

Mécanique Quantique

DM de Noël 2019

Premier problème : diffraction de Bragg d'atomes froids

On considère un atome de masse m initialement préparé dans l'état fondamental $|\psi_0\rangle$ d'énergie E_0 d'un hamiltonien $\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\hat{X})$, où U désigne le potentiel de piégeage initial. À l'instant $t = 0$ on branche un potentiel $V(\hat{X}) = V_0 \cos(q\hat{X})$ que l'on laisse agir pendant un temps τ .

1. Rappeler l'expression de l'opérateur d'évolution pour $t > 0$ et préciser son développement en puissance de t .
2. À l'aide de la question précédente, donner l'expression de $|\psi(\tau)\rangle$ à l'ordre 1 en τ . Dans la suite, on travaillera toujours à cet ordre.
3. On note $|\mathbf{p}\rangle$ les états propres de l'opérateur impulsions associés aux impulsions classique $\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z)$. Rappeler l'expression de $|\mathbf{p}\rangle$ en représentation position. En déduire $\cos(q\hat{X})|\mathbf{p}\rangle$ dans la base $|\mathbf{p}\rangle$ (on notera \mathbf{e}_x le vecteur unitaire selon la direction x).
4. On note $\tilde{\psi}(\mathbf{p})$ la fonction d'onde du système en représentation impulsion. Donner l'expression de $\tilde{\psi}(\mathbf{p}, \tau)$ en fonction de $\tilde{\psi}(\mathbf{p}, 0)$.
5. On suppose que le paquet d'onde initial associé $|\psi_0\rangle$ a une extension spatiale Δx telle que $q\Delta x \gg 1$.
 - (a) Quelle est l'extension typique de $\tilde{\psi}_0(\mathbf{p})$ dans l'espace des impulsions
 - (b) En déduire l'allure du paquet d'onde en impulsion à l'instant τ .
6. À l'instant $t = \tau$, on éteint à la fois le potentiel U et V et on laisse évoluer la particule librement. Montrer que pour un temps suffisamment long, la distribution de probabilité en position est caractérisée par trois pics dont on précisera la séparation en fonction de q , $t' = t - \tau$, \hbar et m .

Deuxième problème : Moment quadrupolaire des noyaux

Du fait de leur rotation, les noyaux de spin non nul (par exemple le deutéron, constitué d'un proton et d'un neutron et possédant un spin $I = 1$) ne sont pas sphériques et le potentiel d'interaction entre le noyau et l'électron n'est pas parfaitement en $1/r$ ce qui induit des décalages des raies atomiques par rapport à un noyau parfaitement sphérique.

1. *Quelques propriétés de l'atome d'hydrogène* : Dans cette première partie, on établit un certains nombres de propriétés mathématiques des états propres de l'atome d'hydrogène que l'on utilisera dans la partie suivante.

On rappelle que si l'on note $|n, \ell, m_\ell\rangle$ les états propres de l'atome d'hydrogène, les fonctions d'ondes associées se mettent sous la forme

$$\psi_{n,\ell,m_\ell}(r, \theta, \varphi) = \frac{u_{n,\ell}(r)}{r} Y_\ell^{m_\ell}(\theta, \varphi),$$

où $u_{n\ell}$ est état propre du hamiltonien à une dimension

$$\hat{h}_\ell = \frac{\hat{p}_r^2}{2m_e} + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2m_e r^2} - \frac{e^2}{r}.$$

Dans cette expression m_e désigne la masse de l'électron et $\hat{p}_r = -i\hbar\partial_r$. Les valeurs propres sont alors de la forme $E_{n',\ell} = -m_e e^4 / 2\hbar^2 (\ell + n' + 1)^2$, où $n' = n - \ell - 1$ est un entier positif, ce résultat étant valable pour ℓ entier ou non.

