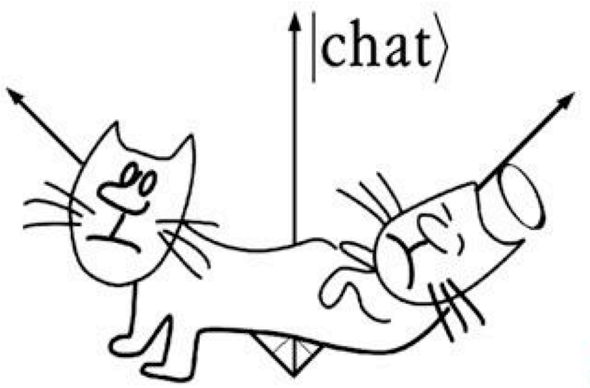
Université de Cergy-Pontoise
S6 - P
Physique Quantique II

Travaux dirigés



2013/2014

Université de Cergy-Pontoise
Physique quantique II
S6 - P - 2013-2014
C. Pinettes

Plan du cours de physique quantique II

I. Les principes de la mécanique quantique

Expérience de Stern et Gerlach. Notion d'opérateur. Formalisme de Dirac. Postulats de la mécanique quantique. Illustration des postulats. Valeur moyenne d'une observable. Evolution dans le temps. Représentation $\{\vec{r}\}$.

II. L'oscillateur harmonique

Introduction. Résolution par la méthode de Dirac. Oscillateur harmonique 3d.

III. Théorie du moment cinétique

Définition du moment cinétique $\vec{J}$. Etats propres de $\vec{J}$. Moment cinétique orbital $\vec{L}$. Moment cinétique de spin $\vec{S}$. Description complète d'une particule. Magnétisme.

IV. Atome d'hydrogène

Systèmes à 2 corps dans un potentiel central. Etats liés de l'atome d'hydrogène. Systèmes hydrogénoïdes. Classification du tableau périodique. Notion de liaison chimique.

Site web du cours : `http ://cpinettes.u-cergy.fr/S6-MecaQ`
Vous y trouverez des documents utiles pour le cours, des annales et des suppléments (liens vers des cours en ligne, des vidéos, des exposés et des articles de vulgarisation ...).

Université de Cergy-Pontoise
Physique quantique II
S6 - P

Ouvrages de mécanique quantique recommandés

En français

Il existe d'excellents ouvrages de mécanique quantique en français.

Niveau Licence, je recommande dans l'ordre :

- *J-L. Basdevant, J. Dalibard : Mécanique quantique, Editions de l'Ecole Polytechnique (2002)*

Excellent livre, clair et concis. De nombreuses applications concrètes et récentes et des exos corrigés.

- *C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloë : Mécanique quantique (2 tomes), Hermann (1977)*

La référence niveau Licence-Master 1. Très complet (1500 pages). Insiste sur le formalisme, explications et calculs détaillés. De nombreux compléments développant des exemples physiques concrets.

- *J-L. Basdevant : 12 leçons de mécanique quantique, Vuibert (2006)*

Excellent livre pour comprendre la mécanique quantique. Très proche de la 1ère référence, il insiste davantage sur les concepts physiques et laisse les développements mathématiques de côté. Agréable à lire, raconte en même temps la génèse historique de la mécanique quantique.

- *C. Aslangul : Mécanique quantique (3 tomes), De Boeck (2010)*

Cours récent et très complet. Commence par une longue partie sur les expériences historiques.

- *C. Ngo, H. Ngo : Physique quantique : introduction, Dunod (1991)*

Livre d'enseignement clair et standard.

- *M. Le Bellac : Physique quantique, EDP Sciences/CNRS Editions (2007)*

Approche originale. Aborde les développements de la mécanique quantique les plus récents. Développements mathématiques poussés.

- *A. Messiah : Mécanique quantique (2 tomes), Dunod (1968)*

La référence historique. Dense, un peu difficile pour une première approche.

En anglais

- *D. Griffiths : Introduction to Quantum Mechanics (2nd edition), Pearson (2005)*

- *B. Bransden, C. Joachain : Quantum Mechanics, Pearson (2000)*

Compléments indispensables en mathématiques

- *Transformées de Fourier* : Appendice I, tome 2 du *Cohen-Tannoudji*.

- *"Fonctions" δ de Dirac* : Appendice II, tome 2 du *Cohen-Tannoudji*.

- *Espaces de Hibert* : Annexe A du cours en ligne de *Mila* ; chapitres 2 (dimension finie) et 7 (dimension infinie) du *Le Bellac*.

FORMULAIRE DE MECANIQUE QUANTIQUE

Oscillateur harmonique

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\ X + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\ P_X \qquad a^+|\varphi_n\rangle = \sqrt{n+1}\ |\varphi_{n+1}\rangle \qquad [a, a^+] = I$$

$$a^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\ X - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\ P_X \qquad a|\varphi_n\rangle = \sqrt{n}\ |\varphi_{n-1}\rangle$$

Moment cinétique

$$J^2\ |j,m\rangle = j(j+1)\hbar^2\ |j,m\rangle \qquad J_\pm = J_x \pm iJ_y$$

$$J_z\ |j,m\rangle = m\hbar\ |j,m\rangle \qquad J_\pm|j,m\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1)-m(m\pm 1)}\ |j,m\pm 1\rangle$$

Premiers harmoniques sphériques

$$Y_0^0(\theta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \ ;\ Y_1^0(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta \ ;\ Y_1^{\pm1}(\theta,\varphi) = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\ e^{\pm i\varphi}$$

$$Y_2^0(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\cos^2\theta - 1) \ ;\ Y_2^{\pm1}(\theta,\varphi) = \mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta\ e^{\pm i\varphi} \ ;\ Y_2^{\pm2}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\theta\ e^{\pm 2i\varphi}$$

$$Y_3^0(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{7}{16\pi}}(5\cos^3\theta - 3\cos\theta) \ ;\ Y_3^{\pm1}(\theta,\varphi) = \mp\sqrt{\frac{21}{64\pi}}\sin\theta(5\cos^2\theta - 1)\ e^{\pm i\varphi}$$

$$Y_3^{\pm2}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{105}{32\pi}}\sin^2\theta\cos\theta\ e^{\pm 2i\varphi} \ ;\ Y_3^{\pm3}(\theta,\varphi) = \mp\sqrt{\frac{35}{64\pi}}\sin^3\theta\ e^{\pm 3i\varphi}$$

Atome d'hydrogène

Rayon de Bohr : $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0}{e^2}\frac{\hbar^2}{\mu} \simeq 0,529$ Å

Energie d'ionisation : $E_I = \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \frac{\mu}{2\hbar^2} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\ \frac{1}{2a_0} \simeq 13,6\ eV$

Premières fonctions radiales de l'atome d'hydrogène

$$R_{1,0}(r) = \frac{2}{a_0^{3/2}}\ e^{-r/a_0} \quad ; \quad R_{2,0}(r) = \frac{2}{(2a_0)^{3/2}}\ \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right)\ e^{-r/2a_0} \quad ; \quad R_{2,1}(r) = \frac{1}{\sqrt{3}}\frac{1}{(2a_0)^{3/2}}\ \ \frac{r}{a_0}\ e^{-r/2a_0}$$

$$R_{3,0}(r) = \frac{2}{(3a_0)^{3/2}}\ \left(1 - \frac{2r}{3a_0} + \frac{2r^2}{27a_0^2}\right)\ e^{-r/3a_0} \quad ; \quad R_{3,1}(r) = \frac{4\sqrt{2}}{9}\frac{1}{(3a_0)^{3/2}}\ \left(1 - \frac{r}{6a_0}\right)\ \frac{r}{a_0}\ e^{-r/3a_0}$$

$$R_{3,2}(r) = \frac{4}{27\sqrt{10}}\frac{1}{(3a_0)^{3/2}}\ \left(\frac{r}{a_0}\right)^2\ e^{-r/3a_0}$$

