

Universite Abd Elhamid Ibn Badis – Mostaganem

Faculté des Sciences Exactes et de l'Informatique

Département de Physique

Année Universitaire 2021/2022

Polycopié de Cours de Mécanique Quantique

Niveaux L3 et Master

Préparé par BELHOUARI Aissa

Expertise :

- Expert 1 : Dr. Benosmane Ahmed – Université de Mostaganem
- Expert 2 : Pr. Dib Anis Amine – Université USTO Oran

Tables des Matières

Chapitre 1 Rappel sur le formalisme et les postulats de la mécanique quantique.....	7
1.1 Introduction.....	7
1.2 L'élaboration de la mécanique quantique (aperçu historique).....	7
1.2.1 L'ancienne mécanique quantique.....	7
1.2.2 La mécanique matricielle (Heisenberg 1925).....	7
1.2.3 La mécanique ondulatoire (Schrödinger 1926).....	8
1.3 Postulats de la mécanique quantique.....	8
1.3.1 L'état du système.....	8
1.3.2 Grandeur physique.....	8
1.3.3 Valeurs mesurables.....	9
1.3.4 Résultats de mesure.....	9
1.3.5 L'évolution du système.....	10
1.4 Valeur moyenne d'une grandeur physique.....	10
1.5 Ensemble complet d'observable qui commutent (ECOC).....	10
1.5.1 Théorème.....	10
1.5.2 Définition d'un ECOC.....	10
1.6 L'image de Schrödinger.....	10
1.7 L'image de Heisenberg.....	11
1.8 L'image d'interaction.....	11
1.9 Produit tensoriel d'espaces d'états.....	11
1.9.1 Définition et propriétés.....	11
1.10 L'opérateur densité.....	12
Exercices du Chapitre 1.....	14
Chapitre 2 L'oscillateur harmonique.....	19
2.1 Introduction.....	19
2.2 Importance de l'oscillateur harmonique en physique.....	19
2.3 Equation de Schrödinger.....	20
2.4 L'algèbre des opérateurs création et annihilation a et a^+.....	20
2.4.1 Expression de H en fonction de N	21
2.4.2 Expression des énergies E_n	21
2.4.3 Relations de commutation.....	21
2.4.4 L'action des opérateurs a et a^+ sur les vecteurs $ n\rangle$	21
2.4.4.1 L'action de a	21

2.4.4.2	L'action de $a +$	23
2.4.5	Construction des étapes propres $ n\rangle$ à partir de l'état fondamental $ 0\rangle$	23
2.4.6	Représentation matricielle des opérateurs	23
2.4.7	Les fonctions d'ondes.....	24
Exercices du Chapitre 2		26
Chapitre 3 Théorie du Moment Cinétique en Mécanique Quantique.....		32
3.1	introduction.....	32
3.2	Le moment orbital L.....	32
3.2.1	Quantification de L	32
3.2.2	L'effet Zeeman normal	32
3.3	Le spin	33
3.3.1	Expérience du Stern-Gerlach.....	33
3.4	Théorie générale du moment cinétique J.....	34
3.4.1	Propriétés.....	35
3.4.2	La représentation matricielle d'opérateurs suivant la base $ j, m\rangle$	35
3.4.3	Cas particulier.....	36
3.4.4	Addition de moments cinétiques	36
3.5	Fonctions propres des opérateurs L^2 et L_z.....	37
3.5.1	Détermination de l'expression des harmoniques sphériques.....	38
3.5.2	Les polynômes de Legendre.....	40
3.6	Relation du spin à la statistique	42
Exercice du Chapitre 3.....		43
Chapitre 4 Problème du Potentiel Central.....		49
4.1	Introduction	49
4.2	Résolution de l'équation de Schrödinger	50
4.2.1	L'équation radiale.....	52
4.3	Exemple de système soumis à un potentiel central.....	53
4.3.1	Particule libre en coordonnées sphériques à 3 dimensions.....	53
4.3.2	L'oscillateur harmonique à trois dimensions	54
4.3.1.1	Etude du comportement asymptotique	55
4.3.1.2	Les niveaux d'énergies	57
4.3.3	L'atome d'hydrogène	58
4.3.1.3	Problème à deux corps.....	59
4.3.1.4	L'équation radiale.....	61
4.3.1.4.1	Le comportement asymptotique.....	61

4.3.1.5	Les niveaux d'énergies	63
4.3.1.6	Les fonctions propres	64
Exercices du Chapitre 4		69
Chapitre 5 Théorie des Perturbations – Méthodes d'Approximation		74
5.1	Introduction	74
5.2	Phénomènes indépendants du temps perturbations stationnaire	74
5.2.1	Perturbation d'un niveau non dégénéré	76
5.2.1.1	Correction à l'énergie à l'ordre (1)	76
5.2.1.2	La correction au vecteur d'état à l'ordre 1	76
5.2.1.3	Correction à l'énergie à l'ordre (2)	77
5.2.2	Spectre discret dégénéré	77
5.3	Perturbations dépendantes du temps (non stationnaire)	78
Exercices du Chapitre 5		81
Chapitre 6 Théorie de la Diffusion		86
6.1	Introduction	86
6.2	Définition de la section efficace de diffusion	88
6.3	Etats stationnaire de diffusion, calcul de la section efficace	89
6.4	Forme asymptotique des états stationnaires de diffusion	89
6.5	Amplitude de diffusion (particule sans spin)	89
6.5.1	Détermination de l'amplitude de diffusion à partir des solutions de l'équation de Schrödinger	89
6.5.2	Détermination de l'amplitude de diffusion par la méthode des déphasage (Analyse en onde partielle)	91
6.6	Théorème optique	94
Exercices du Chapitre 6		95
Chapitre 7 Système de Particules Identiques		99
7.1	Introduction	99
7.2	Equation de Schrödinger pour un système à N particules	99
7.3	Système de particules identiques	100
7.3.1	Le postulat de symétrisation	101
7.3.1.1	Enoncé du postulat	101
7.3.2	Construction des fonctions d'onde symétrique et antisymétrique	101
7.3.3	Construction d'une base de l'espace des états	104
Exercices du Chapitre 7		106

Chapitre 8 Formalisme de la Seconde Quantification.....	111
8.1 Introduction	111
8.2 Représentation nombre d'occupation.....	111
8.2.1 Espace des états	112
8.2.2 Les opérateurs création et annihilation a et a^+	113
8.2.3 L'opérateur champs	114
8.2.4 Expressions des opérateurs a 1 et 2 particules.....	114
8.2.5 Théorème de Wick	115
8.2.5.1 Définition du produit normal.....	115
8.2.5.2 Théorème de Wick	115
Exercices du Chapitre 8	117

Chapitre 1
Rappel sur le formalisme et les
postulats de la mécanique
quantique

Chapitre 1 Rappel sur le formalisme et les postulats de la mécanique quantique

1.1 Introduction

A la fin du 19^{ème} siècle la physique classique a été confrontée à plusieurs problèmes les plus importants sont ceux qui concernent l'explication du rayonnement thermique du corps noir, la spectroscopie atomique et la stabilité de la matière. Pour les résoudre les physiciens de l'époque ont dû renoncer aux principes de la physique classique et d'adopter de nouvelles idées comme la quantification de l'énergie (Planck 1900) et la dualité onde-corpuscule (hypothèse de de Broglie 1923)

1.2 L'élaboration de la mécanique quantique (aperçu historique)

L'élaboration de la mécanique quantique a été achevée en deux étapes décisives constituées par les travaux d'Heisenberg 1925 et ceux de Schrödinger 1926. Mais la première tentative pour construire une théorie consistante basée spécialement sur l'idée des quanta a été entamée par Bohr -après le succès de son modèle atomique (1913)- et Sommerfeld. Leurs efforts aboutirent à la formulation de ce qu'on appelle l'ancienne mécanique quantique.

1.2.1 L'ancienne mécanique quantique

On étudie le système toujours en se basant sur la physique classique puis on sélectionne les états ou trajectoires quantiques sur la base de la règle de Bohr-Wilson-Sommerfeld

$$\oint p_i dq_i = n_i h \quad ; \quad n_i = 0, 1, 2, \dots \text{entier}$$

Où p_i est le moment conjugué de coordonnée généralisée q_i

1.2.2 La mécanique matricielle (Heisenberg 1925)

D'après Heisenberg il faut renoncer à tout ce qui est inobservable comme la position et la quantité de mouvement donc la notion de trajectoire perd tout son sens en mécanique quantique. La dynamique atomique par exemple doit se fixer l'objectif de décrire ce qui est observable c.à.d. spectre atomique, fréquences, intensité des raies etc. En suivant le raisonnement d'Heisenberg (voir Claude Aslangul Tome 1 pour les détails de sa démarche) toute grandeur physique relative à un mouvement périodique peut être décomposée en série de Fourier en particulier la coordonnée généralisée $q(t)$

$$q(t) = \sum_k q_k e^{ik\omega t}$$

En se basant sur la relation de Planck $E = \hbar\omega$ de la relation $\hbar\omega = E_f - E_i$ ainsi que le principe de correspondance - Ce principe stipule que pour les grands nombres quantiques les fréquences émises coïncident avec celles prédites par la théorie classique-, il arrive aux résultats que $q(t)$ sont représentés par des êtres mathématiques dont le produit est non commutatif donc ils ne sont pas évidemment des nombres. C'est Born qui conclut que ces

objets sont des matrices et essaya de généraliser la correspondance proposée par Heisenberg à toute grandeur physique comme la quantité de mouvement \bar{p} et l'hamiltonien H. Born et Jordan font aussi l'extension de ce formalisme aux équations d'Euler –Lagrange et d'Hamilton et démontrèrent la valeur du commutateur $[q, p] = i\hbar$

1.2.3 La mécanique ondulatoire (Schrödinger 1926)

Après la confirmation expérimentale du caractère ondulatoire de la matière par les expériences de Davison-Germer et autres, Schrödinger essaie de trouver l'équation qui gouverne l'évolution de cette onde. Il exploite l'analogie établie par Hamilton entre l'optique géométrique et la mécanique classique. Son point de départ était l'équation d'Hamilton-Jacobi et obtint en première étape son équation indépendantes du temps qu'il généralisa ensuite. Le formalisme de la mécanique ondulatoire appliquée à l'atome d'hydrogène et l'oscillateur harmonique donna les mêmes résultats que le formalisme matriciel d'Heisenberg ceci était révélateur de l'équivalence des 2 formalismes. Schrödinger démontra ensuite l'équivalence entre les 2 points de vue en retrouvant la valeur du commutateur $[q, p]=i\hbar$ où maintenant p est remplacée par l'opérateur différentiel $p = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q}$. Eckart, Pauli et Dirac ont établi les détails de cette équivalence avec l'unification de leurs formalismes en un seul (formalisme de Dirac).

L'ensemble des fonctions d'onde est un espace vectoriel, dans le formalisme de la mécanique ondulatoire les grandeurs physiques sont représentées par de opérateurs différentiels. On sait définir et agir des opérateurs représentables par des matrices dès qu'une base est choisie. Donc les matrices d'Heisenberg ne sont autres que la représentation matricielle des opérateurs de Schrödinger (voir Claude Aslangul Tome 1 pour plus de détails).

1.3 Postulats de la mécanique quantique

1.3.1 L'état du système

L'état d'un système est décrit non pas par un point dans l'espace des phases, mais plutôt par un vecteur $|\psi(t)\rangle$ appartenant à un *espace de Hilbert* appelé *espace des états* ζ .

ζ est un espace de Hilbert donc :

ζ est un espace vectoriel.

ζ est muni d'un produit scalaire définissant une norme définie positive.

ζ est *complet* c'est-à-dire que toute suite de Cauchy converge vers une limite appartenant à ζ .

On peut choisir une base de ζ qui peut être continue ($|\psi_\alpha\rangle$ *indice continu* $\in R$) ou discrète ($|\psi_i\rangle$ $i = 1, 2 \dots n$)

On retrouve la fonction d'onde ψ dès qu'une représentation est choisie

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \langle \vec{r} | \psi(t) \rangle \rightarrow \text{représentation } \vec{R}$$

$$\psi(\mathbf{p}, t) = \langle \vec{p} | \psi(t) \rangle \rightarrow \text{représentation } \vec{P}$$

1.3.2 Grandeur physique

Contrairement à la physique classique où les grandeurs physiques (position, quantité de mouvement, hamiltonien, moment cinétique...) sont des fonctions, en mécanique quantique elles sont représentées par des opérateurs hermitiques et linéaires. La construction de l'opérateur associé à une grandeur physique $G(\vec{r}, \vec{p})$ se fait par le remplacement de \vec{r} et \vec{p} par leurs opérateurs correspondants.

$$G(\vec{r}, \vec{p}) \rightarrow \hat{G}(\hat{r}, \hat{p}), \text{ en représentation } \vec{R}\hat{r} = \vec{r} \text{ et } \hat{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$$

1.3.3 Valeurs mesurables

Les valeurs mesurables qu'on peut obtenir lors de la mesure d'une grandeur physique sont les valeurs propres de l'opérateur associé à cette grandeur. Donc on peut calculer à l'avance toutes les valeurs possibles qu'on obtiendrait lors de l'opération de mesure de cette grandeur en résolvant l'équation aux valeurs propres $A|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$ qui permet d'avoir les valeurs propres et leurs vecteurs propres correspondants

1.3.4 Résultats de mesure

En mécanique quantique on ne peut pas prévoir à l'avance quelle valeur de la grandeur on va obtenir lors de l'opération de mesure on ne peut calculer que les probabilités d'obtention des valeurs de cette grandeur. La probabilité pour que la mesure donne la valeur λ_n :

- a) Pour un spectre discret non dégénéré : $P_r(\lambda_n) = \frac{|\langle \psi_n | \psi \rangle|^2}{\langle \psi | \psi \rangle}$
- b) Pour un spectre discret dégénéré

$$P_r(\lambda_n) = \sum_{i=1}^{g_n} \frac{|\langle \psi_i^\lambda | \psi \rangle|^2}{\langle \psi | \psi \rangle}$$

Où g_n est le degré de dégénérescence

- a) Pour un spectre continu la probabilité $dP_r(\lambda)$ d'avoir un résultat compris entre λ et $\lambda + d\lambda$ est :

$$dP_r(\lambda) = \frac{|\langle \psi_\lambda | \psi \rangle|^2}{\langle \psi | \psi \rangle} d\lambda$$

L'état du système juste après la mesure est l'état propre associé à la valeur obtenue.

$|\psi\rangle_{\text{après}} = |\psi_n\rangle$ si la valeur λ_n obtenue lors de la mesure est non dégénérée

Par contre si la valeur est dégénérée l'état du système est la projection normalisée de $|\psi\rangle$ sur le sous-espace engendré par les vecteurs propres ($|\psi_i^\lambda\rangle$ $i = 1 \dots g_n$) associée à λ_n

$$|\psi\rangle_{\text{après}} = \sum_{i=1}^{g_n} b_i |\psi_i^\lambda\rangle$$

Ceci est résumé par la relation :

$$|\psi\rangle_{\text{après}} = \frac{P_n |\psi\rangle}{\sqrt{\langle \psi | P_n | \psi \rangle}}$$

Où P_n est le projecteur sur le sous espace de λ_n

1.3.5 L'évolution du système

L'évolution au cours du temps de l'état d'un système physique est décrite par l'équation de Schrödinger :

$$\hat{H} |\psi\rangle = i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle$$

Où $|\psi\rangle$ est le vecteur d'état du système et H l'opérateur associée à son énergie totale.

Il s'écrit en représentation $|\vec{r}\rangle$ pour une particule de masse m :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \hat{V}(\vec{r})$$

1.4 Valeur moyenne d'une grandeur physique

Par définition la valeur moyenne d'une grandeur physique dans un état $|\psi\rangle$:

$$\langle A \rangle = \frac{\langle \psi | A | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}$$

Son évolution temporelle :

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

On dit qu'une grandeur physique A est une constante de mouvement si $[A, H] = 0$ et $\frac{\partial A}{\partial t} = 0$

1.5 Ensemble complet d'observable qui commutent (ECOC)

1.5.1 Théorème

Si 2 grandeurs physiques A et B commutent (compatibles) donc $[A, B]=0$ alors elles possèdent des vecteurs propres communs à partir desquelles on peut construire une base.

$|\psi\rangle$ est un vecteur propre commun à A et B alors $A|\psi\rangle = \lambda_a |\psi\rangle$ et $|\psi\rangle = \lambda_b |\psi\rangle$, on peut identifier $|\psi\rangle$ par ses valeurs propres $|\psi\rangle \equiv |\lambda_a, \lambda_b\rangle$

1.5.2 Définition d'un ECOC

Un ensemble de grandeurs physiques A, B, C, D, \dots forment un ECOC si :

- i. Les grandeurs de cet ensemble commutent deux à deux $[A, B]=[B, C]=[A, C], \dots = 0$
- ii. Il existe une base unique formée à partir des vecteurs propres communs à ces grandeurs. La donnée des valeurs propres de A, B, C, D, \dots suffit à déterminer un vecteur propre unique qu'on peut noter $|\lambda_a, \lambda_b, \lambda_c, \lambda_d, \dots\rangle$

1.6 L'image de Schrödinger

Dans cette image on considère que ce sont les vecteurs $|\psi(t)\rangle$ qui dependent explicitement du temps et non pas les opérateurs. Les vecteurs $|\psi(t)\rangle_s$ obéissent à l'équation de Schrödinger

$$\hat{H}|\psi(t)\rangle_s = i\hbar \frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle_s$$

$$|\psi(t)\rangle_s = U(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle_s$$

$U(t, t_0)$ est l'opérateur d'évolution pour un système conservatif $U(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)}$

1.7 L'image de Heisenberg

Dans cette image on considère que ce sont les opérateurs $A_H(t)$ qui dependent du temps et non pas les vecteurs $|\psi\rangle_H$ qui sont maintenant constants. Les opérateurs et les vecteurs de l'image d'Heisenberg sont reliés à ceux de Schrödinger par une transformation unitaire

$$|\psi(t)\rangle_H = U^+(t, t_0)|\psi(t)\rangle_s = |\psi(t_0)\rangle_s$$

$$A_H(t) = U^+(t, t_0)A_s U(t, t_0)$$

$$\frac{dA_H(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[A_H(t), H]$$

...

$$A_H(t_0) = A_s$$

1.8 L'image d'interaction

Cette image sert à décrire des systèmes dont l'hamiltonien dépend du temps $H(t) = H_0 + V(t)$

$$|\psi(t)\rangle_I = e^{-\frac{i}{\hbar}H_0(t-t_0)}|\psi(t_0)\rangle_s$$

$$A_I(t) = e^{\frac{i}{\hbar}H_0(t-t_0)}A_s e^{-\frac{i}{\hbar}H_0(t-t_0)}$$

$$i\hbar \frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle_I = V_I|\psi(t)\rangle_I$$

$$\frac{dA_I(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[A_I(t), H_0]$$

1.9 Produit tensoriel d'espaces d'états

Avec le produit tensoriel on exprime l'espace d'états ξ par des sous espaces $\xi_i \subset \xi$ par exemple ξ en fonction de ξ_x, ξ_y, ξ_z . D'un autre côté il permet d'exprimer l'état d'un système S composé de plusieurs systèmes $S = S_1 + S_2 + S_3 + \dots$

1.9.1 Définition et propriétés

Soient 2 espaces ξ_1 et ξ_2 de dimension N_1 et N_2 par définition l'espace ξ est appelé produit tensoriel de ξ_1 et ξ_2 qu'on note $\xi = \xi_1 \otimes \xi_2$ de dimension $N = N_1 \cdot N_2$ si à tout couple de vecteur $|\psi_1\rangle \in \xi_1$ et $|\psi_2\rangle \in \xi_2$ on associe un vecteur

$$|\psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \text{ qu'on écrit aussi } |\psi\rangle = |\psi_1\rangle |\psi_2\rangle = |\psi_1\psi_2\rangle$$

$$a(|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle) = (a|\psi_1\rangle) \otimes |\psi_2\rangle = |\psi_1\rangle \otimes (a|\psi_2\rangle) \text{ a est une constante}$$

$$|\psi_1\rangle \otimes (|\psi_2\rangle + |\varphi_2\rangle) = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle + |\psi_1\rangle \otimes |\varphi_2\rangle$$

Si $|\psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle$ et $|\varphi\rangle = |\varphi_1\rangle \otimes |\varphi_2\rangle$ deux vecteurs de $\xi = \xi_1 \otimes \xi_2$ alors le produit scalaire $\langle\varphi|\psi\rangle = \langle\varphi_1|\psi_1\rangle\langle\varphi_2|\psi_2\rangle$

1.10 L'opérateur densité

Pour déterminer l'état d'un système à un instant donné il suffit d'effectuer sur le système un ensemble de mesure correspondant à un ECOC. En générale le système n'est pas préparé dans un état précis $|\psi\rangle$ mais il peut être dans des différents états $|\psi_k\rangle$ avec une probabilité p_k on dit qu'on a un mélange statistique. l'opérateur densité nous permet d'incorporer dans le formalisme cette information incomplète.

a) Cas pur : on définit l'opérateur densité dans ce cas par :

$$\rho(t) = |\psi\rangle\langle\psi|$$

b) Cas de mélange statistique :

$$\rho(t) = \sum_k p_k |\psi_k\rangle\langle\psi_k|$$

Soit $|\varphi_i\rangle$ une base de l'espace des états ξ on a donc

$$|\psi_k\rangle = \sum_i a_i^k |\varphi_i\rangle$$

On définit la matrice densité par

$$\rho_{ij}(t) = \langle\varphi_i|\rho(t)|\varphi_j\rangle = \sum_k p_k a_j^{k*} a_i^k$$

Le cas pur est un cas particulier $k=1$. Normalement il est possible d'obtenir toutes les informations par le biais de cet opérateur comme la probabilité de mesure la valeur moyen et évolution du système

$$\langle A \rangle = \sum_k p_k a_i^{k*} a_j^k A_{ij} = \sum_k \rho_{ji}(t) A_{ij} = \text{tr}(\rho(t)A)$$

$$\frac{d\rho(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [H, \rho(t)]$$

$$pr(\lambda_n) = \text{tr}(P_n \rho(t)) \text{ où } P_n = |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|$$

Propriétés

Il est hermétique $\rho(t)^+ = \rho(t)$

$$\text{tr}(\rho(t)) = 1$$

$$\text{tr}(\rho(t)^2) = 1$$

$$\rho(t)^2 = \rho(t)$$

Exercices du Chapitre 1

Exercice 1

Soit A , B , C des opérateurs démontrez les propriétés suivantes des commutateurs:

- 1- $[A , B] = -[B , A]$
- 2- $[A , B+C] = [A , B] + [A , C]$
- 3- $[A , BC] = B[A , C] + [A , B]C$

Exercice 2

On considère deux fonctions propres normalisées ψ_1 et ψ_2 d'un hamiltonien \hat{H} correspondant respectivement aux valeurs propres E_1 et E_2 tel que $E_1 \neq E_2$. Ecrire les équations aux valeurs propres pour chaque fonction.

On construit l'état $\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1 - \psi_2)$.

- 1- Quel principe nous permet de certifier que ψ est aussi un état possible du système ?
- 2- Que représentent physiquement les valeurs propres E_1 et E_2 .
- 3- Est-ce que ψ est aussi fonction propre de \hat{H} . Pourquoi ?
- 4- Calculer les valeurs moyennes $\langle \hat{H} \rangle$ et $\langle \hat{H}^2 \rangle$ dans l'état ψ en fonction de E_1 et E_2 .
- 5- Refaire l'exercice en utilisant la notation de Dirac.

Exercice 3

On considère l'opérateur $A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$

- 1- Trouvez les valeurs propres λ_1 , λ_2 , λ_3 et leurs vecteurs propres normalisés $|\lambda_1\rangle$, $|\lambda_2\rangle$ et $|\lambda_3\rangle$ de A. Est-ce que ces valeurs propres sont dégénérées?
- 2- Montrer que l'ensemble des vecteurs $\{ |\lambda_1\rangle , |\lambda_2\rangle , |\lambda_3\rangle \}$ forme une base orthonormée et complète.

Exercice 4

On considère une particule dont l'hamiltonien est donné par $H = \begin{pmatrix} 2 & i & 0 \\ -i & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$

- 1- Est-ce que le vecteur $|\psi\rangle = \begin{pmatrix} i \\ 7i \\ -2 \end{pmatrix}$ est un vecteur propre de H?
- 2- Est-ce que H est Hermitique ?
- 3- Trouvez les valeurs propres λ_1 , λ_2 , λ_3 et les vecteurs propres normalisés $|\lambda_1\rangle$, $|\lambda_2\rangle$ et $|\lambda_3\rangle$ de H. Est-ce que ces valeurs propres sont dégénérées?

- 4- Calculez la matrice correspondante à l'opérateur $P = |\lambda_1\rangle\langle\lambda_1|$. En utilisant cette matrice montrez que P est un projecteur. Calculez $[P, H]$ en utilisant l'algèbre des commutateurs puis le produit matriciel.

Exercice 5

Un système physique possède un ensemble d'observables représentées par les opérateurs

suivants : $A = \begin{pmatrix} 5 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 2 \\ 0 & 2 & 1 \end{pmatrix}; B = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \\ 0 & 3 & 0 \end{pmatrix}; C = \begin{pmatrix} 0 & 3 & 0 \\ 3 & 0 & 2 \\ 0 & 2 & 0 \end{pmatrix}$

- 1- Quels sont les résultats de mesures de ces observables ?
- 2- Quelles sont les observables compatibles ?
- 3- Donner une base formée de vecteurs propres communs à ces observables
- 4- Quelle combinaison de ces observables forme un ECOC ?

Exercice 6

A l'instant t un système physique est dans l'état $|\psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} -1 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix}$ il possède deux observables représentées par les opérateurs $A = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$ et $B = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$.

- 1- Quelle est la probabilité pour que la mesure à l'instant t de l'observable 'A' donne « -1 » ?
- 2- Maintenant on effectue 2 mesures successives ; on mesure B puis juste après on mesure A
- 3- Quelle est la probabilité pour que les mesures donnent une valeur 0 pour B et 1 pour A ?
- 4- Si au contraire on mesure A puis juste après on mesure B ; Quelle est la probabilité pour que les mesures donnent une valeur 1 pour A et 0 pour B ?

Exercice 7

L'état initial d'un système s'écrit suivant une base $\{|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, |\psi_3\rangle\}$ de l'espace des états

$$|\psi(t=0)\rangle = 3i|\psi_1\rangle - i|\psi_2\rangle + |\psi_3\rangle$$

- 1- Si $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, |\psi_3\rangle$ sont des vecteurs propres de l'hamiltonien H avec les valeurs propres E_1, E_2 et E_3 respectivement tel que $E_n = nE_0$ où E_0 est une constante et $n=1,2,3$. Quelles sont les valeurs possibles obtenues lors d'une mesure de l'énergie et avec quelles probabilités. (justifier votre réponse avec les postulats de la mécanique quantique).
- 2- Calculer la matrice représentant H par rapport à la base $\{|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, |\psi_3\rangle\}$.
- 3- Quelle est l'expression de $|\psi(t)\rangle$ à un temps ultérieur t
- 4- Calculer la valeur moyenne de H $\langle H \rangle$ pour $t=0$ et pour un temps t quelconque.
- 5- On donne l'opérateur d'évolution $U(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)}$

Exercice 8

On considère un système de 2 particules (1) et (2) de même masse sans spin n'interagissant pas placées dans un puits de profondeur infinie de largeur a. On désigne par H_1 et H_2 les hamiltonien des 2 particules et par $|\psi_n\rangle$ et $|\varphi_m\rangle$ les états propres correspondants.

- 1- Quels sont les états propres et les valeurs propres de l'hamiltonien total du système. Donner le degré de dégénérescence des 2 niveaux d'énergie les plus basse.

A l'instant $t=0$ le système est dans l'état :

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}|\psi_1\varphi_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}|\psi_1\varphi_2\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}}|\psi_2\varphi_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}|\psi_2\varphi_2\rangle$$

Où $|\psi_i\varphi_j\rangle = |\psi_i\rangle \otimes |\varphi_j\rangle$ une base de l'espace des états $\xi = \xi_1 \otimes \xi_2$

- 1- Si on mesure l'énergie totale H. Quels résultats peut-on trouver et avec quelle probabilité ?
- 2- Même question pour H_1
- 3- Quel est l'état du système à l'instant t ?

On donne l'opérateur d'évolution $U(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)}$ et les niveaux d'énergie $E_n = \frac{\pi^2\hbar^2n^2}{2ma^2}$

Exercice 9

On considère une base orthonormée $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, |\psi_3\rangle$ le hamiltonien H et une grandeur physique A sont représentés par les matrices :

$$H = E_0 \begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}; A = a \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

- 1- On procède à une mesure de l'énergie. Quels résultats peut-on obtenir ?
- 2- On procède à une mesure de la grandeur A. Quels résultats peut-on obtenir ?
- 3- On prépare le système dans l'état : $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle + |\psi_3\rangle)$
 - a) Quelle est la probabilité pour qu'une mesure de l'énergie donne $3E_0$?
 - b) Si le résultat d'une telle mesure est effectivement $3E_0$, quel est l'état du système après la mesure ?
 - c) Quel(s) résultat(s) donnerait alors une mesure de A? Avec quelle(s) probabilité(s) ?
 - d) Quelle est la probabilité pour que l'énergie mesurée soit E_0 si le système est initialement dans l'état $|\psi\rangle$? Quel est l'état du système après la mesure ?
 - e) On effectue un grand nombre de mesures de l'énergie sur un grand nombre de système identiques tous préparé dans l'état $|\psi\rangle$. Quelle en est la moyenne ?

Exercice 10

Par rapport à la base $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, |\psi_3\rangle$ l'hamiltonien d'un système ainsi que l'observable A sont représentés par les matrices suivantes

$$H = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}; A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

H et A sont-ils compatibles ?

A l'instant initial $t=0$ l'état initial est donné par :

$$|\psi(t = 0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\psi_1\rangle + \frac{1}{2}|\psi_2\rangle + \frac{1}{2}|\psi_3\rangle$$

- 1- On mesure à $t=0$ H et A, quels résultats obtient-on et avec quelles probabilités ?
- 2- Calculer $|\psi(t)\rangle$ l'état du système à l'instant t.
- 3- Calculer $\langle H \rangle(t)$ et $\langle A \rangle(t)$.

