
Examen de Mécanique Analytique
Durée : 2 heures
Les documents et la calculatrice sont interdits.

Cet examen de deux heures comportent deux exercices indépendants. Le premier concerne la barrière centrifuge et l'autre le problème des polaritons.

1 Barrière centrifuge

Dans cet exercice nous allons considérer la collision et la diffusion de deux particules neutres (atomes ou molécules). Dans le référentiel du centre de masse, le problème à deux corps se résume au problème à force centrale d'une unique particule de masse réduite m et interagissant via le potentiel $V(r)$. Le mouvement classique est un mouvement plan qui peut être étudié via les coordonnées polaires (r, θ) . En utilisant ces coordonnées le Hamiltonien s'écrit

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{\ell^2}{2mr^2} + V(r),$$

où p et ℓ sont respectivement les moments conjugués des coordonnées r et θ . A grande portée, nous allons supposer que l'interaction entre les particules peut être modélisée par un potentiel de la forme

$$V(r) = -\frac{C_n}{r^n},$$

où $C_n > 0$ et $n > 0$ sont deux paramètres du potentiel. Dans cet exercice, nous allons considérer l'émergence d'une barrière centrifuge qui est un point central de la théorie de l'état de transition qui permet de décrire la réactivité et la dissociation uni-moléculaire.

1. Montrer que la variable ℓ est une quantité conservée. Relier cette conservation à une propriété de symétrie du système.

Puisque ℓ est une constante du mouvement, la dynamique selon la coordonnée radiale r est déterminée par le potentiel effectif $V_{\text{eff}}(r)$ qui contient le terme d'interaction $V(r)$ et le terme centrifuge,

$$V_{\text{eff}}(r) = \frac{\ell^2}{2mr^2} - \frac{C_n}{r^n},$$

de sorte que le Hamiltonien s'écrit

$$H = \frac{p^2}{2m} + V_{\text{eff}}(r).$$

2. Dans le cas $n < 2$, déterminer le comportement asymptotique de $V_{\text{eff}}(r)$ pour $r \rightarrow 0$ et pour $r \rightarrow +\infty$. En déduire si le potentiel possède un minimum ou un maximum.
3. Dans le cas $n < 2$, tracer l'allure du potentiel effectif $V_{\text{eff}}(r)$.

4. Dans le cas $n < 2$, tracer l'allure du portrait phase (r, p) avec $r > 0$. Considérer l'ensemble des trajectoires possibles.
5. Dans le cas $n > 2$, déterminer le comportement asymptotique de $V_{\text{eff}}(r)$ pour $r \rightarrow 0$ et pour $r \rightarrow +\infty$. En déduire si le potentiel possède un minimum ou un maximum.
6. Dans le cas $n > 2$, tracer l'allure du potentiel effectif $V_{\text{eff}}(r)$ et décrire ce que représente la barrière centrifuge.
7. Dans le cas $n > 2$, tracer l'allure du portrait phase (r, p) avec $r > 0$. Considérer l'ensemble des trajectoires possibles.
8. Dans le cas $n > 2$, que se passe-t-il quand $r \rightarrow 0$, expliquer ce qui manque dans le modèle pour décrire l'interaction entre les deux particules.

2 Polariton

Lorsqu'un ensemble de molécules ou d'atomes est placé dans une cavité Fabry-Perrot, si une résonance se produit entre un mode du champ électromagnétique (fixé par les conditions aux limites de la cavité) et une excitation électronique des atomes, il en résulte l'émergence d'un polariton. Un polariton est une quasi-particule qui correspond à un objet mixte entre excitation électronique et lumière. Il s'agit essentiellement d'un processus quantique, cependant, dans ce problème, nous allons considérer un modèle classique simple pour décrire les polaritons.

2.1 Cas d'un seul atome

Nous allons d'abord considérer un atome unique placé dans une cavité. Nous allons décrire l'excitation électronique de l'atome en considérant le mouvement d'un électron unique lié élastiquement à l'atome par un potentiel harmonique. Nous supposons que l'électron ne peut se déplacer que dans une seule direction et nous désignerons la coordonnée normale de l'électron $q = \sqrt{m}x$ et son moment conjugué p . Par conséquent, le Hamiltonien atomique s'écrit

$$H_{\text{at}} = \frac{p^2}{2} + \frac{1}{2}\omega^2 q^2,$$

où ω est la fréquence harmonique de l'excitation électronique. Cette excitation électronique est couplée à un unique mode du champ électromagnétique que nous supposons être en résonance à la fréquence ω . Nous modéliserons ce mode comme un oscillateur harmonique unique de coordonnée q_0 et de moment conjugué p_0 .

