrit :

$$\bar{v} = \frac{1}{2}(3V_t + V_s) + \frac{1}{4}(V_t - V_s) (\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2)$$

où  $\vec{\sigma}_{H^2} = \vec{\sigma}_{P_1} + \vec{\sigma}_{P_2}$  est la somme des opérateurs de spin des protons.

3. On veut étudier le système des états formés par trois spins  $\frac{1}{2}$  en l'appliquant au cas précédent. Former l'état de  $s_z$  maximum. En déduire tous les sous-états de même spin et de  $s_z$  différents. Montrer que l'on épuise tous les états possibles en ajoutant aux états ainsi formés deux doublets de spin total  $S_T = s_1 + s_2 + s_3 = \frac{1}{2}$ . Construire ces doublets en choisissant une représentation où  $(s_{H^2})^2$  est diagonal. Classer tous les états de spin total par les valeurs propres de  $(s_{H^2})^2$ .
4. calculer la valeur moyenne de l'opérateur  $(\vec{\sigma}_n \cdot \vec{\sigma}_{H^2})$  pour chacun des états déterminés précédemment c'est à dire :

$$\langle S_T M_T, (S_{H^2}) | (\vec{\sigma}_n \cdot \vec{\sigma}_{H^2}) | S_T M_T, (S_{H^2}) \rangle$$

ainsi que la valeur moyenne de l'opérateur  $\bar{v}$ .

5. On considère la diffusion de neutrons non polarisés sur des molécules d'hydrogène dans l'état orthohydrogène :  $S_{H^2} = 1$  et dans l'état parahydrogène :  $S_{H^2} = 0$ . Examiner si dans chaque cas le système  $n + H_2$  est formé dans un état de  $S_T$  donné et sinon déterminer les poids statistiques des états de  $S_T$  différents dans la diffusion d'un neutron par l'ortho puis le parahydrogène.

6. On admettra que lorsque l'énergie du neutron tend vers zéro l'amplitude de diffusion est reliée linéairement au potentiel c'est à dire qu'à toute combinaison des potentiels triplet et singulet  $\alpha V_t + \beta V_s$  il correspond une amplitude  $\alpha a_t + \beta a_s$  telle que la section efficace s'écrive :

$$\sigma = 4\pi (\alpha a_t + \beta a_s)^2$$

(approximation de la longueur de diffusion).

A partir des valeurs moyennes de  $\bar{v}$  du 4 et des poids statistiques calculés en 5 montrer que :

$$\sigma_{ortho} = 4\pi \left[ \frac{2}{3}(2.a_t)^2 + \frac{1}{3}\left(\frac{1}{2}a_t + \frac{3}{2}a_s\right)^2 \right]$$

$$\sigma_{para} = 4\pi \left(\frac{3}{2}a_t + \frac{1}{2}a_s\right)^2$$

Y a t-il une différence entre  $\sigma_{ortho}$  et  $\sigma_{para}$  si  $v_t = v_s$  .

## 4.6.2 WKB

Une particule de masse  $m$  se déplace sur l'axe OX. Elle est soumise à un potentiel  $V(x)$  répulsif schématisé sur la figure. Une onde progressive  $e^{ikx}$  aborde la barrière du côté  $x < 0$ . Soient  $R e^{-ikx}$  et  $T e^{ikx}$ , les ondes réfléchies et transmises. On se propose d'étudier  $R(E)$  et  $T(E)$  dans le cadre d'une **approximation WKB**.

1. Calculer  $R$  et  $T$  lorsque  $E > V_0$ . Quelle est la condition de validité de ce résultat ?
2. Pour  $E < V_0$ , la barrière présente deux points tournants en  $-b$  et  $+b$ . On rappelle les conditions de raccordement correspondantes :

$x < b$	$\longrightarrow$	$x > b$	Où nous
$\frac{1}{\sqrt{k}} \exp\left[\int_x^b k dx\right]$	$\longrightarrow$	$-\frac{1}{\sqrt{k}} \sin\left[\int_b^x k dx - \frac{\pi}{4}\right]$	
$\frac{1}{2\sqrt{k}} \exp\left[-\int_x^b k dx\right]$	$\longrightarrow$	$\frac{1}{\sqrt{k}} \cos\left[-\int_b^x k dx - \frac{\pi}{4}\right]$	
$x < -b$		$x > -b$	
$-\frac{1}{\sqrt{k}} \sin\left[\int_x^{-b} k dx - \frac{\pi}{4}\right]$	$\longrightarrow$	$\frac{1}{\sqrt{k}} \exp\left[\int_{-b}^x k dx\right]$	
$\frac{1}{\sqrt{k}} \cos\left[\int_x^{-b} k dx - \frac{\pi}{4}\right]$	$\longrightarrow$	$\frac{1}{2\sqrt{k}} \exp\left[-\int_{-b}^x k dx\right]$	

avons posé  $k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{em|E - V|}$ . Calculer les coefficients de réflexion et de transmission de la barrière (on exploitera dans le calcul, le fait que  $|T| \ll 1$ ).

3. Outre le potentiel scalaire  $V(x)$ , l'électron est soumis à un faible champ magnétique  $H(x)$  localisé entre  $-a$  et  $+a$ , dirigé le long de Oz. L'électron incident a un spin polarisé le long de Ox.
  - On représente le vecteur d'état sur la base des états propres de  $\sigma_z$ . préciser le vecteur d'état de l'électron incident.
  - Dans le cas  $E \gg V_0$ , montrer qu'à la sortie de la barrière, les deux composantes de spin sont déphasées. Calculer ce déphasage.
  - Montrer que ce déphasage est équivalent à une rotation du spin que l'on précisera. Interpréter physiquement.

– Retrouver ce résultat par un argument purement classique.

4. On suppose maintenant  $E \ll V_0$  et l'on admet que  $H(x)$  est localisé entre les deux points tournants  $\pm b$ . Quelle est l'orientation du spin de l'onde transmise? En déduire le temps que met l'électron à traverser la région interdite  $(-b, +b)$  dans l'approximation BKW. Comment serait modifié ce résultat dans un calcul plus raffiné.

### 4.6.3 Diffusion par un centre de force

On considère une particule de masse  $m$  soumise à un potentiel central du type :

$$V(r) = V\delta(r - a) \quad (V > 0)$$

On se propose de calculer le déphasage  $S$  correspondant,  $\delta_0(E)$ .

1. Construire les fonctions d'onde radiales de symétrie  $l = 0$ . Préciser l'amplitude de la fonction d'onde pour  $r < a$ .
2. En déduire le déphasage. Préciser sa variation avec  $E$ . Quelle est la correction de densité d'états due à ce potentiel diffuseur? Discuter en fonction de  $V$ , en insistant sur les cas limites.
3. On place maintenant un champ magnétique uniforme  $H$ , parallèle à  $Oz$ , dans la région  $r < a$ . L'onde entrante a un spin polarisé le long de  $Ox$ . Quelle est la direction de spin de l'onde sortante? En déduire le temps de séjour de la particule diffusée dans la région  $r < a$ , et discuter en fonction de  $E$ .

## 4.7 Problèmes : Niveau D.E.S.A.

### 4.7.1 Impuretés de Cobalt dans $MgF_2$

Si l'on inclut des impuretés de Cobalt dans  $MgF_2$ , l'ion  $Co^{2+}$  ( $3d^7$ ) se substitue au  $Mg^{2+}$ . Dans ces conditions, le fondamental de l'ion  $Co^{2+}$  est un doublet qui peut être assimilé à un spin fictif  $S = \frac{1}{2}$ .

- **Partie I** : des concentrations suffisantes de Cobalt, il se forme des paires d'ions  $Co^{2+}$  voisins, chaque paire pouvant être assimilée à un système de deux spins  $\frac{1}{2}$ ,  $\vec{S}_1$  et  $\vec{S}_1$  couplés par échange et dont le seul élément de symétrie  $\sigma$  est une réflexion dans le plan contenant l'axe  $z$  du cristal et les deux ions (groupe  $C_s$ ).

On désigne par  $x$  l'axe orthogonal à  $z$  dans le plan de symétrie et par  $y$  l'axe perpendiculaire au plan.

1. Bâtir la table de caractères du groupe simple  $(E, \sigma)$ . Etablir la table de multiplication des représentations irréductibles, c'est à dire évaluer tous les produits  $\Gamma_i \Gamma_j$  possibles.
2. Comment se transforment les composantes  $S_{1\alpha}$  et  $S_{1\beta}(\alpha, \beta = x, y, z)$  de chaque spin dans ce groupe. (On rappelle que les spins sont des pseudo-vecteurs).
3. La forme bilinéaire la plus générale d'interaction d'échange entre les deux spins s'écrit :

$$H_e = \sum_{\alpha, \beta} S_{1\alpha} J_{\alpha\beta} S_{2\beta}$$

Où les  $J_{\alpha\beta}$  sont les d'échange.

Sachant que  $H_e$  doit être invariant dans le groupe considéré, quelles sont les composantes de  $J_{\alpha\beta}$  autorisées par la symétrie ?

(On pourra s'aider de la table de multiplication des représentations obtenues dans la 1<sup>ère</sup> question).

4. On pose  $J = \frac{1}{3}(J_{xx} + J_{yy} + J_{zz})$ ;  $D = \frac{J_{zz}-J}{4}$

On suppose de plus que  $J_{xx} = J_{yy}$  et que  $J_{xz} = J_{zx} = 2\sqrt{2}\alpha$  Montrer que l'Hamiltonien de couplage obtenu dans la 3<sup>ème</sup> question se ramène à :

$$H_e = (J - 2D)\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 + 6D S_{1z} S_{2z} + 2\sqrt{2}\alpha(S_{1z} S_{2x} + S_{1x} S_{2z})$$

5. Ecrire dans ces conditions la matrice représentative de  $H_e$  dans la base  $|S_1 m_1, S_2 m_2\rangle$  avec  $m_1$  et  $m_2 = \pm \frac{1}{2}$ .

( On pourra utiliser les notations  $|++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle, |--\rangle$  pour symboliser les 4 états possibles).

6. Ecrire la matrice représentative de  $H_e$  définie par (1) dans la base  $|SM\rangle$  avec  $\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$ .

7. Trouver les niveaux d'énergie de la paire en fonction de  $\mathbf{J}, \mathbf{D}, \text{et } \alpha$ .

Comparer avec le cas d'un échange isotropique  $J\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$ .

Application numérique : faire un diagramme des niveaux sachant que :

$$J = 10.0 \text{ cm}^{-1}, D = \alpha = 0.2 \text{ cm}^{-1}.$$

– **Partie II** : Lorsque la concentration augmente, la probabilité d'avoir des triades de trois spins voisins augmente. Pour simplifier, on considère uniquement des couplages scalaires entre spins. On a essentiellement des triades de deux types : caractérisées par les Hamiltoniens de couplage :

$$H = J(\vec{S}_2 \cdot \vec{S}_1 + \vec{S}_2 \cdot \vec{S}_3)$$

pour le type **(a)**

$$H = J(\vec{S}_2 \cdot \vec{S}_1 + \vec{S}_2 \cdot \vec{S}_3) + J' \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_3$$

pour le type **(b)** avec  $S_1 = S_2 = S_3 = \frac{1}{2}$

1. Montrer que dans les deux cas  $\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2 + \vec{S}_3$  commute avec  $H$  et donc  $S$  est un bon nombre quantique.

2. Trouver les niveaux d'énergie et la multiplicité des triades de type **(a)**.

3. Trouver les niveaux d'énergie et la multiplicité des triades de type **(b)**.

Cas particulier où  $J' = J$ .