Chapitre 2
L'oscillateur harmonique

Chapitre 2 L'oscillateur harmonique

2.1 Introduction

L'exemple le plus classique d'un oscillateur harmonique est celui d'une masse m qui se déplace le long d'une droite Ox , sous l'action d'une force de rappel $\mathbf{F} = -k\mathbf{x}$, au voisinage d'une position d'équilibre stable qu'on peut prendre comme origine. Cette masse a pour énergie potentielle :

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2$$

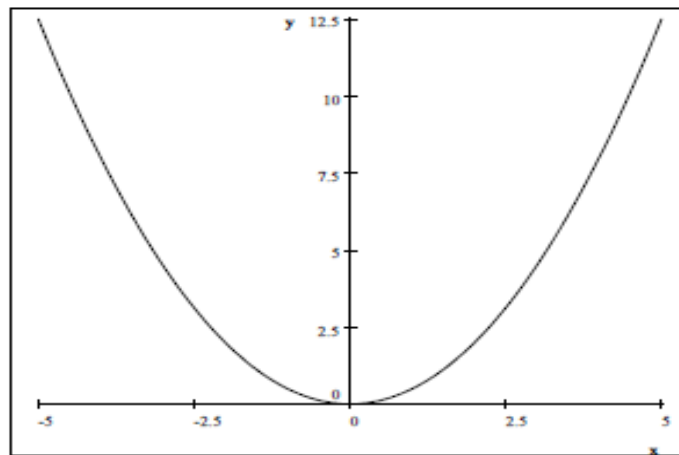


Figure 2.1 : Potentiel harmonique

2.2 Importance de l'oscillateur harmonique en physique

De très nombreux systèmes physiques peuvent être assimilés, en première approximation, à de tels oscillateurs harmoniques dits linéaires. C'est le cas, par exemple, des atomes ou des ions d'un cristal qui peuvent vibrer autour de leur position d'équilibre. Les vibrations des atomes d'une molécule diatomique peuvent être ainsi modélisées, en première approximation, par un oscillateur harmonique à une dimension. Pour expliquer le rayonnement des corps condensés Planck proposa l'hypothèse selon laquelle les atomes se comportent comme des oscillateurs harmoniques qui vibrent avec des énergies variant par paquets où quanta d'énergie $E = h\nu$. Planck introduit cette hypothèse d'échange d'énergie par quanta pour des oscillateurs matériels. L'étude quantique de ce système concerne la vibration de tous les milieux matériels (noyaux, atomes, molécules ...) ainsi que celle du champ électromagnétique. Son étude est aussi essentielle quand on cherche l'évolution de tout système au voisinage d'une position d'équilibre stable.

Si on développe en série de Taylor la fonction $V(x)$

$$V(x) = V(x_0) + V'(x_0)(x - x_0) + \frac{V''(x_0)}{2!}(x - x_0)^2 + \dots \frac{V^{(n)}(x_0)}{n!}(x - x_0)^n \dots *$$

Au voisinage de la position d'équilibre x_0 et pour de faible amplitude ($|x - x_0| \ll 1$) on peut s'arrêter à l'ordre 2 dans la série * on aura

$$V(x) = V(x_0) + V'(x_0)(x - x_0) + \frac{V''(x_0)}{2!}(x - x_0)^2 + O(x^3)$$

L'oscillateur harmonique joue également un rôle important dans la description d'un ensemble de particule identiques se trouvant toutes dans le même état car les niveaux d'énergie sont équidistants pour l'oscillateur harmonique la distance est $\hbar\omega$ donc on peut associer au niveau d'énergie repérer par l'entier n particules identiques

2.3 Equation de Schrödinger

Dans le cas classique l'équation du mouvement est $x(t)'' + \omega^2 x(t) = 0$ admetant comme solution $x(t) = x_m \cos(\omega t + \varphi)$. Pour le cas quantique l'équation de schrodinger gouverne l'évolution du système., l'hamiltonien du système : $H = T + V = \frac{p^2}{2m} + V(x)$ l'opérateur associé est

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m^2 \omega^2 x^2$$

L'équation de Schrödinger des états stationnaires $H\Psi = E\Psi$ pour la masse m s'écrit :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2} m^2 \omega^2 x^2 \Psi(x) = E\Psi(x)$$

Sa résolution permet d'obtenir les énergies E ainsi que les états propres correspondant $\Psi(x)$.

Une autre méthode pour obtenir les énergies E ainsi que les états propres correspondant $\Psi(x)$ est basée sur l'algèbre des opérateurs de création et annihilation a et a^+

2.4 L'algèbre des opérateurs création et annihilation a et a^+

Changement de variables :

$$X = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \quad \text{et} \quad P = \sqrt{\frac{1}{m\hbar\omega}} p$$

L'hamiltonien devient :

$$H = \frac{\hbar\omega}{2} (X^2 + P^2)$$

On définit : l'opérateur **annihilation** a et l'opérateur **création** a^+

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} (X + iP) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x + i \sqrt{\frac{1}{m\hbar\omega}} p \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x + \hbar \sqrt{\frac{1}{m\hbar\omega}} \frac{d}{dx} \right)$$

$$a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} (X - iP) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x - i \sqrt{\frac{1}{m\hbar\omega}} p \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x - \hbar \sqrt{\frac{1}{m\hbar\omega}} \frac{d}{dx} \right)$$

A partir de ces opérateurs, on construit 'opérateur nombre d'occupation'

2.4.1 Expression de H en fonction de N

$$N = a^+ a = \frac{1}{2}(X - iP) \cdot (X + iP) = \frac{1}{2}(X^2 + P^2 + iXP - iPX) = \frac{1}{2}(X^2 + P^2 + i[X, P])$$

Mais en remplaçant X et P par leur expression et sachant que $[x, p] = i\hbar$ on aura : $[X, P] = i\hbar$ d'où :

$$\frac{1}{2}(X^2 + P^2) = N + \frac{1}{2}$$

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

Donc $[H, N] = 0$

$[H, N] = 0$ donc d'après le théorème H, N ils possèdent des vecteurs propres communs qui forment une base de l'espace des états.

2.4.2 Expression des énergies E_n

Soient $|\psi_n\rangle$ les vecteurs propres de l'opérateur N : $N|\psi_n\rangle = n|\psi_n\rangle$ qu'on note $|\psi_n\rangle \equiv |n\rangle$

$$N|n\rangle = n|n\rangle \text{ d'où } H|n\rangle = \hbar\omega \left(N + \frac{1}{2} \right) |n\rangle = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) |n\rangle$$

Donc les vecteurs $|n\rangle$ sont aussi vecteurs propres de H. Par identification avec l'équation de Schrödinger $H\Psi = E_n\Psi$ on aura l'expression des valeurs de l'énergie

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

Les vecteurs $|\psi_n\rangle \equiv |n\rangle$ forment une base unique de l'espace des états donc l'ensemble $\{H, N\}$ forme un ECOC.

2.4.3 Relations de commutation

Montrer que

- 1- $[a, a^+] = 1$
(Remplacer a et a+ par leurs expressions puis utiliser les propriétés des commutateurs $[A + B, C + D] = [A, D] + [A, C] + [B, D] + [B, C]$);
- 2- $[N, a] = -\hbar\omega a$ $[N, a^+] = \hbar\omega a^+$
(Remplacer $N = a^+ a$ puis utiliser les propriétés des commutateurs $[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$)
- 3- En déduire que $[H, a] = -\hbar\omega a$ $[H, a^+] = \hbar\omega a^+$

2.4.4 L'action des opérateurs a et a+ sur les vecteurs |n>

2.4.4.1 L'action de a

Si on agit avec l'opérateur \mathbf{a} sur un vecteur $|n\rangle$ on aura un autre vecteur $|\psi\rangle = \mathbf{a}|n\rangle$ maintenant on va agir avec les opérateurs H et N sur le nouveau vecteur $|\psi\rangle$ pour découvrir ses propriétés :

Soit $|\psi\rangle = \mathbf{a}|n\rangle$ on commence par agir avec H

$$H|\psi\rangle = H\mathbf{a}|n\rangle$$

On a $[H, \mathbf{a}] = -\hbar\omega\mathbf{a} \Rightarrow H\mathbf{a} - \mathbf{a}H = -\hbar\omega\mathbf{a} \Rightarrow H\mathbf{a} = \mathbf{a}H - \hbar\omega\mathbf{a}$ d'où

$$H|\psi\rangle = H\mathbf{a}|n\rangle = (\mathbf{a}H - \hbar\omega\mathbf{a})|n\rangle = \mathbf{a}H|n\rangle - \hbar\omega\mathbf{a}|n\rangle$$

Puisque :

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle$$

$$H|\psi\rangle = H\mathbf{a}|n\rangle = (E_n - \hbar\omega)\mathbf{a}|n\rangle$$

$$H|\psi\rangle = (E_n - \hbar\omega)|\psi\rangle$$

Donc le vecteur $\mathbf{a}|n\rangle$ est vecteur propre de H avec les valeurs propres $(E_n - \hbar\omega) = E_{n-1}$

Maintenant on agit avec N

$$N|\psi\rangle = N\mathbf{a}|n\rangle$$

On a $[N, \mathbf{a}] = -\mathbf{a} \Rightarrow N\mathbf{a} - \mathbf{a}N = -\mathbf{a} \Rightarrow N\mathbf{a} = \mathbf{a}N - \mathbf{a}$

D'où

$$N|\psi\rangle = N\mathbf{a}|n\rangle = (\mathbf{a}N - \mathbf{a})|n\rangle = \mathbf{a}N|n\rangle - \mathbf{a}|n\rangle$$

Puisque :

$$N|n\rangle = n|n\rangle \text{ on aura}$$

$$N|\psi\rangle = N\mathbf{a}|n\rangle = (n - 1)\mathbf{a}|n\rangle$$

$$N|\psi\rangle = (n - 1)|\psi\rangle$$

Donc $\mathbf{a}|n\rangle$ est vecteur propre de N avec les valeurs propres $(n - 1)$.

$\mathbf{a}|n\rangle$ est un vecteur propre de H avec la valeur E_{n-1} puisque les vecteurs propres de H associés à cette valeur E_{n-1} sont $|n - 1\rangle$ donc $\mathbf{a}|n\rangle = c|n - 1\rangle$ où maintenant c est une constante si on calcule la norme $\langle\psi|\psi\rangle$ du vecteur $|\psi\rangle$:

$$|\psi\rangle = \mathbf{a}|n\rangle \Rightarrow \langle\psi| = \langle n|\mathbf{a}^\dagger \Rightarrow \langle\psi|\psi\rangle = \langle n|\mathbf{a}^\dagger\mathbf{a}|n\rangle = \langle n|N|n\rangle = n\langle n|n\rangle$$

On a $\langle n|n\rangle = 1$ car $|n\rangle$ est un vecteur de base d'où

$$\langle\psi|\psi\rangle = n$$

Donc $n \geq 0$

D'un autre côté puisque $|\psi\rangle = \mathbf{a}|n\rangle = c|n - 1\rangle$ on aura

$$\langle\psi|\psi\rangle = c^2\langle n - 1|n - 1\rangle = c^2$$

Donc $c = \sqrt{n}$

On déduit que: $\mathbf{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n - 1\rangle$ avec n positif ou nul.

2.4.4.2 L'action de a^+

Pour voir l'action de a^+ sur l'état $|n\rangle$ maintenant on pose que $|\psi\rangle = a^+|n\rangle$. Avec les étapes similaires que celle vues dessus et en utilisant maintenant les relations de commutations $[H, a^+] = \hbar\omega a^+$ et $[N, a^+] = a^+$

On montre que :

$$H|\psi\rangle = (E_n + \hbar\omega)|\psi\rangle$$

$$N|\psi\rangle = (n + 1)|\psi\rangle$$

Donc $a^+|n\rangle$ est vecteur propre de H et N avec les valeurs propres $E_{n+1} = (E_n + \hbar\omega)$ et $(n + 1)$ respectivement.

De même on montre que : $a^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$

De la relation précédente : $a^+|0\rangle = |1\rangle$; $a^+|1\rangle = \sqrt{2}|2\rangle$; $a^+|2\rangle = \sqrt{3}|3\rangle$... On remarque que le nombre n varie par pas de 1 et $n \geq 0$ donc il est un entier naturel $n \in \mathbb{N}$.

2.4.5 Construction des étapes propres $|n\rangle$ à partir de l'état fondamental $|0\rangle$

En utilisant la relation :

$$a^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$$

On a

$$a^+|0\rangle = |1\rangle$$

$$a^+|1\rangle = \sqrt{2}|2\rangle \Rightarrow |2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}a^+|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(a^+)^2|0\rangle$$

$$a^+|2\rangle = \sqrt{3}|3\rangle \Rightarrow |3\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}a^+|2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2 \cdot 3}}(a^+)^3|0\rangle$$

$$a^+|3\rangle = \sqrt{4}|4\rangle \Rightarrow |4\rangle = \frac{1}{\sqrt{4}}a^+|3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2 \cdot 3 \cdot 4}}(a^+)^4|0\rangle$$

Et ainsi de suite on aura :

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

Pour construire un état excité $|n\rangle$ à partir de l'état fondamental $|0\rangle$ il suffit d'opérer avec l'opérateur a^+ n fois sur l'état fondamental $|0\rangle$

Le système $\{|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, |3\rangle, |4\rangle, \dots, |n\rangle, \dots\}$ forme une base complète dans l'espace des états.

$$\langle n'|n\rangle = \delta_{n'n}$$

$$\sum_n |n\rangle\langle n| = 1$$

2.4.6 Représentation matricielle des opérateurs

L'expression générale de l'élément de matrice d'un opérateur A par rapport à la base $|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle, |4\rangle, \dots \dots |n\rangle$ est :

$$A_{n'n} = \langle n'|A|n\rangle$$

En particulier on a pour N

$$N_{n'n} = \langle n'|N|n\rangle = n\delta_{n'n}$$

Donc il est diagonal :

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & n \end{pmatrix}$$

De même pour H :

$$H_{n'n} = \langle n'|H|n\rangle = E_n\delta_{n'n} = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)\delta_{n'n}$$

$$\frac{\hbar\omega}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 5 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & 2n+1 \end{pmatrix}$$

$$a_{n'n} = \langle n'|a|n\rangle = \sqrt{n}\delta_{n,n+1}$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & \dots \end{pmatrix}$$

$$a_{n'n}^+ = \langle n'|a^+|n\rangle = \sqrt{n+1}\delta_{n,n+1}$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \sqrt{3} & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

2.4.7 Les fonctions d'ondes

En représentation $R\{|x\rangle\}$, les fonctions propres $\psi_n(x)$ de H et N sont reliées aux vecteurs propres $|n\rangle$ par :

$$\psi_n(x) = \langle x|\psi_n\rangle$$

$$H\psi_n(x) = E_n\psi_n(x)$$

$$N\psi_n(x) = n\psi_n(x)$$

$$a\psi_n(x) = \sqrt{n}\psi_{n-1}(x)$$

$$a^+\psi_n(x) = \sqrt{n+1}\psi_{n+1}(x)$$

Connaissant la fonction $\psi_0(x)$ associées à l'état fondamental $|0\rangle$ on peut obtenir toutes les fonctions des états excités $\psi_1(x), \psi_2(x), \psi_3(x), \dots, \psi_n(x)$ associées aux états $|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle, |4\rangle, \dots, |n\rangle$ respectivement. L'expression générale de la fonction d'onde est :

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(X) e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}$$

Où $H_n(X)$ sont les polynômes d'Hermite.

Exercices du Chapitre 2

Exercice 1

- 1- Montrer pour l'oscillateur harmonique qu'on a
 $[H, N]=0, \quad [a, a^+]=1 ; \quad [N, a]=-a ; \quad [N, a^+]=a^+$
- 2- Donnez dans la représentation N l'expression générale des éléments de matrice des opérateurs création et annihilation a, a^+ puis en déduire celle des opérateurs x, p et calculer $\langle x \rangle$ et $\langle p \rangle$ par rapport à un état $|n\rangle$ quelconque.
- 3- Vérifier que $[x, p]=i\hbar$

Exercice 2

A l'instant initial $t=0$ l'état initial d'un oscillateur harmonique à 1 dimension est donné par :

$$|\psi(t=0)\rangle = A(|0\rangle + i\sqrt{3}|1\rangle)$$

- 1- Quelle est la valeur de la constante A ?
- 2- Quelle est l'expression de $|\psi(t)\rangle$ à un temps ultérieur t ?
- 3- Comment évolue l'énergie moyenne du système s'il n'est pas perturbé ?
- 4- Donner les expressions de la position et de l'impulsion moyenne en fonction du temps. Calculer le produit des écarts quadratiques $\Delta X \Delta P$.

Exercice 3

Une particule de masses m et de positions x et d'impulsion p est soumise à un potentiel harmonique $V(x)=\frac{1}{2}m\omega^2x^2$.

- a. Ecrire l'hamiltonien H du système. Donner l'énergie de l'état fondamental.
- b. On désignera par $|n\rangle$ les vecteurs propres communs à H et N qui forment une base de l'espace des états, écrire les relations d'ortho-normalisation et de fermeture de ces états .
- c. On considère un système qui à l'instant $t=0$ est dans l'état :

$$|\psi(0)\rangle = |0\rangle - i|1\rangle + |2\rangle$$

- 1- Quels résultats peut-on trouver et avec quelles probabilités, si on mesure à cet instant l'énergie totale du système
- 2- Quelle est l'action de a^+ et a sur $|\psi(0)\rangle$.

Exercice 4

On considère une particule de masse m soumise à un potentiel harmonique $\frac{1}{2}m\omega^2x^2$ son état à l'instant $t=0$ est

$$|\psi(0)\rangle = |0\rangle + |1\rangle \dots (1)$$

- 1- Est-ce que $|\psi(0)\rangle$ est vecteur propre de H sachant les vecteurs $|n\rangle$ $n = 0, 1 \dots$ sont vecteurs propres de H avec les valeurs propres $E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$, $n = 0, 1, 2 \dots$

- 2- Quelle est l'action de l'opérateur $N = a^+ a$ sur $|\psi(0)\rangle$?
- 3- Calculer de la valeur moyenne de H et de l'opérateur $B = a^+ a^+$ dans l'état $|\psi(0)\rangle$?
- 4- Récrire l'équation (1) avec $\psi_0(x)$ et $\psi_1(x)$: les fonctions d'ondes associées à l'état fondamental $|0\rangle$ et le premier état excité $|1\rangle$ respectivement.
- 5- Quel est l'état du système à l'instant t ?

On donne l'opérateur d'évolution $U(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)}$

Exercice 5

Montrer que l'opérateur hamiltonien d'une particule de masse m dont le mouvement est unidimensionnel suivant l'axe OX soumise à un potentiel $V(x) = x^2$ s'écrit

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \hat{x}^2$$

- 1- Ecrire l'équation aux valeurs propres de cet hamiltonien ; que représentent physiquement ses valeurs propres ?
- 2- Est-ce que $\psi(x) = B e^{-\frac{mx^2}{2\hbar}}$ ou B est une constante est une fonction propre de \hat{H} . Pourquoi ?

Sachant que $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$; montrer que $\psi(x)$ est de carré sommable puis déterminer la constante B pour qu'elle soit normalisée

Exercice 6

Pour un oscillateur harmonique à une dimension en utilisant les opérateurs de création et d'annihilation a^+ et a

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(X + iP) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x + i\sqrt{\frac{1}{m\hbar\omega}}p\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x + \hbar\sqrt{\frac{1}{m\hbar\omega}}\frac{d}{dx}\right)$$

$$a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(X - iP) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x - i\sqrt{\frac{1}{m\hbar\omega}}p\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x - \hbar\sqrt{\frac{1}{m\hbar\omega}}\frac{d}{dx}\right)$$

Et les relations

$$a \psi_n(x) = \sqrt{n} \psi_{n-1}(x)$$

$$a^+ \psi_n(x) = \sqrt{n+1} \psi_{n+1}(x)$$

- 1- Déterminer les fonctions d'onde $\psi_0(x)$, $\psi_1(x)$ et $\psi_2(x)$ associées à l'état fondamental $|0\rangle$ puis au premier et second état excité $|1\rangle$ et $|2\rangle$ respectivement
- 2- Calculer $\langle x \rangle$ dans l'état fondamental $\psi_0(x)$ et $\psi_1(x)$.

On rappelle que $p = -i\hbar \frac{d}{dx}$ et on donne

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^{2n} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \frac{1.3.5 \dots (2n-1)}{(2a)^n} n \in N$$

Exercice 7

On considère une particule de masse m soumise à un potentiel harmonique $\frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ sa fonction d'onde à l'instant $t=0$ est

$$\psi(x, 0) = \psi_0(x) + \psi_1(x) \dots (1)$$

$\psi_0(x)$ et $\psi_1(x)$ sont les fonctions d'ondes associées à l'état fondamental $|0\rangle$ et le premier état excité $|1\rangle$ respectivement.

- 1- Est-ce que $\psi(x, 0)$ est fonction propre de H sachant les fonctions $\psi_n(x)$ $n = 0, 1, \dots, m$ sont fonctions propres de H avec les valeurs propres $E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right)$, $n = 0, 1, \dots, m$
- 2- Quelle est l'action de l'opérateur $N = a^\dagger a$ sur $\psi(x, 0)$.
- 3- Calculer la valeur moyenne de l'opérateur de position $B = a + a^\dagger$ dans l'état $\psi(x, 0)$
- 4- Récrire l'équation 1 avec la notation de Dirac.

On donne :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^{2n} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \frac{1.3.5 \dots (2n-1)}{(2a)^n} n \in N$$

Exercice 8

Calculer $\langle x^3 \rangle$ dans la représentation N puis utiliser le résultat pour calculer la valeur moyenne de l'énergie du système dont l'hamiltonien est $H = H_{OH} + \lambda x^3$ où H_{OH} est l'hamiltonien d'un oscillateur

Exercice 9

Quels sont les niveaux d'énergie et les fonctions d'onde d'un système dans les 2 cas suivants :

- 1- Deux oscillateurs harmoniques indépendants de même fréquence
- 2- Deux oscillateurs harmoniques de même fréquence couplés par un terme d'interaction

$$H_{int} = \frac{1}{2}k(x_1 - x_2)^2$$

Exercice 10

On définit un état cohérent comme un état propre (normé à 1) de l'opérateur d'annihilation $a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$

Donner l'expression de $|\alpha\rangle$ dans la base des états propres de l'Hamiltonien $\{|n\rangle\}$ en fonction de α .

Exercice 11

Deux particules de mêmes masses m_1 et m_2 sans spin et de positions x_1 et x_2 , d'impulsion p_1 et p_2 sont soumises à un même potentiel harmonique $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$. Les particules n'interagissent pas.

- Ecrire l'hamiltonien H du système, montrer qu'il peut s'écrire $H = H_1 + H_2$. Donner l'expression générale de l'énergie et les fonctions d'ondes correspondantes du système total.
- On désignera par $|n_1, n_2\rangle = |n_1\rangle \otimes |n_2\rangle$ les vecteurs propres communs à H_1 et H_2 qui forment une base de l'espace des états, écrire les relations d'ortho-normalisation et de fermeture de ces états.
- On considère un système qui, à l'instant $t=0$, est dans l'état :

$$|\psi(0)\rangle = |0,0\rangle - i|1,0\rangle + i|0,1\rangle + |1,1\rangle$$

Quels résultats peut-on trouver et avec quelles probabilités, si on mesure à cet instant :

- L'énergie totale du système
- l'énergie de la particule 1
- H forme-t-il un ECO ? pourquoi?
- Quelle l'action de a_1^\dagger et a_2 sur $|\psi(0)\rangle$

Exercice 12

On considère une particule dans un potentiel d'oscillateur harmonique totalement anisotrope : $V(r) = \frac{1}{2}m(\omega_x^2x^2 + \omega_y^2y^2 + \omega_z^2z^2)$. les trois pulsations $\omega_x, \omega_y, \omega_z$, étant différentes deux à deux.

- Indiquer les énergies et les fonctions d'onde propres associées.
- Même question pour l'oscillateur harmonique isotrope : $\omega_x = \omega_y = \omega_z$.

Exercice 13

L'énergie potentiel d'interaction électrostatique entre les ions Na^+ et Cl^- du composé ionique distant de r , a pour expression :

$$V(r) = -a \frac{Q}{r} + \frac{A}{r^n} \quad \text{avec} \quad Q = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \approx 2.31 \times 10^{-28} \text{ SI}$$

N étant un entier le facteur numérique a est la constante de Madlung, prend en compte l'influence du voisinage cristallin de ces 2 ions. On rappelle les masses molaires de Na^+ et Cl^- respectivement 23 et 35,5 g.mol⁻¹

- Déterminer la position d'équilibre r_e du couple (Na^+, Cl^-) en déduire l'énergie potentiel correspondante $V_e = V(r_e)$.
- La distance r oscille autour de la valeur r_e . Quelle est l'expression de la raideur K du ressort équivalent ?
- La pulsation propre des oscillations collectives des ions en mode optique est

- 4- $\omega_0 = \sqrt{\frac{2K}{\mu}}$, μ étant la masse réduite du couple d'ions, en déduire l'expression de l'écart énergétique entre deux niveaux de vibration successives, ainsi que l'énergie de vibration de l'état fondamental.
- 5- Sachant que $a = 1.744$, $r_e = 281$ pm et la fréquence du rayonnement correspondant à la transition entre deux niveaux d'énergies successifs vaut $\nu_0 = 1.26 \times 10^{13}$ Hz. Déterminer le facteur n et le coefficient a

Chapitre 3
Théorie du Moment Cinétique en
Mécanique Quantique

Chapitre 3 *Théorie du Moment Cinétique en*

Mécanique Quantique

3.1 introduction

Le moment cinétique est une grandeur physique comme la quantité de mouvement et l'énergie, il est lié à la rotation du système physique. Comme en mécanique classique, le moment cinétique joue un rôle important en MQ (rotations des molécules, des atomes et électrons), surtout pour des systèmes soumis à un potentiel central $V(r)$. Pour un système isolé, il est une quantité conservée. En physique classique le moment cinétique d'une particule est composé seulement du moment cinétique orbital, \vec{L} alors qu'en MQ une particule possède aussi un moment cinétique intrinsèque \vec{S} appelé spin, tel que le moment cinétique total est :

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

3.2 Le moment orbital \vec{L}

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = -i\hbar \vec{r} \times \vec{\nabla}$$

Pour un système composé

$$\vec{L} = \sum \vec{L}_i$$

$$\hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y; \hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z; \hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x$$

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z; [L_z, L_x] = i\hbar L_y; [L_y, L_z] = i\hbar L_x$$

$$[L^2, L_x] = [L^2, L_y] = [L^2, L_z] = 0$$

3.2.1 Quantification de \vec{L}

Exactement comme l'énergie le moment cinétique est aussi une grandeur quantifiée (spectre de valeurs propres discrets) la condition de quantification de Bohr

$$\oint p_i dq_i = n_i h \quad ; \quad n_i = 0, 1, 2 \dots \dots \text{entier}$$

Où p_i est le moment conjugué de coordonnée généralisée q_i (l'ancienne théorie quantique).

On montra déjà que le module $|\vec{L}|$ est quantifié $|\vec{L}| = n\hbar$. Expérimentalement ceci a été mis en évidence par l'observation de l'effet Zeeman normal 1896 et les expériences de Stern Gerlach.

3.2.2 L'effet Zeeman normal

En présence d'un champ magnétique extérieur, les niveaux d'énergie d'un atome sont modifiés, cela se manifeste par une séparation en multiplets (levée de dégénérescence).

En présence du champ magnétique l'hamiltonien total s'écrit :

$$H = H_0 + H_{int}$$

H_0 : en absence de champ magnétique

$H_{int} = -\vec{M}\vec{B}$ est l'hamiltonien d'interaction

\vec{M} le moment magnétique de l'atome $\vec{M} = -g\vec{L}$; $(\vec{B} // \vec{OZ}) \Rightarrow M = -gBL_z$

$g = \frac{e}{2m_e c}$; où e^- est la charge de l'électron et m_e sa masse.

Par conséquent les nouvelles valeurs de l'énergie :

$$E_n = E_n^{(0)} + \Delta E_n = E_n^{(0)} - gBL_z$$

Ces valeurs varient d'une manière discontinue ce qui prouve que l'énergie est quantifiée.

$$L_z = m\hbar \text{ avec } -l \leq m \leq l \Rightarrow l \text{ est entier} \Rightarrow \Delta E_n \text{ est quantifiée}$$

Pour cela on observe $(2l + 1)$ sous niveaux après application d'un champ magnétique.

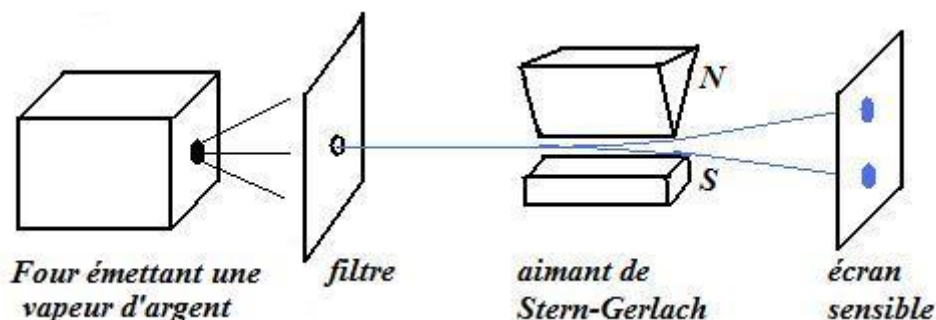
3.3 Le spin

Le terme spin vient de la langue anglaise (to spin = tourner). c'est un degré de liberté interne intrinsèque (moment cinétique intrinsèque) il est indépendant de la position spatiale de la particule. C'est une grandeur purement quantique qui n'a pas d'équivalent classique, l'hypothèse du spin a été proposée par Uhlenbeck et Goudsmit en 1925 pour interpréter certaines données expérimentales concernant la spectroscopie des alcalins (effet Zeeman anormal) Cette hypothèse a pu aussi expliquer les résultats de l'expérience de Stern Gerlach en 1921. Uhlenbeck et Goudsmit ont supposé que l'électron possède un moment cinétique intrinsèque \vec{S} quia les mêmes propriétés d'un moment cinétique qui est dû à la rotation de l'électron sur lui-même (d'où le terme spin) par analogie avec la terre qui a un moment cinétique propre du à sa rotation sur elle-même en plus du moment cinétique de sa rotation autour du soleil. Cela pour donner une explication au nombre pair des sous niveaux d'énergie $2s$ ($2l+1$) pour les atomes alcalins quand ceux-ci sont soumis à un champ magnétique (**effet Zeeman anormal**). Ils attribuent au spin de l'électron la valeur $s = 1/2$ pour expliquer le facteur $2[(2s + 1)] = 2$

3.3.1 Expérience du Stern-Gerlach

L'expérience confirme la quantification du moment cinétique et l'existence du spin.

