

Mécanique quantique
25 février 2019

Cours n°6

Guide d'étude
en vue du
partiel

Formalisme de base (1)

Vous devez connaître par cœur :

- l'équation de Schrödinger
- l'interprétation probabiliste de ψ
- la valeur moyenne d'un opérateur et sa variance

Vous devez pouvoir trouver la probabilité dépendant du temps pour un état correspondant à la superposition d'états de différentes énergies.

Vous devez être à l'aise avec l'utilisation du formalisme de Dirac (ket, bra), et connaître les définitions d'un opérateur adjoint, hermitien, unitaire. Vous devez savoir calculer un déterminant et la trace d'une matrice, et comment ces grandeurs mathématiques sont reliées aux valeurs propres d'un opérateur.

Vous devez connaître des exemples de systèmes à deux niveaux :

- la polarisation d'un photon unique
- le spin $1/2$ d'une particule et sa mesure au moyen d'un dispositif de Stern & Gerlach

Vous devez être à l'aise avec l'utilisation du formalisme tensoriel pour décrire deux particules

Représentation (x,p)

Vous devez être à l'aise pour passer alternativement de la notation d'une fonction d'onde en ket/bra à sa notation en représentation soit position soit impulsion

Vous devez connaître la définition d'une fonction delta comme limite d'un paquet d'ondes gaussien, et pouvoir effectuer la transformée de Fourier de ce paquet d'onde.

Vous devez savoir par cœur la **relation de dispersion de Heisenberg** et savoir utiliser cette relation pour estimer la taille des états liés d'une particule dans un puits de potentiel (ex : atome)

Vous devez connaître la normalisation des états propres de l'opérateur impulsion, et des états propres de l'opérateur position.

Vous devez pouvoir exprimer l'opérateur identité en fonction de ces états, et être capable de l'utiliser pour exprimer une fonction d'onde comme une intégrale sur les kets $|x\rangle$ ou $|p\rangle$.

Vous devez savoir exprimer $|x\rangle$ en fonction de $|p\rangle$

Vous devez connaître l'action de l'opérateur impulsion dans la représentation $\{x\}$ en position

Puits de potentiel

Nous attendons de vous que vous puissiez résoudre des problèmes élémentaires comme les états propres d'un puits infini à 1D et à 3D.

Oscillateur harmonique : vous devez connaître

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a}^\dagger + \hat{a}) \quad \hat{p} = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (\hat{a}^\dagger - \hat{a}) \quad [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{I}$$

et savoir par cœur l'action de ces opérateurs sur les états propres du Hamiltonien

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

Vous devez être capable de manipuler ces opérateurs afin de calculer des valeurs moyennes.

Il est bon de connaître la définition d'un **état cohérent** (voir le TD) et comment il s'exprime en fonction des états propres de l'oscillateur harmonique. Ces états cohérents forme une base complète de l'espace des états de l'oscillateur harmonique. Cette notion d'états cohérents quasi-classiques est fondamentale en optique quantique.

Moment angulaire

Vous devez connaître les relations de commutation entre les composantes de l'opérateur $\hat{\vec{J}}$

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\hbar \epsilon_{i,j,k} \hat{J}_k$$

et vous devez être capable de dériver les relations de commutation entre les opérateurs :

$$\hat{J}^2, \hat{J}_z, \hat{J}_+, \hat{J}_-$$

$$\hat{J}_{\pm} = \hat{J}_x \pm i\hat{J}_y$$

Vous devez savoir calculer les éléments de matrice de ces opérateurs dans la base des états propres communs à (\hat{J}^2, \hat{J}_z) et vous devez savoir prouver que $2j$ est nécessairement entier.