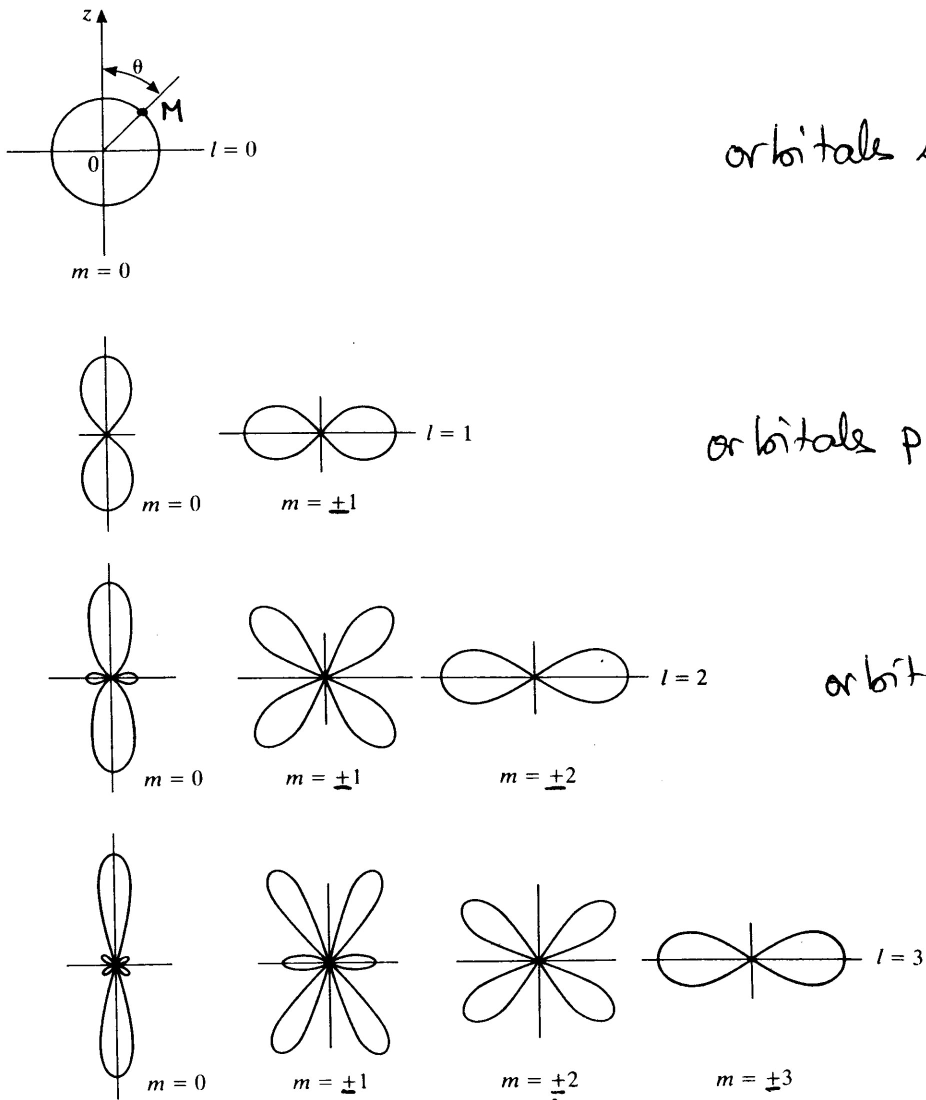
Intégrales gaussiennes

$$I_p = \int_0^{+\infty}\ x^p\ e^{-ax^2}\ dx\ :\ I_0 = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{a}},\ I_1 = \frac{1}{2a},\ I_2 = \frac{1}{4a}\sqrt{\frac{\pi}{a}},\ I_3 = \frac{1}{2a^2}\ ...$$

Les harmoniques sphériques

Table 6.1 Low-order spherical harmonics

l	m	*Spherical harmonic* $Y_{lm}(\theta,\phi)$
0	0	$Y_{0,0}=\dfrac{1}{(4\pi)^{1/2}}$
1	0	$Y_{1,0}=\left(\dfrac{3}{4\pi}\right)^{1/2}\cos\theta$
	±1	$Y_{1,\pm1}=\mp\left(\dfrac{3}{8\pi}\right)^{1/2}\sin\theta\, e^{\pm i\phi}$
2	0	$Y_{2,0}=\left(\dfrac{5}{16\pi}\right)^{1/2}(3\cos^2\theta-1)$
	±1	$Y_{2,\pm1}=\mp\left(\dfrac{15}{8\pi}\right)^{1/2}\sin\theta\cos\theta\, e^{\pm i\phi}$
	±2	$Y_{2,\pm2}=\left(\dfrac{15}{32\pi}\right)^{1/2}\sin^2\theta\, e^{\pm 2i\phi}$
3	0	$Y_{3,0}=\left(\dfrac{7}{16\pi}\right)^{1/2}(5\cos^3\theta-3\cos\theta)$
	±1	$Y_{3,\pm1}=\mp\left(\dfrac{21}{64\pi}\right)^{1/2}\sin\theta(5\cos^2\theta-1)e^{\pm i\phi}$
	±2	$Y_{3,\pm2}=\left(\dfrac{105}{32\pi}\right)^{1/2}\sin^2\theta\cos\theta\, e^{\pm 2i\phi}$
	±3	$Y_{3,\pm3}=\mp\left(\dfrac{35}{64\pi}\right)^{1/2}\sin^3\theta\, e^{\pm 3i\phi}$



orbitales s ($l=0$)

orbitale p ($l=1$)

orbitales d ($l=2$)

orbitales f ($l=3$)

6.2 Polar plots of the probability distributions $|Y_{lm}(\theta,\phi)|^2 = OM$.

Source : "Introduction to quantum mechanics"
Bransden and Joachain, p266-267

Fonction radials de l'atome d'hydrogène

$$H = \frac{p^2}{2\mu} - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

états propre :

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r)\, Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

The first few radial eigenfunctions are given by

$$R_{10}(r) = 2(Z/a_\mu)^{3/2} \exp(-Zr/a_\mu)$$

$$R_{20}(r) = 2(Z/2a_\mu)^{3/2}(1 - Zr/2a_\mu)\exp(-Zr/2a_\mu)$$

$$R_{21}(r) = \frac{1}{\sqrt{3}}(Z/2a_\mu)^{3/2}(Zr/a_\mu)\exp(-Zr/2a_\mu)$$

$$R_{30}(r) = 2(Z/3a_\mu)^{3/2}(1 - 2Zr/3a_\mu + 2Z^2r^2/27a_\mu^2)\exp(-Zr/3a_\mu)$$

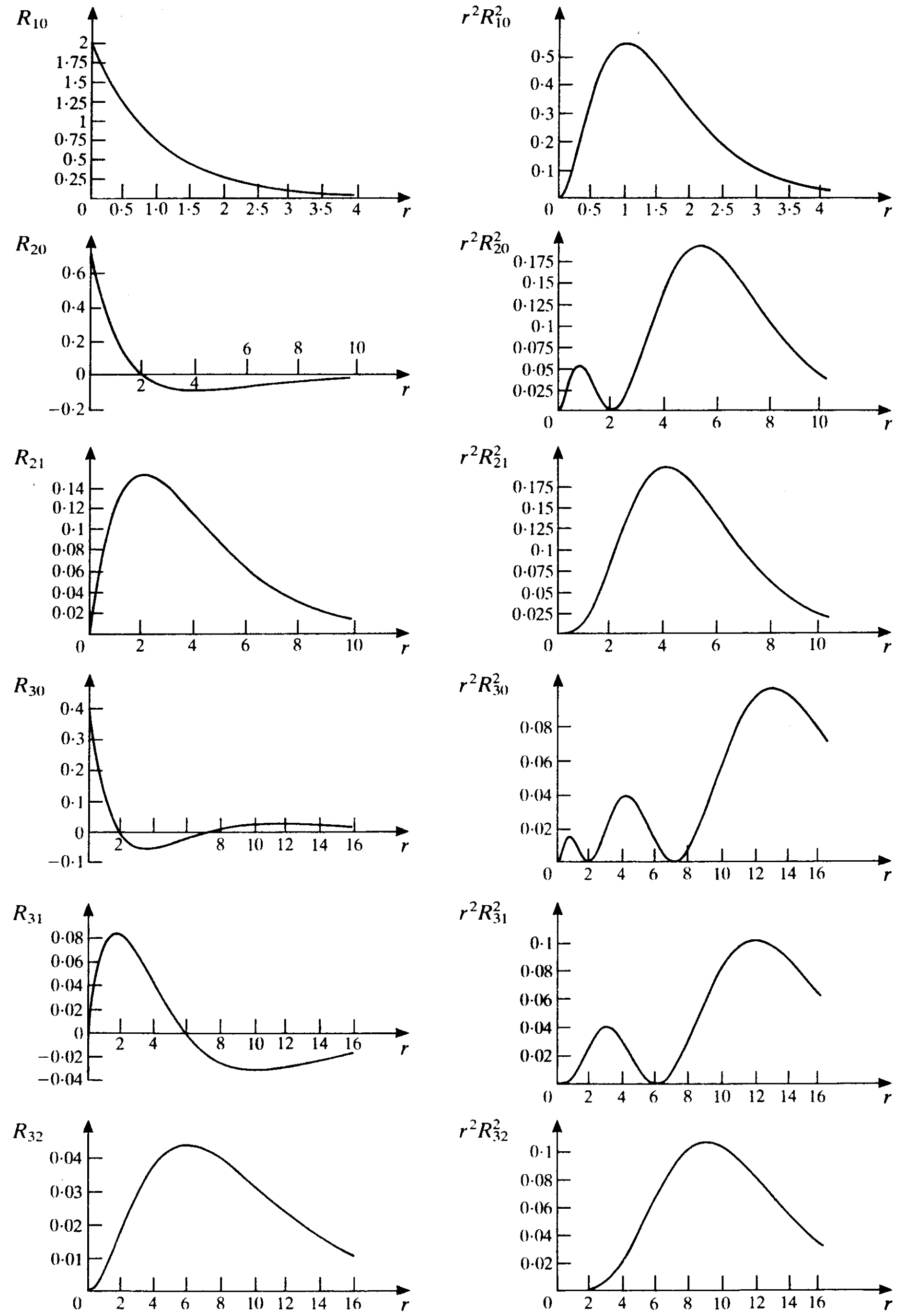
$$R_{31}(r) = \frac{4\sqrt{2}}{9}(Z/3a_\mu)^{3/2}(1 - Zr/6a_\mu)(Zr/a_\mu)\exp(-Zr/3a_\mu)$$

$$R_{32}(r) = \frac{4}{27\sqrt{10}}(Z/3a_\mu)^{3/2}(Zr/a_\mu)^2\exp(-Zr/3a_\mu)$$

and are illustrated in Fig. 7.9.

