UNIVERSITE CADI AYYAD
FACULTE DES SCIENCES SEMLALIA
DEPARTEMENT DE PHYSIQUE
MARRAKECH

Année universitaire 2015/2016
(16 Janvier 2016 - Durée: 2H)

SMP/ S5

Examen de MÉCANIQUE QUANTIQUE

==========

Question de cours (3 points)

On considère le théorème suivant établi dans le cours :
A j_1 et j_2 fixés, les valeurs possibles de j sont :

$$j_{max},\ j_{max}-1,\ j_{max}-2,\ \ldots\ldots,\ j_{min}+1,\ j_{min}.$$

Montrer que : $j_{max} = j_1 + j_2$ et que : $j_{min} = |j_1 - j_2|$

Les j_1, j_2 et j sont les nombres quantiques associés aux moments cinétiques $\vec{J}_1$, $\vec{J}_2$ et $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$ respectivement.

On rappelle : - Dimension de la base découplée : $(2j_1+1)(2j_2+1)$

- Dimension de la base couplée : $\sum_{j_{min}}^{j_{max}} (2j+1)$

I. Oscillateur harmonique plan (7 points)

Un oscillateur harmonique plan est constitué d'une particule de masse m, de pulsation ω et d'énergie potentielle :

$$V(x,y) = \frac{1}{2} m\omega^2 \left(x^2 + y^2\right).$$

1) Ecrire l'hamiltonien H_{xy} du système.

2) Sachant que les niveaux d'énergie et les états propres de l'hamiltonien à une dimension sont : $E_{n_j} = \hbar\omega\left(n_j + \frac{1}{2}\right)$ et $\left|\varphi_{n_j}\right\rangle$ avec j = x , y

a) Donner les niveaux d'énergie et les états correspondants du système.

b) Expliciter les énergies des 3 premiers niveaux et leur dégénérescence. En déduire le degré de dégénérescence des autres niveaux.

3) $\{H_{xy}\}$, $\{\tilde{H}_x\}$, $\{H_{xy}, \tilde{H}_x\}$ et $\{\tilde{H}_x, \tilde{H}_y\}$ forment-ils des E.C.O.C. dans l'espace des états du système ? justifier votre réponse.

4) En plus de V(x,y), la particule est soumise à un potentiel de la forme $W(x) = \frac{1}{2}\lambda x^2$ et on note par H' le nouveau hamiltonien du système ; (λ étant une constante positive).

a) Donner les valeurs propres de H' et expliciter ses fonctions propres, notées φ'(x,y).

b) L'observable H' forme à elle seule un E.C.O.C. ? Justifier. On donnera les énergies des 3 premiers niveaux ; (on suppose que $\lambda \ll m\omega^2$).

5) Calculer la valeur moyenne de W(x) dans un état propre de H'.

Rappel : - La fonction propre d'un oscillateur linéaire s'écrit $\varphi_n(q) = A_n\, e^{-\frac{\alpha q^2}{2}}\, H_n(\sqrt{\alpha}\, q)$ avec :

$\alpha = \frac{m\omega}{\hbar}$, H_n étant le polynôme d'Hermite d'ordre n et A_n la constante de normalisation.

- L'observable position Q est définie, à partir des opérateurs création a^+ et annihilation a, par : $Q = \beta\,(a^+ + a)$ avec β une constante réelle et on a : $a\,|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle$ et $a^+|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle$.

II. Couplage spin-orbite et effet Zeeman (10 points)

On considère un électron p d'un atome de moment cinétique orbital $\vec{L}$ (ℓ =1) et de moment cinétique de spin $\vec{S}$ (s=1/2), dont l'hamiltonien H s'écrit, compte tenu du couplage entre $\vec{L}$ et $\vec{S}$:

$$H = H_0 + a\,\vec{L}\,.\,\vec{S}$$

où a est une constante réelle et positive (la constante de spin-orbite) et H_0 est l'hamiltonien du système en l'absence du couplage et associé à une énergie E_0.

