

Physique Quantique - 1^o A

2h - sans document ni calculatrice

8 Juin 2011

Les vecteurs sont notés en gras : \mathbf{u} .

Exercice 1 : oscillations de torsion de la molécule d'éthylène

On considère la molécule d'éthylène C_2H_4 composée des deux groupes CH_2 en liaison covalente, Figure 1. On note α l'angle entre les deux "tiges" CH_2 . La double liaison de valence se comporte comme un ressort de torsion : la molécule est donc le siège d'oscillations de torsion que l'on peut décrire par l'énergie potentielle $V(\alpha) = V_0(1 - \cos \alpha)$. On note J le moment d'inertie (réduit) de l'ensemble oscillant.

Q1. Tracer l'énergie potentielle $V(\alpha)$ pour $\alpha \in [0, 2\pi]$. Indiquez sur votre graphe les positions d'équilibre stables (cercle) et instable (croix).

On s'intéresse aux petites oscillations autour de l'équilibre stable. On se place pour l'instant dans le cadre de la mécanique classique.

Q2. Ecrire le développement de Taylor de $V(\alpha)$ à l'ordre 2 autour de ce point d'équilibre. Montrer que ce développement peut s'écrire $V_a(\alpha) = \frac{1}{2}k\alpha^2$ et exprimer k en fonction de V_0 .

Q3. Ecrire l'énergie cinétique de rotation en fonction du moment d'inertie J et de la vitesse angulaire $d\alpha/dt$.

Q4. En invoquant la conservation de l'énergie mécanique, déterminer l'équation du mouvement.

Q5. Montrer que la solution de cette équation correspond à des oscillations de pulsation ω . Déterminer ω en fonction de J et k .

On étudie désormais les mouvements d'oscillation dans le cadre quantique. Le rôle de x dans l'oscillateur harmonique linéaire (i.e., vu en cours) est ici joué par la variable angulaire α . On décrit le système par une fonction d'onde $\varphi(\alpha)$.

Q6. Que représente la quantité $|\varphi(\alpha)|^2 d\alpha$?

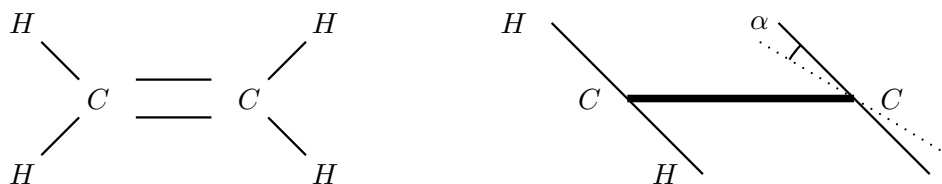


FIGURE 1 – Molécule d'éthylène C_2H_4 . Les deux "tiges" CH_2 font un angle α .

On admet que l'Hamiltonien s'écrit

$$H[\varphi(\alpha)] = -\frac{\hbar^2}{2J} \frac{d^2\varphi(\alpha)}{d\alpha^2} + \frac{1}{2} J\omega^2 \alpha^2 \varphi(\alpha)$$

- Q7.** Identifier dans H ci-dessus : a) le terme représentant l'énergie cinétique ;
b) le terme représentant l'énergie potentielle.
- Q8.** Ecrire l'équation aux valeurs propre de H permettant de déterminer les niveaux d'énergie.
- Q9.** Montrer que cette équation est équivalente à celle d'un oscillateur harmonique linéaire de masse m et de pulsation ω , et exprimer m en fonction de J .
- Q10.** En déduire l'expression des niveaux d'énergie de torsion de la molécule d'éthylène.
- Q11.** A quelle condition sur l'amplitude des oscillations ces niveaux d'énergie constituent-ils une bonne approximation de la réalité ?

Exercice 2 : système de deux électrons en interaction

Dans toute cette partie, \mathcal{E} représente l'espace des états de spin d'un électron, et $\mathcal{B} = \{|z+\rangle, |z-\rangle\}$ est la base des états propre de l'observable S_z mesurant la composante du spin selon l'axe Oz .

