

Tutorats de Mécanique Quantique
Fascicule d'exercices n° 3

Exercice I : Etats stationnaires d'un électron confiné dans l'espace.

Pour confiner un électron dans l'espace, on doit utiliser simultanément un champ électrostatique et un champ magnétique car le champ électrostatique, qui obéit à l'équation de Laplace, ne peut pas avoir d'extrémum. Une méthode consiste à utiliser un potentiel quadrupolaire

$$V(x, y, z) = C(x^2 + y^2 - 2z^2)$$

(où C est une constante positive) qui tend à confiner la particule selon z . Le confinement latéral est obtenu en ajoutant un champ magnétique uniforme $\vec{B}_0$ parallèle à Oz .

1) Vérifier que le champ $\vec{B}_0$ peut être obtenu à partir du potentiel vecteur

$$\vec{A} = \frac{1}{2} \vec{B}_0 \wedge \vec{r}.$$

2) Si l'on ne tient pas compte du spin de l'électron (qui conduirait à un dédoublement des états stationnaires que nous allons obtenir), l'hamiltonien de l'électron est

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\widehat{\vec{P}} + e \vec{A}(\hat{X}, \hat{Y}, \hat{Z}) \right)^2 - eV(\hat{X}, \hat{Y}, \hat{Z})$$

en désignant par m la masse de l'électron et $-e$ sa charge.

Montrer que cet hamiltonien peut s'écrire comme la somme de deux opérateurs

$$\hat{H} = \hat{H}_z + \hat{H}_{xy}$$

avec

$$\begin{aligned} \hat{H}_z &= \frac{1}{2m} \hat{P}_z^2 + \alpha \hat{Z}^2 \\ \hat{H}_{xy} &= \frac{1}{2m} \left(\hat{P}_x^2 + \hat{P}_y^2 \right) + \frac{1}{2} m \Omega^2 (\hat{X}^2 + \hat{Y}^2) + \frac{1}{2} \omega_c \left(\hat{X} \hat{P}_y - \hat{Y} \hat{P}_x \right), \end{aligned} \quad (1)$$

où α , Ω , ω_c sont des constantes que l'on déterminera.

3) En travaillant en base $|\vec{r}\rangle$ (fonctions d'ondes) montrer que l'on peut étudier séparément les hamiltoniens $\hat{H}_z$ et $\hat{H}_{xy}$ et que les énergies des états stationnaires de $\hat{H}$ s'obtiennent sous la forme $E = E_z + E_{xy}$, somme d'une valeur propre de $\hat{H}_z$ et d'une valeur propre de $\hat{H}_{xy}$.

4) Donner les valeurs possibles pour E_z et leur dégénérescence.

5) Etude de l'hamiltonien $\hat{H}_{xy}$.

On introduit des opérateurs $\hat{a}_d$ et $\hat{a}_g$ (dits opérateurs annihilation de quanta circulaires définis par

$$\begin{aligned}\hat{a}_d &= \frac{1}{2} \left\{ \beta(\hat{X} - i\hat{Y}) + \frac{i}{\beta\hbar}(\hat{P}_x - i\hat{P}_y) \right\} \\ \hat{a}_g &= \frac{1}{2} \left\{ \beta(\hat{X} + i\hat{Y}) + \frac{i}{\beta\hbar}(\hat{P}_x + i\hat{P}_y) \right\}\end{aligned}\quad (2)$$

où β est une constante réelle.

5.1) Donner l'expression de leurs adjoints $\hat{a}_d^\dagger$, $\hat{a}_g^\dagger$ et des opérateurs nombre de quanta circulaires $\hat{N}_d = \hat{a}_d^\dagger \hat{a}_d$ et $\hat{N}_g = \hat{a}_g^\dagger \hat{a}_g$.

5.2) Montrer que l'observable $\hat{L}_z$ associée à la composante z du moment cinétique de la particule s'exprime simplement en fonction de $\hat{N}_d$ et $\hat{N}_g$.

5.3) Montrer que, en l'absence de potentiel quadrupolaire ($C = 0$), l'hamiltonien $\hat{H}_{xy}$ s'écrit

$$\hat{H}_{xy} = \hbar\omega_c \left(\hat{N}_d + \frac{1}{2} \right),$$

si l'on choisit convenablement β .

5.4) Calculer le commutateur $[\hat{a}_d, \hat{a}_d^\dagger]$ et en déduire (sans faire de calculs) que, dans ce cas particulier où $C = 0$, les valeurs propres de $\hat{H}_{xy}$ sont de la forme

$$E_{xy} = \hbar\omega_c \left(n_d + \frac{1}{2} \right),$$

où n_d entier ($n_d \geq 0$).

