



UNIVERSITE MOHAMED SEDDIK BEN YAHIA –JIJEL
FACULTE DES SCIENCES EXACTES ET INFORMATIQUE
DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

MECANIQUE QUANTIQUE II

Cours et applications

Ferkous Nourredine

Année 2024

Avant-Propos

Ce polycopié est destiné aux étudiants de la troisième année Licence Physique, conformément au programme national. Il fournit un cours simple, riche aux notions de base et illustré par des exercices d'applications corrigés pour faciliter la compréhension et le savoir-faire.

L'objectif de ce cours et d'approfondir les concepts de base et se familiariser avec les outils mathématiques de la mécanique quantique. Il comporte les chapitres suivants :

- 1) Un rappel sur les systèmes quantiques unidimensionnels.
- 2) Les moments cinétiques en mécanique quantique.
- 3) Le potentiel central.
- 4) La théorie de perturbation.
- 5) Les particules identiques.
- 6) Initiation à la théorie de la diffusion.

Ces chapitres sont suivis par des exercices proposés pour bien maîtriser les concepts essentiels du cours.

Enfin, je propose quelques références utiles :

- 1) Albert Messiah, *Mécanique quantique*, Tome 1 et 2, Éditeur : Dunod
- 2) L. Landau et E. Lifchitz, *Mécanique Quantique*, Editions Mir.
- 3) Noureddine Zettili, *Quantum mechanics : Concepts and applications*. Wiley 2nd edition.

Mots-clés : Mécanique quantique, Moments cinétiques, Perturbation, Potential central, Particules identiques, Diffusion.

Table des matières

| | |
|--|-----------|
| 1 Etude quantique de quelques systèmes unidimensionnels (rappels) | 5 |
| 1.1 Introduction | 5 |
| 1.2 Saut de potentiel | 5 |
| 1.3 Barrière de potentiel | 9 |
| 1.4 Oscillateur harmonique à une dimension | 11 |
| 1.5 Exercices | 14 |
| 2 Moments cinétiques en mécanique quantique | 19 |
| 2.1 Introduction | 19 |
| 2.2 Moment cinétique orbital | 19 |
| 2.3 Moment cinétique de spin | 23 |
| 2.4 Théorie générale des moments cinétiques | 24 |
| 2.5 Addition de deux moments cinétiques | 27 |
| 2.6 Coefficients de Clebsh-Gordan | 30 |
| 2.7 Exercices | 35 |
| 3 Le potentiel central | 39 |
| 3.1 Introduction | 39 |
| 3.2 Etats stastionnaires | 40 |
| 3.3 Particule libre en coordonnées sphériques | 42 |
| 3.4 Exercices | 43 |
| 4 Théorie des perturbations | 47 |
| 4.1 Introduction | 47 |
| 4.2 Perturbation stationnaire | 47 |

| | | |
|----------|---|-----------|
| 4.2.1 | Cas non dégénéré | 48 |
| 4.2.2 | Cas dégénéré | 53 |
| 4.3 | Perturbation dépendante du temps | 57 |
| 4.3.1 | Introduction | 57 |
| 4.3.2 | Méthode | 58 |
| 4.4 | Exercices | 62 |
| 5 | Particules identiques | 68 |
| 5.1 | Généralité | 68 |
| 5.2 | Symétrie d'échange | 69 |
| 5.3 | Système de particules discernables (non identiques) | 70 |
| 5.4 | Système de particules identiques (indiscernable) | 70 |
| 5.4.1 | Dégénérescence d'échange | 71 |
| 5.4.2 | Postulat de symétrisation | 71 |
| 5.4.3 | Construction de fonctions d'onde symétriques et antisymétriques | 72 |
| 5.4.4 | Système de 2 particules identiques sans interactions mutuelles | 72 |
| 5.4.5 | Fonction d'onde d'un système de N particules | 73 |
| 5.5 | Exercices | 76 |
| 6 | Initiation à la théorie de la diffusion | 78 |
| 6.1 | Introduction | 78 |
| 6.2 | Caractéristiques d'un phénomène de diffusion | 78 |
| 6.3 | Section efficace de diffusion | 79 |
| 6.4 | Calcul de la section efficace | 80 |
| 6.5 | Méthode des ondes partielles | 82 |
| 6.5.1 | Théorème optique | 86 |
| 6.5.2 | Calcul de déphasage dans le cas d'un potentiel de portée finie | 87 |

Chapitre 1

Etude quantique de quelques systèmes unidimensionnels (rappels)

1.1 Introduction

L'équation de Schrödinger décrivant la dynamique d'une particule de masse m dans un potentiel unidimensionnel indépendant du temps $V(x)$ est donnée par

$$\frac{p^2}{2m}\psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (1.1)$$

Les solutions de cette équation donnent les valeurs propres d'énergie autorisées E_n et les fonctions d'onde correspondantes $\psi_n(x)$. Pour résoudre cette équation différentielle aux dérivées partielles, il faut spécifier le potentiel $V(x)$ ainsi que les conditions aux limites.

On se limitera à des formes de potentiel très simplifiées afin de pouvoir résoudre sans difficulté l'équation de Schrödinger comme le saut de potentiel et la barrière de potentiel.

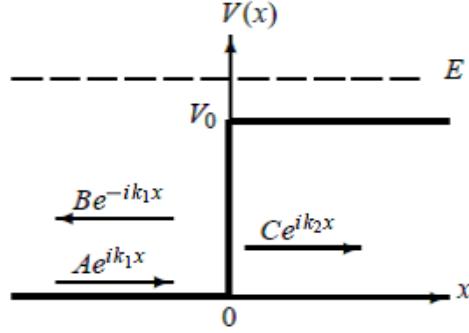
1.2 Saut de potentiel

Il est défini par

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < 0 \quad (\text{région I}) \\ V_0 & \text{si } x > 0 \quad (\text{région II}) \end{cases} \quad (1.2)$$

L'énergie E de la particule doit être positive afin que l'onde incidente soit une onde de propagation. On supposera que la particule vient du côté négatif de l'axe des abscisses x . Nous allons distinguer deux cas : $E > V_0$ et $E < V_0$.

a) $E > V_0$:



i) Région $x < 0$: l'équation de Schrödinger s'écrit

$$\frac{p^2}{2m}\psi_I(x) = E\psi_I(x) \quad (1.3)$$

avec $p = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$ c'est-à-dire

$$\frac{\partial^2 \psi_I(x)}{\partial x^2} + k_1^2 \psi_I(x) = 0 \quad (1.4)$$

où on a posé $\frac{2mE}{\hbar^2} = k_1^2$. La solution générale est alors donnée par

$$\psi_I(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \quad (1.5)$$

L'onde incidente est représentée par le terme e^{ik_1x} et qui correspond à une onde plane allant de gauche vers la droite. Lorsque la particule arrive en $x = 0$, elle peut soit être réfléchie, soit être transmise. L'onde réfléchie est représentée par le terme e^{-ik_1x} .

ii) Région $x > 0$: l'équation de Schrödinger s'écrit

$$\frac{p^2}{2m}\psi_{II}(x) + V_0\psi_{II}(x) = E\psi_{II}(x), \quad (1.6)$$

c'est-à-dire

$$\frac{\partial^2 \psi_{II}(x)}{\partial x^2} + k_2^2 \psi_{II}(x) = 0, \quad (1.7)$$

avec $\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2} = k_2^2$. La solution générale est

$$\psi_{II}(x) = Ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x}. \quad (1.8)$$

Le premier terme en e^{ik_2x} correspond à une onde plane allant de gauche vers la droite : il représente donc l'onde transmise. Par contre le second terme représente une onde venant de $+\infty$ allant vers la gauche. Comme nous n'avons pas de particule qui provient dans ce sens, nous poserons $D = 0$, la solution précédente se réduit à

$$\psi_{II}(x) = Ce^{ik_2x} \quad (1.9)$$

Conditions aux limites : La fonction $\psi(x)$ et sa première dérivée $\psi'(x)$ doivent être continues en $x = 0$. C'est-à-dire

$$\begin{cases} \psi_I(0^-) = \psi_{II}(0^+) \\ \psi'_I(0^-) = \psi'_{II}(0^+) \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} A + B = C \\ A - B = \frac{k_2}{k_1}C \end{cases}$$

d'où on tire les rapports

$$\frac{B}{A} = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \quad \text{et} \quad \frac{C}{A} = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}$$

Nous montrons (exercice) que le courant de Schrödinger à une dimension est donné par

$$j = \frac{\hbar}{2im} \left(\psi^* \frac{d\psi}{dx} - \psi \frac{d\psi^*}{dx} \right) \quad (1.10)$$

le courant incident

$$\begin{aligned} j_{inc} &= \frac{\hbar}{2im} \left(\psi_{inc}^* \frac{d\psi_{inc}}{dx} - \psi_{inc} \frac{d\psi_{inc}^*}{dx} \right), \quad \psi_{inc} = Ae^{ik_1 x} \\ &= \frac{\hbar}{2im} (ik_1 |A|^2 + ik_1 |A|^2) \\ &= \frac{\hbar k_1}{m} |A|^2 \end{aligned}$$

le courant réfléchi

$$\begin{aligned} j_r &= \frac{\hbar}{2im} \left(\psi_r^* \frac{d\psi_r}{dx} - \psi_r \frac{d\psi_r^*}{dx} \right), \quad \psi_r = Be^{-ik_1 x} \\ &= \frac{\hbar}{2im} (-ik_1 |B|^2 - ik_1 |B|^2) \\ &= -\frac{\hbar k_1}{m} |B|^2 \end{aligned}$$

le courant transmis

$$\begin{aligned} j_t &= \frac{\hbar}{2im} \left(\psi_t^* \frac{d\psi_t}{dx} - \psi_t \frac{d\psi_t^*}{dx} \right), \quad \psi_t = Ce^{ik_2 x} \\ &= \frac{\hbar}{2im} (ik_2 |C|^2 + ik_2 |C|^2) \\ &= \frac{\hbar k_2}{m} |C|^2 \end{aligned}$$

Le coefficient (la probabilité) de réflexion s'exprime par

$$R = \left| \frac{j_r}{j_{inc}} \right| = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left| \frac{B}{A} \right|^2 \quad (1.11)$$

c-à-d

$$R = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2 = \left(\frac{1 - \sqrt{1 - \frac{V_0}{E}}}{1 + \sqrt{1 - \frac{V_0}{E}}} \right)^2. \quad (1.12)$$

Le coefficient de transmission est

$$T = \left| \frac{j_t}{j_{inc}} \right| = \frac{k_2}{k_1} \left| \frac{C}{A} \right|^2 = \frac{k_2}{k_1} \left(\frac{2k_1}{k_1 + k_2} \right)^2,$$

c-à-d

$$T = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}. \quad (1.13)$$

On remarque que

$$\boxed{R + T = 1} \quad (1.14)$$

Dans une situation analogue en mécanique classique, la particule serait toujours transmise, alors qu'en mécanique quantique elle a une probabilité non nulle d'être réfléchie.

b) $E < V_0$:

i) Région $x < 0$: l'équation de Schrödinger reste la même, c-à-d la solution est toujours

$$\psi_I(x) = A e^{ik_1 x} + B e^{-ik_1 x} \quad (1.15)$$

ii) Région $x > 0$: l'équation de Schrödinger s'écrit dans ce cas

$$\frac{\partial^2 \psi_{II}(x)}{\partial x^2} - k_2^2 \psi_{II}(x) = 0 \quad (1.16)$$

avec $2m(V_0 - E)/\hbar^2 = k_2^2$ et donc la solution générale est

$$\psi_{II}(x) = C e^{k_2 x} + D e^{-k_2 x} \quad (1.17)$$

L'exponentielle $e^{k_2 x}$ diverge et ne représente donc pas une solution physique. On doit poser $C = 0$. La solution dans cette région est

$$\psi_{II}(x) = D e^{-k_2 x}$$

$\psi_{II}(x) \rightarrow 0$ à l'infini ; c'est une onde évanescante. Il n'y a pas d'onde transmise. Les conditions aux limites s'écrivent

$$\begin{cases} \psi_I(0^-) = \psi_{II}(0^+) \\ \psi'_I(0^-) = \psi'_{II}(0^+) \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} A + B = D \\ A - B = i \frac{k_2}{k_1} D \end{cases}$$

d'où on tire le rapport

$$\frac{B}{A} = \frac{k_1 - ik_2}{k_1 + ik_2} \quad (1.18)$$

Le coefficient (la probabilité) de réflexion s'exprime par

$$\begin{aligned} R &= \left| \frac{j_r}{j_{inc}} \right| = \left| \frac{B}{A} \right|^2 = \left| \frac{k_1 - ik_2}{k_1 + ik_2} \right|^2 \\ &\Rightarrow \boxed{R = 1} \end{aligned} \quad (1.19)$$

Remarque : le coefficient de réflexion R dépend de la valeur de E par rapport à V_0

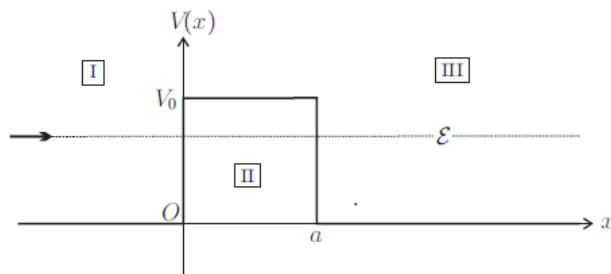
$$R = \begin{cases} 1 & \text{si } E < V_0 \\ \left(\frac{1 - \sqrt{1 - \frac{V_0}{E}}}{1 + \sqrt{1 - \frac{V_0}{E}}} \right)^2 & \text{si } E > V_0 \end{cases} \quad (1.20)$$

1.3 Barrière de potentiel

La barrière de potentiel est définie par

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < 0 \quad (\text{région I}) \\ V_0 & \text{si } 0 < x < a \quad (\text{région II}) \\ 0 & \text{si } x > a \quad (\text{région III}) \end{cases}$$

Du point de vue de la physique classique : la traversée de la barrière est possible si $E > V_0$. Par contre pour $E < V_0$, il est impossible. Qu'en est-il en mécanique quantique ? Pour fixer les idées, on va considérer uniquement le cas $E < V_0$.



i) Région (I) $x < 0$: comme dans le cas du saut de potentiel, la solution de l'équation de Schrödinger dans cette région est

$$\psi_I(x) = Ae^{ik_1 x} + Be^{-ik_1 x} \quad (1.21)$$

avec $\frac{2mE}{\hbar^2} = k_1^2$.

ii) Région (II) $0 < x < a$: l'équation de Schrödinger s'écrit

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi_{II}(x)}{\partial x^2} + V_0 \psi_{II}(x) = E \psi_{II}(x)$$

sa solution est

$$\psi_{II}(x) = C e^{k_2 x} + D e^{-k_2 x} \quad (1.22)$$

où $2m(V_0 - E)/\hbar^2 = k_2^2$.

iii) Région (III) $x > a$: la solution est

$$\psi_{III}(x) = F e^{ik_1 x} + G e^{-ik_1 x} \quad (1.23)$$

Comme on n'a pas d'onde venant de $+\infty$ allant vers la gauche (il y a pas d'obstacle à $+\infty$) on pose $G = 0$.

Conditions aux limites : $\psi(x)$ et $\psi'(x)$ doivent être continues en $x = 0$ et $x = a$.

Continuité en $x = 0$:

$$\begin{cases} \psi_I(0) = \psi_{II}(0) \\ \psi'_I(0) = \psi'_{II}(0) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} A + B = C + D \\ i \frac{k_1}{k_2} (A - B) = C - D \end{cases}, \quad (1.24)$$

ainsi on peut obtenir C et D en fonction de A et B

$$C = \frac{1}{2} \left[\left(1 + i \frac{k_1}{k_2} \right) A + \left(1 - i \frac{k_1}{k_2} \right) B \right] \quad (1.25)$$

$$D = \frac{1}{2} \left[\left(1 - i \frac{k_1}{k_2} \right) A + \left(1 + i \frac{k_1}{k_2} \right) B \right] \quad (1.26)$$

Continuité en $x = a$:

$$\begin{cases} \psi_{II}(a) = \psi_{III}(a) \\ \psi'_{II}(a) = \psi'_{III}(a) \end{cases}$$

ce qui donne

$$C e^{k_2 a} + D e^{-k_2 a} = F e^{ik_1 a} \quad (1.27)$$

$$k_2 C e^{k_2 a} - k_2 D e^{-k_2 a} = i k_1 F e^{ik_1 a} \quad (1.28)$$

remplaçons (1.25) et (1.26) dans (1.27) et (1.28) on obtient

$$\begin{aligned} & \left\{ \left(1 + i \frac{k_1}{k_2} \right) e^{k_2 a} + \left(1 - i \frac{k_1}{k_2} \right) e^{-k_2 a} \right\} A \\ & + \left\{ \left(1 - i \frac{k_1}{k_2} \right) e^{k_2 a} + \left(1 + i \frac{k_1}{k_2} \right) e^{-k_2 a} \right\} B = 2 F e^{ik_1 a} \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned} & \left\{ \left(1 + i \frac{k_1}{k_2} \right) e^{k_2 a} - \left(1 - i \frac{k_1}{k_2} \right) e^{-k_2 a} \right\} A \\ & + \left\{ \left(1 - i \frac{k_1}{k_2} \right) e^{k_2 a} - \left(1 + i \frac{k_1}{k_2} \right) e^{-k_2 a} \right\} B = 2i \frac{k_1}{k_2} F e^{ik_1 a} \end{aligned}$$

On pourra ainsi déterminer les rapports $\frac{B}{A}$ et $\frac{F}{A}$ et par suite calculer les coefficients de réflexion et de transmission, on obtient (exercice)

$$\begin{aligned} R &= \left| \frac{j_r}{j_{inc}} \right| = \left| \frac{B}{A} \right|^2 = \frac{1}{1 + \frac{4k_1^2 k_2^2}{(k_1^2 + k_2^2)^2 \sinh^2(k_2 a)}} \\ T &= \left| \frac{j_t}{j_{inc}} \right| = \left| \frac{F}{A} \right|^2 = \frac{1}{1 + \frac{(k_1^2 + k_2^2)^2 \sinh^2(k_2 a)}{4k_1^2 k_2^2}} \quad \text{avec } R + T = 1. \end{aligned}$$

On remarque ici que même pour $E < V_0$, la particule à une certaine probabilité d'être transmise, ce qui est contraire à la physique classique. Ce phénomène est appelé effet tunnel.

1.4 Oscillateur harmonique à une dimension

Considérons une particule de masse m soumise à un oscillateur harmonique de fréquence ω dont l'hamiltonien est

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

introduisons l'opérateur de création

$$a^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} p \quad (1.29)$$

et son transposé, l'opérateur d'annihilation

$$a = (a^+)^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} p \quad (1.30)$$

l'opérateur nombre de particules $N = a^+ a$ est donc

$$\begin{aligned} N &= \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} p \right) \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} p \right) \\ &= \frac{m\omega}{2\hbar} x^2 + \frac{1}{2m\hbar\omega} p^2 + \frac{i}{2\hbar} (xp - px) \\ &= \frac{1}{\hbar\omega} \left(\frac{1}{2} m\omega^2 x^2 + \frac{1}{2m} p^2 \right) - \frac{1}{2} \end{aligned}$$

Donc

$$H = \hbar\omega \left(N + \frac{1}{2} \right) \quad (1.31)$$

La recherche des valeurs propres de l'Hamiltonien H se réduit donc à la recherche de valeurs propres λ et les vecteurs propres $|\lambda\rangle$ de N

$$N |\lambda\rangle = \lambda |\lambda\rangle \quad (1.32)$$

L'opérateur N est hermitique puisque $N = (a^+a)^+ = a^+a$ donc les valeurs propres λ de N sont réelles

$$\lambda^* = \lambda = \langle \lambda | N | \lambda \rangle = \langle \lambda | a^+a | \lambda \rangle \quad (1.33)$$

le bras $\langle \lambda | a^+$ est le transposé de $a | \lambda \rangle$ donc λ représente la norme (positive ou nulle) du vecteur $a | \lambda \rangle$

$$\lambda = \|a | \lambda \rangle\| \geq 0 \quad (1.34)$$

si $\lambda = 0$, alors suivant (1.34) la norme $\|a | 0 \rangle\| = 0$. Ainsi

$$a | 0 \rangle = 0 \quad (1.35)$$

Utilisons les relations (1.29) et (1.30), on peut montrer (exercice) :

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

Cela donne les relations suivantes

$$\begin{aligned} Na &= (a^+a) a = (aa^+ - 1) a = aa^+a - a \\ &= a(a^+a - 1) \\ \Rightarrow Na &= a(N - 1) \end{aligned} \quad (1.36)$$

ce qui correspond à la relation de commutation

$$[N, a] = -a$$

de même pour l'opérateur de création :

$$Na^+ = a^+(aa^+) = a^+(a^+a + 1) = a^+(N + 1)$$

ce qui correspond à la relation de commutation

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

Appliquons maintenant la relation (1.36) au vecteur $|\lambda\rangle$, il vient

$$\begin{aligned} N(a|\lambda\rangle) &= a(N-1)|\lambda\rangle = a(\lambda-1)|\lambda\rangle \\ N(a|\lambda\rangle) &= (\lambda-1)(a|\lambda\rangle) \end{aligned} \quad (1.37)$$

ainsi le vecteur $a|\lambda\rangle$ est un vecteur propre de N avec la valeur propre $(\lambda-1)$. D'autre part, on a

$$N|\lambda-1\rangle = (\lambda-1)|\lambda-1\rangle \quad (1.38)$$

Comparons (1.37) et (1.38), on obtient

$$a|\lambda\rangle = c|\lambda-1\rangle \quad (1.39)$$

or $\langle\lambda|\lambda'\rangle = \delta_{\lambda,\lambda'}$ on peut écrire alors

$$\langle\lambda|a^+a|\lambda\rangle = \langle\lambda-1|c^*c|\lambda-1\rangle = |c|^2 \quad (1.40)$$

de (1.34) et (1.40), on déduit

$$c = \sqrt{\lambda}$$

la relation (1.39) s'écrit donc comme

$$a|\lambda\rangle = \sqrt{\lambda}|\lambda-1\rangle \quad (1.41)$$

Alors

$$\begin{aligned} a^2|\lambda\rangle &= aa|\lambda\rangle = \sqrt{\lambda}a|\lambda-1\rangle = \sqrt{\lambda(\lambda-1)}|\lambda-2\rangle \\ &\vdots \\ a^n|\lambda\rangle &= \sqrt{\lambda(\lambda-1)\dots(\lambda-n+1)}|\lambda-n\rangle \end{aligned}$$

Supposons que $a^n|\lambda\rangle \neq 0$. Ainsi, on remarque tout de suite que

$$N(a^n|\lambda\rangle) = (\lambda-n)(a^n|\lambda\rangle) \quad (1.42)$$

alors $a^n|\lambda\rangle$ est un vecteur propre de N avec la valeur propre $\lambda-n$. Mais $\lambda-n < 0$ pour $\lambda < n$, ce qui contredit notre résultat précédent selon lequel la valeur propre de N doit être un nombre réel non négatif. Par conséquent, pour un λ donné, il doit exister un entier n tel que $a^n|\lambda\rangle \neq 0$ mais $a^{n+1}|\lambda\rangle = 0$ où $n \in \mathbb{N}$. C'est-à-dire

$$a|\lambda-n\rangle = 0 \Rightarrow \lambda-n = 0 \Rightarrow \lambda = n$$

En d'autres termes, les valeurs propres autorisées de N sont les entiers non négatifs $n = 0, 1, 2, \dots$. On montre d'une façon analogue (exercice)

$$\boxed{a^+ |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle} \quad (1.43)$$

Le spectre d'énergie est obtenu d'après (1.31)

$$\begin{aligned} H |n\rangle &= \hbar\omega \left(N + \frac{1}{2} \right) |n\rangle = E_n |n\rangle \\ \Rightarrow \boxed{E_n &= \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)} \end{aligned} \quad (1.44)$$

Les fonctions propres se déduisent les une des autres par application de l'opérateur de création a^+ ou l'opérateur d'annihilation a

$$\begin{aligned} |0\rangle & \\ |1\rangle &= a^+ |0\rangle \\ |2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} a^+ |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (a^+)^2 |0\rangle \\ &\vdots \\ \boxed{|n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^+)^n |0\rangle} \end{aligned} \quad (1.45)$$

Les valeurs propres de N constituent une base complète dans laquelle nous pouvons représenter l'oscillateur harmonique ; ceci est la représentation du nombre d'occupation $\{N\}$ ou l'espace de Fock engendré par les vecteurs $|n\rangle$ états propres de N avec

$$\begin{cases} N |n\rangle = n |n\rangle, & n = 0, 1, 2, \dots \\ \langle n |n' \rangle = \delta_{n,n'} \\ \sum_n |n\rangle \langle n| = 1 \end{cases}$$

1.5 Exercices

Exercice 01

Soit une particule qui se déplace sur l'axe des x . L'état quantique de cette particule est caractérisé par une fonction d'onde $\psi(x, t)$.