$$H_f = \frac{p_0^2}{2} + \frac{1}{2}\omega^2 q_0^2.$$

Notons qu'il est possible d'exprimer le champ électrique et magnétique en fonction des variables q_0 et p_0 . L'interaction entre le champ électromagnétique et l'excitation électronique est considérée comme bilinéaire dans les coordonnées électronique et électromagnétique. Elle s'écrit comme suit

$$H_{\text{int}} = \gamma\omega^2 q_0 q,$$

où γ est un paramètre qui contrôle le couplage. Nous supposons ici que $|\gamma| < 1$. Le Hamiltonien complet du système s'écrit alors

$$H = \frac{p^2}{2} + \frac{1}{2}\omega^2 q^2 + \frac{p_0^2}{2} + \frac{1}{2}\omega^2 q_0^2 + \gamma\omega^2 q_0 q.$$

Pour résoudre ce problème, nous allons considérer la transformation ponctuelle suivante $(q_0, q \rightarrow Q_+, Q_-)$ où les coordonnées Q_+ et Q_- sont définies par

$$Q_+ = \frac{q + q_0}{2}, \quad Q_- = \frac{q - q_0}{2}. \quad (1)$$

9. Donner l'expression de q et q_0 en fonction de Q_+ et Q_- .

Nous introduisons les moments conjugués P_+ et P_- associés aux coordonnées Q_+ et Q_- . Afin de s'assurer que cette transformation ponctuelle soit une transformation canonique, nous allons rechercher une fonction génératrice de deuxième espèce $F_2(q_0, q, P_+, P_-)$. Une telle fonction génératrice est définie par

$$dF_2 = p_0 dq_0 + p dq + Q_+ dP_+ + Q_- dP_-,$$

si bien que les règles de transformations sont données par

$$p_0 = \frac{\partial F_2}{\partial q_0}, \quad p = \frac{\partial F_2}{\partial q}, \quad Q_+ = \frac{\partial F_2}{\partial P_+}, \quad Q_- = \frac{\partial F_2}{\partial P_-}.$$

10. Trouvez une expression pour $F_2(q_0, q, P_+, P_-)$ de telle sorte que l'on retrouve la définition de Q_+ et Q_- donnée par l'Eq. (1).
11. Dédurre de l'expression de $F_2(q_0, q, P_+, P_-)$ l'expression de p_0 et p en fonction de P_+ et P_- .
12. Écrire l'expression du Hamiltonien total en fonction des variables Q_+, Q_-, P_+ et P_- .
13. Écrire les équations de Hamilton pour les variables Q_+, P_+, Q_- et P_- .
14. Résoudre ces équations et montrer que le système oscille à deux fréquences propres ω_+ et ω_- . Donner l'expression de ω_{\pm} en fonction de ω et γ .
15. Pour $\gamma > 0$, les variables Q_+, Q_- sont généralement appelées états polariton supérieur et inférieur. Donnez une interprétation de cette appellation.
16. Ecrivez la solution générale pour $q(t)$ et $q_0(t)$.

2.2 Cas de N atomes

Dans cette partie, nous utiliserons quelques résultats importants de l'analyse de Fourier, résumés ici :

Soit $u_j, j = 1, \dots, N$ un ensemble de N variables complexes. La transformée de Fourier discrète est définie par

$$\tilde{u}_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N u_j e^{\frac{2i\pi}{N}jk}, \quad k = 1, \dots, N.$$

La transformée de Fourier discrète inverse est définie par

$$u_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=1}^N \tilde{u}_k e^{-\frac{2i\pi}{N}jk}, \quad j = 1, \dots, N.$$

Nous utiliserons également l'important théorème de Plancherel-Parseval

$$\sum_{j=1}^N |u_j|^2 = \sum_{k=1}^N |\tilde{u}_k|^2.$$

Nous allons maintenant considérer N atomes placés à l'intérieur de la cavité. Pour simplifier nous considérerons que N est un nombre impair. Nous négligerons l'interaction entre les atomes et ne considérerons que l'interaction entre le champ électromagnétique et l'excitation électronique de chaque atome. Les coordonnées électroniques et moments conjugués sont notés q_i, p_i avec $i = 1, \dots, N$. Le Hamiltonien total s'écrit alors

$$H = \frac{p_0^2}{2} + \frac{1}{2}\omega^2 q_0^2 + \sum_{j=1}^N \left(\frac{p_j^2}{2} + \frac{1}{2}\omega^2 q_j^2 \right) + \gamma\omega^2 q_0 \sum_{j=1}^N q_j. \quad (2)$$

