Mécanique Quantique

Examen

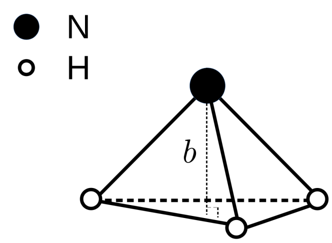
27 janvier 2023

Le double puits carré

Les 2 parties du sujet peuvent être traitées séparément.

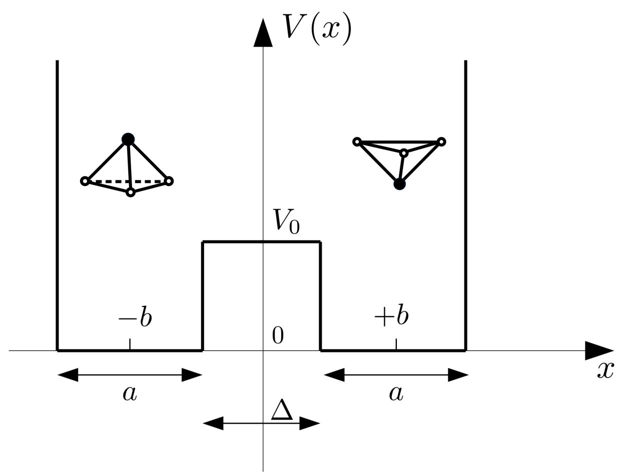
1 Un modèle simple pour la molécule d'ammoniac

La molécule d'ammoniac NH_3 a la forme d'une pyramide dont l'atome d'azote occupe le sommet et les trois atomes d'hydrogène forment la base, en forme de triangle équilatéral. La hauteur de la pyramide (distance de l'azote au plan des hydrogènes) vaut $b = 37,7\,10^{-12}$ m.



On s'intéresse ici à un mouvement particulier des atomes de cette molécule, dans lequel l'azote traverse le plan des hydrogènes pour aboutir à une nouvelle position d'équilibre, symétrique de la précédente. On parle d'inversion de la molécule d'ammoniac.
Pour cela, on considère le modèle simple décrit ci-dessous :

- l'atome d'azote, beaucoup plus lourd que ceux d'hydrogène, est immobile
- les atomes d'hydrogène forment un triangle équilatéral de côté invariable et dont l'axe passe toujours par l'atome d'azote
- l'énergie potentielle $V(x)$ du système est alors fonction d'un seul paramètre, la distance algébrique x entre l'azote et le plan défini par les 3 hydrogènes. $V(x)$ est un potentiel carré en forme de double puits infini, représenté ci-dessous.



Pour décrire l'inversion de la molécule d'ammoniac, on se propose d'étudier le mouvement quantique à une dimension d'une particule fictive de masse $m = 3\,m_H$ dans le potentiel $V(x)$, où m_H est la masse d'un atome d'hydrogène.

1. Montrer que l'on peut chercher les états stationnaires du hamiltonien du système sous la forme de fonctions paires ou impaires.

2. Déterminer les états stationnaires du hamiltonien d'énergie $0 < E < V_0$ sans les normaliser. Montrer que les énergies de ces états vérifient :

$$\tan ka = -\frac{k}{K} \coth\left[K\,\frac{\Delta}{2}\right] \qquad \text{pour les états pairs}$$

$$\tan ka = -\frac{k}{K} \operatorname{th}\left[K\,\frac{\Delta}{2}\right] \qquad \text{pour les états impairs}$$

   où on a posé

$$\hbar K = \sqrt{2m(V_0 - E)} \quad \text{et} \quad \hbar k = \sqrt{2mE}$$

3. Montrer que pour $E \ll V_0$ et $K\Delta \gg 1$, ces équations deviennent :

$$\tan ka = -\varepsilon_{\pm}\, ka \qquad \text{avec} \qquad \varepsilon_{\pm} = \frac{1 \pm 2e^{-K_0\Delta}}{K_0 a}$$

   où $\hbar K_0 = \sqrt{2mV_0}$ et où le signe $+$ correspond aux états pairs et le signe $-$ aux états impairs.
   Préciser la signification physique de l'hypothèse $K\Delta \gg 1$.
   Discuter le cas $V_0 = +\infty$.