1) On introduit le moment cinétique total $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ caractérisé par ses nombres quantiques j et m.

a) Exprimer les vecteurs de la base couplée $\{|\ell,s,j,m\rangle\}$ que l'on notera $\{|j,m\rangle\}$ en fonction de ceux de la base découplée $\{|\ell, m_\ell\rangle \otimes |s,m_s\rangle\}$ que l'on notera $\{|m_\ell,m_s\rangle\}$.

b) Utiliser la base $\{|j,m\rangle\}$ pour déterminer les énergies E_j du système et préciser leur dégénérescence et les kets associés. Résumer vos résultats dans un diagramme.

2) On soumet le système à un champ magnétique $\vec{B}$ dirigé suivant l'axe Oz.

a) Montrer que l'interaction du système avec $\vec{B}$ est régie par un hamiltonien H_B qui s'écrit :

$$H_B = \omega_0 (L_z + 2S_z)$$

avec $\omega_0 = -\gamma_0 B$ (pulsation de Larmor); γ_0 étant le rapport gyromagnétique orbital.

b) Déterminer les énergies E_B associées à H_B et préciser leur dégénérescence ainsi que les kets associés. Faire un diagramme d'énergie correspondant à : $H_0 + H_B$.

3) On considère maintenant l'hamiltonien total : $H_T = H_0 + H_B + a\vec{L}.\vec{S}$ et on suppose que le champ $\vec{B}$ est fort de telle sorte que le couplage spin-orbite est considéré comme une perturbation.

a) Déterminer les énergies E_T du système au premier ordre en perturbation.

b) Reprendre le diagramme précédent de la question 2b et compléter le. Quel est l'effet de la perturbation sur chaque niveau d'énergie?

c) Tracer l'évolution des niveaux d'énergie en fonction de l'intensité du champ $\vec{B}$.

Données :

Ci-contre la table des coefficients de Clebsch-Gordan pour 1x1/2.
Un signe $\sqrt{}$ est sous-entendu devant chaque coefficient ; exemple : $-1/3$ doit se lire : $-\sqrt{1/3}$.

1x1/2	3/2	
	3/2	
1 1/2	1	

	3/2 1/2	
	1/2 1/2	
1 −1/2	1/3 2/3	
0 1/2	2/3 −1/3	

	3/2 1/2	
	−1/2 −1/2	
0 −1/2	2/3 1/3	
−1 1/2	1/3 −2/3	

	3/2	
	−3/2	
−1 −1/2	1	

$$\vec{L}.\vec{S} = \frac{1}{2}(L_+S_- + L_-S_+) + L_zS_z$$

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

==========

Barème indicatif: **I.** 1) 0,5pts; 2) 2pts; 3) 1pt ; 4) 2,5pts ; 5) 1pts **II.** 1) 2,5pt; 2) 2,5pt; 3) 5pts

SMP/S5 Examen Janv. 2016 (1/6)

par A. Kaddouri

I/ à $V(x,y)$, on associe l'observable $V(X,Y) = \frac{1}{2} m\omega^2 (X^2+Y^2)$

1) et $H_{xy} = \frac{P^2}{2m} + V(X,Y) = \frac{P_x^2 + P_y^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 (X^2+Y^2)$

$= \frac{P_x^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 X^2 + \frac{P_y^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 Y^2 = H_x + H_y$ (0,5)

2.) a) $E_{xy} = E_x + E_y = \left(n_x + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega + \left(n_y + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$ (0,5)

$= (n_x + n_y + 1)\hbar\omega = (n+1)\hbar\omega$ avec $n = n_x + n_y = 0, 1, 2, .$

Etats propres : $|\varphi_{n_x}\rangle \otimes |\varphi_{n_y}\rangle \equiv |\varphi_{n_x}, \varphi_{n_y}\rangle$ noté : $|n_x, n_y\rangle$ Produit tensoriel. (0,5)

b) • 1er niveau : $n_x = n_y = 0 \Rightarrow E_{0,0} = \hbar\omega \rightarrow |0,0\rangle$ énergie non dégénérée

• 2ème niveau : $n_x = 1$ et $n_y = 0$ ou $n_x = 0$ et $n_y = 1$ $\Big\}$ $E_{1,0} = E_{0,1} = 2\hbar\omega \begin{cases} |1,0\rangle \\ |0,1\rangle \end{cases}$ énergie 2 fois dégénérée

