

EXAMEN DE PHYSIQUE QUANTIQUE DU 5 MAI 2011

INFORMATIONS UTILES

$m_e = 9.110 \times 10^{-31}$ kg, $\hbar = 1.055 \times 10^{-34}$ J.s, $h = 6.626 \times 10^{-34}$ J.s ,
 unité de masse atomique $u = 1.661 \times 10^{-27}$ kg, $c = 2.998 \times 10^8$ m.s $^{-1}$,
 $\hbar^2/(2m_e a_0^2) = 13.61$ eV, $a_0 = 4\pi\epsilon_0 \hbar^2 / (m_e q_e^2) = 0.529 \times 10^{-10}$ m.

Applications du théorème de Feynman-Hellmann

On considère l'atome à 1 électron dans l'approximation du noyau infiniment lourd de nombre de charge Z , dont l'hamiltonien, en représentation d'espace, s'écrit :

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{Zq_e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (1)$$

On rappelle que l'opérateur Laplacien en coordonnées sphériques s'écrit :

$$\nabla^2 = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{1}{r^2} \frac{\vec{L}^2}{\hbar^2} \quad (2)$$

où \vec{L} est l'opérateur moment cinétique.

Par analogie avec les valeurs propres de l'hamiltonien de l'atome d'hydrogène, on montre que les valeurs propres de H_0 ont pour expression :

$$E_n = -\frac{m}{2\hbar^2} \left(\frac{Zq_e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{1}{(p+l+1)^2} \quad (3)$$

où l est le nombre quantique orbital et $p+1$ est un nombre entier strictement positif qui sert à dénombrer les niveaux d'énergie à l constant.

1) On peut considérer cet hamiltonien en tant que fonction de paramètres extérieurs (λ) tels que Z ou l . De manière très générale un hamiltonien $H(\lambda)$, avec valeurs propres $E_i(\lambda)$ et vecteurs propres $\varphi_i(\lambda)$ est tel que :

$$\left(\frac{dE_i}{d\lambda} \right)_{\lambda_0} = \langle \varphi_i(\lambda_0) | \left(\frac{\partial H}{\partial \lambda} \right)_{\lambda_0} | \varphi_i(\lambda_0) \rangle \quad (4)$$

Démontrer cette relation.

2) Dans l'état propre stationnaire $|nlm\rangle$ de H_0 , où $n = p + l + 1$, comment s'écrit l'opérateur Laplacien ∇^2 en fonction de l ?

3) Calculer $\frac{\partial H}{\partial Z}$ et $\frac{\partial H}{\partial l}$, et en déduire les valeurs moyennes $\langle \frac{1}{r} \rangle$, $\langle \frac{1}{r^2} \rangle$ dans l'état propre stationnaire $|nlm\rangle$ de H_0 .

Application de la théorie des perturbations aux oscillations de Rabi

Dans le cadre des oscillations de Rabi, l'atome à deux niveaux considéré sera décrit par l'hamiltonien suivant

$$H_0 = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix} \quad (1)$$

dans la base $|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ $|2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$. En l'absence de couplage, E_1 et E_2 sont les énergies possibles du système, et les états $|1\rangle$ et $|2\rangle$ sont stationnaires.

Cet atome est soumis à un hamiltonien d'interaction (dû à un champ de couplage) qui s'écrit comme suit :

$$H_I = \frac{\hbar\Omega}{2} \begin{pmatrix} 0 & e^{i\omega t} \\ e^{-i\omega t} & 0 \end{pmatrix} \quad (2)$$

avec Ω la fréquence de Rabi. On note $\delta = \omega - (E_2 - E_1)/\hbar$ le désaccord en fréquence entre le champ de couplage et la transition atomique considérée.

L'état de l'atome est décrit par une fonction d'onde de la forme $|\psi(t)\rangle = c_1(t)|1\rangle + c_2(t)|2\rangle$.

1) Montrer qu'il est intéressant de chercher les solutions sous la forme $|\psi(t)\rangle = e^{-i\frac{H_0 t}{\hbar}}|\tilde{\psi}(t)\rangle$. Expliquer à quoi correspond ce changement de représentation.

2) On écrit $|\tilde{\psi}(t)\rangle = \tilde{c}_1(t)|1\rangle + \tilde{c}_2(t)|2\rangle$. Expliciter les équations d'évolution de $\tilde{c}_1(t)$ et $\tilde{c}_2(t)$. Calculer $\tilde{c}_2(t)$ à partir des conditions initiales suivantes : $\tilde{c}_1(0) = 1$ et $\tilde{c}_2(0) = 0$.

3) Montrer à l'aide d'un développement limité au premier ordre pour $\Omega \ll 1$ que $\tilde{c}_2(t) = -i\frac{\Omega}{\delta} e^{-i\frac{\delta t}{2}} \sin(\frac{\delta t}{2})$

4) Retrouver ce résultat à l'aide de la théorie des perturbations dépendant du temps. Pour ce faire, on introduit un paramètre de perturbation $\lambda \ll 1$ définissant ainsi un hamiltonien d'interaction de la forme λH_I . On cherche les solutions au premier ordre sous la forme : $|\tilde{\psi}(t)\rangle \simeq (\tilde{c}_1^{(0)}(t) + \lambda \tilde{c}_1^{(1)}(t))|1\rangle + (\tilde{c}_2^{(0)}(t) + \lambda \tilde{c}_2^{(1)}(t))|2\rangle$.

