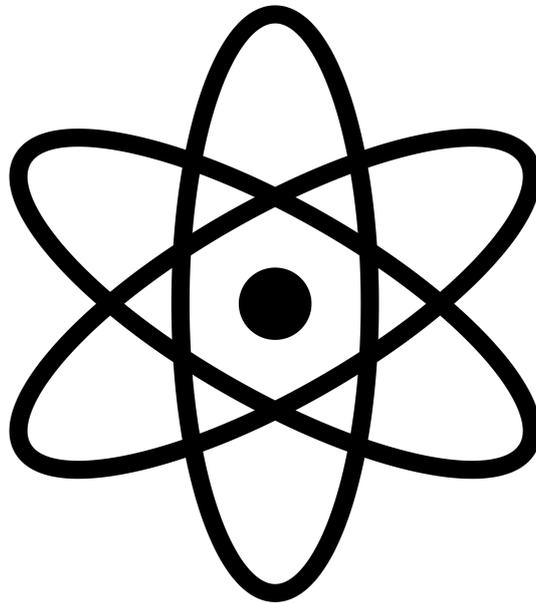


Année universitaire 2023 - 2024
Magistère de Physique Fondamentale
Université Paris-Saclay

Mécanique Quantique S2

Travaux Dirigés



Contenu du poly

- 9 sujets de Travaux Dirigés + 1 sujet de révision du programme de S1 en annexe + 2 anciens sujets d'examen en annexe

Table des Matières

1	Propriétés des états de Rydberg	1
1.1	Quelques propriétés	1
1.2	Applications aux états de Rydberg	2
2	Perturbations dépendantes du temps	3
2.1	Transition entre états d'un spectre discret	3
2.2	Transitions électromagnétiques dans l'atome d'hydrogène dans l'approximation dipolaire	4
2.3	Couplage de deux spins (voir plus tard!)	6
3	Spectroscopie d'un faisceau de neutrons – Franges de Ramsey	7
3.1	Spin-1/2 dans un champ magnétique oscillant	7
3.2	Franges de Ramsey	8
4	Inégalités de Bell et Applications	9
4.1	Bell states for a system composed of two spins	9
4.2	Entanglement through measurements: the GHZ state	10
4.3	The no-cloning theorem	10
5	Composition des moments angulaires	12
5.1	Généralités	12
5.2	Hamiltonien de couplage de plusieurs spins 1/2	13
6	Perturbations indépendantes du temps	14
6.1	Perturbation d'un oscillateur harmonique à une dimension	14
6.2	Perturbation d'un oscillateur harmonique isotrope à trois dimensions	15
6.3	Levée de dégénérescence	15
6.4	Perturbation des états d'une particule confinée sur un cercle (<i>facultatif</i>)	15
7	Effet Stark sur l'atome d'hydrogène	17
7.1	Préliminaires	17
7.2	Traitement de l'état fondamental	18
7.3	Traitement du niveau $n = 2$	18
8	Particules identiques	20
8.1	Deux particules et trois états	20
8.2	La vie sociale des fermions et bosons	20
8.3	Deux fermions en interaction dans un puits infini	20

9	Particules indiscernables et effet Hong-Ou-Mandel	22
9.1	Effet Hong-Ou-Mandel	22
9.2	Photons et optique quantique	23
A	Révisions du S1: Moment angulaire	24
A.1	Moment angulaire en mécanique quantique - partie 1	24
A.2	Moment angulaire en mécanique quantique - partie 2	24
A.3	Particule avec spin 1/2 (source: Basdevant-Dalibard)	24
A.4	Spectre rotationnel de la molécule de CO	25
B	Extraits du partiel de 2020	26
B.1	Coefficients de Clebsch-Gordan	26
B.2	Théorie des perturbations et atome d'hydrogène	28
C	Sujet examen Mai 2022	30
C.1	Deux particules identiques avec spin dans une boîte	30
C.2	Oscillateur harmonique en dimension trois	31
C.2.1	Propriétés de l'état fondamental	31
C.2.2	Effet d'un champ magnétique sur l'état fondamental	32
C.2.3	Effet d'un champ magnétique sur les premiers états excités	32
C.2.4	Une perturbation additionnelle	33
C.3	Un oscillateur harmonique dépendant du temps	33

Travaux Dirigés 1

Propriétés des états de Rydberg

Les états de Rydberg de l'atome d'hydrogène sont des états avec un très grand nombre quantique principal n . Par rapport à l'état fondamental et aux premiers états excités, cela conduit à des propriétés exaltées que l'exercice se propose de mettre en évidence. On rappelle le Hamiltonien pour la particule réduite dans le potentiel coulombien :

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m_e} - \frac{e^2}{\hat{r}} \quad \text{avec} \quad e^2 = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \quad (1.1)$$

où $q = -1.6 \times 10^{-19}$ C est la charge élémentaire de l'électron, m_e la masse de l'électron (c'est en toute rigueur la masse de la particule réduite que l'on peut confondre avec la masse de l'électron) et \hat{r} l'opérateur défini par $\hat{r} = \|\hat{\mathbf{r}}\|$. On rappelle que l'opérateur \hat{r} agissant sur une fonction d'onde $\psi(r, \theta, \varphi)$ en coordonnées sphériques revient à effectuer le produit $r\psi(r, \theta, \varphi)$. De même, l'opérateur indiqué comme $1/\hat{r}$ dans l'équation (1.1) agit de même comme $\psi(r, \theta, \varphi)/r$. On note $|n, l, m\rangle$ les états propres de l'atome d'hydrogène, les fonctions d'onde associées s'écrivant

$$\psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) = R_{n,l}(r)Y_{l,m}(\theta, \varphi). \quad (1.2)$$

On utilisera dans la suite les expressions

$$Y_{0,0}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad Y_{1,0}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \quad Y_{1,\pm 1}(\theta, \varphi) = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi} \quad (1.3)$$

et

$$R_{n,l}(r) = P_{n-l+1}(r) r^l e^{-r/(na)} \quad (1.4)$$

où $P_{n-l+1}(r)$ est en polynôme en r de degré $n-l+1$ et $a = \hbar^2/(m_e e^2) \approx 0.053$ nm le rayon de Bohr.

1.1 Quelques propriétés

1. Rappeler la valeur de l'énergie pour l'état (n, l, m) en fonction de $E_I = m_e e^4 / (2\hbar^2)$. Indiquer la dégénérescence de chaque niveau.
2. Soit \hat{A} un opérateur. Que vaut la grandeur $\langle n, l, m | [\hat{A}, \hat{H}_0] | n, l, m \rangle$?
3. Démontrer la relation de commutation suivante :

$$[\hat{p}_x, f(\hat{r})] = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial f}{\partial x}(\hat{r}). \quad (1.5)$$

4. On pose $\hat{A} = \hat{x}\hat{p}_x + \hat{y}\hat{p}_y + \hat{z}\hat{p}_z$. En utilisant le résultat de la question précédente, montrer que $[\hat{A}, \hat{p}^2] = 2i\hbar\hat{p}^2$ et $[\hat{A}, 1/\hat{r}] = i\hbar/\hat{r}$.

1.2 Applications aux états de Rydberg

1. En déduire $[\hat{A}, \hat{H}_0]$. À partir de ce résultat, calculer les valeurs moyennes de l'énergie cinétique $\hat{T} = \hat{p}^2/(2m_e)$ et de l'énergie potentielle $\hat{V} = -e^2/\hat{r}$.
2. En déduire que

$$\langle n, l, m | \frac{1}{\hat{r}} | n, l, m \rangle = \frac{1}{n^2 a}. \quad (1.6)$$

En déduire un ordre de grandeur pour la valeur moyenne $\langle \hat{r} \rangle$.

3. Un calcul exact (mais un peu technique) donne $\langle \hat{r} \rangle = (3n^2 - l(l+1))a/2$. Justifier que le calcul approché effectué ci-dessus est pertinent pour la plus grande valeur de l permise. La figure ci-dessous représente la densité électronique pour un état $(n, l = n-1, |m| = l)$ avec $n \gg 1$. De quel modèle pré-quantique se rapproche-t-on ?

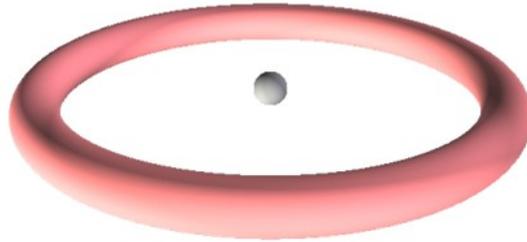


Figure 1.1: Densité électronique pour un état $(n, l = n-1, |m| = l)$ avec $n \gg 1$.

4. Estimer $\langle \hat{r} \rangle$ pour un état de Rydberg avec $n = 60$. Que pensez-vous de cette valeur ? On pourra par exemple la comparer à la dimension caractéristique d'un virus...
5. On considère l'observable dipôle électrique $\hat{\mathbf{d}} = q\hat{\mathbf{r}}$. On considère un état (n, l, m) . À partir de la symétrie des fonctions d'onde, justifier que $\langle \hat{\mathbf{d}} \rangle = 0$.
6. Déterminer pour quelle valeur de l et m le dipôle de transition

$$\langle n, l, m | \hat{d}_z | n, 0, 0 \rangle = q \langle n, l, m | \hat{z} | n, 0, 0 \rangle$$

est non nul. Pour cela, on exprimera cet élément de matrice en fonction d'une intégrale que l'on précisera et qui porte sur les parties radiales $R_{n,0}(r)$ et $R_{n,l}(r)$ des fonctions d'onde sans chercher à la calculer explicitement. On utilisera la relation d'orthogonalité des harmoniques sphériques.

7. Procéder de manière similaire pour les éléments de matrice de \hat{x} et \hat{y} .
8. En déduire un ordre de grandeur pour ces éléments de matrice.

Travaux Dirigés 2

Perturbations dépendantes du temps

On considère un système dont le hamiltonien s'écrit :

$$H = H_0 + W(t)$$

où H_0 est un hamiltonien indépendant du temps, dont on connaît les valeurs propres E_i et les vecteurs propres, $|\phi_i\rangle$, et $W(t)$ est une perturbation qui dépend du temps t .

Les états $|\phi_i\rangle$ ne sont pas vecteurs propres de $H = H_0 + W(t)$ par conséquent, si à l'instant t_0 , le système est dans l'un des états propres, $|\psi(0)\rangle = |\phi_i\rangle$ alors à un instant $t > t_0$, le système aura une probabilité non nulle de se trouver dans un des autres états propres $|\phi_j\rangle$, $j \neq i$.

Au premier ordre en $W(t)$ de la théorie des perturbations, la probabilité de transition de $|\phi_i\rangle$ à $|\phi_j\rangle$ est donnée par

$$\mathcal{P}_{\phi_i \rightarrow \phi_j} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{t_0}^t dt' e^{i(E_j - E_i)t'/\hbar} \langle \phi_j | W(t') | \phi_i \rangle \right|^2 \quad (2.1)$$

2.1 Transition entre états d'un spectre discret

On considère une particule dont l'énergie potentielle est harmonique. Son hamiltonien sera celui d'un oscillateur harmonique à une dimension.

$$H_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \hat{x}^2 .$$

On a $\hat{x} = x_0 (a + a^\dagger)$ et $\hat{p} = -ip_0 (a - a^\dagger)$ où on a posé $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$ et $p_0 = \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}$. Les opérateurs a et a^\dagger vérifient

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \quad , \quad a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle .$$

1. Rappeler les valeurs propres, $E_n^{(0)}$ de H_0 et leur dégénérescence.
2. La particule possède une charge q . Pour $t < 0$, la particule est dans l'état fondamental $|0\rangle$. Entre les instants $t = 0$ et $t = \tau$, elle est soumise à un champ électrique $\vec{\mathcal{E}} = \mathcal{E}\vec{u}_x$, où \mathcal{E} est une constante. Donner l'expression du terme de perturbation $W(t)$ correspondant.