5.5) En présence du potentiel quadrupolaire ($C \neq 0$), montrer que l'on peut écrire $\hat{H}_{xy}$ sous la forme

$$\hat{H}_{xy} = \hbar\omega'_c \left(\hat{N}_d + \frac{1}{2} \right) - \hbar\omega'_m \left(\hat{N}_g + \frac{1}{2} \right)$$

en donnant au paramètre β une nouvelle valeur, et où ω'_c et ω'_m sont des constantes à déterminer.

En déduire l'expression des valeurs propres de $\hat{H}_{xy}$.

6) On donne $\hbar\omega_c = 10^{-5}$ eV, $\hbar\sqrt{4eC/m} = 10^{-6}$ eV.

6.1) Représenter qualitativement le spectre d'énergie de l'électron, en indiquant pour chaque niveau d'énergie les nombres quantiques qui le caractérisent.

6.2) Dans quelle mesure les résultats obtenus pour l'énergie des états stationnaires de l'électron traduisent-ils le fait que l'électron est confiné dans l'espace ?

Exercice II : Formalisme de Schwinger pour le moment cinétique.

On considère un système de deux oscillateurs harmoniques repérés par les indices 1 et 2. On note $\hat{a}_1^\dagger, \hat{a}_1, \hat{a}_2^\dagger, \hat{a}_2$, leurs opérateurs création annihilation, $\hat{N}_1, \hat{N}_2$ leurs opérateurs "nombre". Pour un oscillateur donné ces opérateurs obéissent aux relations de commutation standard, et tout opérateur relatif à l'oscillateur 1 commute avec tout opérateur de l'oscillateur 2 (oscillateurs *indépendants*).

On note $|n_1, n_2\rangle$ un ket propre commun aux opérateurs $\hat{N}_1$ et $\hat{N}_2$ ($\hat{N}_1|n_1, n_2\rangle = n_1 |n_1, n_2\rangle$). Comment sait-on qu'un tel ensemble de kets propres communs existe ?

On forme les opérateurs

$$\widehat{G}_+ = \hbar \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 \quad \widehat{G}_- = \hbar \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1 \quad \text{et} \quad \widehat{G}_z = \frac{\hbar}{2} (\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 - \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2) \quad (3)$$

1) Montrer que les opérateurs $\widehat{G}_+, \widehat{G}_-, \widehat{G}_z$ obéissent aux mêmes règles de commutation que les opérateurs de moment cinétique $\widehat{J}_+, \widehat{J}_-, \widehat{J}_z$.

2) En déduire que $\widehat{G}_x = (\widehat{G}_+ + \widehat{G}_-)/2$, $\widehat{G}_y = (\widehat{G}_+ - \widehat{G}_-)/2i$ et $\widehat{G}_z$ sont des opérateurs de moment cinétique.

3) On définit $\widehat{N} = \widehat{N}_1 + \widehat{N}_2$. Calculer $\widehat{G}^2 = G_x^2 + G_y^2 + G_z^2$ en fonction de $\widehat{N}$

4) Supposons que l'on associe une valeur $+\hbar/2$ à la composante z du moment cinétique pour chaque quantum d'excitation de l'oscillateur 1 et une valeur $-\hbar/2$ à cette composante pour chaque quantum d'excitation de l'oscillateur 2.

4.1) Montrer que cette association donne bien à $\widehat{G}_+$ et $\widehat{G}_-$ le même rôle que les opérateurs $\widehat{J}_+, \widehat{J}_-$ dans l'étude du moment cinétique.

4.2) Utiliser cette modélisation du moment cinétique en termes d'oscillateurs harmoniques pour retrouver les résultats du cours sur le moment cinétique, en particulier les spectres des opérateurs $\widehat{J}^2$ et $\widehat{J}_z$.

On utilisera également cette méthode pour montrer que, pour j fixé les états propres de $\widehat{J}_z$ ne sont pas dégénérés.

Exercice III : Un système a pour fonction d'onde :

$$\psi(x, y, z) = N(x + y + z) \exp(-r^2/a^2)$$

où a , réel, est donné et N est une constante de normalisation.

1) On mesure sur ce système les observables L_z et L^2 . Quelle probabilité a-t-on de trouver 0 et $2\hbar^2$? On rappelle que :

$$Y_1^0(\theta, \phi) = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \cos \theta$$

2) En utilisant également le fait que :

$$Y_1^{\pm 1}(\theta, \phi) = \pm \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/2} (-\sin \theta) \exp(\pm i\phi),$$

peut-on prévoir directement les probabilités de tous les résultats possibles des mesures de L^2 et L_z sur le système de fonction d'onde $\psi(x, y, z)$?

Exercice IV : Expérience de Stern et Gerlach.