Les parties I et II sont indépendantes

Les questions 5, 6, 7 de la partie I peuvent se traiter en partant de l'Hamiltonien (1) sans avoir à traiter les questions 1 à 4.

## 4.8 Solutions

### 4.8.1 solution : modèle nucléaire collectif - moments quadrupolaires d'inertie

–

$$H = \sum_{i=1}^A h(i) = \sum_{i=1}^A (h_x(i) + H_y(i) + h_z(i))$$

$$V(r) = \frac{1}{2}m[\omega_x^2 \cdot x^2 + \omega_y^2 \cdot y^2 + \omega_z^2 \cdot z^2]$$

$$E = \hbar\omega_x \sum_{i=1}^A [n_x^i + \frac{1}{2}] + \hbar\omega_y \sum_{i=1}^A [n_y^i + \frac{1}{2}] + \hbar\omega_z \sum_{i=1}^A [n_z^i + \frac{1}{2}] = \hbar\omega_x \Sigma_x + \hbar\omega_y \Sigma_y + \hbar\omega_z \Sigma_z$$

L'énergie minimale est obtenue pour :

$$\omega_x \Sigma_x = \omega_y \Sigma_y = \omega_z \Sigma_z$$

dans le cas de 4 nucléons :  $n_x = n_y = n_z = 0$  et  $\Sigma_x = \Sigma_y = \Sigma_z = 2$  ce qui implique  $\omega_x = \omega_y = \omega_z$  et  $V = \frac{1}{2}m\omega_0^2 r^2$  et  $\omega_x \cdot \omega_y \cdot \omega_z = \omega_0^3$

Configuration du  ${}^8_4\text{Be}$

4(001)

4(000)

$$\Sigma_x = 4(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}) = 4$$

$$\Sigma_y = 4(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}) = 4$$

$$\Sigma_z = 4(\frac{1}{2} + \frac{1}{2} + \frac{1}{2}) = 6$$

$$\Sigma_x = \Sigma_y < \Sigma_z \text{ et } \omega_z < \omega_x = \omega_y$$

$$\text{ce qui implique : } \frac{1}{\omega_z} > \frac{1}{\omega_x} = \frac{1}{\omega_y}$$

c est proportionnelle à  $\frac{1}{\omega_z}$  grand axe des ellipsoïdes équipotentiels  $\frac{1}{\omega_x}$  proportionnelle au petit axe de l'ellipsoïde équipotentielle.

– moment quadrupolaire de masse

$$Q_0 = \langle \psi | \sum_{i=1}^A A(2Z_i^2 - X_i^2 - Y_i^2) | \psi \rangle$$

$$Q_0 = 2 \langle \psi | \sum_{i=1}^A AZ_i^2 | \psi \rangle - \langle \psi | \sum_{i=1}^A (X_i^2 + Y_i^2) | \psi \rangle$$

$$\langle Z_i^2 \rangle = \frac{\hbar}{m\omega_z} (n_z + \frac{1}{2})$$

$$\langle \psi | \sum_{i=1}^A AZ_i^2 | \psi \rangle = \frac{\hbar}{m\omega_z} \Sigma_z$$

$$\langle \psi | \sum_{i=1}^A A2X_i^2 | \psi \rangle = \frac{\hbar}{m\omega_x} \Sigma_x = \frac{\hbar}{m\omega_y} \Sigma_y$$

$$\omega_x \Sigma_x = \omega_y \Sigma_y = \omega_z \Sigma_z$$

$$\Sigma_z = 2\Sigma_y = 2\Sigma_x \text{ et } 2\omega_z = \omega_x = \omega_y$$

$$\frac{\Sigma_x}{\omega_x} = \frac{1}{4} \frac{\Sigma_z}{\omega_z}$$

$$Q_o = 2 \frac{\hbar}{m} \left( \frac{\Sigma_z}{\omega_z} - \frac{\Sigma_x}{\omega_x} \right) = \frac{3\hbar}{2m} \frac{\Sigma_z}{\omega_z}$$

$$Q_o = \frac{3}{2} \langle Z^2 \rangle$$

$$\omega_x \cdot \omega_y \cdot \omega_z = \omega_o^3 \text{ et } (\Sigma_x \Sigma_y \Sigma_z)^3 = \Sigma_x \Sigma_y \cdot \Sigma_z \cdot \omega_x \cdot \omega_y \cdot \omega_z$$

$$\omega_z = \frac{(\Sigma_x \Sigma_y \Sigma_z)^{\frac{1}{3}}}{\Sigma_z} \omega_o$$

$$\langle Z^2 \rangle = \frac{\hbar}{m} \frac{\Sigma_z^2}{m(\Sigma_x \Sigma_y \Sigma_z)^{\frac{1}{3}} \omega_o} \frac{1}{\omega_o}$$

$$Q_o = \frac{24\hbar}{2^{\frac{1}{3}} m \omega_o}$$

$$(\Sigma_x \Sigma_y \Sigma_z)^{\frac{1}{3}} = (4 \cdot 4 \cdot 8)^{\frac{1}{3}} = 4(2)^{\frac{1}{3}} \text{ et } \Sigma_z^2 = 64$$

## 4.9 Transformations canoniques

### 4.9.1 Rotation

En physique classique une rotation est définie par un angle et un axe de rotation, connaissant la matrice de rotation  $\mathfrak{R}$ , nous pouvons déterminer comment se transforme un vecteur sous  $\mathfrak{R}$ . Dans l'espace à trois dimensions, un vecteur  $\vec{A}$  se transforme en :  $\vec{A}' = \mathfrak{R}\vec{A}$ . Une rotation d'un angle  $\phi$  autour de l'axe z transforme les composantes  $A_x$ ,  $A_y$  et  $A_z$  du vecteur  $\vec{A}$  en  $A_{x'}$ ,  $A_{y'}$  et  $A_{z'}$ .

$$\begin{pmatrix} A_{x'} \\ A_{y'} \\ A_{z'} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \phi & \sin \phi & 0 \\ -\sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_x \\ A_y \\ A_z \end{pmatrix}$$

$$\vec{A}' = \mathfrak{R}_z(\phi)\vec{A}$$

les rotations autour des axes x et y sont données par :

$$\mathfrak{R}_x(\phi) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \phi & \sin \phi \\ 0 & -\sin \phi & \cos \phi \end{pmatrix}, \quad \mathfrak{R}_y(\phi) = \begin{pmatrix} \cos \phi & 0 & \sin \phi \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \phi & 0 & \cos \phi \end{pmatrix}$$

$$\mathfrak{R}_x(\phi)\mathfrak{R}_y(\phi) \neq \mathfrak{R}_y(\phi)\mathfrak{R}_x(\phi)$$

ne commutent pas

Par contre

$$\mathfrak{R}\mathfrak{R}^T = \mathfrak{R}^T\mathfrak{R} = \mathbb{1}$$

$\mathfrak{R}^T$  transposée de  $\mathfrak{R}$ , c'est une matrice orthogonale qui conserve la norme des vecteurs :

$$|\vec{A}'| = |\vec{A}|$$

$$\vec{A}' = \mathfrak{R}\vec{A}, \quad \vec{A}'^2 = \mathfrak{R}\vec{A}^2 \text{ ou}$$

$$A_{x'}^2 + A_{y'}^2 + A_{z'}^2 = A_x^2 + A_y^2 + A_z^2$$

avec

$$\det(\mathfrak{R}) = 1$$

**En Mécanique quantique :**

Prenons une transformation R qui transforme les coordonnées d'un vecteur  $\vec{r}$  :  $r \rightarrow \vec{r}' = \mathfrak{R}\vec{r}$

$$\vec{r} = \mathfrak{R}^{-1}\vec{r}'$$

La fonction d'onde se transforme sous R :

$$\psi(\vec{r}') = \psi(\vec{r}) = \mathfrak{R}\psi(\vec{r})$$

$$|\psi\rangle = \hat{\mathfrak{R}}|\psi\rangle$$

## Rotation infinitésimale :

Considérons la rotation des coordonnées d'une particule sans spin d'un angle infinitésimal  $\delta\phi$  autour de l'axe des z. Si on note cette rotation par  $\hat{\mathfrak{R}}_z(\delta\phi)$ , nous avons alors :

$$\hat{\mathfrak{R}}_z(\delta\phi)\psi(r, \theta, \phi) = \psi(r, \theta, \phi - \delta\phi)$$

Le développement de Taylor de cette fonction au premier ordre en  $\delta\phi$ , nous donne

$$\psi(r, \theta, \phi - \delta\phi) \simeq \psi(r, \theta, \phi) - \delta\phi \frac{\delta\psi}{\delta\phi} = \left(1 - \delta\phi \frac{\delta}{\delta\phi}\right) \psi(r, \theta, \phi)$$

$$\hat{\mathfrak{R}}_z(\delta\phi) = 1 - \delta\phi \frac{\delta}{\delta\phi}$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\delta}{\delta\phi}$$

$$\hat{\mathfrak{R}}_z(\delta\phi) = 1 - \frac{i}{\hbar} \delta\phi \hat{L}_z$$

On peut généraliser cette relation à toute rotation de  $\delta\phi$  autour d'un axe arbitraire :

$$\hat{\mathfrak{R}}(\delta\phi) = 1 - \frac{i}{\hbar} \delta\phi \vec{n} \cdot \vec{\hat{L}}$$

## 4.9.2 Translation

Une transformation unitaire :  $\psi' = T\psi$

prenons

$$T = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{P} \cdot \vec{a}\right)$$

avec  $\vec{a}$  vecteur constant, pour l'opérateur  $r$ . la transformée de l'opérateur sous T est :

$$\vec{r}' = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{P} \cdot \vec{a}\right) \vec{r} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{P} \cdot \vec{a}\right)$$

avec :  $\vec{P} = i\hbar \vec{\nabla}$  on a alors :

$$\exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{P} \cdot \vec{a}\right) = \exp\left(\vec{a} \cdot \vec{\nabla}\right)$$

faisons le développement de cet opérateur :

$$\exp\left(\vec{a} \cdot \vec{\nabla}\right) f(r) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\vec{a} \cdot \vec{\nabla})^n}{n!} f(r)$$

le terme de droite exprime le développement de la fonction  $f(r+a)$  en série de Taylor autour du point  $r$  :

$$f(r+a) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\vec{a} \cdot \vec{\nabla})^n}{n!} f(r)$$

la transformation  $r'$  de l'opérateur position est donnée par :

$$r'f(r) = \exp\left(\vec{a} \cdot \vec{\nabla}\right) r \exp\left(-\vec{a} \cdot \vec{\nabla}\right) f(r) = \exp\left(\vec{a} \cdot \vec{\nabla}\right) [rf(r-a)] = (r+a)f(r-a+a) = (r+a)f(r)$$

$$r' = r + a$$

et

$$g'(r) = g(r + a)$$

et l'impulsion  $\vec{P}$  est inchangée par cette transformation :

$$\vec{P}' = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{P} \cdot \vec{a}\right) \vec{P} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{P} \cdot \vec{a}\right) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{P} \cdot \vec{a}\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{P} \cdot \vec{a}\right) \vec{P} = \vec{P}$$

# Chapitre 5

## COURS : L'OSCILLATEUR HARMONIQUE ISOTROPE

### 5.1 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 :

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m}(p^2 + m^2\omega^2q^2) \quad (5.1)$$