3. A l'ordre le plus bas en \mathcal{E} , calculer la probabilité $\mathcal{P}_{0 \rightarrow n}$ d'observer la particule dans un état $|n\rangle$, à l'issue de la période d'excitation (à $t = \tau$).
4. Montrer que les états propres $|\Phi_n\rangle$ de $H = H_0 + W(t)$, pour $t \in [0, \tau]$, sont définis par

$$|\Phi_n\rangle = \exp\left(-i \frac{q\mathcal{E}}{m\omega^2} \frac{\hat{p}}{\hbar}\right) |n\rangle$$

et donner leurs énergies E_n .

5. Montrer que l'expression exacte de $\mathcal{P}_{0 \rightarrow n}$ est

$$\mathcal{P}_{0 \rightarrow n} = \left| \sum_k \langle n | \Phi_k \rangle \langle \Phi_k | 0 \rangle e^{-iE_k\tau/\hbar} \right|^2.$$

6. Donner l'expression des états $|\Phi_k\rangle$ au premier ordre en \mathcal{E} .
7. Calculer $\mathcal{P}_{0 \rightarrow n}$ à l'ordre 2 en \mathcal{E} et comparer le résultat avec celui qu'on avait obtenu à la question 3.

2.2 Transitions électromagnétiques dans l'atome d'hydrogène dans l'approximation dipolaire

On considère un atome d'hydrogène sur lequel on envoie un champ électromagnétique cohérent de fréquence ω . L'approximation dipolaire s'applique quand la longueur d'onde de la radiation λ est beaucoup plus grande que la taille typique de l'atome a_0 . Dans ce cas, le champ électrique $\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{\mathcal{E}} \sin(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)$ peut être approché par un champ oscillant uniforme $\vec{E}(\vec{r}, t) \approx \vec{\mathcal{E}} \sin(-\omega t)$.

1. Montrer que la probabilité d'induire une transition d'un état atomique initial $|i\rangle$ vers un état final $|f\rangle$ dépend de l'élément de matrice dipolaire

$$-e \langle f | \hat{\vec{r}} \cdot \vec{u}_{\mathcal{E}} | i \rangle \quad (2.2)$$

où $e > 0$ est la charge électrique élémentaire et $\vec{u}_{\mathcal{E}}$ est un vecteur unitaire parallèle à $\vec{\mathcal{E}}$. Le premier objectif de cet exercice est de se familiariser avec quelques règles de sélection pour des transitions électromagnétiques, qui sont des conditions *nécessaires* pour que l'élément de matrice ne s'annule pas. Dans cet exercice, on néglige le spin électronique et on référence les états propres de l'atome d'hydrogène par les trois nombres quantiques $|n, l, m\rangle$.

2. Rappeler la condition d'orthonormalisation satisfaite par les harmoniques sphériques.
3. Rappeler la dépendance en l'angle ϕ de l'harmonique sphérique $Y_{l,m}(\theta, \phi)$.
4. *Règle de sélection sur L_z* . Montrer que:

$$\langle n, l, m | \hat{z} | n', l', m' \rangle \neq 0 \quad \implies \quad m = m'; \quad (2.3)$$

$$\langle n, l, m | (\hat{x} + i\hat{y}) | n', l', m' \rangle \neq 0 \quad \implies \quad m = m' + 1; \quad (2.4)$$

$$\langle n, l, m | (\hat{x} - i\hat{y}) | n', l', m' \rangle \neq 0 \quad \implies \quad m = m' - 1. \quad (2.5)$$

5. Rappeler la forme exacte de $Y_{00}(\theta, \phi)$.

6. Règle de sélection sur L^2 - Première partie. Montrer que:

$$\langle n, l = 0, m = 0 | \hat{r} | n', l' = 0, m' = 0 \rangle = 0. \quad (2.6)$$

Le produit de deux harmoniques sphériques, étant une fonction de carré sommable de θ and ϕ , peut s'exprimer comme une combinaison linéaire d'harmoniques sphériques:

$$Y_{l_1, m_1}(\theta, \phi) Y_{l_2, m_2}(\theta, \phi) = \sum_l c_{l_1, l_2, l} Y_{l, m_1 + m_2}(\theta, \phi). \quad (2.7)$$

On ne s'intéresse pas ici à la forme explicite de c_{lm} , en revanche la relation suivante est importante:

$$c_{l_1, l_2, l} \neq 0 \quad \implies \quad l \in \{|l_1 - l_2|, |l_1 - l_2| + 1, |l_1 - l_2| + 2, \dots, l_1 + l_2\}. \quad (2.8)$$

7. Règle de sélection sur L^2 - Deuxième partie. Montrer que:

$$\langle n, l, m, s | \hat{z} | n', l', m', s' \rangle \neq 0 \quad \implies \quad l = l', l' + 1, l' - 1 \quad \text{ET} \quad l + l' \neq 0. \quad (2.9)$$

Le deuxième objectif de cet exercice est de mettre en application les règles de sélection que nous venons de dériver pour en déduire certaines propriétés observables des raies d'absorption de l'atome d'hydrogène.

8. Supposons que l'atome d'hydrogène soit initialement dans son état fondamental et que l'on envoie une radiation ayant une fréquence résonante avec l'énergie de transition $E_2 - E_1$. Si la transition atomique a lieu, quel est le nombre quantique l de l'état final? Vérifier que la longueur d'onde correspondant à cette transition vérifie bien l'approximation dipolaire.
9. Supposons que l'on sache préparer un gaz d'atomes d'hydrogène tous dans l'état $|n = 2, l = 0, m = 0\rangle$. Expliquer pourquoi cet état ne peut pas se désexciter vers l'état fondamental par une transition dipolaire. Justifier l'appellation de métastable donné à un tel état.
10. Considérons maintenant un champ électrique uniforme et statique \vec{E}_0 parallèle à l'axe z . Il est connu (et nous le verrons plus loin dans ce cours) que le niveau d'énergie $l = 2$ se divise en trois sous niveaux avec les énergies et états propres suivants:

$$E_2 \quad \rightarrow \quad |n = 2, l = 1, m = 1\rangle, |n = 2, l = 1, m = -1\rangle \quad (2.10)$$

$$E_2 + \Delta E \quad \rightarrow \quad \frac{1}{\sqrt{2}} (|n = 2, l = 0, m = 0\rangle + |n = 2, l = 1, m = 0\rangle) \quad (2.11)$$

$$E_2 - \Delta E \quad \rightarrow \quad \frac{1}{\sqrt{2}} (|n = 2, l = 0, m = 0\rangle - |n = 2, l = 1, m = 0\rangle). \quad (2.12)$$

Supposons que l'atome est initialement préparé dans son état fondamental, et qu'il interagit avec une onde plane ayant une direction de propagation perpendiculaire au champ électrique statique \vec{E}_0 . Combien de raies d'absorptions peuvent-êtré observées pour la transition dipolaire $n = 1 \rightarrow n = 2$ si l'onde est polarisée linéairement dans une direction parallèle à \vec{E}_0 ?

11. Même question si l'onde est polarisée linéairement dans une direction perpendiculaire à \vec{E}_0 .
12. Même question si l'onde est polarisée circulairement.

2.3 Couplage de deux spins (voir plus tard!)

On considère deux particules ayant chacune un spin $1/2$. Lorsque les particules sont très éloignées l'une de l'autre, le Hamiltonien \hat{H}_0 du système des deux particules ne dépend pas des spins \vec{S}_1 et \vec{S}_2 de chacune des particules. Lorsque les deux particules se rapprochent, les deux particules interagissent et le Hamiltonien du système devient $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W}(t)$, avec $\hat{W}(t) = a(t)\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$. On suppose que $a(t)$ est une fonction réelle du temps t , telle que $\lim_{|t| \rightarrow \infty} a(t) = 0$, et dont le support est essentiellement contenu dans un intervalle de largeur τ autour de $t = 0$.

Lorsque $t \rightarrow -\infty$, l'état des deux particules est $|\psi_{\text{init}}\rangle = |\psi_{\text{orb}}\rangle \otimes |+\rangle_1 \otimes |-\rangle_2$ où $|\pm\rangle_i$, est l'état propre commun à S_i^2 et S_{iz} et dont la valeur propre de S_{iz} est $\pm\hbar/2$, ($i = 1, 2$). Par ailleurs, $|\psi_{\text{orb}}\rangle$ appartient à l'espace de Hilbert dans lequel agit l'opérateur \hat{H}_0 .

1. Soit $|\psi(t)\rangle$ l'état du système à l'instant t . Ecrire l'équation différentielle satisfaite par $|\psi(t)\rangle$.
2. Soit $|\psi_I(t)\rangle = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} |\psi(t)\rangle$. Montrer que $|\psi_I(t)\rangle$ vérifie une équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_I(t)\rangle = H_I(t) |\psi_I(t)\rangle,$$

où on donnera l'expression de $H_I(t)$.

3. En remarquant que $[H_I(t), H_I(t')] = 0, \forall t, t' \in \mathbb{R}$, en déduire l'expression intégrale de $|\psi_I(t)\rangle$, puis celle de $|\psi(t)\rangle$.
4. En déduire la probabilité $\mathcal{P}(+- \rightarrow -+)$ que les deux particules soient dans l'état $|\psi_{\text{fin}}\rangle = |-\rangle_1 \otimes |+\rangle_2$ lorsque $t \rightarrow +\infty$.
5. Calculer $\mathcal{P}(+- \rightarrow -+)$ en utilisant la théorie des perturbations dépendant du temps au premier ordre. Discuter les conditions de validité d'une telle approximation en comparant les résultats obtenus à ceux de la question précédente.
6. On suppose maintenant que chaque spin interagit en plus avec un champ magnétique statique $\vec{B}_0 = B_0 \vec{e}_z$ dirigé suivant l'axe Oz . Le Hamiltonien du système devient $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}_0 + \hat{W}(t)$, avec \hat{V}_0 le Hamiltonien Zeeman :

$$\hat{V}_0 = -B_0 (\gamma_1 S_{1z} + \gamma_2 S_{2z}),$$

où les γ_1 et γ_2 sont les rapports gyromagnétiques de chacun des deux spins.

En prenant $a(t) = a_0 e^{-\frac{t^2}{\tau^2}}$, calculer $\mathcal{P}(+- \rightarrow -+)$ par la théorie des perturbations dépendant du temps au premier ordre. Les paramètres a_0 et τ étant fixés, discuter des variations de $\mathcal{P}(+- \rightarrow -+)$ en fonction de B_0 .

Travaux Dirigés 3

Spectroscopie d'un faisceau de neutrons – Franges de Ramsey

3.1 Spin-1/2 dans un champ magnétique oscillant

Un neutron est plongé dans un champ magnétique oscillant $\vec{B}(t)$ dont les composantes sont données par :

$$\begin{aligned} B_x(t) &= B_1 \cos \omega t; \\ B_y(t) &= B_1 \sin \omega t; \\ B_z(t) &= B_0. \end{aligned} \quad (3.1)$$

Le but de cet exercice est d'étudier la dynamique de l'état interne du neutron, qui est bien décrit par le formalisme du spin 1/2.