Le dispositif est schématisé dans la figure suivante.



Dans son état fondamental ne possède pas de moment orbital $\vec{L} = \vec{0} \Rightarrow H_{int} = 0$

Donc ils ne doivent pas interagir avec le champ magnétique de l'aimant (H ils ne seront pas par conséquent déviés. On devrait en principe observer une seule tache centrale sur l'écran. L'expérience montre qu'on a 2 taches symétriques ce qui peut être expliqué par l'hypothèse du spin. L'opérateur de spin \vec{S} vérifie les mêmes relations de commutations que le moment cinétique \vec{L}

$$[S_x, S_y] = i\hbar S_z ; [S_z, S_x] = i\hbar S_y ; [S_y, S_z] = i\hbar S_x$$

$$[S^2, S_x] = [S^2, S_y] = [S^2, S_z] = 0$$

Pour un système composé

$$\vec{S} = \sum \vec{S}_i$$

3.4 Théorie générale du moment cinétique \vec{J}

On a maintenant les relations de commutations générales :

$$[J_x, J_y] = i\hbar J_z ; [J_z, J_x] = i\hbar J_y ; [J_y, J_z] = i\hbar J_x$$

$$[J^2, J_x] = [J^2, J_y] = [J^2, J_z] = 0$$

$$J_i = L_i + S_i \text{ où } i = x, y, z$$

Pour un système composé

$$\vec{J} = \sum \vec{J}_i = \sum (\vec{L}_i + \vec{S}_i)$$

L'ensemble des grandeurs (J^2, J_z) commutent donc on peut construire une base de l'espace des états formée par leurs vecteurs propres communs : soit $|\psi\rangle$ un vecteur propre commun à J^2 et J_z donc

$$J^2 |\psi\rangle = \lambda_j |\psi\rangle$$

$$J_z |\psi\rangle = \lambda_m |\psi\rangle$$

Par conséquent on peut spécifier et fixer les vecteurs propres communs de (J^2, J_z) par la donnée des valeurs propres et on peut écrire

$$|\psi\rangle = |\lambda_j, \lambda_m\rangle$$

$$J^2 |\lambda_j, \lambda_m\rangle = \lambda_j |\lambda_j, \lambda_m\rangle$$

$$J_z |\lambda_j, \lambda_m\rangle = \lambda_m |\lambda_j, \lambda_m\rangle$$

Par analyse dimensionnelle on a $[J] = [\hbar] = \text{joule.seconde}$ donc $[\lambda_j] = [\hbar^2]$ et $[\lambda_m] = [\hbar]$ on réécrit ces valeurs :

$$\lambda_j = \lambda'_j \hbar^2$$

$$\lambda_m = m \hbar$$

Où maintenant λ'_j et m sont sans dimension.

On peut montrer qu'on peut écrire λ'_j sous la forme $\lambda'_j = j(j+1)$ avec $j \geq 0$ et on conclut qu'on peut spécifier et fixer $|\psi\rangle$ par les valeurs de j et m $|\psi\rangle = |j, m\rangle$

$$J^2|j, m \rangle = j(j+1)\hbar^2|j, m \rangle$$

$$J_z|j, m \rangle = m\hbar|j, m \rangle$$

On introduit les opérateurs :

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

Qui vérifient les relations de commutations suivantes :

$$[J^2, J_{\pm}] = 0; [J_+, J_-] = 2\hbar J_z; [J_z, J_{\pm}] = \pm\hbar J_{\pm}$$

3.4.1 Propriétés

1- Soit $|j, m \rangle$ un vecteur propre commun à (J^2, J_z) tel que :

$$J^2|j, m \rangle = j(j+1)\hbar^2|j, m \rangle$$

$$J_z|j, m \rangle = m\hbar|j, m \rangle$$

Alors $-j \leq m \leq j$ donc on a $(2j+1)$ valeurs possibles de m .

2- L'action des opérateurs J_{\pm} :

a) Soit $|\psi \rangle = J_-|j, m \rangle$ alors ce vecteur est un vecteur propre de J^2 et J_z :

$$J^2(J_-|j, m \rangle) = j(j+1)\hbar^2(J_-|j, m \rangle)$$

$$J_z(J_-|j, m \rangle) = (m-1)\hbar(J_-|j, m \rangle)$$

En plus l'action de J_- sur $|j, m \rangle$ est définie par :

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

Si $m = -j$ alors $J_-|j, -j \rangle = 0$

b) Soit $|\psi \rangle = J_+|j, m \rangle$ alors ce vecteur est un vecteur propre de J^2 et J_z :

$$J^2(J_+|j, m \rangle) = j(j+1)\hbar^2(J_+|j, m \rangle)$$

$$J_z(J_+|j, m \rangle) = (m+1)\hbar(J_+|j, m \rangle)$$

En plus l'action de J_+ sur $|j, m \rangle$ est définie par :

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

Si $m = j$ alors $J_+|j, j \rangle = 0$.

3.4.2 La représentation matricielle d'opérateurs suivant la base $|j, m \rangle$

Les vecteurs $|j, m \rangle$ forment une base dans l'espace des états.

$$\langle m', j | j, m \rangle = \delta_{m'm}$$

$$\sum_m |j, m \rangle \langle m, j| = 1$$

Pour les opérateurs J^2 et J_z :

$$(j^2)_{m'm} = \langle m', j | j^2 | j, m \rangle = j(j+1)\hbar^2 \delta_{m'm}$$

$$(J_z)_{m'm} = \langle m', j | J_z | j, m \rangle = m\hbar$$

3.4.3 Cas particulier

a- Moment orbitale pur $\vec{J} = \vec{L}$

Dans ce cas on $j = l$ entier positif ou nul $|j, m \rangle \equiv |l, m \rangle$

$$L^2 |l, m \rangle = l(l+1)\hbar^2 |l, m \rangle$$

$$L_z |l, m \rangle = m\hbar |l, m \rangle$$

b- Moment de spin pur $\vec{J} = \vec{S}$

Dans ce cas on $j = S$ entier ou demi-entier positif ou nul $|j, m \rangle \equiv |S, m \rangle$

$$S^2 |S, m_s \rangle = S(S+1)\hbar^2 |S, m_s \rangle$$

$$S_z |S, m_s \rangle = m_s \hbar |S, m_s \rangle$$

3.4.4 Addition de moments cinétiques

Soient 2 systèmes de moments cinétiques \vec{j}_1 et \vec{j}_2 respectivement, le moment cinétique total $\vec{J} = \vec{j}_1 + \vec{j}_2$

\vec{j}_1 agit dans l'espace des états ξ_1 de dimension $(2j_1 + 1)$ si la base de e1 est l'ensemble $|j_1, m_1 \rangle$.

\vec{j}_2 agit dans l'espace des états ξ_2 de dimension $(2j_2 + 1)$ si la base de e1 est l'ensemble $|j_2, m_2 \rangle$

\vec{J} agit dans l'espace des états $\xi = \xi_1 \otimes \xi_2$ de dimension $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ dans ce cas on peut choisir comme base les vecteurs $|j_1, m_1 \rangle \otimes |j_2, m_2 \rangle$ qu'on note pour simplifier $|j_1, j_2, m_1, m_2 \rangle$. car l'ensemble des grandeurs $(j_1^2, j_2^2, j_{1z}, j_{2z})$ commutent entre eux

On s'intéresse au moment cinétique total \vec{J} :

Les vecteurs propres communs à (J^2, J_z) qu'on note $|J, M \rangle$ forment une base dans l'espace ξ

$$J^2 |J, M \rangle = J(J+1)\hbar^2 |J, M \rangle$$

$$J_z |J, M \rangle = M\hbar |J, M \rangle$$

$$|j_1 - j_2| \leq J \leq j_1 + j_2$$

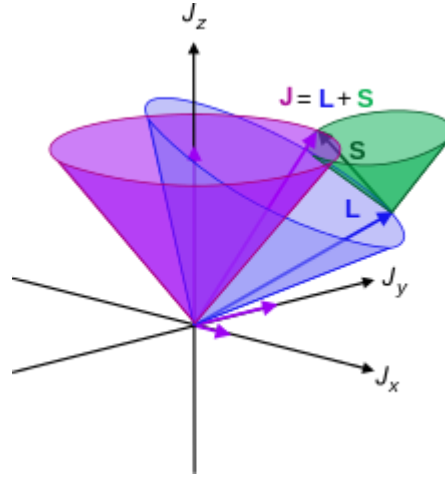
$$-J \leq M \leq J$$

$$J_z = j_{1z} + j_{2z} \Rightarrow M = m_1 + m_2$$

Expression des vecteurs $|J, M \rangle$ suivant la base $|j_1, j_2, m_1, m_2 \rangle$:

$$|J, M\rangle = \sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} C_{m_1 m_2}^{j_1 j_2} |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle$$

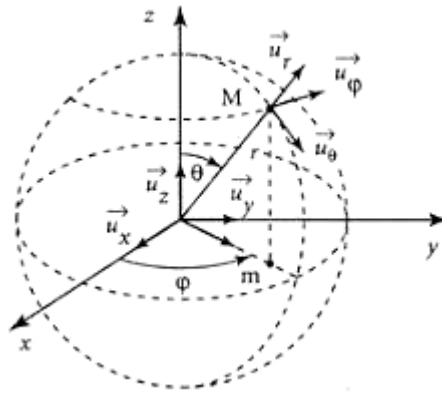
$C_{m_1 m_2}^{j_1 j_2} = \langle m_1, m_2, j_2, j_1 | J, M \rangle$ sont les coefficients de Clebsh-Gordan.



3.5 Fonctions propres des operateurs L^2 et L_z

Pour cela le système approprié à utiliser dans ce cas est le système de coordonnées sphériques définie par r, θ et φ ($r \geq 0$, $0 \leq \theta \leq \pi$, $0 \leq \varphi \leq 2\pi$) :

$$x = r \sin \theta \cos \varphi \quad y = r \sin \theta \sin \varphi \quad z = r \cos \theta$$



Les expressions des composantes du moment cinétique \vec{L} ainsi que son module à l'aide des coordonnées sphériques sont :

$$\vec{L} = -i\hbar \vec{r} \times \vec{\nabla} \quad \text{avec} \quad \vec{\nabla} = \vec{u}_r \frac{\partial}{\partial r} + \vec{u}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \vec{u}_\varphi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

$$L_x = i\hbar \left[\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right]$$

$$L_y = i\hbar \left[\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right]$$

$$L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

$$L^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]$$

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = \langle \theta, \varphi | l, m \rangle$$

$$L^2 Y_l^m(\theta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_l^m(\theta, \varphi)$$

$$L_z Y_l^m(\theta, \varphi) = \hbar m Y_l^m(\theta, \varphi)$$

$Y_l^m(\theta, \varphi)$ sont les harmoniques sphériques.

3.5.1 Détermination de l'expression des harmoniques sphériques

Pour déterminer l'expression des harmoniques sphériques on utilise les équations aux valeurs propres et on les écrit sous forme de produit de fonctions dépendante chacune d'une seule variable on pose

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = \Theta_l^m(\theta) \Phi_l^m(\varphi) = \Theta(\theta) \Phi(\varphi) \text{ (on omet les indices } l \text{ et } m \text{ pour simplifier)}$$

$$L^2 \Theta(\theta) \Phi(\varphi) = \lambda \hbar^2 \Theta(\theta) \Phi(\varphi)$$

Avec : $\lambda = l(l+1)$

Il devient :

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \Theta(\theta) \Phi(\varphi) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \{ \Theta(\theta) \Phi(\varphi) \} = -\lambda \Theta(\theta) \Phi(\varphi)$$

$$\Rightarrow \frac{\Phi(\varphi)}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta(\theta)}{\partial \theta} \right) + \frac{\Theta(\theta)}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \Phi(\varphi)}{\partial \varphi^2} = -\lambda \Theta(\theta) \Phi(\varphi)$$

$$\Rightarrow \frac{\Phi(\varphi)}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta(\theta)}{d\theta} \right) + \frac{\Theta(\theta)}{\sin^2 \theta} \frac{d^2 \Phi(\varphi)}{d\varphi^2} = -\lambda \Theta(\theta) \Phi(\varphi)$$

En divisant par : $\Theta(\theta) \Phi(\varphi)$

On trouve :

$$\frac{1}{\Theta(\theta) \sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta(\theta)}{d\theta} \right) + \frac{1}{\Phi(\varphi) \sin^2 \theta} \frac{d^2 \Phi(\varphi)}{d\varphi^2} = -\lambda$$

En multipliant par : $\sin^2 \theta$

$$\frac{\sin \theta}{\Theta(\theta)} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta(\theta)}{d\theta} \right) + \frac{1}{\Phi(\varphi)} \frac{d^2 \Phi(\varphi)}{d\varphi^2} = -\lambda \sin^2 \theta$$

On obtient :

$$\frac{\sin \theta}{\Theta(\theta)} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta(\theta)}{d\theta} \right) + \lambda \sin^2 \theta = -\frac{1}{\Phi(\varphi)} \frac{d^2 \Phi(\varphi)}{d\varphi^2} \quad (*)$$

Notez que seul le dernier terme dépend de φ et qu'aucune autre variable n'apparaît dans ce terme. Cette équation peut être vraie pour toutes les valeurs de r, θ et φ seulement si le dernier terme est égal à une constante.

$$L_z \Theta(\theta) \Phi(\varphi) = \hbar m \Theta(\theta) \Phi(\varphi)$$

Avec

$$L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

Cela implique

$$\begin{aligned} -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \{ \Theta(\theta) \Phi(\varphi) \} &= \hbar m \{ \Theta(\theta) \Phi(\varphi) \} \\ \Rightarrow -i\hbar \frac{\partial \Phi(\varphi)}{\partial \varphi} \{ \Theta(\theta) \} &= \hbar m \Phi(\varphi) \{ \Theta(\theta) \} \end{aligned}$$

On simplifie par $\Theta(\theta)$

$$\begin{aligned} \Rightarrow -i\hbar \frac{\partial \Phi(\varphi)}{\partial \varphi} &= \hbar m \Phi(\varphi) \Rightarrow \frac{\partial \Phi(\varphi)}{\partial \varphi} = im \Phi(\varphi) \Rightarrow \frac{d\Phi(\varphi)}{d\varphi} = im \Phi(\varphi) \\ \Rightarrow \frac{d\Phi(\varphi)}{\Phi(\varphi)} &= im d\varphi \Rightarrow \int \frac{d\Phi(\varphi)}{\Phi(\varphi)} = im \int d\varphi \Rightarrow \Phi(\varphi) = k e^{im\varphi} \end{aligned}$$

La normalisation :

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} | \Phi(\varphi) |^2 d\varphi &= 1 \\ \Rightarrow \int_0^{2\pi} | \Phi(\varphi) |^2 d\varphi &= \int_0^{2\pi} k e^{im\varphi} k^* e^{-im\varphi} d\varphi = |k|^2 \int_0^{2\pi} d\varphi = 2\pi |k|^2 \\ \Leftrightarrow 2\pi |k|^2 &= 1 \Rightarrow |k|^2 = \frac{1}{2\pi} \Rightarrow |k| = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \end{aligned}$$

D'où

$$\Phi(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}$$

Maintenant pour déterminer $\Theta(\theta)$ on sait que :

$$\begin{aligned} \frac{d\Phi(\varphi)}{d\varphi} &= im \Phi(\varphi) \\ \Rightarrow \frac{d^2 \Phi(\varphi)}{d\varphi^2} &= im \frac{d\Phi(\varphi)}{d\varphi} = i^2 m^2 \Phi(\varphi) = -m^2 \Phi(\varphi) \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \frac{d^2\Phi(\varphi)}{d\varphi^2} = -m^2\Phi(\varphi) \Rightarrow -\frac{1}{\Phi(\varphi)} \frac{d^2\Phi(\varphi)}{d\varphi^2} = m^2$$

En utilisant l'équation (*) on aura

$$\frac{\sin \theta}{\theta(\theta)} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\theta(\theta)}{d\theta} \right) + \lambda \sin^2 \theta = m^2$$

En divisant par : $\sin^2 \theta$

$$\Rightarrow \frac{1}{\theta(\theta) \sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\theta(\theta)}{d\theta} \right) + \lambda - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} = 0$$

En multipliant par: $\theta(\theta)$

$$\Rightarrow \frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\theta(\theta)}{d\theta} \right) + \left[\lambda - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right] \theta(\theta) = 0$$

C'est l'équation différentielle de Legendre dont les solutions sont les polynômes de Legendre associés.

En mathématiques un polynôme associé de Legendre, noté $P_1^m(x)$ est une solution particulière de l'équation générale de Legendre:

$$(1 - x^2)y''(x) - 2xy'(x) + \left(l(l+1) - \frac{m^2}{1-x^2} \right) y(x) = 0$$

Qu'on peut mettre sous la forme équivalente :

$$\frac{d}{dx} \left((1 - x^2)y'(x) \right) + \left(l(l+1) - \frac{m^2}{1-x^2} \right) y(x) = 0$$

laquelle n'a de solution régulière que sur l'intervalle $[-1,1]$ et si $-l \leq m \leq l$ avec l et m entier

$$\theta_1^m(\theta) = C_1^m P_1^m(\cos \theta)$$

3.5.2 Les polynômes de Legendre

Les polynômes de Legendre associés sont définis par :

$$P_l^m(x) = (1 - x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m}{dx^m} P_l(x), \quad m > 0$$

$$P_l^m(x) = (-1)^m \frac{(l+m)!}{(l-m)!} P_l^{|m|}(x), \quad m < 0$$

Avec les polynômes de Legendre :

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^2 - 1)^l$$

Ils vérifient la condition d'orthogonalité

$$\int_{-1}^1 P_l^m(x) P_{l'}^m(x) dx = \left(\frac{2}{2l+1}\right) \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \delta_{ll'}$$

Nous avons maintenant des solutions pour les fonctions angulaires $\Phi(\varphi)$ et $\Theta(\theta)$. Il est commode de les combiner en une seule fonction normalisée des deux angles. Ces fonctions sont appelées les harmoniques sphériques et sont définies comme :

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = C_1^m P_l^m(\cos \theta) \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}$$

C_1^m est une constante de normalisation à déterminer

$$\int_0^\pi \int_0^{2\pi} |Y_l^m(\theta, \varphi)|^2 \sin \theta d\theta d\varphi = 1$$

On aura :

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{2}} \sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta) \frac{e^{-im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}$$

En particulier,

$$Y_l^0(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \theta)$$

La définition des fonctions de Legendre associées au m négatif peut être utilisée pour montrer que

$$Y_l^m(\theta, \varphi)^* = (-1)^m Y_l^{-m}(\theta, \varphi)$$

Les harmoniques sphériques satisfont la condition d'orthogonalité

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \sin \theta Y_{l'}^{m'}(\theta, \varphi) Y_l^m(\theta, \varphi)^* = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

Les $Y_l^m(\theta, \varphi)$ sont des fonctions orthormées on peut développer la partie angulaire la fonction d'onde suivant ces fonctions :

$$\chi(\theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{+\infty} \sum_{m=-l}^l a_{lm} Y_l^m(\theta, \varphi)$$

et la fonction d'onde totale

$$\psi(r, \theta, \varphi) = \sum_{n,l,m} a_{nlm} R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \varphi)$$

3.6 Relation du spin à la statistique

Les particules possédant un spin demi-entier sont appelées des fermions (électron par exemple) alors que celles ayant un spin entier sont des bosons (le photon par exemple). La fonction d'onde d'un ensemble de fermions identiques est antisymétrique reflétant le principe d'exclusion de Pauli (deux fermions ne peuvent pas occuper le même état quantique) ces particules obéissent à la statistique de fermi-Dirac. Par contre la fonction d'onde totale d'un ensemble de boson identiques est symétrique et obéissent à la statistique de Bose-Einstein.

Exercice du Chapitre 3

Exercice 1

- a) On considère une particule dans l'état orbital $\ell=1$:
- 1- Quelles sont les valeurs propres de L^2 et L_Z ainsi que leurs vecteurs propres communs $|\ell, m\rangle$.
 - 2- Calculer les matrices associées à L^2, L_Z, L_{\pm} puis en déduire les matrices de L_x , et L_y .
- b) Si la particule possède un spin $s=1/2$
- 1- Quelles sont les valeurs propres de S^2 et S_Z ainsi que leurs vecteurs propres communs $|s, m\rangle$.
 - 2- Calculer les matrices associées à S^2, S_Z, S_{\pm} puis en déduire les matrices de S_x , et S_y .
 - 3- Si le système est dans l'état $|\psi\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}$, quelle est la probabilité de mesure de chaque valeur de S_Z .
- c) On considère maintenant le moment cinétique total $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ de la particule
- 1- Quelles sont les valeurs propres de J^2 et J_Z ainsi que leurs vecteurs propres communs $|j, m\rangle$.
 - 2- Calculer les matrices associées à J^2, J_Z, J_{\pm} puis en déduire les matrices de J_x , et J_y .

Exercice 2

On considère un système dont le moment cinétique $j=1$:

- 1- Quelles sont les valeurs propres de j^2 et j_z ainsi que leurs vecteurs propres communs.
- 2- Si le système est dans l'état $|\psi\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 2 \end{pmatrix}$, quelle est la probabilité de mesure de chaque valeur de j_z .
- 3- Calculer $\langle j^2 \rangle$ et de j_z dans l'état $|\psi\rangle$.

Exercice 3

La représentation matricielle des composantes x et y du moment total J d'un système est

$$j_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad j_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}$$

- 1- Calculer la matrice de j_z puis en déduire les valeurs possibles de j_z et de j^2 .
- 2- Calculer $\langle j_x \rangle$ par rapport à l'état $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ puis par rapport à l'état propre de $j_z=0$.

Exercice 4

Soit un système quelconque dont l'espace des états est rapporté aux vecteurs propres communs à j^2 et j_z $|j,m\rangle$ tel que $j=0$ ou 1

1- Donner les vecteurs quelle est la dimension de l'espace des états ?

Le système est dans l'état $|\psi\rangle = |1,0\rangle - 2|1,1\rangle + i|0,0\rangle + |1,-1\rangle$

- Quelle est la probabilité d'avoir lors d'une mesure $j_z=0$? $j_z=0$ et $J^2=2\hbar^2$?
- Quelles sont les valeurs possibles de J_z^2 ? Quelle est la probabilité d'avoir $J_z^2=0$?

Exercice 5

Si $j=5/2$; quels sont les valeurs propres et les vecteurs propres de J^2 et J_z ?

Soit $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$ tel que $j_1=5/2$ et $j_2=1/2$

- Quelles sont les valeurs possible de J et M ainsi que les vecteur $|J,M\rangle$?
- Quelle est l'action de J_+ sur l'état $|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle$
- Ecrire le vecteur $|3,3\rangle$ suivant la base $|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle$ puis en déduire la valeur des coefficients de Clebsh Gordon.

Exercice 6

On considère un système dont le moment cinétique $j=2$:

1- Quelles sont les valeurs propres de j^2 et j_z ainsi que leurs vecteurs propres communs.

2- Si le système est dans l'état $|\psi\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix}$, quelle est la probabilité de mesure de

chaque valeur de j_z .

3- Calculer $\langle j^2 \rangle$

Exercice 7

1- Donner une brève description des propriétés du moment cinétique d'une particule en mécanique quantique.

2- Montrer que qu'on peut écrire la valeur propre de J^2 sous la forme $\hbar^2 j(j+1)$

3- Si $j=3/2$; quels sont les valeurs propres et les vecteurs propres $|j,m\rangle$ de J^2 et J_z ?

4- Si le système est dans l'état $|\psi\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 2 \\ 0 \end{pmatrix}$ écrire $|\psi\rangle$ suivant la base $|j,m\rangle$. Quelle est la probabilité de mesure de chaque valeur de j_z .

Exercice 8

On considère un système dont la fonction d'onde est donnée par

$$\psi(\theta, \varphi) = \frac{1}{2} Y_0^0(\theta, \varphi) + \frac{1}{\sqrt{3}} Y_1^1(\theta, \varphi) + \frac{1}{2} Y_1^{-1}(\theta, \varphi) + \frac{1}{\sqrt{6}} Y_2^2(\theta, \varphi)$$

Où les $Y_l^m(\theta, \varphi)$ sont les harmoniques sphériques

- 1- Est-ce que $\psi(\theta, \varphi)$ est fonction propre de L^2 et L_z ?
- 2- Est-ce que $\psi(\theta, \varphi)$ est normalisée ?
- 3- Calculer $L_+ \psi(\theta, \varphi)$.
- 4- Si on mesure L^2 et L_z quelles valeurs obtient-on et avec quelle probabilité ?

On donne :

$$L_+ Y_l^m = \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m+1)} Y_l^{m+1} ; L^2 Y_l^m = \hbar^2 l(l+1) Y_l^m ; L_z Y_l^m = m \hbar Y_l^m$$

Exercice 9

Soit un système de moment cinétique orbital $l = 1$ on s'intéresse à la mesure de L_y dont la

matrice est donnée par $L_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}$

- 1- Quelles sont les valeurs obtenues lors d'une mesure de L_y ?
- 2- Quelle est la probabilité pour que la mesure donne \hbar ? Si le système se trouve dans l'état

$$|\psi\rangle = |1,0\rangle + i\sqrt{3}|1,1\rangle$$

Où $|l, m\rangle$ sont les vecteurs propres communs à L^2 et L_z

- 3- Montrer que la fonction d'onde associée à $|\psi\rangle$ s'écrit :

$$\psi(\theta, \varphi) = Y_1^0(\theta, \varphi) + i\sqrt{3}Y_1^1(\theta, \varphi)$$

Où les $Y_l^m(\theta, \varphi)$ sont les harmoniques sphériques.

- 4- Est-ce que $\psi(\theta, \varphi)$ est fonction propre de L^2 et L_z
- 5- Calculer $L_{\pm} \psi(\theta, \varphi)$

On donne $L_{\pm} |j, m\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} |j, m \pm 1\rangle$

Exercice 10

La représentation matricielle des composantes x et y du moment orbitale L d'un système est

$$L_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad L_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}$$

- 1- Calculer la matrice de L_z .
- 2- En déduire les valeurs possibles de L_z et de L^2 .
- 3- Calculer $\langle L_x \rangle$ par rapport à l'état $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ puis par rapport à l'état propre de $L_z = 0$.

Exercice 11

On considère un système dont le spin $s = \frac{3}{2}$:

- 1- Quelles sont les valeurs propres de S^2 et S_z ainsi que leurs vecteurs propres communs $|s, m\rangle$.
- 2- Calculer les matrices associées à S^2, S_z, S_x, S_y
- 3- Si le système est dans l'état $|\psi\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \\ 1 \\ 4 \end{pmatrix}$, quelle est la probabilité de mesure de chaque valeur de S_z .

Exercice 12

un système initialement dans l'état

$$\psi(\theta, \varphi) = Y_1^{-1}(\theta, \varphi) + iY_1^1(\theta, \varphi)$$

- 1- Calculer $\langle \psi | L_+ | \psi \rangle$ et $\langle \psi | L_- | \psi \rangle$
- 2- Si on mesure L_z quelles valeurs obtient-on et avec quelles probabilités ?
- 3- Si la mesure de L_z donne \hbar calculer $\langle L_x \rangle$.

Exercice 13

On considère un système dont le moment cinétique est $j = 5/2$; quels sont les valeurs propres et les vecteurs propres de J^2 et J_z ?

Soit $\vec{J} = \vec{j}_1 + \vec{j}_2$ tel que $j_1 = 5/2$ et $j_2 = 1/2$

- 1- Quelles sont les valeurs possible de J et M ainsi que les vecteur $|J, M\rangle$?
- 2- Quelle est l'action de J_+ sur l'état $|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle$
- 3- Ecrire le vecteur $|3, 3\rangle$ suivant la base $|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle$ en imposant la contrainte $M = m_1 + m_2$ puis en déduire la valeur des coefficients de Clebsh Gordon.
- 4- Calculer $\langle j^2 \rangle$

Exercice 14

La représentation matricielle des composantes x et y du moment cinétique \vec{J} d'un système est

$$j_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad j_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \quad j_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

- 1- Quelle sont les valeurs possibles de j_x quand on la mesure ?
- 2- Calculer $\langle j_z \rangle$ et $\langle j_z^2 \rangle$ si $j_x = \hbar$.
- 3- Si le système est dans l'état $|\psi\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 3 \end{pmatrix}$, quelle sont les valeurs obtenues si on mesure j_y

Exercice 15

- 1- Donner une brève description des propriétés du moment cinétique d'une particule en mécanique quantique.
- 2- Si on a un système (1) de moment cinétique $j_1 = 2$; quelles sont les valeurs propres et les vecteurs propres $|j_1, m_1\rangle$ de j^2 et j_z ?