(0,25 x 4 = 1)

• 3ème niveau : $n_x = 1$ $n_y = 1$, $n_x = 2$ $n_y = 0$, $n_x = 0$ $n_y = 2$ $\Big\}$ $E_{11} = E_{20} = E_{02} = 3\hbar\omega \begin{cases} |1,1\rangle \\ |2,0\rangle \\ |0,2\rangle \end{cases}$ énergie 3 fois dégénérée

• On en déduit le degré de dégénérescence $g = n_x + n_y + 1 = n + 1$

3.) Dans l'espace des états :

• $\{H_{xy}\}$ ne forme pas E.C.O.C car la vp E_{xy} est dégénérée $(n+1)$ fois

• $\{H_x\}$ " " " " car " E_x est n_y fois dégénérée

(0,25 x 4 = 1)

• $\{H_{xy}, H_x\}$ forme E.C.O.C car n_x et n_y sont fixés puisque la somme $n_x + n_y$ est fixée et n_x est fixé donc n_y est fixé.

• $\{H_x, H_y\}$ forme E.C.O.C car n_x et n_y sont fixés.

par A. Kaddouri

4/ $W(x) \to W(X) = \frac{1}{2}\lambda X^2 \Rightarrow H' = \frac{P_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2 + \frac{1}{2}\lambda X^2 + H_y$

a) $H' = \frac{P_x^2}{2m} + \frac{1}{2}(m\omega^2 + \lambda)X^2 + H_y = \frac{P_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega'^2 X^2 + H_y$

avec $\omega'^2 = \omega^2 + \lambda/m$ (0,5) (0,5)

Les énergies sont donc : $E' = \hbar\omega'(n_x + \frac{1}{2}) + \hbar\omega(n_y + 1/2)$ $\quad n_x, n_y = 0, 1, 2 \dots$

Les fonctions propres : $\varphi'_{n_x,n_y}(x,y) = A_{n_x} \exp(-\alpha' \frac{x^2}{2}) H_{n_x}(\sqrt{\alpha'}x) A_{n_y} \exp(-\frac{\alpha y^2}{2}) H_{n_y}(\sqrt{\alpha'}y)$

avec $\alpha' = \frac{m\omega'}{\hbar}$ et $\alpha = \frac{m\omega}{\hbar}$ (1)

b) • ω' étant différente de ω et par suite à chaque E' correspond une et une seule fonction propre ca'd E' ne sont pas dégénérés $\Rightarrow \{H'\}$ forme E.C.O.C (1) = 0,25×4

• niveau 1 $\to E'_{0,0} = \frac{\hbar\omega'}{2} + \frac{\hbar\omega}{2} \to \varphi'_{00}$

• niveau 2 $\to E'_{0,1} = \frac{\hbar\omega'}{2} + \frac{3\hbar\omega}{2} \to \varphi'_{01}$ $\quad E'_{0,1} < E'_{1,0}$ car $\lambda > 0$

• niveau 3 $\to E'_{1,0} = \frac{3\hbar\omega'}{2} + \frac{\hbar\omega}{2} \to \varphi'_{10}$ $\quad E'_{1,0} < E_{0,2}$ car $\lambda \ll m\omega^2$

5°) $W(x) = \frac{1}{2}\lambda X^2 \Rightarrow \langle n_x n_y | W(X) | n_x n_y \rangle = \frac{1}{2}\lambda \langle n_x n_y | X^2 | n_x n_y \rangle$

avec $X^2 = [\beta(a_x^+ + a_x)]^2 = \beta^2(a_x^{+2} + a_x^2 + a_x^+ a_x + a_x a_x^+)$ car $[a_x^+, a_x] \neq 0$.