1. On appelle γ le facteur gyromagnétique du neutron (attention: pour le neutron, $\gamma < 0$), tel que son opérateur de moment magnétique s'écrit $\hat{\mu} = \gamma \hat{S}$ où \hat{S} est l'opérateur de spin (attention: $\hat{\mu}$ et \hat{S} sont des vecteurs d'opérateurs). Quel est le hamiltonien \hat{H} de couplage entre le moment magnétique du neutron et les champs magnétiques présents? En donner sa représentation matricielle dans la base des états propres de \hat{S}_z (on posera $\omega_0 = -\gamma B_0$ et $\omega_1 = -\gamma B_1$).
2. Ce problème n'est pas évident à résoudre a priori car le hamiltonien \hat{H} est dépendant du temps. Une astuce consiste à associer à tout vecteur $|\psi(t)\rangle$ décrivant l'état interne du neutron à l'instant t le vecteur $|\tilde{\psi}(t)\rangle$ défini (toujours dans la base des états propres de \hat{S}_z) par:

$$|\tilde{\psi}(t)\rangle = \begin{pmatrix} \exp(i\omega t/2) & 0 \\ 0 & \exp(-i\omega t/2) \end{pmatrix} |\psi(t)\rangle \quad (3.2)$$

Justifier pourquoi on parle de 'passage dans le référentiel tournant avec le champ magnétique' pour décrire cette transformation (on pourra se référer au TD8 du premier semestre).

3. Donner l'expression de $|\psi(t)\rangle$ en fonction de $|\tilde{\psi}(t)\rangle$
4. A partir de l'équation de Schrödinger vérifiée par $|\psi(t)\rangle$, écrire une équation de Schrödinger effective pour $|\tilde{\psi}(t)\rangle$. Quelle est l'expression du hamiltonien effectif \hat{H} correspondant?

5. On suppose qu'au temps $t = 0$, le système se trouve dans l'état $|\psi(0)\rangle = |\downarrow\rangle$, qui est l'état propre de \hat{S}_z avec valeur propre $-\hbar/2$. Donner l'expression de $|\psi(t)\rangle$ au temps t pour $\omega = \omega_0$. Donner une interprétation géométrique du résultat.
6. En déduire l'expression de $|\psi(t)\rangle$ au temps t .

3.2 Franges de Ramsey

On considère un faisceau de neutrons de vitesse v qui se propage le long de l'axe Ox . Les neutrons sont initialement dans l'état propre $|\downarrow\rangle_z$. Dans ce problème, on s'intéresse à l'évolution quantique de l'état interne (le spin). Les variables d'espace seront traitées classiquement (mouvement rectiligne uniforme); on suppose qu'au temps $t = 0$ les neutrons se trouvent au point $x = 0$.

Dans tout l'espace il règne un champ magnétique uniforme \vec{B}_0 dirigé selon Oz . Un champ magnétique tournant $\vec{B}_1(t)$ dans le plan Oxy , tel que :

$$\begin{aligned} B_{1,x}(t) &= B_1 \cos \omega t; \\ B_{1,y}(t) &= B_1 \sin \omega t; \\ B_{1,z}(t) &= 0 \end{aligned} \quad (3.3)$$

se rajoute à \vec{B}_0 dans les régions caractérisées par $0 < x < a$ et $b < x < b + a$, avec $b \geq a$. Dans la suite, on suppose que $\omega_1 a/v = \pi/2$, et que $|\omega - \omega_0| \ll \omega_1$.

1. Donner l'état du spin des neutrons au temps $t = a/v$ dans le référentiel tournant, noté $|\tilde{\psi}(t = a/v)\rangle$ si $\omega = \omega_0$. Interpréter de façon géométrique le résultat. Le résultat est-il significativement différent quand $\omega \neq \omega_0$ (avec la condition $|\omega - \omega_0| \ll \omega_1$)?
2. Donner l'état du spin des neutrons au temps $t = b/v$ dans le référentiel tournant, noté $|\tilde{\psi}(t = b/v)\rangle$.
3. Donner l'état du spin des neutrons au temps $t = (b + a)/v$ dans le référentiel tournant $|\tilde{\psi}(t = (b + a)/v)\rangle$
4. En déduire l'état du spin des neutrons au temps $t = (b + a)/v$ dans le référentiel initial, noté $|\psi(t = (b + a)/v)\rangle$
5. On appelle P la probabilité finale de détecter le neutron dans l'état $|\uparrow\rangle_z$. Calculer la fonction $P(\omega)$ en utilisant la relation $|\omega - \omega_0| \ll \omega_1$.
6. Tracer $P(\omega)$ en fonction de ω . Quelle est la largeur de la frange centrale, comment varie-t-elle en fonction de v et b ? Pourquoi cela impose-t-il une limite sur la mesure de γ et en quoi cela est-il relié à des propriétés générales de la mécanique quantique?
7. Application numérique. Avec des neutrons d'une longueur d'onde de de Broglie $\lambda_{dB} = 31 \text{ \AA}$, la plus précise des mesures du facteur gyromagnétique est

$$\gamma_n = -1.91204184(\pm 8.8 \cdot 10^{-7})q/M_p$$

où q est l'unité de charge et M_p la masse du proton. Pour un champ de 1 Tesla, quelle doit être la longueur b entre les deux zones d'interaction pour atteindre cette précision?

Travaux Dirigés 4

Inégalités de Bell et Applications

In this TD we discuss several properties of entangled states and show some of their non-classical properties. We conclude with a proof of the No-cloning theorem.

4.1 Bell states for a system composed of two spins

Consider a system composed of two spins $1/2$. It is customary to define four entangled states called *Bell states*, in honour of John Bell:

$$|\Phi^+\rangle = \frac{|\uparrow\rangle|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle|\downarrow\rangle}{\sqrt{2}}, \quad |\Phi^-\rangle = \frac{|\uparrow\rangle|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle|\downarrow\rangle}{\sqrt{2}}, \quad (4.1a)$$

$$|\Psi^+\rangle = \frac{|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle + |\downarrow\rangle|\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}, \quad |\Psi^-\rangle = \frac{|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle - |\downarrow\rangle|\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}. \quad (4.1b)$$

The goal of the next questions is to explore some of their properties.

1. What is the dimension of the Hilbert space \mathcal{H}_2 that is necessary in order to describe a system composed of two spins $1/2$? Give the tensor-product basis of this space.
2. Show that the four Bell states constitute an orthonormal basis of \mathcal{H}_2 . Curiously enough, this means that we can thus choose for \mathcal{H}_2 either a basis composed of separable states or a basis composed of entangled states.

Local manipulation of the Bell states

3. Consider a tensor-product state, for instance $|\uparrow\rangle|\uparrow\rangle$. Show that by acting only on one single spin, for instance the first, with a unitary operation whatsoever \hat{U} , it is not possible to create any of the four Bell states.
4. Show that with the previous protocol it is only possible to create states that belong to a two-dimensional subspace of \mathcal{H}_2 .
5. Comment on the fact that a similar situation takes place when one considers two classical spins, namely two Boolean variables σ_1 and σ_2 that can take two values $\{\uparrow, \downarrow\}$. If we start from the initial configuration $(\sigma_1 = \uparrow, \sigma_2 = \uparrow)$, by acting only on the first spin it is possible to create only two configurations, out of the total four that are possible.

6. Consider now the Bell state $|\Phi^+\rangle$. Show that by acting on the first spin only with a set of appropriate unitary transformations it is possible to generate any of the four Bell states.

Local measurements of the Bell states

7. We now consider an observable acting on the first spin, for instance $\hat{S}_z \otimes \hat{I}$. Show that the expectation value of this observable is the same for all the Bell states.
8. Prove the same result for a generic spin measurement, $\hat{S}_{\vec{v}} \otimes \hat{I}$.
9. Consider instead the tensor-product basis. What happens in this case?

A fundamental identity

10. Let us consider the following fundamental identity, that is crucial for proving the Bell inequality:

$$\langle \Psi^- | \hat{S}_{\vec{u}} \otimes \hat{S}_{\vec{v}} | \Psi^- \rangle = -\frac{\hbar^2}{4} \vec{u} \cdot \vec{v}; \quad |\vec{u}| = |\vec{v}| = 1. \quad (4.2)$$

Prove it. A possible way consists in recalling that $\hat{S}_{\vec{u}} = v_x \hat{S}_x + v_y \hat{S}_y + v_z \hat{S}_z$; although the result is fully general, it will be enough to consider the case where \vec{u} and \vec{v} lie in the $x-z$ plane.

4.2 Entanglement through measurements: the GHZ state

We now consider the GHZ state, introduced by Daniel Greenberger, Michael Horne, Anton Zeilinger (and N. David Mermin), which is a three spins state:

$$|\text{GHZ}\rangle = \frac{|\uparrow\rangle|\uparrow\rangle|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle|\downarrow\rangle|\downarrow\rangle}{\sqrt{2}}. \quad (4.3)$$

We can consider it as a generalisation of the Bell state $|\Phi^+\rangle$.

1. Consider a measurement of \hat{S}_z on the first spin, that is $\hat{S}_z \otimes I \otimes I$. Consider the two possible outcomes of the measurement, $\pm\hbar/2$, and say with which probability they are obtained. What is the state of the three-spin system after the measurement in both cases? Is it a product or an entangled state?
2. Consider a measurement of \hat{S}_x on the first spin, that is $\hat{S}_x \otimes I \otimes I$. Repeat the exercise at the previous point, and comment on whether this measurement creates an entangled state of the second and third spin.
3. Consider a generic product state of three spins: show that by measuring the first spin it is not possible to create an entangled state of the second and third spins.

4.3 The no-cloning theorem

A fundamental theorem that has been proven at the beginning of the 1980s by many authors states that no machine acting on two spins exists that can copy an unknown quantum state of the first spin onto the second, namely that produces the following outcome:

$$\hat{U}_{\text{clon}}|\psi\rangle|\uparrow\rangle = |\psi\rangle|\psi\rangle, \quad \forall|\psi\rangle = \alpha|\uparrow\rangle + \beta|\downarrow\rangle. \quad (4.4)$$

In the context of quantum theory, it is reasonable to assume that \hat{U}_{clon} is a linear operator, since in quantum mechanics any operation on a quantum state is represented by a linear operator. Show that there is no linear operator that acts as \hat{U}_{clon} . [Hint: consider the action of \hat{U}_{clon} on two orthogonal states and then extend by linearity.]

Travaux Dirigés 5

Composition des moments angulaires

5.1 Généralités

Soient $\hat{\mathbf{J}}^{(1)}$ et $\hat{\mathbf{J}}^{(2)}$, les opérateurs vectoriels de moment angulaire définis sur les espaces de Hilbert $\mathcal{H}^{(1)}$ et $\mathcal{H}^{(2)}$, contenant les états respectifs des particule (1) et (2).

Si les particules interagissent, on peut s'attendre à ce qu'il y ait un échange de moments angulaires. Inspiré par l'addition des moments en mécanique classique, on définit le moment angulaire total $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{J}}^{(1)} \otimes \mathbb{1}^{(2)} + \mathbb{1}^{(1)} \otimes \hat{\mathbf{J}}^{(2)}$ défini dans $\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)}$, où $\mathbb{1}^{(i)}$ est l'opérateur identité sur $\mathcal{H}^{(i)}$.

Les particules (1) et (2) sont deux particules de spin 1/2 (donc $\mathcal{H}^{(i)} \cong \mathbb{C}^2$). Pour chacune des particules, on notera $|\uparrow\rangle \equiv |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$ et $|\downarrow\rangle := |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$, les deux états propres communs de $(\hat{J}^{(i)})^2$ et $\hat{J}_z^{(i)}$ correspondant aux deux valeurs propres $\pm 1/2$ de $\hat{J}_z^{(i)}$, dans $\mathcal{H}^{(i)}$.