Pour cela, vous devez mémoriser les relations

$$\hat{J}^2 |j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1) |j, m\rangle$$

$$\hat{J}_z |j, m\rangle = \hbar m |j, m\rangle$$

$$\hat{J}_{\pm} |j, m\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} |j, m \pm 1\rangle$$

Moment angulaire orbital à 3D

Vous devez connaître les formules qui donnent les composantes en coordonnées cartésiennes de l'opérateur qui définit le moment cinétique orbital par rapport à l'origine d'une particule ponctuelle.

$$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}} \qquad \hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

Fonctions propres de \hat{L}^2 et \hat{L}_z :

harmoniques sphériques $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$

$$\hat{L}^2 Y_{l,m}(\theta, \varphi) = l(l+1)\hbar^2 Y_{l,m}(\theta, \varphi)$$

$$\hat{L}_z Y_{l,m}(\theta, \varphi) = m\hbar Y_{l,m}(\theta, \varphi)$$

$$\text{dépendance en } \varphi : Y_{l,m}(\theta, \varphi) = F_{l,m}(\theta) e^{im\varphi}$$

Premières harmoniques sphériques :

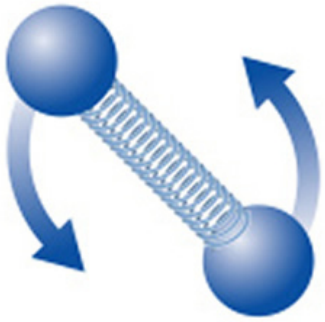
$$l = 0 \qquad Y_{0,0}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$l = 1 \qquad Y_{1,1}(\theta, \varphi) = -\frac{3}{\sqrt{8\pi}} \sin \theta e^{i\varphi}$$

$$Y_{1,0}(\theta, \varphi) = \frac{3}{\sqrt{4\pi}} \cos \theta$$

$$Y_{1,-1}(\theta, \varphi) = \frac{3}{\sqrt{8\pi}} \sin \theta e^{-i\varphi}$$

Le rotateur rigide : énergie de rotation d'une molécule diatomique



La molécule peut être représentée par deux atomes de masse M séparés par une distance R . Classiquement, la molécule a une énergie de rotation :

