



Page de titre

Sommaire



Page 1 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Habib BOUCHRIHA

Introduction à la physique quantique

Cours et applications



Page de titre

Sommaire



Page 2 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

©2002 Centre de Publication Universitaire

Tous droits réservés. Aucun extrait de ce document ne peut être reproduit sous quelque forme ou par quelque procédé que ce soit sans l'autorisation écrite et préalable du Centre de Publication Universitaire.

Pour tout commentaire concernant cette édition électronique contacter habib.bouchriha@fst.rnu.tn



Page de titre

Sommaire



Page 3 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Al Amena, Mohamed et Dhouha



Page de titre

Sommaire



Page 4 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Sommaire

Avant-propos	10
1 Origines de la physique quantique	19
1 Rayonnement du corps noir	21
2 Effet photoélectrique	30
3 Spectres atomiques	37
4 Limite de validité de la physique classique	50
5 Systèmes d'unités de la physique quantique	54
Exercices et Problèmes	60
2 Dualité onde-corpuscule	77
1 Cas de la lumière	80
2 Cas de la matière	96


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 5 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

3	Le paquet d'ondes	109
4	Vitesse de phase et vitesse de groupe	117
5	Relations d'incertitude de Heisenberg	124
	Exercices et Problèmes	131

3	Particule dans un potentiel stationnaire	151
1	Résolution de l'équation de Schrödinger	153
2	Analogie optique	160
3	Marche de potentiel	162
4	Barrière de potentiel	169
5	Puits de potentiel	179
	Exercices et Problèmes	196

4	Bases mathématiques de la mécanique quantique	225
1	Espace ξ des fonctions d'onde d'une particule	227
2	Notion de représentation - Notations de Dirac	240
3	Opérateurs linéaires	243
4	Opérateurs adjoints	254
5	Opérateurs hermitiques	257
6	Vecteurs propres et valeurs propres d'un opérateur	259
7	Observables	265
8	Opérateurs unitaires	274
9	Produit tensoriel d'espaces d'états	280


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 6 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

Exercices et Problèmes	287
----------------------------------	-----

5 Postulats de la mécanique quantique 313

1 Énoncé des postulats	316
2 Valeurs moyennes et compatibilité des observables	330
3 Conservation de la probabilité et lien avec la mécanique classique	339
4 Systèmes conservatifs	350
5 Opérateur d'évolution	357
6 Application des postulats : système à deux niveaux	365
Exercices et Problèmes	374

6 Oscillateur harmonique 399

1 L'oscillateur harmonique classique	404
2 L'oscillateur quantique	407
3 Valeurs propres de $\hat{H}$	410
4 Etats propres de $\hat{H}$	422
5 Fonctions propres de $\hat{H}$	428
6 Valeurs moyennes des opérateurs $\hat{X}$ et $\hat{P}$ dans l'état $ \varphi_n\rangle$	434
7 Oscillateur harmonique isotrope à trois dimensions	441
Exercices et Problèmes	452

7 Moment cinétique 479

1 Définitions et relations de commutation	482
---	-----


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 7 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

2	Valeurs propres et vecteurs propres de $\vec{J}^2$ et J_z	486
3	Représentation $\{ j, m\rangle \}$	505
4	Moment cinétique orbital	512
	Exercices et Problèmes	534

8 Particule dans un potentiel central. Atome d'hydrogène 555

1	Etats d'une particule dans un potentiel central	557
2	Mouvement relatif de deux particules en interaction	565
3	L'atome d'hydrogène	574
	Exercices et Problèmes	600

9 Spin des particules 629

1	Expérience de Stern et Gerlach	632
2	Espace des états de spin $\frac{1}{2}$	640
3	Système de deux spins $\frac{1}{2}$	657
4	Les spineurs	662
5	Résonance magnétique	671
6	Fermions et bosons	689
	Exercices et Problèmes	691

10 Addition de deux moments cinétiques 713

1	Addition de deux spins $\frac{1}{2}$	718
---	--------------------------------------	-----


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 8 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

2	Addition de deux moments cinétiques quelconques	734
3	Addition d'un moment cinétique orbital et d'un spin $\frac{1}{2}$	758
	Exercices et problèmes	769

11 Perturbations stationnaires et méthode variationnelle 793

1	Méthodes des perturbations stationnaires	796
2	Méthode variationnelle	827
	Exercices et Problèmes	836

12 Perturbation dépendant du temps 869

1	Position du problème	871
2	Résolution approchée de l'équation de Schrödinger	873
3	Equations de perturbation	877
4	Probabilité de transition	880
5	Perturbation sinusoïdale	882
6	Perturbation constante	894
7	Règle d'or de Fermi	897
8	Perturbation adiabatique	901
9	Application : Interaction d'une onde électromagnétique avec un atome	903
	Exercices et Problèmes	910

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 9 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)[Liste des exercices et problèmes](#)

926

[Notes biographiques](#)

935

[Bibliographie](#)

964

[Index](#)

971



Page de titre

Sommaire



Page 10 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Avant-propos

Cet ouvrage résulte d'une pratique de l'enseignement de la mécanique quantique de vingt-cinq ans effectuée dans diverses institutions universitaires et pour divers niveaux à Paris et surtout à Tunis.

Durant cette période, j'ai rédigé à l'intention des étudiants de multiples cours photocopiés mais l'idée ne m'était jamais venue d'écrire un livre, tellement l'ouvrage de Claude Cohen-Tannoudji (Prix Nobel de Physique), Bernard Diu et Franck Laloë est complet, riche et d'actualité malgré ses trente ans.

C'est en fait sous l'insistance de mes étudiants de thèse que je me suis laissé tenter pour entreprendre cette aventure, dont la seule ambition est de mettre à la disposition des étudiants un ouvrage accessible qui les aidera à se familiariser avec la physique quantique et ses multiples applications dans divers domaines de la connaissance scientifique.

Cette physique qui est née, il y a un siècle pour pallier les insuffisances de la physique classique, a provoqué un bouleversement intellectuel et philosophique étonnant car elle a, d'une part aboli le concept jusque lors inatta-

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 11 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

quable de la continuité de l'énergie, et d'autre part, introduit un indéterminisme qui choque le sens commun et qui propose une nouvelle façon de penser et d'appréhender les lois de la nature.

On érigait, en effet, en principe la discontinuité de l'espace car les objets sont séparés les uns des autres, tout se termine quelque part, les molécules, les atomes, ne s'interpénètrent pas, il y a des limites bien nettes entre eux, seul est continu le vide dans lequel ils flottent. Mais on ne disposait d'aucune notion similaire sur la divisibilité de l'énergie : une pierre ne tomberait jamais en un mouvement saccadé, le soleil n'éclairerait pas par flambées, ...

Pourtant la hardiesse de Max Planck l'amena, pour expliquer les lois du rayonnement, à s'écarter de ce concept de continuité et à discrétiser l'énergie en énonçant, le 14 décembre 1900, que les échanges d'énergie entre matière et rayonnement ne se font pas de façon continue mais par quantités discrètes et indivisibles appelées quanta.

Le succès fut fulgurant mais le laissa sceptique car sa formulation refusait de se laisser déduire des lois classiques. Il a fallu attendre Albert Einstein qui interpréta en 1904, l'effet photoélectrique en notant que la loi de Planck pouvait être comprise et précisée en considérant que le champ électromagnétique consiste en de véritables corpuscules d'énergie lumineuse : les quanta de lumière ou photons. Compton vint compléter en 1921, cette description en attribuant un caractère corpusculaire au photon, qui devient donc doté non seulement d'une énergie mais aussi d'une impulsion à l'image d'une boule de billard en mouvement.

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 12 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

Cette dualité onde-corpuscule découverte pour le photon a été magistralement démontrée en 1926 par Louis de Broglie pour les particules matérielles et vérifiée expérimentalement en 1927 par Davisson et Germer. Elle est à la base du développement de la mécanique quantique où particules et photons sont décrits par une fonction d'onde qui contient toutes les informations relatives au système qu'ils constituent.

Cette fonction est l'essence de la vision probabiliste de la mécanique quantique, vision qui s'est affirmée par la formulation en 1927 du principe d'incertitude de Heisenberg qui stipule qu'il n'est pas possible de mesurer simultanément la position et l'impulsion d'une particule avec précision. La notion de trajectoire perd ainsi son sens en mécanique quantique au profit de la notion d'état quantique, état qui est perturbé par la mesure des grandeurs associées au système et qui est aussi de nature probabiliste.

Cet indéterminisme propre à la mécanique quantique a intrigué beaucoup de ses fondateurs, dont Einstein lui-même qui, refusant d'admettre, devant l'harmonie de la création et la cohérence de l'Univers, que "Dieu joue aux dés", jugeait que les probabilités de la mécanique quantique devaient pouvoir se déduire d'une théorie plus fondamentale et plus complète. Cette nouvelle théorie formulée entre 1925 et 1927 par les Allemands Max Bohr, Werner Heisenberg, Pascual Jordan, les Autrichiens Wolfgang Pauli et Erwin Schrödinger et par le Britannique Paul Dirac, a conduit en 1927 à l'interprétation connue sous le nom d'interprétation de l'Ecole de Copenhague. Interprétation harmonieuse où l'on renonçait à l'idéal d'une description à la fois spatio-temporelle

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 13 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

et causale des phénomènes au profit d'un indéterminisme régi par des postulats, mais dont les conséquences ont accéléré les succès dans la quête des lois régissant l'harmonie et l'équilibre de la nature.

Construite pour expliquer les lois du rayonnement, la théorie quantique a débouché sur une interprétation complète de la structure de la matière et de l'univers. De l'infiniment petit à l'infiniment grand, elle ne cesse d'étendre son rayon d'action, elle rend compte aussi bien des états ultimes de la matière : molécule, atome, noyau, particules élémentaires, quark, mais permet aussi de comprendre certains états et processus cosmiques telles que la formation et l'évolution des étoiles.

Son formalisme relativiste (théorie quantique des champs et électrodynamique quantique) enregistre de jour en jour des succès spectaculaires et l'espoir est permis de déboucher sur une théorie unifiée des interactions fondamentales qui permettent d'avoir une vue détaillée sur l'origine et la création de l'univers.

Par sa puissance prédictive, la physique quantique ne cesse également de permettre la découverte de nouveaux effets qui révolutionnent la technologie et qui sont d'un grand impact sur notre vécu quotidien ; c'est le cas du transistor (1948), du laser (1960) des microprocesseurs (1971), de la microscopie à effet Tunnel (1981), des nanotechnologies (1990) et dernièrement des ordinateurs quantiques qui sont en cours de développement.

Enfin sur le plan épistémologique, la physique quantique a provoqué un véritable séisme intellectuel et continue à heurter certains rationalismes par

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 14 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

le nouveau mode de raisonnement qu'elle impose et la nouvelle intuition qu'elle façonne, raisonnement qui tranche avec la déduction et l'induction habituelles des sciences et qui insuffle une certaine liberté de la pensée et de l'appréhension et un apprentissage de l'humilité, valeurs tant utiles et indispensables à ceux qui s'adonnent à l'exercice de la science.

Le présent ouvrage s'adresse essentiellement aux étudiants des maîtrises de physique, de sciences physiques, de chimie ainsi qu'aux élèves des écoles d'ingénieurs qui veulent se familiariser avec ce domaine. Il est également utile aux étudiants de troisième cycle et aux chercheurs.

Il est structuré en 12 chapitres équilibrés traitant chacun un cours substantiel complété par de nombreux énoncés d'exercices et de problèmes d'applications dont le corrigé fera l'objet d'un prochain ouvrage.

Des notes bibliographiques placées à la fin de l'ouvrage permettent de suivre l'itinéraire de grands noms de la physique quantique et d'en connaître les principales contributions.

Un CD-Rom interactif accompagnant l'ouvrage permet d'en faciliter l'accès et l'exploitation.

Les trois premiers chapitres s'adressent aux étudiants des deuxièmes années de premier cycle et du cycle préparatoire aux études d'ingénieurs. Ils présentent l'historique de l'avènement de la physique quantique et traitent

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 15 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

de la dualité onde-corpuscule en introduisant l'équation de Schrödinger à une dimension et son application à l'étude des états d'une particule plongée dans un potentiel stationnaire.

Les chapitres suivants s'adressent aux étudiants de deuxième cycle et sont d'une grande utilité aux étudiants des mastères et aux jeunes chercheurs.

Le chapitre 4 présente le formalisme mathématique sur lequel est construite la mécanique quantique. Bien que simplifié, il aborde de manière claire, l'essentiel de ce que requiert la compréhension et l'utilisation des concepts quantiques.

Le chapitre 5 est consacré à l'énoncé et à l'interprétation des postulats qui jettent les bases théoriques de la mécanique quantique. Il présente aussi l'application de ces postulats à l'étude des systèmes à deux niveaux, qui sont des systèmes modèles pour la compréhension de nombreux effets physiques.

Le chapitre 6 décrit l'oscillateur harmonique quantique et son grand potentiel de généralisation à l'étude de nombreuses situations physiques. Il permet également une familiarisation efficace au maniement des opérateurs.

Le chapitre 7 est consacré à l'étude du moment cinétique qui est une observable d'une grande importance en physique quantique. Le début du chapitre est assez calculatoire et très technique mais ne présente pas de difficulté majeure.

Le chapitre 8 est relatif à l'étude d'une particule dans un potentiel central et à son application au cas d'un potentiel coulombien. Il montre comment la connaissance des harmoniques sphériques permettent d'atteindre les états et

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 16 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

les énergies propres de l'atome d'hydrogène et des atomes hydrogénoïdes.

Le chapitre 9 introduit le spin qui est un moment cinétique intrinsèque n'ayant pas d'équivalent en mécanique classique. Il présente également les états spineurs et décrit le principe des méthodes de résonance magnétique telle que la RMN.

Le chapitre 10 étudie la composition des moments cinétiques qui est essentielle dans de nombreux domaines de la physique. Il aborde d'abord l'addition de deux spins $\frac{1}{2}$ et généralise ensuite le formalisme au cas de deux moments cinétiques quelconques en introduisant le couplage spin-orbite.

Les chapitres 11 et 12 introduisent les méthodes d'approximation qui jouent un rôle important dans la physique quantique, puisque dans les cas réels, l'équation de Schrödinger ne peut être résolue exactement. On y présente les méthodes d'approximation les plus utilisées à savoir : la théorie des perturbations stationnaires, la méthode variationnelle et la théorie des perturbations dépendant du temps. Des applications issues de problèmes réels illustrent ces méthodes et familiarisent l'étudiant à leur utilisation.

Habib Bouchriha
Octobre 2002

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 17 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

Remerciements

Je suis reconnaissant à mes étudiants de thèse qui m'ont encouragé à rédiger cet ouvrage. Sans leur concours, ce projet n'aurait pu voir le jour. Pendant toute une année, ils se sont chargés de la frappe et de la composition avec une patience infinie et un soin exemplaire.

La palme d'or revient sans conteste à Dhouha Gamra et à Afef Ben Othman qui ont supervisé le projet, assemblé les différentes parties, dessiné les figures, effectué la mise en page et veillé à la cohérence de la présentation. Leur affection filiale et leur encouragement de tous les jours ont eu raison de mon inertie et de mon défaitisme. Je ne saurai trouver les termes expressifs pour les remercier pour tout ce qu'elles ont donné.

Nadia Boutabba, Noura Loussaïef, Saïd Ridène, Tarek Barhoumi, Olfa Boukari et Ferid Meraï ont été pour beaucoup dans la réalisation de ce projet. Ils ont excellé dans le traitement de texte avec une gentillesse et une disponibilité qui m'ont confondu. Ma dette envers eux reste entière tout comme le sont mon estime et ma considération.

Lotfi Hassine a tracé numériquement certains graphes du texte, je le remercie pour son aide et pour son amitié de tous les jours.

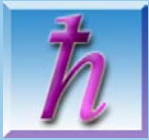
[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 18 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

Grâce à sa profonde culture en physique théorique et sa grande maîtrise des techniques multimédia, Adel Trabelsi a confectionné avec brio le CD-Rom accompagnant l'ouvrage. Je le remercie pour sa précieuse collaboration et sa disponibilité.

Je tiens à exprimer ma reconnaissance aux nombreux collègues du département de physique de la Faculté des Sciences de Tunis qui ont partagé avec moi et pendant plusieurs années le plaisir d'enseigner la mécanique quantique.

Cet ouvrage doit beaucoup aux étudiants des vingt-cinq promotions que j'ai vues passer à la Faculté des Sciences de Tunis. J'en garde un souvenir ému. L'intérêt qu'ils ont toujours manifesté à la mécanique quantique a renforcé davantage mes convictions dans le bien-fondé de cette partie séduisante de la physique. Beaucoup de ces étudiants, qui se reconnaîtront, sont aujourd'hui de brillants collègues à l'université tunisienne.

Je remercie enfin, tout le personnel du Centre de Publication Universitaire pour leur amitié de tous les jours ainsi que ma femme et mon fils pour leur patience et leur soutien.



Page de titre

Sommaire



Page 19 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Chapitre 1

Origines de la physique quantique

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 20 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

A la fin du dix-neuvième siècle, les diverses branches de la physique s'intégraient dans un édifice cohérent basé sur l'étude de deux types d'objets distincts, la matière et le rayonnement :

- La matière est faite de corpuscules parfaitement localisables dont le mouvement peut être décrit par la mécanique rationnelle de Newton. Les grandeurs physiques associées à ces corpuscules s'expriment en fonction des composantes de la position et de l'impulsion qui sont les variables dynamiques fondamentales.

- Le rayonnement est gouverné par les lois de l'électromagnétisme de Maxwell. Ses variables dynamiques sont les composantes en chaque point de l'espace des champs électrique et magnétique.

Le succès de la physique était à cette époque impressionnant et tous les phénomènes connus trouvaient leur explication dans le cadre de ce programme classique.

À l'aube du vingtième siècle et avec l'essor des progrès technologiques, les physiciens se trouvèrent tout à coup confrontés à des phénomènes nouveaux pour lesquels les prévisions de la théorie classique sont en désaccord flagrant avec l'expérience. Il fallait donc jeter les bases d'une nouvelle théorie susceptible de pallier les insuffisances de la conception classique.

Les phénomènes qui furent sans doute historiquement à l'origine de la naissance de la nouvelle théorie sont le rayonnement du corps noir, l'effet photoélectrique et les spectres atomiques.

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 21 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

1. Rayonnement du corps noir

1.1. Définition

Un corps noir est un corps qui absorbe intégralement tout rayonnement frappant sa surface. Une réalisation satisfaisante consiste à aménager un trou dans une enceinte fermée dont le revêtement intérieur absorbe et diffuse la lumière qu'il reçoit : un rayon lumineux atteignant la surface, pénètre dans l'enceinte et y subit une suite de réflexions plus ou moins diffusantes telles qu'une très faible fraction de l'énergie lumineuse incidente puisse ressortir vers l'extérieur, le corps noir se comporte donc comme un absorbant parfait (fig. 1.1).

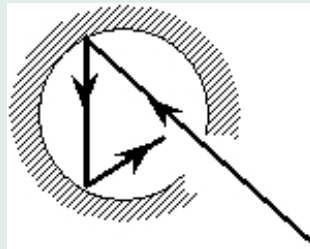


Figure1.1 : Réalisation pratique d'un corps noir



Page de titre

Sommaire



Page 22 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

1.2. Faits expérimentaux et interprétation classique

Chauffé à haute température, le corps noir émet de la lumière à toutes les longueurs d'onde. Si l'on porte en fonction de la longueur d'onde, la densité d'énergie radiative (fig. 1.2), on obtient une courbe régulière tendant vers zéro pour les grandes et pour les faibles longueurs d'onde et présentant un maximum pour une longueur d'onde λ_M dépendant simplement de la température suivant la loi dite de "déplacement de Wien" (1896).

$$\lambda_M T = C_0 = 0.2898 \text{ cm.K} \quad (1.1)$$

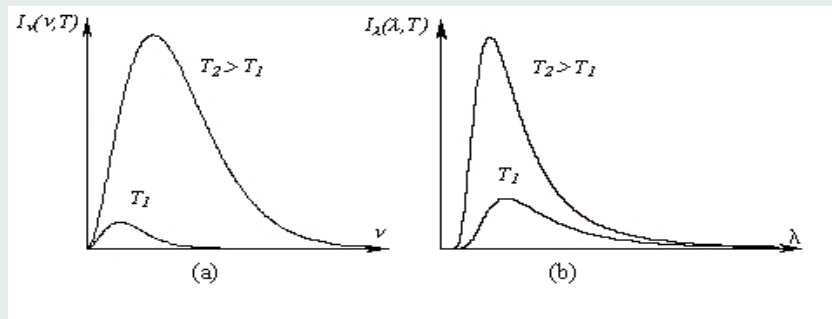


Figure 1.2 : Densité d'énergie rayonnée par le corps noir pour différentes températures (a) en fonction de la fréquence, (b) en fonction de la longueur d'onde



Page de titre

Sommaire



Page 23 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Pour expliquer ces résultats, Rayleigh et Jeans, utilisant la théorie électromagnétique et la mécanique statistique, proposèrent que “le champ électromagnétique rayonné est dû à un ensemble dénombrable d'oscillateurs harmoniques linéaires qui vibrent”.

La densité d'énergie rayonnée est alors donnée par :

$$I_\nu(\nu, T) = \rho(\nu) \langle E(\nu, T) \rangle \quad (1.2)$$

où $\rho(\nu)$ représente le nombre d'oscillateurs par unité de volume et $\langle E(\nu, T) \rangle$ l'énergie moyenne de chaque oscillateur. Ces deux grandeurs sont calculables par la mécanique statistique et valent respectivement :

$$\rho(\nu) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \quad (1.3)$$

$$\langle E(\nu, T) \rangle = \frac{\int_0^\infty E e^{-E/kT} dE}{\int_0^\infty e^{-E/kT} dE} = kT \quad (1.4)$$

On aboutit ainsi à la loi de Rayleigh-Jeans :

$$I_\nu(\nu, T) = \frac{8\pi}{c^3} kT \nu^2 \quad (1.5)$$

Cette loi est quadratique en ν et n'est en accord avec l'expérience que pour les faibles fréquences (fig. 1.3). En outre elle est inacceptable physiquement car l'intégrale de $I_\nu(\nu, T)$ par rapport à ν diverge, ce qui conduirait à une énergie rayonnée infinie, c'est “la catastrophe de l'ultraviolet”.

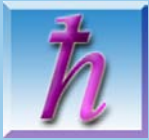
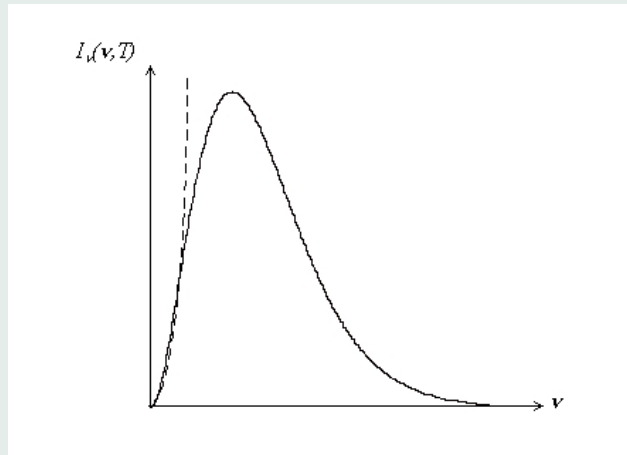
[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 24 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

Figure 1.3 : Catastrophe de l'ultraviolet

1.3. Loi de Planck

Pour obtenir un accord avec les observations expérimentales, Planck a été amené à s'écarter de la mécanique statistique et à évaluer de façon différente l'énergie moyenne de chaque oscillateur. Le 14 Décembre 1900, il émit l'idée que :



Page de titre

Sommaire



Page 25 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

“Les échanges d’énergie entre la matière et le rayonnement ne se font pas de façon continue mais par quantités discrètes et indivisibles.”

Plus précisément, l’énergie de chaque oscillateur est un multiple entier d’une valeur donnée ε soit : $E_n = n\varepsilon$.

Dans ce cas, $\langle E(\nu, T) \rangle$ se calculera simplement par :

$$\langle E(\nu, T) \rangle = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} E_n e^{-E_n/kT}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-E_n/kT}} = \frac{\varepsilon \sum_{n=0}^{\infty} n e^{-n\varepsilon/kT}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\varepsilon/kT}} \quad (1.6)$$

en posant $\frac{\varepsilon}{kT} = x$, cette expression devient :

$$\langle E(\nu, T) \rangle = \frac{\varepsilon \sum_{n=0}^{\infty} n e^{-nx}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-nx}} \quad (1.7)$$

Le dénominateur n’est autre que la limite d’une progression géométrique de raison e^{-x} :

$$\sum_{n=0}^{\infty} e^{-nx} = 1 + e^{-x} + e^{-2x} + \dots = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{1 - e^{-nx}}{1 - e^{-x}} \right) = \frac{1}{1 - e^{-x}} \quad (1.8)$$



Page de titre

Sommaire



Page 26 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

quant au numérateur, pour le calculer il suffit de remarquer que :

$$n e^{-nx} = -\frac{d}{dx}(e^{-nx}) \quad (1.9)$$

La série étant convergente, on a :

$$\sum_{n=0}^{\infty} n e^{-nx} = -\frac{d}{dx}\left(\frac{1}{1-e^{-x}}\right) = \frac{e^{-x}}{(1-e^{-x})^2} \quad (1.10)$$

de sorte que

$$\langle E(\nu, T) \rangle = \frac{\varepsilon e^{-x}}{1-e^{-x}} = \frac{\varepsilon}{e^x - 1} = \frac{\varepsilon}{e\left(\frac{\varepsilon}{kT}\right) - 1} \quad (1.11)$$

et

$$I_{\nu}(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{\varepsilon}{e\left(\frac{\varepsilon}{kT}\right) - 1} \quad (1.12)$$

Pour que cette relation soit en accord avec l'expérience c'est à dire pour que l'on ait $\lim_{\nu \rightarrow \infty} I_{\nu}(\nu, T) = 0$, il faut que ε soit une fonction croissante de ν . Planck a posé $\varepsilon = h\nu$ où h est une nouvelle constante universelle appelée **“constante de Planck”**. Il s'ensuit alors que :



Page de titre

Sommaire



Page 27 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

“Les échanges d’énergie entre la matière et le rayonnement se font par quantités discrètes et indivisibles d’énergie $h\nu$ appelées quanta.”

Quanta étant le pluriel latin de quantum, qui signifie “quantité.”

La **loi de Planck** s’écrit alors dans toute sa gloire sous la forme :

$$I_{\nu}(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{h\nu}{e^{\left(\frac{h\nu}{kT}\right)} - 1} \quad (1.13)$$

La recherche du maximum de $I_{\nu}(\nu, T)$, en fonction de ν permet, en utilisant la loi empirique de Wien (1), de déterminer la valeur de la constante de Planck qu’on trouve égale à : $h = 6,64.10^{-34} J.s$.