4. En supposant que les 2 hypothèses de la question précédente sont vérifiées, proposer une détermination graphique des 2 premiers niveaux du double puits.
   Quelle est la parité de l'état fondamental? Quelle est celle du premier état excité?
   Préciser qualitativement la position de ces niveaux d'énergie par rapport à ceux obtenus dans le cas $V_0 = +\infty$.

5. On note k_+ et E_+ (resp. k_- et E_-) les vecteurs d'onde et énergies associés au premier état pair (resp. impair).
   Montrer que :

$$k_{\pm} \approx \frac{\pi}{a(1 + \varepsilon_{\pm})}$$

   En déduire :

$$\frac{E_+ + E_-}{2} \approx \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}\left(1 - \frac{2}{K_0 a}\right) \qquad \text{et} \qquad E_- - E_+ \approx \frac{4\hbar^2\pi^2}{2ma^2}\,\frac{e^{-K_0\Delta}}{K_0 a}$$

   Commenter.

6. Représenter l'allure des fonctions d'onde $\Psi_+(x)$ et $\Psi_-(x)$.
   Représenter également l'allure de

$$\Psi_1(x) = \frac{\Psi_+(x) - \Psi_-(x)}{\sqrt{2}} \qquad \text{et} \qquad \Psi_2(x) = \frac{\Psi_+(x) + \Psi_-(x)}{\sqrt{2}}$$

7. On suppose qu'à l'instant $t = 0$, la molécule d'ammoniac est dans l'état décrit par la fonction d'onde $\Psi_1(x)$.
   Décrire quantitativement l'évolution du système sachant que $E_- - E_+ \approx 10^{-4}$ eV pour la molécule NH_3.

2 Interaction d'échange

On considère à nouveau le double puits de potentiel $V(x)$ représenté sur la première page de l'énoncé. On note $|g\rangle$ et $|d\rangle$ les états fondamentaux dans les puits gauche et droit lorsque l'effet tunnel à travers la barrière centrale est négligeable. On choisit l'origine des énergies de telle sorte que $E_g = E_d = 0$ et on oublie les autres niveaux d'énergie des 2 puits. Le double puits est donc traité ici comme un système à 2 niveaux.
Dans la base $\{|g\rangle, |d\rangle\}$, le couplage tunnel entre les 2 puits est décrit par la matrice :

$$\begin{pmatrix} 0 & -J \\ -J & 0 \end{pmatrix}$$

où $J > 0$.

1. Quelles sont les niveaux d'énergie du système en présence du couplage tunnel entre les 2 puits? Quels sont les états correspondants?
   Faire le lien avec la partie précédente.

   Dans la suite, on place **2 fermions identiques de spin $\mathbf{\frac{1}{2}}$**, numérotés 1 et 2, dans le potentiel $V(x)$.
   On note par exemple $|1:g+\,;\,2:d-\rangle$ l'état où la particule 1 est dans l'état $|g\rangle$ avec la composante z de son spin égale à $+\frac{\hbar}{2}$ et la particule 2 est dans l'état $|d\rangle$ avec la composante z de son spin égale à $-\frac{\hbar}{2}$.
   On suppose que le couplage tunnel entres les 2 puits est indépendant du spin. On suppose également que les 2 particules interagissent répulsivement entre elles lorsqu'elles occupent le même puits mais que leur interaction lorsqu'elles occupent des puits différents est négligeable. On suppose par ailleurs l'interaction indépendante du spin des particules. Le potentiel d'interaction $\widehat{V}_{int}$ vérifie donc:

   $$\widehat{V}_{int}\left|1:g\sigma\,;\,2:g\sigma'\right\rangle = U\left|1:g\sigma\,;\,2:g\sigma'\right\rangle \qquad \widehat{V}_{int}\left|1:d\sigma\,;\,2:d\sigma'\right\rangle = U\left|1:d\sigma\,;\,2:d\sigma'\right\rangle$$

   $$\widehat{V}_{int}\left|1:g\sigma\,;\,2:d\sigma'\right\rangle = \widehat{V}_{int}\left|1:d\sigma\,;\,2:g\sigma'\right\rangle = 0$$

   où $U > 0$ et $\sigma = \pm$, $\sigma' = \pm$.