avec $a_\mu = \frac{4\pi\varepsilon_0 \hbar^2}{\mu e^2} = \frac{m_e}{\mu} a_0$, a_0 = rayon de Bohr

Source : "Introduction to quantum mechanics"
Bransden and Joachain p 341-342



7.9 Radial functions $R_{nl}(r)$ and radial distribution functions $r^2R_{nl}^2(r)$ for atomic hydrogen. The unit of length is $a_\mu = (m/\mu)a_0$, where a_0 is the first Bohr radius.

TD n^{o}1 : Formalisme de Dirac

Ex. 1. Système à deux niveaux : la molécule d'ammoniac

Dans ses états de plus basse énergie, la molécule d'ammoniac (NH_3) a une forme pyramidale avec un atome d'azote au sommet et trois atomes d'hydrogène à la base formant un triangle équilatéral. Les mouvements de basse énergie correspondent au déplacement du plan des trois atomes H (assimilé à une particule de masse m) par rapport à l'atome N le long de l'axe de symétrie de la molécule (mouvement unidimensionnel le long de l'axe x).
Classiquement, le plan des trois atomes H possède deux positions d'équilibre stables de part et d'autre de l'atome N. Le potentiel $V(x)$ est donc symétrique et possède deux minima séparés par une barrière de potentiel maximale en $x = 0$ (correspondant aux 4 atomes coplanaires). Pour simplifier, on modélisera la molécule NH_3 par le potentiel *paire* $V(x)$ suivant :

$$\begin{cases} V(x) = V_0 \text{ pour } 0 < x < b - a/2 \\ V(x) = 0 \text{ pour } b - a/2 < x < b + a/2 \\ V(x) = +\infty \text{ pour } x > b + a/2 \end{cases}$$

Les puits sont centrés en $\pm b$ et de largeur a ; on notera $\Delta = 2b - a$ la largeur de la barrière.
Pour la molécule NH_3 on a de plus, $V_0 \gg E$, E étant l'énergie de la molécule, $K_0\Delta \gg 1$ et $K_0 a \gg 1$ avec $K_0 = \sqrt{2mV_0/\hbar^2}$.

1. $V(x)$ étant pair, on peut chercher les solutions de l'équation de Schrödinger parmi les fonctions paires, $\psi_S(x)$ et impaires, $\psi_A(x)$. Exprimer ces solutions. En écrivant les conditions de raccordement, établir l'équation exprimant la quantification de l'énergie pour chaque solution paire ou impaire.

2. On notera E_S et E_A les énergies les plus basses pour chaque cas pair et impair. Montrer qu'elles ne sons pas égales (contrairement au cas classique) et qu'elles peuvent se mettre sous la forme $E_S = E_0 - A$ et $E_A = E_0 + A$. Exprimer E_0 et A en fonction de m, a, K_0 et Δ. Que deviennent ces énergies lorsque la barrière de potentiel est parfaitement opaque ?

3. Dans la molécule NH_3 les niveaux d'énergie supérieurs ne sont pas accessibles, car leurs énergies sont beaucoup plus grandes. On peut donc assimiler la molécule NH_3 à un système à deux niveaux.

   Expliquer qualitativement pourquoi l'état : $\psi_D(x) = \dfrac{\psi_S(x) + \psi_A(x)}{\sqrt{2}}$,

   correspond à l'état de la particule m localisée dans le puits de droite. Quel est l'état $\psi_G(x)$ de la particule localisée dans le puits de gauche ?

4. Si la particule est à $t = 0$ dans l'état $\psi_D(x)$, quel est son état $\psi_D(x, t)$ à un instant t ?

   Montrer que la densité de probabilité de cette particule oscille entre les deux puits en fonction du temps : le plan d'atomes H passe périodiquement d'un puits à l'autre par *effet tunnel*. Exprimer la pulsation ω de ces oscillations en fonction de A. Comment varie-t-elle avec la largeur de la barrière Δ ?

   Cette *fréquence d'inversion* de la molécule NH_3 se mesure : elle est de l'ordre de $\nu \simeq$ 24 000 MHz et correspond à une longeur d'onde de $\lambda \simeq 1,25$ cm (dans les micro-ondes).

Ex. 2. Opérateurs de spin

Le spin est le moment cinétique intrinsèque des particules élémentaires. Cette grandeur physique ne dépend pas explicitement des coordonnées d'espace et ne possède pas d'équivalent en mécanique classique.

On considère ici une particule de spin 1/2, par exemple un électron. On admettra que l'espace des états de spin de cette particule, $\mathcal{E}_2$, est un espace de dimension 2 et on notera $\{|+\rangle,\ |-\rangle\}$ une base orthonormée de cet espace. Les opérateurs S_x, S_y et S_z sont les projections sur les axes Ox, Oy et Oz de l'observable moment cinétique de spin $\vec{S}$ et sont donnés dans la base $\{|+\rangle,\ |-\rangle\}$ par les matrices :

$$S_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},\ S_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix},\ S_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

1. Calculer les commutateurs $[S_x, S_y]$, $[S_y, S_z]$ et $[S_z, S_x]$.

2. L'opérateur S_x est-il hermitique ? Calculer les valeurs propres et kets propres de S_x dans la base $\{|+\rangle,\ |-\rangle\}$. Indiquer leur dégénérescence. Montrer que ces kets forment une base orthonormée.

3. Mêmes questions pour les opérateurs S_y, S_z et S^2.

4. A l'opérateur de spin on associe l'opérateur moment magnétique $\vec{M} = \gamma_s \vec{S}$, avec $\gamma_s = g_s \frac{q}{2m}$, γ_s étant le rapport gyromagnétique de spin (q étant la charge, m la masse et g_s une constante dépendant du spin de la particule).

   Le hamiltonien d'un spin dans un champ magnétique constant et uniforme le long de l'axe $(0z)$, $\vec{B}_0 = B_0 \vec{u}_z$, est donné par :

   $$\mathcal{H} = -\vec{M}.\vec{B}_0 = -\gamma_s B_0 S_z$$

   Calculer les énergies d'un électron (spin 1/2) placé dans le champ $\vec{B}_0$, sachant que pour un électron $g_s \simeq 2$. Les exprimer en fonction du magnéton de Bohr, $\mu_B = e\hbar/2m_e$, où e et m_e sont les charge et masse de l'électron, puis en fonction de la pulsation de Larmor, $\omega_0 = -\gamma_s B_0$. Ce clivage en niveaux d'énergie distincts sous champ $\vec{B}$ s'appelle *l'effet Zeeman.*

   En déduire la fréquence de Bohr, c'est-à-dire la fréquence de la raie émise ou absorbée lors de la transition d'un état à l'autre. Montrer que la mesure de cette fréquence permet de déterminer directement le rapport gyromagnétique de spin γ_s.

Ex. 3. Conjugués hermitiques

Indiquer la nature (ket, bra, opérateur, scalaire) des expressions ci-dessous. Donner les conjugués hermitiques correspondants. On précise que λ est un scalaire et que A et B sont des opérateurs.

$$\lambda\ |\phi\rangle\ \langle\psi|$$
$$\lambda\ A\ |\phi\rangle\langle\psi|$$
$$\lambda\ \langle\psi|A|\phi\rangle\ \langle u|v\rangle$$
$$\lambda\ \langle\psi|A|\phi\rangle\ |u\rangle\langle v|$$
$$\lambda\ \langle\psi|AB|\phi\rangle\ |u\rangle$$

Ex. 4. Projecteurs : généralités

L'opérateur projection est un opérateur important en Mécanique Quantique, car il permet de calculer l'état d'un système après une mesure.
Soit $\{|u_n\rangle\}$, $n = 1, ...N$ une base orthonormée de l'espace des états $\mathcal{E}_N$ de dimension N.