On remarque qu’aux basses fréquences la loi de Planck redonne bien la loi de Rayleigh-Jeans et qu’aux hautes fréquences, on retrouve la décroissance exponentielle observée expérimentalement, en effet :

* Si $h\nu \ll kT$ alors $e^{\left(\frac{h\nu}{kT}\right)} \approx 1 + \frac{h\nu}{kT}$ soit :

$$\langle E(\nu, T) \rangle \approx kT \text{ et } I_{\nu}(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} kT \quad (1.14)$$

A la température ambiante ($kT = 0.025 \text{ eV}$) ceci n’est valable que si :

$$\nu \ll 10^{13} \text{ s}^{-1} \quad (1.15)$$



Page de titre

Sommaire

◀

▶

◀

▶

Page 28 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

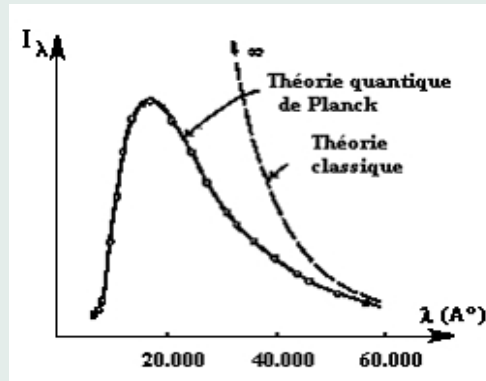
* Si $h\nu \gg kT$ alors $e^{(\frac{h\nu}{kT})} \gg 1$ soit :

$$\langle E(\nu, T) \rangle \approx h\nu e^{(-\frac{h\nu}{kT})} \text{ et } I_\nu(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} h\nu e^{(-\frac{h\nu}{kT})}$$

La loi de Planck peut s'exprimer également en fonction de la longueur d'onde. Elle s'écrit alors :

$$I_\lambda(\lambda, T) = \frac{2\pi c^2 h}{\lambda^5} \left(\frac{1}{e^{\frac{hc}{\lambda kT}} - 1} \right) \quad (1.16)$$

Cette expression est représentée par la courbe en traits pleins de la figure 1.4 et elle est en accord parfait avec l'expérience.




[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 29 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

Figure 1.4 : Confrontation des théories classique et quantique du rayonnement du corps noir avec l'expérience

L'intégration de $I_\lambda(\lambda, T)$ par rapport à λ permet d'atteindre la puissance totale émise par le corps noir. Cette puissance est donnée par :

$$P = \frac{c}{4} \int_0^\infty I_\lambda(\lambda, T) d\lambda = \sigma T^4 \quad (1.17)$$

$$\text{où } \sigma = \frac{2\pi^5 k^4}{15c^2 h^3} = 5.67 \times 10^{-8} \text{ S.I}$$

Cette loi est connue sous le nom de "loi de Stefan" et σ est la constante de Stefan.

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 30 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

2. Effet photoélectrique

2.1. Faits expérimentaux

Au début du siècle, il était expérimentalement connu que lorsque de la lumière (visible ou ultraviolette) tombe sur une surface métallique, des électrons sont éjectés par cette surface. Ce phénomène peut être prévisible par la théorie classique : la lumière étant une onde électromagnétique, le champ électrique qui lui est associé peut induire une force qui s'exerce sur les électrons de la surface métallique et éjecter certains d'entre eux.

Une expérience typique fut celle de Millikan (1916) : on dispose dans une cellule transparente à la lumière ultraviolette et où règne un vide poussé, deux plaques. L'une est appelée cathode (C), et est constituée, en général, par un métal alcalin, l'autre est métallique, et est appelée anode (A). Ces deux plaques sont reliées aux bornes d'un générateur, de sorte à établir une tension U_{AC} entre elles.



Page de titre

Sommaire



Page 31 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

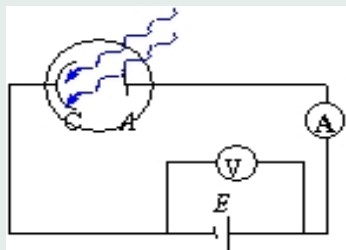


Figure 1.5 : Cellule photoélectrique

Lorsqu'on éclaire la cathode par une radiation monochromatique, un courant d'intensité I peut traverser le circuit (fig. 1.5).

On constate que :

* Ce courant ne s'observe que si les radiations ont une fréquence supérieure à une certaine valeur ν_0 appelée "seuil de fréquence de la cathode" (tableau I-1).

Métal	Pt	Ag	Cu	Zn	Ba	Na	K	Cs
$\nu_0 \times 10^{14} \text{ Hz}$	15,8	11,1	10,3	8,1	6,0	5,8	5,6	4,6
$\lambda_0 (\mu\text{m})$	0,19	0,27	0,29	0,37	0,50	0,52	0,54	0,65

Tableau I-1 : Seuil photoélectrique pour différents métaux



Page de titre

Sommaire



Page 32 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

* Lorsque la tension U_{AC} augmente, l'intensité I du courant augmente et tend vers une limite appelée "intensité de saturation". Cette limite augmente avec la puissance du faisceau lumineux incident (fig. 1.6).

* Lorsque la tension U_{AC} est nulle, un courant I_0 traverse encore le circuit.

* Le courant s'annule pour une tension $U_{AC} = -U_a$, U_a est appelée "potentiel d'arrêt" (fig. 1.6).

Le potentiel d'arrêt U_a dépend de la fréquence : il est nul pour $\nu < \nu_0$ et croît linéairement avec ν pour $\nu > \nu_0$ (fig. 1.7).

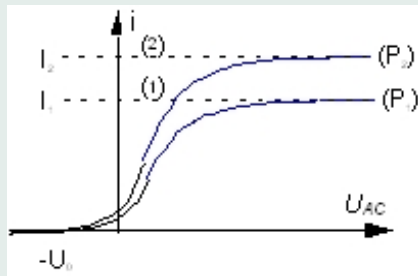


Figure 1.6 : Caractéristique d'une cellule photoélectrique pour une fréquence donnée et pour deux puissances différentes du faisceau incident ($P_2 > P_1$)

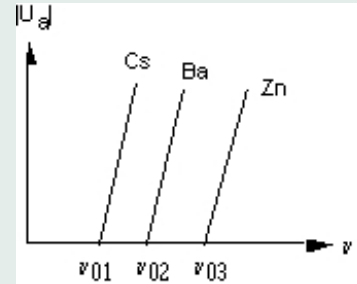


Figure 1.7 : Variation du potentiel d'arrêt en fonction de la fréquence.



Page de titre

Sommaire



Page 33 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

L'intensité de saturation et le potentiel d'arrêt peuvent s'interpréter aisément. En effet, lorsque U_{AC} est positive, les électrons émis par la cathode sont accélérés par le champ électrique existant entre A et C et se dirigent vers l'anode, donnant ainsi naissance à un courant dans le circuit extérieur. Lorsque U_{AC} est négative, les électrons sont freinés par le champ électrique et selon leur vitesse d'émission, certains d'entre eux peuvent atteindre l'anode, alors que d'autres retournent vers la cathode.

On peut calculer la valeur du potentiel d'arrêt en appliquant le théorème de l'énergie cinétique à un électron de masse m se déplaçant de C vers A avec la vitesse V :

$$\frac{1}{2}mV_A^2 - \frac{1}{2}mV^2 = -eU_{CA} = eU_{AC} \quad (1.18)$$

Si le courant I est nul, aucun électron n'atteint l'anode et $V_A = 0$, soit :

$$\frac{1}{2}mV^2 = -eU_{AC} = eU_a \quad (1.19)$$

L'énergie cinétique des électrons est donc comme U_a . Elle est nulle pour $\nu < \nu_0$ et croît linéairement lorsque $\nu > \nu_0$.

$$U_a = \frac{1}{2} \frac{m}{e} V^2 \quad (1.20)$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 34 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

2.2. Interprétation quantique

La dépendance simple de l'énergie cinétique des électrons en fonction de la fréquence et son indépendance de la puissance du faisceau incident ne trouvent pas d'explication dans le cadre de la théorie classique.

L'explication de ces phénomènes fut donnée par Einstein en 1905. Il nota que la loi de Planck pouvait être comprise et précisée en considérant que le champ électromagnétique consiste en de véritables corpuscules d'énergie lumineuse $h\nu$ (les quanta de lumière ou photons) : dans ce cas, le quantum d'énergie peut être transmis en totalité à un électron. Cet électron acquiert l'énergie $E = h\nu$ au moment où il est encore dans le métal : si on suppose qu'il est nécessaire d'effectuer un certain travail W pour l'extraire du métal, cet électron sera donc émis avec l'énergie cinétique :

$E_C = E - W$, soit :

$$E_C = h\nu - W \quad (1.21)$$

W est une constante caractéristique du métal, indépendante de ν et appelée "travail d'extraction".

Comme l'énergie cinétique E_C est positive ou nulle, on a nécessairement :

$$h\nu - W \geq 0 \quad (1.22)$$



Page de titre

Sommaire



Page 35 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

soit

$$\nu \geq \frac{W}{h} = \nu_s \quad (1.23)$$

Le courant ne s'observe donc que pour des fréquences supérieures à la fréquence seuil ν_s .

On remarque aussi que l'énergie cinétique des électrons varie linéairement avec la fréquence et est indépendante de l'intensité de la lumière, ce qui est conforme à l'expérience.

Cette loi rend donc directement compte des aspects "non classiques" de l'effet photoélectrique. Elle fournit de plus, une valeur expérimentale de h à partir de la variation du potentiel d'arrêt avec la fréquence (fig. 1.8). On a en effet :

$$\frac{1}{2} m V^2 = eU_a = h\nu - W \implies U_a = \left(\frac{h}{e}\right)\nu - \frac{W}{e} \quad (1.24)$$

On obtient une valeur de h qui coïncide exactement avec la constante de Planck.

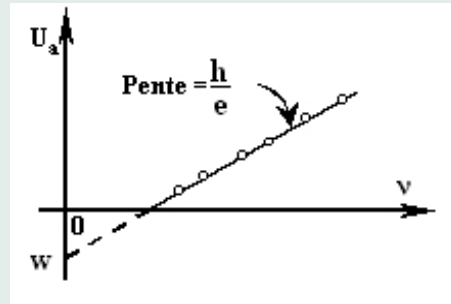
[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 36 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

Figure 1.8 : Variation du potentiel d'arrêt U_a
en fonction de la fréquence ν

Bien que cet effet soit phénoménologiquement distinct du rayonnement du corps noir, il s'interprète avec les mêmes concepts, ce qui montre qu'il s'agit bien de la naissance d'une **théorie d'un grand potentiel de généralisation**.



Page de titre

Sommaire



Page 37 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

3. Spectres atomiques

3.1. Problème de la stabilité de l'atome

Le fait que la matière est formée d'atomes et que les atomes contiennent des grains d'électricité de charges négatives appelées électrons était une réalité admise à la fin du 19^{ème} siècle : le problème était alors de concevoir un "modèle" pour la structure de l'atome.

Un des premiers modèles proposés est celui de J.J Thomson où il considérait, que l'atome est constitué d'une sphère pleine de rayon R de l'ordre de $10^{-8}cm$, uniformément chargée positivement et contenant des électrons qui vibrent librement, le nombre de ces électrons devant satisfaire la neutralité électrique de l'atome.

Ce modèle, très simple, a permis de rendre compte des phénomènes de dispersion et de diffusion de la lumière mais fut en violent désaccord avec les expériences de diffusion du rayonnement α (ions He^{++}) effectuées par Rutherford (1911) qui montrèrent que l'atome est presque vide, et se limite pratiquement à un noyau compact de faibles dimensions (10^{-15} à $10^{-14}m$). La quasi-totalité de la masse de l'atome est concentrée dans ce noyau qui a, de plus, la charge $+Zq$, où Z est le rang de l'élément correspondant dans le tableau de Mendeleïev. L'atome étant neutre, il comporte donc Z électrons de charge $-q$.

Un modèle statique (noyau et électrons avec des positions respectives



Page de titre

Sommaire



Page 38 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

fixes) étant éliminé immédiatement par la loi de Coulomb, Rutherford imagina un modèle dynamique planétaire où les électrons gravitent autour du noyau comme les planètes autour du Soleil. L'identité formelle de l'interaction gravitationnelle et de l'interaction coulombienne conduit à des trajectoires électroniques elliptiques, décrites suivant la loi des aires, en complète analogie avec les trajectoires des planètes autour du Soleil.

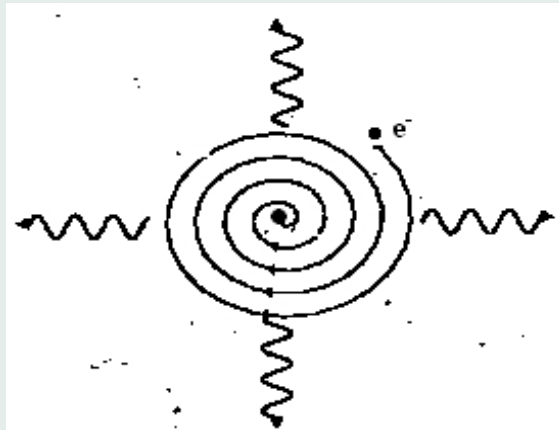


Figure 1.9 : Chute de l'électron sur le noyau

Néanmoins, un tel modèle est en désaccord avec les lois de l'électromagnétisme car, à l'inverse des planètes, les électrons sont des particules chargées et au cours de leur rotation autour du noyau, ces charges accélérées, rayonnent un


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 39 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

champ électromagnétique auquel elles cèdent une partie de leur énergie. Il en résulte alors un freinage des électrons qui finiront par tomber sur le noyau : l'atome ne serait donc pas stable !!! (fig. 1.9).

Cela est évidemment suffisant pour rejeter ce modèle mais on peut exhiber la raison supplémentaire suivante : la fréquence du rayonnement émis est égale en théorie électromagnétique classique, à la fréquence du mouvement uniforme de rotation de l'électron. Cette fréquence doit donc varier continûment avec le rayon de l'orbite lors de la chute de l'électron. Il en résulte que le spectre d'émission des atomes doit être continu entre deux fréquences limites, et ceci est de nouveau contraire à l'expérience où on observe un spectre discontinu (fig. 1.10).

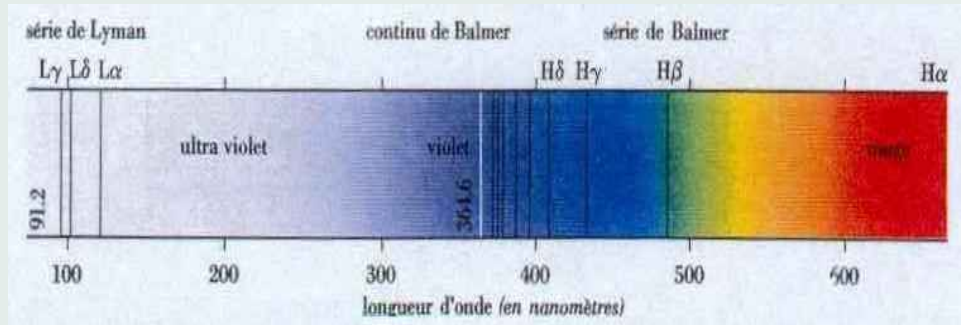


Figure 1.10 : Spectre de raies de l'atome d'hydrogène



Page de titre

Sommaire



Page 40 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

En effet, dès 1885 Balmer constata que le spectre de l'atome d'hydrogène est un spectre de raies, c'est à dire que les fréquences émises forment une suite discrète. Il montra en plus, que l'ensemble des raies connues satisfont la relation empirique :

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad \text{avec } m < n \quad (1.25)$$

où $R_H = 1,097.10^7 m^{-1}$ représente la constante de Rydberg pour l'hydrogène.

3.2. Modèle de Bohr (1913)

Pour expliquer ces observations expérimentales et ces formulations empiriques, Bohr a été amené à admettre deux postulats nouveaux :

1- Les électrons ne s'observent que dans des orbites "permises" dans lesquelles ils ont des énergies bien déterminées : ces orbites sont définies par la condition de quantification :

$$\int \vec{p} \cdot d\vec{\ell} = n h \quad (1.26)$$

où n est un nombre entier positif appelé nombre quantique.



Page de titre

Sommaire



Page 41 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Cette condition se simplifie lorsqu'on admet un mouvement circulaire des électrons autour du noyau supposé immobile, et donne :

$$m V_n r_n = n \frac{h}{2\pi} \quad (1.27)$$

2- Quand l'électron décrit une orbite stationnaire, l'atome n'émet (ni n'absorbe) aucun rayonnement. L'émission (ou l'absorption) est déterminée uniquement par le passage de l'électron d'une orbite d'énergie E_n à une orbite d'énergie plus petite (ou plus grande) E_m (fig. 1.11). La fréquence ν_{nm} du rayonnement émis (ou absorbé) est donnée par :

$$\nu_{nm} = \frac{1}{h} (E_n - E_m) \quad (1.28)$$

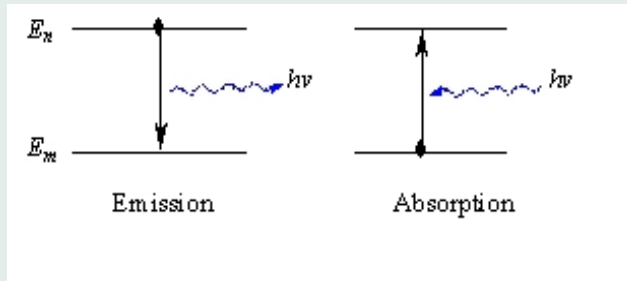


Figure 1.11 : Emission et absorption d'un photon par un atome



Page de titre

Sommaire



Page 42 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Les conséquences de ces postulats vont nous permettre, en principe, de rendre compte des faits expérimentaux observés dans l'hydrogène :

* L'équilibre entre la force centrifuge et l'attraction coulombienne exercée par le noyau sur l'électron de charge $-q$ donne :

$$m \frac{V_n^2}{r_n} = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r_n^2} \quad (1.29)$$

En combinant les relations (1.27) et (1.29) on obtient :

$$r_n = \frac{\epsilon_0 h^2}{\pi m q^2} n^2 = a_0 n^2 \quad (1.30)$$

et

$$V_n = \frac{1}{2} \frac{q^2}{\epsilon_0 h} \frac{1}{n} = \frac{V_0}{n} \quad (1.31)$$

r_n est le rayon de l'orbite d'ordre n et V_n la vitesse de l'électron dans cette orbite.

a_0 est le rayon de Bohr qui correspond à $n = 1$, $a_0 = 0,529\text{\AA}$.

* En admettant que le proton est au repos dans le référentiel atomique, l'énergie de l'atome d'hydrogène est égale à l'énergie totale de l'électron, qui



Page de titre

Sommaire



Page 43 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

est la somme de son énergie potentielle et de son énergie cinétique, soit :

$$E_n = E_{pot} + E_{cin} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q^2}{r_n} + \frac{1}{2} m V_n^2 \quad (1.32)$$

d'après (1.29) on a :

$$\frac{1}{2} m V_n^2 = \frac{1}{2} \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r_n} \quad (1.33)$$

ce qui donne pour E_n :

$$E_n = -\frac{1}{2} \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r_n} \quad (1.34)$$

et en remplaçant r_n par sa valeur on obtient :

$$E_n = -\frac{1}{2} \frac{m q^4}{4\pi\epsilon_0^2 h^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{R_\infty}{n^2} \quad \text{avec } R_\infty = \frac{m q^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \quad (1.35)$$

La fréquence du rayonnement émis est d'après (1.28) :

$$\nu_{nm} = \frac{1}{h} \left(-\frac{R_\infty}{n^2} + \frac{R_\infty}{m^2} \right) = \frac{R_\infty}{h} \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad \text{avec } m < n \quad (1.36)$$

et sa longueur d'onde λ est telle que :

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (1.37)$$

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 44 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

où

$$R_H = \frac{R_\infty}{hc} = \frac{mq^4}{8\varepsilon_0^2 ch^3} \quad (1.38)$$

On retrouve ainsi la formule empirique de Balmer et on atteint une valeur de R_H identique à la valeur de la constante de Rydberg pour l'hydrogène mesurée par Balmer ($R_H = 109677 \text{ cm}^{-1}$).

Avec ce résultat, les différentes raies de l'hydrogène peuvent s'ordonner et sont en bonne conformité avec le spectre expérimental (fig. 1.12) :



Page de titre

Sommaire



Page 45 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

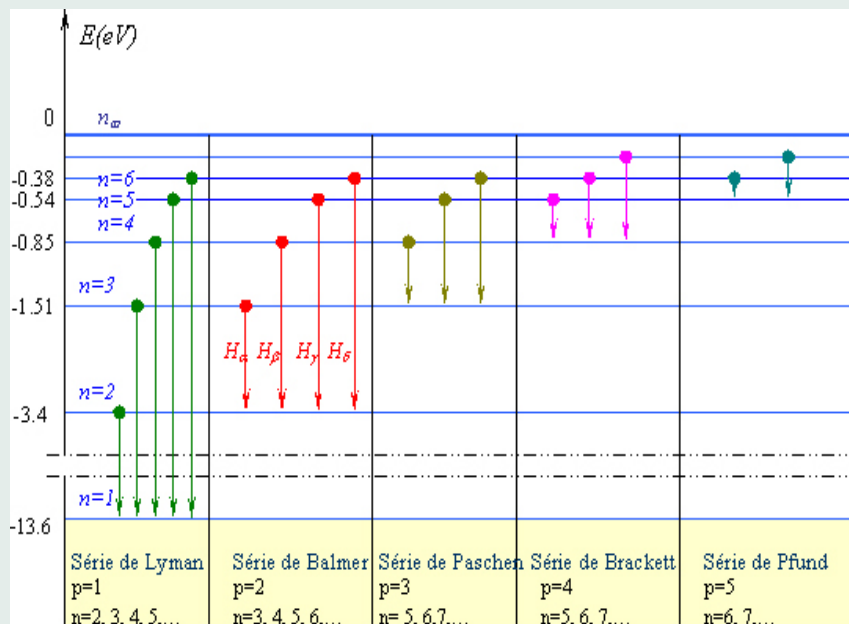


Figure 1.12 : Spectre de l'atome d'hydrogène

3.3. Constante de structure fine

D'après (1.35), R_∞ peut s'interpréter comme le potentiel d'ionisation non relativiste de l'hydrogène lorsque la masse du proton est considérée infinie,



Page de titre

Sommaire



Page 46 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

elle a pour valeur :

$$R_{\infty} \simeq 13.6 \text{ eV}$$

R_{∞} peut aussi s'écrire :

$$R_{\infty} = \frac{mq^4}{8\varepsilon_0^2\hbar^2} = \frac{mq^4}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2} = \frac{1}{2} \frac{m}{\hbar^2} \left(\frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0} \right)^2 = \frac{1}{2} \left(\frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0} \right)^2 \frac{1}{\hbar^2 c^2} mc^2 \quad (1.39)$$

On notera pour toute la suite $\frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0} = e^2$ ce qui permet d'écrire :

$$R_{\infty} = \frac{1}{2} \left(\frac{e^2}{\hbar c} \right)^2 mc^2 \quad (1.40)$$

La quantité $\frac{e^2}{\hbar c}$ est appelée constante de structure fine, et est désignée par α . Elle joue un rôle fondamental en physique quantique.

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = 1,297 \cdot 10^{-3} \simeq \frac{1}{137} \quad (1.41)$$

$$R_{\infty} = \frac{1}{2} \alpha^2 mc^2 \quad (1.42)$$

α peut être considérée comme une constante de couplage, elle nous renseigne sur la force d'interaction entre les électrons et le champ électromagnétique. Sa faible valeur numérique traduit la faiblesse de l'interaction électromagnétique par rapport aux interactions fortes et faibles.



Page de titre

Sommaire



Page 47 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

3.4. Atome hydrogénoïde

Un atome hydrogénoïde est un atome ou un ion formé, comme l'atome d'hydrogène, d'un noyau et d'un seul électron (He^+ , Li^{++} , Be^{+++} , ...).

Des résultats analogues à ceux décrits pour l'hydrogène ont été observés avec ces atomes. Ainsi pour un atome hydrogénoïde de numéro atomique Z , dont le noyau a Z protons la relation (1.37) s'écrit :

$$\frac{1}{\lambda} = R Z^2 \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) \quad (1.43)$$

3.5. Modèle de Sommerfeld et Wilson

Des études spectroscopiques plus fines ont montré que les raies de la série de Balmer sont en fait éclatées en plusieurs composantes très voisines appelées multiplets.

Pour interpréter ces observations expérimentales, Sommerfeld et Wilson ont complété le modèle de Bohr par l'introduction d'orbites elliptiques qui sont plus conformes à un mouvement plan à force centrale. En repérant la position de l'électron sur son orbite par les coordonnées polaires r et θ , Sommerfeld et Wilson ont été amenés à introduire deux postulats de quantification : l'un dans la direction radiale auquel est associé le nombre quantique n_r , l'autre dans la direction azimutale avec le nombre quantique n_θ . On montre que les deux conditions de quantification et le principe fondamental de la dynamique



Page de titre

Sommaire



Page 48 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

permettent d'établir que l'électron peut décrire des orbites elliptiques (fig. 1.13) si et seulement si n_r et n_θ sont des entiers positifs tels que $n_r + n_\theta \geq 1$.

Les niveaux d'énergie de l'atome sont alors donnés par l'expression :

$$E_{n_r, n_\theta} = -\frac{E_1}{(n_r + n_\theta)^2} = -\frac{E_1}{n^2} \quad (1.44)$$

où E_1 est l'énergie de Bohr établie précédemment pour la première orbite circulaire et n le nombre quantique principal $n = n_r + n_\theta$.

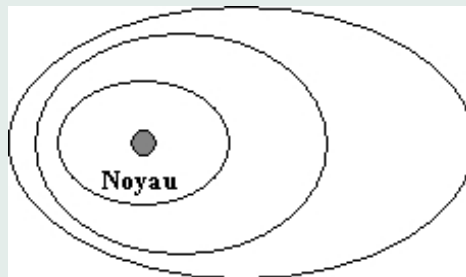


Figure 1.13 : Modèle atomique de Bohr-Sommerfeld

Ainsi formulé, ce modèle à orbites elliptiques permet de retrouver les mêmes séries de raies spectrales que celui de Bohr, mais celles-ci peuvent être émises de différentes façons. De plus à la place d'une raie unique, apparaît un ensemble de raies très fines et très proches appelé multiplet. C'est ce qu'on appelle la structure fine de l'hydrogène.

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 49 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

En physique quantique et on le verra en détail plus loin, lorsque plusieurs états correspondent à une même énergie on dit qu'il y a dégénérescence. Le fait d'observer un multiplet indique une levée de cette dégénérescence ; levée qui peut être provoquée par divers mécanismes.

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 50 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

4. Limite de validité de la physique classique

Il apparaît que de nombreux faits expérimentaux, tels que ceux décrits dans les paragraphes précédents ne peuvent être décrits dans le cadre de la physique classique et nécessitent pour leur interprétation un nouveau formalisme introduisant des concepts de discontinuité.