$$E_{\text{rot}} = \frac{L^2}{2I}$$

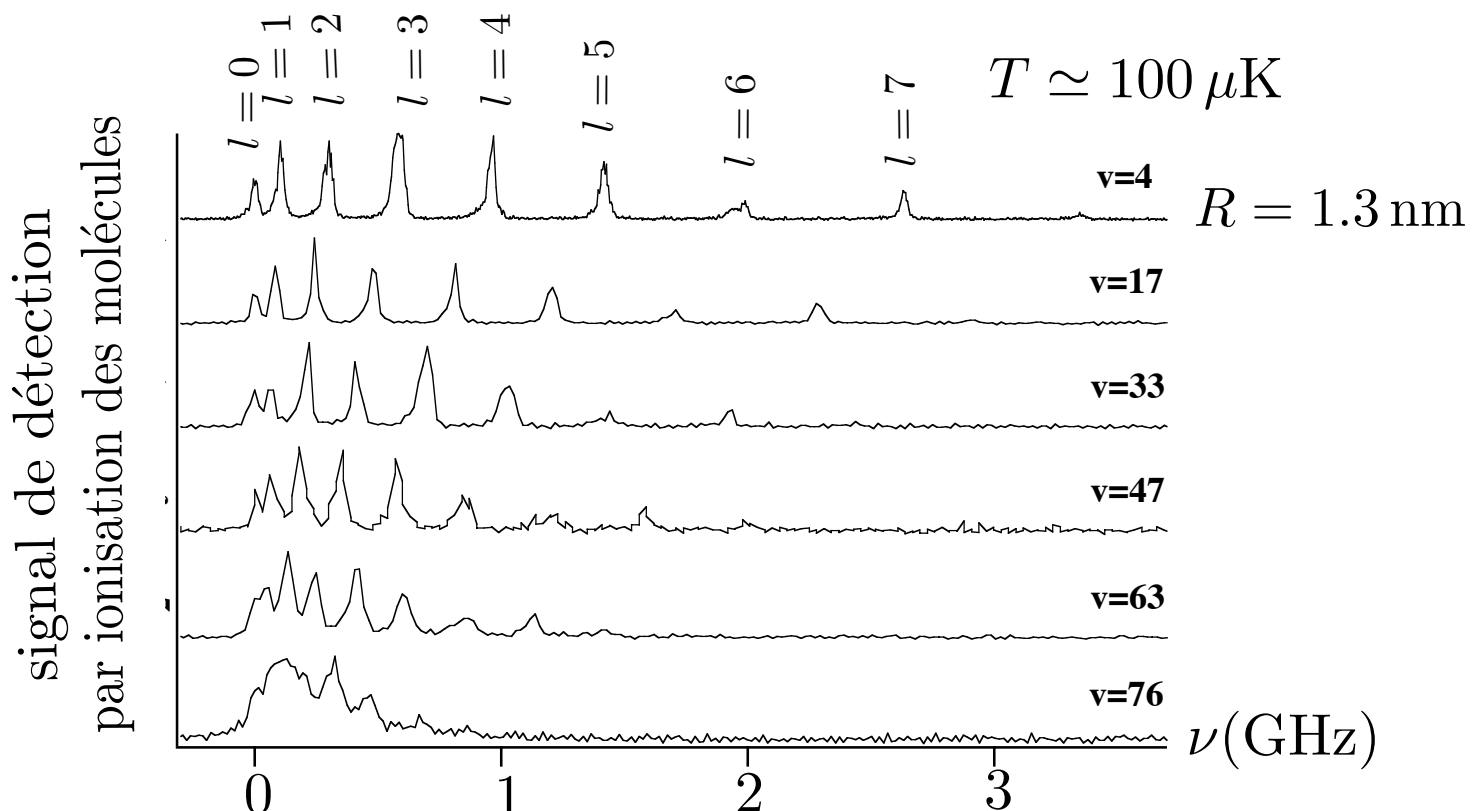
$I = \frac{1}{2}MR^2$ moment d'inertie du système

L moment cinétique / au centre de gravité

Dans le régime quantique, ce résultat devient :

$$E_{\text{rot}}(l) = \frac{\hbar^2}{2I}l(l+1) \rightarrow E_{\text{rot}}(l) - E_{\text{rot}}(l-1) = \frac{\hbar^2}{I}l$$

Spectre de rotation de molécules froides de Cs_2 (Pierre Pillet)



Moment angulaire et moment magnétique

Connaître la relation de proportionnalité entre le moment magnétique et le moment angulaire :

$$\hat{\vec{\mu}} = \gamma \hat{\vec{J}} \quad \gamma : \text{facteur gyromagnétique}$$

dans un champ magnétique \vec{B} : $\hat{H}_{\text{mag}} = -\hat{\vec{\mu}} \cdot \vec{B}$

Un système complexe, comme un atome ou un noyau, possède toute une série de niveaux d'énergie, chaque niveau étant un sous-espace propre de \hat{J}^2

La constante γ dépend alors du niveau considéré

Vous devez savoir comment cette relation s'écrit relation pour un spin 1/2 : **magnéton de Bohr**

$$\mu_B = \gamma_0 \hbar = \frac{-q\hbar}{2m_e} \simeq -9.27 \times 10^{-24} \text{ J T}^{-1}$$

Vous devez connaître les conséquences de la relation de proportionnalité entre μ et J :

- précession de Larmor
- résonance magnétique

Composition des moments angulaires

Cherchez à bien comprendre mes notes !

Il faut retenir que l'addition de deux moments angulaires j_1 et j_2 conduit à des valeurs possibles du moment angulaire j comprises entre

$$j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, \dots, |j_1 - j_2|$$

Vous devez savoir comment passer des états de la base "produit" $|j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle$

à la base des états "somme" $|j, m\rangle$

La situation la plus générale est celle où l'on connaît le spin total j et la valeur m , mais pas celles des particules individuelles.