- i) Rappeler le postulat de Born donnant la probabilité dP que la particule se trouve dans l'intervalle $[x, x + dx]$ à l'instant t . En déduire la dimension de $\psi(x, t)$. Interpréter la propriété $\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dx = 1$.

- ii) Quelle est la signification physique de $\rho = |\psi(x, t)|^2$?
 iii) A partir de l'équation de Schrödinger

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

montrer l'équation de conservation de la probabilité de présence

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j} = 0$$

où \vec{j} est le courant de probabilité qu'on déterminera.

- iv) On cherche des états d'énergie stationnaire E de la forme $\psi(x, t) = \varphi(x) f(t)$. Déterminer l'équation de Schrödinger indépendante du temps vérifiée par $\varphi(x)$ et la forme générale de $\psi(x, t)$. Que peut-on dire de la probabilité de présence dP ?
 v) On définit une particule libre comme une particule de masse m , d'impulsion \vec{p} et d'énergie $E = p^2/2m > 0$ évoluant dans une région d'énergie potentielle $V(x)$ nulle. Déterminer la solution générale de l'équation de Schrödinger indépendante du temps pour une particule libre.
 vi) Montrer que sa fonction d'onde $\psi(x, t)$ est la somme de deux ondes planes se propageant en sens inverse.
 v) Définir le vecteur d'onde \vec{k} que l'on peut associer à cette particule. Déterminer la relation entre \vec{p} et \vec{k} . Comment s'appelle cette relation ?

Exercice 02

On considère une particule de masse m piégée dans un puits de potentiel. On suppose que le potentiel est nul pour $0 \leq x \leq a$ et infini (très grand), pour $x < 0$ et pour $x > a$.

- 1) Montrer la condition d'existence d'ondes stationnaires

$$a = n \frac{\lambda}{2}$$

où λ est la longueur d'onde.

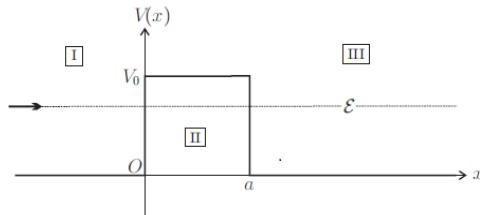
- 2) Montrer que les niveaux d'énergie sont donnés par l'expression

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2, \quad n = 1, 2, \dots$$

Exercice 03 (*Mines ponts/2016 adapté*)

Une particule d'énergie E arrive d'une région (I) définie par $x < 0$ et dans laquelle son énergie potentielle est $V(x) = 0$. Il est susceptible également de se trouver soit dans une région (II) telle que $0 < x < a$ où règne une énergie potentielle $V(x) = V_0$ ou bien dans une région

(III) définie par $x > a$, dans laquelle $V(x) = 0$ (voir figure). On supposera que $0 < E < V_0$ et l'on cherche des états stationnaires d'énergie E .



1) Rappeler brièvement ce que serait le comportement de cette particule s'il était régi par la mécanique classique.

2) Déterminer la forme générale de la solution de l'équation de Schrodinger indépendante du temps dans la région (I) et (III).

3) Déterminer la forme générale de la solution de l'équation de Schrodinger indépendante du temps dans la région (II). On posera $q = \sqrt{2m(V_0 - E)/\hbar}$.

4) Ecrire les conditions de continuité de la fonction d'onde en $x = 0$ et $x = a$ permettant d'écrire un système de 4 équations dont les 5 inconnues sont les constantes d'intégration des questions 2) et 3).

5) Quelle dernière hypothèse permet de définir complètement la fonction d'onde ?

6) Déterminer les courants de probabilité dans les régions (I) et (III) en fonction des constantes d'intégrations de la question 2). En déduire les coefficients de réflexion R et de transmission T caractérisant cette barrière d'énergie potentielle en fonction de ces mêmes constantes.

7) Montrer que

$$T = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0-E)} \sinh^2(qa)}$$

8) On considère que la particule est un électron de masse $m_e = 9,11 \times 10^{-31} \text{ kg}$ et d'énergie $E = 1,00 \text{ eV}$ évoluant dans le potentiel décrit sur la figure (1) avec $V_0 = 2,00 \text{ eV}$. Remplir le tableau suivant

| | | | |
|-----------------|-----|---|---|
| $a (\text{nm})$ | 0,5 | 1 | 2 |
| qa | | | |
| T | | | |

9) Définir ce que l'on appelle une barrière d'énergie potentielle épaisse et montrer que dans

ce cas

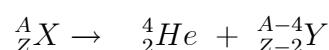
$$T \simeq T_0(E, V_0) e^{-2qa}$$

où l'on précisera l'expression de $T_0(E, V_0)$. En étudiant les variations de $T_0(E, V_0)$ pour $0 < E < V_0$, déduire que pour une barrière épaisse, l'on peut écrire

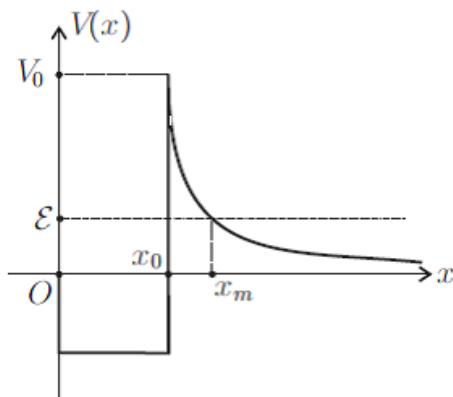
$$\ln(T) \approx -2qa.$$

Exercice 04 (*Mines ponts/2016 adapté*)

La radioactivité α est l'émission de noyaux d'hélium 4, appelés particules α , par des noyaux atomiques lourds (généralement tels que $Z > 82$), selon la réaction



dans laquelle A représente le nombre de nucléons (protons et neutrons) et Z le nombre de protons du noyau X . George Gamow fut le premier en 1928 à interpréter la radioactivité α grâce à l'effet tunnel. Il considéra que le noyau X était constitué au préalable de la particule α et du noyau Y . L'énergie potentielle $V(x)$ d'interaction entre ces deux particules est une fonction de la distance x qui les sépare dont l'allure est représentée sur la figure



- pour des grandes valeurs de x , cette énergie potentielle correspond à la répulsion électrostatique, et présente donc un profil coulombien de la forme $K/4\pi\epsilon_0 x$.
 - pour $x < x_0$, les interactions nucléaires attractives interviennent et l'énergie potentielle est un puits très profond.
 - pour l'uranium 238 : $Z = 92$ et $x_0 = 3,50 \times 10^{-15}$ m. La mesure de l'énergie E des particules α émises par ce noyau donne une valeur proche de 4,00 MeV.
- 1) i) Déterminer l'expression de la constante K en fonction de Z et de la charge élémentaire

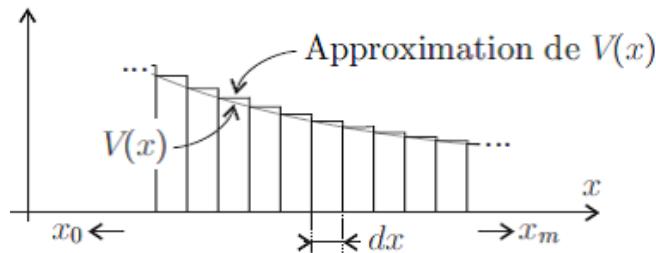
$$e = 1,61 \times 10^{-19} \text{ C.}$$

- ii) En déduire la hauteur V_0 de la barrière d'énergie potentielle à franchir.
- iii) Calculer la distance x_m à laquelle l'énergie potentielle coulombienne est égale à E .
- iv) Donner un ordre de grandeur de la largeur de la barrière d'énergie potentielle à franchir.

Peut-on considérer que la barrière est épaisse ?

On donne la masse de la particule α , $m_\alpha = 6,64 \times 10^{-27} \text{ kg}$ et on rappelle que $\frac{1}{4\pi\varepsilon_0} = 8,98 \times 10^9 \text{ SI}$.

2) Etant donné que la barrière d'énergie potentielle n'a pas la forme simple de celle étudiée dans l'exercice (3) (on ne peut donc plus utiliser directement l'approximation de T obtenue à la question 9). Pour $x > x_0$, on peut cependant approcher la fonction $V(x)$ par une succession de barrières rectangulaires de hauteur $V(x)$ et de largeur dx (voir figure) suffisamment épaisse pour pouvoir utiliser l'approximation.



3) En généralisant le résultat obtenu pour T en fonction de T_0 , déterminer $T(x + dx)$ en fonction de $T(x)$, q et dx . En considérant, pour simplifier la suite du calcul, que $qdx \ll 1$.

- i) Etablir la relation

$$\ln(T) \approx -\frac{2}{\hbar} \int_{x_0}^{x_m} \sqrt{2m_\alpha \left(\frac{K}{4\pi\varepsilon_0 x} - E \right)} dx$$

On admettra que

$$\int_{x_0}^{x_m} \sqrt{\frac{x_m}{x} - 1} dx \approx x_m \left(\frac{\pi}{2} - 2\sqrt{\frac{x_0}{x_m}} \right)$$

- ii) En déduire la loi de Gamow-Condon-Gurney, valable pour $\frac{x_0}{x_m} \ll 1$:

$$\ln(T) \approx a - \frac{b}{\sqrt{E}}$$

Dans laquelle on exprimera a et b en fonction des données du problème.

Chapitre 2

Moments cinétiques en mécanique quantique

2.1 Introduction

En mécanique quantique, le moment cinétique est un opérateur vectoriel dont les trois composantes ont des relations de commutation bien définies. Cet opérateur est l'analogue quantique du vecteur moment cinétique classique. Il joue un rôle central dans la théorie de la physique atomique et moléculaire et d'autres problèmes quantiques impliquant la symétrie rotationnelle. Le moment cinétique avec l'impulsion et l'énergie constituent les trois propriétés fondamentales du mouvement.

2.2 Moment cinétique orbital

En mécanique classique : le moment cinétique orbital \vec{L} d'une particule est défini par l'expression

$$\vec{L} = \vec{r} \wedge \vec{p} \quad (2.1)$$

où \vec{r} est le vecteur de position et \vec{p} le vecteur impulsion

$$\begin{aligned}\vec{r} &= x \vec{i} + y \vec{j} + z \vec{k} \\ \vec{p} &= p_x \vec{i} + p_y \vec{j} + p_z \vec{k}\end{aligned}$$

les composantes x_i et p_i avec $i = 1, 2, 3$ vérifient le crochet de Poisson suivant

$$\{x_i, p_j\} = \delta_{ij} \quad \text{où} \quad \delta_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{si } i \neq j \\ 1 & \text{si } i = j \end{cases} \quad (\text{le symbole de Kronecker})$$

avec les notations $x_1 = x$, $x_2 = y$, $x_3 = z$ et $p_1 = p_x$, $p_2 = p_y$, $p_3 = p_z$

En mécanique quantique : l'opérateur moment cinétique orbital $\widehat{\vec{L}}$ est défini comme l'opérateur vectoriel $\widehat{\vec{L}} = \widehat{\vec{r}} \wedge \widehat{\vec{p}}$ avec $\widehat{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$. En coordonnées cartésiennes, il a les composantes

$$\widehat{\vec{L}} = \hat{L}_x \vec{i} + \hat{L}_y \vec{j} + \hat{L}_z \vec{k}$$

avec

$$\begin{cases} \hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y \\ \hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z \\ \hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x \end{cases} \quad (2.2)$$

où les opérateurs \hat{x}_i et \hat{p}_j vérifient au lieu de crochet de Poisson le commutateur

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij} \quad (2.3)$$

A partir de maintenant, on va omettre de mettre les chapeaux sur les opérateurs pour simplifier l'écriture.

On peut montrer d'après (2.2) et (2.3) que les composantes L_x , L_y et L_z obéissent aux relations de commutation cycliques

$$\begin{cases} [L_x, L_y] = i\hbar L_z \\ [L_y, L_z] = i\hbar L_x \\ [L_z, L_x] = i\hbar L_y \end{cases} \quad (2.4)$$

en effet,

$$\begin{aligned} [L_x, L_y] &= [yp_z - zp_y, zp_x - xp_z] = [yp_z, zp_x] - [yp_z, xp_z] - [zp_y, zp_x] + [zp_y, xp_z] \\ &= y[p_z, z]p_x + x[z, p_z]p_y = i\hbar(xp_y - yp_x) = i\hbar L_z \end{aligned}$$

on peut montrer aussi que le carré du moment orbital $L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$ commute avec toutes les composantes de \vec{L} (exercice)

$$[L^2, L_x] = [L^2, L_y] = [L^2, L_z] = 0 \quad (2.5)$$

Remarque : on peut représenter le moment orbital en coordonnées sphériques (r, θ, φ) , en particulier nous pouvons montrer que les opérateurs L^2 et L_z s'écrivent

$$L_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (2.6)$$

$$L^2 = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2(\theta)} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \quad (2.7)$$

Valeurs propres de L^2 et L_z et harmoniques sphériques

Les équations aux valeurs propres de L^2 et L_z sont

$$L^2 Y_\ell^m(\theta, \varphi) = a \hbar^2 Y_\ell^m(\theta, \varphi) \quad (2.8)$$

$$L_z Y_\ell^m(\theta, \varphi) = b \hbar Y_\ell^m(\theta, \varphi) \quad (2.9)$$

le moment cinétique orbital a la dimension de \hbar et les constantes a et b sont sans dimensions.
On peut montrer que

$$a = \ell(\ell+1) \quad \text{où } \ell = 0, 1, 2, \dots$$

$$b = m \quad \text{où } m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

les fonctions propres $Y_\ell^m(\theta, \varphi)$ sont appelées *harmoniques sphériques*. Elles sont données par l'expression

$$Y_\ell^m(\theta, \varphi) = (-1)^m \sqrt{\frac{(2\ell+1)(\ell-m)!}{4\pi(\ell+m)!}} P_\ell^m(\cos \theta) e^{im\varphi}, \quad (2.10)$$

$$|m| \leq \ell \Leftrightarrow -\ell \leq m \leq \ell$$

où $P_\ell^m(\cos \theta)$ est le polynôme de Legendre associé défini par

$$\begin{aligned} P_\ell^m(x) &= (1-x^2)^{|m|/2} \frac{d^{|m|}}{dx^{|m|}} (P_\ell(x)), \quad |m| \leq \ell \\ P_\ell(x) &= \frac{1}{2^\ell \ell!} \frac{d^\ell}{dx^\ell} (x^2 - 1)^\ell. \end{aligned}$$

Calculons par exemple la première fonction $Y_0^0(\theta, \varphi)$:

$$\begin{aligned} Y_0^0(\theta, \varphi) &= (-1)^0 \sqrt{\frac{1}{4\pi}} P_0^0(\cos \theta) e^0 \\ x = \cos \theta \Rightarrow P_0^0(\cos \theta) &= P_0^0(x) = P_0(x) = \frac{1}{2^0 0!} (x^2 - 1)^0 = 1 \\ Y_0^0(\theta, \varphi) &= \sqrt{\frac{1}{4\pi}} \end{aligned}$$

de même pour $Y_1^0(\theta, \varphi)$

$$\begin{aligned} Y_1^0(\theta, \varphi) &= (-1)^0 \sqrt{\frac{(2+1)(1-0)!}{4\pi(1+0)!}} P_1^0(\cos \theta), \quad x = \cos \theta \\ &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} P_1^0(x) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} P_1(x) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{1}{2} \frac{d}{dx} (x^2 - 1) \\ &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} x = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \end{aligned}$$

on obtient également les fonctions $Y_1^{\pm 1}(\theta, \varphi)$ comme

$$Y_1^{\pm 1}(\theta, \varphi) = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi}$$

Quelques propriétés des harmoniques sphériques

i) La normalisation

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi [Y_{\ell'}^{m'}(\theta, \varphi)]^* Y_\ell^m(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta d\varphi = \delta_{\ell, \ell'} \delta_{m, m'} \quad (2.11)$$

ii) Toute fonction $f(\theta, \varphi)$ à carré intégrable peut être développée d'une façon unique sur les harmoniques sphériques

$$f(\theta, \varphi) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} a_{\ell, m} Y_\ell^m(\theta, \varphi) \quad (2.12)$$

iii) les $Y_\ell^m(\theta, \varphi)$ vérifient la relation

$$Y_\ell^{-m}(\theta, \varphi) = (-1)^m [Y_\ell^m(\theta, \varphi)]^* \quad (2.13)$$

En notation de Dirac, on peut écrire les $Y_\ell^m(\theta, \varphi)$ comme suit

$$Y_\ell^m(\theta, \varphi) = \langle \theta, \varphi | \ell, m \rangle \quad (2.14)$$

les relations de complétude et normalisation sont notées comme

$$\sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} |\ell, m\rangle \langle \ell, m| = 1 \quad (2.15)$$

$$\langle \ell', m' | \ell, m \rangle = \delta_{\ell', \ell} \delta_{m', m} \quad (2.16)$$

$|\ell, m\rangle$ est un ket propre de L^2 et L_z donc on écrit également

$$L^2 |\ell, m\rangle = \hbar^2 \ell (\ell + 1) |\ell, m\rangle \quad (2.17)$$

$$L_z |\ell, m\rangle = \hbar m |\ell, m\rangle \quad (2.18)$$

Les Opérateurs d'échelle L_+ et L_-

Il est utile de définir les opérateurs d'échelle L_+ et L_- , adjoints l'un de l'autre

$$L_+ = L_x + iL_y \quad (2.19)$$

$$L_- = L_x - iL_y \quad (2.20)$$

En coordonnées sphériques ces deux opérateurs s'écrivent

$$L_{\pm} = \hbar e^{\pm i\varphi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial\theta} + i \cot\theta \frac{\partial}{\partial\varphi} \right) \quad (2.21)$$

leurs actions sur les $Y_{\ell}^m(\theta, \varphi)$ sont

$$L_{\pm} Y_{\ell}^m(\theta, \varphi) = \hbar \sqrt{\ell(\ell+1) - m(m \pm 1)} Y_{\ell}^{m \pm 1}(\theta, \varphi) \quad (2.22)$$

on écrit aussi en notation de Dirac

$$L_{\pm} |\ell, m\rangle = \hbar \sqrt{\ell(\ell+1) - m(m \pm 1)} |\ell, m \pm 1\rangle \quad (2.23)$$

notons ici que les kets $|\ell, m\rangle$ ne sont pas kets propres de L_{\pm} .

Exercice : Vérifier que

$$L^2 = \frac{1}{2} [L_+ L_- + L_- L_+] + L_z^2$$

$$[L_+, L_-] = 2\hbar L_z$$

$$[L_z, L_{\pm}] = \pm \hbar L_{\pm}$$

2.3 Moment cinétique de spin

Le moment cinétique de spin est une forme intrinsèque propre à la particule qui n'a pas d'équivalent classique. L'existence de spin des particules est déduite de l'expérience telle que l'expérience de Stern et Gerlach. Il est donc soumis aux mêmes lois générales qui régissent tout autre moment cinétique quantique, tel que, par exemple, le moment cinétique orbital. Le spin est représenté généralement par l'opérateur hermitien \vec{S} de composantes S_x, S_y et S_z . Il existe pour l'opérateur spin une base de vecteurs propres notés $|s, m\rangle$, où s est entier ou demi-entier positif, et m est un entier ou demi-entier prenant l'une des $2s + 1$ valeurs $-s \leq m_s \leq s$ tels que

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

$$S_z |s, m\rangle = \hbar m |s, m\rangle$$

Le nombre s est un nombre quantique, qui est aussi appelé le spin. Toutes les particules connues ont un nombre quantique de spin compris entre 0 et 2. C'est en particulier le cas des particules élémentaires.

$s = 1/2$: l'électron, le positron, les neutrinos, les quarks, etc. ;

$s = 1$: le photon.

$s = 2$: le graviton, particule hypothétique, qui serait vecteur de la gravitation.

2.4 Théorie générale des moments cinétiques

En mécanique quantique, on appelle moment cinétique tout opérateur hermitique \vec{J} de composantes J_x , J_y et J_z vérifiant les relations de commutations suivantes

$$\begin{cases} [J_x, J_y] = i\hbar J_z \\ [J_y, J_z] = i\hbar J_x \\ [J_z, J_x] = i\hbar J_y \end{cases} \quad (2.24)$$

comme dans le cas du moment orbital, on peut montrer les relations

$$[J^2, J_x] = [J^2, J_y] = [J^2, J_z] = 0 \quad (2.25)$$

où $J^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$. On définit également les opérateurs d'échelle

$$J_{\pm} = J_x \pm iJ_y \quad (2.26)$$

on peut aussi montrer les relations (exercice)

$$\begin{aligned} [J^2, J_+] &= [J^2, J_-] = 0 \\ [J_z, J_{\pm}] &= \pm\hbar J_{\pm} \\ [J_+, J_-] &= 2\hbar J_z \\ J^2 &= \frac{1}{2} [J_+ J_- + J_- J_+] + J_z^2 \\ J_- J_+ &= J^2 - J_z^2 - \hbar J_z \\ J_+ J_- &= J^2 - J_z^2 + \hbar J_z \end{aligned}$$

Valeurs propres de J^2 et J_z

Soit $\{|j, m\rangle\}$ une base propre commune à J^2 et J_z on écrit ainsi

$$\begin{cases} J^2 |j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1) |j, m\rangle \\ J_z |j, m\rangle = \hbar m |j, m\rangle \end{cases} \quad (2.27)$$

où $-j \leq m \leq j \Leftrightarrow m = -j, -j+1, \dots, j-1, j$ et de plus nous avons

$$J_{\pm} |j, m\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} |j, m \pm 1\rangle \quad (2.28)$$

et comme $\{|j, m\rangle\}$ est une base complète on écrit également

$$\sum_{m=-j}^j |j, m\rangle \langle j, m| = 1$$

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

L'espace des états $\xi(j)$ à j fixé, engendré par la base $\{|j, m\rangle\}$, est de dimension $2j + 1$.

Exercice d'application

Soit le moment cinétique de spin $s = 1/2$. L'espace $\xi(s = 1/2)$ est engendré par les kets $\{|1/2, m\rangle\}$.

- i) Quelles sont les valeurs possibles de m .
- ii) En déduire la dimension de l'espace $\xi(s = 1/2)$.
- iii) Trouver les matrices représentatives de S^2 , S_z , S_+ , et S_- .

En déduire celles de S_x et S_y

iv) On pose $\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$ où $\vec{\sigma}$ est un opérateur de composantes σ_x , σ_y et σ_z appelées matrices de Pauli. Vérifier ainsi qu'on a

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1_2 \quad (\text{matrice unité } 2 \times 2)$$

$$[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z, \quad [\sigma_y, \sigma_z] = 2i\sigma_x, \quad [\sigma_z, \sigma_x] = 2i\sigma_y$$

Solution

- i) Les valeurs possibles de m sont : $-\frac{1}{2} \leq m \leq \frac{1}{2} \Rightarrow m = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$.
- ii) La dimension de l'espace $\xi(s = 1/2)$ est $\dim(\xi) = 2s + 1 = 2$. Cet espace est engendré par la base $\{| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \rangle, | \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle\}$.
- iii) Matrice représentative de S^2 . On a

$$S^2 | \frac{1}{2}, m \rangle = \hbar^2 \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) | \frac{1}{2}, m \rangle = \frac{3}{4} \hbar^2 | \frac{1}{2}, m \rangle$$

comme la base $\{|\frac{1}{2}, m\rangle\}$ est une base propre de S^2 , la matrice représentative est diagonale et les éléments de cette matrice sont donnés par

$$\langle \frac{1}{2}, m' | S^2 | \frac{1}{2}, m \rangle = \frac{3}{4}\hbar^2 \langle \frac{1}{2}, m' | \frac{1}{2}, m \rangle = \frac{3}{4}\hbar^2 \delta_{m,m'}$$

ou explicitement

$$S^2 = \begin{pmatrix} \frac{3}{4}\hbar^2 & 0 \\ 0 & \frac{3}{4}\hbar^2 \end{pmatrix} = \frac{3}{4}\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Matrice représentative de S_z :

on écrit

$$S_z |\frac{1}{2}, m\rangle = \hbar m |\frac{1}{2}, m\rangle$$

la base $\{|\frac{1}{2}, m\rangle\}$ est une base propre de S_z alors la matrice représentative coorespondante est diagonale. Les éléments de cette matrice sont donnés par

$$\langle \frac{1}{2}, m' | S_z | \frac{1}{2}, m \rangle = \hbar m \langle \frac{1}{2}, m' | \frac{1}{2}, m \rangle = \hbar m \delta_{m,m'}$$

ou explicitement

$$S_z = \begin{pmatrix} \frac{\hbar}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar}{2} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Matrice représentative de S_+ et S_- :

Les opérateurs d'échelle S_+ et S_- sont définis comme suit

$$S_{\pm} = S_x \pm iS_y$$

On a

$$\begin{aligned} S_+ |\frac{1}{2}, m\rangle &= \hbar \sqrt{\frac{1}{2}(\frac{1}{2} + 1) - m(m + 1)} |\frac{1}{2}, m + 1\rangle \\ &= \hbar \sqrt{\frac{3}{4} - m(m + 1)} |\frac{1}{2}, m + 1\rangle \end{aligned}$$

la base $\{|\frac{1}{2}, m\rangle\}$ n'est pas une base propre de S_+ ainsi la matrice représentative n'est pas diagonale. Les éléments de cette matrice sont donnés par

$$\begin{aligned} \langle \frac{1}{2}, m' | S_+ | \frac{1}{2}, m \rangle &= \hbar \sqrt{\frac{3}{4} - m(m + 1)} \langle \frac{1}{2}, m' | \frac{1}{2}, m + 1 \rangle \\ &= \hbar \sqrt{\frac{3}{4} - m(m + 1)} \delta_{m',m+1} \end{aligned}$$

ou explicitement

$$S_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

comme $S_- = (S_+)^+$ il vient

$$S_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

et par suite

$$\begin{aligned} S_x &= \frac{1}{2} (S_+ + S_-) = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ S_y &= \frac{1}{2i} (S_+ - S_-) = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

iv) On pose $\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$. Ainsi, on a

$$\begin{aligned} \sigma_x &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\ \Rightarrow \sigma_x^2 &= \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = 1_2 \end{aligned}$$

On montre également les commutateurs (exercice).