La physique quantique s'est développée à partir de ces bases historiques et un nouveau formalisme intitulé "mécanique quantique" a été développé. Son armature théorique repose sur une formulation mathématique élaborée mais les idées de base sont relativement simples et pertinentes.

Il faut cependant signaler que la physique classique n'est pas remise en question dans tous les domaines d'investigation. Elle continue à expliquer un grand nombre de phénomènes dans le monde macroscopique, mais sa validité s'avère limitée en ce qui concerne une description détaillée du mouvement des objets microscopiques et de l'interaction entre la matière et le rayonnement. Il est donc nécessaire de connaître la limite de validité de la physique quantique en cherchant un critère pour son application.

4.1. Critère d'application de la mécanique quantique

En mécanique la vitesse de la lumière c est la constante universelle qui permet de délimiter le domaine "non relativiste" du domaine "relativiste" : lorsque les vitesses envisagées dans un problème sont petites par rapport



Page de titre

Sommaire



Page 51 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

à c , un traitement “non relativiste” est suffisamment précis, par contre, dans le cas où ces vitesses se rapprochent de c , un traitement “relativiste” est alors nécessaire.

On peut se demander alors s’il existe une constante universelle qui jouerait un rôle analogue pour fixer un critère d’applicabilité de la mécanique quantique. Cette constante est incontestablement la constante de Planck h . La dimension de h peut être déterminée à partir de la relation $E = h\nu$ ou de la condition de quantification de Bohr : Cette constante a donc les dimensions d’un moment cinétique ou “action”, on l’appelle “quantum d’action” et on la note $\mathcal{A}$.

$$\begin{aligned}[h] &= [\textit{temps}][\textit{énergie}] \\ &= [\textit{longueur}][\textit{quantité de mouvement}] = M L^2 T^{-1}\end{aligned}$$

Il est également utile de remarquer que :

$$[h^2] = [\textit{énergie}][\textit{masse}][\textit{longueur}]^2$$

En pratique, on utilise le plus souvent la constante : $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ qui se lit “ h barre” et qui a, les mêmes dimensions que h et l’avantage d’être voisine de l’unité :

$$\hbar = (1,054592 \pm 0,000006)10^{-34} MKS$$

On considérera désormais $\hbar$ comme la “vraie” constante de la physique quantique et le critère d’utilisation du formalisme quantique est le suivant :



Page de titre

Sommaire



Page 52 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

“Si dans un système physique une quelconque variable dynamique naturelle ayant les dimensions d’une action prend une valeur numérique de l’ordre de la constante de Planck $\hbar$, le comportement du système doit être décrit dans le cadre de la mécanique quantique. Si, au contraire toutes les variables ayant les dimensions d’une action sont très grandes par rapport à $\hbar$, les lois de la physique classique sont valides”.

soit :

 $\mathcal{A} \gg \hbar \implies \text{mécanique classique}$
 $\mathcal{A} \approx \hbar \implies \text{mécanique quantique}$

4.2. Exemples

4.2.1. Montre

Une montre ordinaire a des parties mobiles de taille et masse typiques : une longueur $L \approx 10^{-3}$ mètre, une masse $M \approx 10^{-4}$ kg, et un temps typique T qui est la seconde.

L’action caractéristique est donc $\mathcal{A} = ML^2T^{-1} \approx 10^{24}\hbar \gg \hbar$. La mécanique classique est donc suffisante !! Et les horlogers n’ont pas besoin de connaître la mécanique quantique pour fabriquer et réparer les montres.



Page de titre

Sommaire



Page 53 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

4.2.2. Atome d'hydrogène

L'atome d'hydrogène a une énergie d'ionisation $E = 13,6 \text{ eV}$ et un spectre caractérisé par une longueur d'onde minimale de l'ordre de 10^3 Å , soit une pulsation maximale $\omega \approx 2 \cdot 10^{16} \text{ s}^{-1}$. L'action caractéristique est : $\mathcal{A} = \frac{E}{\omega} \approx \hbar$. On en conclut que l'atome d'hydrogène, et donc tous les atomes, ne peuvent être appréhendés sans recours à la mécanique quantique.

4.2.3. Noyau atomique

L'énergie de liaison par nucléon dans un noyau ordinaire est de l'ordre de 8 MeV , par ailleurs, le rayon du noyau est donné par $r = A^{1/3} r_0$ (A étant le nombre de masse et $r_0 \approx 1,3 \cdot 10^{-15} \text{ m}$). En prenant la masse du nucléon (proton ou neutron) $M = 1,6 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$, on forme une action caractéristique valant $\sqrt{ME} r_0 \approx 0,5 \hbar$; la physique nucléaire est donc nécessairement quantique.



Page de titre

Sommaire



Page 54 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

5. Systèmes d'unités de la physique quantique

Chaque domaine de la physique possède un système d'unités naturelles pour les grandeurs physiques qui y interviennent. Cela signifie que lorsqu'on exprime une grandeur physique quelconque dans ces unités, on doit atteindre des valeurs numériques raisonnables qui peuvent varier entre 10^{-6} et 10^6 par exemple, mais ne jamais comporter des valeurs aussi hallucinantes que 10^{-20} ou 10^{-30} .

Or, nous avons vu que les constantes physiques intervenant en physique quantique sont très petites lorsqu'elles sont exprimées dans nos systèmes macroscopiques habituels. En effet :

$$\hbar = 1,05 \cdot 10^{-34} \text{ J.s}$$

$$m_e = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$$

$$e = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$$

$$m_p = 1,67 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$$

$$k = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J.K}^{-1}$$

Il est donc nécessaire d'introduire de nouvelles unités propres à cette micro-physique.



Page de titre

Sommaire



Page 55 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

5.1. Unités de la physique quantique

5.1.1. Unité de masse

C'est l'unité de masse atomique (u.m.a), elle est définie à partir de la masse de l'isotope C^{12} du carbone où on attribue à l'atome de cet isotope une masse de 12 unités de masse atomique de sorte qu'on a :

$$1 \text{ u.m.a} = \frac{1}{12} (\text{masse d'un atome } C^{12}) = (1,66053 \pm 0,00001) 10^{-27} \text{ kg}$$

Le nombre d'Avogadro N ($N = 6,02.10^{23}$) est alors défini comme le nombre d'atomes dans 12 grammes de C^{12} isotopiquement pur.

Dans cette nouvelle unité la masse du proton est $1,0073 \text{ u.m.a}$ et est très proche de l'unité. Par exemple le poids atomique de l'oxygène naturel est $15,9994$ et est voisin de la valeur 16 de l'échelle des chimistes.

5.1.2. Unité de longueur

Le mètre est une unité trop grande pour décrire la dimension des atomes et des molécules, c'est pour cette raison qu'on utilise l'angström qui est une unité de longueur plus adaptée à la microphysique :

$$1 \text{ Angström} = 1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$$



Page de titre

Sommaire



Page 56 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Ainsi le rayon de Bohr devient égal à $0,529\text{\AA}$. On utilise également en physique nucléaire le fermi qui est de l'ordre de grandeur de la dimension du noyau atomique.

$$1 \text{ Fermi} = 1 \text{ F} = 10^{-15} \text{ m}$$

5.1.3. Unité de temps

La seconde est aussi une unité de mesure très grande pour décrire la durée de certains phénomènes quantiques (temps de relaxation, durée de vie des états excités, temps de recombinaison,). On utilise alors les sous-multiples de la seconde.

$$\begin{aligned} 1 \text{ ms} &= \text{milliseconde} = 10^{-3} \text{ s} \\ 1 \mu\text{s} &= \text{microseconde} = 10^{-6} \text{ s} \\ 1 \text{ ns} &= \text{nanoseconde} = 10^{-9} \text{ s} \\ 1 \text{ ps} &= \text{picoseconde} = 10^{-12} \text{ s} \end{aligned}$$

5.1.4. Unité d'énergie

Le joule et la calorie ne sont pas des unités naturelles pour la physique quantique. L'unité la plus adaptée est l'électronvolt (eV). Elle est définie comme l'énergie acquise par une charge élémentaire subissant une chute de potentiel de un volt.



Page de titre

Sommaire



Page 57 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

$$1 \text{ eV} = 1,6021910^{-19} \text{ J}$$

Ainsi les diverses transitions atomiques se font à des énergies de l'ordre de l'eV. On utilise également pour la physique des particules les multiples de l'électronvolt :

$$1 \text{ KeV} = \text{kiloélectronvolt} = 10^3 \text{ eV}$$

$$1 \text{ MeV} = \text{megaélectronvolt} = 10^6 \text{ eV}$$

$$1 \text{ GeV} = \text{gigaélectronvolt} = 10^9 \text{ eV}$$

5.2. Unités de Planck

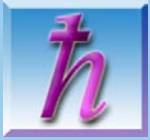
Il est possible de construire à partir de la constante de Planck h de la vitesse de la lumière c et de la constante de gravitation G trois unités naturelles de longueur, de temps et de masse appelées unités de Planck. Elles sont définies de la façon suivante :

$$L_p = \left(\frac{\hbar G}{c^3}\right)^{\frac{1}{2}} = 1,6 \cdot 10^{-35} \text{ m} \quad : \text{longueur de Planck}$$

$$T_p = \frac{L_p}{c} = \left(\frac{\hbar G}{c^5}\right)^{\frac{1}{2}} = 5,4 \cdot 10^{-44} \text{ s} \quad : \text{temps de Planck}$$

$$M_p = \left(\frac{\hbar c}{G}\right)^{\frac{1}{2}} = 2,2 \cdot 10^{-8} \text{ kg} \quad : \text{masse de Planck}$$

L_p , T_p pourraient jouer respectivement le rôle de quanta pour l'espace et le temps et M_p interviendrait dans certains modèles d'unification des interactions

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 58 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

fondamentales.



Page de titre

Sommaire



Page 59 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter



Page de titre

Sommaire



Page 60 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Exercices et Problèmes

EP 1.1 Rayonnement du corps noir

1- Ecrire l'expression de la loi de Planck donnant la densité spectrale de l'énergie en fonction de la fréquence ν . Interpréter cette loi.

2- Donner l'expression de la loi de Planck en fonction de la longueur d'onde λ . En déduire la loi de déplacement de Wien et la valeur de la constante C_0 de Wien (on posera $x = \frac{hc}{\lambda kT}$).

On donne :

· La solution de l'équation $\frac{x}{5} = 1 - e^{-x}$ est $x = 4.965$.

3- La loi de Stefan-Boltzmann énonce que l'énergie électromagnétique totale à l'intérieur d'une cavité dont les parois sont maintenues à la température T est proportionnelle à T^4 . Montrer comment cette loi se déduit des résultats précédents. Evaluer le facteur de proportionnalité α .

Montrer alors que la puissance rayonnée par unité de surface du corps noir est égale à $P = \sigma T^4$ où σ est la constante de Stefan. Donner la valeur de σ .

On donne : $\int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \frac{\pi^4}{15} = 6.4938$.

4- Applications :

4.1- Le spectre du soleil présente un maximum pour la longueur d'onde $\lambda = 0.55 \mu\text{m}$. Evaluer la température à la surface du soleil en l'assimilant à un corps


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 61 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

noir ?

4.2- A quelle longueur d'onde se situe la maximum de rayonnement du corps humain assimilé à un corps noir ?

4.3- Montrer que dans une cavité vide imperméable aux radiations et à la chaleur, on a la relation :

$$T^3 V = \text{constante}$$

où T est la température de la cavité et V son volume.

Appliquer cette relation au cas de l'univers et montrer que l'on a :

$$TR = \text{constante}$$

où R est le rayon de l'univers et sa température moyenne.

Commenter cette relation.

EP 1.2 Effet photoélectrique

Une cellule photoélectrique de cathode C est montée en série avec un générateur de tension continue G et un ampermètre A . Les résistances de G et A sont négligeables et la tension fournie par G est réglable.

1- On éclaire la cathode de la cellule avec une radiation monochromatique de longueur d'onde λ dans le vide. G est branché de telle manière que le courant dans A est nul lorsque la tension aux bornes de G est supérieure à une certaine tension U_s .



Page de titre

Sommaire



Page 62 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

1.1- Indiquer sur un schéma les polarités des bornes de G .

1.2- Un photon d'énergie ε arrivant sur la cathode C peut provoquer l'émission d'un électron d'énergie cinétique ε_c . Ecrire les relations qui existent entre :

- ε_c et la tension U_s ;
- ε , ε_c et le travail d'extraction W_0 d'un électron de la cathode C .

1.3-

Pour $\lambda = \lambda_1 = 0.4047 \mu\text{m}$, $U_s = U_1 = 1.18 \text{ V}$

Pour $\lambda = \lambda_2 = 0.4358 \mu\text{m}$, $U_s = U_2 = 0.96 \text{ V}$

Déterminer la valeur de la constante de Planck h , et la valeur de la longueur d'onde λ_0 correspondant au seuil photoélectrique de la cellule.

2- On inverse la polarité de G et on éclaire C par un faisceau de lumière monochromatique de longueur d'onde $\lambda_1 = 0.4047 \mu\text{m}$, et d'intensité constante. Lorsque la tension U fournie par G est assez grande, le courant i mesuré par A est indépendant de U : i est alors égal à $20 \mu\text{A}$.

Sachant qu'un photon sur cent arrache un électron à la cathode C , calculer l'énergie apportée sur C pendant une seconde par le faisceau lumineux.

EP 1.3 Principe du photomultiplicateur

Un photomultiplicateur est un dispositif qui permet d'amplifier le courant électrique i_c correspondant aux électrons émis par effet photoélectrique par une cathode quand i_c est très faible. Les électrons émis par la cathode sont focalisés sur une première anode appelée dynode et en arrachent des électrons. Ces électrons, dits secondaires,



Page de titre

Sommaire



Page 63 de 978

Retour

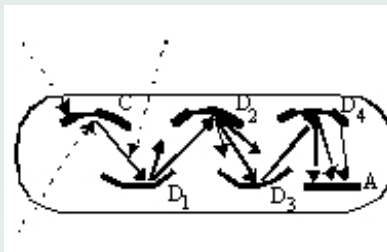
Plein écran

Fermer

Quitter

sont focalisés à leur tour sur une deuxième dynode et ainsi de suite jusqu'à l'anode collectrice A. Chacune des dynodes étant portée à un potentiel croissant.

Sachant qu'un électron incident frappant une dynode provoque l'émission de K électrons et que l'on a n dynodes, calculer l'intensité du courant de sortie i_s recueilli à l'anode en fonction de i_c , K et n .



Application numérique : calculer i_s lorsque la cathode émet 30 électrons par seconde et que $K = 4$, $n = 6$.

EP 1.4 : Modèle de J.J. Thomson

Dans le modèle J.J. Thomson l'atome d'hydrogène est constitué d'une sphère pleine de rayon R , uniformément chargée positivement et dans laquelle se déplace l'électron de masse m et de charge q .

1- Calculer le champ électrique $\vec{E}$ créée par la distribution volumique de charges représentant le proton.



Page de titre

Sommaire



Page 64 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

2- Montrer qu'en l'absence de champ extérieur, le mouvement de l'électron est celui d'un oscillateur harmonique de constante de rappel :

$$k = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 R^3}.$$

3- En prenant $R = 10^{-8} \text{ cm}$ calculer la pulsation ω de ce mouvement ainsi que sa fréquence. Déterminer alors la longueur d'onde λ de la lumière émise et situer la raie correspondante sur le spectre d'émission de l'atome d'hydrogène.

EP 1.5 : Diffusion de Rutherford

Pour vérifier la validité du modèle de Thomson, Ernest Rutherford réalisa en 1908 une expérience qui consiste à bombarder une plaque d'or par des particules α (noyaux d'hélium composés de deux protons et deux neutrons) en vue d'étudier la diffusion de ces particules par les atomes d'or.

Pour modéliser cette expérience on considère une particule α de charge $2q$ et de masse m se déplaçant dans le champ électrostatique créée par un noyau atomique d'or de charge Zq et de masse M .

À l'instant $t = 0$ on suppose que le noyau est immobile à l'origine O d'un référentiel galiléen $R (O, \vec{i}, \vec{j}, \vec{k})$ et que la particule α arrive de l'infini avec une vitesse $\vec{V}_0$ dont le support est à la distance b de O , b est appelé paramètre d'impact (voir figure).

À un instant quelconque on note $\overrightarrow{OP}$ le vecteur position de la particule α , $\vec{V}$ son



Page de titre

Sommaire



Page 65 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

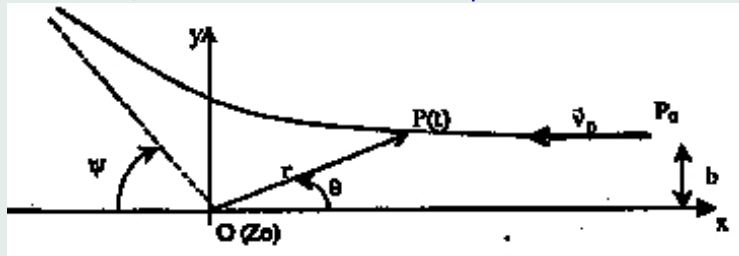
Quitter

vecteur vitesse et $\vec{L}$ son moment cinétique par rapport à O .

On suppose également que l'interaction entre les deux particules est purement coulombienne et décrite par la force :

$$\vec{F} = \frac{2Zq^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\vec{OP}}{\|\vec{OP}\|^3}$$

On pose $\vec{OM} = r \vec{u}_r$ et on introduit le vecteur de Laplace $\vec{A}$ défini par $\vec{A} = \vec{V} \wedge \vec{L} + B \vec{u}_r$ où B est une constante positive.



1- Montrer que $\vec{L}$ se conserve au cours du mouvement. Préciser le plan du mouvement.

2- Exprimer $\vec{V}$ dans la base cylindrique orthonormée directe $(\vec{u}_r, \vec{u}_\theta, \vec{k})$.

3- Montrer que $\vec{A}$ est orthogonal à $\vec{L}$ et déterminer la valeur de la constante B pour que le vecteur de Laplace soit une constante du mouvement.

4- Montrer que la force $\vec{F}$ dérive d'une énergie potentielle $E_p(r)$ que l'on déterminera



Page de titre

Sommaire



Page 66 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

en prenant $E_p(\infty) = 0$. On notera alors E l'énergie mécanique de la particule à un instant t quelconque.

5- 5.1- Déterminer la valeur E_0 de E à l'instant $t = 0$. En déduire la trajectoire de la particule.

5.2- Montrer que E s'écrit : $E = \frac{1}{2}m \left(\frac{dr}{dt} \right)^2 + \frac{1}{2}m \frac{V_0^2 b^2}{r^2} + \frac{\alpha}{r}$

5.3- Montrer que r est supérieur ou égal à une distance r_m , que l'on déterminera.

6- Soit $\vec{V}_f$ le vecteur vitesse de la particule lorsqu'elle est de nouveau infiniment éloignée de O .

On pose $\beta = (\vec{V}_0, \vec{V}_f)$.

6.1- Déterminer $\|\vec{V}_f\|$.

6.2- Exprimer $\vec{V}_f$, dans la base $(\vec{i}, \vec{j}, \vec{k})$.

6.3- En utilisant la conservation de $\vec{A}$, déterminer β (il suffira de déterminer $\tan \frac{\beta}{2}$).

7- Commenter les résultats de cette expérience.

EP 1.6 Perte d'énergie par rayonnement de l'atome d'hydrogène et modèle de Bohr

L'atome d'hydrogène est constitué d'un proton de masse M et de charge $+q$ et d'un électron de masse $m \ll M$ et de charge $-q$. L'un des premiers modèles



Page de titre

Sommaire



Page 67 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

atomiques consiste à considérer que, suite à l'interaction coulombienne, l'électron décrit autour du proton une orbite elliptique comme le feraient les planètes autour du soleil. Mais, à la différence des planètes, l'électron est une particule chargée qui rayonne au cours de son mouvement un champ électromagnétique auquel elle cède une partie de son énergie. L'objet de ce problème est de montrer les limites de ce modèle et de présenter les hypothèses qui l'ont concilié avec la réalité physique.

1- Calculs préliminaires :

On suppose que le proton est fixé à l'origine O d'un référentiel galiléen où l'on se place dans tout le problème et on considère pour simplifier, des orbites électroniques circulaires. On notera $\overrightarrow{OP} = \overrightarrow{r}$ le vecteur position de l'électron.

a. Montrer qu'il est légitime de négliger la force de gravitation devant la force d'interaction coulombienne entre le proton et l'électron.

b. Déterminer la relation qui existe entre le rayon r de la trajectoire de l'électron et sa vitesse V .

c. Déterminer l'énergie cinétique E_c , l'énergie potentielle E_p puis l'énergie mécanique totale E de l'électron en fonction de r , de q et de la permittivité absolue du vide ϵ_0 .

d. Montrer que l'énergie de l'atome est pratiquement égale à l'énergie E de l'électron.

Calculer cette énergie lorsque le rayon de l'orbite vaut $r = a = 0.53 \text{ \AA}$.

On notera E_0 cette énergie.

e. Exprimer le moment cinétique $\overrightarrow{L_0}$ de l'électron par rapport à O , en fonction des



Page de titre

Sommaire



Page 68 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

mêmes données.

2- Perte d'énergie de l'atome :

La puissance rayonnée dans le vide par une particule chargée accélérée est en première approximation :

$$P(t) = \frac{q^2}{6\pi\epsilon_0 c^3} \gamma^2$$

où q est la valeur de la charge et γ le module de son accélération.

a. Ecrire la relation qui existe entre la puissance P rayonnée par l'électron et son énergie E .

b. En admettant que la distance r de l'électron au noyau, son énergie E et son accélération γ sont des fonctions du temps qui vérifient entre elles les relations trouvées dans 1., déterminer l'équation différentielle vérifiée par l'énergie $E(t)$.

c. Déterminer la loi d'évolution de $r(t)$ et décrire le mouvement de l'électron pour atteindre le noyau. Discuter alors la validité de ce modèle.

3- Modèle de Bohr :

a. Rappeler les hypothèses de Bohr.

b. Montrer que l'énergie de l'atome est quantifiée et qu'elle peut s'écrire :

$$h\nu = E_n = \frac{E_0}{n^2}$$

Déterminer E_0 en fonction des données du problème.



Page de titre

Sommaire



Page 69 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

c. Evaluer le rayon orbital α de l'électron et l'énergie E de l'atome dans son état fondamental $n = 1$.

d. Les radiations monochromatiques émises par l'atome d'hydrogène dans la région spectrale du visible et le proche ultraviolet constituent la série de Balmer. Les longueurs d'onde correspondantes vérifient la relation empirique suivante :

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left[\frac{1}{4} - \frac{1}{n^2} \right], \quad n = 3, 4, 5, \dots$$

où R_H est la constante de Balmer dont la valeur expérimentale est

$$R_H = 109677 \text{ cm}^{-1}$$

α - Déterminer les longueurs d'onde λ_α , λ_β , λ_γ et λ_δ correspondant à

$$n = 3, 4, 5 \text{ et } 6$$

Quelle est la limite vers laquelle tend la longueur d'onde λ lorsque n augmente indéfiniment.

β - Déterminer dans le cadre du modèle de Bohr, l'expression de R_H en fonction des données du problème. Calculer sa valeur numérique et la comparer à la valeur expérimentale obtenue par Balmer.

e. En toute rigueur le noyau n'est pas immobile. Montrer que lorsqu'on tient compte de l'effet de son entrainement, la constante de Rydberg est légèrement



Page de titre

Sommaire



Page 70 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

modifiée et devient :

$$R = \frac{R_{\infty}}{1 + \frac{m}{M}}$$

f. Le deutérium (isotope de l'hydrogène) a été découvert en observant un dédoublement des raies atomiques. On a mesuré en effet la longueur d'onde $\lambda_{\alpha} = 6562.8 \text{ \AA}$ dans le cas de l'hydrogène et $\lambda'_{\alpha} = 6561.01 \text{ \AA}$ dans le cas du deutérium.

Déduire à partir de ces mesures le rapport des masses du deutérium et de l'hydrogène.

EP 1.7 : Energie de liaison du positronium

Le modèle de Bohr peut être appliqué au positronium, système qui est constitué d'un électron (de masse m et de charge $-q$) et d'un positron (l'antiparticule de l'électron, de même masse m de charge $+q$) en rotation l'un par rapport à l'autre. L'étude du positronium peut se ramener alors à l'étude d'une particule fictive M .

α - Déterminer les caractéristiques de cette particule fictive ainsi que la nature de son mouvement.

β - En utilisant les résultats du modèle de Bohr, déterminer l'énergie de liaison du positronium dans son état fondamental ainsi que le rayon de la première orbite.

EP 1.8 : Détermination spectroscopique du rapport $\frac{M(\text{électron})}{m(\text{proton})}$



Page de titre

Sommaire



Page 71 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Pour déterminer le rapport de la masse de l'électron m sur la masse du proton M à partir de données spectroscopiques sur l'atome d'hydrogène, Higgins a mesuré en 1886 la longueur d'onde $\lambda = 6562.79\text{\AA}$ de la première raie de la série de Balmer : la raie H_α .

1- Sachant que l'indice de réfraction de l'air dans les conditions normales de température et de pression est $n = 1.0002762$, déterminer la longueur d'onde λ_0 de la raie H_α dans le vide ainsi que sa fréquence d'émission. En déduire le nombre d'onde en cm^{-1} qui lui correspond.

2- En utilisant le modèle de Bohr et en tenant compte du mouvement d'entraînement du noyau, évaluer le rapport $\frac{M}{m}$ et le comparer à sa valeur exacte qui est 1836.31

EP 1.9 : Expérience de Franck et Hertz

L'expérience de Franck et Hertz a été réalisée en 1914 et a donné une preuve supplémentaire de la quantification des niveaux d'énergie atomiques. Elle consiste à bombarder de la vapeur de mercure dans un tube à vide par des électrons accélérés sous une différence de potentiel allant jusqu'à une vingtaine de volts : le dispositif est constitué de trois électrodes : une cathode constituée d'un filament chauffé qui émet les électrons, une anode qui est une grille portée à un potentiel positif U et qui a pour rôle d'accélérer les électrons et une troisième électrode qui est une plaque portée à un potentiel légèrement plus petit que celui de l'anode et qui a pour effet de repousser



Page de titre

Sommaire



Page 72 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

les électrons qui traversent la grille mais qui ont une très faible énergie cinétique (fig 1).

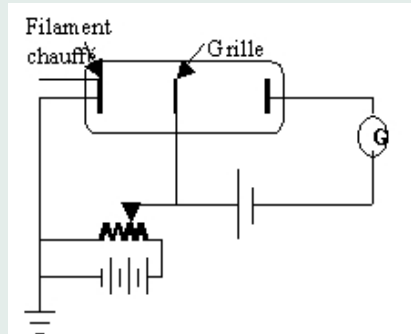


Figure 1

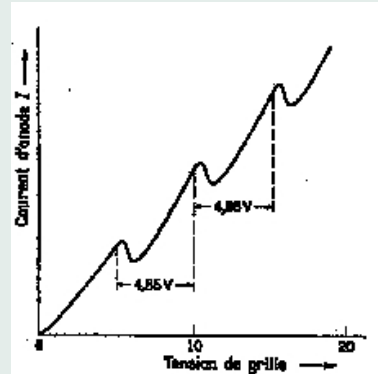


Figure 2

La mesure du courant I arrivant sur la plaque en fonction de la tension accélératrice U appliquée entre le filament et la grille conduit à la caractéristique $I - V$ représentée sur la figure 2.