- (a) *Résultat préliminaire : théorème d'Hellman-Feynman.* On considère un hamiltonien $\hat{H}(\lambda)$ dépendant d'un paramètre λ . On note $E(\lambda)$ une valeur propre de $\hat{H}(\lambda)$ et $|\psi(\lambda)\rangle$ un vecteur propre associé. En développant $\langle \psi(\lambda + \delta\lambda) | \hat{H}(\lambda + \delta\lambda) | \psi(\lambda + \delta\lambda) \rangle$ à l'ordre 1 en $\delta\lambda$, montrer que

$$\frac{dE}{d\lambda} = \left\langle \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} \right\rangle,$$

où la valeur moyenne est prise dans l'état $|\psi(\lambda)\rangle$.

- (b) En considérant les dérivées des énergies propres de l'atome d'hydrogène par rapport à e^2 et ℓ , calculer les valeurs moyennes de $1/r$ et $1/r^2$ dans l'état $|n, \ell, m_\ell\rangle$ (on exprimera le résultat final à l'aide du rayon de Bohr a_0).
- (c) Soit \hat{A} un opérateur quelconque. Que $\langle u_{n',\ell} | [\hat{A}, \hat{h}_\ell] | u_{n',\ell} \rangle$?
- (d) Calculer explicitement $[\hat{p}_r, \hat{h}_\ell]$. En déduire que

$$\ell(\ell+1) \left\langle \frac{\hbar^2}{m_e \hat{r}^3} \right\rangle = e^2 \left\langle \frac{1}{\hat{r}^2} \right\rangle.$$

À l'aide de la question précédente, en déduire que

$$\left\langle \frac{1}{\hat{r}^3} \right\rangle = \frac{2}{a_0^3 \ell(\ell+1)(2\ell+1)n^3},$$

- (e) Pourquoi $\langle 1/\hat{r}^3 \rangle$ diverge-t-il pour $\ell = 0$ (Indication : on rappellera le comportement des fonctions propres de \hat{h}_ℓ pour $r \rightarrow 0$).
2. *Effet de la forme du noyau sur les niveaux électroniques du deutérium :* On suppose ici que le noyau n'est pas sphérique mais possède une forme d'ellipsoïde de révolution autour de l'axe z et l'on s'intéresse aux perturbations sur les deux premiers niveaux de l'atome d'hydrogène.
- (a) On note V le potentiel électrostatique créé par le noyau. Que vaut $\nabla^2 V$ à l'extérieur du noyau ?

- (b) Montrer que suffisamment loin du noyau, on peut écrire l'énergie potentielle d'interaction de l'électron avec le noyau sous la forme $V \simeq V_0 + V_1$ avec

$$\begin{aligned} V_0(r) &= -\frac{e^2}{r} \\ V_1(r) &= g \frac{Y_2^0(\theta, \varphi)}{r^3}. \end{aligned}$$

où g est une constante qu'on ne cherchera pas à évaluer.

- (c) On suppose que l'on peut traiter V_1 en perturbation par rapport à V_0 . On note \mathcal{E}_n le sous-espace propre du hamiltonien non perturbé associé au nombre quantique principal n . Que vaut sa dégénérescence (on ne prendra pas en compte le spin de l'électron).
- (d) Montrer qu'au premier ordre de la théorie des perturbations, ceci revient à chercher les valeurs propres de

$$M_{\ell, m_\ell; \ell', m'_\ell}^{(n)} = g \int_0^\infty dr \frac{u_{n\ell}(r) u_{n\ell'}(r)}{r^3} \int d^2\Omega Y_\ell^{m_\ell}(\Omega)^* Y_2^0(\Omega) Y_{\ell'}^{m'_\ell}(\Omega).$$

où $\Omega = (\theta, \varphi)$ et $d^2\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$ est l'élément d'angle solide correspondant.