1. Rappeler les propriétés vérifiées par les vecteurs d'une base orthonormée.
2. Un ket quelconque de l'espace des états peut s'écrire sous la forme : $|\psi\rangle \;=\; \sum_{n=1}^{N} c_n\ |u_n\rangle$, où les c_n sont des constantes. Ecrire la condition pour que $|\psi\rangle$ soit normé.
3. Soit P_n le projecteur sur le ket $|u_n\rangle$, $n = 1, ...N$. Expliciter P_n.

   Déterminer la projection de $|\psi\rangle$ sur $|u_n\rangle$.

   Montrer que l'on a : $P_n\ P_m = P_n\ \delta_{n,m}$. Interpréter géométriquement cette relation.
4. Calculer $\sum_{n=1}^{N} P_n$. Quelle est l'action de l'opérateur $I - P_N$?

Ex. 5. Représentations matricielles

L'espace des états $\mathcal{E}_3$ d'un certain système physique est de dimension 3. Soit $\{|u_1\rangle,\ |u_2\rangle,\ |u_3\rangle\}$, une base orthonormée de cet espace. On définit les kets suivants :

$$\begin{aligned}
|\psi_1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}}(\ |u_1\rangle + i\ |u_3\rangle\ ) \\
|\psi_2\rangle &= \sqrt{2}\ \ |u_1\rangle + i\ |u_2\rangle\ \ + |u_3\rangle
\end{aligned}$$

1. Les kets $|\psi_1\rangle$ et $|\psi_2\rangle$ sont-ils normés ? Si non, les normer.

   Ecrire les kets $|\psi_1\rangle$, $|\psi_2\rangle$, et les bras $\langle\psi_1|$ et $\langle\psi_2|$ sous forme matricielle dans la base $\{|u_i\rangle\}$.

   Les kets $|\psi_1\rangle$ et $|\psi_2\rangle$ sont-ils orthogonaux ?
2. Soient P_1 et P_2 les projecteurs sur les états $|\psi_1\rangle$ et $|\psi_2\rangle$ respectivement.

   Ecrire ces opérateurs sous forme matricielle dans la base $\{|u_i\rangle\}$. Vérifier que ces matrices sont bien hermitiques.
3. Calculer les scalaires $\langle\psi_i|P_1|\psi_i\rangle$ et $\langle\psi_i|P_2|\psi_i\rangle$, pour $i = 1, 2$.

Ex. 6. Etats propres et valeurs propres d'une observable

1. Montrer que les valeurs propres d'un opérateur hermitique sont réelles.
2. Montrer que les vecteurs propres d'un opérateur hermitique associés à des valeurs propres disctinctes sont orthogonaux.

Ex. 7*. Orthogonalisation de Schmidt

L'espace des états $\mathcal{E}_3$ d'un certain système physique est de dimension 3. Soit $\{|u_1\rangle,\ |u_2\rangle,\ |u_3\rangle\}$, une base orthonormée de cet espace.
En diagonalisant un opérateur hermitique A dans cette base, on obtient une valeur propre dégénérée trois fois, a, et les kets propres suivants :

$$\begin{aligned}
|v_1\rangle &= |u_1\rangle +\ |u_2\rangle +\ |u_3\rangle \\
|v_2\rangle &= |u_1\rangle +\ |u_2\rangle \\
|v_3\rangle &= |u_2\rangle +\ |u_3\rangle
\end{aligned}$$

1. Vérifier que les kets propres $\{|v_i\rangle\}$ sont bien linéairement indépendants. Sont-ils orthogonaux entre eux ?

2. On souhaite construire un système *orthonormé* $\{|e_i\rangle\}$ de kets propres de A à partir des kets propres $\{|v_i\rangle\}$, par le procédé d'orthogonalisation de Schmidt.

   (a) Ecrire l'expression du ket normé $|e_1\rangle$ dans la direction $|v_1\rangle$.

   (b) Ecrire l'expression du ket $|\omega_2\rangle$, obtenu à partir de $|v_2\rangle$ en lui soustrayant sa projection sur $|e_1\rangle$. Soit $|e_2\rangle$ le ket normé dans la direction $|\omega_2\rangle$. Donner son expression et vérifier qu'il est bien perpendiculaire à $|e_1\rangle$.

   (c) Généraliser cette procédure pour déterminer, à partir de $|v_3\rangle$, le ket normalisé $|e_3\rangle$ formant avec $|e_1\rangle$ et $|e_2\rangle$ une base orthonormée.

   (d) Montrer que les kets $\{|e_i\rangle\}$ ainsi obtenus sont bien kets propres de A.

Université de Cergy-Pontoise
Physique quantique II
S6 - P - 2013-2014

TD n^{o}2 : Principes de la mécanique quantique :
Mesures, valeurs moyennes, évolution temporelle

Ex. 1. Mesures de spin

On veut effectuer une série de mesures de spin sur un jet de particules de spin 1/2, contenant un très grand nombre N de particules.
On dispose pour cela de deux appareils de mesure de Stern et Gerlach, l'un mesurant la composante S_x et l'autre la composante S_z. Ces deux appareils jouent aussi le rôle de polariseurs de spin en ne sélectionnant que les états de spin dont la mesure a donné la valeur $\hbar/2$.
On utilisera ici les notations et résultats de l'Ex. 2 du TD n^{o}1.
Les particules du jet sont préparées dans l'état de spin $|+\rangle$.

1. On effectue d'abord une mesure de S_z puis une mesure de S_x. Quel est le nombre de particules et leur état de spin après ces deux mesures ?
2. Même question si on change l'ordre des mesures.

Ex. 2. Mesures d'observables et évolution dans le temps

On considère un système physique dont l'espace des états $\mathcal{E}_3$ est de dimension 3. Soit $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle\}$ une base orthonormée de cet espace. L'opérateur hamiltonien $\mathcal{H}$ et deux observables A et B s'écrivent dans cette base sous la forme matricielle suivante :

$$\mathcal{H} = \hbar\omega \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}, \; A = \begin{pmatrix} 0 & \alpha & 0 \\ \alpha & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2\alpha \end{pmatrix}, \; B = \begin{pmatrix} 2\beta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \beta \\ 0 & \beta & 0 \end{pmatrix}$$

où α et β sont des constantes réelles non nulles.

1. Quels sont les valeurs propres et kets propres de $\mathcal{H}$ et A ?
2. Dans cette question, on suppose que le système est dans l'état $|\psi_0\rangle$:

$$|\psi_0\rangle = |u_1\rangle + \frac{i}{\sqrt{2}}|u_2\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|u_3\rangle$$

   (a) $|\psi_0\rangle$ est-il normalisé ? Sinon, le normaliser.
   (b) Ecrire $|\psi_0\rangle$ dans les bases propres de $\mathcal{H}$ et A respectivement.
   (c) On effectue une mesure de $\mathcal{H}$ (mesure de l'énergie du système). Quels résultats peut-on trouver et avec quelles probabilités ? Quel est l'état du système après la mesure ?
   (d) On mesure A. Mêmes questions qu'en (c).
   (e) Calculer les valeurs moyennes des grandeurs physiques associées à $\mathcal{H}$ et A lorsque le système est dans l'état $|\psi_0\rangle$.

3. On suppose que le système est dans l'état $|\psi_0\rangle$ à $t = 0$.
   (a) Donner le ket $|\psi(t)\rangle$ représentant l'état du système à l'instant $t > 0$ dans la base $\{|u_i\rangle\}$.
   (b) Est-ce que les observables $\mathcal{H}$ et A sont des constantes du mouvement ?
   (c) On effectue une mesure de A à l'instant t. Quels résultats peut-on trouver et avec quelles probabilités ?
   (d) Calculer les valeurs moyennes de $\mathcal{H}$ et A à l'instant t.
4. Reprendre l'exercice en remplaçant l'observable A par l'observable B (*à faire à la maison*).

Ex. 3. Précession de Larmor

On considère un électron de spin 1/2 dans un champ magnétique constant et uniforme le long de l'axe $(0z)$, $\vec{B}_0 = B_0\vec{u}_z$. Le hamiltonien de ce spin s'écrit donc :

$$\mathcal{H} = -\gamma_s B_0 S_z$$

On utilisera ici les notations et résultats de l'Ex. 2 du TD n^{o}1.

1. Si le spin est dans l'état $|+\rangle$ à $t = 0$, quel est son état à t ?
   Calculer la valeur moyenne de $\mathcal{H}$ à t.
2. Le spin est à $t = 0$ dans l'état : $|\psi(0)\rangle = \frac{|+\rangle+|-\rangle}{\sqrt{2}}$
   Quel est l'état du spin à l'instant t ?
   Quels sont les résultats et avec quelles probabilités, d'une mesure à t de chaque opérateur S_x, S_y et S_z?
   Calculer les valeurs moyennes des opérateurs S_x, S_y, S_z et $\mathcal{H}$ à t.
   Montrer que la valeur moyenne du moment cinétique de spin, $\langle\vec{S}\rangle(t)$, tourne autour du champ $\vec{B}_0$ à la pulsation $\omega_0 = -\gamma_s B_0$ (précession de Larmor).