États cohérents de l'oscillateur harmonique

Les états quasi-classiques (ou *cohérents*) de l'oscillateur harmonique sont des états remarquables : dans de tels états, la particule présente un comportement aussi proche que possible de celui d'un oscillateur classique. En particulier, l'inégalité de Heisenberg est *saturée* dans un état cohérent : $\Delta x \Delta p = \hbar/2$.

On rappelle l'hamiltonien de l'oscillateur harmonique :

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

dont on note les vecteurs propres $|n\rangle$: $H|n\rangle = \hbar\omega(n + 1/2)|n\rangle$.

On construira les états cohérents sur la base des vecteurs propres de H .

1) On note $|z\rangle$ le vecteur propre de l'opérateur d'annihilation $a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}X + i\frac{P}{\sqrt{2m\hbar\omega}}$ associé à la valeur propre z : $a|z\rangle = z|z\rangle$.

Rappel : $[a, a^\dagger] = 1$, $a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$, $a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$.

a) Justifier que $z = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\langle z|X|z\rangle + i\langle z|P|z\rangle/\sqrt{2m\hbar\omega}$.

b) Calculer les valeurs moyennes $\langle z|X^2|z\rangle$ et $\langle z|P^2|z\rangle$ en fonction du nombre complexe z .

c) En déduire les écarts quadratiques moyens Δx et Δp et vérifier qu'on a bien $\Delta x \Delta p = \hbar/2$.

2) On décompose le vecteur $|z\rangle$ sur la base orthonormée $\{|n\rangle\}$ des propres de l'opérateur nombre $N = a^\dagger a$: $|z\rangle = \sum_n c_n(z)|n\rangle$.

a) Montrer la relation de récurrence entre les composantes $c_n(z)$ et $c_{n+1}(z)$: $\sqrt{n+1}c_{n+1} = zc_n$.

b) En déduire que $|z\rangle$ peut s'écrire :

$$|z\rangle = \exp\left(-\frac{|z|^2}{2}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle. \quad (2)$$

Nota : on n'oubliera pas la condition $\langle z|z\rangle = 1$!

3) On suppose qu'à l'instant $t = 0$, l'oscillateur est préparé dans l'état cohérent

$$|z_0\rangle = \exp\left(-\frac{|z_0|^2}{2}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z_0^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} d_n(0)|n\rangle \quad (3)$$

On note $|\psi(t)\rangle$ l'état de l'oscillateur à l'instant $t > 0$.

a) Rappeler l'équation qui régit l'évolution dans le temps de $|\psi(t)\rangle$.

b) En posant $|\psi(t)\rangle = \sum_n d_n(t)|n\rangle$, en déduire l'équation d'évolution pour chacun des d_n et en déduire la décomposition de $|\psi(t)\rangle$ sur la base $\{|n\rangle\}$ en fonction des composantes initiales $\langle n|z_0\rangle = d_n(0)$.

c) Vérifier, alors, que $|\psi(t)\rangle$ est également, à un facteur de phase près, un état cohérent dont on précisera la valeur propre $z(t)$ de a , en fonction du temps t , de z_0 et de ω .

Modèle du rotateur rigide et spectre rotationnel d'une molécule diatomique

Pour modéliser les états de rotation d'une molécule, on oriente les axes x , y , et z le long des 3 axes principaux du rotateur rigide que forme la molécule. On note I_x , I_y et I_z les moments d'inertie correspondants. Le spectre d'énergie rotationnel se déduit de l'hamiltonien :

$$H_R = \frac{L_x^2}{2I_x} + \frac{L_y^2}{2I_y} + \frac{L_z^2}{2I_z} \quad (1)$$

1) Dans le cas d'une molécule diatomique; $I_x = I_y = \mu r^2 \equiv I$ où r est la distance interatomique à l'équilibre et μ la masse réduite, et où $I_z \ll I$.

a) Ecrire H_R en termes des opérateurs \vec{L}^2 et L_z^2 .

b) En déduire les vecteurs propres de H_R et les énergies propres de rotation en fonction des nombres quantiques l et m associés aux vecteurs propres $|lm\rangle$ de \vec{L}^2 et L_z .

c) Comment se comparent les énergies nécessaires pour exciter la rotation autour de z à l'énergie thermique à température ambiante si $k_B T \ll \hbar^2/I_z$?

Est-il possible d'observer à température ambiante des transitions spontanées entre les sous-niveaux magnétiques (i.e. entre niveaux de m différents) ?

En déduire que les molécules se trouvent alors naturellement dans les états correspondant à $m = 0$.

2) On montre qu'une transition dipolaire n'est permise que si $\Delta l = \pm 1$.

a) En déduire que l'énergie absorbée ou émise lors d'une transition $l \leftrightarrow l + 1$ s'écrit :

$$E_{l+1} - E_l = 2hcB(l + 1) \quad (2)$$

où $B = \frac{h}{8\pi^2 cI}$.

b) Le deutérium (D) est un isotope atomique de l'hydrogène (i.e. son noyau possède un neutron supplémentaire). Pour les molécules isotopiques H ^{35}Cl et D ^{35}Cl , on a les valeurs *expérimentales* :

$$B(\text{H } ^{35}\text{Cl}) = 10,59 \text{ cm}^{-1} \quad r_{\text{H-Cl}} = 0,127 \text{ nm},$$

$$B(\text{D } ^{35}\text{Cl}) = 5,45 \text{ cm}^{-1} \quad r_{\text{D-Cl}} = 0,127 \text{ nm}.$$

Justifier ces données.

On rappelle les masses atomiques (en unité de masse atomique) :

H : 1.007 u,

D : 2.014 u,

^{35}Cl : 35.45 u.