1. Donner l'expression des états orthonormés de la base de \mathcal{H} formée par le produit tensoriel des bases de chaque spin (base produit).
2. L'état $|\uparrow\uparrow\rangle$ est-il aussi un état propre de \hat{J}^2 et \hat{J}_z ? Et $|\downarrow\downarrow\rangle$? Si oui, pour quelles valeurs propres ? Montrer que ce n'est pas le cas pour les états $|\uparrow\downarrow\rangle$ et $|\downarrow\uparrow\rangle$.
3. Déterminer les autres états propres $|j, m\rangle$, des opérateurs \hat{J}^2 et \hat{J}_z correspondant aux valeurs propres respectives $\hbar^2 j(j+1)$ et $\hbar m$ (*Suggestion*: utiliser $\hat{J}_\pm = \hat{J}_\pm^{(1)} + \hat{J}_\pm^{(2)}$).
4. Soit $\hat{P}_{1\leftrightarrow 2}$ l'opérateur qui réalise l'échange des deux particules. Appliquer $\hat{P}_{1\leftrightarrow 2}$ à l'état $|0, 0\rangle$ (singulet), puis à $|1, 0\rangle$ (état du triplet). Comparer les résultats.
5. On remplace la particule (2) par une particule de moment angulaire 1. Déterminer les états propres $|j, m\rangle$ communs aux opérateurs \hat{J}^2 et \hat{J}_z . On donnera l'expression de $|j, m\rangle$ dans la base induite par le produit tensoriel des bases $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}^{(1)}$ et $\{|-1\rangle, |0\rangle, |1\rangle\}^{(2)}$.
6. En général, on trouve que la combinaison de deux moments angulaires j_1 et j_2 conduit à plusieurs valeurs possibles de j : $(j_1 + j_2), (j_1 + j_2 - 1), (j_1 + j_2 - 2), \dots, |j_1 - j_2|$.

Sachant que le spin du neutron j est dû à l'addition des spins de trois *quarks*, particules de spin 1/2, montrer qu'on peut choisir $j = \frac{1}{2}$.

5.2 Hamiltonien de couplage de plusieurs spins 1/2

1. On considère deux spins 1/2, notés respectivement 1 et 2. Les espaces des états de ces deux spins sont notés respectivement \mathcal{E}_1 et \mathcal{E}_2 . Chacun de ces espaces des états est muni d'une base $|\uparrow\rangle$ et $|\downarrow\rangle$ correspondant aux états propres communs aux opérateurs \hat{S}^2 et \hat{S}_z définis pour chaque spin 1/2. L'espace des états $\mathcal{E} = \mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$ pour les deux spins a pour vecteurs de base les états "produit" ($|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle$), où nous avons utilisé une notation contractée pour décrire l'état produit tensoriel des deux spins : par exemple, $|\uparrow\uparrow\rangle = |\text{spin 1} : \uparrow\rangle \otimes |\text{spin 2} : \uparrow\rangle$. Ces deux spins sont placés sur deux sites voisins et interagissent via le Hamiltonien

$$\hat{H} = J \hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2 \quad (5.1)$$

où J est une constante réelle et positive. On introduit le spin total $\hat{S} = \hat{S}_1 + \hat{S}_2$, la base des états propres communs aux opérateurs \hat{S}^2 et \hat{S}_z étant notée $|S, M\rangle$.

- (a) Rappeler (sans démonstration) les expressions des différents états $|S, M\rangle$ normalisés à l'unité en fonction des états produit indiqués ci-dessus.
 - (b) Donner l'action de \hat{H} sur un état $|S, M\rangle$.
 - (c) En déduire les niveaux d'énergie du système constitué par les deux spins couplés, et préciser leur dégénérescence.
 - (d) On suppose le système des deux spins dans le niveau fondamental. En supposant que l'énergie de ce niveau fondamental serait équirépartie sur chaque site, donner l'énergie E_{site} par site. Calculer également le dipôle magnétique moyen sur chaque site, le long de l'axe de quantification z . Justifier pourquoi une telle situation est appelée "anti-ferromagnétisme".
2. (*Facultatif*) On considère maintenant trois spins 1/2, notés 1,2 et 3, et placés sur les sommets d'un triangle équilatéral. Ces spins interagissent via le Hamiltonien :

$$\hat{H} = J \left(\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2 + \hat{S}_2 \cdot \hat{S}_3 + \hat{S}_3 \cdot \hat{S}_1 \right) . \quad (5.2)$$

- (a) Montrer que cet Hamiltonien peut s'écrire en fonction de l'opérateur \hat{S}^2 du spin total, avec $\hat{S} = \hat{S}_1 + \hat{S}_2 + \hat{S}_3$.
- (b) Indiquer la dimension de l'espace des états formé par ces trois spins 1/2. Donner les valeurs possibles de S et préciser la dimension des sous-espaces associés à ces valeurs.
- (c) Déterminer l'énergie du niveau fondamental et indiquer la dégénérescence de cet état. Calculer l'énergie E_{site} et comparer au résultat obtenu à la question 1d.

Travaux Dirigés 6

Perturbations indépendantes du temps

6.1 Perturbation d'un oscillateur harmonique à une dimension

On considère un oscillateur harmonique à une dimension, c'est-à-dire un système décrit par le hamiltonien:

$$H_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 .$$

1. Rappeler quelles sont les valeurs propres, E_n , de H_0 et leur dégénérescence.

On note $|n\rangle$ l'état propre associé à la valeur propre E_n . On définit les opérateurs d'annihilation et de création \hat{a} et \hat{a}^\dagger par

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x + i\frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}} p \quad , \quad a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x - i\frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}} p$$

Inversement, on a $x = x_0 (a + a^\dagger)$ et $p = -ip_0 (a - a^\dagger)$ où on a posé $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$ et $p_0 = \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}$.

Les opérateurs a et a^\dagger vérifient

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \quad , \quad a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$$

2. Calculer les éléments de matrice $\langle n|\hat{x}|m\rangle$ et $\langle n|\hat{x}^2|m\rangle$.
3. On applique une perturbation de la forme $W = \alpha x$. Calculer, pour toutes valeurs de n :
 - (a) la variation des états au premier ordre,
 - (b) la variation des énergies au premier et au second ordre,
 - (c) la valeur exacte des énergies, à comparer à l'approximation ci-dessus,
 - (d) l'expression exacte des états propres de $H = H_0 + W$, à comparer à l'approximation ci-dessus.
 - (e) en analysant les réponses précédentes, déterminer la condition de validité de la théorie des perturbations.
4. (Facultatif) Reprendre les questions 3 a, b et c ci-dessus, pour une perturbation de la forme $W = \mu x^2$. Quelle est la condition de validité de la théorie des perturbations dans ce cas?

6.2 Perturbation d'un oscillateur harmonique isotrope à trois dimensions

On considère un oscillateur harmonique isotrope à trois dimensions, c'est-à-dire un système décrit par le hamiltonien :

$$H_0 = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{\mathbf{r}}^2 .$$

On introduit une perturbation de la forme $W = \frac{1}{2}m\lambda z^2$. Calculer :

1. le déplacement en énergie, au premier ordre, pour le niveau fondamental et pour le premier niveau excité,
2. les valeurs exactes des niveaux d'énergie, à comparer aux approximations ci-dessus. Quelle est la condition de validité de la théorie des perturbations dans ce cas?

6.3 Levée de dégénérescence

On considère un système décrit par le hamiltonien H_0 possédant deux valeurs propres E_1 et E_2 dégénérées. Le système est soumis à une perturbation extérieure W . Dans une base appropriée les deux opérateurs prennent la forme:

$$H_0 = \begin{pmatrix} E_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & E_2 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad W = \begin{pmatrix} 0 & \Delta & E_0 & 0 & E_0 \\ \Delta & 0 & 0 & E_0 & 0 \\ E_0 & 0 & 0 & 0 & \Delta \\ 0 & E_0 & 0 & \Delta & 0 \\ E_0 & 0 & \Delta & 0 & 0 \end{pmatrix} . \quad (6.1)$$

1. Quelles sont les conditions à remplir pour pouvoir traiter \hat{W} comme une petite perturbation de \hat{H} ?
2. À l'aide de la théorie des perturbations, étudier les valeurs propres et les vecteurs propres du Hamiltonien $H = H_0 + W$.

6.4 Perturbation des états d'une particule confinée sur un cercle (facultatif)

On considère une particule de masse m libre de mouvement sur une région à une dimension de longueur L qui se replie sur elle-même. La résolution de l'équation de Schrödinger prenant en compte les conditions aux limites conduit aux états stationnaires de la particule :

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i2\pi n x/L} \quad \text{pour} \quad -L/2 < x < L/2 \quad (6.2)$$

où $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, avec pour énergies correspondantes :

$$E_n = \frac{2}{m} \left(\frac{n\pi\hbar}{L} \right)^2 . \quad (6.3)$$

1. Justifier les valeurs possibles de l'énergies à partir d'une condition sur la longueur d'onde de de Broglie λ_{DB} de la particule.

On suppose que le potentiel le long de la circonférence est déformé localement en $x = 0$ sur une dimension de l'ordre de $a \ll L$. Cet effet est modélisé en ajoutant au Hamiltonien le terme de perturbation :

$$H'(x) = -V_0 e^{-x^2/a^2}. \quad (6.4)$$

Dans la suite de l'exercice, on s'intéresse à l'effet de cette perturbation sur le niveau d'énergie E_n avec $n > 0$.

2. Quelle condition V_0 doit-il satisfaire pour qu'un traitement perturbatif soit possible?
3. Calculer les effets de la perturbation sur l'énergie de l'état fondamental.

L'équation (6.3) indique que ce niveau est dégénéré en énergie pour les états $|\psi_n\rangle$ et $|\psi_{-n}\rangle$ qui correspondent aux fonctions d'onde $\psi_n(x)$ et $\psi_{-n}(x)$ en représentation position. On considère les éléments de matrice suivants :

$$\langle \psi_n | \hat{H}' | \psi_n \rangle, \langle \psi_{-n} | \hat{H}' | \psi_{-n} \rangle, \langle \psi_{-n} | \hat{H}' | \psi_n \rangle.$$

4. Exprimer ces éléments de matrice sous forme intégrale en représentation position puis déterminer la valeur de chacun de ces trois paramètres. Pour simplifier le calcul des intégrales, on exploitera le fait que $a \ll L$ et on utilisera les expressions suivantes :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2/a^2} dx = a\sqrt{\pi} \quad \text{et} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2/a^2} e^{-i4\pi nx/L} dx = a\sqrt{\pi} e^{-(2\pi na/L)^2}.$$

5. En appliquant la théorie des perturbations sur le niveau d'énergie E_n , montrer que H' lève la dégénérescence entre les deux états ψ_n et ψ_{-n} . On appellera E_+ et E_- les nouvelles valeurs propres de l'énergie calculées à l'ordre un.
6. Déterminer les fonctions propres $\psi_+(x)$ et $\psi_-(x)$ associées.
7. Proposer un opérateur hermitien \hat{A} qui commute avec \hat{H} et \hat{H}' . Que peut-on en conclure par rapport aux fonctions $\psi_+(x)$ et $\psi_-(x)$ déterminées à la question précédente ?