Ex. 4. Atome d'hydrogène

Le hamiltonien de l'électron d'un atome d'hydrogène est donné par :

$$\mathcal{H} = \frac{P^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

La fonction d'onde normalisée de cet électron dans son état fondamental (d'énergie $E_1 = -13,6\ eV$) est donnée par :

$$\psi_1(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}\ exp\left(-\frac{r}{a_0}\right)$$

où r est la distance de l'électron au centre de masse de l'atome et a_0 le rayon de Bohr ($a_0 \simeq 0,52$Å).

1. Calculer la probabilité de trouver l'électron à une distance comprise entre r et $r + dr$. Pour quelle valeur de r la densité de probabilité correspondante est-elle maximum ?
2. On suppose que l'électron est dans son état fondamental à $t = 0$. On mesure l'énergie : quel est le résultat et avec quelle probabilité ? Calculer la valeur moyenne de l'observable R associée à la distance r, toujours à $t = 0$.
3. Quel est l'état de l'électron à $t > 0$? Donner les valeurs moyennes de $\mathcal{H}$ et R dans cet état.

Ex. 5. Système à deux niveaux : la molécule d'ammoniac

On reprend l'Ex. 1 du TD n^{o}1 sur la molécule NH_3 avec le formalisme de Dirac. L'espace des états de la molécule est de dimension infinie, mais on a vu que seuls les deux premiers niveaux d'énergie sont accessibles. On peut donc se placer dans un sous-espace $\mathcal{E}_2$ de dimension 2 et modéliser la molécule d'ammoniac par un système à deux niveaux d'énergie $E_S = E_0 - A$ et $E_A = E_0 + A$ associés aux états $|\psi_S\rangle$ et $|\psi_A\rangle$.

1. Vérifier que les états $|\psi_S\rangle$ et $|\psi_A\rangle$ sont bien orthogonaux. En supposant ces vecteurs convenablement normés, ils forment donc une base orthonormée de $\mathcal{E}_2$. Montrer que les vecteurs $\{|\psi_D\rangle\}, |\psi_G\rangle\}$ avec $|\psi_D\rangle = \frac{|\psi_S\rangle+|\psi_A\rangle}{\sqrt{2}}$ et $|\psi_G\rangle = \frac{|\psi_S\rangle-|\psi_A\rangle}{\sqrt{2}}$, forment aussi une base orthonormée de $\mathcal{E}_2$.

2. Ecrire la matrice du hamiltonien $\mathcal{H}_0$ de la molécule d'ammoniac dans la base $\{|\psi_S\rangle\}, |\psi_A\rangle\}$, puis dans la base $\{|\psi_D\rangle\}, |\psi_G\rangle\}$.

3. La molécule d'ammoniac possède un moment dipolaire électrique le long de l'axe de symétrie x de la molécule, car le barycentre des charges positives est différent de celui des charges négatives (l'atome N, plus électropositif, attire les électrons). Ce moment dipolaire s'inverse donc lorsque la molécule se retourne.

   Ce moment dipolaire intéragit avec un champ électrique $\vec{\mathcal{E}}$. D'après le principe de correspondance, on peut écrire ce couplage pour un champ $\vec{\mathcal{E}}$ le long de x :

   $$W = -\vec{D}.\vec{\mathcal{E}} = -D\mathcal{E}$$

   où l'opérateur moment dipolaire s'écrit $D = q_0 X$, q_0 étant une charge effective. Le hamiltonien s'écrit donc : $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + W$.

   (a) Montrer que l'opérateur position peut s'écrire dans la base $\{|\psi_S\rangle\ , |\psi_A\rangle\}$ sous la forme:

   $$X = x_0 \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

   où x_0 est un réel que l'on ne cherchera pas à calculer. Calculer les états propres et valeurs propres de l'opérateur X. Peut-on avoir une idée de ce que vaut x_0 ?

   (b) Sachant que la particule est dans l'état $|\psi_D\rangle$ à $t = 0$, calculer $\langle X\rangle(t)$ et la probabilité qu'elle soit dans l'état $|\psi_G\rangle$ à t, en fonction de $\omega = 2A/\hbar$, la fréquence d'inversion de la molécule.

   (c) Ecrire la matrice du hamiltonien $\mathcal{H}$ dans la base $\{|\psi_S\rangle\}, |\psi_A\rangle\}$, puis dans la base $\{|\psi_D\rangle\}, |\psi_G\rangle\}$. En déduire les énergies de la molécule d'ammoniac dans le champ $\vec{\mathcal{E}}$. On posera $\eta = q_0 x_0 \mathcal{E}$.

   Préciser les états propres uniquement pour les deux cas extrêmes : $\mathcal{E} = 0$ puis $A = 0$ (barrière de potentiel parfaitement opaque). Calculer la moyenne de l'opérateur D dans ces états propres. En déduire qu'il y a compétition entre l'effet tunnel, qui tend à symétriser la molécule et le champ $\vec{\mathcal{E}}$, qui tend à polariser la molécule.

Ex. 6. Relation d'incertitude généralisée

Nous cherchons à démontrer la relation d'incertitude généralisée suivante :

$$\Delta A \ \Delta B \ \geq \frac{1}{2} \left|\langle\psi| \ [A,B] \ |\psi\rangle\right|$$

où A et B sont deux observables quelconques et $|\psi\rangle$ un ket normé quelconque.

1. Commençons par centrer les variables en posant : $A' = A - \langle A\rangle I$ et $B' = B - \langle B\rangle I$. Exprimer ΔA et ΔB en fonction de moyennes des opérateurs A' et B'. Montrer que $i\ [A', B']$ est hermitien.

2. Considérons l'état : $|\varphi\rangle = (A' + i\lambda B')\ |\psi\rangle$, où $|\psi\rangle$ est un ket quelconque et λ un réel. Calculer le carré de la norme de $|\varphi\rangle$. Montrer que l'on obtient un polynôme du second degré en λ de coefficients *réels*.

3. Déterminer le signe du discriminant. En déduire la relation d'incertitude généralisée. Montrer que l'on retrouve bien la relation d'incertitude de Heisenberg pour X et P_X.

Université de Cergy-Pontoise
Physique quantique II
S6 - P - 2013-2014

TD n^{o}3 : Oscillateur harmonique quantique

On veut étudier quelques propriétés de l'oscillateur harmonique quantique à une dimension donné par le hamiltonien :

$$\mathcal{H} = \frac{P_X^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 X^2$$

Ce modèle a, comme en mécanique classique, de nombreuses applications : les vibrations des atomes d'une molécule autour de leur position d'équilibre, les oscillations des atomes ou ions d'un réseau cristallin (phonons) ...
On désigne par $\{|\varphi_n\rangle\}$ les états stationnaires *normés* d'énergies E_n. On admettra qu'ils forment une base de l'espace des états $\mathcal{E}$.

1. Rappeler l'expression des énergies E_n et les valeurs permises du nombre quantique n.
   Les énergies sont-elles dégénérées? Pourquoi les kets propres $\{|\varphi_n\rangle\}$ sont orthogonaux ?
2. A $t = 0$, le système est dans un état représenté par le ket normé $|\psi(0)\rangle = \sum_n c_n |\varphi_n\rangle$.
   Quelle est la probabilité pour qu'une mesure de l'énergie de la particule effectuée à un instant $t > 0$ quelconque donne un résultat supérieur à $2\hbar\omega$?
   Quelles sont les conditions sur le ket $|\psi(0)\rangle$ pour que cette probabilité soit nulle ?
3. Les kets propres $\{|\varphi_n\rangle\}$ sont-ils kets propres des opérateurs création et annihilation de l'oscillateur harmonique, a^+ et a ?
   Donner les matrices représentant les opérateurs $\mathcal{H}$, a^+, a et $N = a^+a$ dans la base $\{|\varphi_n\rangle\}$. Les opérateurs a^+ et a sont-ils hermitiques ? En déduire la relation de commutation $[a, a^+] = I$.
   En déduire les matrices représentant les observables position et quantité de mouvement, X et P_X, dans la base $\{|\varphi_n\rangle\}$.
4. Retrouver les expressions des fonctions propres $\varphi_n(x)$ associées aux trois premiers niveaux d'énergies de l'oscillateur harmonique.
   Représenter $|\varphi_n(x)|^2$ sur un graphe pour ces trois niveaux.
5. Calculer la probabilité de trouver la particule à l'extérieur des limites classiques lorsqu'elle est dans son état fondamental.
6. Montrer que le principe d'incertitude de Heisenberg est bien vérifié lorsque la particule est dans un état propre $|\varphi_n\rangle$.
7. Calculer les valeurs moyennes des opérateurs potentiel et énergie cinétique de la particule dans un état propres $|\varphi_n\rangle$ en fonction de son énergie E_n.
8. Montrer que le théorème d'Ehrenfest donne l'équation du mouvement classique pour les valeurs moyennes.
9. Quelles sont les énergies et kets propres de l'oscillateur harmonique à trois dimensions? Calculer la dégénérescence des niveaux d'énergies.