Afin de ne pas transporter inutilement des constantes, posons :

$$\mathcal{H} = H\hbar\omega \quad (5.2)$$

$$p = (m\hbar\omega)^2 P \quad (5.3)$$

$$q = \left(\frac{\hbar}{\omega m}\right)^{\frac{1}{2}} Q \quad (5.4)$$

$$H\hbar\omega = \frac{1}{2m}m\hbar\omega P^2 + \frac{1}{2m}\frac{m^2\omega^2\hbar}{m\omega}Q^2 \quad (5.5)$$

$$H = \frac{1}{2}(P^2 + Q^2) \quad (5.6)$$

Les opérateurs  $p$  et  $q$  satisfont aux règles de commutation

$$[p, q] = -i\hbar \quad (5.7)$$

Ce qui donne pour  $P$  et  $Q$  la relation de commutation

$$[Q, P] = i \quad (5.8)$$

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

$$p \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial q} \quad (5.9)$$

$$(m\hbar\omega)^{\frac{1}{2}} P \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial Q} \frac{\partial Q}{\partial q} \Rightarrow P \rightarrow \frac{-i\hbar}{(m\hbar\omega)^{\frac{1}{2}}} \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{\partial}{\partial Q} \quad (5.10)$$

$$P \rightarrow -i \frac{\partial}{\partial Q} \quad (5.11)$$

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

$$\frac{1}{2} \left[ -\frac{d^2}{dQ^2} + Q^2 \right] u(Q) = \epsilon u(Q) \quad (5.12)$$

## 5.2 Oscillateur à une dimension en notation de Dirac

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

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} (Q + iP) \quad (5.13)$$

$$a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} (Q - iP) \quad (5.14)$$

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.

$$[a, a^+] = \frac{1}{2} [Q + iP, Q - iP] \quad (5.15)$$

$$= \frac{1}{2} [Q, Q] + \frac{1}{2} [Q, -iP] + \frac{1}{2} [iP, -iP] + \frac{1}{2} [iP, Q] \quad (5.16)$$

$$= 0 - \frac{i}{2} [Q, P] + \frac{i}{2} [P, Q] + 0 \quad (5.17)$$

$$= -\frac{i}{2} (i) + \frac{i}{2} (-i) = 1 \quad (5.18)$$

$$(5.19)$$

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

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 :

$$aa^+ = \frac{1}{2} (Q + iP) (Q - iP) \quad (5.20)$$

$$= \frac{1}{2} [Q^2 - iQP + iPQ + P^2] = \frac{1}{2} [Q^2 + P^2 + 1] \quad (5.21)$$

$$aa^+ = H + \frac{1}{2} \quad (5.22)$$

$$aa^+ - a^+a = 1 \Rightarrow a^+a = H - \frac{1}{2} \quad (5.23)$$

$$\text{ce qui donne} \quad (5.24)$$

$$H = \frac{1}{2} (aa^+ + a^+a) \quad (5.25)$$

$$\text{en posant} \quad N = a^+a \quad (5.26)$$

$$H = N + \frac{1}{2} \quad (5.27)$$

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

### 5.2.1 Spectre de N

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

$$Na = a^+aa = a(a^+a - 1) \quad (5.28)$$

$$Na = a(N - 1) \rightarrow [N, a] = -a \quad (5.29)$$

$$Na^+ = a^+(N + 1) \rightarrow [N, a^+] = a^+ \quad (5.30)$$

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

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

$$a^+|n\rangle = (n+1)^{\frac{1}{2}}|n+1\rangle \quad (5.31)$$

$$a|n\rangle = n^{\frac{1}{2}}|n-1\rangle \quad (5.32)$$

$$a|0\rangle = 0 \quad (5.33)$$

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 :

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^+)^n|0\rangle \quad (5.34)$$

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

$$N|n\rangle = n|n\rangle \quad (5.35)$$

$$\langle n'|n\rangle = \delta_{nn'} \quad (5.36)$$

et par la relation 4.31.

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

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

et

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

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  $H$  seront les fonctions  $\psi(q)$  telles que :

$$\mathcal{H}\psi(q) = E\psi(q) \tag{5.37}$$

$$\left( \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dq^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 q^2 \right) \psi(q) = E\psi(q) \tag{5.38}$$

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

$$\langle Q|n \rangle = u_n(Q) = \left( \frac{\hbar}{m\omega} \right)^{\frac{1}{2}} \langle q|n \rangle = \left( \frac{\hbar}{m\omega} \right)^{\frac{1}{2}} \psi_n(q) \tag{5.39}$$

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

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (Q + iP) \langle Q|0 \rangle = 0 \tag{5.40}$$

$$(Q + iP) u_0(Q) = 0 \tag{5.41}$$

$$\left[ Q + i \left( -i \frac{d}{dQ} \right) \right] u_0(Q) = 0 \tag{5.42}$$

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

$$u_0 = Ae^{-\frac{Q^2}{2}} \tag{5.43}$$

Après normalisation on obtient :

$$u_0 = \pi^{-\frac{1}{4}} e^{-\frac{Q^2}{2}} \quad (5.44)$$

$$\begin{aligned} u_n(Q) &= \langle Q|n \rangle \text{ or } |n \rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^+)^n |0 \rangle \\ \langle Q|n \rangle &= \frac{1}{\sqrt{n!}} \left[ \frac{1}{\sqrt{2}} (Q - iP) \right]^n \langle Q|0 \rangle \\ u_n(Q) &= \frac{1}{\sqrt{n! 2^n \pi^{\frac{1}{2}}}} \left( Q - \frac{d}{dQ} \right)^n e^{-\frac{Q^2}{2}} \end{aligned}$$

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

$$u_n(Q) = \frac{1}{\sqrt{n! 2^n \pi^{\frac{1}{2}}}} e^{-\frac{1}{2}Q^2} H_n(Q) \quad (5.45)$$

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 :

$$\int_{-\infty}^{\infty} u_n(Q) u_p(Q) dQ = \delta_{np} \quad (5.46)$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} u_n^*(Q) u_n(Q) = \delta(Q - Q') \quad (5.47)$$

### 5.3 Oscillateur harmonique à p dimensions

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

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \mathcal{H}_i \quad \mathcal{H}_i = \frac{1}{2m} (p_i^2 + m^2 \omega^2 q_i^2) \quad (5.48)$$

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 :

$$\mathcal{H}_1 |n_1 \rangle = (n_1 + \frac{1}{2}) \hbar \omega |n_1 \rangle \quad \mathcal{H}_2 |n_2 \rangle = (n_2 + \frac{1}{2}) \hbar \omega |n_2 \rangle \quad \mathcal{H}_p |n_p \rangle = (n_p + \frac{1}{2}) \hbar \omega |n_p \rangle \quad (5.49)$$

$$\mathcal{H} |n_1 n_2 \dots n_p \rangle = (\mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2 + \dots + \mathcal{H}_p |n_1 \dots n_p \rangle) |n_1 n_2 \dots n_p \rangle = (n_1 + n_2 + \dots + n_p + p \frac{1}{2}) \hbar \omega |n_1 n_2 \dots n_p \rangle \quad (5.50)$$

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

$$a_1|0\rangle = a_2|0\rangle = \dots = a_p|0\rangle = 0 \quad (5.51)$$

$$|n_1 n_2 \dots n_p\rangle = (n_1! n_2! \dots n_p!)^{-\frac{1}{2}} a_1^{+n_1} \dots a_p^{+n_p} |0\rangle \quad (5.52)$$

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.

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

## 5.4 Oscillateur harmonique à 3 dimensions

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

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m}(p^2 + m^2\omega^2 r^2) \quad (5.53)$$

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

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_x + \mathcal{H}_y + \mathcal{H}_z = \sum_i \mathcal{H}_i = \sum_i \frac{1}{2m}(p^2 + m^2\omega^2 r^2) \quad (5.54)$$

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 :

$$a_x|000\rangle = a_y|000\rangle = a_z|000\rangle = 0 |n_x n_y n_z\rangle = (n_x! n_y! n_z!)^{-\frac{1}{2}} a_x^{+n_x} a_y^{+n_y} a_z^{+n_z} |000\rangle \quad (5.55)$$

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

$$[a_j, a_k] = \delta_{jk} [H, a_k^+] = a_k^+ [H, a_k] = -a_k |n_1 n_2 n_3\rangle = \Omega_{n_1 n_2 n_3} |000\rangle \quad \text{avec} \quad \Omega_{n_1 n_2 n_3} = \prod_1^3 \frac{a_1^{+n_i}}{\sqrt{n_i!}} \quad (5.56)$$

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 :

$$\mathcal{H}|nlm\rangle = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega |nlm\rangle \quad L^2 |nlm\rangle = \hbar^2 l(l+1) |nlm\rangle \quad L_z |nlm\rangle = m\hbar |nlm\rangle \quad (5.57)$$

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

$$\psi_{nlm}(r) = \frac{y_{nl}(r)}{r} Y_{lm}(\Omega) \quad (5.58)$$

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

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 r^2\right]y_{nl}(r) = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega y_{nl}(r) \quad (5.59)$$

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 :

$$|nlm\rangle = \sum_{n_1 n_2 n_3} A_{nlm}^{n_1 n_2 n_3} |n_1 n_2 n_3\rangle = \sum_{n_1 n_2 n_3} |n_1 n_2 n_3\rangle \langle n_1 n_2 n_3 | nlm\rangle \quad (5.60)$$

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

## 5.5 Mouvement de particules dans un champ de forces centrales

### 5.5.1 Séparation des variables

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

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + V(r) \quad \text{et} \quad H\psi = E\psi \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)\right]\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \quad (5.61)$$

l'hamiltonien en coordonnées sphériques est de la forme :

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right] + V(r) \quad (5.62)$$

$$L^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right] \quad \text{on peut donc écrire} \quad (5.63)$$

$$\mathcal{H} = \frac{P_r^2}{2m} + \frac{L^2}{2mr^2} + V(r) \quad \text{avec} \quad P_r = \frac{\hbar}{i}r\frac{\partial}{\partial r} = \frac{\hbar}{i}\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right) \quad (5.64)$$

$$\text{On peut écrire alors l'équation sous la forme :} \left[\frac{P_r^2}{2m} + \frac{L^2}{2mr^2} + V(r)\right]\psi(r, \theta, \phi) = E\psi(r, \theta, \phi) \quad (5.65)$$

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

$$L^2 Y_{lm}(\theta, \phi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (5.66)$$

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

$$\psi_{lm}(r, \theta, \phi) = \chi_l(r) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (5.67)$$

On obtient alors l'équation différentielle :

$$\left[\frac{P_r^2}{2m} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m r^2} + V(r) - E\right]\chi_l(r) = 0 \quad \text{avec} \quad P_r^2 = -\hbar^2 \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r \quad \text{posons :} \quad y_l(r) = r \chi_l(r) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r \chi_l(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m r^2} \chi_l(r) \quad (5.68)$$

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 :

$$\langle \psi_{lm} | \psi_{lm} \rangle = \int d\Omega Y_{lm}^*(\Omega) Y_{lm}(\Omega) \int r^2 dr |\chi_l(r)|^2 = \int_0^\infty r^2 dr |\chi_l(r)|^2 = \int_0^\infty |Y_l(r)|^2 dr \quad (5.69)$$

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.

## Particule libre

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

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + l(l+1) \frac{\hbar^2}{2m r^2} - E \right] Y_l(r) = 0 \quad \text{On pose} \quad k^2 = \frac{2m E}{\hbar^2} \left[ \frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2 \right] Y_l(r) = 0 \quad (5.70)$$

Ondes s (c'est à dire  $l = 0$ )

L'équation se simplifie et on obtient :

$$\left[ \frac{d^2}{dr^2} + k^2 \right] Y_0(r) = 0 \quad (5.71)$$

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  $Y_0(r)$ .

$$A^2 \int_0^\infty \sin^2(kr) dr = 1 \quad \implies \quad A^2 = \frac{2}{\pi} \quad (5.72)$$

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

$$\chi_0(r) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\sin(kr)}{r} \quad (5.73)$$

## Cas général

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

$$\left[ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \chi_l(r) = 0 \quad \text{on pose} \quad \xi = kr \quad \text{variable sans dimension} \quad \left[ \frac{d^2}{d\xi^2} + \frac{2}{\xi} \frac{d}{d\xi} + \left[ 1 - \frac{l(l+1)}{\xi^2} \right] \right] \chi_l(\xi) = 0 \quad (5.74)$$

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 :

$$\chi_l(r) = A j_l(kr) + B \eta_l(kr) \quad (5.75)$$

La fonction d'onde totale

$$\psi(r, \theta, \phi) = [A j_l(kr) + B \eta_l(kr)] Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (5.76)$$

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  $\psi$  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.