(0,5) $\begin{cases} a_x^{+2}|n_x n_y\rangle = \sqrt{n_x+1}\sqrt{n_x+2}\,|n_x+2, n_y\rangle \Rightarrow \langle a_x^{+2}\rangle = 0 \\ a_x^2|n_x n_y\rangle = \sqrt{n_x}\sqrt{n_x-1}\,|n_x-2, n_y\rangle \Rightarrow \langle a_x^2\rangle = 0 \end{cases}$

(0,5) $\begin{cases} a_x^+ a_x|n_x n_y\rangle = \sqrt{n_x}\, a_x^+|n_x-1, n_y\rangle = n_x|n_x, n_y\rangle \Rightarrow \langle a_x^+ a_x\rangle = n_x \\ a_x a_x^+|n_x n_y\rangle = \sqrt{n_x+1}\, a_x|n_x+1, n_y\rangle = n_x+1|n_x, n_y\rangle \Rightarrow \langle a_x a_x^+\rangle = n_x+1 \end{cases}$

(0,5) $\Rightarrow \langle X^2\rangle = (2n_x+1)\beta^2$ soit $\langle W(X)\rangle = \frac{1}{2}\lambda\beta^2(2n_x+1) = \lambda(n_x+\frac{1}{2})\beta^2$

Rq : • Dans cette question, la notation $|n_x, n_y\rangle$ désigne $|\varphi'_{n_x,n_y}\rangle$ et non $|\varphi_{n_x,n_y}\rangle$

• $|\varphi_{n_x,n_y}\rangle$ ne sont pas les propres de H'

Cet exercice I est noté sur 8 points et non 7 points; soit un point de plus à prendre en considération

par A. Kaddouri

II. Électron p : $\begin{cases} l = 1 \rightarrow m_l = 1, 0, -1 \rightarrow 3 \text{ kets} \\ s = 1/2 \rightarrow m_s = 1/2, -1/2 \rightarrow 2 \text{ kets} \end{cases} \Rightarrow 3 \times 2 = 6$ kets $|m_l, m_s\rangle$ de la base découplée

1°) $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \Rightarrow j = l+s, l+s-1, \dots, |l-s|$

soit 2 valeurs de j : $j \begin{cases} = 3/2 \rightarrow m = 3/2, 1/2, -1/2, -3/2 \rightarrow 4 \text{ kets} \\ = 1/2 \rightarrow m = 1/2, -1/2 \rightarrow 2 \text{ kets} \end{cases}$ $4 + 2 = 6$ kets $|j, m\rangle$ de la base couplée

a)

• $|j, m\rangle$ en fonction des $|m_l, m_s\rangle$: $|j, m\rangle = \sum_{m_l=-l}^{l} \sum_{m_s=-s}^{s} \langle m_l, m_s | j\, m\rangle\, |m_l, m_s\rangle$

En utilisant la table des coef. C.G, on aura :

$$\begin{cases} |3/2, 3/2\rangle = |1, 1/2\rangle \; ; \; |3/2, 1/2\rangle = \sqrt{1/3}\, |1, -1/2\rangle + \sqrt{2/3}\, |0, 1/2\rangle \\ |3/2, -1/2\rangle = \sqrt{2/3}\, |0, -1/2\rangle + \sqrt{1/3}\, |-1, 1/2\rangle \; ; \; |3/2, -3/2\rangle = |-1, -1/2\rangle \\ |1/2, 1/2\rangle = \sqrt{2/3}\, |1, -1/2\rangle - \sqrt{1/3}\, |0, 1/2\rangle \text{ et } |1/2, -1/2\rangle = \sqrt{1/3}\, |0, -1/2\rangle - \sqrt{2/3}\, |-1, 1/2\rangle \end{cases}$$

1

b) $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \Rightarrow J^2 = L^2 + S^2 + 2\vec{L}\cdot\vec{S}$

0,5

$\Rightarrow H|j, m\rangle = H_0 |j, m\rangle + \frac{a}{2}(J^2 - L^2 - S^2)|j, m\rangle$ avec $|j, m\rangle \equiv |l, s, j, m\rangle$

$= E_0 + \frac{a\hbar^2}{2}[j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)]\, |j, m\rangle$