- 3- Si on ajoute un système (2) de moment cinétique $j_2 = 1$. quelles sont les valeurs propres et les vecteurs propres $|J, M\rangle$ de J^2 et J_Z du moment cinétique du système total $S = S(1) + S(2)$

Exercice 16

- 1- Donner une brève définition du spin d'une particule en mécanique quantique.
- 2- Soit $\vec{S} = \vec{s}_1 + \vec{s}_2$ tel que $s_1 = 1/2$ et $s_2 = 1/2$
- 3- Quelles sont les valeurs possibles de S et M_s ainsi que les vecteur $|S, M_s\rangle$?
- 4- Déterminer les matrices de S_Z et S par rapport à $|S, M_s\rangle$
- 5- Quelle est l'action de S sur l'état $|s_1, s_2, m_1, m_2\rangle$
- 6- Ecrire l'expression générale du vecteur $|S, M_s\rangle$ suivant la base $|s_1, s_2, m_1, m_2\rangle$ en fonction des coefficients de Clebsch Gordon $C_{m_1 m_2}^S$
- 7- Déterminer ces coefficients pour l'état $|1, 0\rangle$

On donne :

La valeur propre de J^2 est $\hbar^2 j(j+1)$ et $j_{\pm} |j, m\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} |j, m \pm 1\rangle$

Chapitre 4
Problème du potentiel Central

Chapitre 4 Problème du Potentiel Central

4.1 Introduction

Un potentiel est dit central s'il dépend seulement du module de \vec{r} , c'est-à-dire une énergie potentielle qui ne dépend que de la distance r à l'origine:

$$V(\vec{r}) = V(x, y, z) = V(|\vec{r}|) = V(r) = V(x^2 + y^2 + z^2).$$

L'hamiltonien pour une particule de masse m soumise à un un potentiel central s'écrit :

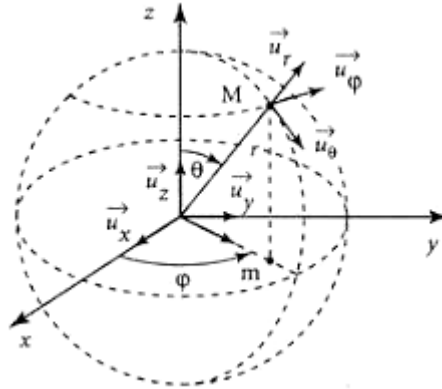
$$\hat{H} = \frac{p^2}{2m} + V(r) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r)$$

Un exemple de potentiel central est le potentiel de Coulomb entre les charges électriques des particules:

$$V_{\text{Coul}}(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}$$

Puisque le potentiel ne dépend que de la distance de l'origine, l'hamiltonien possède une symétrie sphérique c.à.d. invariant par rotation. Pour cela le système approprié à utiliser dans ce cas est le système de coordonnées sphériques définie par r, θ et φ ($r \geq 0, 0 \leq \theta \leq \pi, 0 \leq \varphi \leq 2\pi$):

$$x = r \sin \theta \cos \varphi \quad y = r \sin \theta \sin \varphi \quad z = r \cos \theta$$



Le moment cinétique orbital joue un rôle fondamental dans tous les problèmes de potentiel central, à cause de la symétrie sphérique l'hamiltonien \hat{H} commute avec toutes les composantes du moment cinétique \vec{L} :

$$[\hat{H}, L_i] = 0, (i = x, y, z) \Rightarrow [\hat{H}, L^2] = 0$$

Il en résulte que pour un système soumis à un potentiel central le moment cinétique est une grandeur conservée donc une constante du mouvement. Les expressions des composantes du moment cinétique \vec{L} ainsi que son module à l'aide des coordonnées sphériques sont :

$$\vec{L} = -i\hbar \vec{r} \times \vec{\nabla} \quad \text{avec} \quad \vec{\nabla} = \vec{u}_r \frac{\partial}{\partial r} + \vec{u}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \vec{u}_\varphi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

$$L_x = i\hbar \left[\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right]$$

$$L_y = i\hbar \left[\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right]$$

$$L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

$$L^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]$$

L'ensemble des grandeurs physiques $\{\hat{H}, L^2, L_z\}$ forment un ECOC (Ensemble Complet d'Observable qui Commutent) donc ces grandeurs possèdent des vecteurs propres communs à partir des quels on peut construire une base unique dans l'espace des états. Soit $|n, l, m\rangle$ un vecteur propre commun à \hat{H}, L^2 et L_z , On a :

$$\hat{H}|n, l, m\rangle = E_n|n, l, m\rangle$$

$$L^2|n, l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1)|n, l, m\rangle$$

$$L_z|n, l, m\rangle = \hbar m|n, l, m\rangle$$

Où l est un entier positif ou nul $-l \leq m \leq l$, prenant ainsi $(2l+1)$ valeurs. L^2 et L_z sont deux opérateurs dont on connaît l'expression en représentation R , donc il est facile d'écrire les équations différentielles exprimant leurs équations aux valeurs propres. Si $\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$ est une fonction propre de $\{\hat{H}, L^2, L_z\}$:

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = \langle \vec{r} | n, l, m \rangle$$

$$\hat{H}\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = E_n\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$$

$$L^2\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1)\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$$

$$L_z\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = \hbar m\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$$

Les fonctions $\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$ forment une base dans l'espace d'Hilbert des fonctions d'ondes par conséquent toute fonction $\psi(r, \theta, \varphi)$ quelconque de cet espace s'exprime comme une combinaison linéaire de ces dernières :

$$\psi(r, \theta, \varphi) = \sum_{n,l,m} a_{nlm} \psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$$

4.2 Résolution de l'équation de Schrödinger

En mécanique quantique la résolution de l'équation consiste à déterminer les niveaux E_n et les fonctions propres associées $\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$. Puisque le potentiel ne dépend que de la distance de l'origine, l'hamiltonien possède une symétrie sphérique. Il est donc pratique de représenter l'équation de Schrödinger en termes du système de coordonnées sphériques standard. Le Laplacien dans ce système de coordonnées est donné par :

$$\Delta = \Delta_{radial} + \Delta_{angulaire} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$$

Avec :

$$L^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]$$

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{1}{\hbar^2} \frac{L^2}{r^2}$$

L'équation de Schrödinger en coordonnées sphérique s'écrit :

$$\Rightarrow \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{L^2}{2mr^2} + V(r) \right] \psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = E_n \psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$$

L'approche standard pour résoudre les équations différentielles partielles consiste à utiliser la méthode de séparation des variables que nous avons déjà utilisée plusieurs fois. Nous supposons que la fonction d'onde est un produit de 2 fonctions l'une dépendante de r (partie radiale) et l'autre de θ et φ (partie angulaire)

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_n(r) Y_l^m(\theta, \varphi)$$

On montre que la partie angulaire est fonction propre de L^2 et L_z

$$L^2 Y_l^m(\theta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_l^m(\theta, \varphi)$$

$$L_z Y_l^m(\theta, \varphi) = \hbar m Y_l^m(\theta, \varphi)$$

$Y_l^m(\theta, \varphi)$ sont les harmoniques sphériques

Nous avons maintenant des solutions pour les fonctions angulaires $\Phi(\varphi)$ et $\Theta(\theta)$. Il est commode de les combiner en une seule fonction normalisée des deux angles. Ces fonctions sont appelées les harmoniques sphériques et sont définies comme :

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = C_1^m P_l^m(\cos \theta) \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}$$

C_1^m est une constante de normalisation à déterminer

$$\int_0^\pi \int_0^{2\pi} |Y_l^m(\theta, \varphi)|^2 \sin \theta d\theta d\varphi = 1$$

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{2}} \sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta) \frac{e^{-im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}$$

En particulier,

$$Y_l^0(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \theta)$$

La définition des fonctions de Legendre associées au m négatif peut être utilisée pour montrer que

$$Y_l^m(\theta, \varphi)^* = (-1)^m Y_l^{-m}(\theta, \varphi)$$

Les harmoniques sphériques satisfont la condition d'orthogonalité

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \sin \theta Y_l^{m'}(\theta, \varphi) Y_l^m(\theta, \varphi)^* = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

Les $Y_l^m(\theta, \varphi)$ sont des fonctions orthonormées on peut développer la partie angulaire la fonction d'onde suivant ces fonctions :

$$\chi(\theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{+\infty} \sum_{m=-l}^l a_{lm} Y_l^m(\theta, \varphi)$$

et la fonction d'onde totale

$$\psi(r, \theta, \varphi) = \sum_{n,l,m} a_{nlm} R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \varphi)$$

4.2.1 L'équation radiale

C'est l'équation aux valeurs propres pour la coordonnée radiale et puisqu'elle dépend explicitement de l'entier l , les fonctions propres seront généralement représentées par $R_{nl}(r)$. Les solutions complètes de l'équation de Schrödinger peuvent alors être écrites comme

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \varphi)$$

La partie angulaire $Y_l^m(\theta, \varphi)$ de la fonction d'onde est déjà déterminée il reste maintenant la partie radiale $R_{nl}(r)$, l'équation de Schrödinger en coordonnées sphérique s'écrit :

$$\begin{aligned} \Rightarrow \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{L^2}{2mr^2} + V(r) \right] \psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) &= E_n \psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) \\ \Rightarrow \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{L^2}{2mr^2} + V(r) \right] R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \varphi) &= E_n R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \varphi) \\ \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r R_{nl}(r)) Y_l^m(\theta, \varphi) + \frac{L^2}{2mr^2} Y_l^m(\theta, \varphi) R_{nl}(r) + V(r) R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \varphi) \\ &= E_n R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \varphi) \end{aligned}$$

Or :

$$\begin{aligned} L^2 Y_l^m(\theta, \varphi) &= \hbar^2 l(l+1) Y_l^m(\theta, \varphi) \\ \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r R_{nl}(r)) Y_l^m(\theta, \varphi) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} Y_l^m(\theta, \varphi) R_{nl}(r) + V(r) R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \varphi) \\ &= E_n R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \varphi) \end{aligned}$$

En simplifiant par $Y_l^m(\theta, \varphi)$ on obtient :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (rR_{nl}(r)) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} R_{nl}(r) + V(r)R_{nl}(r) = E_n R_{nl}(r)$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (rR_{nl}(r)) + \left[\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right] (rR_{nl}(r)) = E_n (rR_{nl}(r))$$

On pose $u_{nl}(r) = rR_{nl}(r)$ l'équation devient :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u_{nl}(r)}{dr^2} + V_{eff}(r)u_{nl}(r) = E_n u_{nl}(r)$$

Où

$$V_{eff}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2}$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} u_{nl}''(r) + V_{eff}(r)u_{nl}(r) = E_n u_{nl}(r)$$

4.3 Exemple de système soumis à un potentiel central

4.3.1 Particule libre en coordonnées sphériques à 3 dimensions

La particule n'étant soumise à aucune interaction ($V(r)=0$)

$$\hat{H} = \frac{P^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta$$

L'équation radiale générale avec $V(r)=0$ s'écrit :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} u_{nl}''(r) + \left[\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right] u_{nl}(r) = E_n u_{nl}(r)$$

Mais dans ce cas particulier il est plus commode d'utiliser la forme originale de cette équation :

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (rR_{nl}(r)) + \left[\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right] R_{nl}(r) = E_n R_{nl}(r)$$

$$E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

On effectue le changement de variables $\rho = kr$ l'équation devient

$$\frac{d^2 R_l(\rho)}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{dR_l(\rho)}{d\rho} + \left[1 + \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] R_l(\rho) = 0$$

Avec $R_l(\rho) = R_l(kr) = R_{kl}(r)$

C'est l'équation de Bessel sphérique, la solution est une combinaison linéaire des fonctions de Bessel sphérique $J_l(\rho)$ et de Newman $N_l(\rho)$:

$$R_l(\rho) = A_l J_l(\rho) + B_l N_l(\rho)$$

$$J_l(\rho) = (-\rho)^l \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^l \frac{\sin(\rho)}{\rho}$$

$$N_l(\rho) = -(-\rho)^l \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^l \frac{\cos(\rho)}{\rho}$$

Seules $J_l(\rho)$ sont acceptables car $N_l(\rho)$ divergent quand $\rho \rightarrow 0$

Le développement de l'onde plane qui est la fonction d'onde de la particule libre en coordonnées cartésiennes suivant cette base :

$$e^{i\vec{k}\vec{r}} = \sum_{l=0}^{+\infty} \sum_{m=-l}^l a_{lm} \psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{+\infty} \sum_{m=-l}^l a_{lm} R_{kl}(r) Y_l^m(\theta, \varphi)$$

4.3.2 L'oscillateur harmonique à trois dimensions

Considérons une particule de masse m sans spin soumise au potentiel harmonique isotrope :

$$V(x, y, z) = \frac{1}{2} m \omega^2 (x^2 + y^2 + z^2)$$

Le potentiel est central, en coordonnées sphériques il s'écrit :

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

D'où

$$V_{eff}(r) = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 r^2$$

L'équation radiale devient :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} u_{nl}''(r) + \left[\frac{1}{2} m \omega^2 r^2 + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right] u_{nl}(r) = E_n u_{nl}(r)$$

$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$ De carré sommable \Rightarrow elle est finie en tout point. Les fonctions d'onde pour les états liés doivent être normalisables. C'est à dire :

$$\iiint \psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) \psi_{nlm}^*(r, \theta, \varphi) d^3r = 1$$

Cela implique que

$$\int_0^{\infty} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} R(r) R^*(r) Y_l^m(\theta, \varphi) Y_l^{m*}(\theta, \varphi) r^2 dr \sin \theta d\theta d\varphi = 1$$

$$\Rightarrow \int_0^{\infty} |R_{nl}(r)|^2 r^2 dr \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} |Y_l^m(\theta, \varphi)|^2 \sin \theta d\theta d\varphi = 1$$

$$\int_0^\pi \int_0^{2\pi} |Y_l^m(\theta, \varphi)|^2 \sin \theta d\theta d\varphi = 1$$

D'où

$$\int_0^{+\infty} |R_{nl}(r)|^2 r^2 dr = 1 \Rightarrow \int_0^{+\infty} |u_{nl}(r)|^2 dr = 1$$

Par conséquent $\lim_{r \rightarrow +\infty} R(r) = \lim_{r \rightarrow +\infty} u(r) = 0$, d'un autre côté $R(r)$ doit être finie au point 0 donc $\lim_{r \rightarrow 0} r R(r) = \lim_{r \rightarrow 0} u(r) = 0$

4.3.1.1 Etude du comportement asymptotique

Quand $r \rightarrow \infty \Rightarrow \frac{1}{r^2} \rightarrow 0$ et l'équation radiale devient :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} u_{nl}''(r) + \left[\frac{1}{2} m \omega^2 r^2 \right] u_{nl}(r) = 0$$

Car quand $r \rightarrow \infty$ il y a aucune information sur $u''(r)$ et $\frac{1}{2} m \omega^2 r^2$ est assez grand alors que $\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \rightarrow 0$ Donc négligeable

Les solutions de cette équation sont : $u_{nl}(r) \sim e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}}$

Quand $r \rightarrow 0$ et l'équation radiale devient :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} u_{nl}''(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} u_{nl}(r) = 0$$

Les solutions sont de la forme : $u_{nl}(r) \sim r^{l+1}$

Ce qui implique que :

$$u_{nl}(r) \sim r^{l+1} f(r) e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}}$$

On injecte $u_{nl}(r)$ dans l'équation radiale on obtient :

$$f''(r) + 2 \left[\frac{(l+1)}{r} - \frac{m\omega r}{\hbar} \right] f'(r) + \left[\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{m\omega}{\hbar} (2l+3) + \dots \right] f(r) = 0$$

Les fonctions d'onde standards

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \varphi)$$

$$u_{nl}(r) \sim r^{l+1} f(r) e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}}$$

$$\Rightarrow \frac{u_{nl}(r)}{r} = R_{nl}(r) \sim r^l f(r) e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}}$$

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) \sim r^l f(r) e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}} Y_l^m(\theta, \varphi)$$

Maintenant il reste à déterminer la fonction $f(r)$ pour cela on utilise la méthode des séries entières on pose que :

$$\begin{aligned} f(r) &= \sum_{n=0}^{+\infty} a_n r^n \\ f'(r) &= \sum_{n=0}^{+\infty} n a_n r^{n-1} \\ f''(r) &= \sum_{n=0}^{+\infty} n(n-1) a_n r^{n-2} \\ \Rightarrow \sum_{n=0}^{+\infty} n(n-1) a_n r^{n-2} + 2 \left[\frac{(l+1)}{r} - \frac{m\omega r}{\hbar} \right] \sum_{n=0}^{+\infty} n a_n r^{n-1} \\ &\quad + \left[\left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^2 r^2 - \frac{m\omega}{\hbar} (2l+3) + \frac{2mE_n}{\hbar^2} \right] \sum_{n=0}^{+\infty} a_n r^n = 0 \\ \Rightarrow \sum_{n=0}^{+\infty} n(n-1) a_n r^{n-2} + 2(l+1) \sum_{n=0}^{+\infty} n a_n r^{n-2} - \frac{2m\omega}{\hbar} \sum_{n=0}^{+\infty} n a_n r^n - \frac{m\omega}{\hbar} (2l+3) \sum_{n=0}^{+\infty} a_n r^n \\ &\quad + \frac{2mE_n}{\hbar^2} \sum_{n=0}^{+\infty} a_n r^n = 0 \\ \Rightarrow \sum_{n=0}^{+\infty} n(n+2l+1) a_n r^{n-2} + \left[\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{2m\omega n}{\hbar} - \frac{m\omega}{\hbar} (2l+3) \right] \sum_{n=0}^{+\infty} a_n r^n = 0 \end{aligned}$$

Pour $n \rightarrow n+2$

On a :

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{+\infty} n(n+2l+1) a_n r^{n-2} &= \sum_{n=0}^{+\infty} (n+2)(n+2+2l+1) a_{n+2} r^n \\ \Rightarrow \sum_{n=0}^{+\infty} n(n+2l+1) a_n r^{n-2} &= \sum_{n=0}^{+\infty} (n+2)(n+2l+3) a_{n+2} r^n \\ \Rightarrow \sum_{n=0}^{+\infty} (n+2)(n+2l+3) a_{n+2} r^n + \left[\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{m\omega}{\hbar} (2n+2l+3) \right] \sum_{n=0}^{+\infty} a_n r^n &= 0 \\ \Rightarrow \sum_{n=0}^{+\infty} \left\{ (n+2)(n+2l+3) a_{n+2} + \left[\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{m\omega}{\hbar} (2n+2l+3) \right] a_n \right\} r^n &= 0 \\ \Rightarrow (n+2)(n+2l+3) a_{n+2} &= \left[\frac{m\omega}{\hbar} (2n+2l+3) - \frac{2mE}{\hbar^2} \right] a_n \end{aligned}$$

Pour $n=0$

$$2(2l + 3)a_2 = \left[\frac{m\omega}{\hbar} (2l + 3) - \frac{2mE}{\hbar^2} \right] a_0$$

Pour $n = 1$

$$3(2l + 4)a_3 = \left[\frac{m\omega}{\hbar} (2l + 5) - \frac{2mE}{\hbar^2} \right] a_1$$

$$a_1 = 0 \Rightarrow a_3 = 0$$

Donc $a_{2p+1} = 0$, $\forall p$

Tous les coefficients s'expriment en fonction de a_0

$$\sum_{n=0}^{+\infty} a_{2n} r^{2n} = a_0 + a_2 r^2 + a_4 r^4 + a_6 r^6 + \dots \dots \dots$$

$\psi_{n1m}(r, \theta, \varphi)$ de carré sommable cela implique

$$f(r) = \sum_{n=0}^p a_{2n} r^{2n}$$

La fonction d'onde de l'état fondamental

$$\psi_{000}(r, \theta, \varphi) = R_{00}(r) Y_0^0(\theta, \varphi)$$

$$\Rightarrow \psi_{000}(r, \theta, \varphi) = a_0 e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}} Y_0^0(\theta, \varphi)$$

Au premier état excité

$$f(r) = \sum_{p=0}^{n=1} a_{2p} r^{2p} = a_0 + a_2 r^2$$

$$\psi_{100}(r, \theta, \varphi) = R_{10}(r) Y_0^0(\theta, \varphi)$$

$$\Rightarrow \psi_{100}(r, \theta, \varphi) = (a_0 + a_2 r^2) e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}} Y_0^0(\theta, \varphi)$$

a_0 et a_2 sont déterminés par la condition de normalisation

C'est-à-dire que :

$$a_{p+2} = a_{p+4} = \dots \dots \dots = 0$$

$$(n + 2)(n + 2l + 3)a_{n+2} = \left[\frac{m\omega}{\hbar} (2n + 2l + 3) - \frac{2mE}{\hbar^2} \right] a_n$$

$$f(r) = \sum_{p=0}^n a_{2p} r^{2p}$$

4.3.1.2 Les niveaux d'énergies

Si $n = p$

$$0 = \left[\frac{m\omega}{\hbar} (2p + 2l + 3) - \frac{2mE}{\hbar^2} \right] a_p$$

Avec $a_p \neq 0$

Cela implique

$$\begin{aligned} \frac{m\omega}{\hbar} (2p + 2l + 3) - \frac{2mE_n}{\hbar^2} &= 0 \\ \Rightarrow E_n &= \frac{\hbar\omega}{2} (2(p + l) + 3) \end{aligned}$$

En posant que : $N = p + l$

$$\Rightarrow E_N = \hbar\omega \left(N + \frac{3}{2} \right)$$

4.3.3 L'atome d'hydrogène

L'atome d'hydrogène est un système de deux particules: proton, de masse m_p et de charge e , et d'électron, de masse m_e et de charge $-e$

$$m_p = 1.710^{-27} \text{ kg}$$

$$m_e = 0.910^{-30} \text{ kg}$$

$$e = 1.610^{-19} \text{ Coulomb}$$

Le but : La détermination des énergies et les fonctions propres par la solution de l'équation de Schrödinger $\hat{H}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$

$$\hat{H} = T + V = T_e + T_p + V$$

$$T_e = \frac{P_e^2}{2m_e} \rightarrow \text{Énergie cinétique de l'électron } E_c$$

$$T_p = \frac{P_p^2}{2m_p} \rightarrow \text{Énergie cinétique du proton}$$

L'hamiltonien s'écrit :

$$\hat{H} = \frac{P_e^2}{2m_e} + \frac{P_p^2}{2m_p} + V(|\vec{r}_e - \vec{r}_p|)$$

Pour l'atome d'hydrogène, le potentiel qui dépend de la distance r entre le proton et l'électron est :

$$V(|\vec{r}_e - \vec{r}_p|) = -\frac{e^2}{|\vec{r}_e - \vec{r}_p|}$$

\vec{r}_e : Rayon vecteur de l'électron

\vec{r}_p : Rayon vecteur de proton

$$\Rightarrow \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_e - \frac{\hbar^2}{2m_p} \Delta_p - \frac{e^2}{|\vec{r}_e - \vec{r}_p|}$$

$$\Rightarrow \left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_e - \frac{\hbar^2}{2m_p} \Delta_p - \frac{e^2}{|\vec{r}_e - \vec{r}_p|} \right] \psi(\vec{r}_e, \vec{r}_p) = E \psi(\vec{r}_e, \vec{r}_p)$$

$$\Delta_e = \frac{\partial^2}{\partial x_e^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_e^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_e^2} \quad \text{et} \quad \Delta_p = \frac{\partial^2}{\partial x_p^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_p^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_p^2}$$

4.3.1.3 Problème à deux corps

Considérons deux particules sans spin de masses m_1 et m_2 et les positions \vec{r}_1 et \vec{r}_2 respectivement, et supposons que la force entre les particules dérive d'un potentiel

$$V(r) = V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$$

L'hamiltonien s'écrit :

$$\hat{H} = \frac{1}{2} m_1 V_1^2 + \frac{1}{2} m_2 V_2^2 + V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$$

L'étude du mouvement des deux particules est simplifiée en exprimant le problème avec les coordonnées du centre de masse $\vec{R}_c = \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{m_1 + m_2}$ et les coordonnées relatives $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$ au lieu des variables $\vec{r}_1 ; \vec{r}_2$. Pour cela on doit écrire \vec{r}_1 et \vec{r}_2 en fonction de \vec{R}_c et \vec{r} . En inversant les relations précédentes on a :

$$\vec{r}_1 = \vec{R}_c + \frac{m_2}{M} \vec{r} \quad \text{et} \quad \vec{r}_2 = \vec{R}_c - \frac{m_1}{M} \vec{r}$$

$$\vec{v}_1 = \frac{d\vec{r}_1}{dt} = \vec{V}_c + \frac{m_2}{M} \vec{V} \quad \text{et} \quad \vec{v}_2 = \frac{d\vec{r}_2}{dt} = \vec{V}_c - \frac{m_1}{M} \vec{V}$$

$$\vec{v}_c = \frac{d\vec{R}_c}{dt} \quad \text{et} \quad \vec{V} = \frac{d\vec{r}}{dt}$$

Où M est la masse totale du système $M = m_1 + m_2$ l'hamiltonien devient :

$$\hat{H} = \frac{1}{2} m_1 \left(\vec{V}_c + \frac{m_2}{M} \vec{V} \right)^2 + \frac{1}{2} m_2 \left(\vec{V}_c - \frac{m_1}{M} \vec{V} \right)^2 + V(r)$$

Qui peut être réécrit en termes des nouvelles coordonnées comme :

$$\hat{H} = \frac{1}{2} M V_c^2 + \frac{1}{2} \mu V^2 + V(r) = \hat{H}_c + \hat{H}_r$$

Où μ est la masse réduite : $\mu = \frac{m_1 \times m_2}{M}$

$$\hat{H}_c = \frac{1}{2} M V_c^2 \quad \text{et} \quad \hat{H}_r = \frac{1}{2} \mu V^2 + V(r)$$

\hat{H}_c et \hat{H}_r commute : $[\hat{H}_c, \hat{H}_r] = 0$

Et satisfont ainsi les équations aux valeurs propres avec le vecteur propre commun

$$\hat{H}_c |\psi\rangle = E_c |\psi\rangle$$

$$\hat{H}_r |\psi\rangle = E_r |\psi\rangle$$

Ce qui implique que

$$\hat{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle$$

On a :

$$r = |\vec{r}_e - \vec{r}_p|$$

$$\vec{r}_1 \rightarrow \vec{r}_e \quad \text{et} \quad \vec{r}_2 \rightarrow \vec{r}_p \Rightarrow \vec{R}_c, \vec{r}$$

$$\Rightarrow [\hat{H}_c + \hat{H}_r] \psi(\vec{R}_c, \vec{r}) = E \psi(\vec{R}_c, \vec{r})$$

Cela implique

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_c - \frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_r - \frac{e^2}{r} \right] \psi(\vec{R}_c, \vec{r}) = E \psi(\vec{R}_c, \vec{r})$$

\vec{R}_c, \vec{r} sont indépendants

On peut écrire

$$\psi(\vec{R}_c, \vec{r}) = \psi_c(\vec{R}_c) \psi_r(\vec{r})$$

Equivaut à dire que:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_c - \frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_r + V(r) \right] \psi(\vec{R}_c, \vec{r}) = E \psi(\vec{R}_c, \vec{r})$$

$$\Rightarrow \left[-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_c - \frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_r + V(r) \right] \psi_c(\vec{R}_c) \psi_r(\vec{r}) = E \psi_c(\vec{R}_c) \psi_r(\vec{r})$$

$$\Rightarrow \left[-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_c \psi_c(\vec{R}_c) \right] \psi_r(\vec{r}) + \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_r \psi_r(\vec{r}) + V(r) \psi_r(\vec{r}) \right] \psi_c(\vec{R}_c) = E \psi_c(\vec{R}_c) \psi_r(\vec{r})$$

On trouve :

$$\frac{-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_c \psi_c(\vec{R}_c)}{\psi_c(\vec{R}_c)} + \frac{-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_r \psi_r(\vec{r}) + V(r) \psi_r(\vec{r})}{\psi_r(\vec{r})} = E$$

Donc les deux termes sont constants :

$$\frac{-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_c \psi_c(\vec{R}_c)}{\psi_c(\vec{R}_c)} = c_1$$

On trouve :

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_c \psi_c(\vec{R}_c) = c_1 \psi_c(\vec{R}_c) = E_c \psi_c(\vec{R}_c)$$

Et

$$\frac{\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_r + V(r)\right]\psi_r(\vec{r})}{\psi_r(\vec{r})} = c_2 \quad \text{avec} \quad V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}$$

$$\Rightarrow \frac{\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_r - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}\right]\psi_r(\vec{r})}{\psi_r(\vec{r})} = c_2$$

On obtient :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_r - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}\right]\psi_r(\vec{r}) = c_2\psi_r(\vec{r}) = E_r\psi_r(\vec{r})$$

Où

$$E = E_c + E_r = c_1 + c_2$$

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_c \rightarrow \frac{p_c^2}{2M}$$

Dont l'énergie est :

$$E_c = \frac{p_c^2}{2M}$$

La solution qui décrit le mouvement d'une particule fictive libre est :

$$\psi_c(\vec{R}_c) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{-i\vec{k}\vec{R}_c} \quad \text{avec} \quad \vec{k} = \frac{\vec{p}_c}{\hbar}$$

4.3.1.4 L'équation radiale

L'équation radiale pour la fonction est $u(r)$ correspondant au mouvement relatif donc :

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}u''_{nl}(r) + V_{eff}(r)u_{nl}(r) = E_n u_{nl}(r)$$

Le potentiel effectif est :

$$V_{eff}(r) = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + V(r) = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}$$

Où l est l'entier naturel donnant la valeur propre $\hbar^2 l(l+1)$ pour le carré du moment cinétique orbital. L'équation radiale s'écrit :

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}u''_{nl}(r) + \left[\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}\right]u_{nl}(r) = E_n u_{nl}(r)$$

4.3.1.4.1 Le comportement asymptotique

On a deux comportements :

Dans le premier cas $l = 0$ il n'y a pas le terme de centrifuge et la limite de $V_{eff}(r)$ est :

$$\lim_{r \rightarrow 0} V_{\text{eff}}(r) = -\infty$$

Dans le deuxième cas $l > 0$ La limite de $V_{\text{eff}}(r)$ est :

$$\lim_{r \rightarrow 0} V_{\text{eff}}(r) = +\infty$$

Avec $u(r) = rR(r)$

Quand $r \rightarrow 0$ $u(r) = rR(r) \Rightarrow \frac{u(r)}{r} = R(r)$

$$\lim_{r \rightarrow 0} rR(r) = \lim_{r \rightarrow 0} u(r) = 0$$

L'équation devient :

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} u_{nl}''(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} u_{nl}(r) = 0$$

$$\Rightarrow -u_{nl}''(r) + \frac{l(l+1)}{r^2} u_{nl}(r) = 0$$

Les solutions sont de la forme :

$$u_{nl}(r) \sim r^{l+1}$$

Quand $r \rightarrow +\infty$ on obtient pour l'équation radiale

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} u_{nl}''(r) = E_n u_{nl}(r)$$

$$\Rightarrow u_{nl}''(r) + \frac{2\mu E}{\hbar^2} u_{nl}(r) = 0$$

Cela implique

$$\lambda^2 = -\frac{2\mu E}{\hbar^2}$$

Etat lié Donc pour $E < 0$

$$\lambda = \pm \sqrt{\frac{2\mu(-E)}{\hbar^2}}$$

$$u_{nl}(r) = Ae^{-\lambda r} + Be^{\lambda r}$$

$$\int_0^{+\infty} |u_{nl}(r)|^2 dr = 1 \Rightarrow u_{nl}(r) \sim e^{-\lambda r}$$

$$u_{nl}(r) \sim r^{l+1} f(r) e^{-\lambda r}$$

Les dérivées de $u_{nl}(r)$ on remplace dans l'équation radiale $f(r)$ vérifie :

$$f''(r) + 2 \left[\frac{(l+1)}{r} - \lambda \right] f'(r) + 2 \left[-\lambda \frac{(l+1)}{r} + \frac{\mu}{\hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \right] f(r) = 0$$

4.3.1.5 Les niveaux d'énergies

La méthode des séries entières

$$f(r) = \sum_{k=0}^{+\infty} a_k r^k$$

$$f'(r) = \sum k a_k r^{k-1} \quad f''(r) = \sum k(k-1) a_k r^{k-2}$$

$$\Rightarrow \sum_{k=0}^{+\infty} k(k-1) a_k r^{k-2} + 2 \left[\frac{(l+1)}{r} - \lambda \right] \sum_{k=0}^{+\infty} k a_k r^{k-1} + 2 \left[-\lambda \frac{(l+1)}{r} + \frac{\mu}{\hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \right] \sum_{k=0}^{+\infty} a_k r^k = 0$$

$$\Rightarrow \sum_{k=0}^{+\infty} k(k-1) a_k r^{k-2} + 2(l+1) \sum_{k=0}^{+\infty} k a_k r^{k-2} - 2\lambda \sum_{k=0}^{+\infty} k a_k r^{k-1} - 2\lambda(l+1) \sum_{k=0}^{+\infty} a_k r^{k-1} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{k=0}^{+\infty} a_k r^{k-1} = 0$$

$$\Rightarrow \sum_{k=0}^{+\infty} k(k+2l+1) a_k r^{k-2} + 2 \left[-\lambda(k+1) + \frac{\mu}{\hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right] \sum_{k=0}^{+\infty} a_k r^{k-1} = 0$$

Par exemple :

$$\sum_{k=0}^{+\infty} A_k x^{k-1} = \sum_{k=1}^{+\infty} A_{k-1} x^{k-2}$$

$$\Rightarrow \sum_{k=1}^{+\infty} \left\{ k(k+2l+1) a_k + 2 \left[-\lambda(k+1) + \frac{\mu}{\hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right] a_{k-1} \right\} r^{k-2} = 0$$

Or $r^{k-2} \neq 0$

$$k(k+2l+1) a_k + 2 \left[-\lambda(k+1) + \frac{\mu}{\hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right] a_{k-1} = 0$$

$$k(k+2l+1) a_k = 2 \left[\lambda(k+1) - \frac{\mu}{\hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right] a_{k-1}$$

$$f(r) = \sum_{k=0}^p a_k r^k = a_0 + a_1 r^1 + a_2 r^2 + \dots + a_p r^p$$

C'est-à-dire que : $a_{p+1} = a_{p+2} = \dots = 0$

Si $k = p+1$

$$0 = 2 \left[\lambda(p+1) - \frac{\mu}{\hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right] a_p$$

p et l sont des entiers et on pose alors :

$$n = p + 1 + 1 \quad D'o\grave{u} \quad \lambda n = \frac{\mu}{\hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$$

Le rayon de Bohr $a = \frac{\hbar^2}{\mu} \frac{4\pi\epsilon_0}{e^2}$

$$\lambda n = \frac{1}{a} \Rightarrow \lambda = \frac{1}{na}$$

Or $\sqrt{\frac{2\mu(-E)}{\hbar^2}} = \lambda$

$$\Leftrightarrow \sqrt{\frac{2\mu(-E)}{\hbar^2}} = \frac{1}{na}$$

On obtient :

$$E_n = - \frac{\hbar^2}{2\mu n^2 a^2}$$

4.3.1.6 Les fonctions propres

$f(r)$ est totalement d\u00e9termin\u00e9e : on exprime tous les coefficients en a_k en fonction de a_0 puis on calcule a_0 en utilisant la condition de normalisation.