### 5.5.2 Développement de l'onde plane

$$e^{i\vec{r}\vec{k}} = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} a_{lm}(k) Y_{lm}(\theta, \phi) j_l(kr) \quad (5.77)$$

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

$$e^{ikr \cos(\theta)} = \sum a_{lm} Y_{lm}(\theta, \phi) j_l(kr) \quad (5.78)$$

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

$$Y_{l0}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{(2l+1)}{4\pi}} P_l(\cos(\theta)) \quad (5.79)$$

L'onde plane admet le développement suivant :

$$e^{i\vec{r}\vec{k}} = \sum_0^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos(\theta)) e^{i\vec{r}\vec{k}} = \sum_{lm} 4\pi i^l j_l(kr) Y_{lm}^* Y_{lm}(\theta, \phi) \quad \text{avec } P_l\left(\frac{\vec{r}\vec{k}}{|\vec{r}\vec{k}|}\right) = \sum_m \frac{4\pi}{2l+1} Y_{lm}^* Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (5.80)$$

### 5.5.3 Mouvement d'une particule dans un puits carré

#### Puits infiniment profond

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

$$V(r) = \begin{cases} V(r) = 0 & \text{si } r \leq a \\ = \infty & \text{si } r > a \end{cases} \quad (5.81)$$

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 :

$$\psi_{klm} = A Y_{lm}(\theta, \varphi) j_l(kr) \quad \text{avec } E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (5.82)$$

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.

$$k = \frac{1}{a} X_{nl} \quad \text{ou} \quad E = \frac{\hbar^2}{2ma^2} X_{nl}^2 \quad (5.83)$$

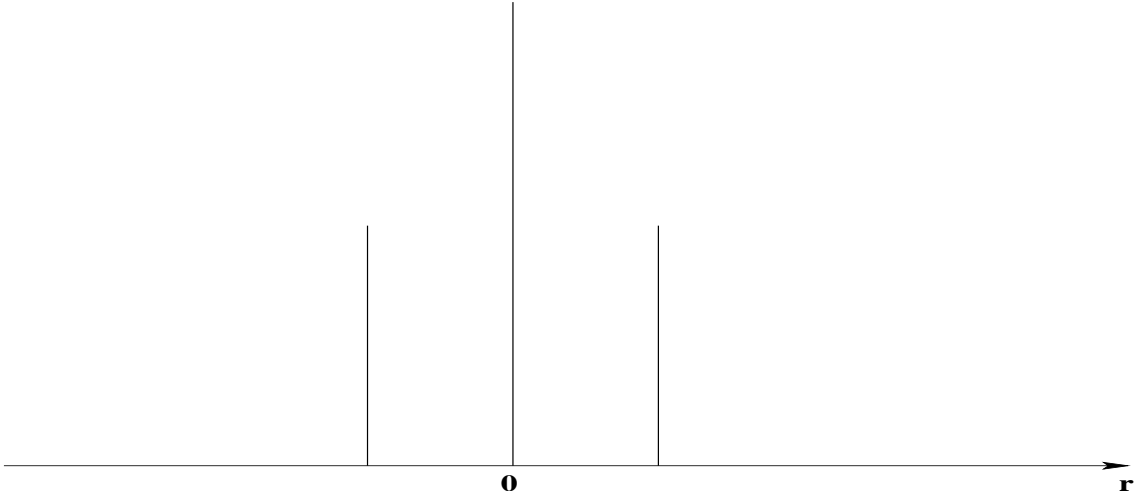


FIG. 5.1 – puits infiniment profond

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.

<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.

### Puits carré sphérique

On considère maintenant un puits sphérique non infini de la forme

$$V(r) = \begin{cases} V(r) = -V_0 & \text{si } r < a \\ = 0 & \text{si } r > a \end{cases} \quad (5.84)$$

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 :

$$\left[ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + \left[ k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \right] f_l(r) = 0 \quad \text{et en posant } \rho = kr \quad \left[ \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho} + \left[ 1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] \right] f_l(\rho) = 0 \quad (5.85)$$

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

$$\psi_l = A j_l(kr) \quad \text{pour } 0 < r < a \quad (5.86)$$

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  $r > a$ .

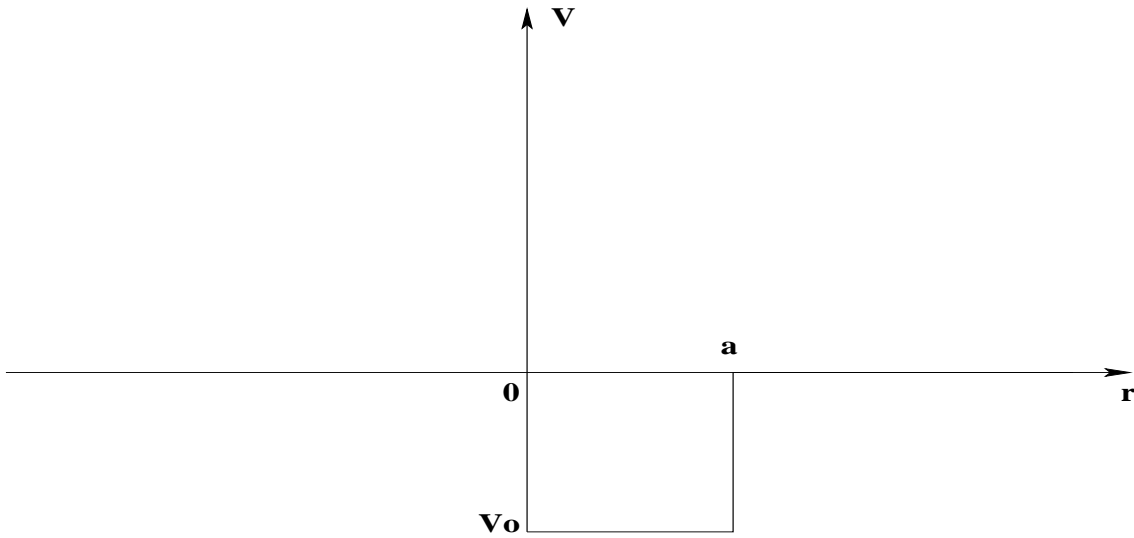


FIG. 5.2 – puits carré sphérique

$\psi_l = Bh_l^+(i\chi r)$ . 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 :

$$\left[ \frac{1}{h_l^+(i\chi\rho)} \frac{d}{dr} h_l^+(i\chi\rho) \right]_{r=a} = \left[ \frac{1}{j_l(kr)} \frac{d}{dr} j_l(kr) \right]_{r=a} \quad (5.87)$$

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

$$h_l^+(i\chi r) = \frac{e^{-\chi r}}{i\chi r} \quad \text{et} \quad j_0(kr) = \frac{\sin(kr)}{kr} \quad (5.88)$$

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  $\delta_l$  et par conséquent le rapport  $\frac{B}{A}$

$$\frac{kj_l'(ka)}{j_l(ka)} = k \frac{\cos \delta_l j_l'(ka) + \sin \delta_l \eta_l'(ka)}{\cos \delta_l j_l(ka) + \sin \delta_l \eta_l(ka)} \quad (5.89)$$

On appelle  $\delta_l$  le déphasage de l'onde sphérique de moment cinétique  $l$ .

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

$$k \cot(ka) = k \cot(ka + \delta_0) \quad (5.90)$$

### 5.5.4 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 :

$$V(r) = \frac{1}{2} m \omega^2 r^2 \quad (5.91)$$

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

$$\left[ \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d}{dr^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 r^2 - E_{nl} \right] y_{nl} = 0 \quad (5.92)$$

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

$$\left( \frac{d^2}{d\xi^2} - \xi^2 - \frac{l(l+1)}{\xi^2} + 2\varepsilon \right) y(\xi) = 0 \quad (5.93)$$

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 :

$$\left[ Z \frac{d^2}{dZ^2} + \left( 2s + \frac{1}{2} - Z \right) \frac{d}{dZ} + n \right] W(Z) = 0 \quad (5.94)$$

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

$$W(Z) = F\left(-n, 2s + \frac{1}{2}, Z\right) \quad (5.95)$$

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

$$E_{nl} = \hbar\omega\varepsilon = 2\hbar\omega\left(n + s + \frac{1}{4}\right) = 2\hbar\omega\left(n + \frac{l}{2} + \frac{3}{4}\right) E_{nl} = \hbar\omega\left(2n + l + \frac{3}{2}\right) \quad \text{avec } n, l = 0, 1, 2, \dots \quad (5.96)$$

La fonction d'onde est donc :

$$y_{nl} = N_{nl} e^{-\frac{\xi^2}{2}} \xi^{(-l+1)} F\left(-n, l + \frac{3}{2}, \xi^2\right) \text{ et la fonction d'onde complète } \psi_{nlm} = \frac{1}{\xi} y_{nl}(\xi) Y_{lm}(\theta\varphi) \quad (5.97)$$

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 dégénéérés.

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 polynome 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	$2 \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)$
$\frac{5}{2}$	1	1 p	$\sqrt{\frac{8}{3}} \xi \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)$
$\frac{7}{2}$	2	2 s 1 d	$\sqrt{\frac{8}{3}} \left(\xi^2 - \frac{3}{2}\right) \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)$
$\frac{9}{2}$	3	2 p 1 f	$\frac{4}{\sqrt{15}} (\xi^2) \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)$

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 6

## DEVOIR DE MÉCANIQUE QUANTIQUE -P4-

### 6.1 I - Oscillateur harmonique - notions de base

En mécanique classique, l'énergie totale  $E$  d'un oscillateur harmonique de masse  $m$  de pulsation  $\omega$  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 :

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

### 6.2 A - Formulation quantique de l'oscillateur harmonique

On se propose de calculer les énergies propres  $E_\lambda$  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 entier  $(\lambda - n)$  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.

## 6.3 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

### 6.3.1 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 :

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

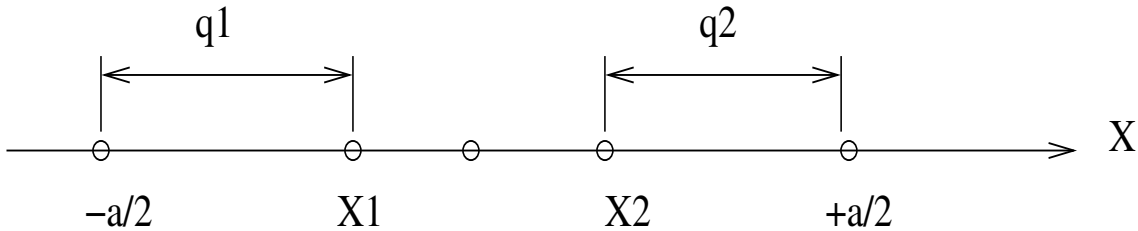


FIG. 6.1 –

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  $U_o$  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  $\omega_+$  et  $\omega_-$  dont on donnera les valeurs en fonction de  $\omega$ ,  $C$  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  $\omega_-$  est fonction de  $C$  alors que  $\omega_+$  en est indépendant.