Addition de deux spins 1/2 : vous devez connaître par cœur l'expression des états **singulet** et **triplet**. Vous devez connaître la démarche qui permet de déterminer ces états par l'action des opérateurs "échelle" \hat{J}_{\pm} .

Vous devez également retenir la symétrie de ces états dans l'échange entre les deux spins : lequel est symétrique ? lequel est anti-symétrique ?

Particules identiques

Connaître le **principe de Pauli** : quels types de particules sont des bosons, quels types de particules sont des fermions.

Dans l'échange de deux particules **identiques**, les fonctions d'onde de **bosons** sont **symétriques** tandis que les fonctions d'onde **fermions** sont **anti-symétriques**.

Notez bien l'**importance du terme "identiques"**. Cette règle s'applique aux systèmes composés de 3 électrons, ou 5 photons, mais pas sur un système composé d'un électron et d'un proton. Même si l'électron et le proton sont tous deux des fermions, ce ne sont pas des particules identiques. Par conséquent l'échange entre le proton et l'électron ne transforme pas la fonction d'onde totale de la même façon.

Savoir combiner la partie spatiale de la fonction d'onde (degrés de liberté externes) avec la partie liée au spin des particules (degré de liberté interne) : **interaction d'échange** entre deux spins $1/2$ (atome d'hélium, ferromagnétisme)

Méthodes d'approximation : perturbations stationnaires

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1 \quad \text{avec} \quad \lambda \ll 1$$

Partant des énergies du Hamiltonien H_0 et de ses états propres, connaître la recette qui permet de calculer les corrections sous la forme d'un développement en puissances du paramètre de perturbation, sans avoir à résoudre l'équation de Schrödinger. Dans le **cas non dégénéré**, la correction au premier ordre s'écrit :

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda \langle \psi_n^{(0)} | \hat{H}_1 | \psi_n^{(0)} \rangle$$

Si le premier ordre est nul, il faut aller au second ordre de la série :

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda^2 \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \psi_m^{(0)} | \hat{H}_1 | \psi_n^{(0)} \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$$

Retenir l'ordre des termes dans le dénominateur par l'effet **d'anti-croisement** entre deux niveaux couplés : les deux niveaux « se repoussent ».

Connaître la méthode à appliquer dans le **cas dégénéré** : “on diagonalise la perturbation dans le sous-espace des états dégénérés”.

Perturbations stationnaires dans le cas dégénéré

**Mantra : “on diagonalise la perturbation
dans le sous-espace des états dégénérés”.**

Il ne faut pas être effrayé par cette recette !

Ex.: considérons un état de \hat{H}_0 dégénéré deux fois
de fonctions propres ψ_a et ψ_b

Dans le sous-espace dégénéré, la perturbation s'écrit
sous la forme d'une matrice 2×2

$$\hat{H}_{1,\text{restreint}} = \begin{pmatrix} H_{1,aa} & H_{1,ab} \\ H_{1,ba} & H_{1,bb} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle \psi_a | H_1 | \psi_a \rangle & \langle \psi_a | H_1 | \psi_b \rangle \\ \langle \psi_b | H_1 | \psi_a \rangle & \langle \psi_b | H_1 | \psi_b \rangle \end{pmatrix}$$

Il suffit maintenant de diagonaliser cette matrice.

Les valeurs propres seront les corrections au 1er ordre
de l'énergie : **simple et efficace !**

Si on part d'un niveau qui a une dégénérescence plus
grande, mais pour lequel beaucoup d'éléments de
matrice sont nuls, il suffit d'exclure les états où les
éléments de matrice disparaissent. On réduit ainsi le
problème à une matrice qui n'a plus de lignes ou de
colonnes dont les termes sont tous nuls.