Travaux Dirigés 7

Effet Stark sur l'atome d'hydrogène

On considère un atome d'hydrogène au repos placé dans un champ électrique $\vec{\mathcal{E}}$ constant, orienté suivant \vec{z} (on pose $\|\vec{\mathcal{E}}\| = \mathcal{E}$). On se propose de calculer les déplacements des deux premiers niveaux d'énergie induits par cette perturbation du système.

Rappels :

- En l'absence de $\vec{\mathcal{E}}$, les niveaux d'énergie sont donnés par

$$E_n = -\frac{E_I}{n^2} \quad , \quad \text{avec} \quad n \geq 1 \quad \text{et} \quad E_I \simeq 13.6 \text{ eV} .$$

- Le niveau n a une dégénérescence n^2 .
- Les états propres sont de la forme

$$\langle \vec{r} | nlm \rangle = R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \phi) \quad , \quad \text{avec} \quad l \leq n - 1$$

où les coordonnées r, θ, ϕ sont les coordonnées relatives électron-proton : $\vec{r} = \vec{r}_e - \vec{r}_p$.

Dans cet exercice, les expressions des harmoniques sphériques suivantes pourraient être utiles:

$$Y_1^{-1}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{-i\phi} ; \quad Y_1^0(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta ; \quad Y_1^{+1}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{+i\phi} .$$

7.1 Préliminaires

1. Donner l'expression de la perturbation $W = f(z, \mathcal{E}, q)$ où q est la charge électrique du proton.
2. En utilisant la loi de transformation des états propres sous l'action de l'opérateur parité P

$$P|nlm\rangle = (-1)^l |nlm\rangle$$

et en remarquant que $PWP^{-1} = -W$, établir la règle (dite de sélection)

$$\langle nlm | W | n'l'm' \rangle = 0 \quad , \quad \text{pour} \quad l + l' \text{ pair.}$$

3. Dédurre du commutateur $[L_z, z]$ la deuxième règle de sélection

$$\langle nlm|W|n'l'm'\rangle = 0 \quad , \quad \text{pour} \quad m \neq m'.$$

4. Exprimer W en coordonnées sphériques, puis comme combinaison linéaire d'harmoniques sphériques.
5. À partir de l'expression $Y_l^m \propto P_l^m(\cos\theta)e^{im\phi}$ retrouver la deuxième règle de sélection.

7.2 Traitement de l'état fondamental

1. Montrer que la correction au premier ordre de l'énergie du niveau fondamental est nulle. On va donc calculer la correction au deuxième ordre.
2. En utilisant les expressions explicites des harmoniques sphériques et leurs relations d'orthogonalité, montrer que:

$$\langle nlm|W|100\rangle = 0 \quad , \quad \text{pour} \quad l \neq 1$$

3. En partant de l'expression du terme correctif au deuxième ordre de l'énergie du fondamental $\delta^{(2)}E_1$, montrer que :

$$-\delta^{(2)}E_1 = \sum_{n>1} \sum_{l=0}^{n-1} \sum_{m=-l}^l \frac{|\langle nlm|W|100\rangle|^2}{E_I} \frac{n^2}{n^2-1}$$

et en utilisant la relation de fermeture $\sum_{nlm} |nlm\rangle\langle nlm| = \hat{1}$ ainsi que le résultat de la question 2 ci-dessus, établir

$$\delta < -\delta^{(2)}E_1 < \frac{4}{3}\delta \quad \text{avec} \quad \delta = \frac{1}{3E_I}(q\mathcal{E})^2\langle 100|r^2|100\rangle.$$

4. Calculer l'élément de matrice $\langle 100|r^2|100\rangle$ en utilisant:

$$\begin{aligned} R_{10}(r) &= 2r_0^{-\frac{3}{2}}e^{-\frac{r}{r_0}} \\ k! &= \int_0^\infty t^k e^{-t} dt \end{aligned}$$

où $r_0 \simeq 0.5 \text{ \AA}$ est le rayon de Bohr.

5. Application numérique: le champ appliqué est 10^4 V/cm . Comparer la valeur de δ à l'écart entre niveau fondamental et premier niveau excité en l'absence de champ.

7.3 Traitement du niveau $n = 2$

1. Rappeler le degré de dégénérescence de ce niveau.
2. Parmi les éléments de matrice $\langle 2lm|W|2l'm'\rangle$, quels sont ceux qui sont non nuls?
3. Calculer les déplacements d'énergie au premier ordre. On introduira $a = \langle 200|W|210\rangle$. Donner l'expression, à l'ordre zéro, des états perturbés.

4. A partir d'un schéma des énergies représentées en fonction \mathcal{E} , indiquer comment la transition entre premier et deuxième niveau d'énergie est modifiée.
5. Application à un cas concret: on appelle raie Lyman-alpha la raie spectrale de l'atome d'hydrogène associée à la transition entre $n = 2$ et $n = 1$. Quelle est la longueur d'onde associée? Comment celle-ci va-t-elle être modifiée si on applique un champ électrique constant et homogène sur la cellule contenant les atomes d'hydrogène?

L'effet Stark a de nombreuses applications aussi bien en physique atomique qu'en physique des solides. Les répartitions de charge dans certains matériaux tels que les puits quantiques à base de semi-conducteurs créent des champs électriques internes que l'on peut mesurer par effet Stark. C'est une des techniques qui a permis de mieux comprendre ces puits, de les modifier pour arriver à mettre au point la LED bleue, à base de nitrure de Gallium, un semiconducteur à grand gap. Cette LED bleue est venue compléter la longueur d'onde manquante dans le spectre du visible pour obtenir de la lumière blanche; l'éclairage utilisant des LEDs a maintenant envahi notre quotidien. La mise au point extrêmement difficile de la LED bleue a été récompensée par le prix Nobel de physique 2014.

www.nobelprize.org/uploads/2018/06/popular-physicsprize2014.pdf

Travaux Dirigés 8

Particules identiques

8.1 Deux particules et trois états

On considère deux particules (sans spin), chacune ayant des états dans un espace de Hilbert \mathcal{H} de dimension 3. On note $|a\rangle, |b\rangle, |c\rangle$, 3 états orthonormés constituant une base de \mathcal{H} . Quelle est la dimension de l'espace de Hilbert décrivant les états des deux particules si

1. Les deux particules sont discernables.
2. Les deux particules sont des bosons indiscernables.
3. Les deux particules sont des fermions indiscernables.

8.2 La vie sociale des fermions et bosons

On considère deux particules (1) et (2), chacune pouvant être dans deux états *orthogonaux* $|\psi_a\rangle$ et $|\psi_b\rangle$. On suppose que les deux particules ne sont pas dans le même état. On note $|\psi_{\text{dis}}\rangle = |\psi_a\rangle_1 \otimes |\psi_b\rangle_2$ l'état des deux particules lorsqu'elles sont discernables. On note \hat{x} l'opérateur position.

1. Exprimer $\langle \psi_{\text{dis}} | (\hat{x} \otimes \mathbb{1} - \mathbb{1} \otimes \hat{x})^2 | \psi_{\text{dis}} \rangle$ en fonction de $(\Delta \hat{x})_a$, $(\Delta \hat{x})_b$, et $(\langle \hat{x} \rangle_a - \langle \hat{x} \rangle_b)^2$, où on a défini $\langle \hat{x} \rangle_i = \langle \psi_i | \hat{x} | \psi_i \rangle$ et $(\Delta \hat{x})_i = \langle \psi_i | (\hat{x} - \langle \hat{x} \rangle_i)^2 | \psi_i \rangle$, avec $i = a, b$.
2. On suppose maintenant que les deux particules sont des bosons indiscernables. Déterminer l'expression de l'état $|\psi_{\text{bos}}\rangle$ du système des deux particules, puis comparer l'expression de $\langle \psi_{\text{bos}} | (\hat{x} \otimes \mathbb{1} - \mathbb{1} \otimes \hat{x})^2 | \psi_{\text{bos}} \rangle$ avec celle obtenue précédemment pour des particules discernables.
3. Même question lorsque les deux particules sont des fermions indiscernables.
4. Qu'en déduisez vous quant à la socialisation des bosons et des fermions?

8.3 Deux fermions en interaction dans un puits infini

On considère deux fermions de spin $\frac{1}{2}$ dans un puits de potentiel infini de longueur L .

1. Calculer les niveaux d'énergie et les fonctions d'onde correspondantes en représentation x pour une particule dans le puits infini à 1D, sans spin.
2. On considère deux particules de spin $\frac{1}{2}$ *sans interaction*. Quelles sont les fonctions d'onde possibles pour le système, et les énergies associées ?
3. On introduit une interaction entre les fermions, dont le potentiel associé s'écrit

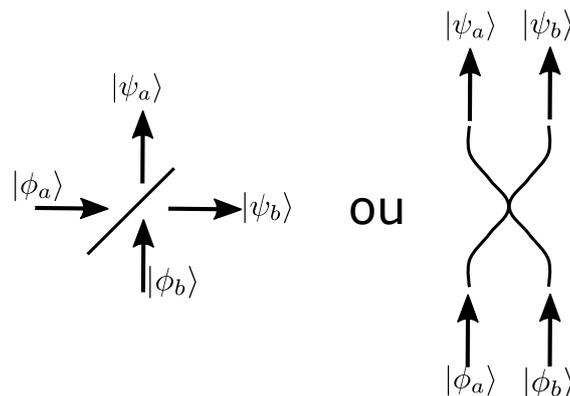
$$V(x_1 - x_2) = g\delta(x_1 - x_2) ,$$

g étant une constante et δ la distribution de Dirac. On traitera cette interaction comme une perturbation. Calculer au premier ordre en g le décalage des niveaux d'énergie.

Travaux Dirigés 9

Particules indiscernables et effet Hong-Ou-Mandel

9.1 Effet Hong-Ou-Mandel



On considère un dispositif séparateur 50/50 (par exemple une lame séparatrice) avec deux états d'entrée et deux états de sortie, comme représenté sur la figure. Le dispositif est dit 50/50, ou symétrique, si une particule incidente sur une des deux voies d'entrée a une probabilité $P = 0.5$ d'être détectée sur chacune des voies de sortie.

Le problème dit "Hong-Ou-Mandel" consiste à étudier le cas où deux particules identiques arrivent au même instant sur le dispositif, une sur chacune des deux entrées. On propose de calculer les probabilités que les particules sortent par la même sortie ou par des sorties différentes.

Les états d'entrée $|\phi\rangle$ appartiennent au sous-espace de Hilbert engendré par les deux états quantiques $\{|\phi_a\rangle, |\phi_b\rangle\}$ qui décrivent l'état de la particule dans les voies 1 et 2 d'entrée. Les états de sortie $|\psi\rangle$ appartiennent au sous-espace de Hilbert engendré par les deux états quantiques $\{|\psi_a\rangle, |\psi_b\rangle\}$ qui décrivent l'état de la particule dans les voies 1 et 2 de sortie.

L'action du séparateur est d'associer à un état $|\phi\rangle = \alpha|\phi_a\rangle + \beta|\phi_b\rangle$ d'entrée un état $|\psi\rangle = \alpha'|\psi_a\rangle + \beta'|\psi_b\rangle$ de sortie. Son action peut être représentée par la matrice U unitaire :

$$U = \begin{pmatrix} U_{aa} & U_{ab} \\ U_{ba} & U_{bb} \end{pmatrix},$$

telle que

$$\begin{pmatrix} \alpha' \\ \beta' \end{pmatrix} = U \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}.$$

On admet que dans les bases d'entrée $\{|\phi_a\rangle, |\phi_b\rangle\}$ et de sortie $\{|\psi_a\rangle, |\psi_b\rangle\}$, la matrice U a pour expression :

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix},$$

1. On considère deux particules incidentes *discernables*. La première particule est dans la voie 1, la seconde dans la voie 2. Calculer les probabilités des différentes configurations de sortie.
2. On considère maintenant que les particules sont des *bosons indiscernables*.
 - (a) Comment s'écrit la fonction d'onde en entrée du dispositif ?
 - (b) Calculer la probabilité de chaque configuration de sortie.
3. Reprendre le calcul précédent pour deux *fermions indiscernables*.