2.5 Addition de deux moments cinétiques

Soient maintenant deux systèmes physiques distincts (1) et (2) de moments cinétiques respectifs \vec{J}_1 et \vec{J}_2 . Les espaces vectoriels ξ_1 et ξ_2 associés sont engendrés respectivement par les vecteurs de base $|j_1, m_1\rangle$ et $|j_2, m_2\rangle$ avec

$$J_1^2 |j_1, m_1\rangle = \hbar j_1 (j_1 + 1) |j_1, m_1\rangle \quad (2.29)$$

$$J_2^2 |j_2, m_2\rangle = \hbar j_2 (j_2 + 1) |j_2, m_2\rangle \quad (2.30)$$

les nombres quantiques m_1 et m_2 prennent les valeurs

$$m_1 = -j_1, -j_1 + 1, \dots, j_1$$

$$m_2 = -j_2, -j_2 + 1, \dots, j_2$$

Les deux moments \vec{J}_1 et \vec{J}_2 commutent puisqu'ils se rapportent à des systèmes indépendants

$$\left[\vec{J}_1, \vec{J}_2 \right] = 0 \quad \text{c-à-d} \quad [J_{1\alpha}, J_{2\beta}] = 0 \quad \forall \alpha, \beta = x, y, z$$

Considérons maintenant le système formé par l'union des deux systèmes (1) et (2). Ce système global est caractérisé par le moment cinétique \vec{J} tel que

$$\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2 \quad (2.31)$$

de composante J_z suivant l'axe oz.

Les opérateurs J_1^2 , J_2^2 , J_{1z} et J_{2z} commutent entre eux et donc peuvent former un ECOC (ensemble complet des opérateurs qui commutent). Désignons par $|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle$ leurs vecteurs propres communs définis par le produit tensoriel suivant

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

ce que l'on écrit simplement comme

$$|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle = |j_1 m_1\rangle |j_2, m_2\rangle \quad (2.32)$$

Ainsi, l'ensemble $\{|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle\}$ forme une base standard de l'espace vectoriel du système global

$$\xi = \xi_1 \otimes \xi_2 \quad (2.33)$$

cet espace est de dimension $\dim(\xi) = \dim(\xi_1) \cdot \dim(\xi_2) = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$.

Par ailleurs, les opérateurs J_1^2 , J_2^2 , J^2 et J_z commutent également entre eux et peuvent former un ECOC. Ce qui conduit à une seconde base $\{|j_1, j_2, j, m\rangle\}$ notée simplement $\{|j, m\rangle\}$. On doit donc connaître les valeurs propres de J^2 et J_z .

i) *Valeurs propres de J_z* :

On a l'opérateur

$$J_z = J_{1z} + J_{2z} \quad (2.34)$$

son action sur le ket $|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle$ est

$$\begin{aligned} J_z |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle &= (J_{1z} + J_{2z}) |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle \\ &= J_{1z} |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle + J_{2z} |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle \\ &= J_{1z} |j_1 m_1\rangle |j_2, m_2\rangle + J_{2z} |j_1 m_1\rangle |j_2, m_2\rangle \\ &= \hbar m_1 |j_1 m_1\rangle |j_2, m_2\rangle + \hbar m_2 |j_1 m_1\rangle |j_2, m_2\rangle \\ &= \hbar(m_1 + m_2) |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle \end{aligned}$$

multiplions à gauche le bra $\langle j, m |$ il vient

$$\langle j, m | J_z | j_1, j_2, m_1, m_2 \rangle = \langle j, m | \hbar(m_1 + m_2) | j_1, j_2, m_1, m_2 \rangle$$

c-à-d

$$\hbar m \langle j, m | j_1, j_2, m_1, m_2 \rangle = \hbar(m_1 + m_2) \langle j, m | j_1, j_2, m_1, m_2 \rangle$$

d'où on tire la relation

$$\boxed{m = m_1 + m_2} \quad (2.35)$$

comme

$$\begin{cases} -j_1 \leq m_1 \leq j_1 \\ -j_2 \leq m_2 \leq j_2 \end{cases} \Rightarrow -(j_1 + j_2) \leq m \leq j_1 + j_2$$

ii) *Valeurs propres de J^2 .*

On a $m = m_1 + m_2$ et comme les valeurs maximales de m_1 et m_2 sont $(m_1)_{\max} = j_1$ et $(m_2)_{\max} = j_2$ on a $m_{\max} = j_1 + j_2$ mais $|m| \leq j$ il s'ensuit que

$$j_{\max} = j_1 + j_2 \quad (2.36)$$

Pour trouver la valeur minimale j_{\min} de j , on utilise le fait qu'il existe $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ vecteurs propres $|j, m\rangle$. Pour chaque valeur de j correspond $(2j + 1)$ vecteurs propres $|j, m\rangle$, donc on a

$$\sum_{j=j_{\min}}^{j_{\max}} (2j + 1) = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1) \quad (2.37)$$

Soit la somme s telle que

$$s = \sum_{j=j_{\min}}^{j_{\max}} (2j + 1) = (2j_{\min} + 1) + (2j_{\min} + 3) + \dots + (2j_{\max} + 1)$$

qui s'écrit aussi comme suit

$$s = (2j_{\max} + 1) + (2j_{\max} - 1) + \dots + (2j_{\min} + 1)$$

Faisons la somme

$$2s = 2(j_{\max} + j_{\min} + 1) + 2(j_{\max} + j_{\min} + 1) + \dots + 2(j_{\max} + j_{\min} + 1)$$

c-à-d

$$s = (j_{\max} + j_{\min} + 1) + (j_{\max} + j_{\min} + 1) + \dots + (j_{\max} + j_{\min} + 1)$$

comme cette somme a $j_{\max} - j_{\min} + 1$ termes, on écrit

$$\begin{aligned}s &= \text{nombre de termes} \times \frac{\text{premier terme} + \text{dernier terme}}{2} \\ &= (j_{\max} - j_{\min} + 1) (j_{\max} + j_{\min} + 1)\end{aligned}$$

mais $j_{\max} = j_1 + j_2$ on

$$\begin{aligned}s &= (j_1 + j_2 + 1 - j_{\min}) (j_1 + j_2 + 1 + j_{\min}) \\ &= (j_1 + j_2 + 1)^2 - j_{\min}^2\end{aligned}$$

d'après (2.37) on obtient l'égalité

$$(j_1 + j_2 + 1)^2 - j_{\min}^2 = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$$

d'où on tire

$$j_{\min}^2 = (j_1 - j_2)^2 \Rightarrow j_{\min} = |j_1 - j_2|$$

Par suite, pour j_1 et j_2 fixés, les valeurs possibles de j sont

$$|j_1 - j_2| \leq j \leq |j_1 + j_2| \quad (2.38)$$

2.6 Coefficients de Clebsh-Gordan

Comme les deux bases $\{|j_1 j_2 m_1 m_2\rangle\}$ et $\{|jm\rangle\}$ sont complètes, on peut écrire

$$|jm\rangle = \sum_{m_1 m_2} |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle \langle j_1 j_2 m_1 m_2| jm\rangle$$

$$|jm\rangle = \sum_{m_1 m_2} \langle j_1 j_2 m_1 m_2| jm\rangle |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle$$

Les coefficients $\langle j_1 j_2 m_1 m_2| jm\rangle$ sont les éléments d'une matrice d'une transformation unitaire qui relie les deux bases $\{|jm\rangle\}$ et $\{|j_1 j_2 m_1 m_2\rangle\}$, ces coefficients s'appellent coefficients de Clebsh-Gordan (C-G).

Propriétés des coefficients de C-G

i) Règles de sélection : comme $J_z = J_{1z} + J_{2z}$, on a

$$(J_z - J_{1z} - J_{2z}) |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle = 0 \Rightarrow \langle jm| J_z - J_{1z} - J_{2z} |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle = 0$$

$$\hbar(m - m_1 - m_2) \langle jm| j_1 j_2 m_1 m_2\rangle = 0$$

Donc si

$$m \neq m_1 + m_2 \Rightarrow \langle jm | j_1 j_2 m_1 m_2 \rangle = 0 \quad (2.39)$$

et on a vu que

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

Alors les C-G sont *nuls* sauf si les deux conditions suivantes sont simultanément satisfaites

$$\boxed{\begin{cases} m = m_1 + m_2 \\ \text{et } |j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2 \end{cases}} \quad (2.40)$$

ces conditions sont connues comme les règles de sélection des C-G.

ii) Relations d'orthogonalité :

Comme les $\{|jm\rangle\}$ forment une base, on a l'orthogonalité

$$\langle j'm' | jm \rangle = \delta_{jj'} \delta_{mm'} \quad (2.41)$$

introduisons la relation de fermeture

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

comme

$$\begin{aligned} \langle j'm' | jm \rangle &= \langle j'm' | 1 | jm \rangle \\ &= \sum_{m_1 m_2} \langle j'm' | j_1 j_2 m_1 m_2 \rangle \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | jm \rangle \end{aligned}$$

il vient

$$\sum_{m_1 m_2} \langle j'm' | j_1 j_2 m_1 m_2 \rangle \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | jm \rangle = \delta_{j'j} \delta_{mm'}$$

c-à-d

$$\sum_{m_1 m_2} \langle jm | j_1 j_2 m_1 m_2 \rangle \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | jm \rangle = 1$$

iii) Les C-G sont *réels* par convention, par conséquent

$$\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | jm \rangle = \langle jm | j_1 j_2 m_1 m_2 \rangle$$

la relation d'orthogonalité précédente devient

$$\sum_{m_1 m_2} \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | jm \rangle^2 = 1$$

iv) Quelques relations usuelles des C-G :

$$\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | jm \rangle = (-1)^{j-j_1-j_2} \langle j_2 j_1 m_2 m_1 | jm \rangle \quad (2.42)$$

$$\langle j_1 j_2, -m_1, -m_2 | j, -m \rangle = (-1)^{j_1+j_2-j} \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | jm \rangle \quad (2.43)$$

$$\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 + j_2, m \rangle \geq 0 \quad (2.44)$$

$$\langle j, j, m, -m | 0, 0 \rangle = \frac{(-1)^{j-m}}{\sqrt{2j+1}} \quad (2.45)$$

Signalons aussi que les C-G peuvent être trouvés dans des tables spécifiques appelées Tables des C-G.

Calcul des C-G

En général, les C-G sont reliés par des relations de récurrence qu'on peut déterminer en appliquant les opérateurs J_{\pm} . La combinaison de ces relations de récurrence avec la condition de normalisation détermine tous les C-G mais avec un signe prés. Pour déterminer ce signe, il faut utiliser *la convention de phase* suivante

$$\boxed{\langle j_1, j_2, j_1, j - j_1, | j, j \rangle \text{ réel et } \geq 0} \quad (2.46)$$

Exercice d'application

On considère le couplage de deux spins $s_1 = s_2 = 1/2$. Ainsi, soit l'espace $\xi = \xi_1(s_1) \otimes \xi_2(s_2)$ engendré par la base $\{|s_1 s_2 m_1 m_2\rangle\}$ relative à l'ensemble $\{S_1^2, S_2^2, S_{1z}, S_{2z}\}$ et soit une deuxième base $\{|s_1, s_2, s, m\rangle\}$, notée simplement $\{|s, m\rangle\}$, relative à l'ensemble $\{S_1^2, S_2^2, S^2, S_z\}$.

(a) Quelle est la dimension de ξ ? Quelles sont les valeurs possibles de s ?

(b) Vérifier l'égalité

$$\sum_{s=s_{\min}}^{s_{\max}} (2s+1) = (2s_1+1)(2s_2+1)$$

(c) Pour le sous espace $\xi(s=0)$, montrer qu'on a

$$|00\rangle = a \left| s_1, s_2, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle + b \left| s_1, s_2, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle$$

où a et b sont des C-G à déterminer.

(d) Pour le sous espace $\xi(s=1)$, montrer que

$$|1, 1\rangle = \left| s_1, s_2, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle$$

En déduire $|1, 0\rangle$ et $|1, -1\rangle$.

(e) Trouver la matrice de transformation entre les deux bases, formée par les C-G, puis vérifier qu'elle est unitaire.

(f) Vérifier les résultats précédents à partir d'une table des C-G.

Solution

(a) La dimension de ξ est $\dim(\xi) = (2s_1 + 1)(2s_2 + 1) = 4$.

Comme $|s_1 - s_2| \leq s \leq |s_1 + s_2| \Rightarrow 0 \leq s \leq 1$ donc les valeurs possibles de s sont $s = 0, 1$.

(b) On a

$$\sum_{s=s_{\min}}^{s_{\max}} (2s + 1) = \sum_{s=0}^1 (2s + 1) = (2(0) + 1) + (2(1) + 1) \\ = 1 + 3 = 4 = (2s_1 + 1)(2s_2 + 1) \text{ donc l'égalité est vérifiée}$$

(c) Pour le sous espace $\xi(s = 0)$, on a

$$|0, 0\rangle = 1 |0, 0\rangle = \sum_{m_2=-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} \sum_{m_1=-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} |s_1, s_2 m_1 m_2\rangle \langle s_1, s_2 m_1 m_2 | 00\rangle \\ = \sum_{m_2=-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} \sum_{m_1=-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} \langle s_1, s_2 m_1 m_2 | 00\rangle |s_1, s_2 m_1 m_2\rangle \quad \text{avec } m_1 + m_2 = 0 \\ = \left\langle s_1, s_2 \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \middle| 00 \right\rangle \left| s_1, s_2 -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + \left\langle s_1, s_2 -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \middle| 00 \right\rangle \left| s_1, s_2 m_1 m_2 \right\rangle \\ \Rightarrow a = \left\langle s_1, s_2 \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \middle| 00 \right\rangle \quad \text{et} \quad b = \left\langle s_1, s_2 -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \middle| 00 \right\rangle$$

reste à déterminer les deux C-G a et b . Pour cela, utilisons la propriété

$$\langle j_1 j_2, -m_1, -m_2 | j, -m \rangle = (-1)^{j_1 + j_2 - j} \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | jm \rangle$$

donc

$$\left\langle s_1, s_2 \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \middle| 00 \right\rangle = (-1)^{s_1 + s_2 - 0} \left\langle s_1, s_2 -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \middle| 00 \right\rangle \\ = - \left\langle s_1, s_2 -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \middle| 00 \right\rangle \quad (\text{i})$$

La condition de normalisation

$$\sum_{s_1 s_2} \langle s_1 s_2 m_1 m_2 | jm \rangle^2 = 1$$

donne

$$\left\langle s_1, s_2, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \middle| 0, 0 \right\rangle^2 + \left\langle s_1, s_2, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \middle| 0, 0 \right\rangle^2 = 1 \quad (\text{ii})$$

de (i) et (ii) on a

$$\left\langle s_1, s_2, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \middle| 00 \right\rangle = \pm \frac{1}{\sqrt{2}}$$

mais comme $\langle j_1, j_2, j_1, j - j_1, | j, j \rangle \equiv \langle s_1, s_2, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} | 00 \rangle$ doit être positif par convention, donc les deux C-G sont

$$\left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \middle| 0, 0 \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \text{ et } \left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \middle| 0, 0 \right\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}}$$

Donc

$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\left| s_1, s_2, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle - \left| s_1, s_2, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \right]$$

(d) Le sous espace ξ ($s = 1$) engendré par la base $\{|1, 1\rangle, |1, 0\rangle, |1, -1\rangle\}$ donc

$$\begin{aligned} |1, 1\rangle &= \sum_{m_2=-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} \sum_{m_1=-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} |s_1, s_2, m_1, m_2\rangle \langle s_1, s_2, m_1, m_2| 1, 1\rangle, \text{ avec } m + m_2 = 1 \\ &= \left\langle s_1, s_2, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \middle| 1, 1 \right\rangle \left| s_1, s_2, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \end{aligned}$$

la condition de normalisation :

$$\left| \left\langle s_1, s_2, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \middle| 1, 1 \right\rangle \right|^2 = 1 \Rightarrow \left\langle s_1, s_2, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \middle| 1, 1 \right\rangle = \pm 1$$

mais comme $\langle j_1, j_2, j_1, j - j_1, | j, j \rangle \equiv \langle s_1, s_2, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | 1, 1 \rangle$ réel et > 0 . Donc

$$\left\langle s_1, s_2, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \middle| 1, 1 \right\rangle = 1$$

c-à-d

$$|1, 1\rangle = \left| s_1, s_2, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle$$

pour déduire $|1, 0\rangle$ et $|1, -1\rangle$ on peut appliquer l'opérateur S_- au ket $|11\rangle$, en effet :

$$\begin{aligned} S_- |1, 1\rangle &= [(S_1)_- + (S_2)_-] \left| s_1, s_2, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\ &\Rightarrow \hbar\sqrt{2} |1, 0\rangle = (S_1)_- \left| s_1, s_2, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + (S_2)_- \left| s_1, s_2, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\ &\Rightarrow \hbar\sqrt{2} |1, 0\rangle = (S_1)_- \left| s_1, \frac{1}{2} \right\rangle \left| s_2, \frac{1}{2} \right\rangle + (S_2)_- \left| s_1, \frac{1}{2} \right\rangle \left| s_2, -\frac{1}{2} \right\rangle \\ &\Rightarrow \hbar\sqrt{2} |1, 0\rangle = \hbar \left| s_1, -\frac{1}{2} \right\rangle \left| s_2, \frac{1}{2} \right\rangle + \hbar \left| s_1, \frac{1}{2} \right\rangle \left| s_2, -\frac{1}{2} \right\rangle \\ &\Rightarrow |1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \left| s_1, s_2, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + \left| s_1, s_2, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \right\} \end{aligned}$$

et de même

$$\begin{aligned} S_- |1, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} [(S_1)_- + (S_2)_-] \left\{ \left| s_1, s_2, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + \left| s_1, s_2, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \right\} \\ \Rightarrow \hbar\sqrt{2} |1, -1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} [(S_1)_-] \left| s_1, s_2, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} (S_2)_- \left\{ \left| s_1, s_2, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \right\} \\ \Rightarrow \hbar\sqrt{2} |1, -1\rangle &= \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \left| s_1, s_2, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle + \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \left| s_1, s_2, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\ \Rightarrow |1, -1\rangle &= \left| s_1, s_2, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \end{aligned}$$

e) Matrice de transformation entre les deux bases, formée par les C-G :

Ecrivons les relations entre les éléments des deux bases précédentes sous forme matricielle

$$\begin{pmatrix} |0, 0\rangle \\ |1, 1\rangle \\ |1, 0\rangle \\ |1, -1\rangle \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}}_{=U} \begin{pmatrix} |s_1, s_2, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \\ |s_1, s_2, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \\ |s_1, s_2, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \\ |s_1, s_2, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \end{pmatrix}$$

On voit bien que les C-G trouvés précédemment sont les éléments de la matrice de transformation U . La transformation inverse est ;

$$\begin{pmatrix} |s_1, s_2, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \\ |s_1, s_2, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \\ |s_1, s_2, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \\ |s_1, s_2, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}}_{=U^{-1}} \begin{pmatrix} |00\rangle \\ |11\rangle \\ |10\rangle \\ |1-1\rangle \end{pmatrix}$$

c'est-à-dire qu'on a bien $U^{-1} = U^+$ $\Rightarrow U$ est unitaire. ($UU^+ = U^- U^{-1} = 1$).

2.7 Exercices

Exercice 01

- 1) Calculer les harmoniques sphériques Y_1^0 et Y_1^1 puis en déduire Y_1^{-1} .
- 2) Supposons qu'un électron est dans un état décrit par la fonction d'onde

$$\psi(r, \theta, \varphi) = \frac{A}{2} (e^{i\phi} \sin \theta + \cos \theta) e^{-r/2}$$

i) Exprimer ψ en fonction des harmoniques sphériques puis déterminer la constante A pour qu'elle soit normalisée.

ii) La fonction ψ est-elle fonction propre de L^2 ou de L_z ?

On donne: $\Gamma(\alpha) = \int_0^{+\infty} r^{\alpha-1} e^{-r} dr$.

Exercice 02

Soit $|\ell, m\rangle$ un état propre de l'opérateur L^2 et L_z avec

$$\begin{aligned} L^2 |\ell, m\rangle &= \hbar^2 \ell (\ell + 1) |\ell, m\rangle, \\ L_z |\ell, m\rangle &= \hbar m |\ell, m\rangle \end{aligned}$$

1) Exprimer L_x en fonction de L_+ et L_- .

2) Calculer pour cet état : $\langle L_x \rangle = \langle \ell, m | L_x | \ell, m \rangle$ et $\langle L_x^2 \rangle$.

Exercice 03

Soit la base propre $\{|j, m\rangle\}$ relative à J^2 et J_z .

1) Montrer que

$$(\Delta J_x)(\Delta J_y) = \frac{\hbar^2}{2} [j(j+1) - m^2]$$

2) Vérifier que : $(\Delta J_x)(\Delta J_y) \geq \frac{\hbar}{2} |\langle J_z \rangle|$.

Exercice 04

Considérons un système dans un état $|\psi\rangle$ donné en fonction des états propres $|\ell, m\rangle$ du moment orbital comme suit

$$|\psi\rangle = \frac{1}{2} |1, -1\rangle + A |1, 0\rangle + \frac{1}{2} |1, 1\rangle$$

où A est une constante réelle.

1) Calculer A pour que $|\psi\rangle$ soit normalisé.

2) L'état $|\psi\rangle$ est-il un état propre de L^2 ou de L_z ?

3) Si on effectue une mesure de L_z , quelles sont les valeurs possibles obtenues et avec quelles probabilités ?

4) Trouver $\langle L_z \rangle$.

Exercice 05

On considère un système physique dont le moment cinétique \vec{J} est défini par la valeur $j = 1$.

1) Trouver les matrices représentatives des opérateurs J^2 , J_z , J_{\pm} , J_x et J_y .

- 2) Trouver les vecteurs propres communs à J^2 et J_z puis vérifier qu'ils forment une base complète et orthonormée.
- 3) Utiliser les matrices J_x , J_y et J_z pour calculer les commutateurs $[J_x, J_y]$, $[J_y, J_z]$ et $[J_z, J_x]$.
- 4) Vérifier qu'on a $J_z^3 = \hbar^2 J_z$.

Exercice 06

Soit \vec{S} le moment cinétique intrinsèque d'une particule de spin $s = 1$.

Montrer que pour toute composante $S_u = \vec{S} \cdot \vec{u}$ on a

$$S_u^3 = S_u, \quad \exp(-i\varphi S_u) = 1 - i \sin(\varphi) S_u - (1 - \cos \varphi) S_u^2, \quad \hbar = 1$$

Exercice 07

Soit \vec{L} le moment cinétique orbital d'une particule, θ et φ ses angles polaires. Π est l'opérateur effectuant une réflexion autour de l'origine (opérateur de parité), son action sur une fonction $F(\theta, \varphi)$ est définie par

$$\Pi F(\theta, \varphi) = F(\pi - \theta, \varphi + \pi)$$

Vérifier que $[\Pi, \vec{L}] = 0$. En déduire que les harmoniques sphériques ont une parité bien déterminée et que celle-ci ne dépend que du nombre quantique ℓ . La déterminer.

On donne : $Y_\ell^{-\ell}(\theta, \varphi) = (-1)^\ell C_\ell e^{i\ell\varphi} \sin^\ell \theta$, C_ℓ est une constante qui dépend de ℓ .

Exercice 08

Un système de deux particules de spins $s_1 = \frac{3}{2}$ et $s_2 = \frac{1}{2}$ est décrit par l'hamiltonien effectif :

$$H = \alpha \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$$

où α est une constante. Le système est initialement (à $t = 0$) à l'état $|\frac{3}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$ qui est état propre des opérateurs S_1^2 , S_2^2 , S_{1z} , S_{2z} .