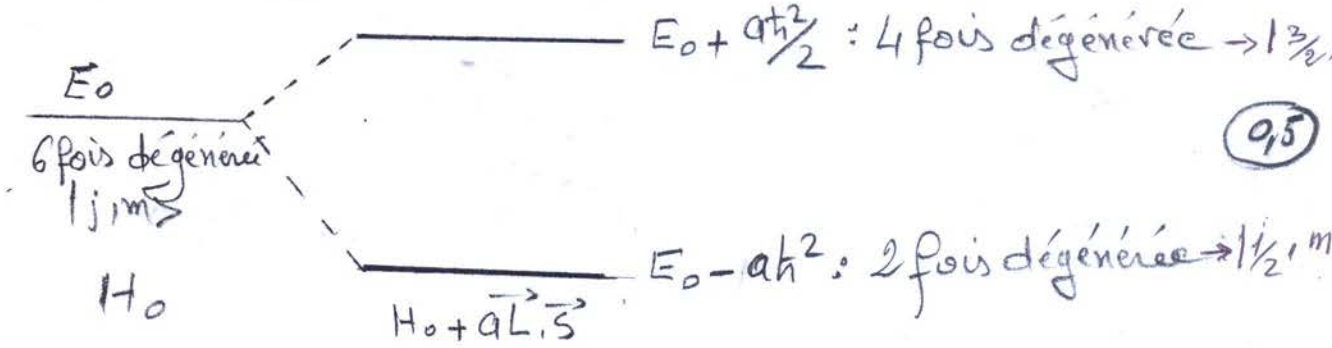
avec $l = 1$ et $s = 1/2 \rightarrow H|j, m\rangle = E_0 + \frac{a\hbar^2}{2}\left[j(j+1) - \frac{11}{4}\right]|j, m\rangle = E_j |j, m\rangle$

Chaque E_j est donc $2j+1$ dégénérée.

0,5

$j = 3/2 \rightarrow E_{3/2} = E_0 + \frac{a\hbar^2}{2}$ associée aux 4 kets : $|3/2, 3/2\rangle, |3/2, 1/2\rangle, |3/2, -1/2\rangle, |3/2, -3/2\rangle$

$j = 1/2 \rightarrow E_{1/2} = E_0 - \alpha\hbar^2$,, aux 2 kets : $|1/2, 1/2\rangle$ et $|1/2, -1/2\rangle$



0,5

2)

a) $H_B = -\vec{\mu}_T \cdot \vec{B}$ avec $\vec{\mu}_T = \vec{\mu}_L + \vec{\mu}_S = \gamma_0 \vec{L} + \gamma_S \vec{S}$ et $\gamma_S = 2\gamma_0$ pour e^-

0,5

$\Rightarrow H_B = -\gamma_0(\vec{L} + 2\vec{S}) \cdot \vec{B} = -\gamma_0 (L_z + 2S_z) \cdot B$ car $\vec{B} \parallel \vec{oz}$.

soit $H_B = \omega_0 (L_z + 2S_z)$ avec $\omega_0 = -\gamma_0 B$ $\left(= \frac{e}{2m} B\right)$.

b) $H_B |m_\ell, m_s\rangle = \omega_0 \left[L_z |m_\ell, m_s\rangle + 2 S_z |m_\ell, m_s\rangle \right]$

0,5 $\rightarrow$ $= \omega_0 \hbar (m_\ell + 2 m_s) |m_\ell, m_s\rangle = E_{m_\ell, m_s} |m_\ell, m_s\rangle = E_B |m_\ell, m_s\rangle$

et on aura :