## DEUXIEME PARTIE

### 6.4 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  $n^{ième}$  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.

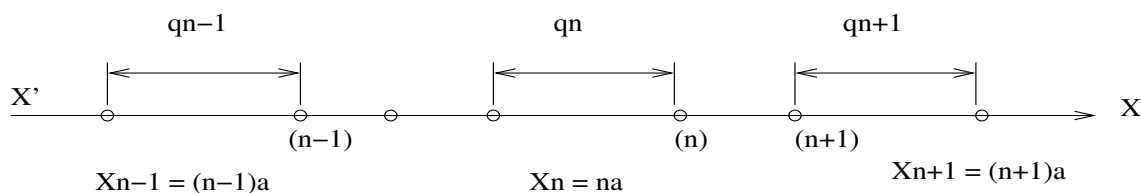


FIG. 6.2 –

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.

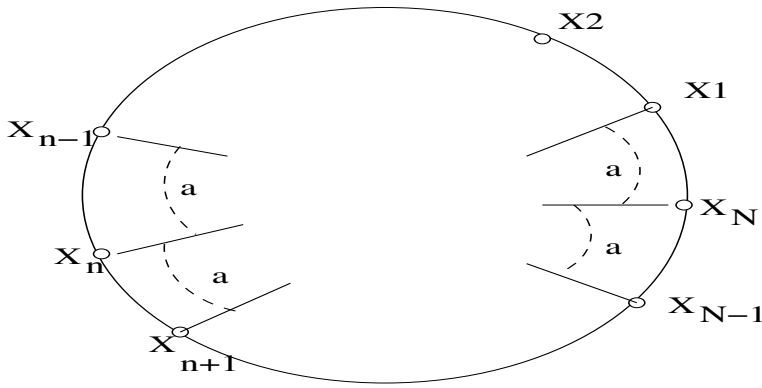


FIG. 6.3 –

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 :  $\mathbf{q}_{n+N} = \mathbf{q}_n$  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  $> 0$

1. Comme dans la 1<sup>ere</sup> 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 disputera 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  $\nu$  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 :

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

cette propriété permet de limiter les valeurs de  $k$  qui fournissent des valeurs indépendantes des variables à un domaine (1<sup>ere</sup> zone de Brillouin) auquel on se restreindra par la suite :

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

Donner les  $N$  valeurs de  $\nu$  correspondantes.

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

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

et

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

Où n varie de 1 à N et k dans la 1<sup>ere</sup> 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  $[\hat{Q}_k, \hat{P}_{k'}^+]$  et  $[\hat{Q}_k, \hat{P}_{k'}]$ .
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 l'hamiltonien  $\hat{H}_0$  en fonction de l'opérateur  $\hat{P}_0$ . A quelle 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 :

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

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  $\Omega_k$  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  $\Omega_k$ .

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  $\omega$  et la relation entre  $\beta_k$  et  $\alpha_{-k}$ .

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  $\Omega_k$  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 :

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

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

# Chapitre 7

## Solution du devoir

### 7.1 Vibrations d'une chaîne linéaire d'atomes

#### 7.1.1 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 :

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

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

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

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

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  $a$ , la force de rappel ne dépend pas alors de  $C$  et par conséquent  $\omega_+$  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  $\omega_-$  dépend de  $C$ .

## 7.2 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  $\nu$  entier

Si on pose  $k' = k + \frac{2\pi}{a}\nu'$  où  $\nu'$  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<sup>ieme</sup> relation est similaire, la somme sur k doit être en fait une somme sur les N valeurs de  $\nu$

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

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<sup>ere</sup> 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 :

$$\begin{aligned} \hat{q}_{n+1} - \hat{q}_n &= \sum_k \hat{Q}_k (f_k^{(n+1)*} - f_k^{n*}) \\ f_k^{n+1} &= \frac{1}{\sqrt{N}} e^{-ik(n+1)a} = e^{-ika} \frac{1}{\sqrt{N}} e^{-ikna} = e^{-ika} f_k^n \\ f_k^{(n+1)*} &= e^{ika} f_k^{n*} \\ \hat{q}_{n+1} - \hat{q}_n &= - \sum_k \hat{Q}_k f_k^{n*} (1 - e^{ika}) \\ \sum_n (\hat{q}_{n+1} - \hat{q}_n)^2 &= \sum_n \sum_k \sum_{k'} \hat{Q}_k f_k^{n*} (1 - e^{ika}) \hat{Q}_{k'} f_{k'}^{n*} (1 - e^{ik'a}) \\ \sum_n (\hat{q}_{n+1} - \hat{q}_n)^2 &= \sum_n \sum_k \sum_{k'} \hat{Q}_k f_k^{n*} f_{-k}^n (1 - e^{ika}) (1 - e^{ik'a}) \hat{Q}_{k'} \\ \sum_n (\hat{q}_{n+1} - \hat{q}_n)^2 &= \sum_k \sum_{k'} \hat{Q}_k \hat{Q}_{k'} \delta_{k,-k'} (1 - e^{ika}) (1 - e^{ik'a}) \\ \sum_n (\hat{q}_{n+1} - \hat{q}_n)^2 &= \sum_k \hat{Q}_k \hat{Q}_{-k} (1 - e^{ika}) (1 - e^{-ika}) \\ \sum_n (\hat{q}_{n+1} - \hat{q}_n)^2 &= \sum_k \hat{Q}_k \hat{Q}_k^+ (2 - e^{ika} - e^{-ika}) \\ \sum_n (\hat{q}_{n+1} - \hat{q}_n)^2 &= 2 \sum_k (1 - \cos ka) \hat{Q}_k \hat{Q}_k^+ \end{aligned}$$

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  $\hat{Q}_0 = \hat{Q}_0^+$  et  $\hat{P}_0 = \hat{P}_0^+$  et aussi  $\cos ka = 1$   
De sorte

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2m} \hat{P}_0 \hat{P}_0^+$$

De plus on a :  $f_0^n = \frac{1}{\sqrt{N}}$  d'où l'on déduit que :

$$\hat{Q}_0 = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N \hat{q}_n \text{ et } \hat{P}_0 = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N \hat{p}_n$$

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

$$\hat{X}_G = \frac{m \sum_{n=1}^N \hat{q}_n}{Nm} = \frac{\sum_{n=1}^N \hat{q}_n}{N} = \frac{1}{\sqrt{N}} \hat{Q}_0$$

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

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

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

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

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

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 :

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

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  $\Omega_k = \Omega_{-k}$

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

$$\hat{H} = \sum_{k \neq 0} \left( \frac{1}{2m} \hat{\pi}_k^2 + \frac{1}{2} m \Omega_k^2 \hat{\mathcal{E}}_k^2 \right) + \frac{\hat{P}_\circ}{2m}$$

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

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

L'hamiltonien se présente sous la forme d'une somme d'hamiltoniens d'oscillateurs harmoniques indépendants à une dimension de pulsation  $\Omega_k$  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  $\Omega_k$

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  $\Omega_k^2 = \frac{4C}{m} \sin \frac{ka}{2}$

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

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

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

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 :

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

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

Si  $\lambda$  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  $\Omega_k$  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 :

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

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  $v = 0$

# Chapitre 8

## Moment cinétique

### 8.1 Composition de moments cinétique

soit un système construit par la juxtaposition de deux systèmes  $\Sigma_1$  et  $\Sigma_2$ ,  $\Sigma = \Sigma_1 + \Sigma_2$ .

$\Sigma_1$  possède un moment cinétique  $j_1$

$\Sigma_2$  possède un moment cinétique  $j_2$

$\Sigma$  possède un moment cinétique  $j = j_1 + j_2$

L'espace des états correspondant à  $\Sigma_1$  est :  $\mathcal{E}(j_1)$  de dimension  $2j_1 + 1$

L'espace des états correspondant à  $\Sigma_2$  est :  $\mathcal{E}(j_2)$  de dimension  $2j_2 + 1$

L'espace des états correspondant à  $\Sigma$  est :  $\mathcal{E}(j)$  de dimension  $2j + 1$

$$\mathcal{E}(j) = \mathcal{E}(j_1) \otimes \mathcal{E}(j_2)$$

de dimension  $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$

$\mathcal{E}(j_1) \rightarrow$  vecteurs  $|j_1 m_1 \rangle$

$\mathcal{E}(j_2) \rightarrow$  vecteurs  $|j_2 m_2 \rangle$

$\mathcal{E}(j) \rightarrow |j_1 m_1 \rangle |j_2 m_2 \rangle = |j_1 j_2 m_1 m_2 \rangle$

$j_1^2 |j_1 j_2 m_1 m_2 \rangle = j_1(j_1 + 1)\hbar^2 |j_1 j_2 m_1 m_2 \rangle$

$j_2^2 |j_1 j_2 m_1 m_2 \rangle = j_2(j_2 + 1)\hbar^2 |j_1 j_2 m_1 m_2 \rangle$

$j_{1z} |j_1 j_2 m_1 m_2 \rangle = m_1 \hbar |j_1 j_2 m_1 m_2 \rangle$

$j_{2z} |j_1 j_2 m_1 m_2 \rangle = m_2 \hbar |j_1 j_2 m_1 m_2 \rangle$

$j_1^2, j_2^2, j_{1z}, j_{2z}$  ont une base commune  $|j_1 j_2 m_1 m_2 \rangle$

$j_1^2, j_2^2, j^2, j_z$  ont une base commune  $|JM \rangle$

Il faudra reconstituer les vecteurs  $|JM \rangle$  à partir des vecteurs  $|j_1 j_2 m_1 m_2 \rangle$ .

Valeurs propres de  $J_z$

Les vecteurs  $|j_1 j_2 m_1 m_2 \rangle$  sont vecteurs propres de  $J_z$  car  $J_z |j_1 j_2 m_1 m_2 \rangle = (j_{1z} + j_{2z}) |j_1 j_2 m_1 m_2 \rangle = (m_1 + m_2)\hbar |j_1 j_2 m_1 m_2 \rangle = M\hbar |j_1 j_2 m_1 m_2 \rangle$

$$M = m_1 + m_2 \text{ et } -(j_1 + j_2) \leq M \leq j_1 + j_2$$

Pour trouver le degré de dégénérescence de M c'est à dire le nombre de vecteurs correspondants à la même valeur propre  $M = m_1 + m_2$ , il faut chercher le nombre de couples qu'on peut former avec  $m_1$  et  $m_2$  tel que  $M = m_1 + m_2$ .

Les valeurs possibles de J pour avoir M sont :

$$J = j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 2, j_1 + j_2 - 3 \dots, |j_1 - j_2|$$

Dans l'espace  $\mathcal{E}(J) = \mathcal{E}(j_1) \otimes \mathcal{E}(j_2)$  de dimensions  $(2j_1+1)(2j_2+1)$  sous-tendu par les vecteurs  $|j_1 j_2 m_1 m_2\rangle$ , les valeurs possibles de J sont :  $|j_1 - j_2| \leq J \leq j_1 + j_2$ .

A chaque valeur de J correspond une seule série de  $(2J+1)$  vecteurs propres  $|JM\rangle$  du moment cinétique total.

$|J = j_1 + j_2, M = j_1 + j_2\rangle$  dégénérescence égale 1  $|j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle = |j_1 j_2 j_1 j_2\rangle$  vecteur unique

Par application successive de l'opérateur  $J_-$  et  $j_{1-} + j_{2-}$  on peut construire les vecteurs  $|j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle$  qui est combinaison linéaire de  $|j_1 j_2 j_1 - 1 j_2\rangle$  et  $|j_1 j_2 j_1 j_2 - 1\rangle$  c'est deux vecteurs de base forment le vecteur  $|JM\rangle$  correspondant à  $M = j_1 + j_2 - 1$

Par application successive de l'opérateur  $J_-$  et  $j_{1-} + j_{2-}$  on peut construire l'ensemble des vecteurs  $|JM\rangle$  à partir des vecteurs de base  $|j_1 j_2 m_1 m_2\rangle$ , les coefficients de ces combinaisons linéaires sont fixés par les conditions de normalisation et d'orthogonalité.