On considère un système constitué de deux électrons "1" et "2" dont on néglige ici les degrés de liberté spatiaux. On note respectivement \mathbf{S}^1 et \mathbf{S}^2 les observables de spin des électrons "1" et "2", cf. figure 2. Les états de spin du système sont représentés dans l'espace $\mathcal{E}_{12} = \mathcal{E} \otimes \mathcal{E}$ engendré par la base orthonormée

$$\mathcal{B}_{12} = \{|z+\rangle \otimes |z+\rangle, |z+\rangle \otimes |z-\rangle, |z-\rangle \otimes |z+\rangle, |z-\rangle \otimes |z-\rangle\}.$$

Si vous le souhaitez, vous pourrez, dans votre copie, utiliser la notation condensée $|++\rangle$ pour $|z+\rangle \otimes |z+\rangle$, etc.

Q12. On considère l'observable $S_z \otimes \mathbf{1}$. Quelle(s) grandeur(s) mesure cette observable ? Déterminer sa matrice (4×4), et calculer ses valeurs propres. Que représentent physiquement ces valeurs propres ?

Q13. Soit le vecteur $\frac{1}{\sqrt{2}}(|z+\rangle \otimes |z+\rangle + |z-\rangle \otimes |z-\rangle)$ On mesure l'observable $S_z \otimes \mathbf{1}$. Déterminez les probabilités pour chacun des 4 résultats de mesure possibles.

L'interaction entre les deux spins est décrite par l'énergie potentielle $V = -J\mathbf{S}^1 \cdot \mathbf{S}^2$, où J est appelé interaction d'échange *effective*. On admettra que l'Hamiltonien s'écrit, en fonction des observables de spin S_x , S_y et S_z , de la manière suivante :

$$H = -J(S_x \otimes S_x + S_y \otimes S_y + S_z \otimes S_z)$$

Q14. En déduire l'expression de la matrice (4×4) de H dans cette base. Vous détaillerez toutes les étapes de votre calcul.

On pose : $\chi_S = |z+\rangle \otimes |z-\rangle - |z-\rangle \otimes |z+\rangle$, $\chi_T^+ = |z+\rangle \otimes |z+\rangle$, $\chi_T^0 = |z+\rangle \otimes |z-\rangle + |z-\rangle \otimes |z+\rangle$, et $\chi_T^- = |z-\rangle \otimes |z-\rangle$.

Q15. Montrer que ces quatre états sont vecteurs propres de H (et à ce titre, forment une base orthonormée), et calculer les niveaux d'énergie correspondants.

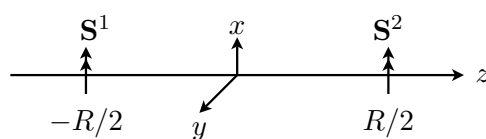


FIGURE 2 – Un système de deux électrons "1" et "2" fixés aux positions $-R/2$ et $R/2$, de spins respectifs S_1 et S_2 .

Q16. Quel doit être le signe de J pour que l'état fondamental favorise l'alignement des spins ? l'antialignement ?

On s'intéresse maintenant au spin total du système des deux électrons, à savoir $\mathbf{S}^T = \mathbf{S}^1 + \mathbf{S}^2$.

Q17. L'observable qui mesure la composante du spin \mathbf{S}^T selon l'axe Oz s'écrit :

$$S_z^T = S_z \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes S_z$$

Déterminer sa matrice.

Q18. Déterminer ses valeurs propres.

Q19. Faire de même avec les mesures selon les axes Ox et Oy .

Q20. En déduire la matrice de l'observable mesurant le module au carré du spin total, $(S^T)^2$, et calculer ses valeurs propres. Commentez.

Formulaire

L'état quantique d'une particule (sans spin) est décrit par une fonction d'onde $\psi(\mathbf{r}, t) \in \mathcal{L}^2$. La quantité $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$ est *interprétée* comme la **densité volumique de probabilité de présence** au point $\mathbf{r} = (x, y, z)$ (Postulat 1)

Le produit scalaire de 2 fonctions d'onde $\varphi_1(\mathbf{r})$ et $\varphi_2(\mathbf{r})$ (ou indifféremment, des kets $|\varphi_1\rangle$ et $|\varphi_2\rangle$) est le nombre complexe

$$\langle \varphi_1 | \varphi_2 \rangle = \iiint_{\mathbb{R}^3} \varphi_1(\mathbf{r})^* \varphi_2(\mathbf{r}) dV = \langle \varphi_2 | \varphi_1 \rangle^*$$

On associe à chaque grandeur physique \mathcal{A} une observable A : c'est un opérateur hermitique, i.e. tel que $A = A^\dagger$ (rappel : A^\dagger est l'opérateur adjoint, défini comme ${}^T(A^*)$, i.e., c'est la matrice transposée de la conjuguée complexe de A).