On considère un système de N_0 particules de spin $1/2$. On se place dans la base des états propres de S^2 et S_z que l'on note $|+\rangle$ et $|-\rangle$. On souhaite mesurer la projection S_u de leur spin sur une direction caractérisée par son vecteur unitaire $\vec{u}$, d'angles polaires θ et ϕ (où θ est l'angle que fait le vecteur $\vec{u}$ avec l'axe Oz).

- 1) Exprimer l'observable $S_u = \vec{S} \cdot \vec{u}$ en fonction des angles θ et ϕ . Ecrire dans la représentation $|\pm\rangle$ la matrice correspondante.
- 2) Déterminer ses valeurs propres et ses vecteurs propres, que l'on notera $|\pm\rangle_u$.
- 3) Soit un système dans l'état $|+\rangle$. Quels sont les résultats possibles d'une mesure de S_u et avec quelles probabilités les obtient-on ?
- 4) On suppose que, partant du système dans l'état $|+\rangle$, on effectue une mesure selon la direction $\vec{u}$ qui donne $+\hbar/2$. On réalise alors une seconde mesure portant cette fois sur S_z . Quels sont les résultats possibles pour cette dernière mesure et avec quelle probabilité ?
- 5) Le faisceau de particules passe par un premier appareil de Stern et Gerlach orienté selon la direction $\vec{u}$. On sélectionne à l'aide d'un écran les particules correspondant à la valeur propre $+\hbar/2$. A combien de particules s'attend-on dans le faisceau sélectionné ? On fait passer le faisceau dans un second appareil dirigé suivant Ox . Quels sont les résultats possibles à la sortie de cet appareil ?

Exercice V : Résonance Magnétique

- 1) Traitement Classique

On rappelle que le moment cinétique d'un système placé dans un champ magnétique $\vec{B}_0 = B_0 \vec{e}_z$ évolue selon l'équation suivante :

$$\frac{d\vec{J}}{dt} = \vec{\mu} \times \vec{B}_0 \quad \text{avec} \quad \vec{\mu} = \gamma \vec{J}$$

- 1.1) Montrer que, pour un champ magnétique fixe $\vec{B}_0$, $\vec{J}$ effectue un mouvement de précession autour de $\vec{B}_0$ avec une vitesse angulaire ω_0 que l'on déterminera.
- 1.2) On rajoute au champs magnétique fixe précédent $\vec{B}_0$ un nouveau champ faible $\vec{B}_1$ perpendiculaire à $\vec{B}_0$ et tournant à la vitesse ω .
 - 1.2.1) En se plaçant dans le référentiel tournant associé à $\vec{B}_1$, montrer que le mouvement de $\vec{J}$ est celui d'une précession autour d'un champ effectif $\vec{B}_{eff}$ fixe avec une vitesse $\vec{\Omega}$ que l'on déterminera.
 - 1.2.2) On suppose qu'à l'instant $t_0 = 0$, le moment cinétique est $\vec{J} = J_0 \vec{e}_z$. Montrer qu'à un instant $t \geq 0$ sa composante suivant l'axe Oz peut s'écrire de la manière suivante :

$$J_z = J_0 \left(\frac{(\omega_0 - \omega)^2}{\Omega^2} + \frac{\omega_1^2}{\Omega^2} \cos(\Omega t) \right) \quad \text{où} \quad \omega_1 = -\gamma B_1$$

2) Traitement Quantique

Soit un système de spin $s = 1/2$ placé dans champ magnétique :

$$\vec{B} = B_0 \vec{e}_z + B_1 \vec{u}(t) \quad \text{avec} \quad \vec{u}(t) = \cos(\omega t) \vec{e}_x + \sin(\omega t) \vec{e}_y$$

L'état du système est défini par un ket $|\psi(t)\rangle$. Afin d'étudier l'évolution du système avec le temps, nous introduisons l'opérateur :

$$R(t) = \exp\left(i \frac{\omega t}{\hbar} S_z\right) \quad \text{et on définit} \quad |\tilde{\psi}(t)\rangle = R(t) |\psi(t)\rangle$$

2.1) Montrer que l'évolution de $|\tilde{\psi}(t)\rangle$ est régie par l'équation suivante :

$$i\hbar \frac{d|\tilde{\psi}(t)\rangle}{dt} = H_{eff} |\tilde{\psi}(t)\rangle \quad \text{avec} \quad H_{eff} = (\omega_0 - \omega) S_z + \omega_1 S_x$$

2.2) Déterminer les valeurs propres et les vecteurs propres de cet hamiltonien effectif.

2.3) En déduire l'évolution dans le temps du ket $|\tilde{\psi}(t)\rangle$.

2.4) Déterminer alors la probabilité de trouver le système à l'instant t dans l'état $|-\rangle_z$ lorsqu'à l'instant $t_0 = 0$, il est dans l'état $|\psi(t_0)\rangle = |+\rangle_z$.