1) Trouver l'état du système à un instant $t > 0$.

2) Quelle est la probabilité de trouver le système dans l'état $|\frac{3}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$?

Exercice 09

Un système de deux particules de spins $s_1 = \frac{1}{2}$ et $s_2 = 1$ est décrit par l'hamiltonien

$$H = A(S_{1z} + S_{2z})^2 + B \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$$

où A et B sont des constantes. Soit la base $\{|s_1, s_2, m_1, m_2\rangle\}$ de l'espace produit tensoriel $\xi = \xi(s_1) \otimes \xi(s_2)$ commune à l'ensemble $\{S_1^2, S_2^2, S_{1z}, S_{2z}\}$, et soit une deuxième base $\{|s, m\rangle\}$ commune à l'ensemble $\{S_1^2, S_2^2, S^2, S_z\}$ avec $\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$.

- 1) a) Quelles sont les valeurs possibles de s ? b) Quelle est la dimension de ξ ?
- 2) a) Montrer que les états $|s, m\rangle$ sont états propres de H .
- b) Donner ainsi l'énergie $E_{s,m}$. Est-ce-qu'il y a de dégénérescence?
- 3) Trouver les C-G a, b et c tels que

$$\begin{aligned}|3/2, 3/2\rangle &= a |s_1, s_2, \frac{1}{2}, 1\rangle \\|3/2, 1/2\rangle &= b |s_1, s_2, -\frac{1}{2}, 1\rangle + c |s_1, s_2, \frac{1}{2}, 0\rangle\end{aligned}$$

4) Développer le ket $|1/2, 1/2\rangle$ sur la base standard $\{|s_1, s_2, m_1, m_2\rangle\}$ en respectant les règles de sélection. Puis, trouver les C-G associés de façon que $\langle 3/2, 1/2 | 1/2, 1/2 \rangle = 0$.

Exercice 10

On considère un système de deux particules chacune est de spin $\frac{1}{2}$. Ce système est décrit par l'hamiltonien effectif

$$H = A(S_{1z} + S_{2z}) + B \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$$

où A et B sont des constantes. Soit la base $\{|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, m_1, m_2\rangle = |\pm, \pm\rangle\}$ dans l'espace produit tensoriel $\xi = \xi(s_1) \otimes \xi(s_2)$ commune à l'ensemble $\{S_1^2, S_2^2, S_{1z}, S_{2z}\}$ et $\{|s, m\rangle\}$ la base commune à l'ensemble $\{S_1^2, S_2^2, S^2, S_z\}$ avec $\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$.

- 1) Quelles sont les valeurs possibles de s . 2) Quelle est la dimension de ξ .
- 3) Montrer que les kets $|s, m\rangle$ sont vecteurs propres de H . Donner ainsi l'énergie $E_{s,m}$ en fonction de A et B pour chaque valeurs de s et m .
- 4) Trouver les C-G a, b, c et d tels que

$$\begin{aligned}|+, -\rangle &= a |1, 0\rangle + b |0, 0\rangle \\|-, +\rangle &= c |1, 0\rangle + d |0, 0\rangle\end{aligned}$$

5) Le système est initialement (à $t_0 = 0$) à l'état $|+, -\rangle$. Trouver l'état du système à un instant $t > 0$.

6) Quelle est la probabilité de trouver le système dans l'état $|-, +\rangle$?

Chapitre 3

Le potentiel central

3.1 Introduction

Si on utilise les coordonnées sphériques (r, θ, φ) , un potentiel central $V(r)$ ne dépend pas des variables angulaires θ et φ . Il dépend uniquement de la distance radiale r . On l'appelle aussi potentiel à symétrie sphérique. Un exemple de potentiel central est le potentiel de Coulomb entre deux particules chargées électriquement (Ze, e)

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \quad (3.1)$$

En mécanique classique, la solution de ce problème repose sur le fait que le moment cinétique est conservé. En effet, le moment cinétique \vec{L} est défini par

$$\vec{L} = \vec{r} \wedge \vec{p} \quad (3.2)$$

alors

$$\begin{aligned} \frac{d\vec{L}}{dt} &= \frac{d\vec{r}}{dt} \wedge \vec{p} + \vec{r} \wedge \frac{d\vec{p}}{dt} \\ &= \underbrace{\frac{\vec{p}}{m} \wedge \vec{p}}_{=0} + \vec{r} \wedge \frac{d\vec{p}}{dt} \\ \frac{d\vec{L}}{dt} &= \vec{r} \wedge \vec{F} \end{aligned} \quad (3.3)$$

La force $\vec{F} = -\vec{\nabla}V(r) = -\frac{dV(r)}{dr}\vec{u}_r$ est dirigée suivant \vec{r} lorsque le potentiel V ne dépend que de r il s'ensuit que $\frac{d\vec{L}}{dt} = 0$ donc \vec{L} est une constante de mouvement.

En mécanique quantique, le moment cinétique est un opérateur et on doit résoudre l'équation de Schrödinger. On va voir également que les opérateurs L^2 et L_z commutent avec l'hamiltonien H est donc sont des constantes de mouvement.

3.2 Etats stastionnaires

Soit une particule de masse M dans un potentiel à symétrie sphérique $V(r)$. L'équation de Schrödinger stationnaire s'écrit

$$H\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \quad (3.4)$$

où l'hamiltonien H est

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2M} + V(r)$$

et puisque en mécanique quantique l'opérateur impulsion \vec{p} est représenté par $\vec{p} = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}$, l'hamiltonien H s'écrit alors

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2 + V(r) \quad (3.5)$$

En coordonnées sphériques (r, θ, φ) , le Laplacien ∇^2 s'écrit

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \quad (3.6)$$

qu'on peut écrire également comme

$$\nabla^2 = \nabla_r^2 - \frac{L^2}{\hbar^2 r^2} \quad (3.7)$$

où L est le moment orbital où

$$L^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right] \quad (3.8)$$

et

$$\nabla_r^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) \quad (3.9)$$

L'équation de Schrödinger (3.4) prend alors la forme

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{L^2}{2Mr^2} + V(r)\right]\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \quad (3.10)$$

Le premier terme de (3.10) peut être considéré comme l'énergie cinétique radiale

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) = \frac{p_r^2}{2M} \quad (3.11)$$

où le moment radial p_r est donné par

$$p_r = \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right), \quad ([r, p_r] = i\hbar) \quad (3.12)$$

L^2 ne dépend pas de $r \Rightarrow [H, L^2] = [H, L_z] = 0$ et donc $\{H, L^2, L_z\}$ forme un ECOC.

On a vu précédemment (voir chapitre 02) que les fonctions propres simultanées de L^2 et L_z sont les harmoniques sphériques

$$L^2 Y_\ell^m (\theta, \varphi) = \hbar^2 \ell (\ell + 1) Y_\ell^m (\theta, \varphi) \quad (3.13)$$

$$L_z Y_\ell^m (\theta, \varphi) = \hbar m Y_\ell^m (\theta, \varphi) \quad (3.14)$$

avec $\ell = 0, 1, 2, \dots, \ell_{\max}$ et $-\ell \leq m \leq \ell$. Cherchons alors les solutions de (3.10) comme un produit d'une partie radiale $R(r)$ et une partie angulaire représentée par les Y_ℓ^m comme

$$\psi(\vec{r}) = R(r) Y_\ell^m (\theta, \varphi) \quad (3.15)$$

Remplaçons (3.15) dans (3.10) et tenons compte de (3.13), il vient

$$\boxed{\left[\frac{p_r^2}{2M} + \frac{\hbar^2 \ell (\ell + 1)}{2Mr^2} + V(r) \right] R(r) = ER(r)} \quad (3.16)$$

Nontons que (3.16) ne dépend pas du nombre quantique m . Donc l'énergie E est au moins $(2\ell + 1)$ fois dégénérée. Cette dégénérence est une caractéristique des potentiels centraux.

Posons $R(r) = U(r)/r$, l'équation (3.16) se réduit à une équation qui a une structure unidimensionnelle en r . En effet, le premier terme de (3.16) se simplifier, d'après (3.11), de la façon suivante

$$\begin{aligned} \frac{p_r^2}{2M} R(r) &= -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left\{ r^2 \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{U(r)}{r} \right) \right\} \\ &= -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \{ rU'(r) - U(r) \} \\ &= -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{1}{r^2} \{ U'(r) + rU''(r) - U'(r) \} \\ &= -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{1}{r} U''(r) \end{aligned}$$

et par suite (3.16) devient

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2 U}{dr^2} + V_{eff}(r) U(r) = EU(r)} \quad (3.17)$$

où le potentiel effectif $V_{eff}(r)$ est

$$V_{eff}(r) = \frac{\hbar^2 \ell (\ell + 1)}{2Mr^2} + V(r) \quad (3.18)$$

$V_{eff}(r)$ est la somme d'un potentiel central $V(r)$ et d'un potentiel centrifuge répulsif $\hbar^2\ell(\ell+1)/2Mr^2$ qui tend à repousser la particule loin du centre. Donc pour avoir des états liés, il faut que $V(r)$ soit négatif. La distance radiale r se variée de 0 à $+\infty$, nous devons donc besoin d'une fonction d'onde $\psi(\vec{r})$ finie pour $r = 0$ et $r \rightarrow +\infty$.

3.3 Particule libre en coordonnées sphériques

Une particule libre peut être considérée comme un cas particulier des potentiel centraux ($V(r) = 0$). Donc (3.17) se réduit à

$$\left[\frac{p_r^2}{2M} + \frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2Mr^2} \right] R(r) = ER(r)$$

c'est-à-dire

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2Mr^2} \right] R(r) = ER(r)$$

qui s'écrit aussi comme

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + k^2 \right] R(r) = 0 \quad (3.19)$$

où $k^2 = 2ME/\hbar^2$. Utilisons le changement de variable $\rho = kr$, on a

$$\begin{aligned} \frac{d}{dr} &= \frac{d\rho}{dr} \frac{d}{d\rho} = k \frac{d}{d\rho} \\ \frac{d^2}{dr^2} &= k^2 \frac{d^2}{d\rho^2} \end{aligned}$$

et donc (3.19) devient

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} + 1 \right] R(\rho) = 0 \quad (3.20)$$

L'équation (3.20) est l'équation de *Bessel sphérique*. La solution générale de cette équation est une combinaison de deux solutions linéairement indépendantes ; la fonction de Bessel sphérique $j_\ell(\rho)$ et la fonction de Neumann $n_\ell(\rho)$;

$$R_\ell(\rho) = A j_\ell(\rho) + B n_\ell(\rho)$$

$j_\ell(\rho)$ et $n_\ell(\rho)$ sont données par la formule de *Rayleigh*

$$\begin{aligned} j_\ell(\rho) &= (-\rho)^\ell \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^\ell \frac{\sin \rho}{\rho} \\ n_\ell(\rho) &= -(-\rho)^\ell \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^\ell \frac{\cos \rho}{\rho} \end{aligned}$$

on donne ici les premières fonctions

$$\begin{aligned} j_0(\rho) &= \frac{\sin \rho}{\rho}, & j_1(\rho) &= \frac{\sin \rho}{\rho^2} - \frac{\cos \rho}{\rho} \\ n_0(\rho) &= -\frac{\cos \rho}{\rho}, & n_1(\rho) &= -\frac{\cos \rho}{\rho^2} - \frac{\sin \rho}{\rho} \end{aligned}$$

les comportements à l'origine de ces fonctions sont

$$j_\ell(\rho) \simeq \frac{2^\ell \ell!}{(2\ell+1)!} \rho^\ell \quad (\rho \ll 1) \quad (3.21)$$

$$n_\ell(\rho) \simeq -\frac{(2\ell)!}{2^\ell \ell!} \rho^{-\ell-1} \quad (\rho \ll 1) \quad (3.22)$$

La fonction de Neumann diverge à l'origine ($\rho \rightarrow 0$) et comme la fonction d'onde doit être finie à l'origine alors $n_\ell(\rho)$ est une solution inacceptable pour ce problème. Donc la solution complète pour une particule libre est

$$\psi(\vec{r}) = A j_\ell(kr) Y_\ell^m(\theta, \varphi). \quad (3.23)$$

A est une constante de normalisation. Comme k varié d'une façon continue le spectre d'énergie est infiniment dégénéré (ceci puisque n'importe qu'elle orientation dans l'espace du vecteur \vec{k} correspond à la même énergie).

3.4 Exercices

Exercice 01

Une particule de masse m est contrainte à se déplacer entre deux sphères concentriques impénétrables de rayons $r = a$ et $r = b$. Il y a pas d'autre potentiel. L'équation de Schrödinger radiale correspondante est

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \left(\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right) R = 0, \quad a \leq r \leq b$$

- 1) On pose $R(r) = \frac{u(r)}{r}$. Trouver l'équation radiale de $u(r)$.
- 2) Trouver l'énergie de l'état fondamental ($n = 1, \ell = 0$) et la fonction d'onde normalisée correspondante.

On donne : $Y_0^0 = 1/\sqrt{4\pi}$

Exercice 02 (L'atome hydrogénoides)

Un atome hydrogénoid est un atome qui a perdu tous ses électrons sauf un. Il est donc constitué d'un électron de masse m_e et charge e en interaction avec un noyau de charge Ze et de masse m_n . Cette interaction ne dépend que de la distance qui sépare ces deux particules $r = |\vec{r}_e - \vec{r}_n|$ de façon que l'énergie potentielle est $V(r) = -Ze^2/r$ (on utilise le CGS, en unité MKS $V(r) = -Ze^2/4\pi\epsilon_0 r$). L'équation de Schrödinger correspondante peut se réduire à celle d'une particule dans un potentiel central

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \vec{\nabla}^2 + V(r) \right] \psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

ou $\mu = m_e m_n / (m_e + m_n)$ est la masse réduite.

- 1) En se basant sur le cours, donner directement l'équation radiale vérifiée par $u(r)$.
- 2) Réécrire l'équation précédente en faisant le changement $\rho = \gamma r$. Puis, on choisit γ de façon que $2\mu E / (\hbar^2 \gamma^2) = -1/4$ et on pose $2\mu Ze^2 / \hbar^2 \gamma = \lambda$.
- 3) Vérifier que $u(\rho)$ se comporte comme $\rho^{\ell+1}$ pour $\rho \rightarrow 0$, et comme $e^{-\frac{1}{2}\rho}$ pour $\rho \rightarrow \infty$.
- 4) Suite aux résultats précédents, la solution $u(\rho)$ est obtenue par la factorisation suivante

$$u(r) = G(\rho) y(\rho) \quad \text{avec} \quad G(\rho) = \rho^{\ell+1} e^{-\frac{1}{2}\rho}$$

Montrer ainsi que l'équation différentielle vérifiée par la fonction y est

$$\rho \frac{d^2y}{d\rho^2} + [2\ell + 2 - \rho] \frac{dy}{d\rho} + (\lambda - \ell - 1) y = 0$$

- 5) Comparer cette équation à l'équation hypergéométrique confluente

$$x \frac{d^2y}{dx^2} + [c - x] \frac{dy}{dx} - ay = 0$$

dont la solution régulière à l'origine est la série

$$y = \Phi(a, c; x) = 1 + \sum_{k=1}^{+\infty} \frac{a(a+1)\dots(a+k-1)}{c(c+1)\dots(c+k-1)} \frac{x^k}{k!}.$$

cette série se comporte comme $x^{a-c} e^x$ lorsque $k \rightarrow +\infty$.

- a) Montrer dans ce cas que la solution $u(r)$ ne peut être physiquement acceptable.
- b) Pour obtenir des solutions acceptables, la série doit être terminée (coupée) à une certaine puissance n_r . En déduire ainsi que $\lambda = \ell + 1 + n_r$.
- c) Désignons par $n = \ell + 1 + n_r$ le nombre quantique total et par $\alpha = e^2/\hbar c$ la constante de structure fine. Vérifier que l'énergie de liaison E_n a l'expression

$$E = E_n = -\frac{Z^2 \alpha^2}{2n^2} \mu c^2$$

6) On considère $\mu \simeq m_e$ et $Z = 1$. Calculer l'énergie de l'état fondamental en eV.

7) Montrer que le degré de dégénérescence du niveau E_n est $g_n = n^2$.

On donne :

$$\alpha \simeq \frac{1}{137,036}, m_e \simeq 0.511 \text{ MeV}/c^2$$

Exercice 03 (Théorème de Hellmann-Feynman)

On considère un hamiltonien $H(\lambda)$ dépendant d'un paramètre λ tel que

$$E(\lambda) = \langle \psi(\lambda) | H(\lambda) | \psi(\lambda) \rangle$$

où $|\psi(\lambda)\rangle$ est un vecteur normé.

1) En dérivant l'équation précédente par rapport à λ , montrer le fameux théorème de Hellmann-Feynman

$$\frac{\partial E(\lambda)}{\partial \lambda} = \langle \psi(\lambda) | \frac{\partial H(\lambda)}{\partial \lambda} | \psi(\lambda) \rangle$$

2) On considère maintenant l'équation aux valeurs propres de l'hamiltonien radial de l'atome d'hydrogène $H_r |n, \ell\rangle = E_n |n, \ell\rangle$ avec

$$H_r = \frac{\hbar^2}{2m} \left(-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right) - \frac{e^2}{r},$$

$$E_n = -\frac{\alpha^2}{2n^2} mc^2, \quad a_0 = \frac{\hbar}{\alpha mc}, \quad n = n_r + \ell + 1, \quad n_r = 0, 1, 2, \dots$$

où m est la masse de l'électron, n_r le nombre quantique radial et $\alpha = e^2/\hbar c$ est la constante de structure fine.

Appliquer le théorème précédent, en choisissons convenablement le paramètre λ , pour déterminer les valeurs moyennes suivantes

$$\langle n, \ell | \frac{1}{r} | n, \ell \rangle = ? \quad \langle n, \ell | \frac{1}{r^2} | n, \ell \rangle = ?$$

Exercice 04

On considère l'équation radiale de l'atome d'hydrogène

$$-\frac{\hbar^2}{2m} U''(r) + \left(\frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} - \frac{e^2}{r} \right) U(r) = E_n U(r),$$

où $U(r) = rR(r)$, $R(r)$ est la partie radiale, $E_n = -(\alpha^2/2n^2) mc^2$ est l'énergie du niveau n , $a_0 = \hbar/\alpha mc$. La valeur moyenne d'une fonction $f(r)$ est donnée par l'expression

$$\langle f(r) \rangle = \int_0^{+\infty} R^2(r) f(r) r^2 dr = \int_0^{+\infty} U^2(r) f(r) dr$$

1) a) Montrer l'égalité

$$\int_0^{+\infty} U(r) r^s U''(r) dr = \ell(\ell+1) \langle r^{s-2} \rangle - \frac{2}{a_0} \langle r^{s-1} \rangle + \frac{1}{a_0^2 n^2} \langle r^s \rangle$$

b) Par intégrations par partie du premier membre de l'égalité précédente, montrer le résultat suivant

$$\int_0^{+\infty} U(r) r^s U''(r) dr = \left[\frac{s}{2} - \frac{\ell(\ell+1)}{s+1} \right] (s-1) \langle r^{s-2} \rangle + \frac{2s}{(s+1)a_0} \langle r^{s-1} \rangle - \frac{1}{a_0^2 n^2} \langle r^s \rangle$$

où $U(r=\infty) = U(r=0) = 0$.

2) En déduire la relation de récurrence de Kramer

$$\frac{s+1}{n^2} \langle r^s \rangle - a_0 (2s+1) \langle r^{s-1} \rangle + \frac{s}{4} a_0^2 [(2\ell+1)^2 - s^2] \langle r^{s-2} \rangle = 0$$

3) Utiliser la relation de récurrence de Kramer pour déterminer les valeurs moyennes

$$\langle r^{-1} \rangle = ?, \quad \langle r \rangle = ?, \quad \langle r^2 \rangle = ?$$

4) Déterminer la valeur $\langle r^{-3} \rangle = ?$

Chapitre 4

Théorie des perturbations

4.1 Introduction

La plupart des problèmes rencontrés en mécanique quantique ne peuvent être résolus exactement. Les solutions exactes de l'équation de Schrödinger existent seulement pour quelques systèmes simples. Pour résoudre certains problèmes, on utilise souvent des méthodes d'approximation. Ces méthodes sont parfois indispensables, sans cela le problème serait insoluble. De plus, elles nous permettent aussi de comprendre le système en termes simples.

Dans ce chapitre, nous allons considérer une de ces méthodes d'approximation connue comme la théorie de perturbation.

4.2 Perturbation stationnaire

La technique consiste à trouver les valeurs propres de l'énergie E_n et les fonctions propres $|\psi_n\rangle$ d'un hamiltonien H indépendant du temps qui n'a pas de solutions exactes pour le problème stationnaire suivant

$$H |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle \quad (4.1)$$

l'idée est de séparer le Hamiltonien H en deux parties

$$H = H_0 + H_p \quad (4.2)$$

telles que l'on sache résoudre le problème pour H_0 et que H_p est considéré ici comme une petite correction ($H_p \ll H_0$). Nous pouvons faire cette idée plus explicite en écrivant H_p en termes

d'un paramètre réel sans dimensions $\lambda \ll 1$ comme

$$H_p = \lambda W \quad (4.3)$$

Ainsi (4.1) devient

$$(H_0 + \lambda W) |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle \quad (4.4)$$

4.2.1 Cas non dégénéré

Dans le cas où H_0 a un spectre non dégénéré ; c'est-à-dire pour chaque valeur propre $E_n^{(0)}$ correspond un seul état propre $|\phi_n\rangle$:

$$H_0 |\phi_n\rangle = E_n^{(0)} |\phi_n\rangle \quad (4.5)$$

où les solutions exactes $E_n^{(0)}$ et $|\phi_n\rangle$ sont connues.

L'idée consiste à supposer que les valeurs propres et les états propres perturbés peuvent à la fois être développées en série de puissance en λ :

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots \quad (4.6)$$

$$|\psi_n\rangle = |\phi_n\rangle + \lambda |\psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\psi_n^{(2)}\rangle + \dots \quad (4.7)$$

Alors $E_n^{(k)}$ et $|\psi_n^{(k)}\rangle$ représentent les corrections à l'énergie et à l'état propre à l'ordre k . On doit calculer les $E_n^{(1)}$, $E_n^{(2)}$, ... et les $|\psi_n^{(1)}\rangle$, $|\psi_n^{(2)}\rangle$,

On se limite ici à déterminer $E_n^{(1)}$ et $E_n^{(2)}$ pour l'énergie et $|\psi_n^{(1)}\rangle$ pour l'état propre.

Remplaçons (4.6) et (4.7) dans (4.4), on a

$$\begin{aligned} & (H_0 + \lambda W) \left(|\phi_n\rangle + \lambda |\psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\psi_n^{(2)}\rangle + \dots \right) \\ &= (E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots) \left(|\phi_n\rangle + \lambda |\psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\psi_n^{(2)}\rangle + \dots \right) \end{aligned}$$

Egalons les coefficients des puissances successives de λ des deux membres de l'équation précédente, nous obtenons les résultats

l'ordre 0 en λ :

$$H_0 |\phi_n\rangle = E_n^{(0)} |\phi_n\rangle \quad (4.8)$$

le premier ordre en λ :

$$H_0 |\psi_n^{(1)}\rangle + W |\phi_n\rangle = E_n^{(0)} |\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)} |\phi_n\rangle \quad (4.9)$$

le deuxième ordre en λ :

$$H_0 \left| \psi_n^{(2)} \right\rangle + W \left| \psi_n^{(1)} \right\rangle = E_n^{(0)} \left| \psi_n^{(2)} \right\rangle + E_n^{(1)} \left| \psi_n^{(1)} \right\rangle + E_n^{(2)} |\phi_n\rangle \quad (4.10)$$

Comme $|\psi_n\rangle$ est considéré de ne pas être très différent de $|\phi_n\rangle$, on a approximativement

$$\langle \phi_n | \psi_n \rangle \simeq 1 \quad (4.11)$$

d'après (4.7) on aura

$$\langle \phi_n | \phi_n \rangle + \lambda \langle \phi_n | \psi_n^{(1)} \rangle + \lambda^2 \langle \phi_n | \psi_n^{(2)} \rangle + \dots = 1$$

comme $\langle \phi_n | \phi_n \rangle = 1$ il s'ensuit que

$$\langle \phi_n | \psi_n^{(1)} \rangle = \langle \phi_n | \psi_n^{(2)} \rangle = \dots = 0 \quad (4.12)$$

■ *Correction à l'ordre 1 en λ à l'énergie*

Multiplions les deux membres de (4.9) par le bra $\langle \phi_n |$, on obtient

$$E_n^{(1)} = \langle \phi_n | W | \phi_n \rangle \quad (4.13)$$

soit $\Delta E_n^{(1)} = \lambda E_n^{(1)}$. La correction à l'énergie à l'ordre 1 en λ est donc

$$\boxed{\Delta E_n^{(1)} = \langle \phi_n | H_p | \phi_n \rangle} \quad (4.14)$$

et l'énergie à l'ordre 1 est alors

$$E_n = E_n^{(0)} + \Delta E_n^{(1)} \quad (4.15)$$

Dans certains cas la correction au premier ordre s'annule et par suite on doit aller à l'ordre suivant.