- (e) À l'aide de l'expression des harmoniques sphériques, montrer que $M_{\ell, m_\ell; \ell', m'_\ell}^{(n)}$ est nul si m_ℓ et m'_ℓ sont différents.
- (f) Rappeler l'expression de Y_0^0 . En déduire que $M_{\ell, m_\ell; 0, 0}^{(n)}$ est nul si $\ell \neq 2$.
- (g) À partir des questions précédentes, montrer que :
- L'état fondamental n'est pas affecté par la perturbation.
 - Le premier état excité se scinde en trois sous-niveaux dont les décalages en énergies sont

$$\Delta E_{n=1} = \frac{\eta}{48\sqrt{5}\pi} \frac{g}{a_0^3},$$

avec $\eta \in \{-1, 0, 2\}$. On rappelle que

$$\begin{aligned} Y_2^0(\theta, \varphi) &= \frac{1}{4} \sqrt{\frac{5}{\pi}} (3 \cos^2(\theta) - 1) \\ Y_1^0(\theta, \varphi) &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \cos(\theta) \\ Y_1^{\pm 1}(\theta, \varphi) &= -\frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} e^{\pm i\varphi} \sin(\theta) \end{aligned}$$

Troisième problème : Tourbillon quantique dans un condensat de Bose-Einstein de rubidium

Dans ce problème on s'intéresse à la dynamique de tourbillons quantiques dans un condensat de Bose-Einstein dont l'existence avait été prédite pour la première fois par Feynman et Onsager. Leur observation peut être considérée comme une preuve de l'existence d'une fonction d'onde macroscopique décrivant le système.

On considère un ensemble d'atomes bosoniques piégés dans un potentiel harmonique de symétrie de révolution autour de l'axe z . Pour simplifier le problème on suppose que les atomes sont sans interactions mutuelles et que la dynamique du système est décrite par le hamiltonien à une particule

$$\hat{H} = \hat{H}_{x,y} + \hat{H}_z.$$

avec

$$\begin{aligned}\hat{H}_{x,y} &= \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \frac{m}{2}\omega_\perp^2(\hat{x}^2 + \hat{y}^2) \\ \hat{H}_z &= \frac{\hat{p}_z^2}{2m} + \frac{m}{2}\omega_z^2\hat{z}^2\end{aligned}$$

Dans ce qui suit, on s'intéresse aux propriétés d'un tel système en rotation.

1. Montrer que les fonctions propres de \hat{H} peuvent se mettre sous la forme

$$\psi(x, y, z) = \psi_\perp(x, y)\psi_z(z),$$

où ψ_\perp et ψ_z sont des fonctions propres de $\hat{H}_{x,y}$ et \hat{H}_z associées aux valeurs propres E_\perp et E_z . Quelle est la valeur propre de \hat{H} correspondante ?

Dans la suite, on supposera que l'état du système dans la direction z reste dans le fondamental, et l'on ne s'intéressera plus qu'aux propriétés du hamiltonien \hat{H}_{xy} .

2. Montrer que les énergies propres de $\hat{H}_{x,y}$ sont de la forme $E_n = \hbar\omega_\perp(n+1)$ où n est un entier naturel. Quelle est la dégénérescence de E_n ?
3. Soit \hat{L}_z le moment cinétique selon z . Montrer sans calcul que \hat{H}_{xy} et \hat{L}_z commutent.
4. Dans les questions qui suivent on cherche à construire la base propre commune à $\hat{H}_{x,y}$ et \hat{L}_z décrivant un condensat en rotation. On pose $a_0 = \sqrt{\hbar/m\omega_\perp}$ et on introduit les opérateurs créations et annihilation \hat{a}_x et \hat{a}_y dans les deux directions x et y .
 - (a) Rappeler l'expression des opérateurs $\hat{a}_{x,y}$ en fonction des opérateurs positions \hat{x} et \hat{y} et impulsion \hat{p}_x et \hat{p}_y .
 - (b) Rappeler les relations de commutations satisfaites par les opérateurs $\hat{a}_{x,y}$ et $\hat{a}_{x,y}^\dagger$.
 - (c) Exprimer $\hat{H}_{x,y}$ et \hat{L}_z en fonction des opérateurs $\hat{a}_{x,y}$ et $\hat{a}_{x,y}^\dagger$.
 - (d) On définit

$$\hat{a}_\pm = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a}_x \pm i\hat{a}_y).$$

Calculer le commutateur $[\hat{a}_\sigma, \hat{a}_{\sigma'}^\dagger]$, avec $(\sigma, \sigma') \in \{+, -\}^2$.