9.2 Photons et optique quantique

L'expérience décrite dans l'exercice précédent a été initialement effectuée dans le contexte de l'optique quantique, en envoyant des photons uniques sur une lame séparatrice. Nous allons maintenant discuter la même expérience avec le formalisme de l'optique quantique.

On suppose que l'on travaille dans ce qui suit avec des photons monochromatiques, qui occupent un seul mode d'entrée ou de sortie de la lame séparatrice. Pour modéliser cela, on introduit les opérateurs \hat{c}_a^\dagger et \hat{c}_b^\dagger qui créent un photon dans les modes d'entrée, et les opérateurs \hat{d}_a^\dagger et \hat{d}_b^\dagger pour les photons dans les modes de sortie.

1. Ecrire les relations de commutation canoniques pour les opérateurs c_α ci-dessus. Tout comme dans l'exercice précédent, on introduit l'opérateur unitaire suivant

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}, \quad (9.1)$$

qui relie les opérateurs d'entrée c_a^\dagger et c_b^\dagger aux opérateurs de sortie d_a^\dagger and d_b^\dagger par la relation:

$$\begin{pmatrix} d_a \\ d_b \end{pmatrix} = U \begin{pmatrix} c_a \\ c_b \end{pmatrix}. \quad (9.2)$$

2. Justifier les relations précédentes à partir des relations de passage en électromagnétisme classique pour une lame séparatrice et de l'expression de l'observable champ électrique dans le formalisme de l'optique quantique.
3. Calculer les relations de commutation canoniques pour les opérateurs \hat{d}_α . Commenter.
4. Montrer que le nombre de photons est conservé à travers la lame.
5. On suppose qu'on envoie exactement un photon dans chaque mode d'entrée. Ecrire l'état en sortie de la lame séparatrice. Comparer avec le résultat de l'exercice précédent.

Annexe A

Révisions du S1: Moment angulaire

A.1 Moment angulaire en mécanique quantique - partie 1

On considère un système de moment angulaire $\hat{\mathbf{J}}$ préparé dans l'état propre de $\hat{\mathbf{J}}^2$ et \hat{J}_z noté $|j, m\rangle$.

- (a) Rappeler quelles sont les valeurs propres associées pour $\hat{\mathbf{J}}^2$ et \hat{J}_z .
- (b) Calculer $\langle \hat{\mathbf{J}}^2 \rangle$, $\langle \hat{J}_x \rangle$, $\langle \hat{J}_y \rangle$, $\langle \hat{J}_z \rangle$, $\langle \hat{J}_x^2 \rangle$, $\langle \hat{J}_y^2 \rangle$, $\langle \hat{J}_z^2 \rangle$.
- (c) Calculer les écarts quadratiques moyens $\Delta \hat{J}_x$, $\Delta \hat{J}_y$, $\Delta \hat{J}_z$.

A.2 Moment angulaire en mécanique quantique - partie 2

On considère un système de moment angulaire $\hat{\mathbf{J}}$, préparé dans un état propre de $\hat{\mathbf{J}}^2$ associé à la valeur propre $2\hbar^2$.

- (a) Quelle est la dimension de l'espace des états accessible à ce système? Ecrire une base de cet espace sous la forme de vecteurs propres communs à $\hat{\mathbf{J}}^2$ et \hat{J}_z .
- (b) Ecrire la matrice des opérateurs $\hat{\mathbf{J}}^2$, \hat{J}_x , \hat{J}_y et \hat{J}_z dans cette base.
- (c) Ecrire, toujours dans cette base, les vecteurs propres communs à $\hat{\mathbf{J}}^2$ et \hat{J}_x .

A.3 Particule avec spin 1/2 (source: Basdevant-Dalibard)

On considère une particule de spin 1/2 dont on décrit l'état par:

$$|\psi\rangle = |\psi_+\rangle \otimes |+\rangle + |\psi_-\rangle \otimes |-\rangle \tag{A.1}$$

On appelle $\hat{\mathbf{S}}$ son observable de spin (dont les vecteurs propres de \hat{S}_z sont $|+\rangle$ et $|-\rangle$), et $\hat{\mathbf{L}}$ son moment cinétique orbital. On suppose que:

$$\langle \mathbf{r} | \psi_+ \rangle = \psi_+(\mathbf{r}, t) = W(r) \left[Y_0^0(\theta, \varphi) + Y_1^0(\theta, \varphi) / \sqrt{3} \right] \quad (\text{A.2})$$

$$\langle \mathbf{r} | \psi_- \rangle = \psi_-(\mathbf{r}, t) = W(r) \left[Y_1^1(\theta, \varphi) - Y_1^0(\theta, \varphi) / \sqrt{3} \right] \quad (\text{A.3})$$

- Quelle est la condition de normalisation sur $W(r)$?
- Quelles sont les probabilités de trouver $\pm\hbar/2$ lors de la mesure de \hat{S}_x et \hat{S}_z ?
- Quels sont les résultats possibles pour la mesure de \hat{L}_z , et avec quelles probabilités?
- On mesure d'abord \hat{L}^2 et ensuite \hat{S}_z . La première mesure donne 0. Quel résultat est-on certain d'obtenir pour la deuxième mesure? De même, on mesure d'abord \hat{S}_z et ensuite \hat{L}^2 . La première mesure donne $-\hbar/2$. Quel résultat est-on certain d'obtenir pour la deuxième mesure?

A.4 Spectre rotationnel de la molécule de CO

On considère le spectre de rotation de la molécule de monoxyde de carbone CO, représenté ci-dessous. Ce spectre a été obtenu en envoyant un signal électromagnétique de fréquence connue sur une cellule contenant une vapeur de CO, et en traçant la transmission du signal en fonction du nombre d'onde (exprimé en cm^{-1}).

- Comment interpréter les creux apparaissant sur ce signal?

On décrit les propriétés rotationnelles de la molécule par le Hamiltonien:

$$\hat{H} = \frac{\hat{L}^2}{2I} \quad (\text{A.4})$$

qui correspond à un rotateur rigide de moment d'inertie $I = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} a^2$, où le paramètre a est la distance entre les deux atomes. On note m_1 la masse de l'atome de carbone, avec $m_1 = 2 \times 10^{-26} \text{kg}$ et m_2 la masse de l'atome d'oxygène avec $m_2 = (4/3)m_1$.

- Sachant que les transitions entre les niveaux rotationnels ne peuvent avoir lieu qu'entre niveaux adjacents, déterminer la valeur de a en mesurant la séparation en fréquence $\Delta\nu$ entre deux raies adjacentes dans le spectre. On donnera le résultat en unité de 10^{-10}m .

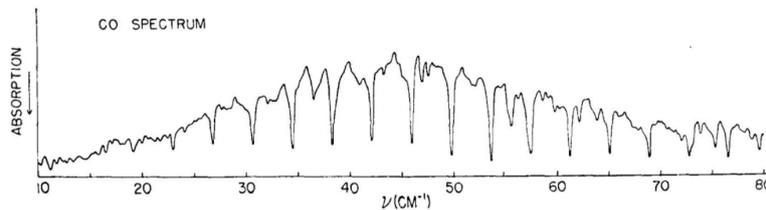


Figure A.1: Spectre de rotation de la molécule de monoxyde de carbone. La quantité ν sur l'axe des abscisses correspond à un nombre d'onde, avec $\nu = 1/\lambda$.

Annexe B

Extraits du partiel de 2020

B.1 Coefficients de Clebsch-Gordan

On considère l'addition de deux moments angulaires j_1 et j_2 correspondant aux opérateurs \hat{J}_1 et \hat{J}_2 . Pour une valeur donnée j du moment angulaire total avec $\hat{J} = \hat{J}_1 + \hat{J}_2$, les états propres $|j_1, j_2; j, m\rangle$ de la base couplée s'expriment en fonction des états propres $|j_1, m_1; j_2, m_2\rangle$ de la base découplée :

$$|j_1, j_2; j, m\rangle = \sum_{m_1, m_2} C_{j_1, m_1; j_2, m_2}^{j, m} |j_1, m_1; j_2, m_2\rangle \quad (\text{B.1})$$

où les facteurs $C_{j_1, m_1; j_2, m_2}^{j, m}$ de ce changement de base sont les coefficients de Clebsch-Gordan :

$$C_{j_1, m_1; j_2, m_2}^{j, m} = \langle j_1, m_1; j_2, m_2 | j_1, j_2; j, m \rangle. \quad (\text{B.2})$$

On rappelle que la base “couplée” $|j_1, j_2; j, m\rangle$ correspond aux états propres des opérateurs \hat{J}_1^2 , \hat{J}_2^2 , \hat{J}^2 et \hat{J}_z tandis que la base “découplée” $|j_1, m_1; j_2, m_2\rangle$ correspond aux états propres des opérateurs \hat{J}_1^2 , \hat{J}_2^2 , $\hat{J}_{z,1}$ et $\hat{J}_{z,2}$. Il existe une expression générale des coefficients de Clebsch-Gordan qui permet d'obtenir leur valeur dans des logiciels scientifiques. On a également coutume de les représenter sous la forme de tableaux. Par exemple, la figure B.1 montre un exemple de matrice de transformation qui relie les états de la base découplée vers les états de la base couplée du moment angulaire total, pour certaines valeurs de j_1 et j_2 .

En utilisant cette matrice, on peut ainsi exprimer les états correspondant à un moment angulaire total $j = \frac{3}{2}$ ayant été obtenu par l'addition de $j_1 = 1$ et $j_2 = \frac{1}{2}$, comme par exemple (figure B.2) :

$$\begin{aligned} |j_1 = 1, j_2 = \frac{1}{2}; j = \frac{3}{2}, m = -\frac{1}{2}\rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}} |j_1 = 1, m_1 = 0; j_2 = \frac{1}{2}, m_2 = -\frac{1}{2}\rangle \\ &+ \sqrt{\frac{1}{3}} |j_1 = 1, m_1 = -1; j_2 = \frac{1}{2}, m_2 = \frac{1}{2}\rangle. \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

- (1) On remarque qu'un coefficient $C_{j_1, m_1; j_2, m_2}^{j, m}$ ne peut être non-nul que si $m_1 + m_2 = m$. Justifier cette propriété.

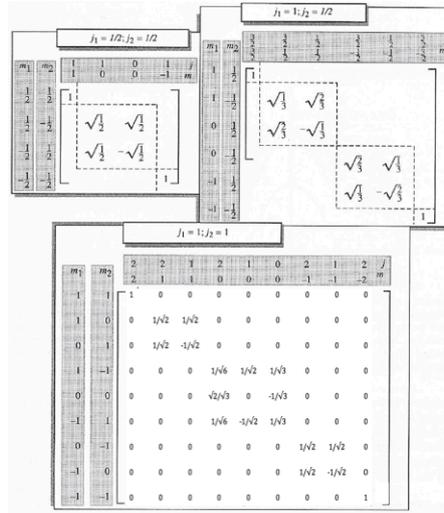


Figure B.1: Matrice des coefficients de Clebsch-Gordan. Seuls les éléments non-nuls de la matrice de transformation des états de la base découplée vers ceux de la base couplée sont représentés.