Cette méthode peut être généralisée sous la forme :

$$|JM\rangle = \sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM\rangle$$

les coefficients  $\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM\rangle$  sont appelés coefficients de Clebsch-Gordan. avec  $M = m_1 + m_2$  et  $|j_1 - j_2| \leq j_1 + j_2$

$|j_1 j_2 m_1 m_2\rangle$  forment une base orthonormée complète.

$$\sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle \langle j_1 j_2 m_1 m_2| = \mathbb{1}$$

$$\langle JM | J' M' \rangle = \delta_{J J'} \delta_{M M'}$$

$$\sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} \langle JM | j_1 j_2 m_1 m_2 \rangle \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | J' M' \rangle = \delta_{J J'} \delta_{M M'}$$

Relations d'orthogonalité des coefficients de Clebsch Gordan.

$$\sum_{J=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \sum_{M=-J}^J |JM\rangle \langle JM| = \mathbb{1}$$

$$\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 j_2 m'_1 m'_2 \rangle = \delta_{m_1 m'_1} \delta_{m_2 m'_2}$$

$$\sum_{J=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \sum_{M=-J}^J \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM \rangle \langle j_1 j_2 m'_1 m'_2 | JM \rangle = \delta_{m_1 m'_1} \delta_{m_2 m'_2}$$

Avec  $M = m_1 + m_2$  la sommation sur M se réduit à un seul terme et  $\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM \rangle$  réels.

1. Relations de récurrence :

$$\begin{aligned}
J_{1\pm}|j_1j_2m_1m_2\rangle &= \hbar\sqrt{j_1(j_1+1)-m_1(m_1\pm 1)}|j_1j_2m_1\pm 1m_2\rangle \\
J_{2\pm}|j_1j_2m_1m_2\rangle &= \hbar\sqrt{j_2(j_2+1)-m_2(m_2\pm 1)}|j_1j_2m_1m_2\pm 1\rangle \\
J_{\pm}|JM\rangle &= \hbar\sqrt{J(J+1)-M(M\pm 1)}|JM_{\pm 1}\rangle \\
|JM\rangle &= \sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} \langle j_1j_2m_1m_2|JM\rangle |j_1j_2m_1m_2\rangle
\end{aligned}$$

En appliquant :  $J_- = j_{1-} + j_{2-}$  au vecteur ci dessus :

$$\begin{aligned}
\hbar\sqrt{J(J+1)-M(M\pm 1)}|JM_{\pm 1}\rangle &= \sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} \langle j_1j_2m_1m_2|JM\rangle [ \\
\hbar\sqrt{j_1(j_1+1)-m_1(m_1\pm 1)}|j_1j_2m_1\pm 1m_2\rangle &+ \\
\hbar\sqrt{j_2(j_2+1)-m_2(m_2\pm 1)}|j_1j_2m_1m_2\pm 1\rangle ]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\hbar\sqrt{J(J+1)-M(M\pm 1)}\langle j_1j_2m'_1m'_2|JM_{\pm 1}\rangle &= \sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} \langle j_1j_2m_1m_2|JM\rangle [ \\
\hbar\sqrt{j_1(j_1+1)-m_1(m_1\pm 1)}\langle j_1j_2m'_1m'_2|j_1j_2m_1\pm 1m_2\rangle &+ \\
\hbar\sqrt{j_2(j_2+1)-m_2(m_2\pm 1)}\langle j_1j_2m'_1m'_2|j_1j_2m_1m_2\pm 1\rangle ]
\end{aligned}$$

Le premier terme de cette equation est :  $\langle j_1j_2m'_1m'_2|JM_{\pm 1}\rangle = 0$  si  $M = \pm J$

Cette equation est une relation de récurrence entre les coefficients de Clebsch-Gordan.

Convention de phase :

Les relations de récurrence fixent les phases relatives des kets  $|JM\rangle$ . Pour avoir la phase associée à  $|JM\rangle$  il suffit de chercher la phase associée aux kets  $|JJ\rangle$ . Au moment cinétique  $J$  on a  $(2J+1)$  vecteurs  $|JM\rangle$  dont les phases relatives ne dépendent que de  $J$ . Le coefficient  $\langle j_1j_2m_1m_2|JJ\rangle$  valeur maximum de  $m_1 = j_1$  et  $m_2 = J - j_1$

Pour fixer la phase du ket  $|JJ\rangle$  nous imposons au coefficient  $\langle j_1j_2J - j_1|JJ\rangle$  réel et positif.

Récapitulatif :

- $\langle j_1j_2J - j_1|JJ\rangle$  réel et positif.
- $\langle j_1j_2m_1m_2|j_1 + j_2M\rangle \geq 0$
- $\langle j_1j_2j_1M - j_1|JM\rangle \geq 0$
- signe  $\langle j_1j_2j_1m_1m_2|J - J\rangle = (-1)^{j_2+m_2}$
- $\langle j_2j_1m_2m_1|JM\rangle = (-1)^{j_1+j_2-J} \langle j_1j_2m_1m_2|JM\rangle$
- $\langle j_1j_2 - m_1 - m_2|J - M\rangle = (-1)^{j_1+j_2-J} \langle j_1j_2m_1m_2|JM\rangle$
- $\langle jjj - j|00\rangle > 0$

# Chapitre 9

## THEORIE DES PERTURBATIONS

### 9.1 Perturbations stationnaires-cas non dégénéré

L'étude d'un système quantique consiste à résoudre le problème aux valeurs propres de l'hamiltonien  $H$  décrivant le système. Dans la plupart des cas il est impossible de déterminer rigoureusement les niveaux du système. Il est alors nécessaire d'utiliser les techniques de calcul approché qui sont basées sur le calcul des perturbations et des variations.

La méthode des perturbations est appliquée lorsque l'hamiltonien du problème est de la forme :  $H(\lambda) = H_0 + \lambda H_1$  avec  $H$  ne dépendant pas du temps.

$\lambda H_1$  est une petite correction ou "perturbation" devant le terme principal  $H_0$  les éléments de matrice de  $\lambda H_1$  sont très petits devant ceux de  $H_0$  c'est à dire :

$$\lambda \langle i | H_1 | j \rangle \ll \langle i | H_0 | j \rangle$$

$H_1$  est comparable à  $H_0$  par contre  $\lambda \ll 1$ .  
 $H(\lambda)$ ,  $H_0$  et  $H_1$  sont hermitiques et  $\lambda$  réel.

On suppose que le problème aux valeurs propres de  $H_0$  est résolu.

$$H_0 \psi_i^0 = E_i^0 \psi_i^0$$

La méthode des perturbations consiste à développer les valeurs propres et états propres de  $H(\lambda)$  en puissance de  $\lambda$  en ne conservant qu'un nombre limité de termes.

Les niveaux d'énergie  $E_i^0$  sont simples, en général les niveaux  $E_i(\lambda)$  le seront aussi :

$$\lambda \rightarrow 0 \Rightarrow \begin{matrix} E_i(\lambda) \rightarrow E_i^0 \\ |\psi_i(\lambda)\rangle \rightarrow |\psi_i^0\rangle \end{matrix}$$

$E_i(\lambda)$  et  $|\psi_i(\lambda)\rangle$  polynome en puissance de  $\lambda$

$$\begin{cases} E_i(\lambda) = E_i^0 + \lambda E_i^{(1)} + \lambda^2 E_i^{(2)} + \dots \\ |\psi_i(\lambda)\rangle = |\psi_i^0\rangle + \lambda |\psi_i^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\psi_i^{(2)}\rangle + \dots \end{cases}$$

$E_i(\lambda)$  et  $|\psi_i(\lambda)\rangle$  sont valeur propre et vecteur propre de  $H(\lambda)$ .

$$H(\lambda)|\psi_i(\lambda)\rangle = E_i(\lambda)|\psi_i(\lambda)\rangle = (H_0 + \lambda H_1) \left\{ |\psi_i^\circ\rangle + \lambda|\psi_i^{(1)}\rangle + \lambda^2|\psi_i^{(2)}\rangle + \dots \right\} = \left\{ E_i^\circ + \lambda E_i^{(1)} + \lambda^2 E_i^{(2)} + \dots \right\} \left\{ |\psi_i^\circ\rangle + \lambda|\psi_i^{(1)}\rangle + \lambda^2|\psi_i^{(2)}\rangle + \dots \right\}$$

Cette équation est vérifiée quel que soit  $\lambda$ , par conséquent les coefficients des polynômes en  $\lambda$  sont égaux.

$$\begin{aligned} \lambda^0 &\rightarrow (H_0 - E_i^\circ)|\psi_i^\circ\rangle = 0 \\ \lambda^1 &\rightarrow (H_0 - E_i^\circ)|\psi_i^{(1)}\rangle = -(H^{(1)} - E_i^{(1)})|\psi_i^\circ\rangle \\ \lambda^2 &\rightarrow (H_0 - E_i^\circ)|\psi_i^{(2)}\rangle = -(H^{(1)} - E_i^{(1)})|\psi_i^{(1)}\rangle + E_i^{(2)}|\psi_i^\circ\rangle \\ \lambda^3 &\rightarrow (H_0 - E_i^\circ)|\psi_i^{(3)}\rangle = -(H^{(1)} - E_i^{(1)})|\psi_i^{(2)}\rangle + E_i^{(2)}|\psi_i^{(1)}\rangle + E_i^{(3)}|\psi_i^\circ\rangle \\ \lambda^q &\rightarrow (H_0 - E_i^\circ)|\psi_i^{(q)}\rangle = -(H^{(1)} - E_i^{(1)})|\psi_i^{(q-1)}\rangle + E_i^{(2)}|\psi_i^{(q-2)}\rangle + \dots + E_i^{(q)}|\psi_i^\circ\rangle \end{aligned}$$

L'état non-perturbé  $|\psi_i^\circ\rangle$  est normé :  $\langle \psi_i^\circ | \psi_i^\circ \rangle = 1$ , on impose à  $|\psi_i(\lambda)\rangle$  d'être normé  $\langle \psi_i(\lambda) | \psi_i(\lambda) \rangle = 1$

A l'ordre 1 :

$$\langle \psi_i(\lambda) | \psi_i(\lambda) \rangle = [\langle \psi_i^\circ | + \lambda \langle \psi_i^{(1)} |][|\psi_i^\circ\rangle + \lambda|\psi_i^{(1)}\rangle] + 0(\lambda^2) = \langle \psi_i^\circ | \psi_i^\circ \rangle + \lambda[\langle \psi_i^\circ | \psi_i^{(1)} \rangle + \langle \psi_i^{(1)} | \psi_i^\circ \rangle] + 0(\lambda^2) = 1$$

La phase de  $|\psi_i^\circ\rangle$  est choisit tel que le produit scalaire  $\langle \psi_i^\circ | \psi_i(\lambda) \rangle$  soit réel ce qui donne :

$$\langle \psi_i^\circ | \psi_i^{(1)} \rangle = \langle \psi_i^{(1)} | \psi_i^\circ \rangle = 0$$