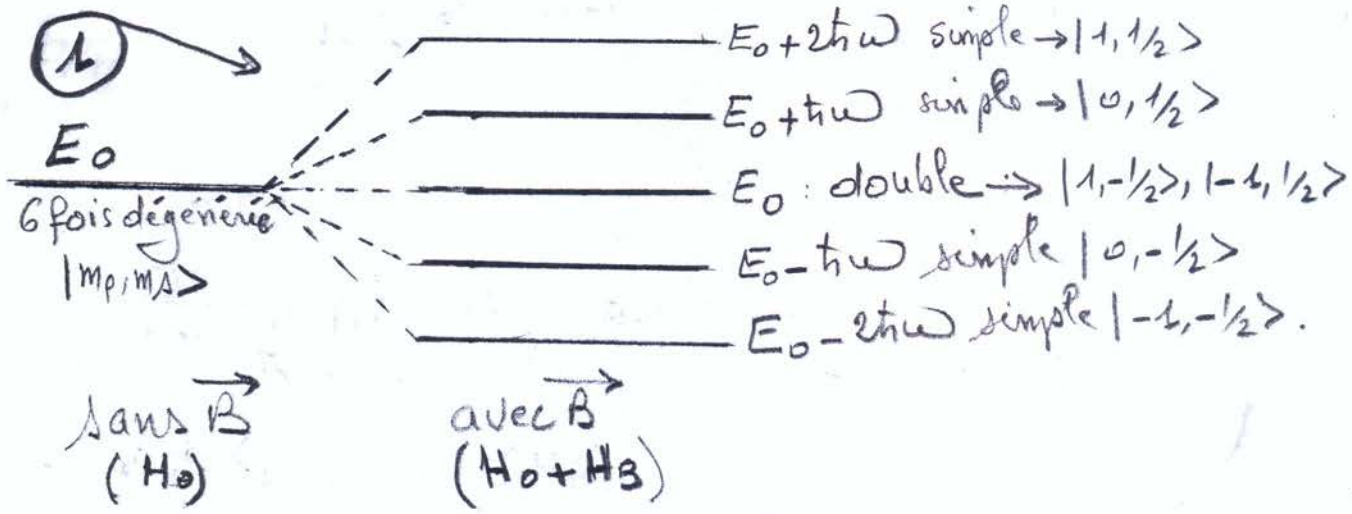
0,5

$E_{1,1/2} = 2\hbar\omega$ associée à $|1, 1/2\rangle$; $E_{-1,-1/2} = -2\hbar\omega$ associée à $|-1, -1/2\rangle$

$E_{0,1/2} = \hbar\omega$ associée à $|0, 1/2\rangle$; $E_{0,-1/2} = -\hbar\omega$ associée à $|0, -1/2\rangle$

$E_{1,-1/2} = E_{1,1/2} = 0$ double associée aux kets $|1, -1/2\rangle$ et $|-1, 1/2\rangle$

1



3°) $H_T = H_0 + H_B + a\vec{L}\cdot\vec{S}$ avec $a\vec{L}\cdot\vec{S}$ perturbation.

a) Au 1er ordre, la correction à l'énergie non dégénérée = valeur moyenne de $a\vec{L}\cdot\vec{S}$ dans l'état non perturbé : $\Delta\varepsilon_1 = \langle m_\ell, m_s | a\vec{L}\cdot\vec{S} | m_\ell, m_s\rangle$

$E_T = E_0 + E_{m_\ell, m_s} + \Delta\varepsilon_1$ 0,5

sachant que $\vec{L}\cdot\vec{S} = \frac{1}{2}(L_+ S_- + L_- S_+) + L_z \cdot S_z$

avec $\langle m_\ell, m_s | L_+ S_- | m_\ell, m_s\rangle = C_+(\ell, m_\ell) C_-(s, m_s) \langle m_\ell, m_s | m_\ell + 1, m_s - 1\rangle = 0$

de même $\langle m_\ell, m_s | L_- S_+ | m_\ell, m_s\rangle = 0$ 0,5

alors que $\langle m_\ell, m_s | L_z S_z | m_\ell, m_s\rangle = \hbar^2 m_\ell m_s$.

$\Longrightarrow \Delta\varepsilon_1 = \hbar^2 a\, m_\ell \cdot m_s$ 0,5

Donc $E_T = E_0 + \omega_0\hbar(m_p + 2m_s) + \hbar^2 a\, m_p . m_s$

0,5

Ainsi pour les niveaux d'énergie $E_0 + 2\hbar\omega$ et $E_0 - 2\hbar\omega$ (non dégénéré)

on a : $\Delta\varepsilon_1 = a\hbar^2/2$

De même pour les énergie $E_0 + \hbar\omega$ et $E_0 - \hbar\omega_0$, on a : $\Delta\varepsilon_1 = 0$