On donne l'intégrale suivante : $\displaystyle \int_1^{+\infty} e^{-t^2}\, dt \simeq 0.16\, \frac{\sqrt{\pi}}{2}$

Université de Cergy-Pontoise
Physique quantique II
S6 - P - 2013-2014

TD n^{o}4 : Moment cinétique

Ex. 1. Opérateurs de spin 1/2

On considère une particule de spin $s = 1/2$ (par exemple un électron). Ecrire les matrices des opérateurs de spin S_x, S_y, S_z et S^2 dans la base des kets propres communs à S^2 et S_z. Montrer que l'on retrouve bien les matrices données dans l'Ex. 2 du TD n^{o}1.

Ex. 2*. Opérateurs moments cinétiques

On considère un système physique dont l'espace des états, $\mathcal{E}_4$, est de dimension 4. Les kets propres communs aux observables J^2 et J_z , $|j, m\rangle$ avec $j = 0, 1$, forment un base de cet espace.

1. Ecrire dans cette base les matrices des opérateurs J_z, J^2 et J_x. On rangera les kets $|j, m\rangle$ dans l'ordre $|1, 1\rangle$, $|1, 0\rangle$, $|1, -1\rangle$, $|0, 0\rangle$. Calculer les kets propres communs à J^2 et J_x.

2. Soit $|\psi\rangle$ un ket normé représentant l'état du système : $|\psi\rangle = a\ |1, 1\rangle + b\ |1, 0\rangle + c\ |1, -1\rangle + d\ |0, 0\rangle$, où a, b, c et d sont des constantes réelles. Quelle est la probabilité d'obtenir le résultat $+\hbar$ lors d'une mesure de J_z dans cet état ? Et lors d'une mesure de J_x ?

Ex. 3. Particule de spin 1

On considère le hamiltonien suivant : $\mathcal{H} = a\ S_z^2 + b\ (S_x^2 - S_y^2)$, où $\vec{S}$ est l'opérateur de spin 1 et a et b deux constantes réelles positives.
Déterminer les énergies et états propres de $\mathcal{H}$.

Ex. 4. Rotation d'une molécule rigide

Afin de déterminer les niveaux d'énergie de rotation d'une molécule diatomique, nous modélisons la molécule diatomique par deux atomes de masses m_1 et m_2, séparés par une distance fixe égale à a (modèle du rotateur rigide).

1. Déterminer l'expression de l'énergie cinétique de rotation classique de la molécule autour de son centre de masse. En déduire que le hamiltonien quantique correspondant s'écrit : $\mathcal{H} = L^2/2I$, où $\vec{L}$ est l'opérateur moment cinétique orbital de la molécule. Expliciter et donner le sens physique du terme I.

2. Donner les états stationnaires et les énergies de rotation de la molécule. Indiquer la dégénérescence. Montrer que l'écart entre deux niveaux d'énergie consécutifs, $l - 1$ et l, croît linéairement avec le nombre quantique l associé à l'opérateur L^2.

3. Le spectre d'absorption de la molécule CO d'oxyde de carbone présente un pic pour une longueur d'onde $\lambda = 1,3$ mm, correspondant à une transition entre les niveaux $l = 1$ et $l = 2$. Calculer le moment d'inertie de la molécule. En déduire la distance a entre les deux atomes de la molécule.

On donne les masses molaires de C et O, $M_C = 12g$ et $M_0 = 16g$, et $\hbar = 1.054\ 10^{-34}\ Js$.

Ex. 5. Harmoniques sphériques

Une particule est dans l'état normé donné par : $\psi(\vec{r}) = K\ (x + y + z)\ e^{-\alpha r}$ où K, constante de normalisation, et α sont des constantes réelles.

1. Montrer que ψ peut se mettre sous la forme : $\psi(\vec{r}) = f(r)\ \phi(\theta, \varphi)$.

   Ecrire la partie angulaire $\phi(\theta, \varphi)$ dans la base des $Y_l^m(\theta, \varphi)$. On utilisera pour cela la table des harmoniques sphériques distribuée en cours.

2. Quels sont les résultats possibles lors d'une mesure de L_z sur cet état ? et lors d'une mesure de L^2 sur cet état ?

3. Calculer les probabilités de tous les résultats possibles lors d'une mesure de L_z sur cet état. Indiquer l'état du système immédiatement après la mesure.

4. Calculer la valeur moyenne de L_z sur cet état.

5. Quelle est la probabilité de trouver la particule dans un angle solide $d\Omega$ à θ, φ ?

Ex. 6. Composante d'un spin le long d'une direction quelconque

On souhaite mesurer, à l'aide d'appareils de Stern et Gerlach, la composante S_u d'un spin 1/2 le long d'un vecteur unitaire $\vec{u}(\theta, \varphi)$ quelconque repéré par les angles θ et φ.

1. Ecrire la matrice représentant S_u dans la base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$. En déduire ses valeurs propres et états propres, que l'on notera $|+\rangle_u$ et $|-\rangle_u$.

2. On effectue une mesure de S_u sur un spin 1/2 initialement dans l'état $|+\rangle$. Quels sont les résultats possibles et avec quelles probabilités ? Indiquer les états de spin possibles après la mesure.

3. Calculer les valeurs moyennes des opérateurs S_x, S_y et S_z dans l'état $|+\rangle_u$. Montrer que ces valeurs moyennes sont égales aux composantes qu'aurait un moment cinétique classique, de module $\hbar/2$ et orienté suivant le vecteur $\vec{u}$.

Ex. 7. Cryptographie quantique

Le but de la cryptographie est d'échanger un message codé en minimisant les risques de voir ce message intercepté par un tiers. On va voir sur un exemple simple, comment la mécanique quantique et le principe de superposition permettent de s'assurer que le message n'a pas été intercepté.
Alice souhaite envoyer à Bob un message codé en binaire au moyen d'états de spins 1/2, la valeur $+\hbar/2$ étant codée par +1 et la valeur $-\hbar/2$ par 0. Alice envoie donc une série de spins, préparés grâce à deux appareils de Stern et Gerlach orientés dans les directions x et z, dans des états $|\pm\rangle$ ou $|\pm\rangle_x$. Bob dispose lui aussi de deux appareils de Stern et Gerlach qu'il oriente aléatoirement dans les x et z, ignorant quels états de spin envoie Alice.
Supposons qu'Alice lui envoie un spin 1/2 dans l'état $|+\rangle$.

1. Calculer la probabilité que Bob obtienne le même résultat $+\hbar/2$ qu'Alice. On distinguera deux cas, suivant le choix des axes de mesure de Bob.

2. Un espion intercepte le spin envoyé par Alice et le mesure le long d'une direction $\vec{u}(\theta_u)$ quelconque dans le plan xOz, faisant un angle θ_u avec l'axe Oz ($\theta_u \in [0, \pi]$). Puis l'espion le renvoie à Bob.

   Quels sont les états de spins renvoyés par l'espion et avec quelles probabilités ?

3. Calculer la probabilité que Bob obtienne le même résultat qu'Alice en présence de l'espion. On distinguera deux cas, suivant le choix des axes de mesure de Bob.

4. Même question si l'espion choisit l'angle θ_u aléatoirement avec une probabilité uniforme sur $[0, \pi]$.

5. Même question si l'espion connaît le choix des axes d'Alice et Bob et fait ses mesures aléatoirement dans les deux directions x et z. Conclusion ?

6. Supposons que l'espion connaisse le choix des axes d'Alice et Bob. Quelle est la probabilité qu'un espion ne soit pas détecté sur un ensemble de N mesures ?

Ex. 8. Intrication quantique

On considère une paire de deux particules (1,2) de spin 1/2 préparées dans l'état :

$$|\psi_0\rangle = \frac{|+-\rangle + |-+\rangle}{\sqrt{2}}$$

où $|+-\rangle = |+\rangle_1 \otimes |-\rangle_2$ et $|-+\rangle = |-\rangle_1 \otimes |+\rangle_2$, les états $|\pm\rangle_1$ ($|\pm\rangle_2$) désignant les kets propres des opérateurs S_1^2 et S_{z1} (S_2^2 et S_{z2}) et $\vec{S}_1$, $\vec{S}_2$ les moments cinétiques de spin des particules 1 et 2.

1. Ecrire la matrice représentant S_{x1} dans la base $\{|+\rangle_1,\ |-\rangle_1\}$. Calculer ses valeurs propres et kets propres. On notera $\{|+\rangle_{x1},\ |-\rangle_{x1}\}$ les kets propres normés de S_{x1} de valeur propre positive et négative respectivement.

2. Ecrire la matrice représentant S_{z1} dans la base $\{|++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle, |--\rangle\}$.