Pour l'ordre 2 :

$$\begin{aligned} \langle \psi_i(\lambda) | \psi_i(\lambda) \rangle &= [\langle \psi_i^\circ | + \lambda \langle \psi_i^{(1)} | + \lambda^2 \langle \psi_i^{(2)} |][|\psi_i^\circ\rangle + \lambda|\psi_i^{(1)}\rangle + \lambda^2|\psi_i^{(2)}\rangle] + 0(\lambda^3) \\ 1 &= 1 + \lambda^2[\langle \psi_i^{(2)} | \psi_i^\circ \rangle + \langle \psi_i^\circ | \psi_i^{(2)} \rangle + \langle \psi_i^{(1)} | \psi_i^{(1)} \rangle] \\ \langle \psi_i^{(2)} | \psi_i^\circ \rangle + \langle \psi_i^\circ | \psi_i^{(2)} \rangle + \langle \psi_i^{(1)} | \psi_i^{(1)} \rangle &= 0 \\ 2 \langle \psi_i^{(2)} | \psi_i^\circ \rangle &= - \langle \psi_i^{(1)} | \psi_i^{(1)} \rangle \end{aligned}$$

### 9.1.1 Correction à l'ordre 1

$$\begin{aligned} (H_0 - E_i^\circ)|\psi_i^{(1)}\rangle &= -(H^{(1)} - E_i^{(1)})|\psi_i^\circ\rangle \\ 0 &= E_i^{(1)} \langle \psi_i^\circ | \psi_i^\circ \rangle - \langle \psi_i^\circ | H_1 | \psi_i^\circ \rangle \end{aligned}$$

$$E_i^{(1)} = \langle \psi_i^\circ | H_1 | \psi_i^\circ \rangle$$

La correction au premier ordre de l'énergie est égale à la valeur moyenne de l'hamiltonien perturbateur sur l'état non perturbé.

$$E_i(\lambda) = E_i^\circ + \langle \psi_i^\circ | \lambda H_1 | \psi_i^\circ \rangle$$

### 9.1.2 Correction à l'ordre 1 du vecteur propre

$$\begin{aligned} (H_0 - E_i^\circ)|\psi_i^{(1)}\rangle &= -(H^{(1)} - E_i^{(1)})|\psi_i^\circ\rangle \\ |\psi_i^\circ\rangle &\text{ forment une base orthonormée} \end{aligned}$$

$$\sum_i |\psi_i^\circ\rangle \langle \psi_i^\circ| = \mathbb{1}$$

$$\langle \psi_j^\circ | (H_0 - E_i^\circ) | \psi_i^{(1)} \rangle = \langle \psi_j^\circ | [-(H^{(1)} - E_i^{(1)})] | \psi_i^\circ \rangle = \langle \psi_j^\circ | H_0 | \psi_i^{(1)} \rangle - E_i^\circ \langle \psi_j^\circ | \psi_i^{(1)} \rangle = E_i^{(1)} \langle \psi_j^\circ | \psi_i^\circ \rangle - \langle \psi_j^\circ | H_1 | \psi_i^\circ \rangle$$

$$|\psi_i^{(1)}\rangle = \sum_{j \neq i} \frac{\langle \psi_j^\circ | H_1 | \psi_i^\circ \rangle}{E_i^\circ - E_j^\circ} |\psi_j^\circ\rangle$$

$|\psi_i^{(1)}\rangle$  est une superposition linéaire de tous les états non perturbés autres  $|\psi_i^\circ\rangle$ .

$$|\psi_i(\lambda)\rangle = |\psi_i^\circ\rangle + \lambda \sum_{j \neq i} \frac{\langle \psi_j^\circ | H_1 | \psi_i^\circ \rangle}{E_i^\circ - E_j^\circ} |\psi_j^\circ\rangle$$

### 9.1.3 Correction à l'ordre 2 de l'énergie

$$(H_0 - E_i^\circ) |\psi_i^{(2)}\rangle = -(H^{(1)} - E_i^{(1)}) |\psi_i^{(1)}\rangle + E_i^2 |\psi_i^\circ\rangle$$

$$E_i^2 = \langle \psi_i^\circ | H_1 | \psi_i^{(1)} \rangle$$

$$E_i^2 = \sum_{j \neq i} \frac{|\langle \psi_i^\circ | H_1 | \psi_j^\circ \rangle|^2}{E_i^\circ - E_j^\circ}$$

$$E_i^\circ(\lambda) = E_i^\circ + \lambda \langle \psi_i^\circ | H_1 | \psi_i^\circ \rangle + \lambda^2 \sum_{j \neq i} \frac{|\langle \psi_i^\circ | H_1 | \psi_j^\circ \rangle|^2}{E_i^\circ - E_j^\circ} + 0(\lambda^3)$$

## 9.2 Problème : effet zeeman anormal et interaction dipolaire

La configuration électronique de l'atome  $Zn^+$  (atome une fois ionisé  $Z = 29$ ) est, dans l'état fondamental :

$$1S^2 \quad 2S^2 \quad 2P^6 \quad 3S^2 \quad 3P^6 \quad 3D^{10} \quad 4S \quad (\text{un électron de valence})$$

L'atome est placé dans un champ magnétique  $\vec{B}$  constant dirigé suivant l'axe oz, si l'on tient compte de l'interaction spin-orbite l'hamiltonien total devient :  $H = H^\circ + H^1$  avec

$$H^1 = \gamma \vec{L} \cdot \vec{S} + \frac{\mu_B \cdot B}{\hbar} (L_z + 2S_z)$$

1. En considérant  $H^1$  comme un hamiltonien de perturbations par rapport à  $H^\circ$  dont les états propres sont états propres de  $L^2$ ,  $S^2$ ,  $L_z$ ,  $S_z$  (nombres quantiques :  $L$ ,  $S$ ,  $m_L$ ,  $m_S$ ), étudier les niveaux d'énergie du système, après avoir montré la relation suivante :

$$\vec{L} \cdot \vec{S} = L_z S_z + \frac{1}{2} (L_+ S_- + L_- S_+)$$

2. En déduire les facteurs de Landé de ces niveaux.
3. Que deviennent les résultats précédents si :

(a)  $\mu_B \cdot B \ll \frac{\gamma \hbar^2}{2}$  (effet Zeeman "anormal")

(b)  $\mu_B \cdot B \gg \frac{\gamma \hbar^2}{2}$  (effet Paschen-Back)

Dans ce dernier cas quelles sont les règles de sélection sur  $\mathbf{l}$ ,  $m_l$  et  $m_s$  pour les transitions permises induites par interaction dipolaire.

4. On applique les résultats précédents à la transition optique  $4D - 4P$  ( D correspond à  $L=2$ , P à  $L=1$ ) induite par interaction dipolaire électrique. Etablir que si  $B=0$ , cette transition correspond à un triplet de longueurs d'onde  $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ . Quelles sont les règles de sélection sur  $\mathbf{l}$  et  $\mathbf{j}$ , avec  $j = l \pm \frac{1}{2}$ .
5. L'atome est placé dans un champ  $B = 2T$ . Sachant que  $\lambda_1 = 2100.53 \text{ \AA}$ ,  $\lambda_2 = 2102.88 \text{ \AA}$ ,  $\lambda_3 = 2064.93 \text{ \AA}$ .
  - (a) Montrer que l'on est dans les conditions de l'effet Zeeman "anormal".
  - (b) Calculer le facteur de Landé relatif à chaque niveau initial.
  - (c) Etudier la décomposition de chacune des raies initiales.
    - Quelles sont les transitions permises et les règles de sélection sur  $\mathbf{l}$ ,  $\mathbf{j}$  et  $m_j$

Données numériques :  $h = 6.62 \cdot 10^{-34} \text{ J.s}^{-1}$ ,  $\mu_B = 9.2741 \cdot 10^{-24} \text{ J.T}^{-1}$ ,  $c = 2.997925 \cdot 10^8 \text{ m.s}^{-1}$

### 9.3 Calcul des perturbations pour les problèmes dépendants du temps

Considérons un système physique d'hamiltonien  $H_0$ , dont le problème aux valeurs propres est résolu  $H_0|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle$ . On considère que  $H_0$  a un spectre discret de valeurs propres.

A l'instant  $t = 0$ , une perturbation est appliquée au système, l'hamiltonien devient :  $H(t) = H_0 + \lambda H_1(t)$ ,  $\lambda$  paramètre réel très inférieur à 1. A l'instant  $t = 0$  le système est dans l'état  $|\psi_i\rangle$ , on applique la perturbation, le système va évoluer conformément à l'équation de Schrodinger :

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = [H_0 + \lambda H_1(t)] |\psi(t)\rangle$$

La solution à  $t = 0$  est  $|\psi(t = 0)\rangle = |\psi_i\rangle$ , on suppose qu'à l'instant  $t$  le système se trouve dans l'état  $|\psi_f(t)\rangle$ .

$$\begin{array}{ccc} |\psi_i\rangle & \rightarrow & |\psi(t)\rangle \\ t = 0 & \lambda H_1(t) & t \end{array}$$

La probabilité de transition  $|\psi_i\rangle \rightarrow |\psi_f\rangle$

$$\mathcal{P}_{if}(t) = |\langle \psi_f | \psi(t) \rangle|^2$$

Soit  $C_n(t)$  les composantes de  $|\psi(t)\rangle$  dans la base  $|\psi_n\rangle$

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n C_n(t) |\psi_n\rangle$$

$$C_n(t) = \langle \psi_n | \psi(t) \rangle$$

On remplace  $|\psi(t)\rangle = \sum_n C_n(t) |\psi_n\rangle$  dans l'équation de Schrodinger :

$$i\hbar \frac{d}{dt} \sum_n C_n(t) |\psi_n\rangle = [H_0 + \lambda H_1(t)] \sum_n C_n(t) |\psi_n\rangle$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} \sum_n C_n(t) \langle \psi_{n'} | \psi_n \rangle = E_n C_n(t) + \lambda \sum_n C_n(t) \langle \psi_{n'} | H_1 | \psi_n \rangle$$

$$i\hbar \frac{dC_n(t)}{dt} = E_n C_n(t) + \lambda \sum_n C_n(t) H_{nn'}^1(t)$$

C'est un système d'équations différentielles couplées à cause du second membre : En prenant  $\langle \psi_{n'} | H_1 | \psi_n \rangle = 0$  ce système se réduit à

$$i\hbar \frac{dC_n(t)}{dt} = E_n C_n(t)$$

Les solutions  $C_n(t)$  sont de la forme :

$$C_n(t) = b_n e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}$$

On peut approcher la solution de  $C_n(t)$  par :

$$C_n(t) = b_n(t) e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}$$

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n b_n(t) e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} \sum_n b_n(t) e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} |\psi_n\rangle = [H_0 + \lambda H_1(t)] \sum_n b_n(t) e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} |\psi_n\rangle$$

$$i\hbar \sum_n \left( \frac{db_n(t)}{dt} + \frac{E_n b_n(t)}{i\hbar} \right) e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} |\psi_n\rangle = \sum_n b_n(t) E_n e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} |\psi_n\rangle + \sum_n b_n(t) e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} \lambda H_1(t) |\psi_n\rangle$$

$$i\hbar b_k(t) e^{-\frac{iE_k t}{\hbar}} = \sum_n b_n(t) e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} \lambda \langle \psi_k | H_1(t) | \psi_n \rangle$$

$$b_k(t) = \frac{1}{i\hbar} \sum_n b_n(t) e^{\frac{(E_n - E_k)t}{i\hbar}} \lambda \langle \psi_k | H_1(t) | \psi_n \rangle$$

On défini :  $\omega_{kn} = \frac{E_k - E_n}{\hbar}$

$$b_k(t) = \frac{1}{i\hbar} \sum_n b_n(t) e^{i\omega_{kn} t} \lambda \langle \psi_k | H_1(t) | \psi_n \rangle$$

Il faut donc résoudre ce système d'équations différentielles pour  $t < 0$  le système est dans l'état  $|\psi_n\rangle$  c'est à dire on a  $b_n = 1$  et  $b_{n \neq k} = 0$ .