Pour le niveau d'énergie E_0 dégénéré 2 fois, on doit diagonaliser

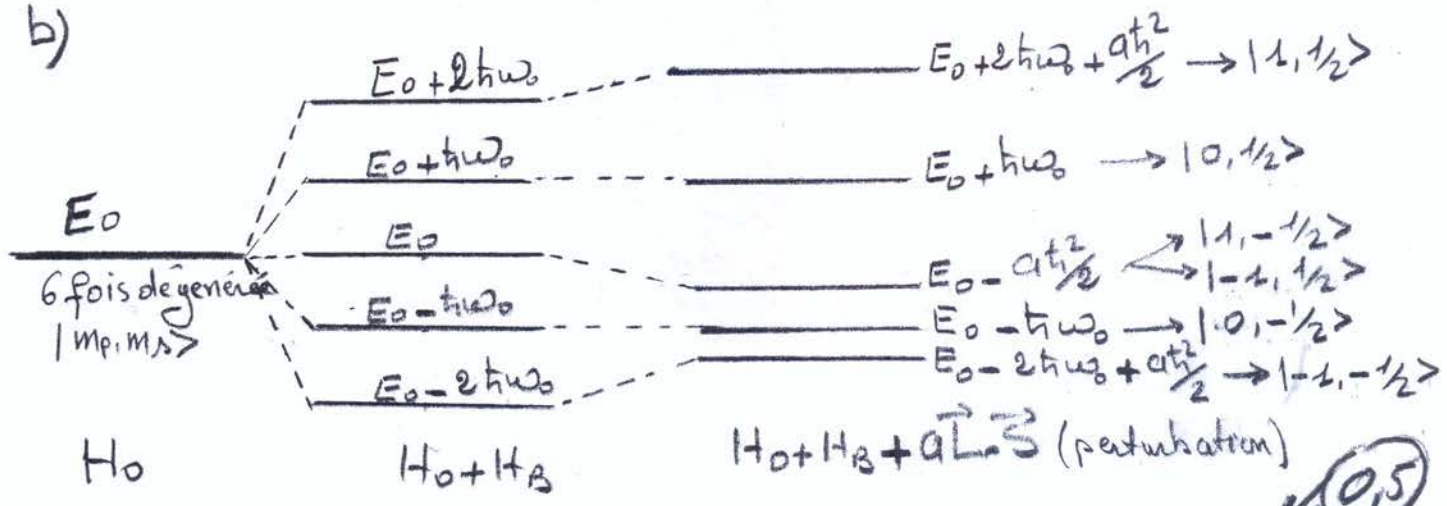
0,5 la matrice de $a.\vec{L}.\vec{S}$ dans le sous espace $\{|1,-1/2\rangle ; |-1,1/2\rangle$

$$(a\vec{L}.\vec{S}) = \begin{pmatrix} -a\hbar^2/2 & 0 \\ 0 & -a\hbar^2/2 \end{pmatrix} = -\frac{a\hbar^2}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \text{matrice diagonale}$$