- (e) En déduire sans calcul que les opérateurs $\hat{N}_{\sigma=\pm} = \hat{a}_{\sigma}^{\dagger}\hat{a}_{\sigma}$ sont co-diagonalisables et que leurs valeurs propres n_{σ} sont des entiers naturels.
- (f) Exprimer $\hat{H}_{x,y}$ et \hat{L}_z en fonction des opérateurs \hat{N}_{\pm} .
- (g) En déduire que les états

$$|n_+, n_-\rangle = \frac{(a_+^{\dagger})^{n_+}}{\sqrt{n_+!}} \frac{(a_-^{\dagger})^{n_-}}{\sqrt{n_-!}} |0\rangle,$$

où $|0\rangle$ désigne le fondamental de $\hat{H}_{x,y}$, forment une base propre commune de $\hat{H}_{x,y}$ et \hat{L}_z pour des valeurs propres que l'on précisera.

5. Dans la suite on notera $|+\rangle$ et $|-\rangle$ les états $|1, 0\rangle$ et $|0, 1\rangle$ et on se place en coordonnées polaires (ρ, θ) .

- (a) Donner l'expression de la fonction d'onde $\psi_0(\rho)$ de l'état fondamental.
- (b) En déduire que les fonctions d'ondes ψ_{\pm} décrivant les états $|\pm\rangle$ s'écrivent

$$\psi_{\pm}(\rho, \theta) = \frac{\rho}{\sqrt{\pi}a_0^2} e^{-\rho^2/2a_0^2} e^{\mp i\theta}.$$

- (c) Rappeler l'expression du courant de probabilité ainsi que le champ de vitesse associé en fonction du gradient de la phase χ de la fonction d'onde.
- (d) En déduire son expression dans les états $|0\rangle$ et $|\pm\rangle$.

Indication : on rappelle l'expression du gradient en coordonnées polaires

$$\nabla\chi = (\partial_{\rho}\chi)\mathbf{u}_{\rho} + (\partial_{\theta}\chi)\mathbf{u}_{\theta}/\rho.$$

- (e) Pourquoi les états $|\pm\rangle$ représentent-ils des tourbillons alignés selon l'axe z ?
6. On présente sur la Figure 1 le profil de densité dans le plan (x, y) d'un condensat de Rubidium mis en rotation.
- (a) Sachant que le rubidium est un alcalin (première colonne du tableau périodique), justifier que l'isotope ^{87}Rb soit un boson.
 - (b) Comparer le profil observé à la prédiction précédente. Commentaire ?
7. On constate sur la figure 1 qu'un tourbillon décentré précesse autour du centre du piège.
- (a) On prépare à $t = 0$ le système dans un état

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|+\rangle.$$

avec $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$. Si l'on suppose que comme précédemment le tourbillon est localisé sur les zéros de densité, montrer que cet état correspond à un tourbillon dont la position est donnée dans le plan (x, y) par les coordonnées cylindriques (ρ^*, θ^*) que l'on exprimera en fonction de $|\alpha|$ et $\phi = \arg(\alpha/\beta)$.

- (b) Quel est l'état du système à un instant t ultérieur ? En déduire que le tourbillon précesse autour du centre du piège à une pulsation que l'on calculera.

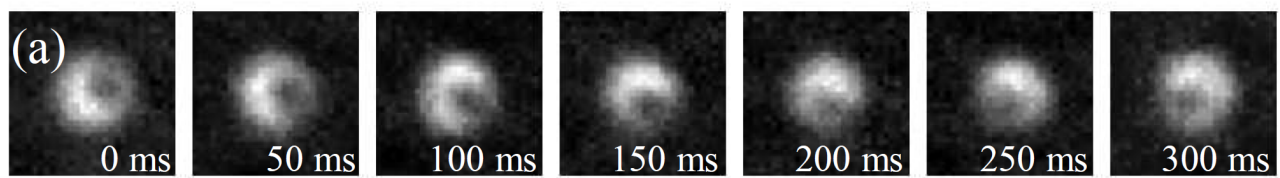


FIGURE 1 – Précession d'un tourbillon dans un condensat de Bose-Einstein de Rubidium 87. Données extraites de B. P. Anderson et al., PRL **85**, 2857 (2000)