■ *Correction à l'ordre 1 en λ à l'état propre*

Comme les états non perturbés $|\phi_n\rangle$ forment une base complète et orthogonale, on peut développer l'état $|\psi_n^{(1)}\rangle$ dans $\{|\phi_n\rangle\}$;

$$\left| \psi_n^{(1)} \right\rangle = \sum_m |\phi_m\rangle \langle \phi_m| \left| \psi_n^{(1)} \right\rangle = \sum_{m \neq n} \langle \phi_m | \psi_n^{(1)} \rangle |\phi_m\rangle \quad (4.16)$$

puisque le terme $m = n$ n'a pas de contribution car $\langle \phi_n | \psi_n^{(1)} \rangle = 0$. Le coefficient $\langle \phi_m | \psi_n^{(1)} \rangle$ peut être obtenu à partir de l'équation (4.9) en multipliant les deux membres par le bra $\langle \phi_m |$. En effet

$$\begin{aligned} \langle \phi_m | H_0 \left| \psi_n^{(1)} \right\rangle + \langle \phi_m | W | \phi_n \rangle &= E_n^{(0)} \langle \phi_m | \psi_n^{(1)} \rangle + E_n^{(1)} \langle \phi_m | \phi_n \rangle \\ \Rightarrow E_m^{(0)} \langle \phi_m | \psi_n^{(1)} \rangle + \langle \phi_m | W | \phi_n \rangle &= E_n^{(0)} \langle \phi_m | \psi_n^{(1)} \rangle \end{aligned}$$

d'où on obtient

$$\langle \phi_m | \psi_n^{(1)} \rangle = \frac{\langle \phi_m | W | \phi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \quad (4.17)$$

remplaçons dans (4.16), il vient

$$\left| \psi_n^{(1)} \right\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{\langle \phi_m | W | \phi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} | \phi_m \rangle \quad (4.18)$$

la correction à l'ordre 1 en λ à l'état propre $|\psi_n\rangle$ de H est

$$\lambda \left| \psi_n^{(1)} \right\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{\langle \phi_m | H_p | \phi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} | \phi_m \rangle$$

alors

$$\boxed{|\psi_n\rangle = |\phi_n\rangle + \sum_{m \neq n} \frac{\langle \phi_m | H_p | \phi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} | \phi_m \rangle} \quad (4.19)$$

■ Correction à l'ordre 2 en λ à l'énergie

Pour déterminer $E_n^{(2)}$, multiplions l'équation (4.10) par le bra $\langle \phi_n |$, on obtient

$$E_n^{(2)} = \langle \phi_n | W \left| \psi_n^{(1)} \right\rangle \quad (4.20)$$

où on a utilisé le fait que $\langle \phi_n | \psi_n^{(1)} \rangle = \langle \phi_n | \psi_n^{(2)} \rangle = 0$ et $\langle \phi_n | \phi_n \rangle = 1$. Puis, remplaçons la relation (4.18) dans (4.20) on aura

$$\begin{aligned} E_n^{(2)} &= \langle \phi_n | W \sum_{m \neq n} \frac{\langle \phi_m | W | \phi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} | \phi_m \rangle \\ &= \sum_{m \neq n} \frac{\langle \phi_m | W | \phi_n \rangle \langle \phi_n | W | \phi_m \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \end{aligned}$$

La correction à l'énergie à l'ordre 2 en λ est donc

$$\begin{aligned} \Delta E_n^{(2)} &= \lambda^2 E_n^{(2)} \\ &= \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \phi_m | H_p | \phi_n \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \end{aligned} \quad (4.21)$$

Au deuxième ordre l'énergie E_n de H s'écrit

$$E_n = E_n^{(0)} + \Delta E_n^{(1)} + \Delta E_n^{(2)}$$

ou bien

$$\boxed{E_n = E_n^{(0)} + \langle \phi_n | H_p | \phi_n \rangle + \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \phi_m | H_p | \phi_n \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}} \quad (4.22)$$

Remarque : si les niveaux d'énergie $E_n^{(0)}$ et $E_m^{(0)}$ sont égaux (niveaux dégénérés), alors l'expression (15) et (17) ne seront pas définis et dans ce cas il faut traiter le problème avec un approche différente de celui du cas non dégénéré.

Exercice d'application

Une particule de charge q and de masse m est soumise à un potentiel harmonique de fréquence ω et un champ électrique faible $\vec{\xi} = \varepsilon \vec{\mathcal{H}}$ dans la direction des x où $\varepsilon \ll 1$ est un paramètre sans dimension.

- (a) Ecrire l'hamiltonien H du système.
- (b) Trouver l'expression exacte de l'énergie.
- (c) Calculer la correction à l'énergie à l'ordre 1 en ε .
- (d) Calculer la correction à l'énergie à l'ordre 2 en ε . Comparer cette correction avec le résultat exacte de la question (b).
- (e) Trouver l'état propre de H à l'ordre 1 en ε .

On donne :

$$\begin{aligned} a &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}p \\ a^+ &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}p \end{aligned}$$

avec $a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$ et $a^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$ où $|n\rangle$ désigne un état propre de l'oscillateur harmonique.

Solution

- a) L'hamiltonien du système est donné par

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

où le terme qV représente le potentiel d'interaction entre la charge q et le champ électrique. Comme $\vec{\xi} = -\nabla V$, cet hamiltonien s'écrit aussi de la façon suivante

$$H = H_0 + H_p$$

avec

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \text{ et } H_p = -\varepsilon q\mathcal{H}x \ll H_0.$$

b) Notons que la solution de l'équation de Schrödinger pour ce système peut être donnée exactement sans avoir recours à aucun traitement perturbatif. En effet, faisons le changement

$$y = x - \frac{q\xi}{m\omega^2}$$

l'hamiltonien H devient

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dy^2} + \frac{1}{2}m\omega^2y^2 - \frac{q^2\xi^2}{2m\omega^2}$$

qui est l'hamiltonien d'un oscillateur harmonique plus un terme constant. Le spectre d'énergie correspondant est donc

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{q^2\xi^2}{2m\omega^2}.$$

c) La correction à l'énergie à l'ordre 1 en ξ

Comme le champ électrique est faible, on peut traiter H_p comme une perturbation. La correction à l'ordre 1 à l'énergie est donc

$$\begin{aligned} \Delta E_n^{(1)} &= \langle \phi_n | H_p | \phi_n \rangle \\ &= -q\xi \langle \phi_n | x | \phi_n \rangle \end{aligned}$$

ici les $|\phi_n\rangle$ sont les états propres de H_0 on les note simplement par les kets $|n\rangle$ avec $\langle m | n \rangle = \delta_{n,m}$ et leurs valeurs propres sont $E_n^{(0)} = \hbar\omega(n + 1/2)$. D'autre part, les opérateurs de création et d'annihilation a et a^+ relatifs à l'oscillateur harmonique sont donnés par

$$\begin{aligned} a &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}p \\ a^+ &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}p \end{aligned}$$

soit

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

mais comme $a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$ et $a^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$ donc

$$\begin{aligned} \Delta E_n^{(1)} &= -q\xi \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle n | (a^+ + a) | n \rangle \\ &= -q\xi \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \{ \langle n | a^+ | n \rangle + \langle n | a | n \rangle \} \\ &= -q\xi \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left\{ \underbrace{\sqrt{n+1}\langle n | n+1 \rangle}_{=0} + \underbrace{\sqrt{n}\langle n | n-1 \rangle}_{=0} \right\} \\ &= 0 \end{aligned}$$

donc la correction à l'ordre 1 de l'énergie est nulle.

c) la correction à l'énergie à l'ordre 2 en ξ

D'après la relation (4.21) on écrit

$$\Delta E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \phi_m | H_p | \phi_n \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$$

avec $\langle \phi_m | \equiv \langle m |$ et $|\phi_n \rangle \equiv |n\rangle$ et donc $E_n^{(0)} - E_m^{(0)} = \hbar\omega(n - m)$ donc

$$\Delta E_n^{(2)} = \frac{q^2 \xi^2}{\hbar\omega} \sum_{n \neq m} \frac{|\langle m | x | n \rangle|^2}{n - m}$$

on obtient après un calcul simple

$$\begin{aligned} \Delta E_n^{(2)} &= \frac{q^2 \xi^2}{2m\omega^2} \sum_{m \neq n} \frac{|(\sqrt{n+1}\delta_{m,n+1} + \sqrt{n}\delta_{m,n-1})|^2}{n - m} \\ &= \frac{q^2 \xi^2}{2m\omega^2} \sum_{m \neq n} \frac{(\sqrt{n+1}\delta_{m,n+1})^2 + (\sqrt{n}\delta_{m,n-1})^2}{(n - m)} \text{ puisque } \delta_{m,n+1}\delta_{m,n-1} = 0 \\ &= \frac{q^2 \xi^2}{2m\omega^2} \left(\frac{n}{n - (n - 1)} + \frac{n + 1}{n - (n + 1)} \right) = -\frac{q^2 \xi^2}{2m\omega^2} \end{aligned}$$

Donc l'énergie à l'ordre 2 en ε est

$$\begin{aligned} E_n &= E_n^{(0)} + \Delta E_n^{(1)} + \Delta E_n^{(2)} \\ &= \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{q^2 \varepsilon^2}{2m\omega^2} \end{aligned}$$

ce résultat est en accord total avec l'expression exacte de l'énergie.

(e) exercice.

4.2.2 Cas dégénéré

On a toujours le problème (4.4) c-à-d

$$(H_0 + \lambda W) |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle \quad (01) \tag{4.23}$$

mais maintenant le spectre $E_n^{(0)}$ de H_0 et g fois dégénéré (c-à-d qu'il existe un nombre g d'états propres $|\phi_{n,\alpha}\rangle$, $\alpha = 1, 2, \dots, g$ qui corresponds au même énergie $E_n^{(0)}$).

$$H_0 |\phi_{n,\alpha}\rangle = E_n^{(0)} |\phi_{n,\alpha}\rangle \quad (\alpha = 1, 2, \dots, g) \tag{4.24}$$

Pour simplifier, on considère que $g = 2$ (c-à-d $E_n^{(0)}$ est deux fois dégénérée).

A l'ordre zéro, on peut écrire $|\psi_n\rangle$ comme une combinaison linéaire de $|\phi_{n,1}\rangle$ et $|\phi_{n,2}\rangle$

$$|\psi_n\rangle = c_1 |\phi_{n,1}\rangle + c_2 |\phi_{n,2}\rangle = \sum_{\alpha=1}^2 c_\alpha |\phi_{n,\alpha}\rangle \quad (02) \quad (4.25)$$

les $|\phi_{n,1}\rangle$ et $|\phi_{n,2}\rangle$ sont orthonormés

$$\langle \phi_{n,\alpha} | \phi_{n,\beta} \rangle = \delta_{\alpha,\beta} \quad \text{avec } \alpha, \beta = 1, 2 \quad (4.26)$$

remplaçons l'équation (4.25) dans (4.23), il vient

$$(H_0 + \lambda W) \sum_{\alpha=1}^2 c_\alpha |\phi_{n,\alpha}\rangle = E_n \sum_{\alpha=1}^2 c_\alpha |\phi_{n,\alpha}\rangle$$

c-à-d

$$\sum_{\alpha=1}^2 (E_n^{(0)} |\phi_{n,\alpha}\rangle + \lambda W |\phi_{n,\alpha}\rangle) c_\alpha = E_n \sum_{\alpha=1}^2 c_\alpha |\phi_{n,\alpha}\rangle$$

puis, multiplions les 2 membres pas le bra $\langle \phi_{n,\beta} |$, on aura

$$\sum_{\alpha=1}^2 c_\alpha (E_n^{(0)} \delta_{\alpha,\beta} + \lambda \langle \phi_{n,\beta} | W |\phi_{n,\alpha}\rangle) = E_n \sum_{\alpha=1}^2 c_\alpha \delta_{\alpha,\beta}$$

c-à-d

$$c_\beta E_n^{(0)} + \sum_{\alpha=1}^2 \lambda \langle \phi_{n,\beta} | W |\phi_{n,\alpha}\rangle c_\alpha = E_n c_\beta$$

on peut écrire cette dernière équation comme

$$\sum_{\alpha=1}^2 \lambda \langle \phi_{n,\beta} | W |\phi_{n,\alpha}\rangle c_\alpha = (E_n - E_n^{(0)}) c_\beta \quad (4.27)$$

mais au premier ordre en λ on a $E_n - E_n^{(0)} = \lambda E_n^{(1)}$ et posons $\langle \phi_{n,\beta} | W |\phi_{n,\alpha}\rangle = W_{\beta\alpha}$, on obtient :

$$\sum_{\alpha=1}^2 W_{\beta\alpha} c_\alpha = E_n^{(1)} c_\beta$$

qui s'écrit aussi comme

$$\sum_{\alpha=1}^2 (W_{\beta\alpha} - E_n^{(1)} \delta_{\alpha,\beta}) c_\alpha = 0, \quad \beta = 1, 2 \quad (4.28)$$

le dernier résultat est un système de 2 équations linéaires homogènes

$$\begin{cases} (W_{11} - E_n^{(1)}) c_1 + W_{12} c_2 = 0, & \beta = 1 \\ W_{21} c_1 + (W_{22} - E_n^{(1)}) c_2 = 0, & \beta = 2 \end{cases} \quad (4.29)$$

qui s'écrit aussi sous forme matricielle comme suit

$$\begin{pmatrix} W_{11} & W_{12} \\ W_{21} & W_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = E_n^{(1)} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \quad (4.30)$$

Pour déterminer les énergies $E_n^{(1)}$, il faut résoudre l'équation aux valeurs propres (4.30). La généralisation au cas où la dégénérescence est g sera très simple à formuler.

Exemple d'application

On considère un système quantique décrit par l'hamiltonien :

$$H = V_0 \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 + \varepsilon & \varepsilon \\ 0 & 0 & 1 - \varepsilon \end{pmatrix}$$

où V_0 est une constante et ε est un nombre réel sans dimensions ($\varepsilon \ll 1$).

- a) Trouver les vecteurs propres et les valeurs propres de l'hamiltonien non perturbé H_0 ($\varepsilon = 0$).
- b) Donner les énergies exactes du système décrit par H .
- c) Utiliser la théorie de perturbation pour donner les corrections aux énergies au premier et au deuxième ordre de l'état relatif à l'état non dégénéré de H_0 . Comparer avec les résultats exacts (b).
- d) Utiliser la théorie de perturbation pour donner les corrections au premier ordre des états relatifs aux états dégénérés de H_0 . Comparer avec les résultats exacts (b).

Solution

- a) L'hamiltonien non perturbé H_0 ($\varepsilon = 0$) est

$$H_0 = V_0 \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad H_p = V_0 \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon & \varepsilon \\ 0 & 0 & -\varepsilon \end{pmatrix}$$

qui est une matrice diagonale, donc ses vecteurs propres sont la base canonique

$$\begin{aligned} |\phi_1\rangle &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \rightarrow E_1^{(0)} = 2V_0, \quad |\phi_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \rightarrow E_2^{(0)} = V_0, \\ |\phi_3\rangle &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \rightarrow E_3^{(0)} = V_0 \end{aligned}$$

L'état d'énergie $E_1^{(0)} = 2V_0$ est non dégénéré alors que les états d'énergie $E_2^{(0)} = E_3^{(0)} = V_0$ sont deux fois dégénérés.

b) Les énergies exactes du système décrit par H .

$$\begin{aligned} \det(H - EI_3) &= \begin{vmatrix} 2V_0 - E & 0 & 0 \\ 0 & (1 + \varepsilon)V_0 - E & \varepsilon V_0 \\ 0 & 0 & (1 - \varepsilon)V_0 - E \end{vmatrix} \\ &= (2V_0 - E)[(1 + \varepsilon)V_0 - E][(1 - \varepsilon)V_0 - E] \\ &\Rightarrow E_1 = 2V_0, \quad E_2 = V_0(1 + \varepsilon), \quad E_3 = V_0(1 - \varepsilon) \end{aligned}$$

c) Pour l'état d'énergie non dégénéré, la correction à l'ordre 1 en ε à l'énergie $2V_0$ est

$$\begin{aligned} \Delta E^{(1)} &= \langle \phi_1 | H_p | \phi_1 \rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} V_0 \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon & \varepsilon \\ 0 & 0 & -\varepsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= 0 \end{aligned}$$

D'après le cours, la correction à l'ordre 2 en ε à l'énergie $2V_0$ est

$$\Delta E_1^{(2)} = \sum_{m \neq 1} \frac{|\langle \phi_m | H_p | \phi_1 \rangle|^2}{E_1^{(0)} - E_m^{(0)}} = \frac{|\langle \phi_2 | H_p | \phi_1 \rangle|^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} + \frac{|\langle \phi_3 | H_p | \phi_1 \rangle|^2}{E_1^{(0)} - E_3^{(0)}}$$

mais :

$$\begin{aligned} \langle \phi_2 | H_p | \phi_1 \rangle &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} V_0 \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon & \varepsilon \\ 0 & 0 & -\varepsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = 0 \\ \langle \phi_3 | H_p | \phi_1 \rangle &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} V_0 \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon & \varepsilon \\ 0 & 0 & -\varepsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = 0 \end{aligned}$$

donc $\Delta E_1^{(2)} = 0$.

Les corrections du niveau $E_1^{(0)} = 2V_0$ sont nulles ce qui est en accord avec le résultat exact $E_1 = 2V_0$.

d) Pour obtenir les corrections au premier ordre des états relatifs aux états dégénérés de H_0 , on est besoin de diagonaliser la matrice H_p relative au sous espace engendré par les états dégénérés, qu'on la note par V ;

$$V = V_0 \begin{pmatrix} \varepsilon & \varepsilon \\ 0 & -\varepsilon \end{pmatrix}$$

c-à-d

$$\begin{aligned} \det(V - \lambda I_2) = 0 &\Rightarrow \begin{vmatrix} \varepsilon V_0 - \lambda & \varepsilon V_0 \\ 0 & -\varepsilon V_0 - \lambda \end{vmatrix} = 0 \\ &\Rightarrow (\varepsilon V_0 - \lambda)(-\varepsilon V_0 - \lambda) = 0 \\ &\Rightarrow \lambda_+ = \varepsilon V_0 \text{ et } \lambda_- = -\varepsilon V_0, \end{aligned}$$

donc les corrections à l'énergie à l'ordre 1 en ε du niveau dégénéré sont $E_2^{(1)} = \varepsilon V_0$ et $E_3^{(1)} = -\varepsilon V_0$. Donc les énergies de ce niveau à l'ordre 1 sont :

$$\begin{aligned} E_+ &= E_2^{(0)} + E_2^{(1)} \rightarrow E_+ = V_0 + \varepsilon V_0 \\ \text{et } E_- &= E_2^{(0)} + E_3^{(1)} \rightarrow E_- = V_0 - \varepsilon V_0 \end{aligned}$$

qui sont en accord avec les résultats exacts E_2 et E_3 de la question (b).

4.3 Perturbation dépendante du temps

4.3.1 Introduction

La théorie des perturbations dépendantes du temps est très utile pour l'étude des processus d'absorption et d'émission d'un rayonnement par des atomes ou plus généralement pour le traitement des transitions des systèmes quantiques d'un niveau d'énergie à un autre. Soit un système quantique décrit par l'hamiltonien

$$H(t) = H_0 + V(t), \quad V(t) \ll H_0 \quad (4.31)$$

où H_0 est un hamiltonien indépendant du temps qui décrit le système non perturbé et $V(t)$ caractérise l'interaction du système avec la source extérieure. La question est comment $V(t)$

affecte ce système ? Ce processus provoque le système de subir des transitions d'un état propre de H_0 à un autre. Si le système est initialement à l'état (non perturbé) $|\psi(t_i=0)\rangle = |\varphi_i\rangle$ de H_0 , quelle est la probabilité de trouver ce système à un autre état non perturbé $|\psi(t_f)\rangle = |\varphi_f\rangle$ de H_0 après la perturbation ?

4.3.2 Méthode

Considérons l'équation de Schrödinger

$$H(t)|\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} \quad (4.32)$$

ou bien

$$[H_0 + V(t)]|\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} \quad (4.33)$$

On suppose que l'état $|\psi(t)\rangle$ est développable sur la base propre $\{|\varphi_n\rangle\}$ de H_0

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |\varphi_n\rangle \quad (4.34)$$

on pose $V(t) = \lambda W(t)$ où λ est un paramètre sans dimension. Remplaçons (4.34) dans (4.33), il vient

$$\sum_n c_n(t) H_0 |\varphi_n\rangle + \lambda \sum_n c_n(t) W(t) |\varphi_n\rangle = i\hbar \sum_n \frac{\partial c_n(t)}{\partial t} |\varphi_n\rangle$$

avec $H_0 |\varphi_n\rangle = E_n |\varphi_n\rangle$. Multiplions par le bra $\langle \varphi_m|$, on aura

$$\sum_n c_n(t) E_n \langle \varphi_m | \varphi_n \rangle + \lambda \sum_n c_n(t) \langle \varphi_m | W(t) |\varphi_n\rangle = i\hbar \sum_n \frac{\partial c_n(t)}{\partial t} \langle \varphi_m | \varphi_n \rangle$$

mais comme $\langle \varphi_m | \varphi_n \rangle = \delta_{m,n}$, on obtient

$$c_m(t) E_m + \lambda \sum_n c_n(t) \langle \varphi_m | W(t) |\varphi_n\rangle = i\hbar \frac{\partial c_m(t)}{\partial t}.$$

posons

$$\langle \varphi_m | W(t) |\varphi_n\rangle = W_{mn} \quad \text{et} \quad c_n(t) = b_n(t) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}$$

on obtient alors

$$b_m(t) e^{-\frac{i}{\hbar} E_m t} E_m + \lambda \sum_n b_n(t) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} W_{mn} = i\hbar \frac{\partial b_m(t)}{\partial t} e^{-\frac{i}{\hbar} E_m t} + E_m b_m(t) e^{-\frac{i}{\hbar} E_m t}$$

qui peut se simplifier à

$$\lambda \sum_n b_n(t) e^{i\omega_{mn} t} W_{mn} = i\hbar \frac{\partial b_m(t)}{\partial t} \quad (4.35)$$

où $\omega_{mn} = (E_m - E_n) / \hbar$. Ainsi

i) Si $\lambda = 0$ alors (4.35) donne

$$\frac{\partial b_m(t)}{\partial t} = 0 \Rightarrow b_m(t) = \text{Cte} = b_m(t=0) = c_n(t=0)$$

d'après (4.34) et pour $t = 0$ on a

$$\begin{aligned} |\psi(t=0)\rangle &= \sum_n c_n(t=0) |\varphi_n\rangle \\ \Rightarrow |\varphi_i\rangle &= \sum_n c_n(t=0) |\varphi_n\rangle \end{aligned}$$

multiplions par le bra $\langle\varphi_m|$

$$\langle\varphi_m|\varphi_i\rangle = \sum_n c_n(t=0) \langle\varphi_m|\varphi_n\rangle$$

on déduit

$$c_m(t=0) = \delta_{m,i} \quad (4.36)$$

ii) Si $\lambda \neq 0$, on peut chercher une solution approximative de (4.35) sous la forme

$$b_m(t) = b_m^{(0)}(t) + \lambda b_m^{(1)}(t) + \lambda^2 b_m^{(2)}(t) + \dots \quad (4.37)$$

remplaçons (4.37) dans (4.35), on obtient

$$\begin{aligned} &\lambda \sum_n [b_n^{(0)}(t) + \lambda b_n^{(1)}(t) + \lambda^2 b_n^{(2)}(t) + \dots] e^{i\omega_{mn}t} V_{mn} \\ &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} b_m^{(0)}(t) + i\hbar\lambda \frac{\partial}{\partial t} b_m^{(1)}(t) + i\hbar\lambda^2 \frac{\partial}{\partial t} b_m^{(2)}(t) + \dots \end{aligned}$$

identifions les termes de même ordre en λ

l'ordre zéro en λ

$$\frac{\partial b_m^{(0)}(t)}{\partial t} = 0 \Rightarrow b_m^{(0)}(t) = \text{Cte} = b_m(t=0) = c_m(t=0) = \delta_{m,i}$$

l'ordre 1 en λ

$$\sum_n b_n^{(0)}(t) e^{i\omega_{mn}t} V_{mn} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} b_m^{(1)}(t)$$

c-à-d

$$\sum_n \delta_{n,i} e^{i\omega_{mn}t} W_{mn} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} b_m^{(1)}(t)$$

ou bien

$$e^{i\omega_{mi}t}W_{mi} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} b_m^{(1)}(t)$$

par intégration on trouve

$$b_m^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t e^{i\omega_{mi}t'} W_{mi}(t') dt' \quad (4.38)$$

ainsi on écrit à l'ordre 1 en λ

$$\begin{aligned} b_m(t) &= b_m^{(0)}(t) + \lambda b_m^{(1)}(t) \\ &= \delta_{m,i} + \frac{\lambda}{i\hbar} \int_0^t e^{i\omega_{mi}t'} W_{mi}(t') dt' \end{aligned} \quad (4.39)$$

et

$$c_m(t) = \left(\delta_{m,i} + \frac{\lambda}{i\hbar} \int_0^t e^{i\omega_{mi}t'} W_{mi}(t') dt' \right) e^{-\frac{i}{\hbar} E_m t} \quad (4.40)$$

Soit $U(t, t_i)$ l'opérateur d'évolution défini comme suit

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_i)|\psi_i\rangle \quad (4.41)$$

L'élément $\langle \psi_f | U(t, t_i) |\psi_i\rangle$ représente l'amplitude de transition d'un état initial non perturbé $|\psi_i\rangle = |\varphi_i\rangle$ de H_0 à un autre état non perturbé $|\psi_f\rangle = |\varphi_f\rangle$ de H_0 . La probabilité de transition correspondante est donc

$$P_{i \rightarrow f}(t) = |\langle \varphi_f | U(t, t_i) |\varphi_i\rangle|^2 = |\langle \psi_f | \psi(t)\rangle|^2$$

d'après (4.34) on écrit

$$\begin{aligned} P_{i \rightarrow f}(t) &= \left| \langle \psi_f | \sum_m c_m(t) |\varphi_m\rangle \right|^2 = \left| \sum_m c_m(t) \langle \varphi_f | \varphi_m\rangle \right|^2 \\ &= \left| \sum_m c_m(t) \delta_{fm} \right|^2 = |c_f(t)|^2 \end{aligned}$$

on suppose que l'état final est différent de l'état initial donc suite au relation (4.40) la probabilité de transition est

$$P_{i \rightarrow f}(t) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t e^{i\omega_{fi}t'} V_{fi}(t') dt' \right|^2 \quad (4.42)$$

où $\omega_{fi} = \frac{(E_f - E_i)}{\hbar}$ est la fréquence de transition et $V_{fi}(t') = \langle \varphi_f | V(t) | \varphi_i\rangle$.