On constate que tant que $U \leq 4.9V$, le courant I croît régulièrement en fonction de U . A $4.9V$ ce courant décroît brutalement, passe par un minimum et augmente à nouveau jusqu'à un nouveau maximum séparé du premier par $4.9V$. Pour une tension U qui augmente jusqu'à $20V$ le processus se répète à nouveau.

1- Interpréter cette expérience et montrer qu'on peut en déduire l'existence de niveaux d'énergie quantifiés dans l'atome.



Page de titre

Sommaire



Page 73 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

2- Evaluer le potentiel d'excitation de l'atome qui correspond à l'énergie séparant le niveau fondamental du premier niveau excité.

3- Evaluer la longueur d'onde du photon émis dans ce processus.

EP 1.10 : Modèle de Wilson-Sommerfeld

1- En appliquant les conditions de quantification de Wilson-Sommerfeld à un électron de masse m et de charge $-q$, animé d'un mouvement circulaire uniforme, sur une orbite de rayon r_0 autour d'un noyau supposé fixe, de masse M et de charge Zq , vérifier que l'on retrouve la condition de quantification de Bohr.

2- Afin d'expliquer la structure fine d'un atome hydrogénéoïde, on suppose maintenant que l'électron décrit des orbites elliptiques de grand axe a et de petit axe b et dont le noyau occupe l'un des foyers. L'électron étant soumis à un potentiel newtonien $V(r) = -\frac{km}{r}$, où k est une constante ; des considérations de mécanique classique montrent que l'équation de la trajectoire est donnée en coordonnées polaires par :

$$r = \frac{\frac{C^2}{k}}{1 + A\frac{C^2}{k} \cos \theta}$$

qui est l'équation d'une conique de paramètre $p = \frac{C^2}{k}$ et d'excentricité $e = A\frac{C^2}{k}$.



Page de titre

Sommaire



Page 74 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

C étant la constante des aires et est donnée par $C = r^2 \dot{\theta}$ et A est une constante positive.

Ecrire les conditions de quantification de Wilson-Sommerfeld pour les coordonnées r et θ et vérifier leur homogénéité.

3- Conditions de quantification sur r et θ :

a- Montrer que la condition de quantification sur θ conduit à :

$$mC = n_{\theta} h$$

où n_{θ} est un entier positif non nul.

b- Montrer que le mouvement de l'électron peut être décrit par les deux équations suivantes :

$$\begin{cases} r^2 = \frac{2}{n_{\theta}^2} [E - V(r)] - \frac{C^2}{r^2} \\ \left(\frac{dr}{d\theta} \right)^2 = \frac{2r^4}{mC^2} [E - V(r)] - r^2 \end{cases}$$

où E est l'énergie totale de l'électron.

En déduire que la condition sur r conduit à :

$$2 \int_{r_1}^{r_2} \sqrt{-A^2 + 2B \frac{1}{r} - \frac{m^2 C^2}{r^2}} dr = n_r h$$

où n_r est un entier naturel.



Page de titre

Sommaire



Page 75 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Expliciter A et B en fonction de l'énergie E et des données du problème. r_1 et r_2 étant les racines du terme sous le radical.

4- En admettant qu'on a :

$$\int_{r_1}^{r_2} \sqrt{-A^2 + 2B\frac{1}{r} - \frac{m^2 C^2}{r^2}} dr = \pi \left(\frac{B}{A} - Cm \right)$$

a- En déduire les relations suivantes, donnant l'aplatissement de la trajectoire elliptique de l'électron et son énergie E :

$$\frac{a-b}{a} = 1 - \frac{n_\theta}{n_r + n_\theta}$$

$$E = -Z E_i \frac{n_\theta}{(n_r + n_\theta)^2}$$

Exprimer E_i en fonction des données du problème et calculer numériquement E_i et a , pour $n_r + n_\theta = 1$ et $Z = 1$

b- Représenter graphiquement les familles de trajectoires pour $n_r + n_\theta = 1, 2, 3$. Quelles valeurs peut prendre n_θ ?

EP 1.11 : Superfluidité de l'hélium

A la pression normale, l'hélium se liquéfie à la très basse température de $T = 4.2^\circ K$. Il subit à la température plus basse $T_\lambda = 2.18^\circ K$ une transition de phase


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 76 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

de sorte qu'au dessus de cette température, l'hélium qui est baptisé "hélium II" est superfluide et s'écoule avec une viscosité nulle. Il possède en outre dans cette phase une conductivité thermique anormalement élevée.

1- Montrer que l'action associée à ce phénomène est :

$$\mathcal{A} = M^{\frac{5}{6}} (kT_{\lambda})^{\frac{1}{2}} \rho^{-\frac{1}{3}}$$

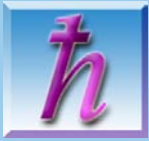
où M est la masse d'un atome d'hélium, ρ la densité volumique de l'hélium et k la constante de Boltzmann. Commenter le bien-fondé de cette expression.

2- Ce phénomène est-il de nature quantique ? Justifier la réponse.

On donne :

$$M = 6.67 \times 10^{-27} \text{ kg}$$

$$\rho = 1.46 \times 10^2 \text{ kg m}^{-3}$$



Page de titre

Sommaire



Page 77 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Chapitre 2

Dualité onde-corpuscule

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 78 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

Les études menées sur la nature de la lumière montrent que suivant les conditions de l'expérience réalisée, la lumière peut être décrite soit par une onde électromagnétique soit par une assemblée de corpuscules : les photons.

L'aspect ondulatoire de la lumière se manifeste par des phénomènes d'interférences et de diffraction tandis que l'aspect corpusculaire apparaît relativement dans l'effet photoélectrique.

Dans le cas de la lumière, on peut donc dire qu'il y a une dualité onde-corpuscule bien établie.

Pour les particules matérielles les choses ne semblent pas à priori aussi évidentes : La nature corpusculaire des particules est une vérité de Lapalisse, toute particule est un corpuscule et se manifeste donc comme telle, alors qu'une manifestation ondulatoire d'un corpuscule n'est pas une réalité physique tangible.

C'est à Louis Victor De Broglie qu'on doit l'association des propriétés ondulatoires aux corpuscules : ce qui est vrai pour les photons devrait l'être pour tout type de particule, c'est à dire que la matière doit posséder comme la lumière la double entité ondulatoire et corpusculaire.

La physique moderne devra donc rendre compte de deux aspects différents du même objet pour ne pas se heurter aux difficultés rencontrées par la physique classique qui est intégrée dans un schéma figé à deux objets distincts : L'onde et le corpuscule.

Nous allons montrer dans ce chapitre que lumière et matière ont la double entité ondulatoire et corpusculaire et que ces deux aspects sont

[Page de titre](#)[Sommaire](#)

Page 79 de 978

[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

complémentaires.



Page de titre

Sommaire



Page 80 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

1. Cas de la lumière

1.1. Aspect ondulatoire

1.1.1. Mise en évidence

L'aspect ondulatoire de la lumière est révélé par l'existence des phénomènes de diffraction et d'interférences. De tels phénomènes se retrouvent d'ailleurs dans de nombreux domaines de la physique (mécanique, acoustique,...) et trouvent une interprétation générale dans un même formalisme mathématique.

L'onde, qu'elle soit scalaire ou vectorielle est, avant tout, le déplacement à vitesse finie de la variation d'une grandeur physique.

Pour l'onde acoustique par exemple la grandeur qui se propage est la variation de la pression et pour l'onde lumineuse la grandeur qui se propage est la variation vectorielle du champ électrique ou magnétique.

A ce titre c'est essentiellement un processus de transport d'énergie : L'énergie transportée est proportionnelle au carré de l'amplitude de l'onde.

L'onde est décrite par une fonction $\Psi(\vec{r}, t)$ qui satisfait à une équation différentielle aux dérivées partielles du second ordre de la forme :

$$\Delta \Psi(\vec{r}, t) - \frac{1}{V^2} \frac{\partial^2 \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t^2} = 0 \quad (2.1)$$

et qui constitue l'équation de propagation.



Page de titre

Sommaire



Page 81 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Δ est l'opérateur laplacien et V la vitesse de propagation de l'onde.

Lorsque, à un instant t , la fonction $\Psi(\vec{r}, t)$ a même valeur en tous les points d'un plan normal à une direction de propagation, l'onde est dite plane. Si en plus, elle est une fonction périodique simple du temps, l'onde est dite plane et monochromatique et sa représentation la plus commode est donnée par :

$$\Psi(\vec{r}, t) = \Psi_0 e^{-i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})} \quad (2.2)$$

où Ψ_0 est l'amplitude de l'onde, ω sa pulsation et $\vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda} \vec{u}_r$ le vecteur d'onde, $\vec{u}_r$ étant le vecteur unitaire de la direction de propagation.

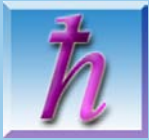
Si l'onde se propage suivant $\vec{Ox}$, cette expression devient :

$$\Psi(\vec{r}, t) = \Psi_0 e^{-i(\omega t - kx)} \quad , \quad \vec{k} = k \vec{u}_x \quad (2.3)$$

Ce formalisme permet de rendre compte convenablement des phénomènes d'interférences et de diffraction lumineuse.

1.1.2. Exemple : Expérience d'interférences des fentes d'Young :

Dans cette expérience une lumière monochromatique émise par une source S tombe sur une plaque opaque percée de deux fentes fines F_1 et F_2 qui éclairent un écran d'observation $\mathcal{E}$ disposé à une grande distance D de la plaque P (fig. 2.1).



Page de titre

Sommaire



Page 82 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

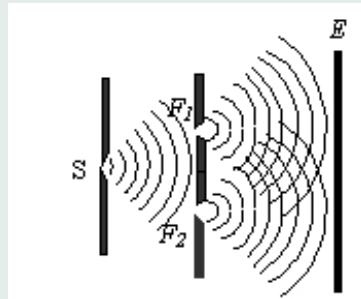


Figure 2.1 : Expérience d'interférences des fentes d'Young

Dans ce cas les grandeurs physiques oscillantes sont les composantes du champ électrique ou magnétique, de sorte qu'on peut prendre pour fonction d'onde le champ $\vec{E}$ tel que :

$$\vec{E} = \vec{E}_0 e^{-i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})} \quad (2.4)$$

Ainsi les champs issus de F_1 et F_2 sont :

$$\vec{E}_1 = \vec{E}_{10} e^{-i(\omega t - \vec{k}_1 \cdot \vec{r}_1)} \quad (2.5)$$

$$\vec{E}_2 = \vec{E}_{20} e^{-i(\omega t - \vec{k}_2 \cdot \vec{r}_2)} \quad (2.6)$$

Comme l'écran d'observation est loin de la plaque (fig. 2.2), on a :

$$\vec{k}_1 \approx \vec{k}_2 \approx \vec{k}.$$



Page de titre

Sommaire



Page 83 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

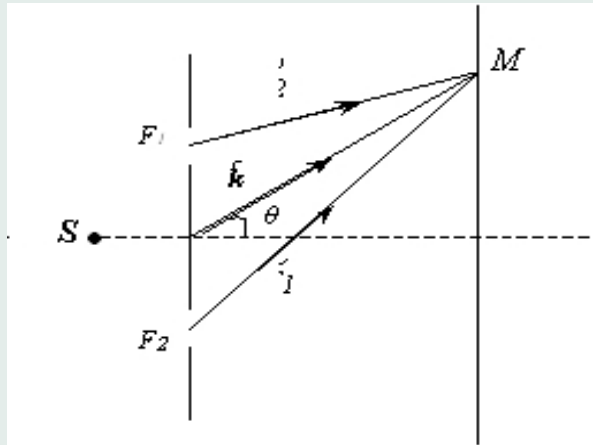


Figure 2.2 : Illustration du calcul de l'intensité lumineuse en un point M de l'écran

Le champ résultant au point M sur l'écran $\mathcal{E}$ est :

$$\begin{aligned}\vec{E} &= \vec{E}_1 + \vec{E}_2 = \vec{E}_{10} e^{-i(\omega t - \vec{k}_1 \cdot \vec{r}_1)} + \vec{E}_{20} e^{-i(\omega t - \vec{k}_2 \cdot \vec{r}_2)} \\ &= e^{-i\omega t} [\vec{E}_{10} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_1} + \vec{E}_{20} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_2}]\end{aligned}\quad (2.7)$$

L'intensité lumineuse $\mathcal{I}$ en M est telle que : $\mathcal{I} \propto |\vec{E}(M)|^2$, soit :

$$|\vec{E}(M)|^2 = \vec{E} \cdot \vec{E}^* = E_{10}^2 + E_{20}^2 + 2 E_{10} E_{20} \cos \vec{k} \cdot (\vec{r}_2 - \vec{r}_1) \quad (2.8)$$



Page de titre

Sommaire



Page 84 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

qui s'écrit :

$$I = E_{10}^2 + E_{20}^2 + 2 E_{10} E_{20} \cos \delta \quad (2.9)$$

où

$$\delta = \vec{k} \cdot (\vec{r}_2 - \vec{r}_1) = \vec{k} \cdot 2\vec{a} = 2ka \sin \theta = \frac{4\pi}{\lambda} a \sin \theta \approx \frac{4\pi}{\lambda} a \frac{x}{D} \quad (2.10)$$

et E_{10} et E_{20} sont les amplitudes des ondes à la sortie des deux fentes F_1 et F_2 distantes de $2a$.

* Si $\cos \delta = 1 \implies \delta = 2n\pi \implies \mathcal{I} = (E_{10} + E_{20})^2$: on aura interférence constructive (maximum de lumière).

* Si $\cos \delta = -1 \implies \delta = (2n + 1)\pi \implies \mathcal{I} = (E_{10} - E_{20})^2$: on aura interférence destructive (minimum de lumière ou même obscurité si $E_{10} = E_{20}$).

Lorsque $E_{10} = E_{20}$ on aura au point M :

Une frange obscure pour $\frac{4\pi}{\lambda} a \frac{x}{D} = 2n\pi$

Une frange lumineuse pour $\frac{4\pi}{\lambda} a \frac{x}{D} = (2n + 1)\pi$

L'interfrange i est telle que : $2\pi = \frac{4\pi}{\lambda} a \frac{i}{D} \implies i = \frac{\lambda D}{2a}$

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 85 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

1.2. Aspect corpusculaire

Newton déjà, considérait la lumière comme un jet de corpuscules qui rebondissent lors de la réflexion sur un miroir, mais il a fallu attendre A.H Compton (1923) pour que le photon soit directement mis en évidence en tant que corpuscule individualisé, car l'effet photoélectrique montre seulement que l'échange d'énergie entre la lumière et la matière se fait par quantum d'énergie de valeur $h\nu$.

1.2.1. Effet Compton

Expérimentalement, on réalise la diffusion Compton en envoyant un faisceau de rayon X dont la longueur d'onde est de quelques angströms) sur une substance contenant un certain nombre d'électrons libres (calcite, Aluminium,...). Si la cible est assez mince, on observe, par transmission des rayons X diffusés en dehors de la direction incidente avec une longueur d'onde légèrement plus élevée c'est à dire une fréquence plus basse (fig. 2.3) :



Page de titre

Sommaire



Page 86 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

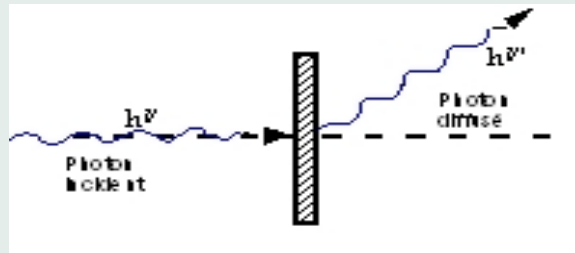
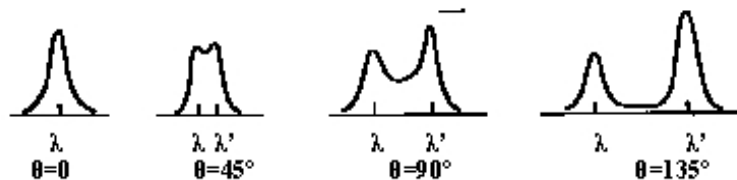


Figure 2.3 : Diffusion Compton

Compton a trouvé également que la longueur d'onde λ' des rayons diffusés est fonction de l'angle θ que font ces rayons avec la direction incidente (fig. 2.4).

La relation entre λ' , λ et θ étant :

$$\lambda' = \lambda + A \sin^2 \frac{\theta}{2} \quad (2.11)$$





Page de titre

Sommaire



Page 87 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Figure 2.4 : Spectre de rayonnement diffusé par effet Compton pour quatre angles de diffusion différents

1.2.2. Interprétation

La théorie classique de la diffusion des rayons X développée par J.J Thomson ne peut rendre compte de la relation trouvée par Compton ($\lambda' \neq \lambda$).

Pour expliquer ces résultats, Compton a supposé que les photons X sont des corpuscules qui entrent en collision avec les électrons de la cible. Dans une telle collision, il y a **conservation de la quantité de mouvement et de l'énergie** et la théorie élémentaire des collisions peut donc fournir une interprétation même quantitative des résultats expérimentaux.

Comme les photons, se déplacent à la vitesse de la lumière, les équations de conservation doivent s'écrire dans un formalisme relativiste.

On a alors pour la conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement les équations suivantes :

$$\mathcal{E} + E_0 = \mathcal{E}' + E_e \quad (2.12)$$

$$\vec{P} = \vec{P}' + \vec{P}_e \quad (2.13)$$

où $\mathcal{E}$, $\vec{P}$ et $\mathcal{E}'$, $\vec{P}'$ sont respectivement les énergie et quantité de mouvement des photons incident et diffusé et E_0 l'énergie de l'électron au repos et E_e et $\vec{P}_e$ son énergie et sa quantité de mouvement après le choc avec le photon.


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

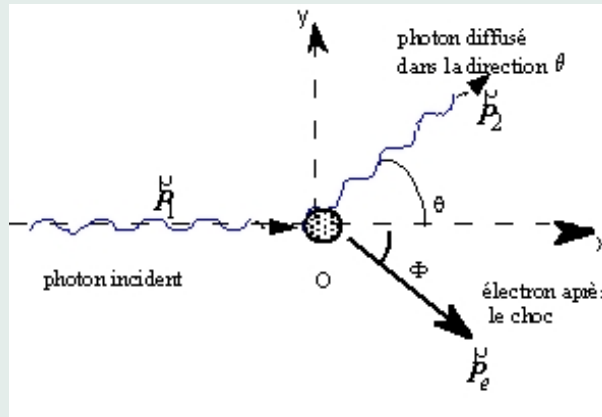
[Page 88 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)


Figure 2.5 : Collision entre un photon et un électron libre au repos

En relativité restreinte l'énergie E d'une particule et sa quantité de mouvement $\vec{p}$ sont reliés par :

$$p = E \frac{v}{c^2} \quad (2.14)$$

$$E^2 = c^2 (p^2 + m^2 c^2) \quad (2.15)$$

de sorte que'on a pour l'électron de masse m et de vitesse $\vec{v}$ et pour le photon



Page de titre

Sommaire



Page 89 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

de masse nulle et de vitesse c :

$$\begin{cases} E_0 = mc^2, & E_e = \gamma mc^2 \text{ et} & \vec{P}_e = \gamma m \vec{V} \\ \mathcal{E} = h\nu, & \mathcal{E}' = h\nu' \text{ et} & \left| \vec{P} \right| = \frac{h\nu}{c} \end{cases} \quad (2.16)$$

En explicitant les différents termes et en projetant la conservation de la quantité de mouvement sur les axes $\vec{Ox}$ et $\vec{Oy}$ d'un référentiel orthonormé (fig. 2.5), on obtient le système d'équations suivant :

$$h\nu + mc^2 = h\nu' + \gamma mc^2 \quad (2.17)$$

$$\frac{h\nu}{c} = \frac{h\nu'}{c} \cos \theta + \gamma m V \cos \varphi \quad (2.18)$$

$$0 = \frac{h\nu'}{c} \sin \theta - \gamma m V \sin \varphi \quad (2.19)$$

où V est la vitesse de l'électron, m sa masse, c la célérité de la lumière et

$$\gamma = \left(1 - \frac{V^2}{c^2}\right)^{-1/2} \quad (2.20)$$

Les équations (2.18) et (2.19) conduisent après élimination de φ , élévation au carré et addition, à l'équation :

$$\frac{h^2\nu^2}{c^2} + \frac{h^2\nu'^2}{c^2} - 2\frac{h^2\nu\nu'}{c^2} \cos \theta = \gamma^2 m^2 c^2 \quad (2.21)$$



Page de titre

Sommaire



Page 90 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

L'équation (2.17) donne, après élévation au carré et division par c^2 , l'équation :

$$\frac{h^2\nu^2}{c^2} + \frac{h^2\nu'^2}{c^2} - 2\frac{h^2\nu\nu'}{c^2} + m^2c^2 + 2mh(\nu - \nu') = \gamma^2 m^2 c^2 \quad (2.22)$$

La différence entre (2.21) et (2.22) divisée par $mh\nu\nu'$ conduit alors à :

$$\frac{1}{\nu'} - \frac{1}{\nu} = \frac{h}{mc^2}(1 - \cos \theta) \quad (2.23)$$

soit encore :

$$\lambda' - \lambda = \frac{2h}{mc} \sin^2 \frac{\theta}{2} \quad (2.24)$$

qui est la formule de Compton et qui rend exactement compte des observations expérimentales.

Il est facile de vérifier que la quantité h/mc est homogène à une longueur, c'est la longueur d'onde Compton λ_c . Sa faible valeur ($\lambda_c \approx 0,025\text{\AA}$) explique pourquoi l'effet n'est sensible que pour les très petites longueurs d'onde (quelques angströms).

Il est également possible de calculer l'angle φ et l'énergie cinétique de l'électron éjecté, on trouve :

$$\cotg \varphi = (1 + \alpha) \operatorname{tg} \frac{\theta}{2} \quad (2.25)$$

$$E_c = \frac{2\alpha \cos^2 \varphi}{(1 + \alpha)^2 - \alpha^2 \cos^2 \varphi} h\nu \quad (2.26)$$



Page de titre

Sommaire



Page 91 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

avec

$$\alpha = \frac{h\nu}{mc^2} \quad (2.27)$$

1.3. Dualité onde-corpuscule

Nous avons vu que la lumière est formée d'une assemblée de photons qui se manifeste soit de manière ondulatoire soit de manière corpusculaire. Doit-on en conclure que la lumière ne peut se manifester que sous une forme ou sous une autre ?

Pour répondre à cette question, nous allons analyser l'expérience bien connue des fentes d'Young et nous allons montrer que l'interprétation complète des phénomènes ne peut être obtenue qu'en conservant à la fois l'aspect ondulatoire et l'aspect corpusculaire de la lumière. Nous introduirons alors le lien statistique entre ces deux aspects et nous dégagerons quelques notions quantiques fondamentales : amplitude de probabilité, état du système,...

Le dispositif de cette expérience a été présenté sur la figure 2.1.

1.3.1. Analyse en terme de corpuscule

Nous allons considérer successivement trois expériences : F_1 ouverte F_2 fermée, F_1 fermée F_2 ouverte, F_1 et F_2 ouvertes (fig. 2.6).



Page de titre

Sommaire



Page 92 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

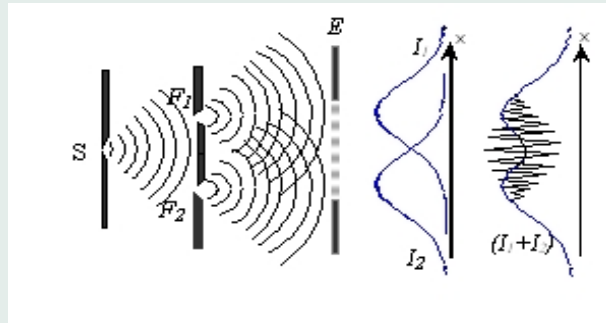


Figure 2.6 : Complémentarité entre aspect corpusculaire et aspect ondulatoire dans l'expérience d'interférences lumineuses des fentes d' Young

- En fermant la fente F_2 , on voit sur l'écran une tache de diffraction P_1 plus grande que l'ombre portée de la fente F_1 et d'intensité décrite par $\mathcal{I}_1(x)$: on peut interpréter cette diffraction par des effets de bord de F_1 sur les photons.

- Si l'on ferme F_1 et on laisse F_2 ouverte, on obtient une tache P_2 semblable à P_1 décrite par $\mathcal{I}_2(x)$.

- Si les fentes F_1 et F_2 sont ouvertes, on s'attend à trouver une tache provenant de la somme des deux taches précédentes ($P_1 + P_2$) décrite par $\mathcal{I}_1(x) + \mathcal{I}_2(x)$. Il n'en est rien et on trouve **un système de franges** (fig. 2.6).

Le fait que F_2 soit ouvert modifie donc l'histoire des photons qui passent par F_1 (et réciproquement), au point qu'en certains endroits de l'écran, on observe de l'obscurité là où l'on attendait un renforcement de la lumière.



Page de titre

Sommaire



Page 93 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

On peut tenter d'expliquer ces franges en invoquant une interaction entre les photons passant par F_1 et ceux passant par F_2 . Diminuons alors l'intensité $\mathcal{I}$ de la source et augmentons le temps de pose t de façon que le produit $(\mathcal{I}.t)$ reste constant. L'interaction devrait diminuer et à la limite s'annuler lorsque les photons seront émis un par un, mais on n'observe aucune variation de la figure d'interférences.

Les interférences ne peuvent donc s'interpréter à partir d'une interaction entre photons!!

1.3.2. Analyse en terme d'onde :

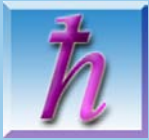
Lorsque les deux fentes sont ouvertes, l'onde lumineuse tombant en un point de l'écran $\mathcal{E}$ provient de la superposition en ce point de l'onde issue de F_1 et de l'onde issue de F_2 . Nous avons vu dans 1.1.2 que l'intensité $\mathcal{I}$ de la tâche est donnée par (2.9), soit :

$$\mathcal{I} = E_{10}^2 + E_{20}^2 + 2 E_{10} E_{20} \cos \delta \quad (2.28)$$

ou encore

$$\mathcal{I} = \mathcal{I}_1 + \mathcal{I}_2 + 2 \sqrt{\mathcal{I}_1 \mathcal{I}_2} \cos \delta \quad (2.29)$$

$\mathcal{I}_1$ et $\mathcal{I}_2$ correspondent respectivement aux intensités issues des fentes F_1 et F_2 et le terme croisé est le terme d'interférence.