Exemples importants :

- l'opérateur **position** $\mathbf{R} = (X, Y, Z)$, défini par $X|\mathbf{r}\rangle = x|\mathbf{r}\rangle$, ou de manière équivalente $X[\varphi(\mathbf{r})] = x\varphi(\mathbf{r})$, et *id.* pour Y et Z ;
- l'opérateur **impulsion** $\mathbf{P} = (P_x, P_y, P_z)$ défini par $P_x|\mathbf{p}\rangle = p_x|\mathbf{p}\rangle$, ou de manière équivalente $P_x[\varphi(\mathbf{r})] = -i\hbar\partial\varphi(\mathbf{r})/\partial x$;
- l'opérateur hamiltonien (énergie mécanique) $H = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V(\mathbf{R})$.

La famille $\{|\varphi_n\rangle\}$ des vecteurs propres de l'opérateur A est orthonormée. Le spectre des valeurs propres $\{a_n\}$ représente l'ensemble des résultats possibles d'une mesure de \mathcal{A} (postulat 3). La probabilité de trouver a_n lors d'une mesure de A , la particule étant juste **avant la mesure** dans l'état $|\psi\rangle$, est $|\langle \varphi_n | \psi \rangle|^2$ (postulat 4). Réduction du paquet d'onde : après une mesure donnant la valeur a_n , l'état du système est $|\varphi_n\rangle$ (postulat 5).

Grandeurs statistiques relatives aux résultats de N mesures de \mathcal{A} ($N \rightarrow \infty$), la particule étant dans l'état $|\psi\rangle$:

- moyenne : $\langle A \rangle_\psi = \langle \psi | A | \psi \rangle$
- écart-type : $\delta A = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}$

États stationnaires

États propres de l'Hamiltonien : $H |\varphi_n\rangle = E_n |\varphi_n\rangle$ où les E_n sont les niveaux d'énergie.

Pour les problèmes qu'on peut approximer par des modèles unidimensionnels : si $V(x)$ est constant par morceaux : résoudre $H[\varphi_n(x)] = E_n \varphi_n(x)$ dans chaque région, puis imposer des conditions de raccordement sur $\varphi_n(x)$ et $\varphi_n'(x)$ entre chaque région ; les niveaux d'énergie E_n sont les valeurs de E telles que $\varphi_n(x) \in \mathcal{L}^2$;

Évolution temporelle d'un état quantique

L'évolution est régie par l'équation de Schrödinger (postulat 6) : $i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = H |\psi(t)\rangle$

Évolution d'un état stationnaire $|\psi(0)\rangle = |\varphi_n\rangle$: $|\psi(t)\rangle = e^{-iE_n t/\hbar} |\varphi_n\rangle = e^{-i\omega_n t} |\varphi_n\rangle$, relation qui s'étend à une superposition linéaire quelconque d'états stationnaires,

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n e^{-iE_n t/\hbar} |\varphi_n\rangle.$$

Moment cinétique orbital & spin

Moment cinétique caractérisant le mouvement orbital de l'électron autour du noyau : $\mathbf{L} = \mathbf{R} \times \mathbf{P}$. En coordonnées sphériques (r, θ, ϕ) , on a notamment $L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$.

Particule de spin $\frac{1}{2}$ Spin : moment cinétique propre de la particule. Comme pour le moment cinétique orbital, on ne peut mesurer que sa projection selon une direction arbitraire à la fois, par exemple l'axe Oz : $\sigma_z = \pm \frac{1}{2}$.

Notation de Dirac : $|\chi\rangle = \chi_+ |+\rangle + \chi_- |-\rangle$, où $|+\rangle$ et $|-\rangle$ sont une base d'états propres de l'opérateur de spin S_z .

Opérateurs de spin : $\mathbf{S} = (S_x, S_y, S_z)$. Représentation matricielle dans la base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$:

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