A partir du premier ordre le calcul devient compliqué, mais le premier ordre est suffisant généralement pour traiter nombreux problèmes de physique atomique et moléculaire.

Exercice d'application

Une particule est initialement (i.e., $t \rightarrow -\infty$) à son état fondamental dans un puits de potentiel infini localisé aux points $x = 0$ et $x = a$. Cette particule est soumise à une perturbation dépendante du temps de la forme

$$V(t) = \varepsilon x e^{-t^2},$$

où $\varepsilon \ll 1$ est un paramètre réel positif.

Calculer la probabilité de transition pour que la particule se trouve dans son premier état excité après un temps suffisamment long (i.e., $t \rightarrow +\infty$).

On donne :

$$\begin{aligned} \int_0^\pi y \sin(2y) \sin(y) dy &= -\frac{8}{9} \\ \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha^2 t^2 + \beta t} dt &= \frac{\sqrt{\pi}}{\alpha} \exp\left(\frac{\beta^2}{4\alpha^2}\right) \end{aligned}$$

Solution

L'état de la particule est décrit par l'hamiltonien suivant :

$$H = H_0 + V(t)$$

H_0 est l'Hamiltonien d'une particule libre dans un puits infini, les fonctions d'onde et le spectre d'énergie correspondant sont

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right), \quad E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2}$$

La probabilité de transition de l'état fondamental $n = 1$ (où $t \rightarrow -\infty$) au premier état premier état excité $n = 2$ (où $t \rightarrow +\infty$) est donnée par

$$P_{1 \rightarrow 2}(t) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega_{21}t} \langle \psi_2 | V(t) | \psi_1 \rangle \right|^2$$

où

$$\omega_{21} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar} = \frac{3\pi^2 \hbar}{2ma^2}$$

et

$$\begin{aligned} \langle \psi_2 | V(t) | \psi_1 \rangle &= \int_0^a \psi_2^*(x) V(t) \psi_1(x) dx \\ &= \frac{2\varepsilon}{a} e^{-t^2} \int_0^a \sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right) x \sin\left(\frac{\pi}{a}x\right) dx \end{aligned}$$

faisons le changement $\frac{\pi}{a}x = y$ on aura

$$\langle \psi_2 | V(t) | \psi_1 \rangle = -\frac{16\varepsilon a}{9\pi^2} e^{-t^2}$$

La probabilité de transition est donc

$$P_{1 \rightarrow 2}(t) = \left(\frac{16\varepsilon a}{9\pi^2 \hbar} \right)^2 \left| \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega_{21}t - t^2} \right|^2$$

utilisons la formule

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha^2 t^2 + \beta t} dt = \frac{\sqrt{\pi}}{\alpha} \exp\left(\frac{\beta^2}{4\alpha^2}\right)$$

on obtient

$$P_{1 \rightarrow 2}(t) = \pi \left(\frac{16\varepsilon a}{9\pi^2 \hbar} \right)^2 \exp\left(-\frac{9\pi^4 \hbar^2}{8m^2 a^4}\right).$$

4.4 Exercices

Exercice 01 (*Correction spin-orbite*)

Dans le référentiel propre de l'électron, le proton se déplace en créant un champ magnétique qui interagit avec le spin de l'électron. Cette interaction dite spin-orbite peut être retrouvée qualitativement par un traitement approché.

1) La formule de Biot et Savart appliquée au proton en mouvement relatif par rapport à l'électron peut s'écrire

$$\vec{B} = -\frac{1}{c^2} (\vec{v} \times \vec{E})$$

où \vec{v} est la vitesse de l'électron et \vec{E} le champ électrique créé par le proton.

a) Vérifier que \vec{B} s'écrit aussi comme

$$\vec{B} = \frac{1}{mc^2 e r} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \vec{L}$$

b) Ecrire ensuite l'hamiltonien d'interaction spin-orbite.

2) Le mouvement relatif de l'électron et du proton n'étant pas rectiligne et uniforme, le résultat précédent est inexact. On le corrige en tenant compte de la rotation, ce qui introduit un champ magnétique supplémentaire autour duquel précessse le spin de l'électron (précession de Thomas). Le résultat exact après correction est finalement

$$H_{SO} = \frac{1}{2m^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \vec{S} \cdot \vec{L}$$

Posons $H = H_0 + H_{SO}$. Soit une première base $|n, \ell, m_\ell, m_s\rangle$ relative à l'ensemble $\{H, L^2, S^2, L_z, S_z\}$ et soit une deuxième base $|n, \ell, j, m\rangle$ relative à l'ensemble $\{H, L^2, S^2, J^2, J_z\}$ où $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$.

- a) Est-ce-que $[H, L_z] = 0$? b) Est-ce-que $[H, S_z] = 0$?
- c) Calculer les commutateurs $[H, J^2]$ et $[H, J_z]$.
- 3) A partir des résultats de la question 2) quelle est la base appropriée pour traiter le présent problème.
- 4) Montrer que la correction de spin-orbite à l'énergie est donnée par l'expression

$$\Delta E_{SO} = \frac{mc^2}{2n^3} \alpha^4 \left[\frac{j(j+1) - \ell(\ell+1) - \frac{3}{4}}{\ell(\ell+1)(2\ell+1)} \right]$$

où α est la constante structure fine.

- 5) En déduire la correction de spin-orbite ΔE_{SO}^{2p} .

Exercice 02 (*Correction relativiste à l'énergie cinétique*)

L'hamiltonien non relativiste représentant le mouvement d'un électron dans le potentiel central créé par un proton de charge $+e$ s'écrit

$$H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r},$$

et l'énergie correspondante est

$$E_n^{(0)} = -\frac{\alpha^2}{2n^2} mc^2.$$

- 1) Donner l'expression de l'énergie cinétique relativiste de l'électron.
- 2) Vérifier que l'Hamiltonien H de l'atome d'hydrogène, à l'ordre $O(1/m^4)$, devient

$$H = H_0 + H_R$$

où $H_R = -\frac{p^4}{8m^3c^2}$ est considéré comme une correction relativiste de l'Hamiltonien non perturbé H_0 .

- 3) Montrer que la correction ΔE_R apportée par H_R est

$$\Delta E_R = -\frac{\alpha^4}{8n^4} \left[\frac{8n}{2\ell+1} - 3 \right] mc^2.$$

- 4) En déduire les corrections relativistes ΔE_R^{1s} , ΔE_R^{2s} et ΔE_R^{2p} .

Exercice 03 (*Structure fine de l'atome d'hydrogène*).

La correction de la structure fine est obtenue en additionnant les corrections ΔE_{SO} et ΔE_R , c'est-à-dire

$$\Delta E_{SF} = \Delta E_{SO} + \Delta E_R$$

Vérifier ainsi que cette correction, dans le cas $j = \ell + \frac{1}{2}$ ou $j = \ell - \frac{1}{2}$, a l'expression

$$\Delta E_{SF} = \frac{\alpha^4}{8n^4} \left[3 - \frac{4n}{j+\frac{1}{2}} \right] mc^2.$$

on donne

$$\begin{aligned} \langle n, \ell | \frac{1}{r} | n, \ell \rangle &= \frac{1}{n^2 a_0}, & \langle n, \ell | \frac{1}{r^2} | n, \ell \rangle &= \frac{2}{n^3 (2\ell + 1) a_0^2}, \\ \langle n, \ell | \frac{1}{r^3} | n, \ell \rangle &= \frac{2}{n^3 \ell (\ell + 1) (2\ell + 1) a_0^3}, & \text{avec } a_0 &= \frac{\hbar}{\alpha m c} \text{ (le rayon de Bohr)} \end{aligned}$$

Exercice 04 (Effet Zeemann anormal)

Lorsqu'on tient compte du spin de l'électron, l'hamiltonien de l'atome d'hydrogène, en présence d'un champ magnétique constant suffisamment fort \vec{B} dirigé selon l'axe oz, est donné par : $H \simeq H_0 + H_Z$ où $H_0 = \frac{p^2}{2m_e} + V(r)$

$$H_Z = \frac{\mu_B}{\hbar} B (L_z + 2S_z), \quad \mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e c} = \text{magneton de Bohr}$$

1) En utilisant le théorème de projection, montrer que la correction apportée par H_Z peut s'écrire sous la forme

$$\Delta E = \langle n, j, m | H_Z | n, j, m \rangle = \mu_B B g m$$

où g est le facteur de Landé à déterminer.

2) Ecrire ainsi le spectre d'énergie $E_{j,m} = E_0 + \Delta E$ pour le cas $\ell = 1$ et $s = \frac{1}{2}$. avec $E_0 = \langle n, j, m | H_0 | n, j, m \rangle$.

On donne le théorème de projection pour les composantes S_z et L_z

$$\begin{aligned} \langle j, m | S_z | j, m \rangle &= \frac{\langle j, m | \vec{S} \cdot \vec{J} | j, m \rangle}{\hbar^2 j (j+1)} \langle j, m | J_z | j, m \rangle \\ \langle j, m | L_z | j, m \rangle &= \frac{\langle j, m | \vec{L} \cdot \vec{J} | j, m \rangle}{\hbar^2 j (j+1)} \langle j, m | J_z | j, m \rangle \end{aligned}$$

Exercice 05 (Correction relativiste à l'oscillateur harmonique)

I) Une particule de masse m est soumise à un potentiel harmonique de fréquence ω dont l'hamiltonien est

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$

Soient les opérateurs de création et d'annihilation

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} p \quad , \quad a^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} p$$

et soit $|n\rangle$ un état propre de H_0 avec $H_0|n\rangle = E_n^{(0)}|n\rangle$ tel que

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

(1) Ecrire les opérateurs x et p en fonction des opérateurs a et a^+ .

(2) Déduire l'hamiltonien H_0 en fonction de a et a^+ .

(3) Déterminer l'énergie $E_n^{(0)}$.

II) On considère une particule de masse m et d'énergie cinétique T soumise à un oscillateur harmonique de fréquence ω dont l'hamiltonien du système est

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

1) Donner l'expression de l'énergie cinétique relativiste T de la particule.

2) Vérifier que l'Hamiltonien H de l'oscillateur harmonique, à l'ordre $O(1/m^4)$, devient :

$$H = H_0 + H_p$$

où $H_p = -\frac{p^4}{8m^3c^2}$ est considéré comme une correction relativiste à l'oscillateur harmonique non perturbé $H_0 = p^2/2m + (1/2)m\omega^2x^2$ tel que $H_0|n\rangle = E_n^{(0)}|n\rangle$.

3) Calculer $\langle 0|p^4|0\rangle$.

4) En déduire la correction à l'énergie de l'état fondamental de l'oscillateur harmonique.

On donne : $\sqrt{1+\alpha x^2} \simeq 1 + \frac{\alpha}{2}x^2 - \frac{\alpha^2}{8}x^4$

Exercice 06

Une particule de masse m est soumise à l'oscillateur harmonique isotropique à deux dimensions de la forme

$$H_0 = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2(x^2 + y^2)$$

Soient les opérateurs

$$\begin{cases} a_x = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}p_x \\ a_x^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}p_x \end{cases}, \quad \begin{cases} a_y = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}y + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}p_y \\ a_y^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}y - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}p_y \end{cases}$$

et considérons les opérateurs nombres d'occupation sont définis comme

$$N_x = a_x^+a_x, \quad N_y = a_y^+a_y \quad \text{et} \quad N = N_x + N_y$$

1) Vérifier que : $H_0 = \hbar\omega(N + 1)$.

- 2) Donner les énergies des trois états les plus bas ? est-ce-qu'il y a de dégénérescence ?
- 3) On applique maintenant la perturbation $H_p = \delta m\omega^2 xy$ où δ est un paramètre réel sans dimensions très petit devant l'unité. Utiliser la théorie de perturbation pour donner les corrections aux énergies au premier ordre des trois états les plus bas, et les vecteurs propres correspondants à l'ordre zéro.
- 4) Trouver la solution exacte du problème $H = H_0 + H_p$ pour chacun des trois états les plus bas, puis comparer avec les résultats (3).

Exercice 07

On considère un système quantique décrit par l'hamiltonien

$$H = AL^2 + BL_z + CL_y$$

on suppose que les constantes $A, B \gg C$ de façon qu'on peut écrire $H = H_0 + H_p$ où $H_0 = AL^2 + BL_z$ et $H_p = CL_y$.

- 1) a) Vérifier que les états $|\ell, m\rangle$ (états propres de L^2 et L_z) sont états propres de H_0 .
- b) Donner ainsi l'énergie $E_{\ell,m}^{(0)}$ de H_0 .
- 2) Calculer la correction à l'énergie au premier $\Delta E^{(1)}$ relative à H_p .
- 3) Calculer la correction à l'énergie au deuxième $\Delta E^{(2)}$ avec

Exercice 08

Un système physique décrit par un oscillateur harmonique d'hamiltonien $H_0 = p^2/2m + \frac{1}{2}m\omega^2x^2$ est à son état fondamental $|0\rangle$ à $t = -\infty$. Ce système est perturbé par un champ électrique faible E de façon qu'on a

$$V(t) = -e\mathcal{E}x \exp(-t^2/\tau^2)$$

Quelle la probabilité de trouver le système à son premier état excité $|1\rangle$ à $t = +\infty$.

Exercice 09

Une particule est initialement (i.e., $t \rightarrow 0$) à son état fondamental dans un potentiel harmonique à une dimension. A $t = 0$ elle est soumise à une perturbation dépendante du temps de la forme

$$V(x, t) = \varepsilon x^3 e^{-t/\tau}.$$

où $\varepsilon \ll 1$ est un paramètre réel positif. L'état de la particule est décrit par l'Hamiltonien

$$H = H_0 + V(x, t)$$

où H_0 est l'Hamiltonien relatif à l'oscillateur harmonique.

- 1) Soit $|n\rangle$ un état propre de H_0 . Utiliser les opérateurs de création et d'annihilation pour calculer l'élément de matrice $\langle n| x^3 |0\rangle$.
- 2) Calculer les probabilités de transition au premier ordre $P_{0\rightarrow 1}$, $P_{0\rightarrow 2}$ et $P_{0\rightarrow 3}$ pour que la particule se trouve dans un état excité après un temps suffisamment long (i.e., $t \rightarrow +\infty$).
- 3) Calculer la probabilité $P_{0\rightarrow n}$ pour $n > 3$. Que peut-on déduire ?

Exercice 10

Un atome d'hydrogène, initialement dans son état fondamental (1s), est placé à partir du temps $t = 0$ dans un champ électrique dépendant du temps dirigé selon l'axe Oz

$$\vec{E}(t) = E_0 \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \vec{k}.$$

où τ est une constante ayant la dimension du temps. Le potentiel $V(t)$ résultant de l'interaction de l'électron de l'atome d'hydrogène avec le champ $\vec{E}(t)$ s'écrit

$$V(t) = -e \vec{r} \cdot \vec{E}(t)$$

En considérant $V(t)$ comme une perturbation, calculer la probabilité pour que l'atome se trouve dans l'état 2p après un temps suffisamment long (i.e., $t \rightarrow +\infty$).

On donne :

$$\begin{aligned} \psi_{1s}(\vec{r}) &= \langle \vec{r} | \psi_{1s} \rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi(a_0)^3}} \exp(-r/a_0) \\ \psi_{2p}(\vec{r}) &= \langle \vec{r} | \psi_{2p} \rangle = \frac{1}{\sqrt{8\pi(a_0)^3}} \frac{r}{2a_0} \exp(-r/2a_0) \cos \theta \\ \Gamma(n) &= \int_0^{+\infty} \rho^{n-1} \exp(-\rho) d\rho, \quad E_{2p} = \frac{E_{1s}}{4}. \end{aligned}$$

Exercice 11

Considérons la perturbation harmonique

$$V(t) = v e^{i\omega t} + v^+ e^{-i\omega t}$$

où v est un opérateur indépendant du temps. Une telle perturbation survienne, par exemple, lorsque des particules chargées (électrons) interagissent avec un champ électromagnétique.

- 1) Trouver $P_{i\rightarrow f}(t)$ en négligeant le terme qui vient du produit. Trouver le taux de transition $\Gamma_{i\rightarrow f} = \frac{P_{i\rightarrow f}(t)}{t}$.
- 2) En déduire que le taux de transition est différent de zéro que lorsque l'une des deux conditions suivantes sont vérifiées

$$E_f = E_i \pm \hbar\omega$$

Quelle est la signification physique de ce résultat ?

Chapitre 5

Particules identiques

5.1 Généralité

Il existe dans la nature de nombreux systèmes composés de plusieurs particules de la même espèce. Ces particules ont toutes la même masse, la même charge, le même spin et toutes autres grandeurs intrinsèques. Ces particules sont dites identiques et ne peuvent pas être distinguées en mesurant leurs propriétés. Par exemple, les électrons d'un atome sont des particules identiques.

Dans ce chapitre, nous voulons examiner comment décrire les systèmes de plusieurs particules. Nous allons considérer en particulier les systèmes de particules identiques et voir comment construire leurs fonctions d'onde.

La dynamique d'un système de N particules est décrite par un hamiltonien H obtenu en généralisant l'hamiltonien à une particule

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m_i} + V(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t) \quad (5.1)$$

Le potentiel $V(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t)$ représente toutes formes d'interactions (internes, externes, mutuelles,...). Les opérateurs correspondants aux différentes particules commutent

$$[x_i, p_{x_j}] = i\hbar\delta_{ij}, \quad [x_i, x_j] = [p_{x_i}, p_{x_j}] = 0, \quad (i, j = 1, \dots, N)$$

L'état d'un système de N particules sans spin (nous ignorons le spin pour le moment) est décrit par une fonction d'onde $\Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t)$. L'évolution dans le temps de cette fonction d'onde s'écrit

$$i\hbar \frac{\partial \Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t)}{\partial t} = H\Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t) \quad (5.2)$$

Dans le cas où le potentiel V est indépendant du temps, la solution de (5.2) est

$$\Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t) = \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) e^{-\frac{iE}{\hbar}t}. \quad (5.3)$$

où E est l'énergie totale du système de N particules.

Remarque : Pour simplifier cette étude, on va considérer uniquement un système de deux particules. La généralisation est simple à formuler.

5.2 Symétrie d'échange

Soit ξ_i les coordonnées (position \vec{r}_i , spin \vec{s}_i , et tous autres degrés de liberté internes) de la particule (i) et soit $\psi(\xi_1, \xi_2)$ la fonction d'onde du système de 2 particules. On définit l'opérateur d'échange (où opérateur de permutation) P_{12} comme

$$P_{12}\psi(\xi_1, \xi_2) = \psi(\xi_2, \xi_1) \quad (5.4)$$

et comme

$$\psi(\xi_2, \xi_1) = P_{21}\psi(\xi_1, \xi_2) \Rightarrow P_{12} = P_{21}$$

et aussi

$$\begin{aligned} P_{12}^2\psi(\xi_1, \xi_2) &= P_{12}P_{12}\psi(\xi_1, \xi_2) = P_{12}\psi(\xi_2, \xi_1) \\ &= \psi(\xi_1, \xi_2) \Rightarrow P_{12}^2 = 1 \end{aligned}$$

Donc les valeurs propres de P_{12} sont ± 1 c-à-d

$$P_{12}\psi(\xi_1, \xi_2) = \pm\psi(\xi_1, \xi_2) \quad (5.5)$$

Les fonctions d'onde relatives à la valeur propre 1 sont symétriques et celles à la valeur -1 sont antisymétriques par rapport à l'échange. Notons ces fonctions par ψ_s et ψ_a respectivement. On écrit

$$\psi_s(\xi_1, \xi_2) = \psi_s(\xi_2, \xi_1) \quad (5.6)$$

$$\psi_a(\xi_1, \xi_2) = -\psi_a(\xi_2, \xi_1) \quad (5.7)$$

5.3 Système de particules discernables (non identiques)

Pour un système de 2 particules discernables et sans interactions mutuelles, chaque particule à la masse m_i et soumise à un potentiel différent $V_i(\xi_i)$. Le potentiel total V est

$$V(\xi_1, \xi_2) = \sum_{i=1}^{N=2} V_i(\xi_i) \quad (5.8)$$

L'hamiltonien du système est donc

$$H = \sum_{i=1}^{N=2} H_i = \sum_{i=1}^{N=2} \left(\frac{p_i^2}{2m_i} + V_i(\xi_i) \right)$$

L'Hamiltonien de différentes particules commutent $[H_1, H_2] = 0$. L'équation de Schrödinger du système s'écrit

$$\begin{aligned} H\psi(\xi_1, \xi_2) &= [H_1 + H_2]\psi(\xi_1, \xi_2) \\ &= E\psi(\xi_1, \xi_2) \end{aligned}$$

Si on considère la séparation

$$\psi(\xi_1, \xi_2) = \prod_{i=1}^{N=2} \psi(\xi_i) = \psi(\xi_1)\psi(\xi_2)$$

on aura

$$\psi(\xi_2)H_1\psi(\xi_1) + \psi(\xi_1)H_2\psi(\xi_2) = E\psi(\xi_1, \xi_2)$$

mais $H_1\psi(\xi_1) = \varepsilon_1\psi(\xi_1)$ et $H_2\psi(\xi_2) = \varepsilon_2\psi(\xi_2)$ il vient

$$[\varepsilon_1 + \varepsilon_2]\psi(\xi_1, \xi_2) = E\psi(\xi_1, \xi_2) \Rightarrow E = \varepsilon_1 + \varepsilon_2 = \sum_{i=1}^{N=2} \varepsilon_i$$

5.4 Système de particules identiques (indiscernable)

En mécanique classique, lorsqu'un système est constitué de particules identiques, il est toujours possible d'identifier et de distinguer chaque particule des autres.

En mécanique quantique, les particules identiques sont vraiment impossibles à distinguer en raison du principe d'incertitude où le concept de la trajectoire d'une particule devient sans aucun sens.

Considérons un système à 2 particules identiques dont la fonction d'onde est $\psi(\xi_1, \xi_2)$. Il est impossible de déterminer expérimentalement l'identité de la particule qui est située à ξ_1 ou celle qui est située à ξ_2 . Mais la probabilité doit rester inchangée par un échange de particules

$$|\psi(\xi_1, \xi_2)|^2 = |\psi(\xi_2, \xi_1)|^2 \quad (5.9)$$

$$\Rightarrow \psi(\xi_1, \xi_2) = \pm \psi(\xi_2, \xi_1) \quad (5.10)$$

Cela veut dire que la fonction d'onde pour un ensemble de particules identiques doit être soit symétrique ou antisymétrique par un échange d'une paire de particules.

5.4.1 Dégénéréscence d'échange

Un ensemble de particules sont dites identiques si les différentes observables liées au système (comme l'hamiltonien H) sont symétriques lorsque deux particules sont interchangées. L'invariance de H sous une permutation de particules provoque une dégénéréscence des valeurs propres de H ; c'est-à-dire que les fonctions d'onde associées à toutes permutations ont la même énergie E . Cela est connu comme la dégénéréscence d'échange.