Page de titre

Sommaire



Page 94 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Diminuons l'intensité de la source, l'intensité des franges devrait décroître de façon continue, or pour une intensité suffisamment faible, on voit apparaître sur la plaque des impacts localisés : l'aspect corpusculaire réapparaît ! (fig. 2.7)

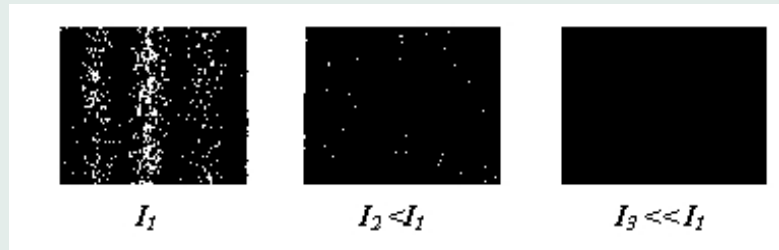


Figure 2.7 : Evolution des franges d'interférences en fonction de l'intensité I de la source lumineuse

1.3.3. Unification quantique des deux aspects

Dans son interaction avec l'écran, la lumière manifeste son aspect corpusculaire, mais la répartition d'un grand nombre de ces corpuscules, c'est à dire leur comportement statistique est lié à l'onde électromagnétique. Cette onde permet de calculer la probabilité pour que le corpuscule se manifeste. On admettra alors l'hypothèse de Max Born (1924) selon laquelle :

- $\vec{E}(\vec{r}, t)$ est la fonction d'onde du photon, elle caractérise entièrement son état à l'instant t et représente "l'amplitude de probabilité" de trouver le



Page de titre

Sommaire



Page 95 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

photon au point $\vec{r}$ à l'instant t .

- $\left| \vec{E}(\vec{r}, t) \right|^2$ est la densité de probabilité de trouver le photon au point $\vec{r}$ à l'instant t .

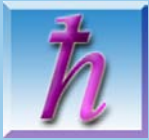
1.3.4. Conclusion

- Les aspects corpusculaire et ondulatoire de la lumière sont inséparables. La lumière se comporte à la fois comme une onde et comme un flux de particules, l'onde permettant de calculer la probabilité pour qu'un photon se manifeste.

Les prévisions sur le comportement d'un photon ne peuvent être que de type probabiliste.

- Au concept classique de trajectoire, il faut substituer celui d'état. L'état quantique du photon est caractérisé par la fonction d'onde $\vec{E}(\vec{r}, t)$.

- Enfin, toute mesure perturbe le système de façon fondamentale. Il est impossible d'observer à la fois les franges et de savoir par quelle fente est passé le photon !



Page de titre

Sommaire



Page 96 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

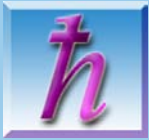
2. Cas de la matière

La matière est formée d'un ensemble infini mais dénombrable de particules. L'aspect corpusculaire de ces particules (électrons, protons,...) est un fait acquis et l'étude de leur mouvement est décrite convenablement par les principes de la mécanique classique. Toutefois des difficultés sérieuses apparaissent à l'échelle atomique où on trouve que certaines grandeurs physiques comme l'énergie, le moment angulaire,... sont quantifiées. Un pas important est franchi lorsque Louis Victor de Broglie (1924) suggère théoriquement l'existence d'un aspect ondulatoire pour les particules matérielles.

2.1. Onde de De Broglie

D'après De Broglie, la matière comme la lumière doit posséder la double entité corpusculaire et ondulatoire : les relations d'Einstein valables pour le photon doivent l'être également pour la particule.

Ainsi à une particule dont les grandeurs dynamiques sont l'énergie E et l'impulsion $\vec{p}$, correspond une onde plane de pulsation ω et de vecteur d'onde $\vec{k}$. De Broglie démontra de façon très séduisante que les couples $(E, \vec{p})$ et


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 97 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

$(\omega, \vec{k})$ sont liés par :

$$\mathbf{E} = \hbar\omega \quad (2.30)$$

$$\vec{p} = \hbar \vec{k} \quad (2.31)$$

soit encore en module :

$$p = mV = \frac{h}{2\pi} \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{h}{\lambda}$$

ce qui donne pour la longueur d'onde :

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (2.32)$$

qui est la célèbre relation de De Broglie et qui exprime la longueur d'onde associée à une particule de masse m se déplaçant à la vitesse V .

Lorsque les particules se déplacent à une vitesse V voisine de celle de la lumière on montre que la relation (2.32) devient :

$$\lambda = \frac{h}{mc} \frac{\sqrt{1 - \frac{V^2}{c^2}}}{\frac{V}{c}} \quad (2.33)$$

Avec la relation de De Broglie on comprend mieux la signification de la condition de quantification de Bohr rencontrée dans le chapitre I. En effet,



Page de titre

Sommaire

◀

▶

◀

▶

Page 98 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

dans le cas d'une orbite électronique circulaire, la circulation de $\vec{p}$ est :

$$\int \vec{p} \cdot d\vec{\ell} = 2\pi r p = nh \quad (2.34)$$

soit :

$$\frac{h}{\lambda} \cdot 2\pi r = nh \quad (2.35)$$

ou encore :

$$2\pi r = n\lambda \quad (2.36)$$

Cette relation exprime simplement l'établissement d'un système d'ondes stationnaires sur l'orbite (fig. 2.8) comme c'est le cas pour une corde vibrante.

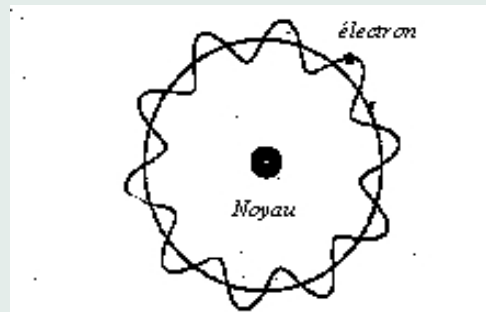


Figure 2.8 : Onde stationnaire de De Broglie pour l'électron de l'atome d'hydrogène



Page de titre

Sommaire



Page 99 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

2.2. Mise en évidence expérimentale de l'onde de De Broglie

Dans une expérience d'optique, pour mettre en évidence les propriétés ondulatoires de la lumière et donc pour déterminer la longueur d'onde λ , il faut s'arranger pour que les dimensions des instruments de mesure (largeur de fentes, pas du réseau,...) soient comparables à λ . C'est à ce moment que l'on peut observer des déviations par rapport à l'optique géométrique sous forme d'effets d'interférences ou de diffraction.

Pour un électron de quantité de mouvement $\vec{p}$ et donc d'énergie cinétique $E_c = \frac{p^2}{2m}$, la longueur d'onde associée λ est :

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mE_c}} \quad (2.37)$$

soit en utilisant les valeurs numériques de h et m :

$$\lambda(\text{\AA}) \approx \sqrt{\frac{150}{E_c(\text{eV})}} \approx \frac{12.26}{\sqrt{V(\text{volts})}} \quad (2.38)$$

Ainsi, pour une énergie raisonnable de l'ordre de 100 eV correspondant à une tension accélératrice de 100 V et à une vitesse de l'ordre de 5.10^6 m/s , la longueur d'onde associée à l'électron serait de l'ordre 1 Å. Il est donc



Page de titre

Sommaire



Page 100 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

impossible de confectionner un réseau de diffraction ayant ce pas ou une fente ayant cette largeur.

Davisson et Germer (1927) détournèrent cette difficulté en utilisant un réseau naturel : le cristal. En effet, dans un cristal la distance des plans réticulaires est d'environ $1 \text{ à } 3 \text{ \AA}$ et on peut effectuer des expériences de diffraction des électrons comme on effectue des expériences de diffraction des rayons X .

Comme le montre la figure 2.9, chaque plan réticulaire du cristal se comporte comme un miroir plan pour le faisceau d'électrons incidents.

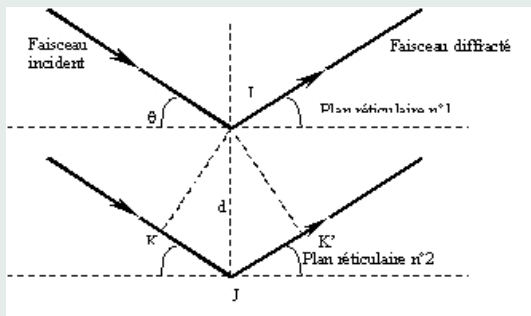


Figure 2.9 : Diffraction d'un faisceau d'électrons sur les plans réticulaires d'un cristal

Ainsi pour deux plans réticulaires adjacents les faisceaux diffractés présentent une différence de marche de $2d \sin \theta$ de sorte que les fonctions



Page de titre

Sommaire



Page 101 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

d'onde associées aux électrons incidents et diffractés s'écrivent :

$$\Psi_1 = \Psi_0 e^{-i(\omega t - kx)} \quad (2.39)$$

$$\Psi_2 = \Psi_0 e^{-i(\omega t - kx - 2kd \sin \theta)} \quad (2.40)$$

et il y aura maximum de diffraction dans les directions θ_n telles que les ondes $\Psi_1, \Psi_2, \dots$ soient toutes en phase, c'est à dire qu'on a :

$$2kd \sin \theta_n = 2n\pi \quad (2.41)$$

ou encore :

$$2d \sin \theta_n = n\lambda \quad (2.42)$$

qui est la relation de Bragg utilisée en cristallographie X .

Davisson et Germer utilisèrent un monocristal de Nickel ($d = 2,55\text{\AA}$) bombardé par des électrons de 54eV (fig. 2.10) et virent le premier maximum de diffraction pour $\theta_1 = 50^\circ$ ce qui donne $\ell = 1,65\text{\AA}$, en parfait accord avec la valeur qu'on obtient par la relation de De Broglie : $\lambda_D = 1.67\text{\AA}$.

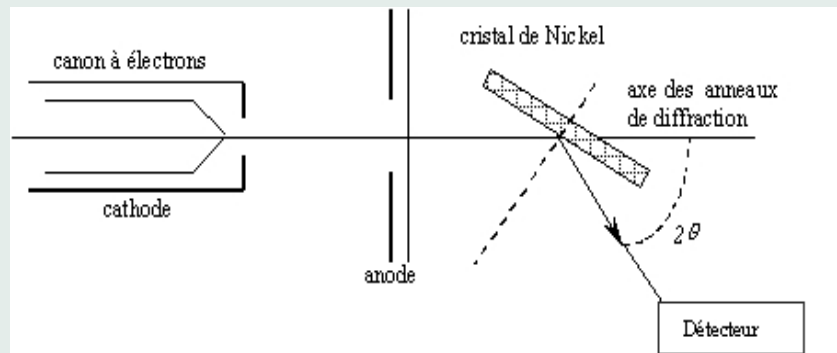
[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 102 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

Figure 2.10 : Schéma de l'expérience de Davisson et Germer

Il est également possible de réaliser avec des électrons une expérience d'interférences analogue à celle du biprisme de Fresnel qui met en évidence des franges d'interférence électroniques (fig. 2.11).



Page de titre

Sommaire



Page 103 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

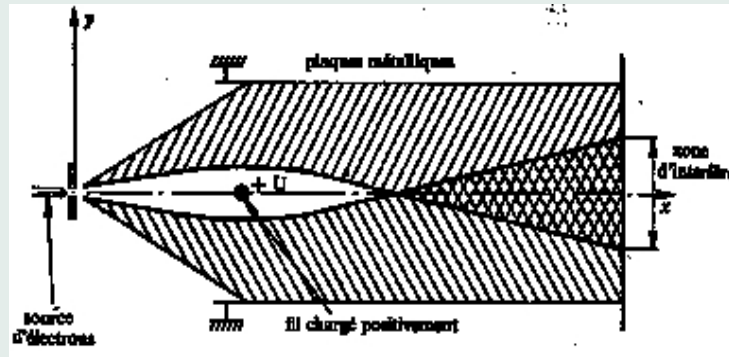


Figure 2.11 : Schéma de l'expérience d'interférences électroniques

Les deux faisceaux issus de la même source sont d'abord séparés l'un de l'autre, puis déviés par une électrode positive de façon à se recouvrir partiellement. Dans la partie commune aux deux faisceaux il y a interférence, le calcul de l'interfrange donne bien une longueur d'onde coïncidant avec la longueur d'onde de De Broglie.

2.3. Fonction d'onde d'une particule matérielle

Comme pour le photon, nous caractériserons l'état d'une particule matérielle à l'instant t par la donnée d'une fonction d'onde $\Psi(\vec{r}, t)$ qui contient toutes les informations sur la particule. $\Psi(\vec{r}, t)$ est interprétée comme une amplitude de



Page de titre

Sommaire

◀

▶

◀

▶

Page 104 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

probabilité de présence de la particule au point $\vec{r}$ à l'instant t . $|\Psi(\vec{r}, t)|^2$ est la densité de probabilité de présence et

$$dP = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r \quad (2.43)$$

est la probabilité de trouver la particule à l'instant t dans l'élément de volume $d^3r = dx dy dz$.

Il est évident que la probabilité totale pour trouver la particule n'importe où dans l'espace, à l'instant t , doit être finie et égale à l'unité :

$$\int |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r = 1 \quad (2.44)$$

La fonction $\Psi(\vec{r}, t)$ dont l'intégrale sur tout l'espace du carré de l'amplitude est finie est dite fonction de carrée sommable.

2.4. Equation d'onde

L'équation que vérifie la fonction d'onde est l'équation de Schrödinger qu'on admettra à ce stade et à laquelle on reviendra plus tard. Elle s'écrit :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}, t) \right] \Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} \quad (2.45)$$



Page de titre

Sommaire



Page 105 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

On remarque qu'il s'agit d'une équation aux dérivées partielles linéaire. Le premier membre représente l'action sur la fonction d'onde d'un opérateur H défini par :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r}, t) \quad (2.46)$$

H est appelé hamiltonien de la particule de masse m en mouvement dans le champ de forces dérivant du potentiel $V(\vec{r}, t)$. Δ étant l'opérateur laplacien.

Le deuxième membre représente l'action sur la fonction d'onde de l'opérateur dérivation par rapport au temps multiplié par $i\hbar$.

$$H \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad (2.47)$$

On peut justifier le bien fondé de l'équation de Schrödinger en considérant, pour simplifier, une fonction d'onde plane et monochromatique.

On a :

$$\Psi(\vec{r}, t) = \Psi_0 e^{-i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})} = \Psi_0 e^{-i(E t - \vec{p} \cdot \vec{r})/\hbar} \quad (2.48)$$

L'énergie totale E de la particule s'écrit :

$$E = \frac{p^2}{2m} + V \quad (2.49)$$



Page de titre

Sommaire



Page 106 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Considérons les dérivées partielles de $\Psi(\vec{r}, t)$ par rapport au temps et aux coordonnées de position on a :

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} E \Psi \quad (2.50)$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x} = \frac{i}{\hbar} p_x \Psi \quad ; \quad \frac{\partial \Psi}{\partial y} = \frac{i}{\hbar} p_y \Psi \quad ; \quad \frac{\partial \Psi}{\partial z} = \frac{i}{\hbar} p_z \Psi \quad (2.51)$$

En introduisant l'opérateur gradient $\vec{\nabla}$, les trois dernières équations peuvent s'écrire simplement sous la forme :

$$\vec{\nabla} \Psi(\vec{r}, t) = \frac{i}{\hbar} \vec{p} \Psi(\vec{r}, t) \quad (2.52)$$

En effectuant une deuxième dérivation partielle par rapport à x , y et z on obtient :

$$\Delta \Psi(\vec{r}, t) = -\frac{p^2}{\hbar^2} \Psi(\vec{r}, t) \quad (2.53)$$

En utilisant les relations (2.49), (2.50) et (2.53) on peut écrire :

$$\left(\frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}, t) \right) \Psi = E \Psi \quad (2.54)$$



Page de titre

Sommaire



Page 107 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

soit

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + V(\vec{r}, t)\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} \quad (2.55)$$

qui est l'équation de Schrödinger postulée plus haut.

Les équations (2.49), (2.50) et (2.53) permettent également d'établir des règles de correspondance entre l'énergie et la dérivation par rapport au temps et entre l'impulsion et la dérivation par rapport à l'espace :

$$\mathbf{E} \rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \quad \text{et} \quad \vec{\mathbf{p}} \rightarrow \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} \quad (2.56)$$

soit encore :

$$p_x \rightarrow \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} ; \quad p_y \rightarrow \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y} ; \quad p_z \rightarrow \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z} \quad (2.57)$$

Enfin à la quantité $\vec{p}^2$, module au carré de l'impulsion, correspondrait l'opérateur $-\hbar^2\Delta$:

$$\vec{p}^2 \rightarrow -\hbar^2\Delta = \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) \quad (2.58)$$

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 108 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

2.5. Dualité onde-corpuscule

Le même raisonnement conduit dans l'expérience des fentes d'Young, peut se transposer pour l'expérience des interférences électroniques décrites dans 2.2. Pour rendre compte convenablement des résultats observés, il faut considérer le double aspect ondulatoire et corpusculaire des particules matérielles. La figure 2.7 montre d'ailleurs la manifestation des deux aspects.


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 109 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

3. Le paquet d'ondes

3.1. Définition

L'onde plane monochromatique d'étendue illimitée, ne peut être une solution physiquement acceptable de l'équation de propagation. D'abord une onde de ce type représente une particule dont la densité de probabilité de présence est uniforme dans tout l'espace, ensuite l'énergie qu'elle véhicule n'est pas une quantité finie.

On ne peut cependant abandonner complètement l'onde monochromatique en raison de sa simplicité mathématique et du potentiel de généralisation qu'elle contient, et dans la recherche d'une "bonne solution", l'idée la plus simple consiste à superposer plusieurs ondes monochromatiques en raison même du caractère linéaire de l'équation d'onde. Il reste alors à déterminer la superposition convenable.

Montrons en effet que la densité de probabilité cesse d'être uniforme lorsqu'on superpose deux ondes de fréquences voisines et de même amplitude.

On a :

$$\begin{aligned} \Psi_1 &= \Psi_0 e^{-i(\omega_1 t - k_1 x)} \\ \Psi_2 &= \Psi_0 e^{-i(\omega_2 t - k_2 x)} \end{aligned} \quad \text{avec} \quad \begin{aligned} \omega_1 &= \omega_0 - \Delta\omega, & \omega_2 &= \omega_0 + \Delta\omega \\ k_1 &= k_0 - \Delta k, & k_2 &= k_0 + \Delta k \end{aligned}$$



Page de titre

Sommaire

◀

▶

◀

▶

Page 110 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

L'onde résultante en chaque point de l'espace est définie dans ce cas par :

$$\begin{aligned}\Psi &= \Psi_1 + \Psi_2 \\ &= \Psi_0 \left[e^{-i(\omega_1 t - k_1 x)} + e^{-i(\omega_2 t - k_2 x)} \right]\end{aligned}\quad (2.59)$$

soit :

$$\Psi(x, t) = 2\Psi_0 \cos(\Delta\omega t - \Delta k x) e^{-i(\omega_0 t - k_0 x)} \quad (2.60)$$

L'amplitude de l'onde résultante est donc $2\Psi_0 \cos(\Delta\omega t - \Delta k x)$ et une photographie instantanée de cette onde donne une image telle que celle représentée sur la figure 2.12.

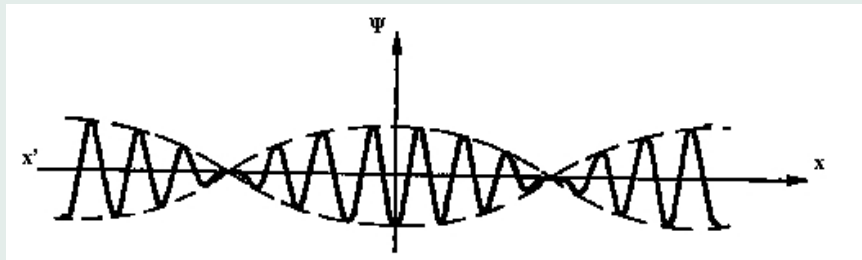


Figure 2.12 : Paquet résultant de la superposition de deux ondes monochromatiques de fréquences voisines



Page de titre

Sommaire



Page 111 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

On remarque que la densité de probabilité cesse d'être uniforme dans tout l'espace puisqu'elle est maximale dans certaines régions et nulle dans d'autres.

L'énergie demeure toutefois infinie car la particule est délocalisée sur tout l'axe x' .

On peut penser que le modèle s'améliore en superposant un plus grand nombre d'ondes de fréquences voisines de sorte que $\Psi(x, t)$ s'écrive :

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^N g_n e^{-i(\omega_n t - k_n x)} \quad (2.61)$$

On montre cependant qu'une telle superposition d'un nombre fini d'ondes planes conduirait toujours à une délocalisation de la particule et à une divergence de l'énergie. La solution du problème ne peut être qu'une superposition infinie d'ondes planes ayant des vecteurs d'ondes k très voisins. On parvient ainsi à la définition du paquet d'ondes dont l'expression est :

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) e^{-i(\omega t - kx)} dk \quad (2.62)$$

où $g(k)$ est une fonction généralement complexe de la variable k et qui est localisée autour d'une valeur k_0 et $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$ est un facteur multiplicatif utilisé pour la normalisation des fonctions.



Page de titre

Sommaire



Page 112 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Une photographie du train d'onde à l'instant $t = 0$ conduit à :

$$\Psi(\mathbf{x}, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} d\mathbf{k} \quad (2.63)$$

On remarque que $\Psi(x, 0)$ et $g(k)$ sont transformées de Fourier l'une de l'autre :

$$g(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(\mathbf{x}, 0) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} d\mathbf{x} \quad (2.64)$$

On a, par conséquent la relation suivante :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, 0)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |g(k)|^2 dk \quad (2.65)$$

Cette relation est appelée relation de Parseval et montre que si $g(k)$ est une fonction de carré sommable $\Psi(x, 0)$ l'est aussi. On peut donc pallier les insuffisances de l'onde plane monochromatique en construisant des paquets d'ondes à partir de fonctions $g(k)$ adéquates.

Ce formalisme se généralise dans l'espace à trois dimensions et on aura :

$$\Psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int g(\mathbf{k}) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} d\vec{k} \quad (2.66)$$

$$\Psi(\vec{r}, 0) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int g(\mathbf{k}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} d\vec{k} \quad (2.67)$$



Page de titre

Sommaire

◀

▶

◀

▶

Page 113 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

On utilise souvent en mécanique quantique l'impulsion à la place du vecteur d'onde ce qui conduit à :

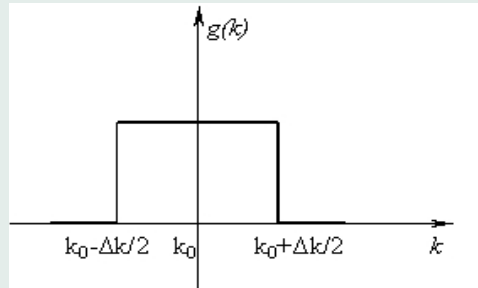
$$\Psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int G(p) e^{i(\vec{p} \cdot \vec{r} - Et)/\hbar} d\vec{p} \quad (2.68)$$

où $\vec{p} = \hbar \vec{k}$, $G(p) = g(p/\hbar)/\sqrt{\hbar}$ et $E = \hbar\omega$

3.2. Exemple : Paquet d'ondes carré

Prenons pour $g(k)$ la fonction créneau représentée sur la figure 2.13 et décrite par :

$$g(k) = \begin{cases} g_0 & \text{pour } k_0 - \frac{\Delta k}{2} \leq k \leq k_0 + \frac{\Delta k}{2} \\ 0 & \text{ailleurs} \end{cases} \quad (2.69)$$





Page de titre

Sommaire

◀

▶

◀

▶

Page 114 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Figure 2.13 : Variation de l'amplitude $g(k)$ en fonction du module du vecteur d'onde pour un paquet d'ondes carré quasi-monochromatique

Une photographie du paquet d'ondes à l'instant $t = 0$ est donnée par :

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) e^{ikx} dk = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{k_0 - \frac{\Delta k}{2}}^{k_0 + \frac{\Delta k}{2}} g_0 e^{ikx} dk \quad (2.70)$$

Le calcul de l'intégrale donne :

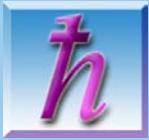
$$\Psi(x, 0) = \frac{g_0}{\sqrt{2\pi}} \left[\frac{e^{ikx}}{ix} \right]_{k_0 - \frac{\Delta k}{2}}^{k_0 + \frac{\Delta k}{2}} = \frac{\Delta k}{\sqrt{2\pi}} g_0 \frac{\sin(x \frac{\Delta k}{2})}{x \frac{\Delta k}{2}} e^{ik_0 x} \quad (2.71)$$

soit :

$$\Psi(x, 0) = \Psi_0 \frac{\sin(x \frac{\Delta k}{2})}{x \frac{\Delta k}{2}} e^{ik_0 x} \quad (2.72)$$

avec $\Psi_0 = \frac{\Delta k}{\sqrt{2\pi}} g_0$.

L'image de ce paquet est représentée sur la figure 2.14 et montre que cette distribution des ondes est centrée en $x = 0$. Bien que $\Psi(x, 0)$ possède une infinité de maxima et de minima, ceux-ci sont très petits comparés aux maxima



Page de titre

Sommaire



Page 115 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

et minima principaux et on peut considérer que la particule est essentiellement localisée au voisinage de $x = 0$ avec une étendue Δx égale à la largeur à mi-hauteur du pic central soit :

$$\Delta x = \frac{2\pi}{\Delta k} \quad (2.73)$$

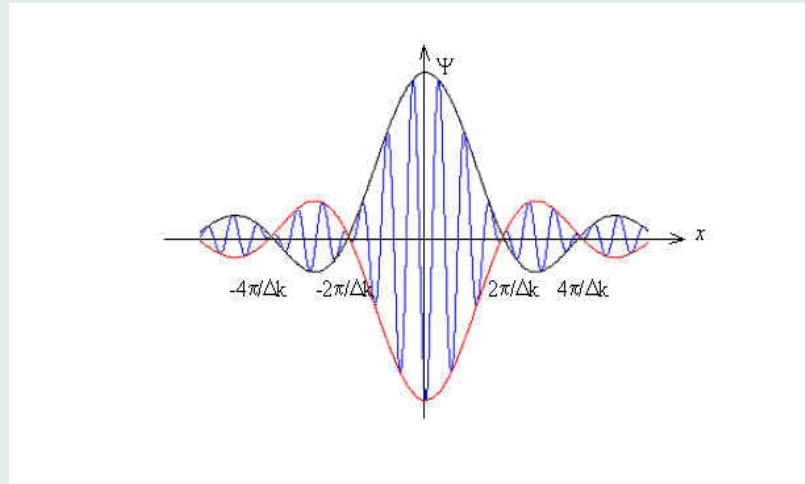


Figure 2.14 : Image à l'instant $t = 0$ d'un paquet d'ondes carré quasi-monochromatique


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 116 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

La densité de probabilité s'écrit :

$$|\Psi(x, 0)|^2 = \Psi(x, 0)\Psi^*(x, 0) = \Psi_0^2 \left[\frac{\sin(x \frac{\Delta k}{2})}{x \frac{\Delta k}{2}} \right]^2 \quad (2.74)$$

L'énergie véhiculée par la particule est alors telle que :

$$W = \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi\Psi^*|^2 dx = \Psi_0^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\frac{\sin(x \frac{\Delta k}{2})}{x \frac{\Delta k}{2}} \right]^2 dx = \frac{2\Psi_0^2}{\Delta k} \quad (2.75)$$

car

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{\sin u}{u} \right)^2 du = 1 \quad (2.76)$$



Page de titre

Sommaire



Page 117 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

4. Vitesse de phase et vitesse de groupe

4.1. Vitesse de phase

A l'intérieur du paquet d'ondes se superposent plusieurs ondes monochromatiques de phase $\alpha = k.x - \omega.t$. Chaque plan d'onde, caractérisé par une phase constante, évolue au cours du temps et sa vitesse de propagation le long de la direction du vecteur d'onde $\vec{k}$ s'obtient en écrivant

$$\frac{d\alpha}{dt} = k \frac{dx}{dt} - \omega = 0 \quad (2.77)$$

soit

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\omega}{k} \quad (2.78)$$

Cette vitesse est appelée vitesse de phase car c'est la vitesse de propagation du lieu des points ayant une phase constante. On la note V_φ :

$$V_\varphi = \frac{\omega}{k}$$

Son expression vectorielle s'écrit dans le cas général

$$\vec{V}_\varphi = \frac{\omega}{k^2} \vec{k}$$



Page de titre

Sommaire



Page 118 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

A l'intérieur du paquet d'ondes, chaque onde a sa propre vitesse V_φ . La vitesse de phase est constante et donc identique pour toutes les ondes planes uniquement dans le cas où l'expression reliant ω à k , appelée relation de dispersion, est linéaire. Dans ce cas on dit que le milieu est non dispersif et le paquet se déplace comme un solide rigide.