   Ecrire la matrice représentant S_{x1} dans la base $\{|++\rangle_x,\ |+-\rangle_x, |-+\rangle_x, |--\rangle_x\}$, où $|++\rangle_x = |+\rangle_{x1} \otimes |+\rangle_{x2}$, $|+-\rangle_x = |+\rangle_{x1} \otimes |-\rangle_{x2}$ etc ...

3. Ecrire $|\psi_0\rangle$ dans la base $\{|++\rangle_x,\ |+-\rangle_x, |-+\rangle_x, |--\rangle_x\}$.

4. Les deux particules (1,2) sont séparées spatialement sans que l'état de spin ne soit affecté.

   (a) Si Alice mesure la composante du spin 1 suivant l'axe z, quels sont les résultats de cette mesure et leurs probabilités ? Indiquer l'état de la paire après cette mesure.

   (b) Mêmes questions si Alice mesure la composante du spin 1 suivant l'axe x.

   (c) Après la mesure d'Alice, Bob mesure la composante du spin 2 suivant l'axe z. Déterminer, dans les deux cas (a) et (b), les résultats de la mesure de Bob et leurs probabilités lorsqu'Alice obtient un résultat positif. Indiquer l'état de la paire après cette mesure.

   La mesure d'Alice sur la particule 1 affecte-t-elle les résultats de la mesure de Bob sur la particule 2 séparée spatialement de la particule 1 ?

Ex. 9*. Téléportation quantique

1. On considère un système de deux particules A et B de spin 1/2.

   Montrer que les quatre états intriqués suivants, appelés états de Bell :

   $$|\Psi_\pm\rangle_{AB} = \frac{|++\rangle \pm |--\rangle}{\sqrt{2}} \quad \text{et} \quad |\Phi_\pm\rangle_{AB} = \frac{|+-\rangle \pm |-+\rangle}{\sqrt{2}}$$

   forment une base orthonormée de l'espace des états de ce système.

2. Alice et Bob partagent une paire de deux particules B et C de spin 1/2 préparée dans l'état intriqué : $|\psi\rangle_{BC} = \frac{|+-\rangle - |-+\rangle}{\sqrt{2}}$. Alice détient le spin B tandis que Bob détient le spin C.

   Alice détient en plus une particule A, toujours de spin 1/2, qu'elle souhaite téléporter vers Bob. L'état de la particule A à téléporter est inconnu, on l'écrira : $|\psi\rangle = \alpha\,|+\rangle + \beta\,|-\rangle$, et on le prendra normé.

(a) Ecrire le vecteur d'état $|\psi\rangle_{ABC}$ des trois spins ABC avant toute mesure.

(b) Alice effectue une mesure de l'état des deux spins AB qu'elle détient qui projette cet état sur un des quatre vecteurs de la base de Bell de AB.

Ecrire $|\psi\rangle_{ABC}$ sur la base de Bell pour le système des spins AB, la base pour le spin C restant $|\pm\rangle_C$. En déduire les probabilités des résultats possibles d'une mesure d'Alice.

(c) On suppose qu'Alice trouve la paire AB dans l'état $|\Phi_-\rangle_{AB}$. Quel est l'état de spin de la particule C après cette mesure ?

En déduire le principe de téléportation quantique.

Université de Cergy-Pontoise
Physique quantique II
S6 - P - 2013-2014

TD n^{o}5 : Atome d'hydrogène

Ex. 1. Superposition d'états

On considère un atome d'hydrogène dans l'état $|\psi\rangle$ à $t = 0$ donné par :

$$|\psi\rangle = \frac{2\ |1,0,0\rangle + |2,1,0\rangle + \sqrt{2}\ |2,1,1\rangle + \sqrt{3}\ |2,1,-1\rangle}{\sqrt{10}}$$

1. Quels sont les résultats possibles lors d'une mesure de l'énergie à $t = 0$ et avec quelles probabilités?
2. Calculer les valeurs moyennes de l'énergie, de L^2 et de L_z à $t = 0$.
3. Calculer la probabilité de trouver l'électron à une distance inférieure à $a = 10^{-10}$cm du proton à $t = 0$. On se contentera pour cela d'un calcul approché (en remarquant que $a \ll a_0$) et on utilisera la table des premières fonctions radiales de l'atome d'hydrogène distribuée en cours.
4. Quel est l'état du système à un instant $t > 0$? Mêmes questions qu'en 1. et 2. à $t > 0$.

Ex. 2. Atome d'hydrogène dans un champ magnétique : effet Zeeman

Un atome d'hydrogène est placé dans un champ magnétique uniforme constant $\vec{B_0}$ dirigé le long de l'axe $0z$. Dans un premier temps, on négligera les effets de spin.
On rappelle qu'une particule de charge q, de masse m et de moment cinétique orbital $\vec{L}$ possède un moment magnétique orbital $\vec{M}$ défini par :

$$\vec{M} = \frac{q}{2m}\ \vec{L}$$

1. Montrer que le hamiltonien de l'atome d'hydrogène sous champ peut s'écrire :

   $$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \omega_0\ L_z$$

   où $\mathcal{H}_0$ est le hamiltonien de l'atome d'hydrogène sans champ et $\omega_0 = \frac{eB_0}{2m_e}$ la pulsation de Larmor, m_e étant la masse de l'électron.
2. Calculer le spectre d'énergie de l'atome d'hydrogène. Quel est l'effet du champ magnétique sur ce spectre ?
3. Calculer l'effet du champ magnétique lors de l'émission de la raie spectrale correspondant à une transition du 1er état excité $2p$ au fondamental $1s$ (raie dite de résonance).
4. Ecrire et résoudre les équations d'évolution des valeurs moyennes des composantes du moment magnétique orbital de l'électron dans un état propre de $\mathcal{H}$.

   Montrer que cette valeur moyenne du moment magnétique, $< \vec{M} > (t)$, tourne autour du champ $\vec{B_0}$ à la pulsation ω_0 (précession de Larmor).

5. On souhaite prendre en compte les effets de spin. Une particule de charge q, de masse m et de moment cinétique de spin $\vec{S}$ possède un moment magnétique de spin $\vec{M}_s$ défini par :

$$\vec{M}_s = g\ \frac{q}{2m}\ \vec{S}$$

   Sachant que pour l'électron $s = 1/2$ et $g \simeq 2$ et que pour le proton $s = 1/2$ et $g \simeq 5.59$, déterminer le terme dû aux effets de spin à ajouter au hamiltonien $\mathcal{H}$.

   En déduire le spectre d'énergie et les états stationnaires de l'atome d'hydrogène sous champ.

Ex. 3. L'énigme de la série de Pickering

On considère l'électron d'un ion hydrogénoïde contenant Z protons.

1. Déterminer les énergies $E_n(Z)$ et le rayon de Bohr $a_0(Z)$ d'un ion hydrogénoïde, en fonction de l'énergie d'ionisation E_I et du rayon de Bohr a_0 de l'atome d'hydrogène.

2. Edward C. Pickering avait observé en 1896 dans l'atmosphère de l'étoile ζ-La Poulpe (ζ-Puppis en anglais) une série spectroscopique dont les nombres d'onde étaient donnés par :

$$\frac{1}{\lambda} = R_y\left(\frac{1}{4} - \frac{1}{p^2}\right)$$

   où $R_y = \dfrac{E_I}{hc}$ est la constante de Rydberg et p un entier.

   (a) Montrer que la série de Pickering est une série de l'ion hydrogénoïde He^+ ($Z = 2$). Préciser les transitions associées à cette série.

   (b) Montrer qu'une raie sur deux de la série de Pickering de l'ion He^+ coïncide avec une série de l'atome d'hydrogène (appelée série de Balmer).

   (c) En fait, les raies de ces deux séries ne coïncident pas tout à fait. Expliquer pourquoi.

   E.C. Pickering avait pensé à l'époque qu'il existait près de cette étoile une forme d'hydrogène inconnue sur Terre ... C'est Niels Bohr qui montra plus tard que la série de Pickering était en fait une série de l'ion He^+ et non une série de l'atome d'hydrogène. Cette interprétation fut pleinement confirmée par l'observation qui a même mis en évidence le léger décalage avec les raies de Balmer de l'atome d'hydrogène.

Université de Cergy-Pontoise
Mécanique quantique 2012-2013
S6 - P / PS

Février 2013

Partiel de Mécanique quantique : durée 2h

Documents, calculettes, portables interdits

Les exercices sont indépendants. Le barème indiqué est approximatif.

Ex. 1. Spin 1/2 sous champ magnétique (11 pts)

On considère un électron de spin 1/2. On rappelle que l'espace des états de spin de l'électron est un espace de dimension 2 et on notera $\{|+\rangle,\ |-\rangle\}$ une base orthonormée de cet espace. Les composantes S_y et S_z du moment cinétique de spin sont données dans cette base par les matrices suivantes :

$$S_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \qquad S_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

On notera $\{|+\rangle_y,\ |-\rangle_y\}$ les kets propres normés de l'opérateur S_y de valeur propre positive et négative respectivement.
On suppose qu'à l'instant $t = 0$ l'électron est dans l'état : $|\psi_0\rangle = |+\rangle_y$.