Cette propriété peut être obtenue en montrant que l'opérateur H commute avec l'opérateur de permutation.

$$\begin{aligned} HP_{12}\psi(\xi_1, \xi_2) &= H\psi(\xi_2, \xi_1) = E\psi(\xi_2, \xi_1) \\ &= EP_{12}\psi(\xi_1, \xi_2) \\ &= P_{12}E\psi(\xi_1, \xi_2) \\ &= P_{12}H\psi(\xi_1, \xi_2) \\ \Rightarrow [H, P_{12}] &= 0 \end{aligned} \quad (5.11)$$

5.4.2 Postulat de symétrisation

Dans la nature, les états d'un système de particules identiques sont soit totalement symétriques ou totalement antisymétriques sous l'échange de toute paire et que des états avec des symétries mixte n'existent pas. En outre, ce postulat stipule que :

- i) Les particules de spin entier (bosons) ont des états symétriques.
- ii) Les particules de spin demi-entier (fermions) ont des états antisymétriques.

5.4.3 Construction de fonctions d'onde symétriques et antisymétriques

A partir de toute fonction d'onde symétrique $\psi(\xi_1, \xi_2)$ normalisée, on peut construire des fonctions d'onde symétriques $\psi_s(\xi_1, \xi_2)$:

$$\psi_s(\xi_1, \xi_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi(\xi_1, \xi_2) + \psi(\xi_2, \xi_1)] \quad (5.12)$$

on peut aussi construire des fonctions d'onde antisymétriques $\psi_a(\xi_1, \xi_2)$:

$$\psi_a(\xi_1, \xi_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi(\xi_1, \xi_2) - \psi(\xi_2, \xi_1)] \quad (5.13)$$

où on a utilisé le principe de superposition et $1/\sqrt{2}$ est un facteur de normalisation.

5.4.4 Système de 2 particules identiques sans interactions mutuelles

Soit un système de 2 particules identiques sans interactions mutuelles. Chaque particule à la masse $m_i = m$ et soumise à un potentiel $V_i(\xi_i) = V(\xi_i)$. L'équation de Schrödinger du système s'écrit

$$H\psi(\xi_1, \xi_2) = E\psi(\xi_1, \xi_2) \quad (5.14)$$

qui peut être séparée en 2 équations à une particule

$$\left(\frac{p_i^2}{2m} + V(\xi_i) \right) \psi_{\alpha_i}(\xi_i) = \varepsilon_{\alpha_i} \psi_{\alpha_i}(\xi_i) \quad (5.15)$$

où les α_i sont des nombres quantiques de chaque état. Notons ici que l'énergie est donnée (comme dans le cas d'un système de particules discernables) par la somme

$$E = \sum_{i=1}^2 \varepsilon_{\alpha_i} \quad (5.16)$$

alors que la fonction d'onde ne peut être donné dans le cas des particules identiques par le produit $\psi_{\alpha_1, \alpha_2}(\xi_1, \xi_2) = \prod_{i=1}^{N=2} \psi_{\alpha_i}(\xi_i)$ pour deux raisons :

i) Si la fonction d'onde est donnée par ce produit, cela veut dire que la particule 1 est dans l'état $\psi_{\alpha_1}(\xi_1)$ et la particule 2 est dans l'état $\psi_{\alpha_2}(\xi_2)$. Ceci, bien sûr, n'a pas de sens puisque tout ce que nous savons est que l'une des particules est dans l'état ψ_{α_1} et une autre dans l'état ψ_{α_2} puisque les particules sont identiques.

ii) Ce produit n'a pas, en général, une symétrie bien définie. Ceci est en désaccord avec le fait que la fonction d'onde d'un système de particules identiques doit être soit symétrique soit antisymétrique.

Par ailleurs, on peut construire les fonctions d'onde symétriques et antisymétriques pour ce système comme suit

$$\psi_s(\xi_1, \xi_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{\alpha_1}(\xi_1)\psi_{\alpha_2}(\xi_2) + \psi_{\alpha_1}(\xi_2)\psi_{\alpha_2}(\xi_1)] \quad (5.17)$$

$$\psi_a(\xi_1, \xi_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{\alpha_1}(\xi_1)\psi_{\alpha_2}(\xi_2) - \psi_{\alpha_1}(\xi_2)\psi_{\alpha_2}(\xi_1)] \quad (5.18)$$

où on a supposé que $\alpha_1 \neq \alpha_2$. Lorsque $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha$ on aura

$$\psi_s(\xi_1, \xi_2) = \psi_\alpha(\xi_1)\psi_\alpha(\xi_2)$$

$$\psi_a(\xi_1, \xi_2) = 0$$

Nontons qu'on peut écrire la fonction $\psi_s(\xi_1, \xi_2)$ de la façons suivante

$$\psi_s(\xi_1, \xi_2) = \frac{1}{\sqrt{2!}} \sum_P \hat{P} \psi_{\alpha_1}(\xi_1)\psi_{\alpha_2}(\xi_2) \quad (5.19)$$

où \hat{P} est l'opérateur de permutation et la somme est sur toutes les permutations possibles (ici 2 permutations).

On peut écrire également la fonction d'onde $\psi_a(\xi_1, \xi_2)$ sous forme d'un déterminant connu comme déterminant de Slater comme suit

$$\boxed{\psi_a(\xi_1, \xi_2) = \frac{1}{\sqrt{2!}} \begin{vmatrix} \psi_{\alpha_1}(\xi_1) & \psi_{\alpha_1}(\xi_2) \\ \psi_{\alpha_2}(\xi_1) & \psi_{\alpha_2}(\xi_2) \end{vmatrix}} \quad (5.20)$$

5.4.5 Fonction d'onde d'un système de N particules

Pour un système de N particules identiques sans interactions mutuelles, les fonctions d'ondes symétriques et antisymétriques sont données par

$$\psi_s(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P \hat{P} \psi_{\alpha_1}(\xi_1)\psi_{\alpha_2}(\xi_2)\dots\psi_{\alpha_N}(\xi_N) \quad (5.21)$$

$$\psi_a(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_{\alpha_1}(\xi_1) & \psi_{\alpha_1}(\xi_2) & \dots & \psi_{\alpha_1}(\xi_N) \\ \psi_{\alpha_2}(\xi_1) & \psi_{\alpha_2}(\xi_2) & \dots & \psi_{\alpha_2}(\xi_N) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \psi_{\alpha_N}(\xi_1) & \psi_{\alpha_N}(\xi_2) & \dots & \psi_{\alpha_N}(\xi_N) \end{vmatrix} \quad (5.22)$$

avec $\alpha_1 \neq \alpha_2 \neq \dots \neq \alpha_N$.

Cas particuliers

1) si $\alpha_1 = \alpha_2 = \dots = \alpha_N = \alpha$ alors

$$\psi_s(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N) = \psi_\alpha(\xi_1)\psi_\alpha(\xi_2)\dots\psi_\alpha(\xi_N) \quad (5.23)$$

$$\psi_a(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N) = 0 \quad (5.24)$$

2) Si α_1 apparaît N_1 fois dans la suite $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N$ et si α_2 apparaît N_2 fois et ainsi de suite. La fonction d'onde symétrique s'écrit

$$\psi_s(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N) = \sqrt{\frac{N_1!N_2!\dots N_N!}{N!}} \sum_P \hat{P} \psi_{\alpha_1}(\xi_1)\psi_{\alpha_2}(\xi_2)\dots\psi_{\alpha_N}(\xi_N) \quad (5.25)$$

La sommation \sum_P se porte uniquement sur des permutations donnant des termes distincts et par conséquent comprend $N!/N_1!N_2!\dots N_N!$ termes différents.

3) Contrairement au cas symétrique, si parmi les nombres $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N$ seulement deux sont égaux, la fonction d'onde antisymétrique est nulle. Cela veut dire que les fonctions d'ondes antisymétriques sont non nulles seulement si tous les nombres $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N$ sont distincts. C'est le principe d'exclusion de Pauli qui stipule que deux fermions identiques ne peuvent occuper le même état quantique individuel. Ainsi dans l'atome, par exemple, tous les électrons ont des nombres quantiques différents. C'est également le cas dans tous les autres systèmes de fermions.

Remarques

i) A basse température, contrairement aux fermions, les bosons ont tendance à se condenser tous dans le même état (état fondamental). Ce phénomène est connu comme la condensation de Bose-Einstein.

ii) Toutes les particules élémentaires observées sont des fermions ou des bosons.

Exercice d'application

Considérons un système de 2 particules sans interactions mutuelles confinées dans un puits infini unidimensionnel défini comme suit

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

Déterminer l'énergie et la fonction d'onde de l'état fondamental et du premier état excité lorsque les 2 particules sont :

- (a) discernables et sans spin avec $m_1 < m_2$.
- (b) des bosons identiques. (c) identiques de spin 1/2.

Solution

(a) Chaque particule se déplace dans un potentiel défini par $V_i(x_i) = 0$ pour $0 < x_i < a$ et $V_i(x_i) = \infty$ ailleurs. Dans ce cas, l'équation de Schrödinger du système est

$$\sum_{i=1}^2 \frac{\hbar^2}{2m_i} \frac{d^2}{dx_i^2} \psi_{n_1, n_2}(x_1, x_2) = E_{n_1, n_2} \psi_{n_1, n_2, n_3}(x_1, x_2)$$

qui est séparable en 2 équations à une particule comme

$$\frac{\hbar^2}{2m_i} \frac{d^2}{dx_i^2} \psi_{n_i}(x_i) = \varepsilon_{n_i} \psi_{n_i}(x_i), \quad i = 1, 2.$$

avec

$$\varepsilon_{n_i} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n_i^2}{2m_i a^2}, \quad \psi_{n_i}(x_i) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n_i \pi}{a} x_i\right)$$

L'énergie totale et la fonction d'onde sont

$$E_{n_1, n_2} = \sum_{i=1}^2 \varepsilon_{n_i} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2a^2} \left(\frac{n_1^2}{m_1} + \frac{n_2^2}{m_2} \right),$$

$$\psi_{n_1, n_2}(x_1, x_2) = \prod_{i=1}^2 \psi_{n_i}(x_i) = \frac{2}{a} \sin\left(\frac{n_1 \pi}{a} x_1\right) \sin\left(\frac{n_2 \pi}{a} x_2\right)$$

L'état fondamental du système correspond au cas où les 2 particules occupent leur état fondamental ; $n_1 = n_2 = 1$ donc

$$E^{(0)} = E_{1,1} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2a^2} \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right),$$

$$\psi^{(0)} = \psi_{1,1}(x_1, x_2) = \frac{2}{a} \sin\left(\frac{\pi}{a} x_1\right) \sin\left(\frac{\pi}{a} x_2\right)$$

Comme la particule 2 a la plus grande masse, le premier état excité correspond au cas où la particule 2 est dans $n_2 = 2$ tandis que la particule 1 reste dans $n_1 = 1$. Alors on a

$$E^{(1)} = E_{1,2} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2a^2} \left(\frac{1}{m_1} + \frac{4}{m_2} \right),$$

$$\psi^{(1)} = \psi_{1,2}(x_1, x_2) = \frac{2}{a} \sin\left(\frac{\pi}{a} x_1\right) \sin\left(\frac{2\pi}{a} x_2\right)$$

(b) Si les 2 particules sont des bosons identiques, l'état fondamental correspond au cas où les particules sont dans $n_1 = n_2 = 1$. Ainsi

$$E^{(0)} = E_{1,1} = 2\varepsilon_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{a^2 m}$$

$$\psi^{(0)} = \psi_{1,1}(x_1, x_2) = \psi_1(x_1) \psi_1(x_2)$$

$$= \frac{2}{a} \sin\left(\frac{\pi}{a} x_1\right) \sin\left(\frac{\pi}{a} x_2\right)$$

Comme les particules sont identiques, alors pour le premier état excité, une particule est dans l'état ψ_1 (d'énergie $\varepsilon_1 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2a^2m}$) et une particule est dans l'état ψ_2 (avec une énergie $\varepsilon_2 = \frac{4\hbar^2\pi^2}{2a^2m} = 4\varepsilon_1$);

$$E^{(1)} = \varepsilon_1 + \varepsilon_2 = \varepsilon_1 + 4\varepsilon_1 = 5\varepsilon_1 = \frac{5\hbar^2\pi^2}{2a^2m}$$

La fonction d'onde totale du premier état excité s'écrit

$$\psi^{(1)}(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2!}} [\psi_1(x_1)\psi_2(x_2) + \psi_1(x_2)\psi_2(x_1)]$$

qui est une fonction d'onde symétrique.

(c) Si les 2 particules sont identiques de spin 1/2 (des fermions), l'état fondamental correspond au cas où les 2 particules sont dans l'état ψ_1 (une particule a un spin en haut $|+\rangle$ et l'autre a un spin en bas $|-\rangle$).

$$E^{(0)} = 2\varepsilon_1 = \frac{\hbar^2\pi^2}{a^2m}$$

la fonction d'onde de l'état fondamental est antisymétrique

$$\psi^{(0)}(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2!}} \begin{vmatrix} \psi_1(x_1)\chi(s_1) & \psi_1(x_2)\chi(s_2) \\ \psi_1(x_1)\chi(s_1) & \psi_1(x_2)\chi(s_2) \end{vmatrix} \quad (5.26)$$

Nous devons garder à l'esprit que les états de spin sont donnés par

$$\chi(s_i) = |\pm\rangle$$

Le premier état excité correspond au cas où une particule est dans l'état ψ_1 (de spin $|+\rangle$ ou $|-\rangle$) et l'autre particule sont dans l'état ψ_2 (de spin $|+\rangle$ ou $|-\rangle$). L'énergie de cet état est

$$E^{(1)} = \varepsilon_1 + \varepsilon_2 = \varepsilon_1 + 4\varepsilon_1 = 5\varepsilon_1 = \frac{5\hbar^2\pi^2}{2a^2m}$$

5.5 Exercices

Exercice 01

Dans un atome d'hélium ($Z = 2$), on néglige l'interaction spin-orbite et l'interaction entre les électrons, trouver les niveaux d'énergie et la fonction d'onde correspondante de l'état fondamental et le premier état excité.

Exercice 02

L'Hamiltonien de l'atome d'hélium peut être écrit, en négligeant l'interactions spin-orbite, comme

$$H = H_0 + H_{12}$$

où H_0 est la somme de deux parties, chacune correspondant à l'Hamiltonien d'un seul électron en interaction avec le noyau séparément

$$H_0 = \frac{p_i^2}{2m} - \frac{2e^2}{r_i}$$

Le terme

$$H_{12} = \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$$

est la répulsion électrostatique entre les deux électrons.

- 1) (a) Quel est l'état fondamental de l'atome d'hélium si on néglige la répulsion des électrons ?
- (b) Quel est le premier état excité ?
- 2) Considérons maintenant le terme de répulsion comme une perturbation. Calculer la correction à l'énergie de l'état fondamental.

Exercice 03

Considérons un système de 2 particules identiques de spin 1/2 sans interactions mutuelles de masse m confinées dans puits infini unidimensionnel défini comme suit :

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

Supposons que les particules sont dans un état défini par la fonction d'onde :

$$\psi(x_1, x_2) = \frac{\sqrt{2}}{a} \left\{ \sin\left(\frac{2\pi x_1}{a}\right) \sin\left(\frac{5\pi x_2}{a}\right) + \sin\left(\frac{5\pi x_1}{a}\right) \sin\left(\frac{2\pi x_2}{a}\right) \right\} \chi(s_1, s_2)$$

où x_1 et x_2 sont les positions des particules 1 et 2 respectivement, et $\chi(s_1, s_2)$ est l'état du spin des deux particules.

- (a) Est ce que $\chi(s_1, s_2)$ doit être un état singlet ou triplet ?
- (b) Trouver l'énergie du système.

Chapitre 6

Initiation à la théorie de la diffusion

6.1 Introduction

Presque tout ce que nous savons sur la physique nucléaire et atomique a été découvert par des expériences de diffusion (collision) comme, par exemple, la découverte du noyau atomique, les nucléons, les quarks, etc.

Dans l'étude expérimentale de la diffusion on dispose en général d'une source de particules incidentes sensiblement monokinétiques et on réalise un faisceau incident à peu près parallèle au moyen de collimateurs suffisamment étroits pour que les particules aient une impulsion pratiquement bien déterminée en grandeur et en direction.

Soit un faisceau de particules (A) diffusé à partir d'une cible localisée (B). Suite à cette collision, plusieurs cas sont possibles

$$A + B \rightarrow \begin{cases} A + B & (\text{élastique}) \\ A + B^* \\ A + B + C \end{cases} \quad (\text{inélastique})$$
$$C \quad (\text{absorption})$$

Pour simplifier, nous nous concentrerons sur la diffusion élastique dans laquelle l'énergie et le nombre de particules sont conservés.

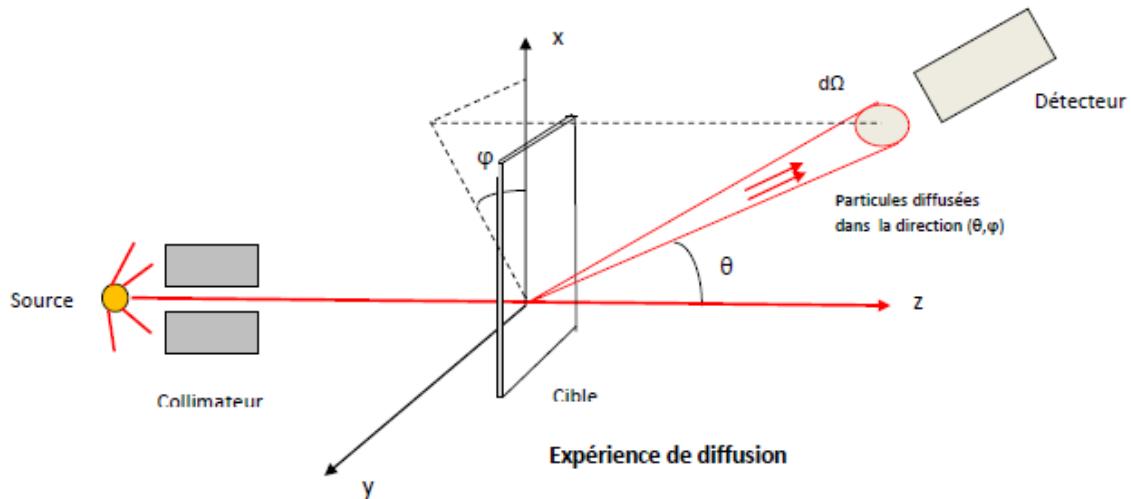
6.2 Caractéristiques d'un phénomène de diffusion

A) *Caractéristiques du faisceau incident*

- i) La nature des particules incidentes.
 - ii) L'intensité I_0 du faisceau : qui le nombre de particules qui traversent par unité de temps l'unité de surface normale à la direction du faisceau.
- B) *Caractéristiques de la cible*
- i) La nature des atomes qui la constituent.
 - ii) Le nombre X de ces atomes (centre diffuseurs).

6.3 Section efficace de diffusion

On place une cible sur le trajet d'un faisceau incident et on dispose, en dehors de celui-ci, un compteur (DéTECTEUR) qui dénombre les particules diffusées dans un angle solide $d\Omega$ autour d'une direction moyenne repérée par deux angles polaires (θ, φ) . L'angle solide $d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi$ est fixé par l'ouverture de la fenêtre d'entrée du compteur et par la distance r de celui-ci à la cible.



Le détecteur définit alors un angle solide $d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi$. On compte le nombre dn de particules diffusées qui traversent par unité de temps ce détecteur. Ainsi, on constate que :

- i) dn est proportionnel à $d\Omega$.
- ii) dn dépend des angles θ et φ .
- iii) dn est proportionnel à I_0 et X .

On peut écrire donc $dn = \sigma(\theta, \varphi) I_0 X d\Omega$ soit

$$\frac{dn}{I_0 X} = \sigma(\theta, \varphi) d\Omega \quad (6.1)$$

La quantité $\sigma(\theta, \varphi) d\Omega = d\sigma$ est la section efficace différentielle de diffusion.

Dimensions de $d\sigma$:

$$d\sigma = \frac{\text{nombre de particules diffusées dans l'angle solide } d\Omega \text{ par unité de temps}}{\text{nombre de particules incidentes qui traversent une unité de surface par unité de temps}}$$

d'où

$$[d\sigma] = \frac{T^{-1}}{T^{-1} L^{-2}} = L^2$$

il en résulte que $d\sigma$ est une surface (section). On exprime une section efficace en *barn* (*b*) : $1\text{barn} = 10^{-24}\text{cm}^2$.

La section efficace totale $\sigma(\theta, \varphi) = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega$ mesure l'efficacité de la cible (du potentiel) à diffuser les particules incidentes. Elle représente la surface totale du faisceau incident qui est diffusé par la cible.

6.4 Calcul de la section efficace

On considère l'équation de Schrödinger

$$\left[\frac{p^2}{2M} + V(r) \right] \psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \quad (6.2)$$

On suppose que $V(r)$ est de portée finie, c'est-à-dire que l'interaction entre la particule et le potentiel se produit uniquement dans une région limitée de l'espace $r \leq a$ où a est la portée du potentiel. Pour $r > a$ le potentiel est négligeable ($V(r) \simeq 0$). Donc, avant la collision la particule se comporte comme une particule libre et peut donc être décrite par une onde plane

$$\psi_{\text{inc}}(\vec{r}) = A e^{i \vec{k} \cdot \vec{r}} \quad (6.3)$$

où \vec{k} est le vecteur d'onde associé à l'onde incidente avec $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ et A est une constante de normalisation.

Lorsque l'onde incidente interagit avec la cible, une onde sortante $\psi_{\text{diff}}(\vec{r})$ est diffusée. Pour une diffusion isotrope, l'onde diffusée est une onde sphérique de la forme $e^{i \vec{k}' \cdot \vec{r}} / r$. Mais en

générale, l'onde diffusée n'est pas à symétrie sphérique, c'est-à-dire que son amplitude dépend de la direction (θ, φ) le long de laquelle elle est détectée et par conséquent on écrit

$$\psi_{\text{diff}}(\vec{r}) = A f(\theta, \varphi) \frac{e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}}}{r} \quad (6.4)$$

où $f(\theta, \varphi)$ est l'amplitude de diffusion et \vec{k}' est le vecteur d'onde associé à l'onde diffusée. Après la diffusion, la fonction d'onde totale est composée d'une superposition de l'onde plane incidente et de l'onde diffusée

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}) &= \psi_{\text{inc}}(\vec{r}) + \psi_{\text{diff}}(\vec{r}) \\ &\simeq A \left(e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + f(\theta, \varphi) \frac{e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}}}{r} \right) \end{aligned}$$

L'amplitude de diffusion $f(\theta, \varphi)$ joue un rôle central dans la théorie de la diffusion, car elle détermine la section efficace différentielle de diffusion. Pour le voir, introduisons le flux incident

$$\vec{j}_{\text{inc}} = \frac{\hbar}{2mi} \left(\psi_{\text{inc}}^* \vec{\nabla} \psi_{\text{inc}} - \psi_{\text{inc}} \vec{\nabla} \psi_{\text{inc}}^* \right) \quad (6.5)$$

et le flux diffusé

$$\vec{j}_{\text{diff}} = \frac{\hbar}{2mi} \left(\psi_{\text{diff}}^* \vec{\nabla} \psi_{\text{diff}} - \psi_{\text{diff}} \vec{\nabla} \psi_{\text{diff}}^* \right) \quad (6.6)$$

On remplace (6.3) dans (6.5) et (6.4) dans (6.6), on obtient les modules suivants

$$j_{\text{inc}} = \frac{|A|^2 \hbar k}{m} \quad (6.7)$$

$$j_{\text{diff}} = \frac{|A|^2 \hbar k'}{mr^2} |f(\theta, \varphi)|^2 \quad (6.8)$$

le nombre dn des particules diffusées dans l'angle solide $d\Omega$ dans la direction (θ, φ) et passant à travers un élément de surface $dS = r^2 d\Omega$ par unité de temps est donné par

$$dn = j_{\text{diff}} r^2 d\Omega \quad (6.9)$$

de (6.8) on obtient

$$dn = \frac{|A|^2 \hbar k'}{m} |f(\theta, \varphi)|^2 d\Omega \quad (6.10)$$

le nombre dn_0 de particules incidentes qui traversent une unité de surface par unité de temps

$$dn_0 = j_{\text{inc}} \quad (6.11)$$

mais on a vu que la section efficace différentielle est

$$d\sigma = \frac{dn}{I_0 X} \quad (6.12)$$

on prend $X = 1$, il est claire alors que $I_0 = j_{\text{inc}}$ et donc on obtient

$$d\sigma = \frac{k' |f(\theta, \varphi)|^2 d\Omega}{k} \quad (6.13)$$

Notons que la constante de normalisation A ne contribue pas à la section efficace différentielle, on va le prendre égale à 1. Pour une diffusion élastique on a $k' = k$ et donc

$$d\sigma = |f(\theta, \varphi)|^2 d\Omega \quad (6.14)$$

$f(\theta, \varphi)$ est l'amplitude de diffusion.