C'est le cas d'un paquet d'ondes électromagnétique se propageant dans le vide ($V_\varphi = \frac{\omega}{k} = c$).

4.2. Vitesse de groupe

Lorsque le milieu est dispersif et c'est le cas le plus général, la propagation de l'onde centrale s'effectue à une vitesse différente de celle des ondes latérales participant au paquet. Pour déterminer la vitesse à laquelle se propage le centre du paquet nous allons développer $\omega(k)$ en une série de Taylor autour du nombre d'onde moyen k_0 et dans l'intervalle Δk mesurant l'étendue de $g(k)$, soit :

$$\omega(k) = \omega(k_0) + \left(\frac{d\omega}{dk} \right)_{k=k_0} (k - k_0) + \left(\frac{d^2\omega}{dk^2} \right)_{k=k_0} \frac{(k - k_0)^2}{2!} + \dots \quad (2.79)$$



Page de titre

Sommaire



Page 119 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

En se limitant au premier terme du développement et en posant :

$$\omega(k_0) = \omega_0 \quad \text{et} \quad \left(\frac{d\omega}{dk} \right)_{k=k_0} = V_g \quad (2.80)$$

On a :

$$\omega(k) = \omega(k_0) + V_g(k - k_0) \quad (2.81)$$

En introduisant cette expression dans le paquet d'ondes décrit par (2.62) et en utilisant pour simplifier un paquet carré, on obtient après un calcul simple :

$$\Psi(x, t) = g_0 e^{-i(\omega_0 t - k_0 x)} \int_{-\frac{\Delta k}{2}}^{\frac{\Delta k}{2}} e^{-i(k - k_0)(V_g t - x)} dk \quad (2.82)$$

Le calcul de l'intégrale conduit en définitive à :

$$\Psi(x, t) = A(x, t) e^{-i(\omega_0 t - k_0 x)} \quad (2.83)$$

où

$$A(x, t) = g_0 \Delta k \frac{\sin \left[\frac{\Delta k}{2} (V_g t - x) \right]}{\frac{\Delta k}{2} (V_g t - x)} \quad (2.84)$$

On peut considérer $A(x, t)$ comme l'amplitude d'une onde approximativement monochromatique et $k_0 x - \omega_0 t$ comme sa phase. Cette amplitude varie



Page de titre

Sommaire

◀

▶

◀

▶

Page 120 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

comme $\frac{\sin z}{z}$ avec $z = \frac{\Delta k}{2}(V_g t - x)$. Elle passe alternativement par des maxima et des minima dont les valeurs sont faibles comparées à celles du maximum principal à $z = 0$ et converge rapidement vers zéro (fig. 2.15).

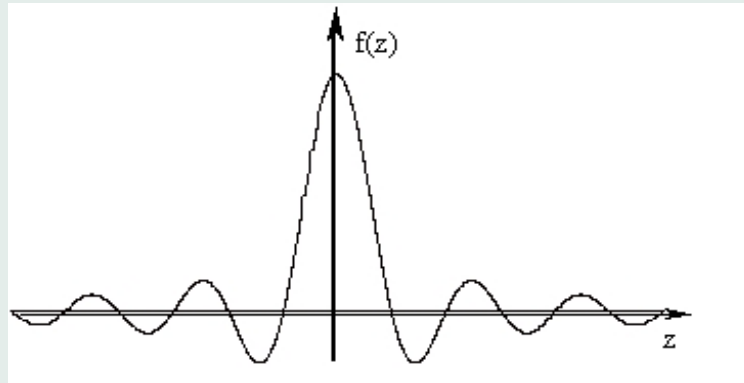


Figure 2.15 : Variation de la fonction $f(z) = \frac{\sin z}{z}$ en fonction de z

Nous pouvons donc conclure que la superposition génère un paquet d'ondes dont l'amplitude est différente de zéro uniquement dans une région limitée de l'espace et décrite par $\frac{\sin z}{z}$. Ce facteur de modulation prend la valeur maximale 1 pour z tendant vers zéro, donc pour $V_g t - x = 0$ ce qui signifie que le centre du paquet d'ondes se propage à la vitesse $\frac{dx}{dt} = V_g$.



Page de titre

Sommaire



Page 121 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

V_g est appelée vitesse de groupe :

$$\mathbf{V}_g = \frac{d\omega}{d\mathbf{k}} \quad (2.85)$$

Ce résultat peut d'ailleurs être trouvé intuitivement à partir d'une superposition de deux ondes (relation (2.59)) où on remarque que la phase de l'amplitude $A(x, t)$ est $(\Delta\omega t - \Delta k x)$, ce qui conduit à une vitesse de groupe

$$V_g = \frac{\Delta\omega}{\Delta k}.$$

La vitesse de groupe correspond donc à la vitesse de déplacement du centre du paquet d'ondes pour lequel toutes les ondes sont en phase.

Le résultat que nous venons d'obtenir est très général. Pour un paquet d'ondes à trois dimensions on aurait :

$$\Psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int g(\mathbf{k}) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} d\mathbf{k} \quad (2.86)$$

et la vitesse de groupe serait égale à :

$$\mathbf{V}_g = \left| \vec{\nabla}_{\mathbf{k}} \omega(\vec{\mathbf{k}}) \right|_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_0} \quad (2.87)$$

Comme la densité d'énergie transportée par l'onde est toujours proportionnelle au carré de l'amplitude, la propagation de l'énergie se fera toujours avec



Page de titre

Sommaire



Page 122 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

une vitesse égale à la vitesse de groupe qui est donc la seule vitesse accessible directement à l'expérience. D'ailleurs on peut s'en convaincre en écrivant V_g sous la forme :

$$V_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d(\hbar\omega)}{d(\hbar k)} = \frac{dE}{dp} \quad (2.88)$$

4.3. Cas d'une particule libre

Pour une particule libre de masse m on :

$$E = \frac{P^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \hbar\omega \quad (2.89)$$

soit

$$\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m} \quad (2.90)$$

* La vitesse de groupe associée au paquet d'ondes est alors :

$$V_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m} \quad (2.91)$$

Cette vitesse est dans ce cas, égale à la vitesse classique de la particule et le centre du paquet d'ondes se déplace donc à la vitesse qu'aurait la particule en mécanique classique.


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)


Page 123 de 978

[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

* La vitesse de phase est quant à elle donnée par :

$$V_{\varphi} = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar\omega}{p} = \frac{E}{p} \quad (2.92)$$

où E est l'énergie totale de la particule. Ainsi pour une particule relativiste de masse au repos m_0 et d'énergie $E = \sqrt{p^2c^2 + m_0^2c^4}$, la vitesse de phase est :

$$V_{\varphi} = \frac{\sqrt{p^2c^2 + m_0^2c^4}}{p} = c\sqrt{1 + \frac{m_0^2c^2}{p^2}} \quad (2.93)$$

On obtient donc une vitesse de phase supérieure à la vitesse de la lumière c ! ce qui signifie que la vitesse de phase ne peut d'aucune façon représenter la vitesse de déplacement de la particule. Seule la vitesse de groupe a donc un sens physique.



Page de titre

Sommaire



Page 124 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

5. Relations d'incertitude de Heisenberg

En mécanique classique la mesure de la position ou de la vitesse d'une particule peut être très précise et parfaite. Elle n'est en fait limitée que par la performance de l'instrument et la dextérité de l'opérateur. Un opérateur appliqué utilisant un instrument de qualité peut rendre la mesure aussi précise que possible. On peut donc atteindre aisément la trajectoire du mouvement qui est définie par la connaissance en tout point du vecteur position $\vec{r}(t)$ et de sa dérivée, la vitesse $\vec{V}(t)$.

En mécanique quantique, nous avons vu que la particule est décrite par une fonction d'onde $\Psi(\vec{r}, t)$ qui représente l'amplitude de probabilité de trouver la particule au point $\vec{r}$ à l'instant t . Il est donc exclu de connaître avec certitude la position ou la vitesse et de définir une trajectoire du mouvement. La mécanique quantique impose donc une "limite fondamentale" à la précision avec laquelle on peut spécifier et mesurer des variables de ce type. Cette limite fut établie en 1927 par Heisenberg et est traduite par le principe d'incertitude dont l'expression spécifique et quantitative dans chaque cas particulier s'appelle une relation d'incertitude.

5.1. Relation position - impulsion

Nous verrons plus loin que cette relation peut se déduire de façon rigoureuse à partir du formalisme de la mécanique quantique. A ce stade



Page de titre

Sommaire



Page 125 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

nous allons l'établir de façon approximative à partir de situations relativement simples.

5.1.1. Train d'onde à une dimension

Considérons les trois trains d'onde particuliers d'étendue Δx et constitués d'un certain nombre n de périodes (fig. 2.16). Les longueurs d'onde associées à ces trains sont les longueurs d'onde de De Broglie : $\lambda = \frac{h}{p}$.

On voit clairement sur la figure 2.16 que mieux on définit la position, moins bien on définit la quantité de mouvement (ç.à.d λ)

Soit Δx l'incertitude sur la position x . Comme mesure grossière on peut prendre pour Δx la longueur du train d'onde :

$$\Delta x \sim n\lambda = n \frac{h}{p} \quad (2.94)$$

Comme mesure grossière de l'incertitude sur la longueur d'onde on peut prendre $\Delta \lambda = \frac{\lambda}{n}$, car il est certain que λ est d'autant mieux définie que le nombre d'oscillations complètes dans le train est grand.



Page de titre

Sommaire



Page 126 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

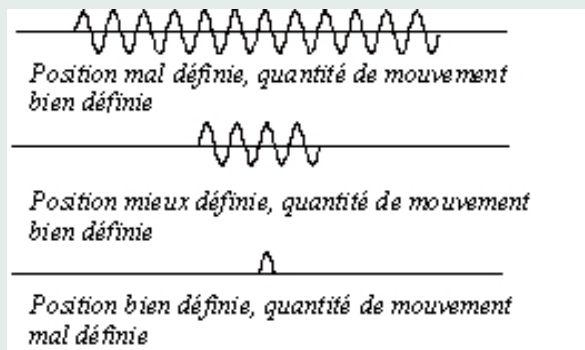


Figure 2.16 : Illustration de la relation d'incertitude position-quantité de mouvement

Or d'après la relation de De Broglie $\lambda = \frac{h}{p}$ on a :

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda} = \frac{\Delta p}{p} = \frac{1}{n} \quad (2.95)$$

soit donc d'après (2.93)

$$\frac{\Delta p}{p} \sim \frac{h}{p\Delta x} \quad (2.96)$$

ou encore

$$\Delta x \cdot \Delta p \sim h \quad (2.97)$$



Page de titre

Sommaire



Page 127 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Cette relation obtenue de façon purement qualitative est la relation d'incertitude de Heisenberg.

5.1.2. Paquet d'ondes carré

La relation de Heisenberg peut être obtenue à partir du paquet d'ondes carré formé de la superposition d'une infinité d'ondes de vecteur d'onde k compris entre $k_0 - \frac{\Delta k}{2}$ et $k_0 + \frac{\Delta k}{2}$: dans ce cas l'étendue du paquet assimilé à sa partie centrale (fig. 2.14) est égale approximativement à $\Delta x \sim \frac{2\pi}{\Delta k}$ soit $\Delta x \cdot \Delta k \sim 2\pi$

En multipliant à droite et à gauche par $\hbar$ on a :

$$\Delta x (\hbar \Delta k) \simeq 2\pi \hbar \quad (2.98)$$

soit :

$$\Delta x \cdot \Delta p \simeq h \quad (2.99)$$

5.1.3. Transformée de Fourier

On peut également atteindre la relation position - impulsion en utilisant la propriété reliant la largeur d'une fonction et de sa transformée de Fourier.


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)


Page 128 de 978

[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

En effet si Δx est la largeur de $\Psi(x, 0)$ et Δk la largeur de $g(k)$, on a toujours $\Delta x \cdot \Delta k \geq 1$, soit,

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar \quad (2.100)$$

Cette dernière relation est compatible avec la précédente et se généralise pour les deux autres directions $\vec{Oy}$ et $\vec{Oz}$.

On aura alors les trois inégalités :

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar \quad (2.101)$$

$$\Delta y \cdot \Delta p_y \geq \hbar \quad (2.102)$$

$$\Delta z \cdot \Delta p_z \geq \hbar \quad (2.103)$$

qui constituent les relations d'incertitude position-impulsion de Heisenberg.

La description ondulatoire des particules impose donc l'impossibilité de connaître simultanément et avec une grande précision la position et la quantité de mouvement d'une particule matérielle.

5.2. Relation temps - énergie :

Nous avons vu que le maximum central du paquet d'ondes se déplace à la vitesse de groupe $V_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{dE}{dp}$. Un observateur verra donc passer quelque


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 129 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

chose de tangible pendant l'intervalle de temps Δt tel que :

$$\Delta t \sim \frac{\Delta x}{V_g} \sim \frac{\Delta k}{\Delta \omega} \Delta x \quad (2.104)$$

d'où

$$\Delta t \cdot \Delta \omega = \Delta k \cdot \Delta x \quad (2.105)$$

et en multipliant par $\hbar$ on a :

$$\Delta E \cdot \Delta t = \Delta p \cdot \Delta x \quad (2.106)$$

soit d'après précédemment :

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar \quad (2.107)$$

La signification de cette relation est surprenante, elle nous enseigne que l'incertitude sur la mesure de l'énergie d'une particule est inversement proportionnelle à la durée de la mesure. Ainsi plus la durée de la mesure est brève, plus l'incertitude sur la valeur de l'énergie est grande. Cela constitue une violation de la loi de conservation de l'énergie de la mécanique classique, violation d'autant plus grande que la durée de la mesure est brève.

Cette relation, propre à la physique microscopique permet d'atteindre la durée de vie d'un phénomène en connaissant sa plage énergétique. Elle



Page de titre

Sommaire



Page 130 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

nous permet par exemple d'estimer la durée de vie τ d'un niveau d'énergie atomique de largeur naturelle ΔE . τ vaut approximativement :

$$\tau = \frac{\hbar}{\Delta E} \quad (2.108)$$

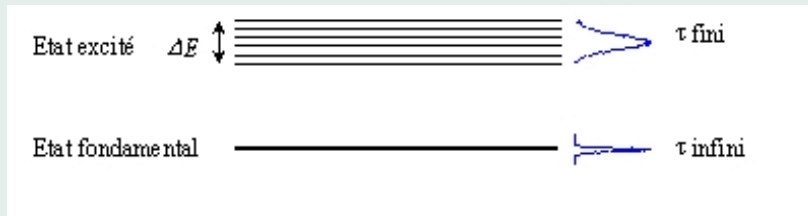


Figure 2.17 : Niveau fondamental et niveau excité d'un atome

Ainsi et comme le montre la figure 2.17, le niveau fondamental pour lequel $\Delta E = 0$ a une durée de vie infinie alors que le niveau excité de largeur ΔE a une durée de vie τ donnée par (2.108).



Page de titre

Sommaire



Page 131 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Exercices et Problèmes

EP 2.1 Effet Compton

On considère la diffusion Compton d'un photon X de fréquence ν par un électron de masse m_0 .

1- En se plaçant dans le cadre de la mécanique classique et en écrivant les lois de conservation de la quantité de mouvement et de l'énergie pour le système (photon, électron), montrer qu'en utilisant une approximation justifiée, on peut trouver la formule de Compton :

$$\lambda' = \lambda + A \sin^2 \frac{\theta}{2}$$

λ et λ' étant les longueurs d'onde du photon incident et diffusé et θ l'angle de diffusion du photon.

2- On se place maintenant dans le cadre de la mécanique relativiste qui est plus adaptée à l'étude du problème.

a- Déterminer la formule de Compton et définir et évaluer la longueur d'onde Compton λ_C .

b- Déterminer l'angle φ caractérisant la direction d'éjection de l'électron.

c- Calculer l'énergie cinétique E_c de l'électron éjecté.

3- Quelle est la longueur d'onde λ d'un photon qui donne, par diffusion Compton $\theta = \frac{\pi}{2}$, un photon de longueur d'onde $\lambda' = 0.71 \text{Å}$. Quel est l'angle d'éjection φ de



Page de titre

Sommaire



Page 132 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

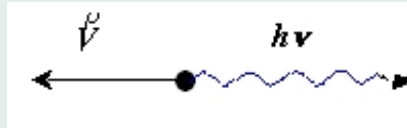
Quitter

l'électron et quelle est son énergie cinétique ? Est-il nécessaire d'utiliser la mécanique relativiste pour étudier cette diffusion ?

EP 2.2 Effet de recul d'un atome

On considère un atome de masse m dans l'état d'énergie E_2 au repos dans le référentiel du laboratoire.

Suite à une excitation extérieure il passe à l'état d'énergie E_1 inférieure en émettant un photon de fréquence ν .



1- Ecrire, dans un cadre non relativiste, les lois de conservation de la quantité de mouvement et de l'énergie du système (atome, photon) et montrer que l'atome recule.

2- Déterminer la vitesse de recul V de l'atome ainsi que l'énergie $h\nu$ du photon émis.

3- Déterminer l'écart $\Delta\lambda$ entre la longueur d'onde émise sans effet de recul et la longueur d'onde effectivement mesurée.

4- Calculer V et $\Delta\lambda$ dans le cas du sodium où le photon émis correspond à la longueur d'onde $\lambda = 5890\text{\AA}$



Page de titre

Sommaire



Page 133 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

5- Montrer que lorsque l'atome est en mouvement, il est possible de l'immobiliser à l'aide d'excitations adéquates : c'est le "refroidissement atomique" qui a été découvert par Claude Cohen Tannoudji et qui lui a valu le prix Nobel de Physique en 1998.

EP 2.3 Emission continue

La distribution de Maxwell qui permet de calculer le nombre d'atomes n d'énergie E_n dans un système gazeux en équilibre thermique avec un thermostat à la température T est :

$$n = K \exp\left(-\frac{E_n}{kT}\right)$$

où k est la constante de Boltzmann et K une constante caractéristique du système.

1- Déterminer le rapport $\frac{n_1}{n_0}$ du nombre d'atomes qui se trouvent dans l'état excité d'énergie E_1 au nombre d'atomes qui se trouvent dans l'état fondamental d'énergie E_0 .

2- Calculer ce rapport à la température $T = 0\text{ K}$. Ce résultat est-il prévisible ? Que devient ce rapport à très haute température ? Peut-il être égal à l'unité.

3- Quelle est l'énergie d'un photon associé à une onde monochromatique de longueur d'onde 6328Å correspondant à la désexcitation d'un atome du niveau d'énergie E , vers le fondamental ?



Page de titre

Sommaire



Page 134 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Quelle est la proportion d'atomes dans le premier état d'énergie E_1 à température ambiante (300 K)? A quelle condition un milieu est-il le siège d'une émission lumineuse continue?

EP 2.4 Equation d'onde du photon

Le but de cet exercice est d'introduire à partir du champ électromagnétique $(\vec{E}, \vec{B})$ une fonction $\alpha(\vec{k}, t)$ qui sera interprétée comme "la fonction d'onde" du photon dans l'espace réciproque des vecteurs d'ondes $\vec{k}$.

1- Ecrire les équations de Maxwell dans le vide.

2- On désigne par $\vec{\mathcal{E}}(\vec{k}, t)$ et $\vec{\mathcal{B}}(\vec{k}, t)$ les transformées de Fourier des vecteurs $\vec{E}$ et $\vec{B}$ respectivement. Montrer que :

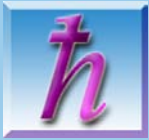
$$\vec{\mathcal{E}}(\vec{k}, t) = \vec{\mathcal{E}}^*(-\vec{k}, t)$$

$$\vec{\mathcal{B}}(\vec{k}, t) = \vec{\mathcal{B}}^*(-\vec{k}, t)$$

où $\vec{\mathcal{E}}^*$ et $\vec{\mathcal{B}}^*$ sont les complexes conjugués de $\vec{\mathcal{E}}$ et $\vec{\mathcal{B}}$.

3- Réécrire les équations de Maxwell dans l'espace réciproque.

4- Montrer que l'on peut exprimer les équations de Maxwell en fonction de $\vec{\mathcal{E}}$ et de sa dérivée par rapport au temps $\dot{\vec{\mathcal{E}}}$ au lieu de $\vec{\mathcal{E}}$ et $\vec{\mathcal{B}}$.



Page de titre

Sommaire



Page 135 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

5- Montrer que l'équation du mouvement du champ s'écrit dans la description $(\vec{\mathcal{E}}, \dot{\vec{\mathcal{E}}})$ sous la forme :

$$\ddot{\vec{\mathcal{E}}}(\vec{k}, t) + \omega^2 \vec{\mathcal{E}}(\vec{k}, t) = \vec{0}$$

où ω est la pulsation du champ $\vec{\mathcal{E}}$.

Interpréter cette équation.

6- On introduit la fonction vectorielle $\vec{\alpha}(\vec{k}, t)$ par la relation :

$$2N(\vec{k}) \vec{\alpha} = \vec{\mathcal{E}} + \frac{i}{\omega} \dot{\vec{\mathcal{E}}}$$

où $N(\vec{k}) = N(-\vec{k})$ est un coefficient de normalisation.

a- Montrer que la connaissance de $\vec{\alpha}$ permet la détermination de $\vec{\mathcal{E}}$ et $\dot{\vec{\mathcal{E}}}$. Que peut-on conclure ?

b- Montrer que $\vec{\alpha}$ vérifie l'équation :

$$i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \vec{\alpha} = \hbar \omega \vec{\alpha}$$

Interpréter cette équation.

EP 2.5 Ondes de De Broglie

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 136 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

Calculer la longueur d'onde de De Broglie associée à :

- 1- Une balle de fusil de masse 1 g et de vitesse 500 m/s .
 - 2- Un grain de poussière de masse 10^{-15} kg et de vitesse 1 mm/s .
 - 3- Un neutron thermique ayant une vitesse correspondant à l'énergie moyenne d'agitation thermique à la température ambiante $T = 300\text{ K}$.
 - 4- Un électron accéléré sous une différence de potentiel $U = 100\text{ V}$.
 - 5- Un électron dans l'atome d'hélium ayant une énergie cinétique de 24.6 eV correspondant à l'énergie d'ionisation de l'hélium.
 - 6- Une particule α (noyau d'hélium) ayant une énergie cinétique de 7.7 MeV .
- Examiner dans chaque cas l'opportunité de considérer ou non les propriétés ondulatoires de la matière.

EP 2.6 Interférences électroniques

En optique électronique, on réalise une expérience, analogue à celle du biprisme, en envoyant, sur un fil chargé positivement, un faisceau d'électrons accélérés sous une tension V_a (figure ci-dessous).



Page de titre

Sommaire



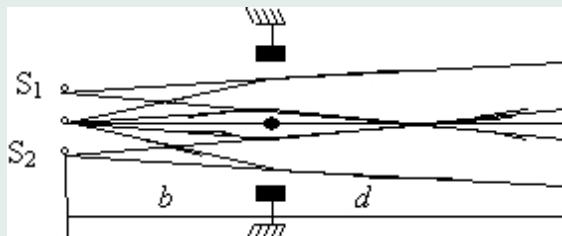
Page 137 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter



1- Rappeler l'expression de la longueur d'onde λ de l'onde associée à une particule matérielle de masse m et se déplaçant à la vitesse V (onde pilote de De Broglie). On se limitera à un traitement classique.

2- Trouver l'expression de λ en fonction de V_a dans le cas des électrons.

Calculer λ pour $V_a = 100 \text{ V}$; commenter le résultat obtenu.

3- Exprimer l'interfrange i en fonction de λ , b , d et $a = \overline{S_1 S_2}$.

Calculer i pour $b = 10 \text{ cm}$, $d = 30 \text{ cm}$ et $a = 30 \mu\text{m}$ et pour la valeur de λ déterminée précédemment.

EP 2.7 Diffraction des neutrons

Un faisceau de neutrons monocinétiques et d'énergie E est envoyé sur des noyaux atomiques de diamètre d disposés régulièrement sur une chaîne linéaire. On désigne par ℓ la distance séparant deux noyaux consécutifs ($d \ll \ell$). Un détecteur de neutrons D est placé au loin dans une direction faisant l'angle θ avec la direction des neutrons incidents comme le montre la figure ci-dessous.



Page de titre

Sommaire



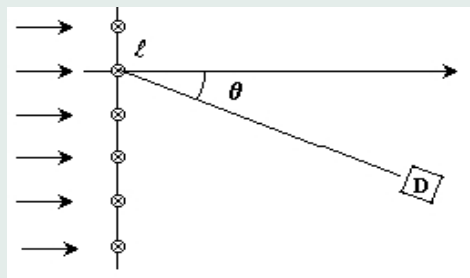
Page 138 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter



1- Qu'observe-t-on sur le détecteur lorsque l'énergie E des neutrons varie ?

2- La variation en fonction de E du nombre de neutrons détectés présente un maximum pour une certaine valeur E_1 . Sachant qu'il n'y a pas d'autres maxima pour $E < E_1$, montrer qu'on peut en déduire la mesure de la distance ℓ .

Déterminer ℓ pour $\theta = 30^\circ$ et $E_1 = 1.3 \cdot 10^{-20} \text{ J}$.