On suppose que la perturbation est suffisamment faible pour que à des temps petits on ait  $b_n = 1$  et les  $b_{n \neq k} = 0$  mais pas nuls, on néglige les  $b_{n \neq k}$  dans la sommation.

$$b_k(t) = \frac{1}{i\hbar} e^{i\omega_{kn} t} \lambda \langle \psi_k | H_1(t) | \psi_n \rangle$$

$$b_k(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t e^{i\omega_{kn} t'} \lambda \langle \psi_k | H_1(t') | \psi_n \rangle dt'$$

$|b_k(t)|^2$  évolue en fonction du temps on peut avoir des transitions. La probabilité de transition :

$$\lambda_{n \rightarrow k}(t) = |b_k(t)|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t e^{i\omega_{kn} t'} \lambda \langle \psi_k | H_1(t') | \psi_n \rangle dt' \right|^2$$

Si  $H_1$  ne dépend explicitement du temps :

$$\lambda_{n \rightarrow k}(t) = \frac{1}{\hbar^2} |\lambda \langle \psi_k | H_1 | \psi_n \rangle|^2 \left| \int_0^t e^{i\omega_{kn}t'} dt' \right|^2$$

$$\lambda_{n \rightarrow k}(t) = \frac{1}{\hbar^2} |\lambda \langle \psi_k | H_1 | \psi_n \rangle|^2 \left| \frac{e^{i\omega_{kn}t} - 1}{i\omega_{kn}} \right|^2 = \frac{1}{\hbar^2} |\lambda \langle \psi_k | H_1 | \psi_n \rangle|^2 t^2 \frac{\sin^2\left(\frac{\omega_{kn}t}{2}\right)}{\left(\frac{\omega_{kn}t}{2}\right)^2}$$

La fonction  $\frac{\sin^2 y}{y^2}$  admet des valeurs notables dans l'intervalle  $|y| \leq \pi$  ce qui correspond à  $(E_k - E_n)t < 2\pi\hbar$ .

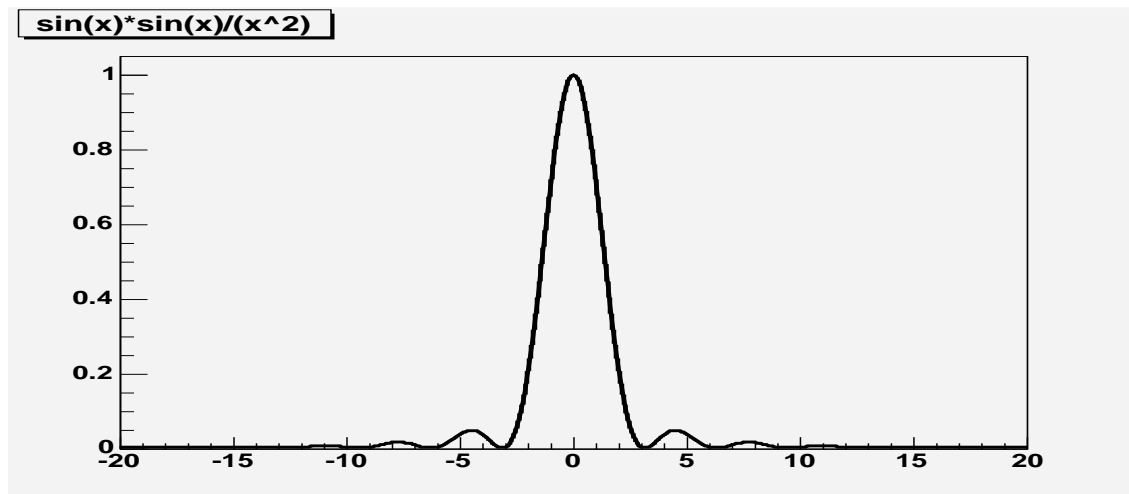


FIG. 9.1 – Fonction :  $\sin(x)**2/x**2$

Cette condition correspond à : le résultat le plus probable est l'état  $\psi_k = \psi_n$ . Cette inégalité exprime le fait que les transitions ont lieu vers des niveaux d'arrivée très serrés.

La probabilité totale de transition de  $E_n \rightarrow E_f$  à  $\delta E$  près est donnée par la somme des probabilités individuelles correspondant à chaque état d'arrivée  $E_k$

# Bibliographie

- [1] S.L. Glashow, Nucl. Phys. 22(1961)579.
- [2] A. Salam, Elementary particle theory, édité par N. Svastholm (Almquist et Wiksell, Stockholm, 1968).
- [3] S. Weinberg, Phys. Rev. Lett 19(1967)1264.
- [4] P. Lefèvre, T. Peterson et le Groupe d'étude LHC, LHC Conceptual Design, CERN-AC 95-05 (LHC) 1995.
- [5] G. Brianti. The Large Hadron Collider (LHC) in the LEP tunnel; proceedings of ECFA/LHC workshop, Aachen Vol. 1-40 4-9.10.1990.
- [6] P. Jenni. Physics Prospects at LHC-CERN, la Thuile 11.03.1994.
- [7] I. Hinchliffe and J. Womersley. LBNL-38997.
- [8] M.E. Leon Florian, H. Schonbacher, M. Tavlet. CERN-LAA/RA/92-006. 15 April 1992.
- [9] ATLAS collaboration. ATLAS Technical Proposal. CERN/LHCC/94-43 LHCC/P2, 1994.
- [10] ATLAS collaboration. ATLAS Inner Detector Technical Design Report. CERN/LHCC/97-16, ATLAS TDR 4, Volume 1-2, 30 April 1997.
- [11] ATLAS collaboration. ATLAS Technical Design Report, Liquid Argon Calorimeter Technical Design Report. CERN/LHCC/96-41, (1996).
- [12] ATLAS collaboration. ATLAS Calorimeter Performance. CERN/LHCC/96-40, ATLAS TDR 1. 15 December 1996.
- [13] ATLAS collaboration. ATLAS Technical Design Report, Tile Calorimeter Technical Design Report. CERN/LHCC/96-42, (1996).
- [14] V.A.J. Van Lit. Nucl.Instr and Methods A288,(1990)54.
- [15] D. Hagedorn, H. Gerstenberg, H. Schonbacher. CERN AT/95-29 (MA). LHC Note 343 (1995).
- [16] T. Mouthuy. ATLAS Internal Note INDET-No-28, (1993).
- [17] A. Ferrari et al. Radiation calculations for the ATLAS detector and experimental hall.
- [18] A. Ferrari et al. RD3 Note-No-22, (1991).
- [19] Technical training seminar 30.3-2.4.1993. 2ème partie : Effets des radiations sur les matériaux.
- [20] M. Tavlet. TIS-CFM/96-12/pp. 27 Septembre 1996.
- [21] H. Schonbacher et al. CERN 96-05. 4 July 1996.

- [22] L.W. Alvarez, LRL Group A. Physics Note 692 (26/11/1968) et S.E. Derenzo et al. Nat.Acc.Lab.Summer Study Report Arpen (1969).
- [23] Robert C.Weast, editor. Handbook of Chemistry and Physics. CRC Press, INC., 58TH Edition, 1977,78.
- [24] W. E. Cleland, E. G. Stern. NIMA, 1994.
- [25] G. Kolachev, EN End-Cap Presampler. Status Report. ATLAS Internal Note LARG-NO-101 (1998).
- [26] H. Chakir et al. ATLAS Internal Note LARG-NO-98-100 2 February 1998.
- [27] A. Belymam, C. Clement, B. Lund-Jensen. Tests of the Presampler Electrodes for “Module 0”, sera publié prochainement dans une note ATLAS.
- [28] Christophe Clement. Technologie licentiat KTH, Stockholm 1998.
- [29] J. Alarja, Thesis 1988, Université Joseph Fourier de Grenoble- ISN 88.81
- [30] K.H. Maier and J. Nitschke, Nucl. Instr. and Meth., 59 (1968) 227.
- [31] J. Collot, P.de Saintignon, A. Hoummada, G. Mahout, D. Marchand, F. Merchez, E. León Florián, C. Leroy, Ph. Jean, B. Merkel, Nucl. Instr. Meth. in Phys. Res., A350 (1994) 525-529.
- [32] R.A. Cecil, B.D. Anderson and R. Madey, Nucl. Instr. and Meth., 161 (1979) 439.
- [33] M.J. Saltmarsh, C.A. Ludemann, C.B. Fulmer and R.C. Styles, Nucl. Instr. and Meth., 145 (1977) 81.
- [34] A.I. Namenson, E.A. Wolicki, G.C. Messenger, IEEE Trans. Nucl. Sci., Vol. NS-29, (1982) 1018.
- [35] A.M. Ougouag, J.G. Williams, M.B. Danjaji, S.Y. Yang and J.L. Meason, IEEE Trans. Nucl. Sci., NS-37 (1990) 2219.
- [36] G. Messenger and M. Ash, The effects of radiation on electronic systems (Von Nostrand Reinhold, New York, 1986), ISBN 0-442-25417-2.
- [37] A. Belymam, A. Hoummada, J. Collot, P.de Saintignon, G. Mahout, B. Merkel, Nucl. Instr. Meth. in Phys. Res., B134 (1998) 217-223.
- [38] Courrier du CERN, 38(April 1998)13.
- [39] H. Schonbacher, M. CERN 98-12, Technical Inspection and Safety Commision, 31 December 1989.
- [40] M.L. Andrieux, A. Belymam, J. Collot, P.de Saintignon, A. Ferrari, J.Y. Hostachy, A. Hoummada, Ph. Martin, B. Merkel, P.M Puzo, D. Sauvage, M. Wielers. ATLAS Internal Note. ATLA-LARG-98-105.
- [41] J.F. Muraz, Etude comparative des produits : FR4, FR5, G10, G11. 2 Avril 1996.
- [42] G. Jaffe, Ann. Phys. 42 (1913) 303.
- [43] H.A. Kramers, Physica 18 (1952) 665.
- [44] L. Onsager, Phys. Rev. 54 (1938) 554.
- [45] J. Thomas et D.A. Imel, Phys. Rev. A36 (1987) 614.
- [46] G. Bakale et al., J. Phys. Chem. Vol. 80, 23 (1976) 2556.

- [47] F. Holldorfer, Diplomarbeit, Mainz (1997).
- [48] E. Shibamura et al., Nucl. Instr. and Meth. 131 (1975) 249.
- [49] W. Hofmann et al., Nucl. Instr. and Meth. A135 (1976) 151.
- [50] A.S. Barabash et al., Nucl. Instr. and Meth. A234 (1985) 451.
- [51] V. Vuillemin et al., Nucl. Instr. and Meth. A316 (1992) 71.
- [52] L.S. Miller et al., Phys. Rev. Vol. 166, No 3, 15 February 1968.
- [53] S.D. Biller et al., Nucl. Instr. and Meth. A276 (1989) 144.
- [54] G. Carugno et al., Nucl. Instr. and Meth. A292 (1990) 580.
- [55] D.W. Swan., Proc. Phys. Soc. 1963, Vol. 82.
- [56] D.F. Anderson and D.C. Lamb., Nucl. Instr. and Meth. A265 (1988) 440.
- [57] D.C. Rahm., Nucl. Instr. and Meth. A316 (1992) 67.
- [58] K. Hummer, H. Schonbacher, B. Szeless, M. Tavlet, H.W. Weber. CERN AT/95-24 (MA). LHC Note 348 (1995).
- [59] A. Belymam, J. Collot, Ph. Martin. ATLAS Internal Note. LARG-NO-96-056. 18 November 1996.