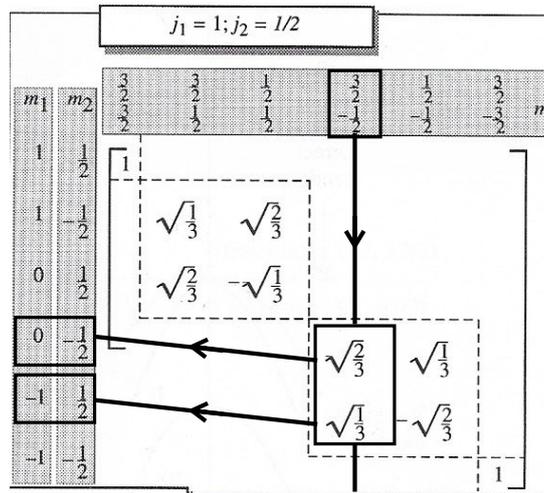


Figure B.2: Obtention de l'état $|j_1 = 1, j_2 = \frac{1}{2}; j = \frac{3}{2}, m = -\frac{1}{2}\rangle$ à partir des états de la base découplée, dans le cas de l'addition de deux moments angulaires $j_1 = 1$ et $j_2 = \frac{1}{2}$.

- (2) On remarque que dans chacune de ces matrices, les deux coefficients diagonaux extrêmes sont systématiquement égaux à l'unité. Justifier cette propriété.
- (3) On considère une boîte contenant deux gyroscopes n°1 et n°2 de moment angulaire individuel $j_1 = j_2 = 1$. Le moment angulaire total est $j = 2, m = 1$. À l'aide de la figure B.1, déterminer les probabilités d'obtenir les valeurs respectives $m_1 = +1, m_1 = -1$ et $m_1 = 0$ pour une mesure de $\hat{J}_{z,1}$ effectuée sur le gyroscope n°1.

B.2 Théorie des perturbations et atome d'hydrogène

La théorie de Schrödinger de l'atome d'hydrogène fut l'un des premiers succès de la mécanique quantique. En négligeant le spin de l'électron et en supposant que le proton possède une masse infinie et qu'il est situé au point $\vec{r} = \vec{0}$, elle prédit les niveaux d'énergie suivant :

$$E_n = -\frac{E_I}{n^2}, \quad n > 0, \quad (\text{B.4})$$

où $E_I = 13.6 \text{ eV}$ est appelée *énergie d'ionisation* (l'origine des énergies correspond ici au cas où l'électron est infiniment éloigné du proton).

Les états stationnaires de l'électron sont distingués par trois nombres quantiques, n , l et m et les fonctions d'onde associées peuvent s'écrire de la façon suivante :

$$\Psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r)Y_l^m(\theta, \phi), \quad (\text{B.5})$$

où $Y_l^m(\theta, \phi)$ est une harmonique sphérique. L'énergie ne dépend que du nombre quantique principal n ; les deux autres nombres quantiques, l et m , sont associés au moment angulaire orbital, plus précisément aux opérateurs \hat{L}^2 et \hat{L}_z , respectivement.

Chaque niveau d'énergie n , est dégénéré n^2 fois car le nombre quantique l prend les valeurs entières de 0 à $n - 1$ et à chaque l correspond $2l + 1$ valeurs du nombre quantique m . Par exemple, l'état fondamental $n = 1$ n'est pas dégénéré, alors qu'à l'énergie $n = 2$ correspond l'état $l = 0, m = 0$ ainsi que les trois états $l = 1$ avec $m = -1, 0, 1$. Ce qui fait bien une dégénérescence d'ordre 4. La figure B.3 ci-dessous résume les propriétés essentielles des niveaux d'énergie de l'atome d'hydrogène.

Le but de cet exercice est de calculer l'effet d'une faible perturbation sur les niveaux d'énergie plus bas de l'atome d'hydrogène.

(1) État fondamental de l'atome

On considère une perturbation par un potentiel central $\lambda V(r)$.

- À l'aide de la théorie des perturbations, donner l'expression de la correction à l'énergie du niveau $n = 1$, au premier ordre en fonction du paramètre λ . On exprimera cette correction en fonction d'une intégrale sur r .
- À l'aide de la théorie des perturbations, donner l'expression de la correction à l'énergie du niveau $n = 1$, au second ordre en λ . On identifiera l'ensemble des états qui ne contribuent pas à cette correction.

(2) Potentiel central : un exemple

Un exemple d'une correction au Hamiltonien de l'atome d'hydrogène est le terme dit de *Darwin* qui provient de la prise en compte d'effets relativistes :

$$V(r) = E_I \alpha^2 \pi \frac{a_0^3}{4\pi r^2} \delta(r).$$

où a_0 est le *rayon de Bohr*, égal approximativement à $a_0 \simeq 5 \cdot 10^{-11} \text{ m}$, et où α est la constante de structure fine dont la valeur approchée est $\alpha \simeq 1/137$.

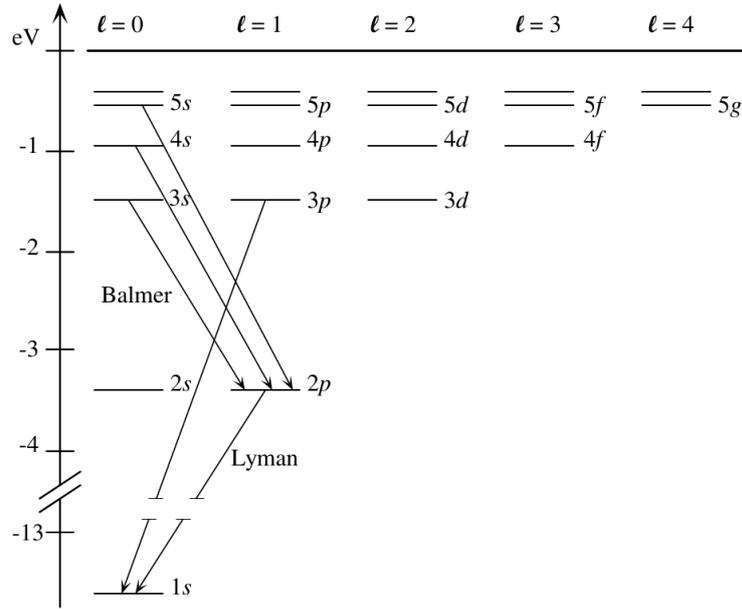


Figure B.3: Structure des niveaux d'énergie de l'atome d'hydrogène.

Pour répondre aux questions qui suivent, les données suivantes peuvent être utiles :

$$R_{nl}(r) \sim \left(\frac{r}{a_0}\right)^l e^{-r/(na_0)} \text{ pour } \frac{r}{a_0} \rightarrow 0 \quad \text{et} \quad R_{n0}(r=0) = \sqrt{\frac{4}{a_0^3 n^3}}.$$

- Calculer la correction de l'énergie du niveau $n = 1$, au premier ordre de perturbation. Justifier *a posteriori* que l'utilisation de l'approche perturbative est raisonnable.
- Calculer les énergies des sous-niveaux issus de la levée de la dégénérescence du niveau $n = 2$, au premier ordre de perturbation.
- Calculer les énergies des sous-niveaux issus de la levée de la dégénérescence de chacun des niveaux $n > 2$, au premier ordre de perturbation.

Annexe C

Sujet examen Mai 2022

C.1 Deux particules identiques avec spin dans une boîte

On étudie quelques propriétés de deux particules identiques de spin $1/2$ qui évoluent en une dimension dans un puits de potentiel infini de largeur L . Les particules n'interagissent pas et leur dynamique quantique est alors décrite par le Hamiltonien suivant:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m} + V(\hat{x}_1) + \frac{\hat{p}_2^2}{2m} + V(\hat{x}_2), \quad \text{avec } V(x) = \begin{cases} 0 & \text{pour } 0 < x < L; \\ +\infty & \text{sinon.} \end{cases} \quad (\text{C.1})$$

Le Hamiltonien ne dépend pas du spin des particules. Par contre, il apparaîtra plus tard et on utilisera les notations usuelles suivantes: \hat{S}_1^α représente la projection du spin de la première particule selon le vecteur unitaire \vec{e}_α ($\alpha = x, y, z$) et on adopte la notation similaire \hat{S}_2^α pour la deuxième particule. La projection selon \vec{e}_α du spin total du système est noté $\hat{S}^\alpha = \hat{S}_1^\alpha + \hat{S}_2^\alpha$ et on utilisera également la notation $\hat{S}^2 = (\hat{S}^x)^2 + (\hat{S}^y)^2 + (\hat{S}^z)^2$.

1. Ces particules sont-elles des bosons ou des fermions? Quelle est alors la propriété que doit satisfaire tout état quantique $|\Psi\rangle$ pour le système formé par les deux particules?
2. On rappelle que les niveaux d'énergie d'une unique particule sans spin, dont le Hamiltonien est $\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$, sont non dégénérés et sont donnés par $E_n = (\hbar^2 \pi^2 n^2)/(2mL^2)$ où n est un entier tel que $n \geq 1$. L'état quantique correspondant est noté $|\psi_n\rangle$. A partir de ces résultats, déterminer les niveaux d'énergie du Hamiltonien \hat{H} pour le système des deux particules défini par (C.1).
3. Donner la forme des états quantiques (notés génériquement $|\Psi\rangle$) associés à chaque niveau d'énergie du système couplé en fonction des états quantiques $|\psi_n\rangle$ d'une particule unique et en fonction du spin des particules. On pensera à construire $|\Psi\rangle$ à partir d'une expression de produit tensoriel. On utilisera également la notation habituelle $|\uparrow\rangle$ et $|\downarrow\rangle$, base d'états propres de \hat{S}_i^z (avec $i = 1, 2$), pour décrire les états de spin de chaque particule.
4. Le système est alors préparé dans un état $|\Psi\rangle$ tel que:

$$\hat{H}|\Psi\rangle = 5 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} |\Psi\rangle; \quad \hat{S}^z |\Psi\rangle = 0. \quad (\text{C.2})$$

Déterminer deux états orthonormés $|\Psi_0\rangle$ et $|\Psi_1\rangle$ qui satisfont ces conditions et qui sont, en outre, des états propres de \hat{S}^2 .

5. Un dispositif expérimental permet de préparer le système dans un des deux états $|\Psi_0\rangle$ ou $|\Psi_1\rangle$ de façon aléatoire. On voudrait alors savoir dans quel état se trouve le système par une mesure de son spin total. Peut-on distinguer ces deux états par une mesure de \hat{S}^z ?
6. On se propose de distinguer les deux états par une mesure de \hat{S}^x . Quelles sont les valeurs possibles de la mesure de \hat{S}^x pour chacun des deux états $|\Psi_0\rangle$ et $|\Psi_1\rangle$, et avec quelles probabilité on les obtiendrait? Est-ce que mesurer \hat{S}^x permet effectivement de distinguer les deux états?