3- A partir de quelles valeurs de E doit-on tenir compte de la taille des noyaux.

EP 2.8 Vitesse de phase et vitesse de groupe

Déterminer la vitesse de phase et la vitesse groupe pour chacune des lois de dispersion suivantes :

1- onde lumineuse dans le vide : $\omega = ck$

2- ondes de gravité à la surface de l'eau : $\omega = \alpha\sqrt{k}$

3- ondes capillaires sur l'eau : $\omega = \beta k^{3/2}$.

4- vibrations transversales d'une tige : $\omega = \gamma k^2$



Page de titre

Sommaire

◀ ▶

◀ ▶

Page 139 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

5- ondes électromagnétiques dans l'ionosphère : $\omega = \sqrt{k^2 c^2 + \delta^2}$

6- ondes associées aux électrons libres dans un solide : $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$

c est la célérité de la lumière dans le vide et α , β , γ et δ des constantes caractéristiques des lois envisagées.

EP 2.9 Etalement d'un paquet d'ondes gaussien

On considère une particule libre de masse m décrite par un paquet d'ondes à une dimension, obtenu par la superposition d'ondes planes e^{ikx} d'amplitude $g(k)$ où $g(k)$ est une fonction gaussienne normée centrée en $k = k_0$ et donnée par :

$$g(k) = \left(\frac{a^2}{2\pi} \right)^{\frac{1}{4}} \exp \left[-\frac{a^2}{4} (k - k_0)^2 \right]$$

a étant une constante ayant la dimension d'une longueur et k le module du vecteur d'onde.

1. Déterminer la fonction $\Psi(x, 0)$ décrivant le paquet d'ondes à l'instant $t = 0$. Donner à cet instant la densité de probabilité de la particule et la représenter graphiquement.

2. Sachant que la largeur d'une fonction gaussienne $f(\ell) = e^{-\frac{\ell^2}{b^2}}$ est définie par $\Delta \ell = \frac{b}{\sqrt{2}}$,



Page de titre

Sommaire



Page 140 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

- a. Calculer les largeurs Δx et Δk correspondant à $|\Psi(x, 0)|^2$ et $|g(k)|^2$.
- b. Evaluer alors le produit $\Delta x \cdot \Delta p$ des incertitudes sur la position et l'impulsion de la particule. Conclure ?
3. On s'intéresse maintenant à l'évolution du paquet d'ondes au cours du temps.

- a. Calculer la fonction d'onde $\Psi(x, t)$ de la particule à l'instant t et montrer qu'elle peut se mettre sous la forme :

$$\Psi(x, t) = \left(\frac{2a^2}{\pi} \right)^{\frac{1}{4}} \frac{e^{i(k_0 x + \varphi)}}{\left(a^4 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2} \right)^{\frac{1}{4}}} \exp \left[-\frac{\left(x - \frac{\hbar k_0}{m} t \right)^2}{a^2 + \frac{2i\hbar t}{m}} \right]$$

Expliciter l'argument φ .

- b. Déterminer la densité de probabilité de la particule et évaluer la vitesse de déplacement du paquet d'ondes. Conclure ?
- c. Montrer que la norme du paquet d'ondes est indépendante du temps.
- d. Déterminer la largeur $\Delta x(t)$ du paquet d'ondes à l'instant t et représenter ses variations au cours du temps.



Page de titre

Sommaire



Page 141 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

e. Montrer que le paquet subit alors une déformation au cours de son évolution.

f. Calculer le produit $\Delta x(t) \cdot \Delta p(t)$ et discuter son évolution au cours du temps.

EP 2.10 Largeur spectrale

Un faisceau parallèle de lumière monochromatique de longueur d'onde ($\lambda_0 = 500nm$) passe à travers un interrupteur rapide placé en $x = 0$. L'interrupteur est ouvert de $-\delta\tau/2$ à $+\delta\tau/2$ avec $\delta\tau = 10^{-10}$ s, et fermé le reste du temps. Ouvert, il laisse passer l'onde plane sans la perturber.

1- Estimer la largeur $\delta\omega$ de la distribution spectrale du paquet d'ondes que l'on obtient après l'interrupteur.

2- Si l'on décrit le paquet d'ondes à la sortie de l'interrupteur par :

$$\Psi(t) = \Psi(x = 0, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(\omega) e^{-i\omega t} d\omega$$

Calculer $g(\omega)$ ainsi que sa largeur $\delta\omega$. Conclure.

3- A la sortie de l'interrupteur, la lumière passe dans un tube rempli de gaz dont l'indice n dépend de ω selon la loi :

$$\frac{\omega}{n} \frac{dn}{d\omega} = \frac{1}{12.33}$$

a- Calculer le nombre d'onde k dans ce milieu.


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 142 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

b- Donner l'expression $F(x, t)$ du paquet d'ondes en un point x du tube à l'instant t .

Calculer la vitesse de phase et la vitesse de groupe du paquet d'ondes.

EP 2.11 Pression de radiation

On considère un faisceau incident de lumière monochromatique de longueur d'onde λ tombant perpendiculairement sur un miroir plan idéal, immobile dans le référentiel lié au laboratoire.

1- Montrer qu'en théorie électromagnétique classique la lumière réfléchie a la même longueur d'onde que la lumière incidente et que le rayonnement incident exerce sur le miroir une pression, dite pression de radiation valant :

$$\mathcal{P} = \frac{2\phi}{c}$$

où c est la célérité de la lumière et ϕ est le flux de rayonnement incident, c'est à dire la quantité d'énergie lumineuse passant par unité de temps en direction du miroir et à travers une surface unité perpendiculaire à la direction d'incidence.

2- Montrer qu'en théorie quantique où le photon est caractérisé par une énergie $E = h\nu$ et une quantité de mouvement $p = \frac{h\nu}{c}$ cette pression de radiation est égale



Page de titre

Sommaire



Page 143 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

à :

$$\mathcal{P} = 2 \frac{N h \nu}{c}$$

où N est le nombre de photons par unité de temps à travers une surface unité de du miroir.

3- On s'intéresse maintenant à un seul photon incident d'énergie $h\nu$ et on désire évaluer sa fréquence ν' après réflexion sur le miroir. On suppose que la source lumineuse est immobile et que le miroir de masse M s'éloigne de la source à une vitesse $V \ll c$.

a- Ecrire dans le cadre de la mécanique classique les équations de conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement relatives au système photon-miroir. On supposera que la vitesse du miroir après collision avec le photon est V' .

b- En éliminant V' , trouver la relation existant entre $\nu - \nu'$ et $\nu + \nu'$.

c- Montrer que si l'on considère le cas extrême d'un miroir très lourd, la fréquence du photon réfléchi est :

$$\nu' = \frac{1 - \frac{V}{c}}{1 + \frac{V}{c}} \nu$$

Que devient cette expression lorsque $\frac{V}{c} \ll 1$.



Page de titre

Sommaire



Page 144 de 978

Retour

Plein écran

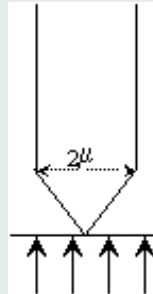
Fermer

Quitter

EP 2.12 Microscope de Heisenberg

On observe un électron se propageant sur la platine d'un microscope en l'éclairant avec une lumière de longueur d'onde λ .

Si le faisceau de lumière quittant l'électron et entrant dans l'objectif a une ouverture 2μ , la position de l'électron n'est connue qu'avec une certaine imprécision, définie par le pouvoir séparateur de l'instrument, lui-même fonction de λ et μ .



Un photon quittant l'électron pour le microscope, et qui va ainsi permettre d'en repérer la position a en fait subi une diffusion Compton sur cet électron qui lui communique une quantité de mouvement de recul lui faisant changer sa quantité de mouvement.

Montrer que si l'on cherche à améliorer la détermination de la position de l'électron, on accroît l'incertitude sur sa quantité de mouvement, en accord avec les


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 145 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

inégalités de Heisenberg.

On donne le pouvoir séparateur du microscope :

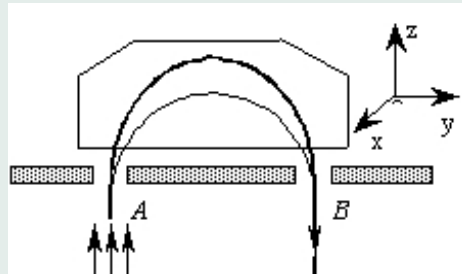
$$\Delta x = \frac{\lambda}{2 \sin \mu}$$

EP 2.13 Déflexion dans un champ magnétique

L'impulsion $\vec{p}$ d'une particule de masse m et de charge q peut être mesurée par déflexion du mouvement de cette particule dans un champ magnétique constant d'intensité B_0 . On montre alors que cette impulsion est reliée au rayon de courbure R de la trajectoire de la particule par la relation bien connue :

$$p = \frac{q}{c} B_0 R$$

où c est la vitesse de la lumière.





Page de titre

Sommaire



Page 146 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Le dispositif de mesure est représenté sur la figure ci-dessous. Dans le cas d'un électron par exemple, ce dernier aborde l'aimant après la traversée du diaphragme A et le quitte pour traverser le diaphragme B après avoir subi une déflexion de 180° . A l'instant qui précède immédiatement le début de la mesure, c'est à dire juste avant la traversée du diaphragme A on suppose la direction de propagation ($\vec{Oz}$) parfaitement définie et la coordonnée z de l'électron parfaitement connue. Cette situation peut toujours être réalisée en utilisant un collimateur muni d'un obturateur dont le temps de pose est très bref.

1- En désignant par $2d_A$ et $2d_B$ les largeurs respectives des diaphragmes A et B , montrer que l'impulsion de l'électron est connue avec la précision Δp telle que :

$$\Delta p = \frac{p_y}{R} (d_A + d_B)$$

2- En raison de la diffraction de l'onde associée à l'électron à la traversée du diaphragme A , la mesure de l'angle α que fait l'impulsion avec l'axe $\vec{Oz}$ à l'intérieur de l'aimant est entachée d'une incertitude $\Delta\alpha \sim \frac{\lambda}{d_A}$ et la trajectoire de l'électron est un arc de cercle défini à $2\Delta\alpha$ près.

Montrer que l'incertitude Δz sur z est donnée par :

$$\Delta z = 2h \frac{c}{eB_0 d_A}$$

3- Calculer le produit $\Delta z \cdot \Delta p$ et conclure.



Page de titre

Sommaire



Page 147 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

EP 2.14 Collision photon-particule

Considérons un électron d'impulsion $\vec{p}$ en mouvement sur l'axe $\vec{Oy}$ et qu'on éclaire avec un rayonnement monochromatique de fréquence ν et de direction de propagation parallèle à $\vec{Oy}$. Un des photons de ce rayonnement subit une diffusion Compton sur cet électron de sorte que sa fréquence devient ν' .

1- En utilisant les résultats de l'effet Compton et en se plaçant dans une approximation non relativiste ($p, p' \ll mc$ et $\nu, \nu' \ll \frac{mc^2}{h}$), montrer que les impulsions p et p' de l'électron avant et après la collision avec le photon sont :

$$p = mc \frac{\nu' - \nu}{\nu' + \nu} + \frac{h}{2c} (\nu' + \nu)$$

$$p' = mc \frac{\nu' - \nu}{\nu' + \nu} - \frac{h}{2c} (\nu' + \nu)$$

2- Montrer alors que l'incertitude sur la détermination de ces quantités est liée à celle de la détermination de ν' par la relation :

$$\Delta p \sim \Delta p' \simeq mc \frac{\Delta \nu'}{\nu' + \nu}$$

3- Sachant que l'électron se déplace avec la vitesse p/m avant la collision Compton puis à la vitesse p'/m après cette collision, montrer que l'incertitude sur



Page de titre

Sommaire



Page 148 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

la position de l'électron est donnée par :

$$\Delta x = \frac{h}{mc} \frac{\nu' + \nu}{\Delta \nu'}$$

4- Calculer le produit $\Delta x \cdot \Delta p$ et conclure.

EP 2.15 Transformée de Fourier

On appelle transformée de Fourier d'une fonction $f(x)$ de la variable réelle x , la fonction $F(k)$ de la variable réelle k définie par :

$$F(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \exp(-ikx) dx$$

La formulation inverse s'écrit :

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} F(k) \exp(ikx) dk$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 149 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

Dans l'espace à trois dimensions ces formulations deviennent :

$$F(\vec{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(\vec{r}) \exp(-i \vec{k} \cdot \vec{x}) d\vec{r}$$

$$F(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} F(\vec{k}) \exp(i \vec{k} \cdot \vec{x}) d\vec{k}$$

1- Calculer les transformées de Fourier des fonctions suivantes :

a- Fonction créneau :

$$f(x) = \begin{cases} \frac{1}{a} & \text{pour } \frac{-a}{2} < x < \frac{a}{2} \\ 0 & \text{pour } |x| > \frac{a}{2} \end{cases}$$

b- Fonction exponentielle décroissante :

$$f(x) = \exp\left(-\frac{|x|}{a}\right)$$

c- Fonction gaussienne :

$$f(x) = \exp\left(-\frac{x^2}{a^2}\right)$$



Page de titre

Sommaire



Page 150 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

d-Fonction lorentzienne :

$$f(x) = \frac{a}{a^2 + x^2}$$

 a étant un réel positif.

2- En notant $F(k)$ et $G(k)$ les transformées de Fourier des fonctions $f(x)$ et $g(x)$ respectivement, calculer $G(k)$ dans les cas suivants :

a- $g(x) = f(x + a)$

b- $g(x) = \exp(ik_0 x) f(x)$

c- $g(x) = f(\lambda x)$

d- $g(x) = \frac{d}{dx} f(x)$

e- $g(x) = x \cdot f(x)$

f- $g(x) = f^*(x)$

3- Démontrer l'égalité de Parseval-Plancherel qui implique que la transformation de Fourier conserve la norme :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |f(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |F(k)|^2 dk$$



Page de titre

Sommaire



Page 151 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Chapitre 3

Particule dans un potentiel stationnaire

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 152 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

En mécanique classique et lorsque les forces s'exerçant sur une particule dérivent d'un potentiel, les courbes d'énergie potentielle constituent une approche élégante pour déterminer au moins de façon qualitative le mouvement de la particule et ses principales caractéristiques : En particulier lorsque la particule se déplace suivant un axe $\vec{Ox}$ ou dans un champ de forces centrales, la connaissance des courbes $V(x)$ ou $V(r)$ nous permettent de décrire complètement le mouvement de cette particule sans résoudre l'équation fondamentale de la dynamique et donc sans faire appel à une mathématique élaborée. Ainsi, l'analyse de ces courbes permet de déterminer les positions d'équilibre stables et instables qui correspondent aux extrema du potentiel, de fixer les limites du mouvement, d'en connaître les zones interdites, d'en déduire les principales caractéristiques et d'atteindre la nature des trajectoires correspondant à une énergie totale fixée.

En mécanique quantique, l'analyse des courbes de potentiel revêt également une importance capitale dans l'étude d'une particule en mouvement dans un champ de forces extérieur dérivant d'un potentiel indépendant du temps et fonction uniquement de la position. On verra en particulier que lorsque le potentiel $V(\vec{r})$ présente des discontinuités et qu'il est constant entre ces discontinuités, la résolution de l'équation de Schrödinger se simplifie considérablement et ses solutions permettent d'avoir une vision simple de problèmes physiques réels dont la résolution exacte est complexe et élaborée.



Page de titre

Sommaire



Page 153 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

1. Résolution de l'équation de Schrödinger

On considère une particule de masse m se déplaçant dans un potentiel $V(\vec{r})$ indépendant du temps et on se propose de déterminer sa fonction d'onde $\Psi(\vec{r}, t)$.

1.1. Séparation des variables

L'équation de Schrödinger s'écrit :

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \right] \Psi(\vec{r}, t) \quad (3.1)$$

Comme les variables $\vec{r}$ et t sont séparées dans les deux membres, on peut, de façon générale, chercher des solutions de la forme d'un produit d'une fonction d'espace $\varphi(\vec{r})$ et d'une fonction dépendant du temps $\chi(t)$, soit :

$$\Psi(\vec{r}, t) = \varphi(\vec{r}) \chi(t) \quad (3.2)$$

En portant cette expression dans l'équation de Schrödinger, il vient :

$$i\hbar \varphi \frac{d\chi}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \chi \Delta \varphi + V \varphi \chi \quad (3.3)$$



Page de titre

Sommaire



Page 154 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

En divisant les deux membres de l'équation par le produit $\varphi\chi$, on obtient l'égalité :

$$i\hbar \frac{1}{\chi} \frac{d\chi}{dt} = \frac{[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V]\varphi}{\varphi} \quad (3.4)$$

Le membre de gauche est une fonction du temps tandis que le membre de droite est fonction uniquement de la position. Pour qu'il y ait égalité quelque soient $\vec{r}$ et t il faut que les deux membres soient constants. Cette constante a les dimensions d'une énergie qu'on notera E . On aura alors les deux équations suivantes :

$$i\hbar \frac{d\chi}{\chi} = E dt \quad (3.5)$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V\right)\varphi = E\varphi \quad (3.6)$$

La première équation se résout simplement et a pour solution :

$$\chi(t) = \chi(0)e^{-i(E/\hbar)t}.$$

Ce qui donne pour $\Psi(\vec{r}, t)$:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \varphi(\vec{r})e^{-i(E/\hbar)t} \quad (3.7)$$



Page de titre

Sommaire



Page 155 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

La dépendance sinusoïdale indique que la particule a une énergie bien définie et que sa densité de probabilité de présence est indépendante du temps :

$$|\Psi(\vec{r}, t)|^2 = |\varphi(\vec{r})|^2 \quad (3.8)$$

On dit dans ce cas que la particule est dans des **états stationnaires** c'est à dire pour lesquels l'énergie E est constante.

On obtient ces états en résolvant l'équation (3.6) qui s'écrit aussi sous la forme :

$$\mathbf{H}\varphi = E\varphi \quad (3.9)$$

où H est l'opérateur hamiltonien ($H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V$) et φ tel que :

$$\int |\varphi(\vec{r})|^2 d^3r = 1 \quad (3.10)$$

Cette équation est appelée équation aux valeurs propres : C'est à dire pour des conditions imposées à $\varphi(\vec{r})$, celle-ci n'existe que pour certaines valeurs de l'énergie E , appelées valeurs propres de H . $\varphi(\vec{r})$ est alors appelée fonction propre correspondant à la valeur propre E .

1.2. Modélisation de potentiels réels :

A part les cas où le potentiel est nul ou constant, la situation la plus simple est celle où $V(\vec{r})$ subit des discontinuités en restant constant entre deux



Page de titre

Sommaire



Page 156 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

discontinuités. La recherche des solutions pour de tels potentiels ne présente pas de difficultés mathématiques et cela permettra de modéliser des situations réelles qu'on peut approximer par de tels potentiels. La figure 3.1 montre quelques exemples qui se rencontrent souvent en mécanique quantique.

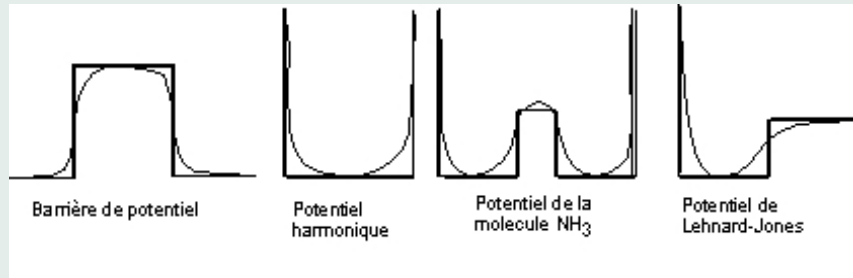


Figure 3.1 : Modélisation de potentiels réels

Pour simplifier le formalisme, on ne traitera dans la suite que des potentiels à une seule variable d'espace x .

1.3. Cas des potentiels pairs $V(x) = V(-x)$

Écrivons l'équation de Schrödinger pour x et pour $-x$:

On a :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + V(x)\varphi(x) = E\varphi(x) \quad (3.11)$$



Page de titre

Sommaire



Page 157 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi(-x)}{dx^2} + V(x)\varphi(-x) = E\varphi(-x) \quad (3.12)$$

On remarque que $\varphi(x)$ et $\varphi(-x)$ sont solutions de la même équation différentielle linéaire ; elles sont donc identiques à un facteur multiplicatif près, soit :

$$\varphi(x) = \varepsilon\varphi(-x) \quad (3.13)$$

Cette relation est vraie pour toute valeur de x et en particulier lorsqu'on change x en $-x$ donc :

$$\varphi(-x) = \varepsilon\varphi(x) \quad (3.14)$$

Si l'on combine les relations (3.13) et (3.14), il vient :

$$\varphi(x) = \varepsilon^2\varphi(x) \quad (3.15)$$

ce qui implique que : $\varepsilon = \pm 1$

ε est appelée parité de la fonction :

- pour $\varepsilon = 1$, la fonction d'onde est une fonction paire, elle est dite symétrique.
- pour $\varepsilon = -1$, la fonction d'onde est une fonction impaire, elle est dite antisymétrique.

Ainsi, lorsque le potentiel est pair, l'ensemble des solutions possibles de l'équation de Schrödinger est constitué de deux systèmes : les solutions paires ou symétriques et les solutions impaires ou antisymétriques.



Page de titre

Sommaire



Page 158 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

1.4. Conditions aux limites

Nous avons vu que la probabilité de trouver la particule en un point de l'espace est proportionnelle au module au carré $|\Psi|^2$ de la fonction d'onde. Cette quantité doit donc être une fonction continue partout et notamment aux discontinuités du potentiel. Si $|\Psi|^2$ est continue il est logique de supposer que $\Psi(x)$ l'est aussi.

Par ailleurs, l'existence d'une dérivée seconde dans l'équation de Schrödinger implique d'un point de vue mathématique que la fonction d'onde n'a pas de discontinuité et par conséquent que sa dérivée première $\frac{d\Psi(x)}{dx}$ est continue en tout point. On verra plus loin que cette condition peut également être déduite du courant de probabilité associé au mouvement de la particule.

Pour déterminer les relations donnant la quantification de l'énergie de la particule, on applique donc aux discontinuité de potentiel les deux conditions suivantes :

- Continuité de la fonction d'onde.
- Continuité de la dérivée première de la fonction d'onde.

1.5. Etats liés et états continus

Lorsque la particule reste confinée dans une région de l'espace, la probabilité de la trouver à l'infini est nulle à tout moment. Sa fonction d'onde est

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 159 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

donc normalisable et les valeurs de son énergie sont quantifiées : Le spectre en énergie de la particule est dans ce cas discontinu et on dit que la particule se trouve dans des **états liés**.

Si la particule n'est pas confinée dans une région donnée, elle peut explorer tout l'espace et se trouver même à l'infini. La fonction d'onde n'est plus normalisable et le spectre en énergie est continu. On dit alors que la particule se trouve dans des **états non liés ou continus**.



Page de titre

Sommaire



Page 160 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

2. Analogie optique

On sait que l'équation de Maxwell dans le vide s'écrit :

$$\left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta\right) \vec{E} = 0 \quad (3.16)$$

Lorsque la lumière se propage dans un milieu d'indice n , cette équation devient :

$$\left(\frac{n^2}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta\right) \vec{E} = \vec{0} \quad (3.17)$$

Cette équation admet, lorsque n est indépendant du temps, une solution de la forme :

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{\xi}(\vec{r}) e^{i\omega t} \quad (3.18)$$

$\vec{\xi}(\vec{r})$ vérifiant l'équation :

$$\left(\Delta + \frac{n^2 \omega^2}{c^2}\right) \vec{\xi}(\vec{r}) = \vec{0} \quad (3.19)$$

En comparant cette équation avec l'équation de Schrödinger :

$$\left[\Delta + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V)\right] \varphi(\vec{r}) = 0 \quad (3.20)$$



Page de titre

Sommaire



Page 161 de 978

Retour

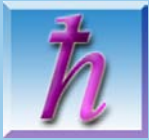
Plein écran

Fermer

Quitter

On remarque que ces deux équations ont la même forme, ce qui suggère qu'on peut associer au problème de mécanique quantique un problème d'optique et réciproquement. La relation décrivant cette analogie est :

$$\frac{n\omega}{c} \sim \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E - V)} \quad (3.21)$$



Page de titre

Sommaire



Page 162 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

3. Marche de potentiel

Soit une particule “incidente” d’énergie E venant des x négatifs et se dirigeant vers les x positifs. Cette particule rencontre en $x = 0$ une marche de potentiel V_0 (fig. 3.2) définie par :

$$V(x) = 0 \quad \text{pour } x < 0 \quad (3.22)$$

$$V(x) = V_0 \quad \text{pour } x > 0 \quad (3.23)$$

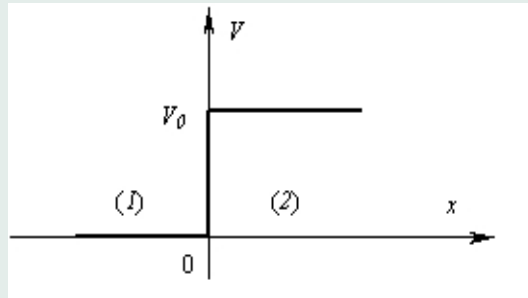


Figure 3.2 : Marche de potentiel

Nous devons considérer deux cas, suivant que E est supérieure ou inférieure à la hauteur de la marche V_0 .



Page de titre

Sommaire



Page 163 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

3.1. Cas où $E > V_0$

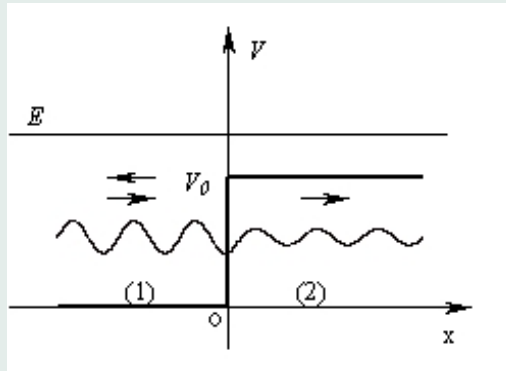


Figure 3.3 : Marche de potentiel ($E > V_0$)

3.1.1. Etude classique

La particule d'énergie E a une vitesse $\sqrt{2E/m}$ dans la région (1), elle est ralentie à la discontinuité et prend la vitesse $\sqrt{2(E - V_0)/m}$ dans la région(2).



Page de titre

Sommaire



Page 164 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

3.1.2. Etude quantique

L'équation de Schrödinger peut s'écrire :

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) \varphi = 0 \quad (3.24)$$

On a alors dans les deux régions (1) et (2) :

$$\text{Région(1)} : \quad \varphi''_1 + k_1^2 \varphi_1 = 0, \quad \text{soit} \quad (3.25)$$

$$\varphi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + A'_1 e^{-ik_1 x}, \text{ avec } k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$$

$$\text{Région(2)} : \quad \varphi''_2 + k_2^2 \varphi_2 = 0, \quad \text{soit} \quad (3.26)$$

$$\varphi_2(x) = A_2 e^{ik_2 x} + A'_2 e^{-ik_2 x}, \text{ avec } k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0)$$

$A_1 e^{ik_1 x}$ représente l'onde incidente et $A'_1 e^{-ik_1 x}$ l'onde réfléchi par le saut de potentiel.