Pour simplifier le Hamiltonien, nous introduisons une transformation canonique complexe

$$(q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N) \rightarrow (\tilde{Q}_1, \dots, \tilde{Q}_N, \tilde{P}_1, \dots, \tilde{P}_N),$$

où \tilde{Q}_k et \tilde{P}_k sont des variables complexes. Cette transformation est dérivée à partir de la fonction génératrice de deuxième espèce suivante

$$F'_2(q_1, \dots, q_N, \tilde{P}_1, \dots, \tilde{P}_N) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N q_j \tilde{P}_k e^{\frac{2i\pi}{N}jk}.$$

Une telle fonction génératrice est définie par

$$dF'_2 = \sum_{j=1}^N p_j dq_j + \sum_{k=1}^N \tilde{Q}_k d\tilde{P}_k,$$

si bien que les règles de transformations sont données par

$$p_j = \frac{\partial F'_2}{\partial q_j}, \quad \tilde{Q}_k = \frac{\partial F'_2}{\partial \tilde{P}_k}.$$

17. Donner l'expression de \tilde{Q}_k en fonction des coordonnées q_i .
18. Donner l'expression de p_j en fonction des variables complexes \tilde{P}_k .
19. En utilisant les résultats de l'analyse de Fourier, donner l'expression de \tilde{P}_k en fonction de p_j .
20. Simplifier l'expression de \tilde{Q}_N et \tilde{P}_N et montrer qu'ils sont réels.
21. En calculant les complexes conjugués \tilde{Q}_k^* et \tilde{P}_k^* , montrer que l'on a les relations suivantes $\tilde{Q}_k^* = \tilde{Q}_{N-k}$ et $\tilde{P}_k^* = \tilde{P}_{N-k}$.
22. Pour décrire les excitations électroniques pour ce système de N atomes, les coordonnées réelles (q_j, p_j) forment un espace des phases de dimension $2N$. Dédire de la question précédente que pour N impair, on peut utiliser l'ensemble suivant de variables complexes indépendantes

$$(\tilde{Q}_N, \tilde{Q}_1, \dots, \tilde{Q}_{(N-1)/2}, \tilde{P}_N, \tilde{P}_1, \dots, \tilde{P}_{(N-1)/2}),$$

de sorte que la dimension de l'espace des phases correspondant reste $2N$.

23. En utilisant la relation de Plancherel-Parseval, montrer que le Hamiltonien total pour un ensemble de N atomes (Eq. 2) avec N impair s'écrit

$$H = \frac{p_0^2}{2} + \frac{1}{2}\omega^2 q_0^2 + \frac{1}{2}\tilde{P}_N^2 + \frac{1}{2}\omega^2 \tilde{Q}_N^2 + \sum_{k=1}^{\frac{N-1}{2}} \left(\tilde{P}_k \tilde{P}_k^* + \omega^2 \tilde{Q}_k \tilde{Q}_k^* \right) + \gamma_N \omega^2 q_0 \tilde{Q}_N.$$

Donner l'expression de γ_N en fonction de γ et N .

24. Montrer que les variables du champ électromagnétique (q_0, p_0) ne sont couplées qu'aux variables $(\tilde{Q}_N, \tilde{P}_N)$.
25. En supposant que les variables $\tilde{Q}_k, \tilde{P}_k, \tilde{Q}_k^*, \tilde{P}_k^*$ peuvent être prises comme variables indépendantes, déduire les équations de Hamilton pour les variables \tilde{Q}_k, \tilde{P}_k avec $k = 1, \dots, (N-1)/2$. Donner la solution de ces équations.
26. En utilisant les résultats de la section 2.1 donner les deux fréquences propres pour les états de polariton supérieur et inférieur en fonction de γ et N .
27. Nous définissons la fréquence de transition entre les états polaroniques supérieur et inférieur $\Delta\omega = \omega_+ - \omega_-$. Dans le cas où γ est petit, comment $\Delta\omega$ évolue avec la densité atomique dans la cavité?