2. Montrer qu'on peut chercher une base de vecteurs propres communs à $\widehat{H}$, $\widehat{S}^2$ et $\widehat{S}_z$ où $\widehat{\vec{S}}$ est le spin total des 2 particules.

3. On note $s(s+1)\hbar^2$ les valeurs propres de $\widehat{S}^2$ et $s_z\hbar$ celles de $\widehat{S}_z$. Rappeler quelles sont les valeurs possibles de s et s_z et donner l'expression des vecteurs propres de $\widehat{S}^2$ et $\widehat{S}_z$ associés à ces valeurs dans la base des états $|\sigma, \sigma'\rangle$. Préciser leurs propriétés de symétrie.

On se place dans le sous-espace propre $s = 0$.

4. Quelle propriété doit vérifier la partie orbitale du vecteur d'état des 2 particules? Quelle est la dimension du sous-espace $s = 0$? Donner une base de ce sous-espace.

5. L'opérateur $\widehat{V}_{tunnel}$ décrivant l'effet tunnel des 2 particules à travers la barrière centrale s'écrit :

   $$\widehat{V}_{tunnel} = \widehat{V}^{(1)}_{tunnel} \otimes \widehat{\mathbb{I}}^{(2)} + \widehat{\mathbb{I}}^{(1)} \otimes \widehat{V}^{(2)}_{tunnel}$$

   où $\widehat{V}^{(i)}_{tunnel}$ et $\widehat{\mathbb{I}}^{(i)}$ sont repspectivement les opérateurs tunnel et identité de la particule i.
   Donner l'action de $\widehat{V}_{tunnel}$ sur chacun des vecteurs de la base déterminée à la question précédente.

6. Procéder de même pour l'opérateur $\widehat{V}_{int}$.
7. Déterminer les énergies propres des états $s = 0$. Représenter graphiquement la variation de ces énergies (normalisées à J) en fonction de $\frac{U}{J}$.
8. Dans le cas de particules en interaction forte ($J \ll U$), donner l'expression des énergies du sous-espace $s = 0$ à l'ordre le plus bas en $\frac{J}{U}$.
   Préciser les vecteurs propres correspondants.

On se place maintenant dans le sous-espace propre $s = 1$.

9. Reprendre les questions 4 à 6.
10. Représenter l'ensemble du spectre énergétique obtenu dans le cas de particules en interaction forte ($J \ll U$).
11. A suffisamment basse température, seuls les 2 niveaux de plus basse énergie sont peuplés. Montrer que :
    - les deux particules ne sont alors jamais dans le même puits
    - tout se passe comme si il existait une interaction entre les spins $\widehat{\vec{S}}_1$ et $\widehat{\vec{S}}_2$ des 2 particules de la forme :
    $$A + B\,\widehat{\vec{S}}_1.\widehat{\vec{S}}_2$$
    Cette interaction est appelée interaction d'échange.

    Déterminer les valeurs de A et B.

Désormais, les particules ne sont plus des fermions identiques de spin 1/2.

12. Quelle serait la dimension de l'espace des états **si les deux particules de spin $\frac{1}{2}$ étaient discernables**?
    Quels seraient les niveaux d'énergie? Le postulat de symétrisation est-il responsable de la levée de dégénérescence des 2 premiers niveaux observée pour $J \ll U$ par rapport au cas sans effet tunnel? Quel est son rôle?
13. Quels seraient les niveaux d'énergie **si les 2 particules étaient des bosons de spin nul**? Dans le cas $J \ll U$, montrer que l'on peut appliquer la théorie des perturbations au second ordre pour retrouver l'énergie de l'état fondamental et celle du premier état excité.