6.5 Méthode des ondes partielles

But : Développer une méthode pour calculer l'amplitude de diffusion $f(\theta, \varphi)$.

On suppose ici que le potentiel $V(r)$ est à symétrie sphérique (potentiel central) et à courte portée. Supposons aussi que l'onde incidente est suivant l'axe (Oz) c-à-d

$$\psi_{\text{inc}}(\vec{r}) = e^{ikz} = e^{ikr \cos \theta} = \sum_{\ell=0}^{+\infty} i^\ell (2\ell + 1) j_\ell(kr) P_\ell(\cos \theta) \quad (6.15)$$

Rappelons aussi que la solution de l'équation de Schrödinger (6.2) est de la forme

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{\ell,m}^{+\infty} a_{\ell m} R(r) Y_\ell^m(\theta, \varphi) \quad (6.16)$$

où la partie radiale $R(r) = (1/r)U(r)$ vérifiée l'équation suivante

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2 U(r)}{dr^2} + \left[\frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2Mr^2} + V(r) \right] U(r) = EU(r) \quad (6.17)$$

Comme $V(r)$ est central, le système est invariant par rotation autour de l'axe (Oz) (L_z commute avec l'Hamiltonien du système). L'onde diffusée ne doit pas dépendre de l'angle φ , c'est-à-dire $m = 0$.

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{\ell=0}^{+\infty} c_\ell R(r) P_\ell(\cos \theta) \quad (6.18)$$

avec

$$\begin{aligned} Y_\ell^0(\theta, \varphi) &= \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} P_\ell(\cos \theta) \\ \text{et } \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} a_{\ell 0} &= c_\ell. \end{aligned}$$

Après la diffusion, la fonction d'onde est constituée de l'onde plane incidente et de l'onde diffusée

$$\psi(\vec{r}) \simeq \psi_{\text{inc}}(\vec{r}) + \psi_{\text{diff}}(\vec{r}) \quad (6.19)$$

c'est-à-dire

$$\psi(\vec{r}) \simeq \sum_{\ell=0}^{+\infty} i^\ell (2\ell+1) j_\ell(kr) P_\ell(\cos \theta) + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (6.20)$$

Ainsi, la fonction d'onde est donnée soit par (6.18) ou par (6.20).

En général, les détecteurs sont situés à des distances de la cible qui sont beaucoup plus grandes que la taille de la cible elle-même. Ainsi, les mesures effectuées par les détecteurs se rapportent à des fonctions d'onde diffusées à des grandes valeurs de la distance radiale r . Pour déterminer l'amplitude de diffusion $f(\theta)$, nous allons établir une connexion entre les formes asymptotiques des expressions (6.18) et (6.20). Ainsi, puisque

$$j_\ell(kr) \underset{r \rightarrow +\infty}{\simeq} \sin\left(kr - \ell \frac{\pi}{2}\right) / kr$$

alors l'expression (6.20) se comporte comme

$$\psi(\vec{r}) \underset{r \rightarrow +\infty}{\rightarrow} \sum_{\ell=0}^{+\infty} i^\ell (2\ell+1) \frac{\sin\left(kr - \ell \frac{\pi}{2}\right)}{kr} P_\ell(\cos \theta) + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (6.21)$$

de plus

$$\begin{aligned} \sin\left(kr - \ell \frac{\pi}{2}\right) &= \frac{e^{i(kr - \ell \frac{\pi}{2})} - e^{-i(kr - \ell \frac{\pi}{2})}}{2i}, \\ &= \frac{(-i)^\ell e^{ikr} - (i)^\ell e^{-ikr}}{2i} \end{aligned}$$

alors (6.21) devient

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}) &\rightarrow -\frac{e^{-ikr}}{2ikr} \sum_{\ell=0}^{+\infty} i^{2\ell} (2\ell+1) P_\ell(\cos \theta) \\ &\quad + \frac{e^{ikr}}{r} \left[f(\theta) + \sum_{\ell=0}^{+\infty} \frac{(2\ell+1)}{2ik} P_\ell(\cos \theta) \right] \end{aligned} \quad (6.22)$$

puisque $i^\ell (-i)^\ell = 1$. Pour déterminer la forme asymptotique de (6.18), on considère qu'à des grandes valeurs de la distance radiale r le potentiel $V(r)$ est négligeable ($V(r) \simeq 0$). Donc l'équation de Schrödinger (6.17) se réduit à celle d'une particule libre où la solution de l'équation radiale correspondante est une combinaison des fonctions de Bessel et de Neumann sphériques

$$R(r) = A_\ell j_\ell(kr) + B_\ell n_\ell(kr) \quad (6.23)$$

la forme asymptotique de $R(r)$ est alors

$$R(r) \underset{r \rightarrow +\infty}{\rightarrow} A_\ell \frac{\sin(kr - \ell \frac{\pi}{2})}{kr} - B_\ell \frac{\cos(kr - \ell \frac{\pi}{2})}{kr}, \quad (6.24)$$

réécrivons (6.24) comme

$$R(r) \rightarrow b_\ell \frac{\sin(kr - \ell \frac{\pi}{2} + \delta_\ell)}{kr} \quad (6.25)$$

où $A_\ell = b_\ell \cos \delta_\ell$ et $B_\ell = -b_\ell \sin \delta_\ell$, c'est-à-dire

$$\tan \delta_\ell = -\frac{B_\ell}{A_\ell} \quad (6.26)$$

L'angle δ_ℓ est appelé déphasage.

Remarques : Alors δ_ℓ a une valeur réelle qui s'annule pour toutes valeurs de ℓ lorsque le potentiel est nul ($V(r) = 0$), c'est-dire dans le cas où la particule est libre. La fonction d'onde (6.18) se comporte pour $r \rightarrow +\infty$ comme suit

$$\psi(\vec{r}) \underset{r \rightarrow +\infty}{\rightarrow} \sum_{\ell=0}^{+\infty} c_\ell b_\ell \frac{\sin(kr - \ell \frac{\pi}{2} + \delta_\ell)}{kr} P_\ell(\cos \theta), \quad (6.27)$$

et comme

$$\begin{aligned} \sin\left(kr - \ell \frac{\pi}{2} + \delta_\ell\right) &= \frac{e^{i(kr - \ell \frac{\pi}{2} + \delta_\ell)} - e^{-i(kr - \ell \frac{\pi}{2} + \delta_\ell)}}{2i}, \\ &= \frac{(-i)^\ell e^{ikr} e^{i\delta_\ell} - (i)^\ell e^{-ikr} e^{-i\delta_\ell}}{2i} \end{aligned}$$

on peut alors réécrire (6.27) de la façon suivante

$$\psi(\vec{r}) \underset{r \rightarrow +\infty}{\rightarrow} \sum_{\ell=0}^{+\infty} c_\ell b_\ell \left(\frac{(-i)^\ell e^{ikr} e^{i\delta_\ell} - (i)^\ell e^{-ikr} e^{-i\delta_\ell}}{2ikr} \right) P_\ell(\cos \theta),$$

c'est-à-dire

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}) &\underset{r \rightarrow +\infty}{\rightarrow} -\frac{e^{-ikr}}{2ikr} \sum_{\ell=0}^{+\infty} c_\ell b_\ell (i)^\ell e^{-i\delta_\ell} P_\ell(\cos \theta) \\ &+ \frac{e^{ikr}}{2ikr} \sum_{\ell=0}^{+\infty} c_\ell b_\ell (-i)^\ell e^{i\delta_\ell} P_\ell(\cos \theta). \end{aligned} \quad (6.28)$$

Egalons maintenant les coefficients de e^{-ikr}/r dans (6.22) et (6.28), on obtient

$$\begin{aligned} c_\ell b_\ell (i)^\ell e^{-i\delta_\ell} &= i^{2\ell} (2\ell + 1) \\ \Rightarrow c_\ell b_\ell &= i^\ell (2\ell + 1) e^{i\delta_\ell} \end{aligned}$$

alors (6.28) s'écrit

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}) &\xrightarrow[r \rightarrow +\infty]{} -\frac{e^{-ikr}}{2ikr} \sum_{\ell=0}^{+\infty} i^{2\ell} (2\ell + 1) P_\ell(\cos \theta) \\ &\quad + \frac{e^{ikr}}{2ikr} \sum_{\ell=0}^{+\infty} (2\ell + 1) e^{2i\delta_\ell} P_\ell(\cos \theta), \quad r \rightarrow +\infty \end{aligned} \quad (6.29)$$

Egalons maintenant les coefficients de e^{ikr}/r dans (6.22) et (6.29), on a

$$f(\theta) + \frac{1}{2ik} \sum_{\ell=0}^{+\infty} (2\ell + 1) P_\ell(\cos \theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{\ell=0}^{+\infty} (2\ell + 1) e^{2i\delta_\ell} P_\ell(\cos \theta)$$

c'est-à-dire

$$f(\theta) = \sum_{\ell=0}^{+\infty} \frac{1}{2ik} (2\ell + 1) P_\ell(\cos \theta) (e^{2i\delta_\ell} - 1) \quad (6.30)$$

ou bien

$$f(\theta) = \sum_{\ell=0}^{+\infty} \frac{(2\ell+1)e^{i\delta_\ell}}{k} \sin \delta_\ell P_\ell(\cos \theta) \quad (6.31)$$

qui s'écrit aussi comme

$$f(\theta) = \sum_{\ell=0}^{+\infty} f_\ell(\theta)$$

avec

$$f_\ell(\theta) = \frac{(2\ell+1)e^{i\delta_\ell}}{k} \sin \delta_\ell P_\ell(\cos \theta), \quad (6.32)$$

$f_\ell(\theta)$ est l'amplitude de l'onde partielle ℓ . La section efficace différentielle est obtenue à partir de l'expression (6.14) et (6.31)

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= |f(\theta)|^2 \\ &= \sum_{\ell=0}^{+\infty} \frac{(2\ell+1)e^{i\delta_\ell}}{k} \sin \delta_\ell P_\ell(\cos \theta) \sum_{\ell'=0}^{+\infty} \frac{(2\ell'+1)e^{-i\delta_{\ell'}}}{k} \sin \delta_{\ell'} P_{\ell'}(\cos \theta) \\ &= \frac{1}{k^2} \sum_{\ell=0}^{+\infty} \sum_{\ell'=0}^{+\infty} (2\ell+1)(2\ell'+1) e^{i(\delta_\ell-\delta_{\ell'})} \sin \delta_\ell \sin \delta_{\ell'} P_{\ell'}(\cos \theta) P_\ell(\cos \theta) \end{aligned}$$

la section efficace totale (intégrée) est donc

$$\begin{aligned}\sigma &= \int |f(\theta)|^2 d\Omega = \int_0^\pi |f(\theta)|^2 \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \\ &= 2\pi \int_0^\pi |f(\theta)|^2 \sin \theta d\theta \\ &= \frac{2\pi}{k^2} \sum_{\ell=0}^{+\infty} \sum_{\ell'=0}^{+\infty} (2\ell+1)(2\ell'+1) e^{i(\delta_\ell - \delta_{\ell'})} \sin \delta_\ell \sin \delta_{\ell'} \int_0^\pi P_{\ell'}(\cos \theta) P_\ell(\cos \theta) \sin \theta d\theta\end{aligned}$$

l'intégrale précédent se calcule en posant $x = \cos \theta$ et en utilisant la relation d'orthogonalité des polynômes de Legendre

$$\int_{-1}^1 P_{\ell'}(x) P_\ell(x) dx = \frac{2\delta_{\ell,\ell'}}{2\ell+1}. \quad (6.33)$$

donc

$$\boxed{\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{\ell=0}^{+\infty} (2\ell+1) \sin^2 \delta_\ell} \quad (6.34)$$

rappelons que si $V(r) = 0$ alors $\delta_\ell = 0$, $\forall \ell \Rightarrow \sigma = 0$.

6.5.1 Théorème optique

Pour $\theta = 0$ l'amplitude donnée par (6.31) se réduit à

$$f(0) = \frac{1}{k} \sum_{\ell=0}^{+\infty} (2\ell+1) e^{i\delta_\ell} \sin \delta_\ell P_\ell(1)$$

comme $P_\ell(1) = 1$, et $e^{i\delta_\ell} = \cos \delta_\ell + i \sin \delta_\ell$, on a

$$f(0) = \frac{1}{k} \sum_{\ell=0}^{+\infty} (2\ell+1) (\cos \delta_\ell \sin \delta_\ell + i \sin^2 \delta_\ell)$$

on déduit que la partie imaginaire de $f(0)$ vaut

$$\text{Im } f(0) = \frac{1}{k} \sum_{\ell=0}^{+\infty} (2\ell+1) \sin^2 \delta_\ell \quad (6.35)$$

remplaçons (6.35) dans (6.34) on obtient le théorème optique

$$\boxed{\sigma = \frac{4\pi}{k} \text{Im } f(0)} \quad (6.36)$$

6.5.2 Calcul de déphasage dans le cas d'un potentiel de portée finie

Soit un potentiel de portée finie définit par

$$V(r) = \begin{cases} V(r) & \text{pour } r < r_0 \\ 0 & \text{pour } r > r_0 \end{cases} \quad (6.37)$$

Comme $V(r)$ est central, la solution de l'équation de Schrödinger pour ce potentiel est donnée par (6.18) à savoir

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{\ell=0}^{+\infty} c_{\ell} R_{\ell}(r) P_{\ell}(\cos \theta)$$

où $R_{\ell}(r) = (1/r) U_{\ell}(r)$ vérifiée l'équation différentielle radiale

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2 U_{\ell}(r)}{dr^2} + \left[\frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2Mr^2} + V(r) \right] U_{\ell}(r) = E U_{\ell}(r) \quad (6.38)$$

Région (I) : $0 < r < r_0$, la partie radiale $R(r)$ est donc donnée par

$$R(r) = \frac{U_{\ell}(r)}{r} \quad (6.39)$$

Région (II) : $r_0 < r < +\infty$, $V(r) = 0$, l'équation radiale se réduit à une équation d'une particule libre où la solution est

$$R_{\ell}(r) = \alpha j_{\ell}(kr) + \beta n_{\ell}(kr) \quad (6.40)$$

α et β des constantes et $k^2 = 2ME/\hbar^2$. Appliquons les conditions de continuité

$$\begin{aligned} R_{\ell}(r_0 - \varepsilon) &= R_{\ell}(r_0 + \varepsilon), \\ \frac{d}{dr} R_{\ell}(r_0 - \varepsilon) &= \frac{d}{dr} R_{\ell}(r_0 + \varepsilon) \end{aligned}$$

où $\varepsilon \rightarrow 0$. On aura

$$\begin{aligned} R_{\ell}(r_0) &= \alpha j_{\ell}(kr_0) + \beta n_{\ell}(kr_0) \\ R'_{\ell}(r_0) &= \alpha k j'_{\ell}(kr) + \beta k n'_{\ell}(kr) \end{aligned}$$

Ecrivons le rapport

$$r_0 \frac{R'_{\ell}(r_0)}{R_{\ell}(r_0)} = \frac{k r_0 j'_{\ell}(kr_0) + \frac{\beta}{\alpha} k r_0 n'_{\ell}(kr_0)}{j_{\ell}(kr_0) + \frac{\beta}{\alpha} n_{\ell}(kr_0)}$$

posons

$$\gamma_{\ell} = r_0 \frac{R'_{\ell}(r_0)}{R_{\ell}(r_0)}$$

on déduit le rapport

$$\frac{\beta}{\alpha} = \frac{kr_0 j'_\ell(kr_0) - \gamma_\ell j_\ell(kr_0)}{\gamma_\ell n_\ell(kr_0) - kr_0 n'_\ell(kr_0)} \quad (6.41)$$

D'autre part

$$R_\ell(r) \xrightarrow[r \rightarrow +\infty]{} \alpha \frac{\sin(kr - \ell \frac{\pi}{2})}{kr} - \beta \frac{\cos(kr - \ell \frac{\pi}{2})}{kr}$$

si on pose $\alpha = c \cos(\delta_\ell)$, $\beta = -c \sin(\delta_\ell)$ c-à-d $\tan(\delta_\ell) = -\frac{\beta}{\alpha}$, on obtient

$$R_\ell(r) \rightarrow c \frac{\sin(kr - \ell \frac{\pi}{2} + \delta_\ell)}{kr}$$

où δ_ℓ est le déphasage. Alors, l'équation (6.41) donne

$$\boxed{\tan(\delta_\ell) = \frac{\gamma_\ell j_\ell(kr_0) - kr_0 j'_\ell(kr_0)}{\gamma_\ell n_\ell(kr_0) - kr_0 n'_\ell(kr_0)}} \quad (6.42)$$

La formule (6.42) permet de calculer le déphasage d'un potentiel de portée finie si on connaît les valeurs des fonctions $j_\ell(kr_0)$, $n_\ell(kr_0)$ et γ .

i) Comportement à haute énergie

A haute énergie ($E \gg$), on néglige le potentiel $V(r)$ devant l'énergie E . L'équation de Schrödinger dans les deux régions précédentes est celle d'une particule libre \Rightarrow le déphasage $\delta_\ell = 0$ donc la section efficace suivant (6.34) est $\sigma = 0 \Rightarrow$ pas de diffusion et les particules traversent la cible directement.

ii) Comportement à basse énergie

A basse énergie ($E \ll$), c'est-à-dire $kr_0 \ll 1$ les fonctions de Bessel sphériques se comportent comme suit

$$\begin{aligned} j_\ell(kr_0) &\simeq \frac{2^\ell \ell!}{(2\ell+1)!} (kr_0)^\ell \Rightarrow j'_\ell(kr_0) \simeq \frac{2^\ell (\ell!)^\ell}{(2\ell+1)!} (kr_0)^{\ell-1} \\ n_\ell(kr_0) &\simeq -\frac{(2\ell)!}{2^\ell \ell!} (kr_0)^{-\ell-1} \Rightarrow n'_\ell(kr_0) \simeq \frac{(2\ell)! (\ell+1)}{2^\ell \ell!} (kr_0)^{-\ell-2} \end{aligned}$$

Alors le déphasage (6.42) s'écrit

$$\tan(\delta_\ell) \simeq -\frac{2^{2\ell} (\ell!)^2}{(2\ell)! (2\ell+1)!} \frac{[\gamma_\ell - \ell]}{[\gamma_\ell + \ell + 1]} (kr_0)^{2\ell+1} \quad (6.43)$$

ou bien

$$\begin{aligned} \tan(\delta_\ell) &\simeq -a_\ell k^{2\ell+1} \\ \text{avec } a_\ell &= \frac{2^{2\ell} (\ell!)^2}{(2\ell)! (2\ell+1)!} \frac{[\gamma_\ell - \ell]}{[\gamma_\ell + \ell + 1]} r_0^{2\ell+1} \end{aligned}$$

a_ℓ est appelée longueur de diffusion.

Suite à l'équation (6.43) à basse énergie ($kr_0 \ll 1$) on a $\tan(\delta_\ell) \ll \Rightarrow \tan(\delta_\ell) \simeq \delta_\ell \simeq \sin \delta_\ell$. Ainsi, la section efficace de diffusion

$$\begin{aligned}\sigma &= \frac{4\pi}{k^2} \sum_{\ell=0}^{+\infty} (2\ell+1) \sin^2 \delta_\ell \simeq \frac{4\pi}{k^2} \sum_{\ell=0}^{+\infty} (2\ell+1) \delta_\ell^2 \\ &\Rightarrow \sigma \simeq \sum_{\ell=0}^{+\infty} 4\pi (2\ell+1) a_\ell^2 k^{4\ell} = \sum_{\ell=0}^{+\infty} \sigma_\ell\end{aligned}$$

donc lorsque $k \rightarrow 0$

$$\sigma_\ell = \begin{cases} 0 & \text{si } \ell \neq 0 \\ 4\pi a_0^2 & \text{si } \ell = 0 \end{cases}$$

Alors à basse énergie, la section efficace est dominée par les ondes s :

$$\boxed{\sigma \simeq \sigma_0 = 4\pi a_0^2} \quad (6.44)$$

Exercice d'application

I) Une particule de masse m est diffusée par le potentiel attractif $V(r)$ défini par

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

La partie radiale de la fonction d'onde totale de la particule est $R_\ell(r) = u_\ell(r)/r$.

(1) Soient $k_1^2 = 2m(E + V_0)/\hbar^2$ et $k_2^2 = 2mE/\hbar^2$ avec $E > 0$.

(a) Ecrire l'équation de Schrödinger satisfaite par la fonction $u_\ell(r)$ pour $r \leq a$ et $r > a$.

(b) A basse énergie, la section efficace est dominée par des ondes spécifiques quelles sont ces ondes ?

(c) Réécrire les équations précédentes pour $\ell = 0$, et donner les solutions correspondantes en tenant compte du fait que la solution acceptable doit être nulle pour $r = 0$ et finie pour $r \rightarrow \infty$.

(2) (a) Appliquer la condition de continuité $(\ln u_\ell(r))'|_{r=a-\varepsilon} = (\ln u_\ell(r))'|_{r=a+\varepsilon}$ pour montrer que le déphasage δ_0 est donné par l'expression

$$\delta_0 = -k_2 a + \arctan \left(\frac{k_2}{k_1} \tan(k_1 a) \right)$$

(b) A basse énergie $E \ll$ on a : $k_2 a \ll 1$ et $k_1 \rightarrow k_0 \simeq 2mV_0/\hbar^2$. Donner ainsi l'expression de δ_0 .

- (c) En déduire la section efficace totale de diffusion.
(d) Si de plus $k_0 a \ll 1$. Montrer que la section efficace totale devient

$$\sigma \simeq \frac{16\pi a^6 m^2 V_0^2}{9\hbar^4}$$

On donne : $\sin(x) \simeq x - \frac{1}{6}x^3$, $\cos(x) \simeq 1 - \frac{1}{2}x^2$, $\tan(x) \simeq x + \frac{1}{3}x^3$

Solution

I) Une particule de masse m est diffusée par le potentiel attractif $V(r)$ défini par

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

La partie radiale de la fonction d'onde totale de la particule est $R_\ell(r) = u_\ell(r)/r$.

(1) Soient $k_1^2 = 2m(E + V_0)/\hbar^2$ et $k_2^2 = 2mE/\hbar^2$ avec $E > 0$.

(a) L'équation Schrödinger

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u_\ell(r)}{dr^2} + \left[\frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} - V_0 \right] u_\ell(r) &= Eu_\ell(r) \quad r \leq a \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u_\ell(r)}{dr^2} + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} u_\ell(r) &= Eu_\ell(r) \quad r > a \end{aligned}$$

(b) A basse énergie, la section efficace est dominée par les ondes s ($\ell = 0$).

(c) Pour $\ell = 0$, on a

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u_0(r)}{dr^2} - V_0 u_0(r) &= Eu_0(r) \quad r \leq a \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u_0(r)}{dr^2} &= Eu_0(r) \quad r > a \end{aligned}$$

Les solutions correspondantes

$$u_0(r) = A \sin(k_1 r) \quad \text{pour } r \leq a$$

$$u_0(r) = B \sin(k_2 r + \delta_0) \quad \text{pour } r > a$$

où on a tenu compte du fait que la solution acceptable doit être nulle pour $r = 0$ c-à-d $R_0(r)$ soit régulière et finie pour $r \rightarrow \infty$.

(2) (a) Appliquons la condition de continuité

$$(\ln u_0(r))'|_{r=a-\varepsilon} = (\ln u_0(r))'|_{r=a+\varepsilon} :$$

c'est-à-dire

$$\frac{\sin(k_1 a)}{k_1 \cos(k_1 a)} = \frac{\sin(k_2 a + \delta_0)}{k_2 \cos(k_2 a + \delta_0)}$$

alors

$$\delta_0 = \arctan\left(\frac{k_2}{k_1} \tan(k_1 a)\right) - k_2 a$$

(b) A basse énergie $E \ll$ on a : $k_2 a \ll 1$ et $k_1 \rightarrow k_0 \simeq 2mV_0 / \hbar^2$. Ainsi l'expression de δ_0 devient

$$\delta_0 \simeq k_2 a \left(\frac{\tan(k_0 a)}{k_0 a} - 1 \right) \ll 1$$

(c) La section efficace totale de diffusion est donc

$$\sigma \simeq \frac{4\pi}{k_2^2} \sin^2 \delta_0 \simeq \frac{4\pi}{k_2^2} \delta_0^2$$

c'est-à-dire

$$\sigma \simeq 4\pi a^2 \left(\frac{\tan(k_0 a)}{k_0 a} - 1 \right)^2$$

(d) Si de plus $k_0 a \ll 1$. Alors la section efficace totale s'écrit

$$\begin{aligned} \sigma &\simeq 4\pi a^2 \left(1 + \frac{1}{3} (k_0 a)^2 - 1 \right)^2 \\ &\simeq \frac{4\pi}{9} k_0^2 a^6 \end{aligned}$$

alors

$$\sigma \simeq \frac{16\pi m^2 V_0^2 a^6}{9\hbar^4}$$