Magistère de Sciences de la Matière
année 2003-2004

Introduction au monde quantique
Examen de Janvier 2004, 3h

Les parties I et II sont entièrement indépendantes.

1 Question de cours: système à 2 niveaux

1. On modèlise la molécule d'ammoniac par un système à 2 niveaux. Expliquer rapidement:
-quels états sont ignorés dans cette modélisation
-la représentation de l'Hamiltonien du système dans la base ($|\psi_S>$,$|\psi_A>$) (état symétrique et antisymétrique) est une matrice 2x2 $\begin{pmatrix} -A & 0 \\ 0 & A \end{pmatrix}$ ($A > 0$). On justifiera qualitativement pourquoi l'état $|\psi_S>$ a une énergie inférieure à $|\psi_A>$.

2. Définir les états droite et gauche $|\psi_d>$ et $|\psi_g>$ à partir des états ($|\psi_S>$,$|\psi_A>$). Donner la représentation de l'Hamiltonien dans la base $|\psi_d>$, $|\psi_g>$.

3. Interpréter le paramètre A, et donner qualitativement sa variation en fonction de l'épaisseur de la barrière qui sépare les puits de droite et de gauche.

4. On place la molécule dans un champ électrique $\mathcal{E}$ parallèle à son axe (perpendiculaire au plan des hydrogènes). Sachant que l'état $|\psi_d>$ correspond à un dipôle $+d$, et l'état $|\psi_g>$ à un dipôle $-d$, écrire l'Hamiltonien du système dans la base ($|\psi_d>$, $|\psi_g>$).

5. Calculer les niveaux d'énergie en présence du champ. Rappeler le principe d'un appareil permettant de "préparer" les molécules dans l'état $|\psi_S>$ ou $|\psi_A>$. On fera un schéma précis, en indiquant la direction du gradient de champ et le sens de déviation pour chaque état.

2 Rotateur rigide dans le plan

On considère un système constitué d'un objet linéaire rigide (par exemple une molécule H_2 qui a pour seul mouvement une rotation dans le plan xOy autour de l'axe Oz fixe. La position de cet objet est repérée par l'angle ϕ que fait son axe avec l'axe des x. Son énergie cinétique s'écrit, classiquement $L_z^2/2J$ où L_z est le moment cinétique suivant Oz, J le moment d'inertie par rapport à l'axe Oz.
En physique quantique, on représente l'état du rotateur à l'instant t par une fonction d'onde $\psi(\phi, t)$, **périodique de période 2π par rapport à la variable ϕ**

1. Justifier que l'opérateur associé au moment cinétique $\hat{L}_z$ a pour action sur une fonction $\psi(\phi, t)$
$$\hat{L}_z\psi(\phi, t) = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\phi}\psi(\phi, t)$$
(On pourra se rappeler l'expression $\mathbf{L} = \mathbf{r} \wedge \mathbf{p}$ et l'exprimer en coordonnées cylindriques). Le gradient en coordonnées cylindriques s'écrit $(\frac{\partial}{\partial r}, r^{-1}\frac{\partial}{\partial\phi}, \frac{\partial}{\partial z})$.

2. Ecrire l'équation de Schrödinger pour la fonction $\psi(\phi, t)$.

3. Montrer qu'une base d'états stationnaires est donnée par les fonctions d'ondes

$$\psi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(im\phi)$$

où m est un entier (positif ou négatif).

Quelle est l'énergie associée E_m associée à l'état représenté par ψ_m (l'exprimer en fonction de m, J et $\hbar$)? Quelle est la dégénérescence de cette énergie ?

4. La fonction d'onde $\psi(\phi, t_0)$ à l'instant t_0. est proportionnelle à $\cos^3 \phi$. Donner les résultats possibles d'une mesure de l'énergie du rotateur à l'instant t_0, ainsi que leurs probabilités.

5. Si la fonction d'onde à l'instant $t = 0$ est $\psi_0(\phi)$, écrire la formule générale de décomposition sur les états propres qui permet de calculer son évolution dans le temps. On précisera la formule permettant de calculer les coefficients.

6. Le rotateur passe de l'état ψ_1 à l'état ψ_0 en émettant un photon dans la direction z. Discuter les propriétés (énergie, moment cinétique, impulsion, domaine de longueur d'onde) de ce photon. Application numérique: le rotateur est une molécule H_2, pour laquelle la distance entre les 2 protons est $0,08 nm$. masse du proton $1,610^{-27}$kg.

7. Le rotateur a maintenant une énergie potentielle

$$V(\phi) = \epsilon \cos(2\phi)$$

ϵ étant supposé petit, on souhaite traiter $V(\phi)$ en perturbation.

A quelle énergie comparer ϵ pour savoir si $V(\phi)$ peut effectivement être considéré comme "petit" ?

8. Calculer en perturbation au premier ordre
-l'énergie de l'état fondamental
-la fonction d'onde associée.

9. On cherche maintenant à faire un calcul variationnel de l'énergie de l'état fondamental en présence de $V(\phi)$. On choisit une fonction d'onde d'essai de la forme

$$\psi_e(\phi) = \cos\alpha\ \psi_0(\phi) + \frac{1}{\sqrt{2}} \sin\alpha\ \psi_2(\phi) + \frac{1}{\sqrt{2}} \sin\alpha\ \psi_{-2}(\phi)$$

où α est le paramètre variationnel.

Justifier qualitativement ce choix pour la fonction d'essai.

Calculer l'énergie variationelle et la valeur optimale de α (on pourra remarquer que $\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_2(\phi) + \psi_{-2}(\phi))$ est une fonction propre de l'hamiltonien non perturbé.).