CORRIGÉ TD 7

7.1)

a) $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\|\vec{r}\|)$

b) $\vec{L} = \vec{r} \wedge \vec{p}$ avec $\vec{r} = \begin{pmatrix} \hat{x} \\ \hat{y} \\ \hat{z} \end{pmatrix}$ et $\vec{p} = \begin{pmatrix} \hat{p}_x \\ \hat{p}_y \\ \hat{p}_z \end{pmatrix}$

c) $L^2 Y_\ell^m = \ell(\ell+1)\hbar^2 Y_\ell^m \qquad \ell \in \mathbb{N}$

$L_z Y_\ell^m = m\hbar Y_\ell^m \qquad m \in \mathbb{Z}$ et $-\ell \leq m \leq \ell$

d) $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{L^2}{\hbar^2 r^2}\right]$ commute avec L^2 (car L^2 ne dépend pas de r, cf. cours III.1) et avec L_z (car L_z ne dépend pas de r et $[L^2, L_z] = 0$) $\Rightarrow$ base commune de vecteurs propres. Pour L^2 et L_z, les vecteurs propres sont les fonctions $Y_\ell^m(\theta,\phi)$ donc les vecteurs propres de H s'écrivent : $R(r)\, Y_\ell^m(\theta,\phi)$.

e) $[L_x, L_y] = i\hbar L_z \qquad [L_y, L_z] = i\hbar L_x \qquad [L_z, L_x] = i\hbar L_y$

Notation compacte : $\vec{L} \wedge \vec{L} = i\hbar \vec{L}$

$[L_i, L^2] = 0 \qquad i = x, y, z$

f) idem question d)

g) On admet que $E_{n\ell m}$ ne dépend pas de m (on le démontrera à la question (i))

$H\Psi_{n\ell m} = E_{n\ell}\Psi_{n\ell m} \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{L^2}{\hbar^2 r^2}\right] f_{n\ell m}\, Y_\ell^m = E_{n\ell} f_{n\ell m} Y_\ell^m$

or $L^2 Y_\ell^m = \hbar^2 \ell(\ell+1) Y_\ell^m$ d'où $-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right] f_{n\ell m} = E_{n\ell} f_{n\ell m}$

donc $f_{n\ell m}(r)$ ne dépend pas de m

h) i) On considère $U_z(\alpha) = \exp(-iL_z\alpha/\hbar)$ avec $L_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial \varphi}$ (cours)

$$U_z(\alpha)\,\Psi(r,\theta,\varphi) = \sum_{m=0}^{+\infty} \frac{(-\alpha)^m}{m!}\frac{\partial^m}{\partial\varphi^m}\Psi(r,\theta,\varphi) \underset{\text{Taylor}}{=} \Psi(r,\theta,\varphi-\alpha)$$

$\Rightarrow U_z(\alpha)$ correspond à une rotation d'angle α autour de l'axe (Oz).

De même, on montre que $U_x(\alpha)$ et $U_y(\alpha)$ correspondent à des rotations autour de (Ox) et (Oy) en redéfinissant les coordonnées sphériques selon ces axes.

(ii) $U_i(\alpha) H U_i^{-1}(\alpha)$ est le Hamiltonien dans le référentiel tourné d'un angle α autour de l'axe (Oi) $i = x, y, z$ (cf. TD5)

(iii) $U_i(\alpha) H U_i^{-1}(\alpha) \simeq (I - \frac{i}{\hbar}\alpha L_i) H (I + \frac{i}{\hbar}\alpha L_i) \simeq H - \frac{i}{\hbar}\alpha [L_i, H]$

au 1er ordre en $\alpha \ll 1$.