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \varphi)$$

On a : $n = p + 1 + l$

Le minimum : $p = 0 \Rightarrow n = 1 + l$

$$\Rightarrow l \leq n - 1$$

$$\psi_{100}(r, \theta, \varphi) = R_{10}(r) Y_0^0(\theta, \varphi)$$

La normalisation

$$\int_0^{+\infty} |R_{nl}(r)|^2 r^2 dr = 1$$

$$u(r) = rR(r) \Rightarrow R_{10} = \frac{u_{10}(r)}{r}$$

Or

$$u(r) \sim r^{l+1} f(r) e^{-\lambda r}$$

$$\Rightarrow R_{10} = \frac{u_{10}(r)}{r} = \frac{r^{l+1} f(r) e^{-\lambda r}}{r} N_{10}$$

$$\Rightarrow R_{10} = N_{10} f(r) e^{-\lambda r}$$

$$k(k + 2l + 1) a_k = 2 \left[\lambda(k + 1) - \frac{\mu}{\hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right] a_{k-1}$$

$$k = 1 ; l = 0$$

$$2a_1 = 2 \left[\lambda - \frac{\mu}{\hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right] a_0$$

$$f(r) = \sum_{k=0}^p a_k r^k$$

$$n = p + 1 + l \Rightarrow p = n - l - 1$$

A l'état fondamental

$$n = 1 ; l = 0 ; p = 0$$

$$f(r) = \sum_{k=0}^{p=0} a_k r^k = a_0$$

Pour $R_{10}(r) \Leftrightarrow f(r) = a_0$

$$\int_0^{+\infty} |R_{10}(r)|^2 r^2 dr = 1$$

$$\Rightarrow \int_0^{+\infty} |N_{10} a_0 e^{-\lambda r}|^2 r^2 dr = 1$$

$$\Rightarrow N_{10}^2 a_0^2 \int_0^{+\infty} e^{-2\lambda r} r^2 dr = 1$$

$$\int_0^{+\infty} x^n e^{-bx} dx = \frac{n!}{b^{n+1}}$$

$\lambda = \frac{1}{na}$ où a est le rayon de Bohr

$$\Rightarrow N_{10}^2 a_0^2 \int_0^{+\infty} r^2 e^{-\frac{2r}{na}} dr = 1$$

Comme $n = 1$

$$\Leftrightarrow N_{10}^2 a_0^2 \int_0^{+\infty} r^2 e^{-\frac{2r}{a}} dr = 1$$

$$\int_0^{+\infty} r^2 e^{-\frac{2r}{a}} dr = \frac{2!}{\left(\frac{2}{a}\right)^{2+1}} = \frac{a^3}{4}$$

$$\Rightarrow N_{10}^2 a_0^2 \frac{a^3}{4} = 1$$

On sait que : $a_0 = \frac{2}{a^{3/2}}$

Avec $N_{10} = 1$

On trouve

$$R_{10} = N_{10} f(r) e^{-\lambda r} = \frac{2}{a^{3/2}} e^{-\frac{r}{a}}$$

Donc

$$\psi_{100}(r, \theta, \varphi) = R_{10}(r) Y_0^0(\theta, \varphi) = \frac{2}{a^{3/2}} e^{-\frac{r}{a}} \times \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

Au premier état excité

$$n = 2 ; l = 0 ; p = 1$$

$$\Rightarrow \psi_{200}(r, \theta, \varphi) = R_{20}(r) Y_0^0(\theta, \varphi)$$

$$u(r) \sim r^{l+1} f(r) e^{-\lambda r} = r R(r)$$

$$\Rightarrow R_{20}(r) = \frac{u_{20}(r)}{r} = f(r) e^{-\lambda r} = N_{20} f(r) e^{-\lambda r}$$

$$f(r) = \sum_{k=0}^{p=1} a_k r^k = a_0 + a_1 r$$

$$\Rightarrow R_{20}(r) = N_{20} (a_0 + a_1 r) e^{-\lambda r}$$

$$\lambda = \frac{1}{na} = \frac{1}{2a}$$

Cela implique

$$R_{20}(r) = N_{20} (a_0 + a_1 r) e^{-\frac{r}{2a}}$$

$$a_1 = \left[\lambda - \frac{\mu}{\hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right] a_0$$

On sait que

$$\lambda n = \frac{\mu}{\hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \quad \text{ou} \quad \lambda n = \frac{1}{a}$$

$$\Rightarrow a_1 = \left[\frac{1}{2a} - \frac{1}{a} \right] a_0$$

On trouve

$$a_1 = -\frac{1}{2a} a_0$$

$$\Rightarrow R_{20}(\Gamma) = N_{20} \left(a_0 - \frac{a_0}{2a} \Gamma \right) e^{-\frac{\Gamma}{2a}}$$

$$\Rightarrow R_{20}(\Gamma) = N_{20} a_0 \left(1 - \frac{\Gamma}{2a} \right) e^{-\frac{\Gamma}{2a}}$$

La normalisation

$$\int_0^{+\infty} |R_{20}(\Gamma)|^2 \Gamma^2 d\Gamma = 1$$

$$\Rightarrow \int_0^{+\infty} \left| N_{20} \left(a_0 - \frac{a_0}{2a} \Gamma \right) e^{-\frac{\Gamma}{2a}} \right|^2 \Gamma^2 d\Gamma = 1$$

$$\Rightarrow N_{20}^2 \int_0^{+\infty} \Gamma^2 \left(a_0 - \frac{a_0}{2a} \Gamma \right)^2 e^{-\frac{\Gamma}{a}} d\Gamma = 1$$

$$\Rightarrow N_{20}^2 \int_0^{+\infty} \Gamma^2 \left(a_0^2 - \frac{a_0^2}{a} \Gamma + \frac{a_0^2}{4a^2} \Gamma^2 \right)^2 e^{-\frac{\Gamma}{a}} d\Gamma = 1$$

$$\Rightarrow N_{20}^2 a_0^2 \int_0^{+\infty} \Gamma^2 \left(1 - \frac{\Gamma}{a} + \frac{\Gamma^2}{4a^2} \right)^2 e^{-\frac{\Gamma}{a}} d\Gamma = 1$$

$$\Rightarrow N_{20}^2 a_0^2 \left\{ \int_0^{+\infty} \Gamma^2 e^{-\frac{\Gamma}{a}} d\Gamma - \frac{1}{a} \int_0^{+\infty} \Gamma^3 e^{-\frac{\Gamma}{a}} d\Gamma + \frac{1}{4a^2} \int_0^{+\infty} \Gamma^4 e^{-\frac{\Gamma}{a}} d\Gamma \right\} = 1$$

En calculant les intégrales :

$$\int_0^{+\infty} \Gamma^2 e^{-\frac{\Gamma}{a}} d\Gamma = \frac{2!}{\left(\frac{1}{a}\right)^{2+1}} = 2a^3$$

$$\int_0^{+\infty} \Gamma^3 e^{-\frac{\Gamma}{a}} d\Gamma = \frac{3!}{\left(\frac{1}{a}\right)^{3+1}} = 6a^4$$

$$\int_0^{+\infty} \Gamma^4 e^{-\frac{\Gamma}{a}} d\Gamma = \frac{4!}{\left(\frac{1}{a}\right)^{4+1}} = 24a^5$$

Ce qui équivaut à dire que :

$$N_{20}^2 a_0^2 \left\{ 2a^3 - \frac{1}{a} 6a^4 + \frac{1}{4a^2} 24a^5 \right\} = 1$$

$$\Rightarrow 2N_{20}^2 a_0^2 a^3 = 1$$

$$\Rightarrow N_{20}^2 = \frac{1}{2a_0^2 a^3}$$

Or

$$a_0 = \frac{2}{a^{3/2}}$$

$$\Rightarrow N_{20}^2 = \frac{1}{2a^3 \left(\frac{2}{a^{3/2}}\right)^2} = \frac{(a^{3/2})^2}{8a^3} = \frac{1}{8}$$

D'où

$$N_{20} = \frac{1}{\sqrt{8}} = \frac{1}{2\sqrt{2}}$$

$$\Rightarrow R_{20}(\Gamma) = \frac{1}{2\sqrt{2}} \times \frac{2}{a^{3/2}} \left(1 - \frac{\Gamma}{2a}\right) e^{-\frac{\Gamma}{2a}}$$

On obtient

$$R_{20}(\Gamma) = \frac{1}{\sqrt{2a^3}} \left(1 - \frac{\Gamma}{2a}\right) e^{-\frac{\Gamma}{2a}}$$

Donc

$$\psi_{200}(\Gamma, \theta, \varphi) = R_{20}(\Gamma) Y_0^0(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2a^3}} \left(1 - \frac{\Gamma}{2a}\right) e^{-\frac{\Gamma}{2a}} \times \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

Exercices du Chapitre 4

Exercice 1

Une particule de masse m se déplace dans le plan xOy sous l'influence d'un potentiel

$V(x, y) = V_1(x) + V_2(y)$ tel que :

$$V_1(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \quad \text{et} \quad V_2(y) = \begin{cases} 0 & \text{si } 0 \leq y \leq a \\ \infty & \text{ailleurs} \end{cases}$$

- Quelles sont l'expression des énergies et des fonctions d'ondes associées du système ?

Données : Pour un oscillateur harmonique à 1 dimension on donne

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad \psi_n(x) = C \cdot H_n(X) e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}$$

Où $H_n(X)$ sont les polynômes d'Hermite.

Exercice 2

Une particule de masse m se déplace dans le plan xOy sous l'influence d'un potentiel

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

- 1- Quelles sont l'expression des énergies et des fonctions d'ondes associées du système ?
- 2- Quelles sont les énergies du premier et second états excités, leur degré de dégénérescence et leurs fonctions d'ondes associées.

Exercice 3

Une particule de masse m se déplace sous l'influence d'un potentiel

$$V(x, y) = V_1(x) + V_2(y) + V_3(z)$$

$$\text{Si } V_1(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \quad V_2(y) = 0 \quad V_3(z) = \begin{cases} 0 & \text{si } 0 \leq z \leq a \\ \infty & \text{ailleurs} \end{cases}$$

Quelles sont l'expression des énergies et des fonctions d'ondes associées ?

Exercice 4

Un proton se trouve dans un potentiel central :

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

- 1- Calculer l'énergie ainsi que la fonction d'onde radiale normalisée pour l'état s ($l=0$)
- 2- Calculer la probabilité de trouver le proton dans la sphère de rayon $a/2$. Et puis dans la bande sphérique comprise entre a et $3a/2$.

Exercice 5

Une particule se trouve dans un potentiel central :

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & \text{si } 0 \leq r \leq a \text{ region I} \\ 0 & \text{si } r > a \text{ region II} \end{cases}$$

- 1- Ecrire l'équation radiale dans chaque région
- 2- Montrer que Pour $l = 0$ cette équation s'écrit sous la forme :
 $U_1(r)'' + k_1^2 U_1(r) = 0$ dans la région I
 $U_2(r)'' - k_2^2 U_2(r) = 0$ dans la région II
 Sachant que pour $(E + V_0) > 0$ et $E < 0$
- 3- Déduire l'expression de k_1 et k_2 puis calculer la fonction d'onde radiale $R_1(r)$ et $R_2(r)$ dans ce cas ($l = 0$) pour chaque région sans normaliser

Données

L'équation radiale générale pour un potentiel central

$$\frac{-\hbar^2}{2m} U(r)'' + \left(V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right) U(r) = EU(r)$$

Où $U(r) = rR(r)$

Les solutions générales de $y(x)'' + a^2 y(x) = 0$

$$y(x) = A \cos(ax) + B \sin(ax)$$

Les solutions générales de $y(x)'' - a^2 y(x) = 0$

$$y(x) = A e^{-ax} + B e^{ax}$$

Exercice 6

Un proton se trouve dans un potentiel central : $V(r) = \begin{cases} -V_0 & \text{si } 0 \leq r \leq a \\ \infty & \text{ailleurs} \end{cases}$

- 1- Pourquoi ce potentiel est central ?
- 2- En générale quelles informations supplémentaires et simplifications obtient-on dans le cas particulier d'un potentiel central par rapport au cas général?
- 3- Calculer l'énergie ainsi que la fonction d'onde totale normalisée pour l'état s ($l=0$)

Avec $V_0 > 0$ et $-V_0 < E < 0$ et $Y_0^0(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$

Le Laplacien en coordonnées sphérique est : $\Delta = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{L^2}{\hbar^2 r^2}$

Exercice 7

Un proton se trouve dans un potentiel central : $V(r) = \begin{cases} -V_0 & \text{si } 0 \leq r \leq a \\ \infty & \text{ailleurs} \end{cases}$

Calculer l'énergie ainsi que la fonction d'onde radiale normalisée pour l'état s ($l=0$).

Avec $E > 0$ et $V_0 > 0$

Exercice 8

Les niveaux d'énergie de l'atome d'hydrogène sont donnés par $E_n = -\frac{Ry}{n^2}$ on se place dans le cas $n=2$.

- 1- Préciser les valeurs des nombre quantique l et m puis en déduire les états propres $|n, l, m\rangle$ et leur degré de dégénérescence.
- 2- Ecrire dans la base $|n, l, m\rangle$ les matrice représentant H, L^2, L_z .(on prend l'ordre $|2, 0, 0\rangle, |2, 1, 1\rangle, |2, 1, 0\rangle, |2, 1, -1\rangle$)
- 3- On plonge l'atome dans un champs électrique parallèle à OZ (effet Stark), Son hamiltonien devient $H=H_0 +W$ où $W= -e EZ$. Pour $n=2$ W est représenté par une matrice dont les seuls éléments non nuls sont $\langle 012|W|200\rangle = \langle 002|W|210\rangle = 3eEa_0$. En considérant W comme une perturbation calculer au premier ordre la correction à l'énergie de ce niveau en fonction de e, E et a_0
- 4- Si au lieu d'un champ électrique on plonge l'atome dans un champ magnétique parallèle à oz on suppose l'énergie d'interaction est $W= -g\vec{B} \cdot \vec{L}$. Calculer les nouvelles valeurs de l'énergie. Est ce qu'il y'a une levée de dégénérescence total ou partielle ?

Exercice 9

Pour l'atome d'hydrogène H, L^2, L_z et S_z forment un ECOC et possèdent des vecteurs propres communs qu'on note $|n, l, m, m_s\rangle$

- 1- Que peut on conclure dans ce cas à propos de la valeur des commutateurs $[H, L^2], [H, L_z]$ et $[H, S_z], [L^2, S_z], [L^2, L_z], [L_z, S_z]$,
- 2- Donner l'action de ces operateurs sur les états $|n, l, m, m_s\rangle$.
- 3- Les niveaux d'énergie de l'atome d'hydrogène sont donnés par $E_n = -\frac{Ry}{n^2}$ on se place dans le cas $n=3$. Préciser les valeurs des nombre quantique l et m puis en déduire les états propres $|n, l, m, m_s\rangle$ et leur degré de dégénérescence.

Exercice 10

Pour l'atome d'hydrogène $\{H, L^2, L_z, S_z\}$ forment un ECOC leurs états propres sont notés $|n, l, m, m_s\rangle$, les niveaux d'énergie de l'atome d'hydrogène sont donnés par $E_n = -\frac{Ry}{n^2}$

- 1- Ecrire les équations aux valeurs propres de cette ECOC puis en déduire l'expression générale des éléments de matrices $\langle s, m', m', l', n | A | n, l, m, m_s\rangle$ où $A = \{H, L^2, L_z, S_z\}$.
- 2- Pour n donné préciser les valeurs des nombre quantique l, m et m_s et le degré de dégénérescence des états $|n, l, m, m_s\rangle$
- 3- Si le système est dans l'état $|\psi\rangle = |3, 0, 0, 1/2\rangle - 2|3, 1, 1, 1/2\rangle + i|2, 1, -1, 1/2\rangle$ quelles valeurs obtient-on lors d'une mesure de l'énergie L^2 et L_z et avec quelles probabilités.

Exercice 11

Les niveaux d'énergie de l'atome d'hydrogène sont donnés par $E_n = -\frac{Ry}{n^2}$ on se place dans le cas $n=3$.

- 1- Préciser les valeurs des nombre quantique l et m puis en déduire les états propres $|n, l, m\rangle$ et leur degré de dégénérescence.
- 2- Ecrire par rapport aux vecteurs $|3, 2, m\rangle$ les matrice représentant H, L^2, L_z .
- 3- Si le système est dans l'état $|\psi\rangle = |3, 0, 0\rangle - 2|3, 1, 1\rangle + i|3, 2, 0\rangle + |3, 1, -1\rangle$ quelles valeurs obtient-on lors d'une mesure de l'énergie L^2 et L_z et avec quelles probabilités.
- 4- On plonge l'atome dans un champ magnétique parallèle à oz on suppose l'énergie d'interaction est $H_{int} = -g\vec{B} \cdot \vec{L}$. Calculer les nouvelles expressions de l'énergie. Est ce qu'il y'a une levée de dégénérescence total ou partielle ?

Exercice 12

A partir de l'expression générale de la fonction d'onde de l'atome d'hydrogène montrer que la fonction d'onde associée à l'état fondamental est :

$$\psi(r, \theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}}$$

Avec a_0 étant le rayon de Bohr

- 1- Quelle est la valeur la plus probable entre l'électron et le proton dans cet état ?
- 2- Calculer la valeur moyenne de cette distance.

On donne $\int_0^{+\infty} x^n e^{-ax} dx = \frac{n!}{a^{n+1}}, a > 0$

Exercice 13

L'électron de l'atome d'hydrogène se trouve dans l'état :

$$\psi_{21,-1}(r, \theta, \varphi) = N r e^{-\frac{r}{2a_0}} Y_1^{-1}(\theta, \varphi)$$

- 1- Calculer N. Donner l'expression de $Y_1^{-1}(\theta, \varphi)$
- 2- Calculer la probabilité par unité de volume pour $r = a_0, \theta = 30^\circ$ et $\varphi = 45^\circ$
- 3- Si une mesure est effectuée sur l'énergie E, L^2 et L_z quelles valeurs obtient-on ? Pourquoi ?

Exercice 14

La fonction d'onde d'un électron dans un atome d'hydrogène est .

$$\psi_{21m_s}(r, \theta, \varphi) = R_{21}(r) \left[\frac{1}{\sqrt{3}} Y_1^0(\theta, \varphi) \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} Y_1^1(\theta, \varphi) \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \right]$$

$\left| \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2} \right\rangle$ sont les vecteurs propres de S^2 et S_z .

- 1- Quelles sont les valeurs possibles de J_z ?
- 2- Si on mesure la composante S_z quelles valeurs on obtient et avec quelle probabilité ?
- 3- Si on mesure J^2 quelles valeurs on obtient et avec quelle probabilité ?

Chapitre 5
Théorie des Perturbations
(Méthodes d'Approximations)

Chapitre 5 *Théorie des Perturbations – Méthodes d'Approximation*

5.1 Introduction

Souvent il est difficile de résoudre l'équation de Schrödinger et il est rare d'obtenir l'expression exacte analytique des solutions, on fait donc recours aux méthodes d'approximation (des perturbations) surtout quand l'expression du potentiel se complique.

5.2 Phénomènes indépendants du temps perturbations stationnaire

Soit H_0 l'hamiltonien du système non perturbé qui vérifie l'équation aux valeurs propres :

$$H_0 |\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |\psi_n^{(0)}\rangle$$

$E_n^{(0)}$; $|\psi_n^{(0)}\rangle$ sont les énergies et les états propres non perturbés.

Maintenant si on ajoute à l'hamiltonien une perturbation décrite par un potentiel V_p l'hamiltonien total du système devient

$$H = H_0 + V_p$$

V_p peut décrire par exemple l'interaction d'un atome avec un champ électrique ou magnétique faibles indépendants du temps.

V_p est indépendant du temps donc H est aussi indépendant du temps et vérifie par conséquent aussi l'équation de Schrödinger aux valeurs propres :

$$H |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle$$

Mais maintenant E_n ; $|\psi_n\rangle$ sont les énergies et les états propres perturbés.

le but est de trouver comment varient $E_n^{(0)}$; $|\psi_n^{(0)}\rangle$ quand on ajoute la perturbation V_p

$$E_n^{(0)} \rightarrow E_n$$

$$|\psi_n^{(0)}\rangle \rightarrow |\psi_n\rangle$$

C'est-à-dire calculer E_n ; $|\psi_n\rangle$ connaissant $E_n^{(0)}$; $|\psi_n^{(0)}\rangle$ et la perturbation V_p . Pour atteindre ce but par la méthode des perturbations (méthodes d'approximation) il faut que la perturbation ne soit pas très forte $V_p \ll H_0$ c.a.d les éléments de matrice de $V_p \ll$ (par rapport à celle de H_0 dans ces conditions on aura $\Delta E \ll |E_{n+1}^{(0)} - E_n^{(0)}|$ et par conséquent E_n et $|\psi_n\rangle$ ne seront pas trop différents de $E_n^{(0)}$ et $|\psi_n^{(0)}\rangle$. Dans ce cas la méthode des perturbations stationnaires permet en principe de calculer E_n et $|\psi_n\rangle$ avec toute la précision nécessaire en utilisant le développement de Taylor en fonction d'une quantité λ reliée à l'intensité relative de V_p par rapport à H_0 . On exprime le potentiel décrivant la perturbation en fonction de cette quantité $V_p = \lambda W$:

$$H(\lambda) = H_0 + \lambda W$$

$$E_n(\lambda) = E_n^{(0)} + \Delta E = \varepsilon_n^{(0)} + \lambda \varepsilon_n^{(1)} + \lambda^2 \varepsilon_n^{(2)} + \dots + \lambda^p \varepsilon_n^{(p)} + \dots = \sum_{p=0}^{\infty} \lambda^p \varepsilon_n^{(p)}$$

$$E_n = E_n^{(0)} + \Delta E = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} + E_n^{(3)} + \dots = \sum_{p=0}^{\infty} E_n^{(p)}$$

$$|\psi_n(\lambda)\rangle = |\varphi_n^{(0)}\rangle + \lambda |\varphi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\varphi_n^{(2)}\rangle + \dots = \sum_{p=0}^{\infty} \lambda^p |\varphi_n^{(p)}\rangle$$

$$|\psi_n\rangle = |\psi_n^{(0)}\rangle + |\psi_n^{(1)}\rangle + |\psi_n^{(2)}\rangle + \dots = \sum_{p=0}^{\infty} |\psi_n^{(p)}\rangle$$

$$|\psi_n(\lambda)\rangle = \sum_i a_i |\psi_i^{(0)}\rangle = \sum_i (a_i^{(0)} + a_i^{(1)} + \dots) |\psi_i^{(0)}\rangle$$

Plus on a de termes plus la précision est grande. E_n et $|\psi_n\rangle$ satisfont à l'équation de Schrödinger :

$$H(\lambda)|\psi_n(\lambda)\rangle = E_n|\psi_n(\lambda)\rangle$$

On remplace $|\psi_n\rangle$ et E_n par leur développement on obtient :

$$(H_0 + V_p) \left(\sum_{p=0}^{\infty} |\psi_n^{(p)}\rangle \right) = \left(\sum_{p=0}^{\infty} E_n^{(p)} \right) \left(\sum_{p=0}^{\infty} |\psi_n^{(p)}\rangle \right)$$

$$(H_0 + V_p)(|\psi_n^{(0)}\rangle + |\psi_n^{(1)}\rangle + |\psi_n^{(2)}\rangle + \dots) = (E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} + \dots)(|\psi_n^{(0)}\rangle + |\psi_n^{(1)}\rangle + |\psi_n^{(2)}\rangle + \dots)$$

$$(H_0 + \lambda W) \left(\sum_{p=0}^{\infty} \lambda^p |\varphi_n^{(p)}\rangle \right) = \left(\sum_{p=0}^{\infty} \lambda^p \varepsilon_p \right) \left(\sum_{p=0}^{\infty} \lambda^p |\varphi_n^{(p)}\rangle \right)$$

En égalant les coefficients des puissances successives de λ dans les deux membres on obtient l'ensemble des équations suivantes dites les équations de perturbation :

- Ordre 0 : (λ^0)

$$H_0 |\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |\psi_n^{(0)}\rangle \quad \dots (I)$$

- Ordre 1 : (λ^1)

$$H_0 |\psi_n^{(1)}\rangle + V_p |\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)} |\psi_n^{(0)}\rangle \quad \dots (II)$$

- Ordre 2 : (λ^2)

$$H_0 |\psi_n^{(2)}\rangle + V_p |\psi_n^{(1)}\rangle = E_n^{(0)} |\psi_n^{(2)}\rangle + E_n^{(1)} |\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(2)} |\psi_n^{(0)}\rangle \quad \dots (III)$$

...

On se limitera en fait aux trois premières équations c'est-à-dire qu'on négligera dans le développement de $|\psi_n\rangle$ et E_n les termes d'ordre supérieur à 2.

Puisqu' on est dans les conditions que $|\psi_n\rangle$ ne soient pas trop différents $|\psi_n^{(0)}\rangle$

$$|\psi_n\rangle \sim |\psi_n^{(0)}\rangle$$

$$\langle \psi_n | \psi_n \rangle \sim \langle \psi_n^{(0)} | \psi_n \rangle = \langle \psi_n^{(0)} | \psi_n^{(0)} \rangle = 1$$

Cette condition étant valable quel que soit le paramètre λ , il vient :

$$\langle \psi_n^{(0)} | \psi_n^{(1)} \rangle = \langle \psi_n^{(0)} | \psi_n^{(2)} \rangle = \dots = \langle \psi_n^{(0)} | \psi_n^{(p)} \rangle = 0$$

5.2.1 Perturbation d'un niveau non dégénéré

Lorsque la valeur propre $E_n^{(0)}$ est non dégénérée il lui correspond un seul vecteur propre $|\psi_n^{(0)}\rangle$ c'est-à-dire qu'on :

$$H_0 |\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |\psi_n^{(0)}\rangle$$

Mais les autres valeurs propres $E_{m \neq n}$ peuvent être dégénérées.