1. Calculer les valeurs propres et kets propres des observables S_y et S_z dans la base $\{|+\rangle,\ |-\rangle\}$.

2. On veut effectuer une série de mesures de spin sur un jet de N électrons tous préparés dans l'état $|\psi_0\rangle$, N étant très grand. On dispose pour cela de deux appareils de mesure de Stern et Gerlach, l'un mesurant la composante S_y et l'autre la composante S_z. Ces deux appareils jouent aussi le rôle de polariseurs de spin en ne sélectionnant que les états de spin dont la mesure a donné la valeur $+\hbar/2$.

   On effectue d'abord une mesure de S_y puis une mesure de S_z. Quel est le nombre d'électrons et leur état de spin après ces deux mesures ?

   On effectue d'abord une mesure de S_z puis une mesure de S_y. Quel est le nombre d'électrons et leur état de spin après ces deux mesures ?

   Commenter ces résultats.

3. On plonge cet électron dans le champ magnétique constant et uniforme le long de l'axe $(0z)$, $\vec{B}_0 = B_0\vec{u}_z$. Le hamiltonien de cet électron est donc donné par :

   $$\mathcal{H} = -\vec{M}.\vec{B}_0 = -\gamma_0 B_0 S_z = \omega_0 S_z$$

   avec $\omega_0 = -\gamma_0 B_0 > 0$.

   (a) Calculer les énergies et kets propres de $\mathcal{H}$ dans la base $\{|+\rangle,\ |-\rangle\}$.

   (b) Si on effectue une mesure de l'énergie de l'électron à $t = 0$, quels seraient les résultats de cette mesure, avec quelles probabilités ? Préciser l'état de l'électron juste après cette mesure.

   (c) Mêmes questions que précédemment si on effectue une mesure de S_y à $t = 0$. En déduire la valeur moyenne de S_y à $t = 0$.

   (d) Quel est l'état de l'électron à un instant $t > 0$? On exprimera cet état dans la base $\{|+\rangle,\ |-\rangle\}$.

   (e) Calculer les valeurs moyennes de l'énergie et de S_y à t.

Ex. 2. Oscillateur harmonique (9 pts)

On considère un oscillateur harmonique à une dimension de masse m et de pulsation ω, se déplaçant le long de l'axe Ox. On désigne les énergies et kets propres orthonormés de cet oscillateur par E_n et $|\varphi_n\rangle$ et on donne la fonction d'onde du fondamental de l'oscillateur harmonique :

$$\varphi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right)$$

La particule est préparée dans le premier état excité.

1. Calculer la fonction d'onde du premier état excité, $\varphi_1(x)$.

2. Quelle est la probabilité de trouver la particule entre x et $x + dx$?

3. Calculer les valeurs moyennes et écarts-types des opérateurs X et P_x dans cet état. Précisez le sens physique de ces valeurs moyennes et écarts-types. Vérifier la relation d'incertitude de Heisenberg.

4. Calculer les valeurs moyennes des opérateurs énergie cinétique T et potentiel V dans cet état.

Formulaire sur l'oscillateur harmonique :

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,X + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\,P_X \qquad a^+\,|\varphi_n\rangle = \sqrt{n+1}\,|\varphi_{n+1}\rangle$$

$$a^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,X - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\,P_X \qquad a\,|\varphi_n\rangle = \sqrt{n}\,|\varphi_{n-1}\rangle$$

$$[a, a^+] = I$$

Université de Cergy-Pontoise
Mécanique quantique 2012-2013
S6 - P / PS — Avril 2013

Examen de Mécanique quantique : durée 2h

Documents, calculettes, portables interdits

Les exercices sont indépendants. Le barème indiqué est approximatif.

Ex. 1. Atome d'hydrogène (11 pts)

On considère l'électron d'un atome d'hydrogène dont l'état à $t = 0$ est donné par:

$$|\psi_0\rangle = C \ (\ |1,0,0\rangle + \sqrt{3}\ |2,0,0\rangle + |2,1,1\rangle + \sqrt{2}\ |2,1,0\rangle + |2,1,-1\rangle)$$

où les états $\{|n,l,m\rangle\}$ sont les états propres normés de l'atome d'hydrogène et C une constante.

1. Calculer la constante C de façon à normaliser le ket $|\psi_0\rangle$.
2. Exprimer l'énergie moyenne de l'électron et son écart-type à $t = 0$ en fonction de l'énergie d'ionisation de l'atome d'hydrogène, E_I.
3. Calculer la valeur moyenne de l'opérateur L_z à un instant $t = 0$.
4. Ecrire l'état de l'électron à un instant $t > 0$.
5. Calculer l'énergie moyenne et la valeur moyenne de l'opérateur L_z à un instant $t > 0$.
6. On effectue une mesure de l'opérateur L^2 sur l'électron à $t = 0$ et on obtient le résultat $2\hbar^2$.
   (a) Quelle est la probabilité d'obtenir ce résultat ?
   (b) Quel est l'état de l'électron juste après cette mesure ?
   (c) Calculer la probabilité de trouver l'électron entre les sphères de rayons r et $r + dr$ juste après cette mesure.
   (d) Calculer en fonction de θ et φ, la probabilité de trouver l'électron dans un angle solide élémentaire juste après cette mesure.
   (e) Montrer que l'état de l'électron juste après cette mesure est état propre de l'opérateur L_x. Quels résultats obtient-on, avec quelles probabilités, lorsqu'on effectue une mesure de L_x juste après la mesure de L^2, à $t \simeq 0$?

Ex. 2. Système de 2 spins 1/2 (12 pts)

On considère un système de deux particules de spins 1/2 indépendantes dans un champ magnétique uniforme $\vec{B}_0 = B_0\ \vec{u}_z$. Le hamiltonien de ce système s'écrit donc :

$$\mathcal{H} = \omega_1 S_{1z} + \omega_2 S_{2z}$$

où $\vec{S}_1$, $\vec{S}_2$ désignent les moments cinétiques de spin de chaque particule et ω_1, ω_2 des constantes réelles.

L'état du système à $t = 0$ est donné par : $|\psi_0\rangle = \dfrac{|+-\rangle + |-+\rangle}{\sqrt{2}}$,

où $|+-\rangle = |+\rangle_1 \otimes |-\rangle_2$ et $|-+\rangle = |-\rangle_1 \otimes |+\rangle_2$, les états $\{|+\rangle_i, |-\rangle_i, i = 1,2\}$ désignant les kets propres des opérateurs S_i^2 et S_{iz}.

1. Ecrire la matrice représentant $\mathcal{H}$ dans la base $\mathcal{B} = \{|++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle, |--\rangle\}$. En déduire les énergies et kets propres de $\mathcal{H}$.
2. Ecrire l'état du système à t.
3. Calculer la valeur moyenne de l'énergie du système à t.
4. On effectue une mesure de l'opérateur S_{1z} à t. Quels résultats obtient-on, avec quelles probabilités ?
5. Ecrire la matrice représentant l'opérateur $S_z = S_{1z} + S_{2z}$ dans la base $\mathcal{B}$. En déduire les valeurs propres et kets propres de S_z.
   On effectue une mesure de l'opérateur S_z à t. Quels résultats obtient-on, avec quelles probabilités ?
6. Ecrire la matrice représentant l'opérateur $S^2 = (\vec{S}_1 + \vec{S}_2)^2$ dans la base $\mathcal{B}$. En déduire les valeurs propres et kets propres de S^2.
   On effectue une mesure de l'opérateur S^2 à t. Quels résultats obtient-on, avec quelles probabilités ?

Moment cinétique

$J^2\ |j,m\rangle = j(j+1)\hbar^2\ |j,m\rangle$ $\qquad J_\pm = J_x \pm iJ_y$

$J_z\ |j,m\rangle = m\hbar\ |j,m\rangle$ $\qquad J_\pm|j,m\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m\pm1)}\ |j,m\pm1\rangle$

Premiers harmoniques sphériques :

$$Y_0^0(\theta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \ ; \ Y_1^0(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta \ ; \ Y_1^{\pm1}(\theta,\varphi) = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\ e^{\pm i\varphi}$$

Premières fonctions radiales de l'atome d'hydrogène, a_0 étant la rayon de Bohr :

$$R_{1,0}(r) = \frac{2}{a_0^{3/2}}\ e^{-r/a_0} \ ; \ R_{2,0}(r) = \frac{2}{(2a_0)^{3/2}}\ (1 - \frac{r}{2a_0})\ e^{-r/2a_0} \ ; \ R_{2,1}(r) = \frac{1}{(2a_0)^{3/2}}\ \frac{1}{\sqrt{3}}\ \frac{r}{a_0}\ e^{-r/2a_0}$$