(iv) $[H, L_i] = 0 \Leftrightarrow$ système invariant par rotation (symétrie centrale de V)

i) $L_+ = L_x + iL_y$ $\quad L_+ |n l m\rangle = \sqrt{l(l+1) - m(m+1)}\, |n l (m+1)\rangle$

$[H, L_+] = 0 \Rightarrow \langle n l m | H L_+ | n l m'\rangle - \langle n l m | L_+ H | n l m'\rangle = 0$

$$\Rightarrow (E_{nlm} - E_{nlm'}) \sqrt{l(l+1) - m'(m'+1)}\, \underbrace{\langle n l m | n l (m'+1)\rangle}_{= \delta_{m, m'+1}} = 0$$

On prend $m = m'+1$

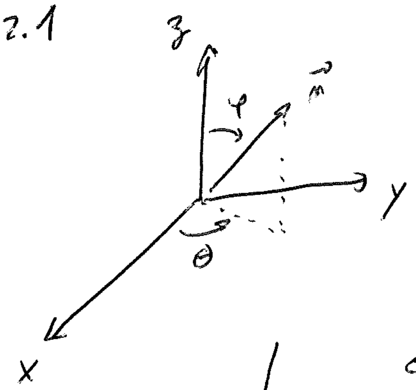
$$(E_{nl(m'+1)} - E_{nlm'}) \underbrace{\sqrt{l(l+1) - m'(m'+1)}}_{} = 0$$

ce terme est nul si :
- $l = 0$ mais alors $m = 0 \Rightarrow$ une seule valeur de m possible
- $m' = l$ mais alors $m = l+1$ impossible

Dans tous les autres cas : $E_{nl(m'+1)} = E_{nlm'}$ donc E_{nl} indépendant de m.

7.2. $\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}\sigma_x\\ \sigma_y\\ \sigma_z\end{pmatrix}$ $\sigma_x = \begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}$ $\sigma_y = \begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}$ $\sigma_z = \begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$

7.2.1



$$\vec{u} = \vec{m} = \begin{pmatrix}\cos\theta \sin\varphi\\ \sin\theta \sin\varphi\\ \cos\varphi\end{pmatrix}$$

a) $$S_{\vec{u}} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}\cos\varphi & \sin\varphi(\cos\theta - i\sin\theta)\\ \sin\varphi(\cos\theta + i\sin\theta & -\cos\varphi\end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}\cos\varphi & \sin\varphi\, e^{-i\theta}\\ \sin\varphi\, e^{i\theta} & -\cos\varphi\end{pmatrix}$$

b) $(S_{\vec{u}})^2 = \begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}\frac{\hbar^2}{4}$

c) valeurs propres : $\pm\frac{\hbar}{2}$ $|u,+\rangle = \begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix}$

$S_{\vec{u}}|\vec{u},+\rangle = \frac{\hbar}{2}|\vec{u},+\rangle \Rightarrow \cos\varphi\, a + \sin\varphi\, e^{-i\theta} b = a$

$\Rightarrow \sin\frac{\varphi}{2} a = e^{-i\theta}\cos\frac{\varphi}{2} b$

$\Rightarrow$ on prend $a = \cos\frac{\varphi}{2}$ et $b = \sin\frac{\varphi}{2} e^{i\theta}$

On veut aussi $|a|^2+|b|^2 = 1$

$|\vec{u},+\rangle = \begin{pmatrix}\cos\varphi/2\\ \sin\varphi/2\, e^{i\theta}\end{pmatrix}$ $\langle\vec{u},+|\vec{u},-\rangle = 0 \Rightarrow |\vec{u},-\rangle = \begin{pmatrix}\sin\varphi/2\\ -\cos\frac{\varphi}{2} e^{i\theta}\end{pmatrix}$

d) $\langle\vec{u},+|\sigma_x|\vec{u},+\rangle = \left(\cos\frac{\varphi}{2} \;\; \sin\frac{\varphi}{2} e^{-i\theta}\right)\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\varphi/2\\ \sin\varphi/2\, e^{i\theta}\end{pmatrix}$

$= \cos\frac{\varphi}{2}\sin\frac{\varphi}{2} e^{i\theta} + \cos\frac{\varphi}{2}\sin\frac{\varphi}{2} e^{-i\theta} = \cos\theta\sin\varphi = u_x$