Indications. Pour répondre à cette question, il sera utile d'utiliser les relations suivantes (sans devoir les prouver):

$$\hat{S}^x|1\rangle_{\pm} = \pm\hbar|1\rangle_{\pm}, \quad |1\rangle_{\pm} = \frac{1}{2} [|\uparrow\uparrow\rangle \pm |\uparrow\downarrow\rangle \pm |\downarrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\rangle], \quad (\text{C.3})$$

$$\hat{S}^x|0\rangle_{\pm} = 0, \quad |0\rangle_{\pm} = \frac{1}{2} [|\uparrow\uparrow\rangle \pm |\uparrow\downarrow\rangle \mp |\downarrow\uparrow\rangle - |\downarrow\downarrow\rangle]. \quad (\text{C.4})$$

7. **Bonus.** Prouver les relations précédentes (C.3) et (C.4). Vous pouvez utiliser les expressions explicites suivantes pour les états propres de l'opérateur de spin d'une unique particule S_i^x (i indique la particule et peut prendre les valeurs 1 ou 2):

$$\hat{S}_i^x \frac{|\uparrow\rangle \pm |\downarrow\rangle}{\sqrt{2}} = \pm \frac{\hbar}{2} \times \frac{|\uparrow\rangle \pm |\downarrow\rangle}{\sqrt{2}} \quad (\text{C.5})$$

où $|\uparrow\rangle$ et $|\downarrow\rangle$ ont été définis à la question 3.

C.2 Oscillateur harmonique en dimension trois

Dans cet exercice, on considère une particule sans spin de masse m qui évolue dans l'espace tri-dimensionnel et qui est sujette à un potentiel harmonique de la forme,

$$V_0(x, y, z) = \frac{1}{2}m\omega^2 (x^2 + y^2 + z^2), \quad (\text{C.6})$$

où ω est une pulsation constante. Le Hamiltonien du système prend alors la forme suivante:

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V_0(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}), \quad \hat{p}^2 = \hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2. \quad (\text{C.7})$$

Les états quantiques de la particule sont des vecteurs de l'espace de Hilbert $\mathcal{H} = \mathcal{H}_x \otimes \mathcal{H}_y \otimes \mathcal{H}_z$ défini comme le produit tensoriel des trois espaces de Hilbert associés à des oscillateurs harmoniques uni-dimensionnels dans chacune des trois directions.

C.2.1 Propriétés de l'état fondamental

1. En utilisant les propriétés bien connues de l'oscillateur harmonique quantique uni-dimensionnel, donner l'énergie du niveau fondamental de \hat{H}_0 . Quelle est sa dégénérescence?
2. Etant donné un état sous la forme $|\psi\rangle = |\psi_x\rangle \otimes |\psi_y\rangle \otimes |\psi_z\rangle$, on rappelle que sa représentation en terme de fonction d'onde est :

$$\psi(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \psi \rangle = \langle x | \psi_x \rangle \langle y | \psi_y \rangle \langle z | \psi_z \rangle = \psi_x(x) \times \psi_y(y) \times \psi_z(z). \quad (\text{C.8})$$

Ecrire alors la fonction d'onde normalisée explicite pour l'état fondamental de l'oscillateur harmonique tri-dimensionnel que l'on notera ψ_{GS} .

3. Montrer alors que l'expression de ψ_{GS} en coordonnées sphériques peut s'écrire sous la forme,

$$\psi_{GS}(r, \theta, \phi) = R_{GS}(r) \times Y_{l,m}(\theta, \phi), \quad (\text{C.9})$$

pour un couple (l, m) associé à l'harmonique sphérique $Y_{l,m}(\theta, \phi)$. On s'aidera du formulaire en annexe pour identifier (l, m) et écrire l'expression de la partie radiale $R_{GS}(r)$.

4. On introduit maintenant l'opérateur de moment orbital $\vec{L} = \vec{r} \wedge \vec{p}$. Rappeler sans preuve l'expression des valeurs propres possibles pour \hat{L}^2 et \hat{L}_z .
5. Écrire l'action des opérateurs \hat{L}^2 et \hat{L}_z sur l'état fondamental.
Il est possible de répondre à cette question en évitant de lourds calculs.
6. En déduire les actions de \hat{L}_x et de \hat{L}_y sur l'état fondamental. On évitera de trop lourds calculs.

C.2.2 Effet d'un champ magnétique sur l'état fondamental

7. Dans ce qui suit, on suppose que la particule a une charge q , ce qui lui confère un rapport gyromagnétique $\gamma = q/(2m)$ et un moment magnétique orbital $\vec{\mu} = \gamma \vec{L}$. Quel est alors l'expression du Hamiltonien d'interaction \hat{W} qui décrit le couplage de la particule à un champ magnétique extérieur \vec{B} (on se limitera au terme linéaire en \vec{B})? Ecrire \hat{W} dans le cas où $\vec{B} = B_0 \vec{e}_z$.
8. On suppose B_0 suffisamment "faible" pour que \hat{W} puisse être traité de façon perturbative. Calculer alors à l'ordre 1 de la théorie des perturbations le décalage sur le niveau fondamental.
9. Calculer le décalage induit par \hat{W} jusqu'à l'ordre 2 de la théorie des perturbations.

C.2.3 Effet d'un champ magnétique sur les premiers états excités

10. Déterminer l'énergie E_1 des premiers états excités de l'oscillateur tri-dimensionnel décrit par l'équation (C.7) et montrer que ce niveau d'énergie est dégénéré trois fois. Donner une base de fonctions d'onde orthonormées pour le sous-espace d'énergie E_1 .
11. Montrer que $V_0(x, y, z)$ est un potentiel central. Sans faire aucun calcul, expliquer alors pourquoi les trois états d'énergie E_1 sont les états propres de l'opérateur \hat{L}^2 avec la même valeur propre que l'on donnera.
12. On s'intéresse maintenant à l'effet de la perturbation \hat{W} sur le niveau d'énergie E_1 . Pour cela, il est intéressant d'introduire les opérateurs de création et d'annihilation pour l'oscillateur harmonique:

$$\hat{a}_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\hat{x}}{\ell_{\text{HO}}} + i \frac{\ell_{\text{HO}}}{\hbar} \hat{p}_x \right), \quad \hat{a}_y = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\hat{y}}{\ell_{\text{HO}}} + i \frac{\ell_{\text{HO}}}{\hbar} \hat{p}_y \right), \quad (\text{C.10})$$

où ℓ_{HO} est donnée en annexe. Montrer alors que $\hat{L}_z = i\hbar (\hat{a}_x \hat{a}_y^\dagger - \hat{a}_y \hat{a}_x^\dagger)$.

13. Il existe un état d'énergie E_1 que l'on note $|\psi_2\rangle$ dont la fonction d'onde est proportionnelle à z et peut s'écrire sous la forme

$$\psi_2(r, \theta, \phi) = R_2(r) \times Y_{l,m=0}(\theta, \phi). \quad (\text{C.11})$$

Trouver cet état et écrire sa fonction d'onde explicitement en identifiant l'harmonique sphérique appropriée et en donnant l'expression explicite de $R_2(r)$.

14. Déterminer l'effet de la perturbation \hat{W} sur le niveau d'énergie E_1 à l'ordre 1 de la théorie des perturbations. Discuter en particulier les valeurs propres et les vecteurs propres de $\hat{H}_0 + \hat{W}$ à l'ordre 1 en B_0 .

C.2.4 Une perturbation additionnelle

Dans cette partie (indépendante de la précédente), la particule est maintenant soumise à l'action d'un potentiel extérieur $V_1(\vec{r})$, supposé "faible", dont l'expression en coordonnées sphériques prend la forme suivante:

$$V_1(r, \theta, \phi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l U_{l,m}(r) Y_{l,m}(\theta, \phi), \quad (\text{C.12})$$

où $U_{l,m}(r)$ sont des fonctions de r seulement.

15. En supposant que V_1 est une perturbation faible, calculer le décalage induit sur le niveau d'énergie fondamental à l'ordre 1 de la théorie des perturbations.

C.3 Un oscillateur harmonique dépendant du temps

Dans cet exercice, on considère un oscillateur "harmonique" uni-dimensionnel dont le Hamiltonien dépend explicitement du temps de la façon suivante:

$$\hat{H}(t) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega(t)^2\hat{x}^2, \quad (\text{C.13})$$

où la pulsation est une fonction du temps telle que, pour $t \geq 0$,

$$\omega(t) = \omega_0 + \delta \times \omega_1(t), \quad \delta \ll 1. \quad (\text{C.14})$$

A l'instant initial $t = 0$, le système se trouve dans l'état fondamental, noté $|0\rangle$, de l'oscillateur harmonique de pulsation ω_0 .

1. On commence par développer le Hamiltonien en puissance de δ et on l'écrit alors sous la forme $\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \delta\hat{H}_1(t) + \delta^2\hat{H}_2(t)$. Déterminer explicitement \hat{H}_0 et chacun des termes $\hat{H}_m(t)$ pour $m = 1, 2$.
2. On tronque le développement précédent à l'ordre 1 en δ et on suppose que $\hat{H}(t) \simeq \hat{H}_0 + \delta\hat{H}_1(t)$. En utilisant les résultats de la théorie des perturbations dépendantes du temps (à l'ordre le plus faible en δ), donner l'expression de la probabilité $P_{0 \rightarrow n}(t)$ de mesurer le système dans l'état $|n\rangle$ ($n > 0$) de l'oscillateur harmonique de pulsation ω_0 à l'instant t .
3. On suppose alors que $\omega_1(t) = \omega_1 \times \sin(\Omega t)$ où ω_1 et Ω sont des pulsations constantes. Donner les conditions sur δ , ω_1 et Ω pour que le traitement perturbatif soit valable aussi à des temps longs.
4. Expliquer pourquoi prendre $\Omega = 2\omega_0$ maximise la probabilité $P_{0 \rightarrow 2}(t)$ de transition jusqu'au niveau d'énergie $n = 2$. La théorie des perturbations est-elle valable dans ce cas?
5. Bonus. Proposer un modèle qui décrit un système à deux niveaux dont on peut déterminer les amplitudes de transition de façon exacte et qui modélise la transition précédente de $n = 0$ à $n = 2$ pour $\Omega = 2\omega_0$. Présenter succinctement la solution et les résultats principaux.

Quelques formules utiles

Oscillateur harmonique

L'oscillateur harmonique uni-dimensionnel de masse m et impulsion ω est caractérisé par une échelle de longueur $\ell_{HO} = \sqrt{\hbar/(m\omega)}$ et une échelle d'impulsion $p_{HO} = \sqrt{\hbar m\omega}$.

Les opérateurs de création et d'annihilation sont très utiles pour déterminer les niveaux d'énergie et leurs actions sont données par:

$$a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle, \quad a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle. \quad (\text{C.15})$$

Les relations entre les opérateurs $(\hat{a}, \hat{a}^\dagger)$ d'une part et (\hat{x}, \hat{p}) d'autre part sont:

$$\hat{x} = \frac{\ell_{HO}}{\sqrt{2}}(a + a^\dagger), \quad \hat{p} = -i\frac{p_{HO}}{\sqrt{2}}(a - a^\dagger). \quad (\text{C.16})$$

Finalement, les fonctions d'onde normalisées pour les premiers niveaux d'énergie sont:

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{x^2}{2\ell_{HO}^2}}, \quad \psi_1(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{\sqrt{2}x}{\ell_{HO}} e^{-\frac{x^2}{2\ell_{HO}^2}}. \quad (\text{C.17})$$

Harmoniques sphériques

Voici une liste de quelques harmoniques sphériques $Y_{l,m}(\theta, \phi)$:

$$Y_{0,0}(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad Y_{1,\pm 1}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin(\theta) e^{\pm i\phi}, \quad Y_{1,0}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos(\theta), \quad (\text{C.18a})$$

$$Y_{2,\pm 2}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2(\theta) e^{\pm i2\phi}, \quad Y_{2,\pm 1}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin(\theta) \cos(\theta) e^{\pm i\phi}, \quad (\text{C.18b})$$

$$Y_{2,0}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2(\theta) - 1). \quad (\text{C.18c})$$