Avant l'établissement de la perturbation, c'est à dire à l'ordre 0 dans les développements, on aura donc :

$$E_n = E_n^{(0)}$$

$$|\psi_n\rangle = |\psi_n^{(0)}\rangle$$

5.2.1.1 Correction à l'énergie à l'ordre (1)

La projection des équations de perturbation (0) et (I) sur l'état $|\psi_n^{(0)}\rangle$ (multiplication à gauche par le bras $\langle \psi_n^{(0)} |$) donne :

$$E_n^{(0)} = \langle \psi_n^{(0)} | H_0 | \psi_n^{(0)} \rangle \quad \dots \text{Ordre } 0$$

A l'ordre 1

$$E_n^{(1)} = \langle \psi_n^{(0)} | V_p | \psi_n^{(0)} \rangle$$

5.2.1.2 La correction au vecteur d'état à l'ordre 1

$$|\psi_n\rangle = |\psi_n^{(0)}\rangle + |\psi_n^{(1)}\rangle = |\psi_n^{(0)}\rangle + \sum_{i \neq n} a_i^{(1)} |\psi_i^{(0)}\rangle$$

D'où :

$$|\psi_n^{(1)}\rangle = \sum_{i \neq n} a_i^{(1)} |\psi_i^{(0)}\rangle$$

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

On doit calculer $|\psi_n^{(1)}\rangle$ et par conséquent $a_i^{(1)}$ pour cela on multiplie l'équation (I) par le bras $\langle\psi_i^{(0)}|$ on aura

$$a_i^{(1)} = \frac{\langle\psi_i^{(0)}|V_p|\psi_n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)} - E_i^{(0)}} = \frac{V_{in}}{E_n^{(0)} - E_i^{(0)}}$$

$$|\psi_n\rangle = |\psi_n^{(0)}\rangle + \sum_{i \neq n} \frac{V_{in}}{E_n^{(0)} - E_i^{(0)}} |\psi_i^{(0)}\rangle$$

5.2.1.3 Correction à l'énergie à l'ordre (2)

(Multiplication à gauche l'équation II par le bras $\langle\psi_n^{(0)}|$) on aura :

$$E_n^{(2)} = \langle\psi_n^{(0)}|V_p|\psi_n^{(1)}\rangle$$

Pour calculer $E_n^{(2)}$ on remplace $|\psi_n^{(1)}\rangle$ par son expression on aura :

$$E_n^{(2)} = \sum_{i \neq n} \frac{|V_{in}|^2}{E_n^{(0)} - E_i^{(0)}}$$

5.2.2 Spectre discret dégénéré

Le niveau d'énergie $E_n^{(0)}$ dans ce cas est g_n fois dégénéré (g_n degré de dégénérescence). Soit \mathcal{E}_n le sous espace associé à $E_n^{(0)}$ de dimension g_n $|\psi_{n,\alpha}^{(0)}\rangle$ $\alpha = 1 \dots g_n$ une base de \mathcal{E}_n

$$H_0|\psi_{n,\alpha}^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|\psi_{n,\alpha}^{(0)}\rangle$$

Maintenant si on ajoute une perturbation V_p

$$H = H_0 + V_p$$

L'équation de Schrödinger pour le niveau perturbé E_n

$$H|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle$$

Le vecteur perturbé se décompose suivant la base

$$|\psi_n\rangle = \sum_i \sum_{\alpha=1}^{g_i} a_{i\alpha} |\psi_{i\alpha}^{(0)}\rangle$$

$$[H_0 + V_p] \sum_i \sum_{\alpha=1}^{g_i} a_{i\alpha} |\psi_{i\alpha}^{(0)}\rangle = E_n \sum_i \sum_{\alpha=1}^{g_i} a_{i\alpha} |\psi_{i\alpha}^{(0)}\rangle$$

$$\sum_i \sum_{\alpha=1}^{g_i} a_{i\alpha} [H_0 + V_p] |\psi_{i\alpha}^{(0)}\rangle = \sum_i \sum_{\alpha=1}^{g_i} E_n a_{i\alpha} |\psi_{i\alpha}^{(0)}\rangle$$

$$\sum_i \sum_{\alpha=1}^{g_i} a_{i\alpha} [E_i^{(0)} + H_p] |\psi_{i\alpha}^{(0)}\rangle = \sum_i \sum_{\alpha=1}^{g_i} E_n a_{i\alpha} |\psi_{i\alpha}^{(0)}\rangle$$

On multiplie à gauche par le bras $\langle \psi_{n\beta}^{(0)} |$

$$\sum_i \sum_{\alpha=1}^{g_i} a_{i\alpha} E_i^{(0)} \langle \psi_{n\beta}^{(0)} | \psi_{i\alpha}^{(0)} \rangle + a_{i\alpha} \langle \psi_{n\beta}^{(0)} | H_p | \psi_{i\alpha}^{(0)} \rangle = \sum_i \sum_{\alpha=1}^{g_i} E_n a_{i\alpha} \langle \psi_{n\beta}^{(0)} | \psi_{i\alpha}^{(0)} \rangle$$

$$\sum_i \sum_{\alpha=1}^{g_i} a_{i\alpha} (E_i^{(0)} \delta_{n\beta} \delta_{i\alpha} + (H_p)_{n\beta i\alpha}) = \sum_i \sum_{\alpha=1}^{g_i} E_n a_{i\alpha} \delta_{n\beta} \delta_{i\alpha}$$

$$\sum_i \sum_{\alpha=1}^{g_i} a_{i\alpha} ((E_i^{(0)} - E_n) \delta_{n\beta} \delta_{i\alpha}) + \sum_i \sum_{\alpha=1}^{g_i} a_{i\alpha} - (H_p)_{n\beta i\alpha} = 0$$

Si $\lambda = 0 \Rightarrow |\psi_n\rangle = \sum_{\alpha=1}^{g_n} a_{n\alpha}^{(0)} |\psi_{n\alpha}^{(0)}\rangle$

Donc $a_{i\alpha}^{(0)} = 0$ si $i \neq n$

$$\sum_{\alpha=1}^{g_n} \left((H_p)_{n\beta n\alpha} - E_n^{(1)} \delta_{\alpha\beta} \right) a_{n\alpha} = 0 \quad ; \quad \beta = 1 \dots g_n$$

C'est un système d'équation linéaire homogène qui n'a de solution que si

$$\det(H_p - E_n^{(1)} I) = 0$$

Avec $E_n^{(1)} = E_n - E_n^{(0)}$

Donc les $E_n^{(1)}$ sont les valeurs propres de la matrice (H_p) et se calcul par l'équation séculaire précédente.

5.3 Perturbations dépendantes du temps (non stationnaire)

Les méthodes d'approximation sont aussi utilisées pour l'étude des perturbations dépendantes du temps par exemple interaction de radiation électromagnétique avec les atomes et les molécules induisant des transitions quantiques :

On considère le cas où $H = H_0 + V_p(t)$

H_0 est indépendant du temps, on connaît son spectre d'énergie et leurs vecteurs propres correspondants. le but est de connaître l'évolution du système à partir d'un état initial $|\psi_i\rangle$

Dans ce cas on peut avoir des transitions entre les différents états $|\psi_i\rangle \rightarrow |\psi_f\rangle$ il est important d'évaluer la probabilité de cette transition.

La résolution consiste à donner une solution approchée de ce problème en considérant $V_p(t)$ comme une perturbation ($V_p(t) \ll H_0$)

$$H|\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt}$$

$$H_0|\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle$$

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n a_n |\psi_n^{(0)}\rangle$$

$$|\psi_n^{(0)}(t)\rangle = U(t,0)|\psi_n^{(0)}(0)\rangle = e^{\frac{-iE_n t}{\hbar}}|\psi_n^{(0)}(0)\rangle$$

$$P_{i \rightarrow f} = |a_f(t)|^2 = \langle \psi_f | \psi(t) \rangle$$

$$[H_0 + V_p(t)] \sum_n a_n |\psi_n^{(0)}\rangle = i\hbar \frac{d}{dt} \left(\sum_n a_n |\psi_n^{(0)}\rangle \right)$$

$$\sum_n a_n(t) [H_0 |\psi_n^{(0)}(t)\rangle + V_p(t) |\psi_n^{(0)}(t)\rangle] = i\hbar \sum_n a_n(t) \frac{d|\psi_n^{(0)}(t)\rangle}{dt} + \frac{da_n(t)}{dt} |\psi_n^{(0)}(t)\rangle$$

En utilisant l'équation de Schrödinger :

$$H_0 |\psi_n^{(0)}\rangle = i\hbar \frac{d|\psi_n^{(0)}(t)\rangle}{dt}$$

L'expression se simplifie :

$$\sum_n a_n(t) V_p(t) |\psi_n^{(0)}(t)\rangle = i\hbar \sum_n \frac{da_n(t)}{dt} |\psi_n^{(0)}(t)\rangle$$

En multipliant par le bras $\langle \psi_f(t) |$ on aura

$$\sum_n a_n(t) e^{\frac{-i(E_f - E_n)t}{\hbar}} V_{fn}(t) = i\hbar \sum_n \frac{da_n(t)}{dt} \delta_{nf}$$

D'où :

$$\frac{da_f(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \sum_n a_n(t) e^{\frac{-i(E_f - E_n)t}{\hbar}} V_{fn}(t)$$

$$a_f(t) = a_f^{(0)} + a_f^{(1)} + a_f^{(2)} + \dots$$

$$\frac{da_f^{(1)}(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \sum_n a_n^{(0)}(t) e^{\frac{-i(E_f - E_n)t}{\hbar}} V_{fn}(t) = \frac{1}{i\hbar} V_{fi}(t) e^{i\omega_{fi}(t)}$$

Où on a utilisé le fait que $a_n^{(0)}(t) = \delta_{ni}$ et la relation de Planck Einstein $E = \hbar\omega$ on aura

$$a_f^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t V_{fi}(t') e^{i\omega_{fi}(t')} dt'$$

$$P_{i \rightarrow f} = |\mathbf{a}_{f(t)}|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t V_{fi}(t') e^{i\omega_{fi}(t')} dt' \right|^2$$

$$V_{fi}(t') = \langle \psi_f^{(0)} | V_p(t') | \psi_i^{(0)} \rangle$$

Exercices du Chapitre 5

Exercice 1

Une particule chargée de charge q et de masse m dans un potentiel harmonique est soumise à un champ électrique faible parallèle à l'axe Ox .

- 1- Calculez au premier et second ordre les corrections aux énergies
- 2- Calculer et à leurs vecteurs propres correspondants.

Exercice 2

Une particule est plongée dans un puits de profondeur infinie et de largeur $2L$. On ajoute 2 types de perturbations :

- 1- $H_{int}(x) = \lambda V_0 \sin\left(\frac{\pi x}{2L}\right)$, $\lambda \ll 1$
- 2- $H_{int}(x) = \lambda V_0 \delta(x - L)$, $\lambda \ll 1$
Calculez au premier ordre la correction à l'énergie.

Exercice 3

Un système ayant un hamiltonien $H_0 = E_0 \begin{pmatrix} 15 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}$ est soumis à une perturbation

$$H_{int} = \frac{E_0}{100} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

- 1- Quelles sont les valeurs propres de H_0 ? Sont-elles dégénérées ?
- 2- Calculez à l'ordre 1 les énergies correspondantes à H .
- 3- Faire une comparaison avec les valeurs exactes.

Exercice 4

Calculer la correction à l'ordre 1 la correction à l'énergie de l'état fondamental et le premier état excité de l'atome d'hydrogène s'il est soumis :

- 1- A un champ magnétique faible constant suivant OZ
- 2- A un champ électrique faible constant suivant OZ

Exercice 5

Soit une particule dont l'hamiltonien est donné par $H = H_0 + \lambda (a^2 + a^{+2})$ avec $\lambda \ll 1$ où H_0 est l'hamiltonien d'un oscillateur harmonique à une dimension. En traitant le terme

$H_0 = \lambda (a^2 + a^{+2})$ comme une perturbation calculer au premier ordre l'énergie et le vecteur propre associé au système perturbé.

Exercice 6

Un système ayant un hamiltonien $H_0 = \begin{pmatrix} 5 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 5 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 8 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -8 \end{pmatrix}$ est soumis à une perturbation

$$H_1 = \lambda \begin{pmatrix} 0 & 3 & 0 & 0 \\ 3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

- 1- Quelles sont les valeurs possibles des énergies associées aux états non perturbés ? Quelles sont les valeurs dégénérées et celles non dégénérées ?
- 2- Calculez à l'ordre 1 les énergies correspondantes à H.

Exercice 7

L'hamiltonien total H d'un système physique est donné par $\begin{pmatrix} E_1^0 & 0 & a \\ 0 & E_1^0 & b \\ a^* & b^* & E_2^0 \end{pmatrix}$

$E_1^0 > E_2^0$ sont les valeurs propres de H_0 et les grandeurs a et b sont considérées comme une perturbation tel que a et $b \ll E_1^0 - E_2^0$

- 1- Ecrire l'hamiltonien H sous la forme $H = H_0 + H_p$
- 2- Utiliser la théorie des perturbations pour calculer les différents niveaux d'énergie au premier ordre. Comparer aux valeurs exactes.

Exercice 8

Soit une particule dont l'hamiltonien est donné par $H = H_0 + \lambda X^2$ avec $\lambda \ll 1$ où H_0 est l'hamiltonien d'un oscillateur harmonique à une dimension. En traitant le terme $H_p = \lambda X^2$ comme une perturbation :

- 1- Calculer au premier ordre l'énergie E_m du niveau m ainsi que le vecteur propre associé avec $X = (a + a^+)$

Exercice 9

Soit une particule dont l'hamiltonien est donné par $H = H_0 + \lambda aa^+$ avec $\lambda \ll 1$ où H_0 est l'hamiltonien d'un oscillateur harmonique à une dimension. En traitant le terme $V_p = \lambda aa^+$ comme une perturbation :

- 1- Calculer au premier ordre l'énergie E_n du niveau n ainsi que le vecteur propre associé.

Exercice 10

Soit une particule dont l'hamiltonien est donné par $H = H_0 + \lambda (a^2 + a^{+2})$ avec $\lambda \ll 1$ où H_0 est l'hamiltonien d'un oscillateur harmonique à une dimension. En traitant le terme $H_p = \lambda (a^2 + a^{+2})$ comme une perturbation :

- 1- Calculer au premier ordre l'énergie E_m du niveau m ainsi que le vecteur propre associé.

Exercice 11

L'hamiltonien H_0 d'un système physique est donné par $\begin{pmatrix} E_1^0 & 0 \\ 0 & E_2^0 \end{pmatrix}$, $E_1^0 > E_2^0$ sont les valeurs propres de H_0 . On le soumet à une perturbation stationnaire $V_p = \begin{pmatrix} 0 & a \\ a & 0 \end{pmatrix}$ tel que la grandeur réelle $a \ll E_1^0 - E_2^0$

- 1- Ecrire la matrice de l'hamiltonien total H après perturbation
- 2- Utiliser la théorie des perturbations pour calculer les différents niveaux d'énergie au premier ordre.

Exercice 12

Calculer au premier ordre des perturbations la correction à l'énergie de l'état fondamental Pour :

- 1- Un oscillateur harmonique à 1 dimension soumis à une perturbation $H_p = \lambda e^{-x^2}$.
- 2- Un oscillateur harmonique à 3 dimensions soumis à une perturbation $H_p = \lambda x^2 y^2 z^2$.

$\lambda \ll 1$. La fonction d'onde de l'état fondamental est $\psi_0(x) = B e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}$ où B est une constante de normalisation à déterminer.

A l'ordre 1 la correction à l'énergie est $E_n^{(1)} = \langle \psi_n^0 | H_p | \psi_n^0 \rangle$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^{2n} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \frac{1.3.5 \dots (2n-1)}{(2a)^n} \quad n \in \mathbb{N}$$

Exercice 13

L'hamiltonien H_0 d'un système physique possède 2 niveaux d'énergies $E_1^0 > E_2^0$ sont les valeurs propres de H_0 et les grandeurs a et b sont considérées comme une perturbation tel que $|a|$ et $|b| \ll E_1^0 - E_2^0$ a un seul vecteur propre $|\psi_1^0\rangle$ normalisé E_1^0 on a 2 $|\psi_{1,1}^0\rangle$ et $|\psi_{1,2}^0\rangle$ orthonormés. On soumet le système à une perturbation constante $V_p = V_0$

- 1- Ecrire l'hamiltonien H total
- 2- Calculer la matrice de V_p par rapport à 2 $|\psi_{1,1}^0\rangle$ et $|\psi_{1,2}^0\rangle$
- 3- Utiliser la théorie des perturbations pour calculer les différents niveaux d'énergie au premier ordre en fonction de $E_1^0 > E_2^0$ et V_0

A l'ordre 1 la correction à l'énergie est $E_n^{(1)} = \langle \psi_n^0 | H_p | \psi_n^0 \rangle$ Où E_n^0 et $|\psi_n^0\rangle$ sont l'énergie et son vecteur propre non perturbés non dégénérés.

Exercice 14

Une particule initialement ($t=0$) dans l'état fondamental dans un puits infini de largeur a , est soumise à une perturbation $W(t)$ pendant la durée $0 \leq t \leq +\infty$; $W(t) = \hat{x}^2 e^{-t/\tau}$.

Calculez à l'ordre 1 la probabilité de trouver la particule dans le premier état excité ($t \geq 0$).

Exercice 15

Initialement un atome d'hydrogène est dans son état fondamental ($t < 0$) à l'instant $t=0$ il est soumis à un champ électrique variable $\vec{E}(t) = \frac{E_0 \tau}{\tau^2 + t^2} \vec{k}$. (τ est un paramètre)

Calculer la probabilité pour que l'atome se trouve à l'instant $t=+\infty$ dans l'état $|2,1,0\rangle$

Exercice 16

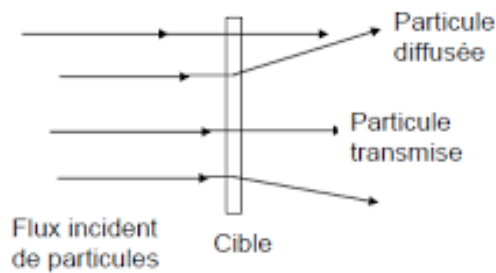
Donnez l'expression de la probabilité de transition d'un état initial $|i\rangle$ à un état final $|f\rangle$ dans le cas d'une perturbation harmonique $W(t) = \hat{v}e^{i\omega t} + \hat{v}^+e^{-i\omega t}$.

Chapitre 6
Théorie de la Diffusion

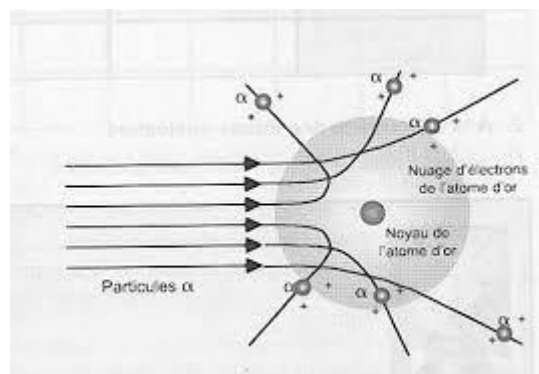
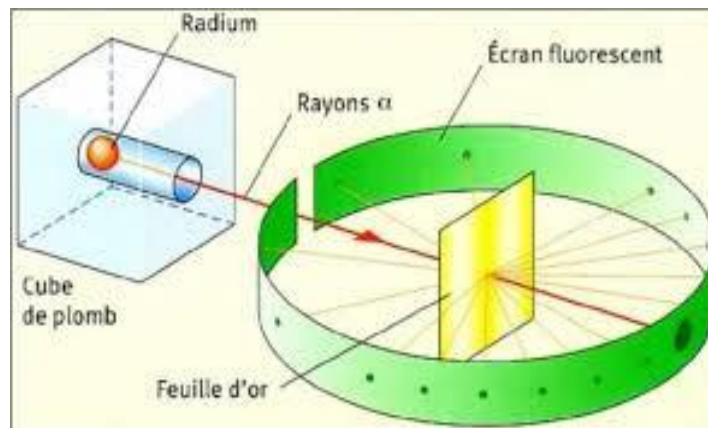
Chapitre 6 Théorie de la Diffusion

6.1 Introduction

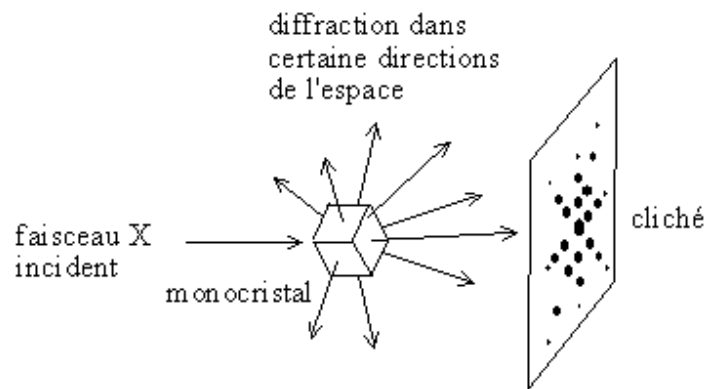
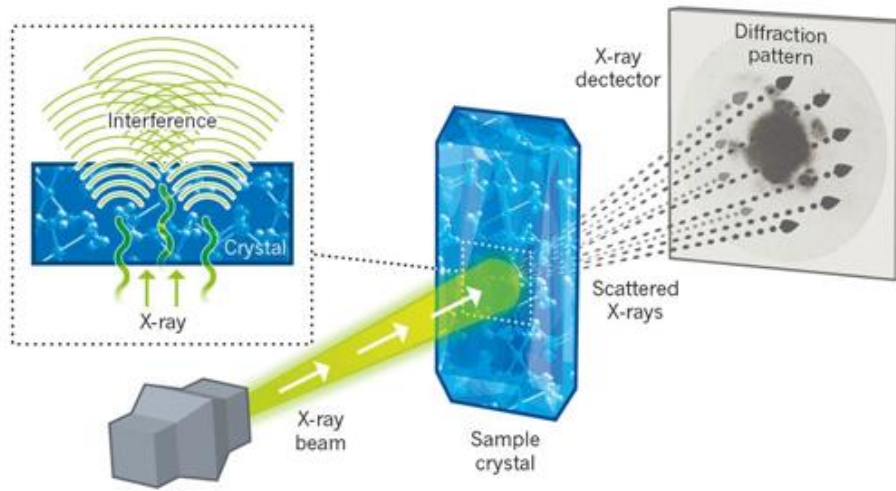
Une expérience de diffusion consiste à diriger un faisceau de particules sur une cible et d'étudier les collisions qui en résultent. C'est en analysant les caractéristiques du faisceau diffusé qu'on peut obtenir des informations sur la dynamique interne de la cible et sa structure. Le faisceau incident peut être des ondes électromagnétique (rayons gamma, x) ou des particules massifs comme les électrons ou neutrons.



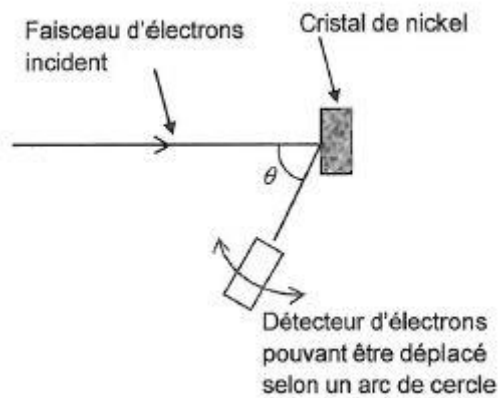
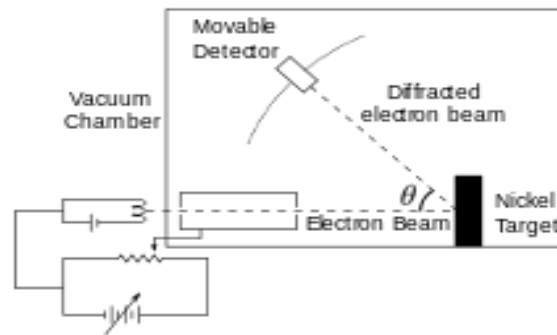
Les expériences de diffusion ont énormément contribué à l'avancement de la science et la physique en particulier : par exemple l'expérience de Rutherford diffraction de rayons X où l'expérience de Davidson et Germer (dualité onde corpuscule).



Expérience de Rutherford



Diffraction de rayons X



Expérience de Davidson et Germer

Pour une étude introductive on introduit certaines hypothèses simplificatrices :

- 1- On ignore le spin des particules
- 2- Les particules sont considérées sans structure et on ne considère que les collision élastiques.
- 3- Les diffuseurs sont supposés infiniment massifs ceci permet de remplacer chacun d'entre eux par le champs qu'il crée $v(r)$. on aura donc un problème à 2 corps et on peut se placer dans le système de centre de masse.
- 4- L'approche adoptée est basée sur la représentation des particules incidentes venant de l'infini par un paquet d'onde qui entre en interaction avec les diffuseurs induisant un faisceau diffusé détecté à l'infini. L'approche statique.

On se place dans le système de centre de masse des particules 1 (particule incidente) et particule 2 (centre diffuseur) dans ce cas le problème se ramène à l'étude de la diffusion d'une particule de masse μ (la masse réduite des deux particules) par un potentiel $V(r)$

6.2 Définition de la section efficace de diffusion

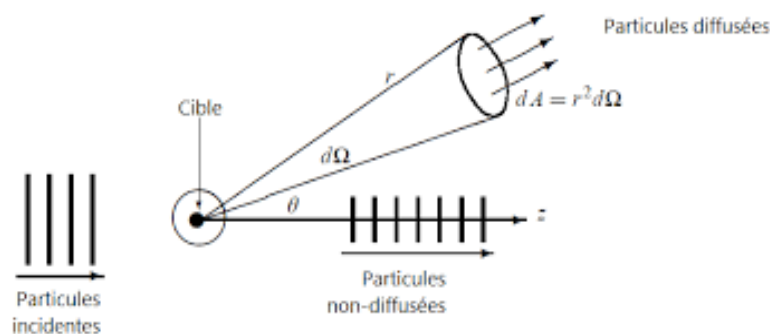
Oz est la direction le long de laquelle arrivent les particules incidentes de masse μ . $V(r)$ est localisé autour de l'origine O des coordonnées J_{inc} . On dispose loin de O d'un détecteur d'ouverture d'angle solide $d\Omega = \sin(\theta)d\theta d\varphi$ (ouverture vue de O) on compte le nombre dN de particules diffusées dans l'angle solide $d\Omega$ autour de θ et φ . dN est proportionnel à $d\Omega$ et au flux de particule incidentes J_{inc} .

$$dN = J_{inc} d\sigma$$

$d\sigma$ est homogène à une surface. Dans une expérience de diffusion une partie des particules incidentes est diffusées l'autre continue sans être perturbées. Les particules diffusées sont déviées leur nombre varie d'une direction à une autre. Le nombre de particule diffusé dans l'angle solide $d\Omega$ est proportionnel à la section efficace différentielle notée $\frac{d\sigma}{d\Omega}$, c'est le nombre de particule diffusé dans un angle solide $d\Omega$ dans la direction (θ, φ) par unité de temps et unité de flux :

$$\frac{dN}{d\Omega} = \frac{d\sigma}{d\Omega} J_{inc}$$

la section efficace totale est $\sigma = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega$



6.3 Etats stationnaire de diffusion, calcul de la section efficace

L'état à l'infini est un paquet d'onde, son évolution s'obtient par superposition d'état stationnaire qui sont solution de l'équation de Schrödinger $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ avec $E > 0$. On choisit parmi les solutions celles qui vérifient les conditions du problème étudié. Nous appellerons les états stationnaires de diffusion les états propres de H qui vérifient ces conditions intuitives.