Idem pour σ_y et σ_z d'où $\langle\vec{S}\rangle_{|\vec{u},+\rangle} = \frac{\hbar}{2}\vec{u}$

e) i) $\langle S_i^2\rangle = \frac{\hbar^2}{4}$ car $\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = \mathbb{1}$

$(S_{\vec{u}})^2 = \frac{\hbar^2}{4}[u_x\sigma_x + u_y\sigma_y + u_z\sigma_z]^2 = \frac{\hbar^2}{4}[u_x^2\sigma_x^2 + u_y^2\sigma_y^2 + u_z^2\sigma_z^2$
$+ u_xu_y(\sigma_x\sigma_y + \sigma_y\sigma_x) + u_yu_z(\sigma_y\sigma_z + \sigma_z\sigma_y)$
$+ u_xu_z(\sigma_x\sigma_z + \sigma_z\sigma_x)]$

or $\sigma_i\sigma_j = -\sigma_j\sigma_i$ pour $i \neq j$ d'où $(S_{\vec{u}})^2 = \frac{\hbar^2}{4}\mathbb{1}$ (car $u_x^2+u_y^2+u_z^2 = 1$)

et $\sigma_i^2 = \mathbb{1}$

<u>Rem</u> : déjà calculé en b) !

ii) $$\Delta S_{\vec{n},|\vec{u},+\rangle} = \sqrt{\underbrace{\langle S_{\vec{n}}^2\rangle_{|\vec{u},+\rangle}}_{=\frac{\hbar^2}{4}\text{ d'après i)}} - \underbrace{\langle S_{\vec{n}}\rangle^2_{|\vec{u},+\rangle}}_{=\langle \vec{n}.\vec{S}\rangle^2_{|\vec{u},+\rangle}}}$$

$$= \sqrt{\frac{\hbar^2}{4} - \Big(\vec{n}.\underbrace{\langle\vec{S}\rangle_{|\vec{u},+\rangle}}_{\frac{\hbar}{2}\vec{u}\text{ d'après d)}}\Big)^2} = \frac{\hbar}{2}\sqrt{1-(\vec{u}.\vec{n})^2}$$

$\rightarrow$ fluctuations maximales quand $\vec{u}\perp\vec{n}$

7.2.2.

a) $H = -\vec{\mathcal{M}}.\vec{B} = -\gamma\vec{S}.\vec{B} = -\gamma S_z B = -\omega S_z$

$U = e^{-\frac{iHt}{\hbar}} = e^{\frac{i\omega t}{\hbar}S_z}$ rotation d'angle $-\omega t$ autour de l'axe (Oz)

(on va le démontrer en b))

b) $|\psi(t=0)\rangle = |\vec{u},+\rangle = \begin{pmatrix}\cos\varphi/2 \\ \sin\varphi/2\, e^{i\theta}\end{pmatrix}$ $\qquad H = -\frac{\hbar}{2}\omega\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$

$$|\psi(t)\rangle = \cos\frac{\varphi}{2}|+\rangle e^{\frac{i\omega t}{2}} + \sin\frac{\varphi}{2}e^{i\theta}|-\rangle e^{-i\frac{\omega t}{2}}$$

c) $$= e^{i\frac{\omega t}{2}}\left[\cos\frac{\varphi}{2}|+\rangle + \sin\frac{\varphi}{2}e^{i(\theta-\omega t)}|-\rangle\right] = |\vec{u}(t),+\rangle e^{\frac{i\omega t}{2}}$$

$$\vec{u}(t) = \begin{pmatrix}\cos(\theta-\omega t)\sin\varphi \\ \sin(\theta-\omega t)\sin\varphi \\ \cos\varphi\end{pmatrix} \Rightarrow \text{rotation autour de } (Oz)\text{, angle } -\omega t$$

d) $\langle\vec{S}\rangle_{|\psi(t)\rangle} = \frac{\hbar}{2}\vec{u}(t)$ $\qquad$ période $T = \frac{2\pi}{\omega}$

e) $|\psi(t+T)\rangle = -|\psi(t)\rangle$

$|\psi(t+2T)\rangle = |\psi(t)\rangle$