→ une seule valeur propre : $-a\hbar^2/2$

1

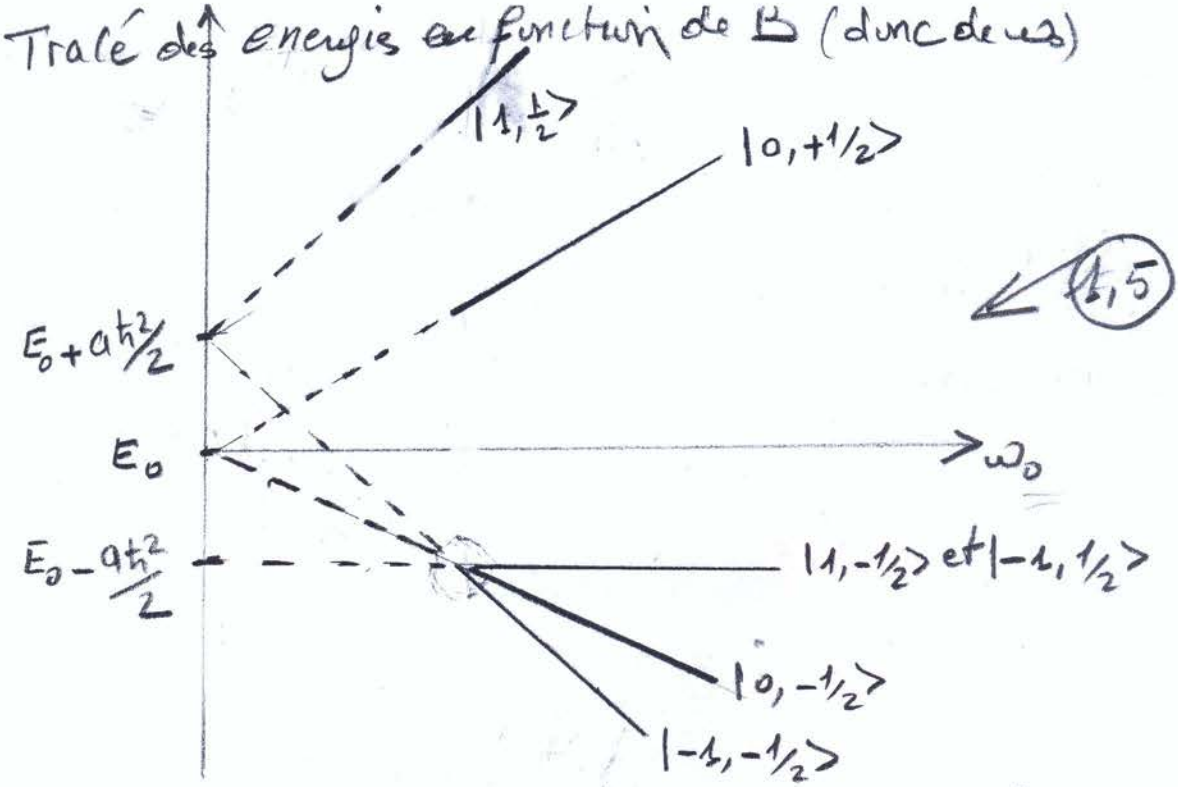
b)



0,5

Ainsi : La perturbation déplace les niveaux $E_0 + 2\hbar\omega_0$ et $E_0 - 2\hbar\omega_0$ de la même quantité : $a\hbar^2/2$, n'affecte pas les niveaux simples $E_0 + \hbar\omega_0$ et $E_0 - \hbar\omega_0$ et elle ne lève pas la dégénérescence du niveau E_0 mais le déplace d'une quantité $-a\hbar^2/2$.

c) Tracé des energies en fonction de B (donc de ω_0)



Question du Cours

1

On sait que $m = m_1 + m_2$ et que $m_{1\,max} = j_1$ et $m_{2\,max} = j_2$; par conséquent, si l'on fixe m_1 et m_2 à leur valeur maximale, on obtient la valeur maximale de m : $m_{max} = j_1 + j_2$. C'est aussi la valeur maximale pour j car aucune valeur de j supérieur à $j_1 + j_2$ n'est réalisée.

Donc : $j_{max} = j_1 + j_2$

2

Pour obtenir j_{min} , on doit évaluer le nombre de kets $|j, m\rangle$ à j_1 et j_2 fixés.

Kets de la Base découplée sont $\{|j_1,\ j_2,\ m_1,\ m_2,\rangle\}$ et on a : $S1 = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ éléments.

Kets de la base couplée sont $\{|j_1,\ j_2,\ j,\ m\rangle\}$ et on a : $S2 = \sum_{j_{min}}^{j_{max}}(2j + 1)$ éléments.

Développons la somme S2 :

$S2 = 2\sum_{J=J_{min}}^{J_{max}} j + \sum_{J=J_{min}}^{J_{max}} 1 = (j_{max} + j_{min})\,N + N = (j_{max} + j_{min} + 1)\,N$ avec $N = j_{max} - j_{min} + 1$

Donc $S2 = (j_{max} + 1 + j_{min})\,(j_{max} + 1 - j_{min}) = (j_{max} + 1)^2 - (j_{min})^2$

Sachant que S2 = S1 et que $j_{max} = j_1 + j_2$, on aura :

$$(j_{min})^2 = (j_1 + j_2 + 1)^2 - (2j_1 + 1)(2j_2 + 1) = (j_1 - j_2)^2$$

Et par conséquent : $j_{min} = |j_1 - j_2|$

Par A. KADDOURI