6.4 Forme asymptotique des états stationnaires de diffusion

Pour $t < 0$ l'état est représenté par e^{ikz} la fonction est modifiée au voisinage de $v(r)$ mais pour $t > 0$ et $r \gg b$ le paquet présente une forme simple il est en une partie transmise suivant oz + un paquet d'onde diffusé $\psi = \psi_{inc} + \psi_{diff}$. La forme asymptotique de l'onde diffusée est simple. Par analogie avec l'optique ondulatoire on comprend que l'onde diffusée doit présenter pour r grand les caractéristiques suivantes :

$$\psi_{diff}(\vec{r}) = A \left(e^{ikz} + f(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r} \right)$$

Où $f(\theta, \varphi)$ est l'amplitude de diffusion

6.5 Amplitude de diffusion (particule sans spin)

$$H\psi(r) = E\psi(r) \quad V(r) = 0 \quad \text{si } r > b$$

$$(\Delta + k^2)\psi_{inc}(\vec{r}) = 0 \quad \psi_{inc}(\vec{r}) = A e^{i\vec{k}_{inc}\vec{r}}$$

Donc après la diffusion la fonction d'onde totale est

$$\psi = \psi_{inc} + \psi_{diff} = A \left(e^{ikz} + f(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r} \right)$$

$$\vec{J}_{inc} = \frac{i\hbar}{2\mu} (\psi_{inc} \vec{\nabla} \psi_{inc}^* - \psi_{inc}^* \vec{\nabla} \psi_{inc}) = \frac{A^2 \hbar k}{\mu}$$

$$\vec{J}_{diff} = \frac{i\hbar}{2\mu} (\psi_{diff} \vec{\nabla} \psi_{diff}^* - \psi_{diff}^* \vec{\nabla} \psi_{diff}) = \frac{A^2 \hbar k}{\mu r^2} |f(\theta, \varphi)|^2$$

En coordonnées sphériques : $\vec{\nabla} = \vec{u}_r \frac{\partial}{\partial r} + \vec{u}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \vec{u}_\varphi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi}$

$$dN = J_{diff} dS = J_{diff} r^2 d\Omega$$

$$\frac{dN}{d\Omega} = J_{diff} r^2 = \frac{A^2 \hbar k}{\mu} |f(\theta, \varphi)|^2$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta, \varphi)|^2$$

6.5.1 Détermination de l'amplitude de diffusion à partir des solutions de l'équation de Schrödinger

$$(\Delta + k^2)\psi(\vec{r}) = \frac{2\mu}{\hbar^2}V(\vec{r})\psi(\vec{r})$$

La solution générale $\psi_{Gener}(\vec{r}) = \psi_{hom}(\vec{r}) + \psi_{part}(\vec{r})$

$(\Delta + k^2)\psi_{hom}(\vec{r}) = 0$ d'où $\psi_{hom}(\vec{r}) = \psi_{inc}(\vec{r})$ on determine la solution particuliere en utilisant la méthode des fonctions de Green :

$$\psi_{part}(\vec{r}) = \frac{2\mu}{\hbar^2} \iiint G(\vec{r} - \vec{r}') V(\vec{r}') \psi(\vec{r}') d^3\vec{r}'$$

Où $G(\vec{r} - \vec{r}')$ sont les fonctions de Green qui sont solution de

$(\Delta + k^2)G(\vec{r} - \vec{r}') = \delta^3(\vec{r} - \vec{r}')$ pour calculer l'expression de la fonction de green on utilise la méthode de transformée de Fourier on a :

$$G(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \iiint \tilde{G}(\vec{q}) e^{i\vec{q}(\vec{r} - \vec{r}')} d^3\vec{q}$$

$$\delta^3(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \iiint e^{i\vec{q}(\vec{r} - \vec{r}')} d^3\vec{q}$$

$$\Delta e^{i\vec{q}(\vec{r} - \vec{r}')} = -q^2 e^{i\vec{q}(\vec{r} - \vec{r}')}$$

On remplaçant dans (1) on aura $(-q^2 + k^2)\tilde{G}(\vec{q}) = 1$ d'où

$$\tilde{G}(\vec{q}) = \frac{1}{k^2 - q^2}$$

$$G(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \iiint \frac{e^{i\vec{q}(\vec{r} - \vec{r}')}}{k^2 - q^2} d^3\vec{q}$$

$$G(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{q^2 dq}{k^2 - q^2} \int e^{i\vec{q}(\vec{r} - \vec{r}')} \sin(\theta) d\theta \int d\varphi$$

L'intégrale par rapport à φ donne 2π et pour integrer para raport à ϑ on a

$$\vec{q}(\vec{r} - \vec{r}') = q|\vec{r} - \vec{r}'| \cos(\vartheta)$$

$$\int_0^\pi e^{iq|\vec{r} - \vec{r}'| \cos(\vartheta)} \sin(\theta) d\theta$$

On fait le changement de variable $U = \cos(\vartheta) \Rightarrow dU = -\sin(\vartheta)$ on aura :

$$\int_0^\pi e^{iq|\vec{r} - \vec{r}'| \cos(\vartheta)} \sin(\theta) d\theta = \int_{-1}^1 e^{iq|\vec{r} - \vec{r}'| U} dU \quad (I)$$

$$(I) = \frac{1}{iq|\vec{r} - \vec{r}'|} (e^{iq|\vec{r} - \vec{r}'|} - e^{-iq|\vec{r} - \vec{r}'|})$$

$$G(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{1}{i(2\pi)^2 |\vec{r} - \vec{r}'|} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{q e^{iq|\vec{r} - \vec{r}'|} dq}{k^2 - q^2}$$

On a 2 poles $q = \pm k$ en integrant par la methode des residus on aura 2 solutions :

$$G_+(\vec{r} - \vec{r}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r} - \vec{r}'|}$$

$$G_-(\vec{r} - \vec{r}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{-ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r} - \vec{r}'|}$$

$G_+(\vec{r} - \vec{r}')$ représente une onde émise de \vec{r}'

$G_-(\vec{r} - \vec{r}')$ représente une onde émise vers \vec{r}'

C'est $G_+(\vec{r} - \vec{r}')$ qui est importante et qui a une relation avec l'onde diffusée

$$\psi(\vec{r}) = \psi_{inc}(\vec{r}) - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \iiint \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} V(\vec{r}') \psi(\vec{r}') d^3\vec{r}'$$

C'est une équation intégrale elle peut être résolue par la méthode itérative (série de Born) à l'ordre zéro $\psi_0(\vec{r}) = \psi_{inc}(\vec{r})$:

$$\psi(\vec{r}) = \psi_{inc}(\vec{r}) - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \iiint \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} V(\vec{r}') \psi_{inc}(\vec{r}') d^3\vec{r}'$$

La limite asymptotique de la fonction d'onde $r \gg r'$

$k|\vec{r} - \vec{r}'| \approx kr - \vec{k}\vec{r}' \frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \approx \frac{1}{r}$ on remplace dans l'expression de $\psi(\vec{r})$ on aura par identification

$$f(\theta, \varphi) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \iiint e^{-i\vec{k}\vec{r}'} V(\vec{r}') \psi(\vec{r}') d^3\vec{r}'$$

L'approximation de Born $\psi(\vec{r}') \approx \psi_{inc}(\vec{r}')$

Pour un potentiel central $V(\vec{r}') = V(r')$ on a une symétrie sphérique de telle sorte que l'amplitude dépend seulement de θ

$$f(\theta) = -\frac{2\mu}{\hbar^2 q} \int_0^{+\infty} r' V(r') \sin(qr') dr'$$

$$q = |\vec{k}_{inc} - \vec{k}_{diff}| = 2k \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)$$

6.5.2 Détermination de l'amplitude de diffusion par la méthode des déphasage (Analyse en onde partielle)

Pour un potentiel central on a une symétrie sphérique et l'hamiltonien \hat{H} ; commute avec toutes les composantes de moment cinétique \vec{L} :

$$[\hat{H}, \vec{L}] = 0; \quad [\hat{H}, L^2] = 0;$$

Donc \vec{L} est conservé si $\psi(r, \theta, \varphi)$ est une fonction propre de $\{\hat{H}, L^2, L_z\}$

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \varphi)$$

Forment une base dans l'espace des fonctions d'ondes, $Y_l^m(\theta, \varphi)$ sont les harmoniques spheriques et $R_{nl}(r)$ sont solution de l'equation radiale

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (rR_{nl}(r)) + \left[\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right] R_{nl}(r) = E_n R_{nl}(r)$$

On pose $u_{nl}(r) = rR_{nl}(r)$

L'equation devient :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u_{nl}(r)}{dr^2} + \left[\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right] u_{nl}(r) = E_n u_{nl}(r)$$

$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$ forme une base $\Rightarrow \forall \psi(r, \theta, \varphi)$ on a :

$$\psi(r, \theta, \varphi) = \sum_{lm} a_{lm} \psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$$

Pour une symetrie spherique :

$$\psi(r, \theta) = \sum_l a_l \psi_{nl}(r, \theta) = \sum_l a_l R_{nl}(r) P_l(\cos(\theta))$$

en particulier pour une particule libre :

$$e^{i\vec{k}\vec{r}} = \sum_l R_{nl}(r) P_l(\cos(\theta))$$

où $R_{nl}(r) = i^l (2l+1) j_l(kr)$

où $j_l(kr)$ sont les fonctions de Bessel

L'equation de Schrödinger radiale peut s'ecrire :

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) \right] (rR_{nl}(r)) = \frac{2m}{\hbar^2} V(r) (rR_{nl}(r))$$

Le comportement asymptotique de la fonction d'onde au voisinage de l'infini :

$$\psi(r, \theta) \sim \sum_0^{+\infty} i^l (2l+1) j_l(kr) e^{i\vec{k}\vec{r}} + f(\theta) \frac{e^{i\vec{k}\vec{r}}}{r}$$

$$\lim_{r \rightarrow \infty} j_l(kr) \rightarrow \frac{\sin(kr - l\frac{\pi}{2})}{kr} = \frac{e^{i(kr - l\frac{\pi}{2})} - e^{-i(kr - l\frac{\pi}{2})}}{2ikr} \quad \text{on a} \quad e^{\pm il\frac{\pi}{2}} = (\pm i)^l$$

$$\psi(\vec{r}) = \frac{e^{-ikr}}{2ikr} \sum_0^{+\infty} i^{2l} (2l+1) P_l(\cos(\theta)) + \left[f(\theta) + \frac{e^{-ikr}}{2ik} \sum_0^{+\infty} i^l (-i)^l (2l+1) P_l(\cos(\theta)) \right] \frac{e^{ikr}}{r}$$

Maintenant on détermine la forme asymptotique de $\psi(\vec{r})$ qui est solution de l'équation de Schrodinger spécialement la partie radiale $R_{kl}(r)$: pour $r \sim \infty$ l'équation radiale devient :

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

La solution générale s'écrit : $R_{kl}(r) = A_1 \frac{\sin(kr - l\frac{\pi}{2})}{kr} + B_1 \frac{\cos((kr - l\frac{\pi}{2}))}{kr}$

On pose $A_1 = C_1 \sin(\delta_l)$ et $B_1 = C_1 \cos(\delta_l)$ on aura

$$R_{kl}(r) = \frac{C_1}{kr} \left[\cos(\delta_l) \sin\left(kr - l\frac{\pi}{2}\right) + \sin(\delta_l) \cos\left(kr - l\frac{\pi}{2}\right) \right]$$

$$R_{kl}(r) = C_1 \frac{\sin\left(kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l\right)}{kr}$$

$$\psi(r, \theta) = \sum_l a_l R_{nl}(r) P_l(\cos(\theta))$$

$$\psi(r, \theta) = \sum_{lm} a_l \frac{\sin\left(kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l\right)}{kr} P_l(\cos(\theta))$$

$$\frac{\sin\left(kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l\right)}{kr} = \frac{(-i)^l e^{i(kr + \delta_l)} - (i)^l e^{-i(kr + \delta_l)}}{2ikr}$$

$$\psi(\vec{r}) = \frac{e^{-ikr}}{2ikr} \sum_0^{+\infty} a_l i^l e^{-i\delta_l} P_l(\cos(\theta)) + \left[\sum_0^{+\infty} a_l (-i)^l e^{i\delta_l} P_l(\cos(\theta)) \right] \frac{e^{ikr}}{2ikr}$$

Par identification on a $a_l = (2l + 1)(i)^l e^{i\delta_l}$ en remplaçant dans l'équation on déduit l'expression de l'amplitude de diffusion :

$$f(\theta) = \frac{1}{k} \sum_0^{+\infty} (2l + 1) \sin(\delta_l) P_l(\cos(\theta)) e^{i\delta_l}$$

Et la section efficace différentielle

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 =$$

$$\sum_{l=0}^{+\infty} \sum_{l'=0}^{+\infty} (2l + 1)(2l' + 1) \sin(\delta_l) \sin(\delta_{l'}) P_l(\cos(\theta)) P_{l'}(\cos(\theta)) e^{i(\delta_l - \delta_{l'})}$$

Pour le calcul de la section efficace différentielle totale $\sigma = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega$ et en utilisant la relation d'orthogonalité des polynômes de Legendre :

$$\int_0^\pi P_{l'}(\cos(\theta)) P_l(\cos(\theta)) \sin(\theta) d\theta = \frac{2}{2l + 1} \delta_{ll'}$$

$$\sigma = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{+\infty} (2l+1) \sin^2(\delta_l)$$

6.6 Théorème optique

La section efficace total σ est reliée à la partie imaginaire de l'amplitude pour $\theta = 0$ par

$$\frac{4\pi}{k} \text{Im}(f(\theta = 0)) = \sigma$$

Exercices du Chapitre 6

Exercice 1

Que devient l'expression de $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ pour un potentiel central $V(r)$ quelconque.

Pour quelles conditions le potentiel de Yukawa $V_0 \frac{e^{-r/R}}{r}$ se réduit au potentiel Coulombien. En déduire à partir de l'expression de la section efficace différentielle $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ obtenue pour le potentiel de Yukawa l'expression de la section efficace différentielle $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ pour le potentiel coulombien ainsi que les sections efficaces totales. Pour avoir une idée quantitative on considère la diffusion des particules alpha ($Z_1=2$ et $A_1=4$) par les noyaux d'Or ($Z_2=79$ et $A_2=197$) si $\theta_{CM}=61^\circ$ (θ centre de masse) et l'énergie des particules α $E=8$ MeV. On donne $\frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137}$, $\hbar c = 197.33$ MeV.fm

Exercice 2

Calculer dans l'approximation de Born la section efficace différentielle $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ de la diffusion élastique de particules de masse m par un potentiel $V(\vec{r}) = \delta(\vec{r})$

Exercice 3

Dans une expérience de diffusion le nombre de particule diffusé dans un angle solide $d\Omega$ dans la direction (θ, φ) par unité de temps et unité de flux :

$$\frac{dN}{d\Omega} = \frac{d\sigma}{d\Omega} J_{inc}$$

$$\text{tel que } \frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta, \varphi)|^2$$

$$f(\theta, \varphi) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \iiint e^{-i\vec{q}\vec{r}'} V(\vec{r}') d^3\vec{r}'$$

où $q = |\vec{k}_{inc} - \vec{k}_{dif}|$.

- 1- Définir les différents termes $\frac{d\sigma}{d\Omega}$, J_{inc} , $f(\theta, \varphi)$, $V(\vec{r}')$, \vec{k}_{inc} , \vec{k}_{dif}
- 2- Donner la relation de \vec{k}_{inc} , \vec{k}_{dif} aux énergies des particules. Que signifie physiquement la condition $|\vec{k}_{inc}| = |\vec{k}_{dif}|$

Exercice 4

Un flux de 10^{24} particule $cm^{-2}s^{-1}$ avec une énergie $E=200$ MeV entre en collision avec une cible fixe. Sachant que l'amplitude de diffusion est $f(\theta, \varphi) = \frac{\hbar c}{2E} (\sin(\theta) \cdot \sin(\varphi) + i \cos(\theta))$

- 1- Calculer l'expression de la section efficace différentielle $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ puis en déduire le nombre $N(\theta, \varphi)$ de particules diffusées par unité d'angle solide dans la direction $\Omega(\theta, \varphi)$.
- 2- Calculer la section efficace totale en barn et le nombre total de particules diffusées en utilisant le théorème optique

$$\hbar c = 197,33 \text{ MeV} \cdot \text{fm}, 1 \text{ barn} = 10^{-24} \text{ cm}^2 \quad 1 \text{ fm} = 10^{-15} \text{ m}$$

Exercice 5

L'expression générale de l'amplitude de diffusion est $f(\theta, \varphi) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\vec{k}_a \vec{r}} V(\vec{r}) \psi(\vec{r}) d^3\vec{r}$, que devient cette expression dans les conditions de validité de l'approximation de Born. Expliquer brièvement.

- 1- Montrer que pour une diffusion élastique et un potentiel central $f(\theta, \varphi)$ s'écrit dans l'approximation de Born

$$f(\theta, \varphi) = -\frac{2\mu}{q\hbar^2} \int_0^\infty r \sin(qr) V(r) dr \quad \text{où } q = |\vec{k}_{inc} - \vec{k}_{dif}|$$

- 2- Calculer dans l'approximation de Born la section efficace différentielle $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ de la diffusion élastique de particule de masse m par un potentiel $V(r) = -V_0$ si $r < a$ et $V(r) = 0$ si $r > a$.

Où V_0 et a sont des constantes positives.

Exercice 6

- 1- Expliquer brièvement les étapes de calcul de la section efficace différentielle par la méthode des fonctions de Green.
- 2- L'expression générale de l'amplitude de diffusion est

$$f(\theta, \varphi) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\vec{k}_a \vec{r}} V(\vec{r}) \psi(\vec{r}) d^3\vec{r}$$

- a) Montrer que cette expression dans les conditions de validité de l'approximation de Born devient-

$$f(\theta, \varphi) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} V(\vec{r}) d^3\vec{r} \quad \text{où } \vec{q} = \vec{k}_{inc} - \vec{k}_{dif}$$

Expliquer brièvement.

- b) Calculer dans l'approximation de Born la section efficace différentielle $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ de la diffusion élastique de particules de masse m par un potentiel :

$$V(\vec{r}) = V_0 \delta(\vec{r} - a\vec{k}) + V_0 \delta(\vec{r} + a\vec{k})$$

Exercice 7

L'expression générale de l'amplitude de diffusion est $f(\theta, \varphi) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\vec{k}_a \vec{r}} V(\vec{r}) \psi(\vec{r}) d^3\vec{r}$

Montrer que pour une diffusion élastique et un potentiel central $f(\theta, \varphi)$ s'écrit dans l'approximation de Born

$$f(\theta, \varphi) = -\frac{2\mu}{q\hbar^2} \int_0^\infty r \sin(qr) V(r) dr \text{ où } q = |\vec{k}_{inc} - \vec{k}_{dif}|$$

Calculer dans l'approximation de Born la section efficace différentielle $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ et totale σ de la diffusion élastique de particule de masse m par un potentiel

$$V(r) = -V_0 \text{ si } r < a \text{ et } V(r) = 0 \text{ si } r > a$$

Où V_0 et a sont des constantes positives.

Exercice 8

Pour une diffusion élastique et un potentiel central $f(\theta, \varphi)$ s'écrit dans l'approximation de Born

$$f(\theta) = -\frac{2\mu}{q\hbar^2} \int_0^\infty r \sin(qr) V(r) dr \text{ où } q = |\vec{k}_{inc} - \vec{k}_{dif}|$$

Calculer dans l'approximation de Born la section efficace différentielle $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ de la diffusion élastique de particule de masse m par un potentiel $V(r) = V_0 e^{-\frac{r}{a}}$

Où V_0 et a sont des constantes positives.

Exercice 9

- 1- Définir un potentiel central pourquoi dans ce cas $f(\theta, \varphi) = f(\theta)$?
- 2- Un flux de 10^{24} particule $\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$ avec une énergie $E=100 \text{ MeV}$
 - i. Quelle est le nombre de particule qui passe en 2 seconde une surface de 2 cm^2 ,
 - ii. Calculer $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ puis en deduire $N(\theta, \varphi)$ sachant que $f(\theta, \varphi) = \frac{\hbar c}{2E} (\cos(\theta) + i \sin(\theta))$
 - iii. Calculer la section efficace totale σ en barn et le nombre total de particules diffusées.

$$\hbar c = 197,33 \text{ MeV}, fm \quad 1 \text{ barn} = 10^{-24} \text{ cm}^2 \quad 1 fm = 10^{-15} m$$

Exercice 10

On considère la diffusion élastique de neutrons par les noyaux de la cible. La mesure des différents déphasages dans cette expérience donne

$$\delta_0 = 95 ; \delta_1 = 72 ; \delta_2 = 60 ; \delta_3 = 35 ; \delta_4 = 18 ; \delta_5 = 5 \text{ et } \delta_l = 0 \text{ pour } l > 5$$

Calculer la section efficace totale σ

Exercice 11

Calculer la section efficace σ de diffusion de protons par un potentiel sphérique $V(r) = \infty$ si $r < a$ et $v(r) = 0$ si $r > a$ pour les deux cas suivants :

- 1- Des protons d'énergies 5 Kev (basse énergie : $l = 0$)
- 2- Des protons d'énergies 700 MeV (haute énergie $l_{mac} = ka$)

On donne $a = 6 fm$ et $m_p c^2 = 938,27 \text{ MeV}$

Chapitre 7
Système de Particules Identiques

Chapitre 7 Système de Particules Identiques

7.1 Introduction

Plusieurs systèmes physiques sont constitués d'ensemble de particules d'atomes ou de molécules comme les gaz et les liquides etc. Le traitement quantique des systèmes de particule identique diffère du traitement classique.

7.2 Equation de Schrödinger pour un système à N particules

La description dynamique d'un système à N particules sans spin est assuré par la fonction d'onde $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2 \dots \vec{r}_N t)$ où $|\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2 \dots \vec{r}_N t)|^2 d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2 \dots d^3\vec{r}_N$ est la probabilité de trouver la particule 1 dans le volume infinitésimal $d^3\vec{r}_1$ la particule 2 dans $d^3\vec{r}_2 \dots$ et la particule N dans $d^3\vec{r}_N$

$$\int |\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2 \dots \vec{r}_N t)|^2 d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2 \dots d^3\vec{r}_N = 1$$

$$\hat{H}\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2 \dots \vec{r}_N t) = i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2 \dots \vec{r}_N t)}{\partial t}$$

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + \hat{V}(\vec{r}_1, \vec{r}_2 \dots \vec{r}_N t) = \sum_{i=1}^N \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta_i + \hat{V}(\vec{r}_1, \vec{r}_2 \dots \vec{r}_N t)$$

Pour un système stationnaire c.à.d. l'hamiltonien \hat{H} indépendant du temps (pour cela il suffit que $\frac{\partial}{\partial t} \hat{V}(\vec{r}_1, \vec{r}_2 \dots \vec{r}_N t) = 0$) dans ce cas la solution générale stationnaires est de la forme :

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2 \dots \vec{r}_N t) = \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2 \dots \vec{r}_N) e^{-i\frac{Et}{\hbar}}$$

$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2 \dots \vec{r}_N)$ est la solution de l'équation aux valeurs propres :

$$\hat{H}\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2 \dots \vec{r}_N) = E\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2 \dots \vec{r}_N)$$

$$\left[\sum_{i=1}^N \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta_i + \hat{V}(\vec{r}_1, \vec{r}_2 \dots \vec{r}_N) \right] \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2 \dots \vec{r}_N) = E\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2 \dots \vec{r}_N)$$

Pour N particules sans interaction mutuelles $\hat{H} = \sum_{i=1}^N H_i = \sum_{i=1}^N \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta_i + \hat{V}(\vec{r}_i)$ dans ce cas :

$$[\hat{H}_i, \hat{H}_j] = 0$$

$$E = \sum_{i=1}^N E_i \quad \text{et} \quad \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2 \dots \vec{r}_N) = \prod_{i=1}^N \psi_i(\vec{r}_i) = \psi_1(\vec{r}_1, t) \psi_2(\vec{r}_2, t) \dots \psi_N(\vec{r}_N, t)$$

Exemple : Atome à plusieurs électrons

H = énergie cinétique du proton + énergie cinétique des électrons + énergie d'interaction électron-électron + énergie d'interaction électron-proton

$$\hat{H} = \frac{p^2}{2M_p} + \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + \hat{V}_{ee} + \hat{V}_{ep} = \frac{-\hbar^2}{2M_p} + \sum_{i=1}^N \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta_i + \sum_{i>j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} - \sum_{i=1}^N \frac{Ze^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}|}$$

- $\frac{p^2}{2M_p}$: énergie cinétique du proton
- $\sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m}$ énergie cinétique des électrons
- $\hat{V}_{ee} = \sum_{i>j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}$ énergie d'interaction électron –électron
- $\hat{V}_{ep} = - \sum_{i=1}^N \frac{Ze^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}|}$ énergie d'interaction électron-proton
- \vec{R} , \vec{r}_i sont est le vecteur position du proton et des Z électrons respectivement

Exercice :

Quel est l'hamiltonien total l'énergie total ainsi que la fonction d'onde totale du système de 2 particules de masse m_1 et m_2 dans les cas suivants :

- 1- 2 Particules libres
- 2- 2 Particules confinée dans un puits infinie à 1 dimension

7.3 Système de particules identiques

Deux particules sont identiques si elles possèdent les mêmes propriétés masse, charge spin ect.. par exemple un ensemble d'électron ou de proton. Pas de problème en mécanique classique, leurs trajectoire $\vec{r}_1(t)$ et $\vec{r}_2(t)$ permettent de les distinguer. En mécanique quantique il y'a un problème : la notion de trajectoire est absente donc on ne peut pas distinguer les particules, on ne peut calculer que la probabilité de trouver la particule dans un certain endroit.

Un système de particule identiques ne change pas après la permutation des deux particules i et j car elles sont identiques donc la densité de probabilité est le même avant et après la permutation :

$$|\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_N t)|^2 = |\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_N t)|^2 \quad \dots (*)$$

$$(*) \Rightarrow \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_N t) = \pm \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_N t) \quad \dots (**)$$

- +Pour les bosons (particules de spin entier par exemple comme le photon son spin $s=1$)
- –Pour les fermions (particules de spin demi-entier par exemple comme l'électron son spin $= s=1/2$)

Les bosons obéissent à la statistique de Bose-Einstein alors que les fermions obéissent à la statistique de Fermi-Dirac

Les différentes grandeurs physiques (H, \vec{L} et $\vec{S} \dots$) d'un système de particule identiques sont invariantes lors d'une permutation de deux particules donc on a une dégénérescence d'échange.

7.3.1 Le postulat de symétrisation

On introduit l'opérateur transposition \hat{P}_{ij} qui permute les deux particules i et j tel que son action pour un système de particules identiques :

$$\hat{P}_{ij}|\psi\rangle = \varepsilon|\psi\rangle \quad \text{où } \varepsilon = \pm 1$$

$$\hat{P}_{ij} \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_N t) = \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_N t)$$

D'après (**)

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_N t) = \pm \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_N t)$$

D'où

$$\hat{P}_{ij} \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_N t) = \pm \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_N t)$$

Par exemple :

$$\hat{P}_{12} \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_N t) = \psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_N t)$$

Donc

$$\psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_N t) = \pm \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_N t)$$

D'où

$$\hat{P}_{12} \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_N t) = \pm \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_N t)$$

7.3.1.1 Enoncé du postulat

« L'état d'un système de N particules identiques est soit totalement symétrique ($\varepsilon = +1$) soit anti-symétrique ($\varepsilon = -1$). Pour un système de bosons identiques la fonction d'onde totale doit être symétrique alors que pour un système de fermion identique la fonction d'onde totale doit être antisymétrique. »

Les états avec une symétrie mixte n'existent pas. Pour des systèmes composites comme les atomes où particule composite (proton neutron etc.) c'est la valeur du spin total S_T qui détermine le caractère bosonique ou fermionique du système et par conséquent leur statistique.

Ceci est confirmé par différents phénomènes physiques comme la supraconductivité, la condensation de Bose-Einstein et la répartition des électrons atomique en couche.

7.3.2 Construction des fonctions d'onde symétrique et antisymétrique

A partir d'une fonction d'onde quelconque $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_N t)$ sans parité définie (on ignore le spin pour le moment) on peut construire une fonction d'onde symétrique $\psi_S(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_N t)$ ou anti-symétrique $\psi_A(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_N t)$ avec les opérateurs symétrisation \hat{S} et anti-symétrisation \hat{A}

$$\psi_S(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_N t) = C_N^S \hat{S} \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_N t)$$

$$\psi_A(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_N t) = C_N^A \hat{A} \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_N t)$$

Où $C_N^S = \sqrt{\frac{N!}{n_1!n_2!\dots n_p!}}$ et $C_N^A = \sqrt{N!}$ sont des constantes de normalisation

n_i ($i = 1 \dots p$) est le nombre de particules qui occupent l'état i

N est le nombre de particule total

Avec $\hat{S} = \frac{1}{N!} \sum_{\sigma} \hat{P}_{\sigma}$ et $\hat{A} = \frac{1}{N!} \sum_{\sigma} \varepsilon_{\sigma} \hat{P}_{\sigma}$ sont les operateurs symétrisations et anti-symétrisations respectivement $\varepsilon_{\sigma} = \pm 1$ est la signature de la permutation

La somme \sum_{σ} sur toutes les permutations possibles. L'ensemble des permutations $\{P_{\sigma}\}$ forment un groupe on a $N!$ permutations (configurations) possibles.

En générale une permutation est composée de plusieurs permutation élémentaire de 2 particules qu'on appelle transposition, par exemple soient 3 particules

- 1 2 3 est l'ordre (la configuration) initiale $\hat{P}_{\sigma} = \hat{1}$ l'identité.
- Le nouvel ordre 2 1 3 est obtenu par une permutation composée de la transposition (permutation élémentaire) des particule 1 et 2 $\hat{P}_{213} = \hat{P}_{12}$
- Mais l'ordre 3 1 2 est obtenu par une permutation composée de la transposition 1 et 2 on aura l'ordre 2 1 3 puis la transposition 2 et 3 pour avoir l'ordre 3 1 2 donc $\hat{P}_{321} = \hat{P}_{23} \cdot \hat{P}_{12}$

La signature de la permutation ε_{σ} est =1 si le nombre de transpositions est paire (deuxième exemple 2 transpositions \hat{P}_{23} et \hat{P}_{12}) et -1 s'il est impaire (le premier exemple 1 seule transposition \hat{P}_{12}).

Exemple : Système de 2 particules identiques

Dans ce cas on a seulement

- 1 2 est la configuration (ordre) initiale $\sigma = I$ l'identité
- 2 1 la permutation des 2 particules avec l'opérateur \hat{P}_{12}

$$\hat{S} = \frac{1}{N!} \sum_{\sigma} \hat{P}_{\sigma} = \frac{1}{\sqrt{2}} [1 + \hat{P}_{12}]$$

$$\hat{A} = \frac{1}{N!} \sum_{\sigma} \varepsilon_{\sigma} \hat{P}_{\sigma} = \frac{1}{\sqrt{2}} [1 + \varepsilon_{12} \hat{P}_{12}] = \frac{1}{\sqrt{2}} [1 - \hat{P}_{12}]$$

$\varepsilon_{12} = -1$ car on a une seule transposition donc le nombre est impaire.

a- Cas pour les bosons

$$\psi_S(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) = C_N^S \hat{S} \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)$$

$$\begin{aligned} \psi_S(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) &= \sqrt{2!} \hat{S} \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} [1 + \hat{P}_{12}] \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) + \hat{P}_{12} \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) + \psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1, t)) \end{aligned}$$

b- Cas pour les fermions

$\Psi_A(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) = 0$ C'est le principe d'exclusion de Pauli (deux fermions identiques ne peuvent pas occuper le même état quantique)

Exercice :

Pour un système de trois particules identiques construire $\psi_S(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, t)$ et $\psi_A(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, t)$

Maintenant si on prend en compte le spin l'état total s'écrit

$$|\psi \rangle = |\psi \rangle_{\text{espace}} \otimes |\varphi \rangle_{\text{spin}}$$

Et par conséquent la fonction d'onde totale :

$$\psi(\vec{r}, \vec{S}, t) = \psi(\vec{r}, t) \varphi(\vec{S}), \varphi(\vec{S}) \text{ est un spineur}$$

$\psi(\vec{r}, t)$ est la partie orbitale (spatiale) et $\varphi(\vec{S})$ la partie du spin

Maintenant la parité de $\psi(\vec{r}, \vec{S}, t)$ dépend de la parité de $\psi(\vec{r}, t)$ et $\varphi(\vec{S})$ séparément :

$$\psi_S(\vec{r}, \vec{S}, t) = \begin{cases} \psi_S(\vec{r}, t) \otimes \varphi_S(\vec{S}) \\ \text{ou} \\ \psi_A(\vec{r}, t) \otimes \varphi_A(\vec{S}) \end{cases}$$

$$\psi_A(\vec{r}, \vec{S}, t) = \begin{cases} \psi_S(\vec{r}, t) \otimes \varphi_A(\vec{S}) \\ \text{ou} \\ \psi_A(\vec{r}, t) \otimes \varphi_S(\vec{S}) \end{cases}$$

7.3.3 Construction d'une base de l'espace des états

Quand l'état du système est caractérisé par plusieurs nombres quantiques par exemple énergie spin moment orbital ... Il est plus commode d'utiliser les vecteurs d'états :

$$|\psi \rangle = |1 : \alpha_1, 2 : \alpha_2, \dots, i : \alpha_i, \dots, N : \alpha_N \rangle$$

α_i (i=1...N) est l'ensemble de tous les nombres quantiques décrivant l'état de la particule i

$\alpha_i = \{\text{energie, spin, ...}\}$ de la particule i

$|\psi \rangle = |1 : \alpha_1, 2 : \alpha_2, \dots, i : \alpha_i, \dots, N : \alpha_N \rangle$ décrit un système de particule où :

La particule 1 dans l'état α_1 la particule 2 dans l'état α_2 la particule i dans l'état α_i la particule N dans l'état α_N

$$[\hat{H}, \hat{P}] = 0$$

L'hamiltonien H est invariant \hat{P}_{ij} est conservé puisqu'ils commutent, on peut donc construire une base commune à partir de leurs vecteurs propres.

Pour un système à N particules discernables l'espace des états est engendré à partir d'une base de l'espace des états à 1 particules $|i : \alpha_i \rangle$:

En générale on va considérer le cas où l'état s'écrit comme produit tensoriel des états individuels à 1 particule $|i : \alpha_i \rangle$

$$|\psi \rangle = |1 : \alpha_1 \rangle \otimes |2 : \alpha_2 \rangle \otimes \dots \otimes |i : \alpha_i \rangle \dots \otimes |N : \alpha_N \rangle$$

Exercices du Chapitre 7

Exercice 1

Soit H_0 l'hamiltonien à une particule qui possède 3 niveaux d'énergie équidistants $0, \hbar\omega_0$ et $2\hbar\omega_0$ non dégénérée dans l'espace orbital. On considère un système de 3 électrons indépendants dont l'hamiltonien total s'écrit : $H = H_0(1)+H_0(2)+H_0(3)$

- 1- Quels sont les niveaux d'énergie de H et leur degré de dégénérescence ?
- 2- Pour le système d'électrons construire la partie orbitale de la fonction d'onde totale si le système se trouve dans l'état de spin $|1/2, 1/2, 1/2\rangle$ justifier votre réponse.

Exercices 2

Soit un système de 3 particules identiques de spin 1/2 sans interactions mutuelles confinées dans un puits de potentiel infini unidimensionnel de largeur a se trouvant dans le même état de spin $|1/2, 1/2\rangle$. Déterminer l'énergie et la fonction d'onde associées à l'état fondamental et le premier état excité .

Pour un niveau n on a : $E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2}$

Exercices 3

Soit un système 4 particules identiques de spin 1/2 sans interactions mutuelles confinées dans un puits de potentiel infini unidimensionnel de largeur a se trouvant dans le même état de spin $|1/2, 1/2\rangle$. Déterminer l'énergie et la fonction d'onde associées à l'état fondamental et le premier état excité.

Exercices 4

Montrer que pour un système de deux particules sans interaction mutuelle l'équation de Schrödinger du système totale s'écrit comme 2 équations indépendantes correspondantes à chaque particule. Maintenant si ces 2 particules sont des bosons de spin 1 une se trouvant dans l'état $|1,0\rangle$ l'autre dans l'état $|1,1\rangle$. Donner les expressions possibles des fonctions d'ondes totales de ce système en fonction des états individuels de chaque particule.

$\hat{S} = \frac{1}{N!} \sum_{\sigma} \hat{P}_{\sigma}$ et $\hat{A} = \frac{1}{N!} \sum_{\sigma} \varepsilon_{\sigma} \hat{P}_{\sigma}$, $C_N^S = \sqrt{\frac{N!}{n_1!n_2!\dots n_p!}}$ et $C_N^A = \sqrt{N!}$ sont les constantes

Exercices 5

Quelle est la propriété essentielle de la fonction d'onde totale d'un système de boson identiques et de la fonction d'onde totale d'un système de fermion identiques. ? Quelle est sa signification physique ?

Construire la fonction d'onde totale d'un système de 2 particules identiques indépendantes qui se trouve dans 2 états différents à partir des fonctions d'ondes individuelles $\psi_i(x_j, S_j)$

$i, j = 1, 2$ de chaque particule dans le cas où

- 1- Les particules sont des bosons sans spin
- 2- Les particules sont des fermions.

Exercices 6

Calculer l'énergie et la fonction d'onde associée à l'état fondamental et le premier état excité d'un système de deux particules identiques sans interaction mutuelles soumises au même potentiel harmonique dans le cas où :

- 1- ces particules ont un spin 1/2
- 2- ces particules ont un spin 1 sans moment orbital dans un état de spins opposés.

Exercices 7

Soit un système de 2 particules identiques de spin 1 sans interactions mutuelles confinées dans un puits de potentiel infini unidimensionnel de largeur a .

Déterminer l'énergie et la fonction d'onde associées à l'état fondamental et le premier état excité si une particule se trouve dans état de spin $|1, 1\rangle$ et l'autre dans $|1, -1\rangle$

Pour un niveau n $E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2}$

Exercice 8

On considère un système de 2 électrons indépendants soumis au même potentiel extérieur $V_{ext}(r)$

- 1- Ecrire l'hamiltonien du système total puis montrer qu'on peut le mettre sous la forme $H=H_1 + H_2$
- 2- En déduire que l'équation de Schrödinger total est équivalente à 2 équations correspondantes à chaque électron
- 3- Donner pour les deux électrons les trois états symétrique et l'état antisymétrique de la partie du spin.
- 4- Quelle est l'expression de la partie orbitale correspondante à chaque état si les électrons sont dans des états orbitaux différents. Justifier votre réponse.

Exercices 9

Calculer l'énergie et la fonction d'onde associée à l'état fondamental et le premier état excité d'un système de deux particules identiques sans interaction mutuelles soumises au même potentiel harmonique dans le cas où ces particules sont :

- 1- Des bosons de spin 0
- 2- Des fermions de spin 1/2

Exercice 10

Montrer que pour deux électrons on a pour la partie du spin trois états symétrique et un état antisymétrique. Quelle l'expression de la partie orbitale correspondante à chaque état si les électrons sont indépendants. Justifier votre réponse.

Exercice 11

Soit un système de 2 particules sans spin d'hamiltonien indépendant du temps H_1 et H_2 .

- 1- Quel est l'hamiltonien total du système ?
- 2- Ecrire l'équation de Schrödinger pour chaque particule
- 3- Ecrire celle du système total.
- 4- En déduire l'énergie total E du système en fonction de E_1 et E_2 et la fonction d'onde du système total en fonction des fonctions d'onde de chaque particule.
- 5- Construire la fonction d'onde symétrique et antisymétrique du système à partir de la fonction d'onde totale en utilisant les opérateurs A et S puis par la méthode des déterminant sachant que ($E_1 \neq E_2$).

On donne $\hat{S} = \frac{1}{N!} \sum_{\sigma} \hat{P}_{\sigma}$ et $\hat{A} = \frac{1}{N!} \sum_{\sigma} \varepsilon_{\sigma} \hat{P}_{\sigma}$

$C_N^S = \sqrt{\frac{N!}{n_1!n_2!\dots n_p!}}$ et $C_N^A = \sqrt{N!}$ sont des constantes de normalisation

Exercice 12

Soit un système de 2 particules sans spin dans un puits infinie

- 1- Quel est l'hamiltonien total du système avec et sans interactions mutuelles ?
- 2- Ecrire l'équation de Schrödinger pour le système total.
- 3- Construire la fonction d'onde totale si les 2 particules sont indépendantes et se trouve dans des états' différents. Justifier

On donne $\hat{S} = \frac{1}{N!} \sum_{\sigma} \hat{P}_{\sigma}$ et $\hat{A} = \frac{1}{N!} \sum_{\sigma} \varepsilon_{\sigma} \hat{P}_{\sigma}$

Exercices 13

On considère un système composé de 2 particules sans interactions (indépendantes) confinées dans un puits de potentiel unidimensionnel infini de largeur a . Déterminer l'énergie et la fonction d'onde associées à l'état fondamental et le premier état excité si les particules sont :

- a) Discernables sans spin
- b) des bosons identiques de spin 0
- c) c) des fermions identiques de spin $1/2$
- d) des fermions discernables de spin $1/2$

Exercices 14

Soit un système 2 particules identiques de spin $1/2$ sans interactions mutuelles confinées dans un puits de potentiel infini unidimensionnel de largeur a se trouvant dans le même état de spin $|1/2, 1/2\rangle$. Déterminer l'énergie et la fonction d'onde associées à l'état fondamental et le premier état excité.

Exercices 15

Calculer l'énergie et la fonction d'onde associée à l'état fondamental et le premier état excité d'un système de deux particules identiques soumises au même potentiel harmonique dans le cas où ces particules sont :

- 1- Des bosons de spin 0

2- Des fermions de spin $1/2$

Exercices 16

En négligeant l'interaction mutuelle entre les électrons, donner l'expression de l'énergie et la fonction d'onde associées à l'état fondamental et le premier état excité pour un atome composé de 2 électrons.

Chapitre 8
Formalisme de la Seconde
Quantification

8.1 Introduction

Pour traiter des systèmes de particule à nombre variable où indéterminé on doit réécrire le formalisme de la MQ en utilisant les opérateurs de création et annihilation (formalisme de l'oscillateur harmonique ou formalisme de seconde quantification).

8.2 Représentation nombre d'occupation

Soit $|1 : \alpha_1 \rangle, |2 : \alpha_2 \rangle, \dots, |i : \alpha_i \rangle, \dots, |N : \alpha_N \rangle$ une base de l'espace des états à 1 particule \mathcal{E} , l'état générale d'un système à N particules est :

$$|\psi \rangle = |1 : \alpha_1, 2 : \alpha_2, \dots, i : \alpha_i, \dots, N : \alpha_N \rangle$$

Si n_1 états identiques $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = \dots = \alpha_{n_1}$;

n_2 états identiques $\alpha_{n_1+1} = \alpha_{n_1+2} = \alpha_{n_1+3} = \dots = \alpha_{n_1+n_2}$

n_3 états identiques $\alpha_{n_1+n_2+1} = \alpha_{n_1+n_2+2} = \alpha_{n_1+n_2+3} = \dots = \alpha_{n_1+n_2+n_3}$

.....

n_p états identiques $\alpha_{N-n_p} = \alpha_{N-n_p-1} = \alpha_{N-n_p-2} = \dots = \alpha_N$

Donc on a : n_1 particules dans l'état α_1

n_2 particules dans l'état α_2

n_3 particules dans l'état α_3

...etc.

n_p particules dans l'état α_p

Dans la représentation nombre d'occupation on écrit l'état générale d'un système de particules identiques sous la forme

$$|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots, n_p \rangle$$

Où on a :

n_1 particules dans l'état α_1

n_2 particules dans l'état α_2

n_3 particules dans l'état α_3

...etc.

n_p particules dans l'état α_p

Si on a des bosons identiques

$$|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots, n_p\rangle = |\psi\rangle_S = \sqrt{\frac{N!}{n_1! n_2! \dots n_p!}} \hat{S} |\psi\rangle$$

Si on a des fermions identiques

$$|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots, n_p\rangle = |\psi\rangle_A = \sqrt{N!} \hat{A} |\psi\rangle$$

Où

$$|\psi\rangle = |1 : \alpha_1, 2 : \alpha_2, \dots, i : \alpha_i, \dots, N : \alpha_N\rangle$$

L'état général à N particules

Pour les bosons les nombres n_i peuvent être quelconque car dans un état on peut mettre n'importe quel nombre de bosons

Par contre pour le cas des fermions $n_i = 0$ ou 1 à cause du principe d'exclusion de Pauli.

Exemple

l'état nombre d'occupation pour 2 états tel que états $\alpha_1 \neq \alpha_2$ est $|n_1, n_2\rangle$ qui est l'état symétrique ou anti symétrique de l'état $|1 : \alpha_1, 2 : \alpha_2\rangle$.

Si on a un système de 2 particules identiques

a) Pour le cas des bosons on aura 3 configurations possibles :

$|1, 1\rangle$ une particule occupe l'état α_1 et une particule occupe l'état α_2

$|0, 2\rangle$, l'état α_1 est vide et les deux particules occupent l'état α_2

$|2, 0\rangle$, l'état α_2 est vide et les deux particules occupent l'état α_1

b) Pour les fermions :

$|1, 1\rangle$ seulement : une particule occupe l'état α_1 et une particule occupe l'état α_2

8.2.1 Espace des états

Le nombre de particule est une observable à laquelle on associe l'opérateur hermétique N opérateur nombre d'occupation $\hat{N} |\psi_n\rangle = n |\psi_n\rangle$. On définit l'espace de tous les états comme étant **la somme directe** des espaces $\mathcal{E}^{(n)}$ à n particules $n=0, 1, \dots, N$:

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}^{(0)} \oplus \mathcal{E}^{(1)} \oplus \mathcal{E}^{(2)} \dots \oplus \mathcal{E}^{(N)}. \text{ appelé espace de Fock,}$$

$\mathcal{E}^{(0)}$ contient seulement l'état $|0\rangle$ l'état du vide.

$\mathcal{E}^{(1)}$ l'espace des états d'un système à 1 particule

$\mathcal{E}^{(2)}$ l'espace des états d'un système à 2 particules

$\mathcal{E}^{(3)}$ l'espace des états d'un système à 3 particules

.....etc.

$\mathcal{E}^{(N)}$ l'espace des états d'un système à N particule

L'espace des états devient une superposition d'espace, chaque espace est associé à un nombre bien déterminé de particule. Cet espace est appelé espace de Fock. Le passage d'un espace à un autre se fait par a et a^+ .

8.2.2 Les opérateurs création et annihilation a et a^+

Le nombre de particule étant variable où indéterminé il y'a donc création et disparition de particule ce processus est décrit par le formalisme de seconde quantification basé sur l'algèbre des opérateurs de création et annihilation. a et a^+ . La différence majeure entre boson et fermions se traduit par le fait que a et a^+ obéissent à de relations de commutations pour les bosons alors qu'ils obéissent à des relations d'anti commutations pour les fermions.

a) Bosons

L'action de a et a^+ sur un état de base nombre d'occupation est définie par :

$$a_i^+ |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots, n_p\rangle = \sqrt{n_i + 1} |n_1, n_2, \dots, n_i + 1, \dots, n_p\rangle$$

Donc a_i^+ ajoute une particule à l'état α_i

$a^+ : \mathcal{E}^{(n)} \rightarrow \mathcal{E}^{(n+1)}$ on passe d'un espace à n particules à un espace à $n+1$ particule

$$a_i |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots, n_p\rangle = \sqrt{n_i} |n_1, n_2, \dots, n_i - 1, \dots, n_p\rangle$$

Donc a_i détruit où enlève une particule de l'état α_i

$a : \mathcal{E}^{(n)} \rightarrow \mathcal{E}^{(n-1)}$ on passe d'un espace à n particules à un espace à $n-1$ particule

En particulier : $a|0\rangle = 0$

Pour les bosons les opérateurs a et a^+ **commutent**

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j] = 0 \quad \forall i, j \quad \text{et} \quad [\hat{a}_i, \hat{a}_j^+] = \delta_{ij}$$

$N_i = a_i^+ a_i$ opérateur nombre d'occupation donne le nombre n_i dans l'état i .

$$N = \sum_{i=1}^N N_i = \sum_{i=1}^N a_i^+ a_i$$

$$[\hat{N}, \hat{a}_j] = -\hat{a}_j$$

$$[\hat{N}, \hat{a}_j^+] = \hat{a}_j^+ \quad [\hat{N}, \hat{N}_i] = 0$$

L'expression du vecteur en fonction des a_i^+ et l'état du vide $|0\rangle$

$$|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots, n_p\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \dots n_i! \dots n_p!}} (a_1^+)^{n_1} (a_2^+)^{n_2} \dots (a_i^+)^{n_i} \dots (a_p^+)^{n_p} |0\rangle$$

b) Fermions

Les opérateurs **anti commutent**

$$\{\hat{a}_i, \hat{a}_j\} = 0 \quad \forall i, j \quad \text{et} \quad \{\hat{a}_i, \hat{a}_j^+\} = \delta_{ij}$$

Où l'anti commutateur de 2 operateurs est défini par $\{\hat{A}, \hat{B}\} = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$

$$a_i^+ |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots, n_p\rangle = \delta_{n_i 0} (-1)^{p_i} |n_1, n_2, \dots, n_i + 1, \dots, n_p\rangle$$

$$a_i |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots, n_p\rangle = \delta_{n_i 1} (-1)^{p_i} |n_1, n_2, \dots, n_i - 1, \dots, n_p\rangle$$

$$p_i = \sum_{j=1}^{i-1} n_j$$

L'expression du vecteur en fonction des a_i^+ et l'état du vide $|0\rangle$

$$|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots, n_p\rangle = a_1^+ a_2^+ \dots a_i^+ \dots a_p^+ |0\rangle$$

8.2.3 L'opérateur champs

On définit les opérateurs champs suivants

$\hat{\psi}(\vec{r}) = \sum_{\alpha_i} \psi_{\alpha_i}(\vec{r}) \hat{a}_{\alpha_i} \hat{\psi}^+(\vec{r}) = \sum_{\alpha_i} \psi_{\alpha_i}^*(\vec{r}) a_{\alpha_i}^+$ où $\psi_{\alpha_i}(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \alpha_i \rangle$ est la fonction d'onde associé à l'état $|\alpha_i\rangle = a_{\alpha_i}^+ |0\rangle$ l'opérateur $\hat{\psi}^+(\vec{r})$ crée une particule à la position \vec{r} $\hat{\psi}^+(\vec{r}) |0\rangle = |\vec{r}\rangle$ alors que $\hat{\psi}(\vec{r})$ détruit une particule à la même position. Pour les bosons on des relations de commutation.

$$[\hat{\psi}(\vec{r}), \hat{\psi}(\vec{r}')]=0, [\hat{\psi}^+(\vec{r}), \hat{\psi}^+(\vec{r}')]=0, [\hat{\psi}(\vec{r}), \hat{\psi}^+(\vec{r}')] = \delta^3(\vec{r} - \vec{r}')$$

Pour les fermions des relations d'anti commutation :

$$\{\hat{\psi}(\vec{r}), \hat{\psi}(\vec{r}')\}=0, \{\hat{\psi}^+(\vec{r}), \hat{\psi}^+(\vec{r}')\}=0, \{\hat{\psi}(\vec{r}), \hat{\psi}^+(\vec{r}')\} = \delta^3(\vec{r} - \vec{r}')$$

$$N = \sum_{i=1}^N N_i = \sum_{i=1}^N a_i^+ a_i = \int d^3\vec{r} \hat{\psi}^+(\vec{r}) \hat{\psi}(\vec{r})$$

8.2.4 Expressions des opérateurs a 1 et 2 particules

Si \hat{O}^i est un opérateur associé à la particule i pour le système total des N particule on a $\hat{O} = \sum_{i=1}^N \hat{O}^i$

Exemple :

$$\hat{T} = \sum_{i=1}^N \hat{T}^i \text{ l'énergie cinétique}$$

On montre que :

$$\hat{O} = \sum_{\alpha\beta} O_{\alpha\beta} a_{\alpha}^+ a_{\beta}$$

Où l'élément de matrice $O_{\alpha\beta} = \langle \alpha | O | \beta \rangle$ avec $|\beta\rangle$ et $|\alpha\rangle$ des états à 1 particule quelconque pour démontrer on introduit 2 relations de fermeture relatives à des états à 1 particule :

$$\sum_{\alpha} |\alpha\rangle \langle \alpha| = 1 \quad \text{et} \quad \sum_{\beta} |\beta\rangle \langle \beta| = 1$$

$O^{(i,j)}$ Opérateur associé à la particule i et j pour le système total N particule on a

$$\hat{O} = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \hat{O}^{i,j}$$

Exemple :

L'interaction mutuelle de 2 particules

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \hat{V}(\vec{r}_i, \vec{r}_j)$$

Dans ce cas

$$\hat{O} = \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} O_{\alpha\beta\gamma\delta} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\beta}^{\dagger} a_{\gamma} a_{\delta}$$

Où $O_{\alpha\beta\gamma\delta} = \langle \alpha, \beta | O | \gamma, \delta \rangle$ et $|\alpha, \beta\rangle$ et $|\gamma, \delta\rangle$ des états à 2 particules quelconques pour démontrer on introduit 2 relations de fermeture relatives à des états à 2 particules :

$$\sum_{\alpha\beta} |\alpha, \beta\rangle \langle \beta, \alpha| = 1 \quad \text{et} \quad \sum_{\gamma\delta} |\gamma, \delta\rangle \langle \delta, \gamma| = 1$$

Le calcul de la valeur moyenne $\langle \psi | H | \psi \rangle$ nécessite souvent le calcul de la valeur moyenne de certaine combinaison des opérateurs a_i^{\dagger} , a_i par rapport au vide $\langle 0 | a_i \dots a_k^{\dagger} a_l a_m^{\dagger} \dots | 0 \rangle$. Ceci est facilité par le théorème de Wick.

8.2.5 Théorème de Wick

8.2.5.1 Définition du produit normal

le produit normal d'opérateurs a_i^{\dagger} , a_i est le réarrangement (changement de l'ordre) du produit des opérateurs a_i^{\dagger} et a_i tel que tous les opérateurs création sont à gauche et annihilation à droite. Dans le cas des fermions il faut ajouter le facteur $(-1)^p$ où p est le nombre de permutations nécessaires pour ce réarrangement.

Exemple le produit normal du produit $a_1 a_2^{\dagger}$ est : $a_1 a_2^{\dagger} =: a_2^{\dagger} a_1$ pour les bosons et $a_1 a_2^{\dagger} = -a_2^{\dagger} a_1$ pour les fermions.

Celui du produit $a_1^{\dagger} a_2 a_3^{\dagger} a_4$ est : $a_1^{\dagger} a_2 a_3^{\dagger} a_4 =: a_1^{\dagger} a_3^{\dagger} a_2 a_4$ pour les bosons : $a_1^{\dagger} a_2 a_3^{\dagger} a_4 = -a_1^{\dagger} a_3^{\dagger} a_2 a_4$ pour les fermions

On pose $A_i = a_i^{\dagger}$, a_i on note $\langle A_i A_j \rangle$ la valeur moyenne $\langle 0 | A_i A_j | 0 \rangle$ on montre que $\langle a_i a_j^{\dagger} \rangle = \delta_{ij}$ et $\langle a_i a_j \rangle = \langle a_i^{\dagger} a_j^{\dagger} \rangle = 0 \forall i, j$

8.2.5.2 Théorème de Wick

Le produit d'un nombre fini d'opérateurs annihilation et création est égal à la somme de tous les produits normaux après avoir effectué toutes les contractions possibles

$$a_1 a_2^{\dagger} = a_2^{\dagger} a_1 + [\hat{a}_1, \hat{a}_2^{\dagger}] = a_2^{\dagger} a_1 + \langle a_1 a_2^{\dagger} \rangle$$

Soient les operateurs $A_i = a_i$ ou a_i^+ ; $i = 1,2,3,4$ on aura d'après le théorème de Wick le produit s'écrit :

$$\begin{aligned}
 A_1 A_2 A_3 A_4 = & : A_1 A_2 A_3 A_4 : + : A_1 A_2 : \langle A_3 A_4 \rangle + : A_1 A_3 : \langle A_2 A_4 \rangle + \\
 & : A_1 A_4 : \langle A_2 A_3 \rangle + : A_2 A_3 : \langle A_1 A_4 \rangle + : A_2 A_4 : \langle A_1 A_3 \rangle + : A_3 A_4 : \langle A_1 A_2 \rangle + \\
 & \langle A_1 A_2 \rangle \langle A_3 A_4 \rangle + \langle A_1 A_3 \rangle \langle A_2 A_4 \rangle + \langle A_2 A_3 \rangle \langle A_1 A_4 \rangle
 \end{aligned}$$

Exercices du Chapitre 8

Exercice 1

Sachant que pour un système de boson l'action des opérateurs création a^+ et annihilation a sur un vecteur d'état en représentation nombre d'occupation est

$$a_i^+ |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots, n_p\rangle = \sqrt{n_i + 1} |n_1, n_2, \dots, n_i + 1, \dots, n_p\rangle$$

$$a_i |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots, n_p\rangle = \sqrt{n_i} |n_1, n_2, \dots, n_i - 1, \dots, n_p\rangle$$

Montrer que

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j] = 0 \quad \forall i, j \quad \text{et} \quad [\hat{a}_i, \hat{a}_j^+] = \delta_{ij}$$

Exercice 2

Soient les états caractérisés par les grandeurs physiques énergies et spin $\alpha_i = \{E_i, S_{zi}\}$

Tel que $S_{zi} = m_{si} \hbar$

- a) Quelle est le nombre d'état possible si on a 2 niveaux d'énergies différents E_1, E_2 , si on
 - 1- Des bosons de spin = 0
 - 2- Des bosons de spin = 1
 - 3- Des fermions de spin $1/2$
 - 4- Des fermions de spin $3/2$
- b) Donner les configurations possibles si on veut mettre 3 particules identiques pour chacun des cas cités précédemment et donner les vecteurs d'état correspondant à chaque cas en représentation nombre d'occupation
- c) Ecrire ces vecteurs en utilisant l'opérateur a^+ et l'état du vide $|0\rangle$.

Exercice 3

- a) Ecrire H dans la représentation nombre d'occupation par rapport à ses vecteurs propres puis calculer $[\hat{H}, \hat{N}]$ où \hat{N} est l'opérateur nombre d'occupation total, interpréter le résultat.
- b) On considère un système à N électrons indépendants dans une boîte cubique de volume V .
 - 1- Quelle est l'expression de la fonction potentiel $V(x, y, z)$.
 - 2- En déduire hamiltonien total en représentation R puis dans le formalisme de seconde quantification par rapport à la base $|\vec{k}, m_s\rangle$
 - 3- Quel est l'état fondamental $|F\rangle$ en fonction de a^+ et l'état du vide $|0\rangle$. ainsi que l'énergie correspondante en fonction de E_1, E_2, \dots , pour $N=3$.
 - 4- Faire de même pour 3 Bosons.

Exercice 4

Donnez l'expression des opérateurs suivant dans le formalisme de la seconde quantification l'impulsion $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ l'énergie cinétique T, le potentiel extérieur $V(\vec{r})$ et le potentiel d'interaction mutuelle $V(\vec{r}_i, \vec{r}_j)$ puis déduire celle de H en utilisant la représentation $|\vec{k}\rangle$ et $|\vec{r}\rangle$ Considérer les états avec et sans spin.

On donne $\langle \vec{r} | \vec{k} \rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\vec{r}}$ où V est le volume.

Exercice 5

1- Vérifier la relation de commutations $[a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij}$ pour un système de bosons

2- Monter que les opérateurs champs s'écrivent

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{\alpha} \psi_{\alpha}(\vec{r}) a_{\alpha} \quad \text{et} \quad \psi^{\dagger}(\vec{r}) = \sum_{\alpha} \psi_{\alpha}^*(\vec{r}) a_{\alpha}^{\dagger}$$

Quelle est leur rôle ?

3- On considère l'opérateur densité de particule $\rho(\vec{r}_0) = |\vec{r}_0\rangle\langle\vec{r}_0|$ quelle son expression le formalisme de la seconde quantification par rapport à une base formée d'états à une particule $|\alpha_i\rangle$

4- Donner l'expression de H en fonction des valeurs propres E_{α} et N_{α} rapport à une base formée de ses états propres et interpréter brièvement.

Exercice 6

Soit un système de bosons indiscernables On appelle opérateur champ de bosons

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{\alpha} \psi_{\alpha}(\vec{r}) a_{\alpha}$$

1- Vérifier les relations de commutation suivantes

$$[\hat{\psi}(\vec{r}), \hat{\psi}^{\dagger}(\vec{r}')] = \delta^3(\vec{r} - \vec{r}')$$

$$[\hat{\psi}(\vec{r}), \hat{\psi}(\vec{r}')] = 0$$

Sachant que $[\hat{a}_i, \hat{a}_j^{\dagger}] = \delta_{ij}$ et $[\hat{a}_i, \hat{a}_j] = 0$

2- Quelle est l'interprétation de l'état

$$|\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3 \dots \vec{r}_N\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \hat{\psi}^{\dagger}(\vec{r}_1) \hat{\psi}^{\dagger}(\vec{r}_2) \dots \hat{\psi}^{\dagger}(\vec{r}_N) |0\rangle$$

Donner la signification physique

Exercice 7

On considère N niveau d'énergies E_1, E_2, \dots, E_N

1- Quelle est le nombre des états α_i possibles si on veut placer des particules de spin 1

2- Même question pour des particules de spin 1/2

3- Quel est l'état fondamental $|F\rangle$ et le premier état excité en fonction de a^{\dagger} et l'état du vide $|0\rangle$ ainsi que l'énergie correspondante en fonction de $E_1, E_2 \dots$ Si on veut remplir ces niveaux avec N particules de spin 1

4- Même question pour 2N particules de spin 1/2.

Références

- [1] Claude Cohen Tannodji Bernard Diu et Franck Laloe Mécanique quantique Tome 1 et Tome 2
Edition Herman 1977
- [2] Claude Aslangul Mécanique quantique Tome 1 et Tome 2 Edition de-eboeck 2007
- [3] Pèrez Carles Pujol Quantique fondements et applications Edition de-eboeck 2013
- [4] Nouredine Zettili Mécanique quantum Mechanics concepts and applications
Edition John
Wiley & Sons, Ltd 2001
- [5] Richard Feynman Le cours de physique de Feynman 3 Mécanique quantique
Edition
InterEdition 1965