$A_2 e^{ik_2 x}$ représente l'onde transmise et $A'_2 e^{-ik_2 x}$ est une onde réfléchi qui reviendrait de l'infini, ce qui est impossible, donc $A'_2 = 0$.

Les solutions dans les deux régions sont en définitive :

$$\varphi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + A'_1 e^{-ik_1 x} \quad (3.27)$$

$$\varphi_2(x) = A_2 e^{ik_2 x} \quad (3.28)$$



Page de titre

Sommaire



Page 165 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Les conditions de continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée ($\varphi_1(0) = \varphi_2(0)$ et $\varphi_1'(0) = \varphi_2'(0)$) donnent :

$$\frac{A_1'}{A_1} = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \quad \text{et} \quad \frac{A_2}{A_1} = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} \quad (3.29)$$

On définit alors les coefficients de réflexion R et de transmission T de la particule par :

$$R = \left| \frac{A_1'}{A_1} \right|^2 \quad \text{et} \quad T = \left| \frac{A_2}{A_1} \right|^2 \frac{V_{g2}}{V_{g1}} \quad (3.30)$$

où V_{g1} et V_{g2} sont les vitesses de groupe associées aux paquets d'ondes dans les deux régions :

$$V_{g1} = \frac{\hbar k_1}{m} \quad \text{et} \quad V_{g2} = \frac{\hbar k_2}{m} \quad (3.31)$$

On reviendra sur le bien fondé de ces définitions de R et de T lors de l'étude du courant de probabilité.

On a alors :

$$R = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2 = 1 - \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2} \quad (3.32)$$

$$T = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2} \quad (3.33)$$



Page de titre

Sommaire



Page 166 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

On vérifie bien que l'on a $\mathbf{R} + \mathbf{T} = \mathbf{1}$. Cette relation signifie qu'on a conservation du flux incident de particules : chaque particule incidente ne peut être que réfléchi ou transmise. Cette situation est similaire à la conservation de l'énergie en mécanique classique.

En conclusion on peut dire que contrairement aux prévisions classiques la particule a une probabilité non nulle de revenir en arrière (fig. 3.3).

3.1.3. Analogie optique

On a deux milieux d'indices n_1 et n_2 réels (réflexion vitreuse). L'onde incidente donne naissance à une onde réfléchi et à une onde transmise.

3.2. Cas où $0 \leq E \leq V_0$

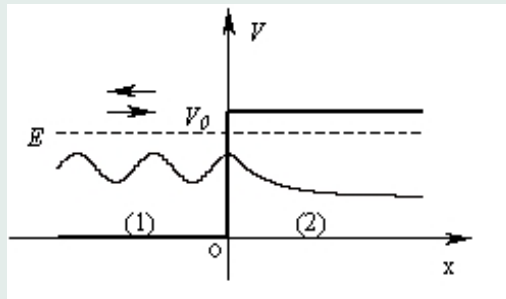


Figure 3.4 : Marche de potentiel ($E < V_0$)



Page de titre

Sommaire



Page 167 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

3.2.1. Etude classique :

La particule a une vitesse $\sqrt{2E/m}$ dans la région (1), elle rebondit élastiquement à la discontinuité et repart avec une vitesse identique.

3.2.2. Etude quantique :

Les fonctions d'onde de la particule dans les deux régions sont données par :

$$\varphi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + A'_1 e^{-ik_1 x} \quad (3.34)$$

$$\varphi_2(x) = B_2 e^{\rho_2 x} + B'_2 e^{-\rho_2 x} \quad (3.35)$$

où :

$$k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E \quad \text{et} \quad \rho_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) \quad (3.36)$$

Pour que $\varphi_2(x)$ reste bornée lorsque x tend vers l'infini il faut que $B_2 = 0$, ce qui conduit à :

$$\varphi_1(\mathbf{x}) = \mathbf{A}_1 e^{ik_1 \mathbf{x}} + \mathbf{A}'_1 e^{-ik_1 \mathbf{x}} \quad (3.37)$$

$$\varphi_2(\mathbf{x}) = \mathbf{B}_2 e^{-\rho_2 \mathbf{x}} \quad (3.38)$$



Page de titre

Sommaire



Page 168 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Les mêmes conditions de quantification que précédemment donnent :

$$\frac{A'_1}{A_1} = \frac{k_1 - i\rho_2}{k_1 + i\rho_2} \quad \text{et} \quad \frac{B'_2}{A_2} = \frac{2k_1}{k_1 + i\rho_2} \quad (3.39)$$

Le coefficient de réflexion R vaut alors :

$$R = \left| \frac{A'_1}{A_1} \right|^2 = 1 \quad (3.40)$$

On doit donc avoir $T = 0$, cependant $\left| \frac{B'_2}{A_1} \right|^2$ est différent de zéro, ce qui implique que la vitesse de groupe du paquet d'ondes est nulle dans la région (2).

Comme en mécanique classique, la particule est toujours réfléchiée néanmoins il existe une onde du type évanescence ($e^{-\rho_2 x}$) qui montre que la particule a une probabilité non nulle de se trouver dans la région (2), probabilité qui décroît exponentiellement en fonction de x et devient négligeable lorsque x est supérieure à la portée $\frac{1}{\rho_2}$ (fig. 3.4).

3.2.3. Analogie optique

L'indice n_1 est réel alors que n_2 est imaginaire : c'est le cas de la réflexion métallique. L'onde incidente est réfléchiée intégralement et on a une onde évanescence dans le milieu métallique.



Page de titre

Sommaire



Page 169 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

4. Barrière de potentiel

Elle est représentée par un potentiel qui est discontinu aux deux points d'abscisse $x = 0$ et $x = a$ (fig. 3.5) et est décrite par :

$$V(x) = 0 \quad \text{pour } x < 0 \quad (3.41)$$

$$V(x) = V_0 \quad \text{pour } 0 \leq x \leq a \quad (3.42)$$

$$V(x) = 0 \quad \text{pour } x > a \quad (3.43)$$

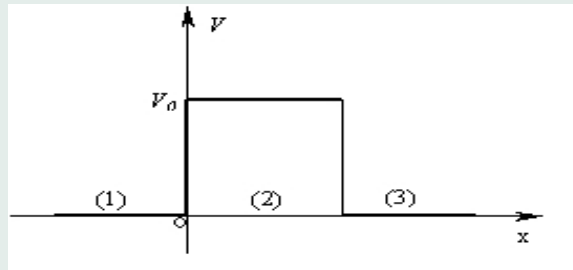


Figure 3.5 : Barrière carrée de potentiel

a est appelée épaisseur de la barrière et V_0 son hauteur.



Page de titre

Sommaire



Page 170 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

4.1. Cas où $E < V_0$: Effet Tunnel

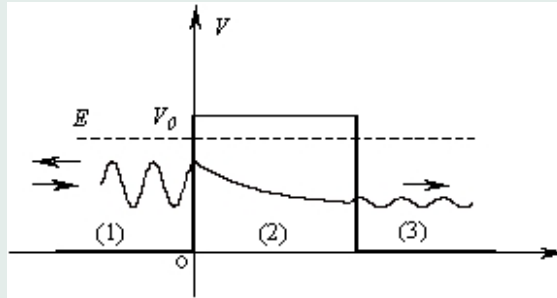


Figure 3.6 : Barrière carrée de potentiel ($E < V_0$)

4.1.1. Traversée de la barrière

La barrière de potentiel est infranchissable pour la particule classique qui est toujours réfléchiée dans la région (1).

En écrivant l'équation de Schrödinger dans les trois régions (1), (2) et (3) on montre facilement que les fonctions d'onde de la particule dans ces régions s'écrivent :

$$\varphi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + A'_1 e^{-ik_1 x} \quad (3.44)$$

$$\varphi_2(x) = A_2 e^{\rho_2 x} + A'_2 e^{-\rho_2 x} \quad (3.45)$$

$$\varphi_3(x) = A_3 e^{ik_1 x} + A'_3 e^{-ik_1 x} \quad (3.46)$$



Page de titre

Sommaire



Page 171 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

k_1 et ρ_2 ont leur signification précédente et A'_3 doit être nul car toute réflexion à l'infini est impossible.

Les conditions de continuité en $x = 0$ et $x = a$ donnent, après un calcul laborieux mais non difficile à mener, les expressions suivantes des coefficients de réflexion et de transmission R et T :

$$R = \left| \frac{A'_1}{A_1} \right|^2 = \frac{(k_1^2 + \rho_2^2) \operatorname{sh}^2(\rho_2 a)}{4 k_1^2 \rho_2^2 + (k_1^2 + \rho_2^2)^2 \operatorname{sh}^2(\rho_2 a)} \quad (3.47)$$

$$T = \left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2 = \frac{4 k_1^2 \rho_2^2}{4 k_1^2 \rho_2^2 + (k_1^2 + \rho_2^2)^2 \operatorname{sh}^2(\rho_2 a)} \quad (3.48)$$

Donc, contrairement aux prévisions classiques, la particule a une probabilité non nulle de franchir la barrière de potentiel : c'est l'effet Tunnel (fig. 3.6). Cet effet est une réalité physique et intervient dans l'interprétation de beaucoup de phénomènes : radioactivité α , passage des électrons d'un atome à un autre, ...

L'équivalent optique de la barrière est une lame métallique plongée dans un milieu transparent (n_1 et n_3 sont réels et n_2 imaginaire). Si la largeur de la lame n'est pas très grande devant la portée $\frac{1}{\rho_2}$ de l'onde évanescente de la région centrale, l'onde peut être transmise dans la région (3) (fig. 3.6).



Page de titre

Sommaire

◀

▶

◀

▶

Page 172 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

4.1.2. Approximation de la barrière épaisse

Cette approximation correspond à la situation où $\rho_2 a \gg 1$.

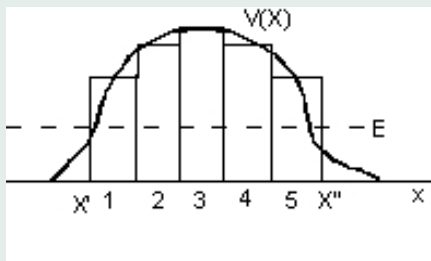
Dans ce cas $sh(\rho_2 a) \simeq e^{\rho_2 a}$, le coefficient de transmission s'écrit alors :

$$T \approx \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-2\rho_2 a} \quad (3.49)$$

Si de plus la hauteur de la barrière est grande devant l'énergie ($\frac{E}{V_0} \ll 1$) le coefficient de transmission s'écrit :

$$T \approx \frac{16E}{V_0} e^{-2\rho_2 a} \quad (3.50)$$

On pourra donc utiliser ces résultats pour traiter de façon approximative une barrière de forme quelconque en la considérant comme une succession de barrières rectangulaires (fig. 3.7).




[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 173 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

Figure 3.7 : Barrière de potentiel de forme quelconque

Le coefficient de transmission global est alors le produit des coefficients de transmission de toutes les barrières rectangulaires, soit :

$$T = T_1 T_2 T_3 \dots T_n \quad (3.51)$$

$$\text{et } \text{Log} T = \text{Log} T_1 + \text{Log} T_2 + \dots \text{Log} T_n \quad (3.52)$$

Si dx_n et $V(x_n)$ sont respectivement la largeur et la hauteur de chacune des barrières rectangulaires et si nous passons à la limite d'une subdivision infiniment fine, nous pouvons remplacer la somme des logarithmes par une intégrale et on obtient :

$$\text{Log} T \sim -\frac{2}{\hbar} \int_{x'}^{x''} \sqrt{2m[V(x) - E]} dx \quad (3.53)$$

Cette expression approchée du coefficient de transmission est très utile et donne une image qualitative correcte de la pénétration de la barrière dans de nombreux phénomènes (radioactivité α , microscopie à effet Tunnel,...).



Page de titre

Sommaire



Page 174 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

4.2. Cas où $E > V_0$: Transfert résonnant

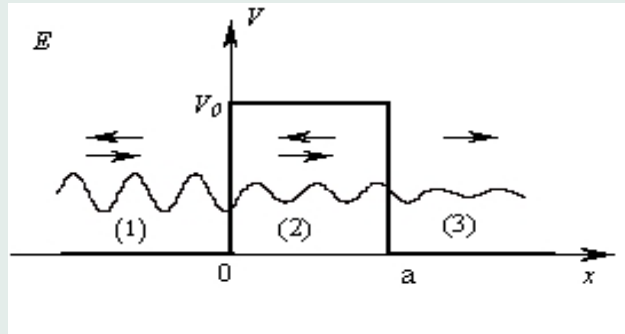


Figure 3.8 : Barrière carrée de potentiel ($E > V_0$)

Dans ce cas, on a toujours en mécanique classique une transmission de la particule avec un ralentissement dans la région centrale. Quantiquement on obtient les fonctions d'onde suivantes :

$$\varphi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + A'_1 e^{-ik_1 x} \quad (3.54)$$

$$\varphi_2(x) = B_2 e^{ik_2 x} + B'_2 e^{-ik_2 x} \quad (3.55)$$

$$\varphi_3(x) = A_3 e^{ik_1 x} + A'_3 e^{-ik_1 x} \quad (3.56)$$

avec

$$k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) \quad (3.57)$$



Page de titre

Sommaire



Page 175 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

A'_3 sera bien sûr nul car la réflexion à l'infini est impossible.

En remplaçant ρ_2 par ik_2 dans les expressions (3.48) et (3.49) de R et T , on obtient :

$$R = \left| \frac{A'_1}{A_1} \right|^2 = \frac{(k_1^2 - k_2^2) \sin^2(k_2 a)}{4 k_1^2 k_2^2 + (k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2(k_2 a)} \quad (3.58)$$

$$T = \left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2 = \frac{4 k_1^2 k_2^2}{4 k_1^2 k_2^2 + (k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2(k_2 a)} \quad (3.59)$$

On remarque qu'il n'y a transmission complète ($T = 1$) que lorsque $k_2 a$ est un multiple de π . Au fur et à mesure que la largeur de la barrière croît, le coefficient de transmission oscille entre cette valeur maximum et une valeur minimale T_m pour laquelle $k_2 a = (2n + 1)\pi/2$ et qu'on montre égale à :

$$T_m = \frac{4E(E - V_0)}{(2E - V_0)^2} \quad (3.60)$$



Page de titre

Sommaire



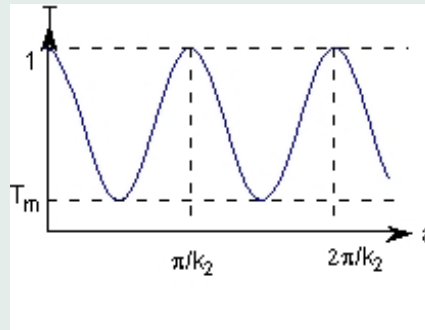
Page 176 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Figure 3.9 : Variation du coefficient de transmission avec a

On aura alors un transfert maximal ou résonnant chaque fois que $a = \frac{n\pi}{k_2}$.

Optiquement les trois indices n_1 , n_2 , et n_3 sont réels, l'onde incidente donne naissance à une onde réfléchie et à une onde transmise.

4.3. Transmission de la barrière en fonction de l'énergie de la particule :

Les relations (3.47) et (3.58) donnant le coefficient de transmission T peuvent s'écrire sous la forme :



Page de titre

Sommaire



Page 177 de 978

Retour

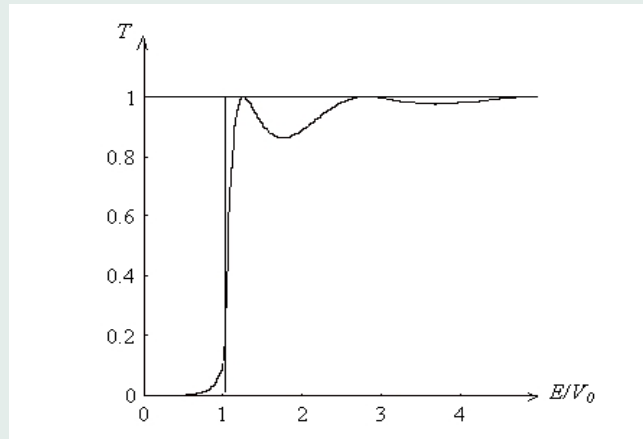
Plein écran

Fermer

Quitter

$$T = \begin{cases} \frac{4E(V_0 - E)}{4E(V_0 - E) + V_0^2 \sinh^2 \rho_2 a} & \text{pour } E < V_0 \\ \frac{4E(E - V_0)}{4E(E - V_0) + V_0^2 \sin^2 k_2 a} & \text{pour } E > V_0 \end{cases}$$

Nous avons tracé sur la figure 3.10 la variation de T en fonction du rapport E/V_0 pour des électrons en prenant à titre d'exemple $V_0 a^2 = 120 \text{ eV} \text{Å}^2$.




[Page de titre](#)
[Sommaire](#)


Page 178 de 978

[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

Figure 3.10 : Variation du coefficient de transmission pour les électrons à travers une barrière de potentiel en fonction du rapport E/V_0

On remarque que dans le cas où $E < V_0$ (effet Tunnel), les coefficients R et T sont bien définis ce qui prouve que le paquet d'ondes incident associé à la particule se scinde en un paquet réfléchi et un paquet transmis dont les intensités ne sont jamais nulles.

Pour $E > V_0$, T peut atteindre l'unité pour certaines valeurs de l'énergie et on assiste dans ce cas à une transmission totale. Au fur et à mesure que l'énergie augmente T oscille entre cette valeur et un minimum de l'ordre de $\frac{4E(E - V_0)}{(2E - V_0)^2}$. L'effet est d'autant plus marqué lorsque la barrière est très élevée ou très épaisse et que l'énergie cinétique $E - V_0$ dans la région (2) est petite.



Page de titre

Sommaire



Page 179 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

5. Puits de potentiel

5.1. Puits de potentiel fini

Il est représenté sur la figure 3.11.

La particule est en mouvement dans un potentiel $V(x)$ tel que $V(x)$ est nul sur le segment $[a, -a]$ et $V(x) = V_0$ en dehors de ce segment.

En mécanique classique, lorsque V_0 est inférieur à l'énergie E de la particule ; celle-ci venant des x négatifs subit une accélération au passage de la discontinuité du potentiel en $x = -a$ et reprend sa vitesse au passage de la discontinuité du potentiel en $x = a$ pour aller se perdre à l'infini. Lorsque V_0 est supérieur à E , tout mouvement de la particule est interdit en dehors du segment $]a, -a[$. La particule est donc astreinte à se mouvoir sur le segment de droite de longueur $2a$ où elle est confinée.

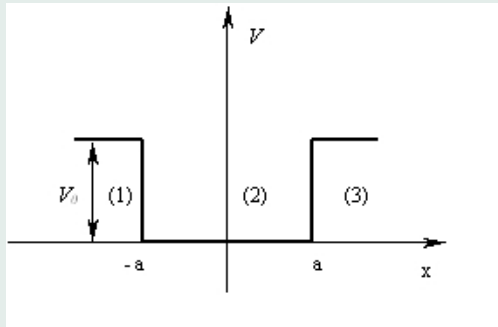




Figure 3.11 : Puits carré de potentiel

C'est à ce confinement qu'on va s'intéresser en mécanique quantique en écrivant l'équation de Schrödinger dans les trois régions (1), (2) et (3) où agit le potentiel :

- A l'extérieur du puits : $|x| > a$

L'équation de Schrödinger s'écrit :

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} - \rho^2\varphi = 0 \quad \text{avec} \quad \rho^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E) \quad (3.61)$$

et ses solutions sont :

$$\varphi_1(x) = B_1 e^{\rho x} + B'_1 e^{-\rho x} \quad (3.62)$$

$$\varphi_3(x) = B_2 e^{\rho x} + B'_2 e^{-\rho x} \quad (3.63)$$

Comme $\varphi(x)$ doit être bornée dans les régions (1) et (3), on a nécessairement : $B'_1 = B_2 = 0$.

- A l'intérieur du puits : $|x| < a$

L'équation de Schrödinger est :

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} + k^2\varphi = 0 \quad \text{avec} \quad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E \quad (3.64)$$

[Page de titre](#)
[Sommaire](#)
[<<](#)
[>>](#)
[<](#)
[>](#)
[Page 180 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)



Page de titre

Sommaire



Page 181 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

La solution générale de cette équation est donc de la forme :

$$\varphi_2(x) = A_1 e^{ikx} + A'_1 e^{-ikx}$$

Comme le potentiel est pair, les fonctions d'onde à l'intérieur du puits sont soit paires soit impaires c'est à dire qu'on a :

$$\varphi_2^P(x) = A \cos kx \quad \text{et} \quad \varphi_2^I(x) = B \sin kx \quad (3.65)$$

En conclusion le problème admet deux ensembles de solutions :

$$\left\{ \begin{array}{l} \varphi_1(\mathbf{x}) = \mathbf{B}_1 e^{\rho \mathbf{x}} \\ \varphi_2^P(\mathbf{x}) = \mathbf{A} \cos \mathbf{kx} \\ \varphi_3(\mathbf{x}) = \mathbf{B}'_2 e^{-\rho \mathbf{x}} \end{array} \right. \quad \text{et} \quad \left\{ \begin{array}{l} \varphi_1(\mathbf{x}) = \mathbf{B}_1 e^{\rho \mathbf{x}} \\ \varphi_2^I(\mathbf{x}) = \mathbf{B} \sin \mathbf{kx} \\ \varphi_3(\mathbf{x}) = \mathbf{B}'_2 e^{-\rho \mathbf{x}} \end{array} \right.$$

avec $B'_2 = B_1$.

Les conditions de raccordement imposées à la fonction d'onde et à sa dérivée aux points $x = -a$ et $x = +a$ conduisent pour les deux ensembles de solutions aux deux conditions de quantification suivantes :

$$\text{tg}(\mathbf{ka}) = \frac{\rho}{\mathbf{k}} \quad \text{et} \quad \text{cotg}(\mathbf{ka}) = -\frac{\rho}{\mathbf{k}} \quad (3.66)$$

Il est possible de résoudre graphiquement ces équations implicites en E , mais il est plus simple de les ramener aux deux systèmes d'équations



Page de titre

Sommaire

◀

▶

◀

▶

Page 182 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

équivalentes suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{l} |\cos \mathbf{k} \mathbf{a}| = \frac{k}{k_0} \\ \operatorname{tg}(\mathbf{k} \mathbf{a}) > 0 \end{array} \right. \quad \text{et} \quad \left\{ \begin{array}{l} |\sin \mathbf{k} \mathbf{a}| = \frac{k}{k_0} \\ \operatorname{tg}(\mathbf{k} \mathbf{a}) < 0 \end{array} \right. \quad (3.67)$$

où k_0 est tel que : $k_0^2 = k^2 + \rho^2 = \frac{2m}{\hbar^2} V_0$

Les niveaux d'énergie sont déterminés par l'intersection d'une droite de pente $1/k_0$ avec des arcs de sinusoïde (fig. 3.12). Ces niveaux sont intercalés en niveaux pairs et impairs correspondant à des fonctions d'onde paires et impaires représentant les états liés de la particule.

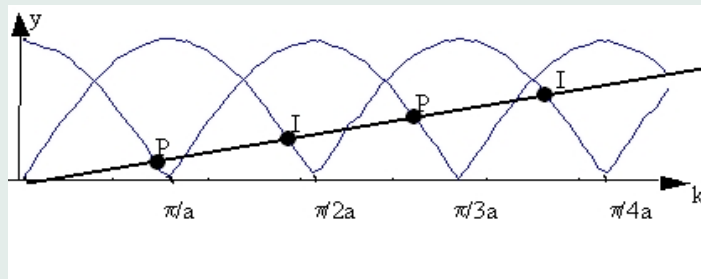


Figure 3.12 : Détermination graphique des énergies des états liés d'une particule dans un puits carré de potentiel

L'analogie optique de ce système est une lame d'air emprisonnée entre deux blocs métalliques (n_1 et n_3 sont imaginaires et n_2 réel) : C'est le principe



Page de titre

Sommaire



Page 183 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

d'une cavité. L'onde électromagnétique se confine dans la région centrale et il s'établit un système d'ondes stationnaires.

5.2. Puits de Potentiel infini

5.2.1. Niveaux d'énergie et fonctions d'onde

Si l'énergie potentielle V_0 caractérisant la profondeur du puits devient infiniment grande devant l'énergie E de la particule, on obtient un puits de potentiel infini (fig. 3.13).

Classiquement la particule ne peut qu'osciller entre les deux parois du puits.

Quantiquement la fonction d'onde de la particule doit être nulle à l'extérieur du puits ($\varphi_1 = \varphi_3 = 0$) et continue en $x = \pm a$.

A l'intérieur du puits, et en raison de la parité du potentiel les solutions de l'équation de Schrödinger sont soit paires soit impaires.

Les fonctions d'onde de la particule sont donc :

$$\varphi^{\text{P}}(\mathbf{x}) = A \cos kx \quad \text{et} \quad \varphi^{\text{I}}(\mathbf{x}) = B \sin kx \quad (3.68)$$

Les conditions de continuité en $x = -a$ et en $x = a$ donnent :



Page de titre

Sommaire



Page 184 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

- Pour les fonctions paires

$$\cos kx = 0 \text{ soit : } ka = (2n + 1)\frac{\pi}{2} \text{ et } E_P = (2n + 1)^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} \quad (3.69)$$

- Pour les fonctions impaires

$$\sin kx = 0 \text{ soit : } ka = n\pi \text{ et } E_I = (2n)^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} \quad (3.70)$$

Les deux expressions de l'énergie E_P et E_I peuvent être regroupées en une seule relation :

$$E_N = N^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} \quad \text{avec} \quad N = 1, 2, 3, \dots \quad (3.71)$$

Ce résultat qui peut être obtenu à partir de l'étude du puits fini, en faisant tendre V_0 vers l'infini dans les relations de quantification (3.65) et (3.66), montre que le spectre d'énergie est constitué de niveaux discrets, éloignés les uns des autres comme le carré des nombres entiers successifs.

Les constantes A et B se calculent facilement en normalisant les fonctions d'onde c'est à dire en écrivant :

$$\int_{-a}^{+a} |\varphi(x)|^2 dx = 1 \quad (3.72)$$



Page de titre

Sommaire

◀

▶

◀

▶

Page 185 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

on obtient : $A = B = \frac{1}{\sqrt{a}}$ ce qui donne pour les fonctions d'onde :

$$\varphi^{\text{P}}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{a}} \cos \left[\frac{(2n+1)}{2a} \pi \mathbf{x} \right] : \text{fonctions paires ou symétriques}$$

$$\varphi^{\text{I}}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin \left[\frac{n}{a} \pi \mathbf{x} \right] : \text{fonctions impaires ou antisymétriques}$$

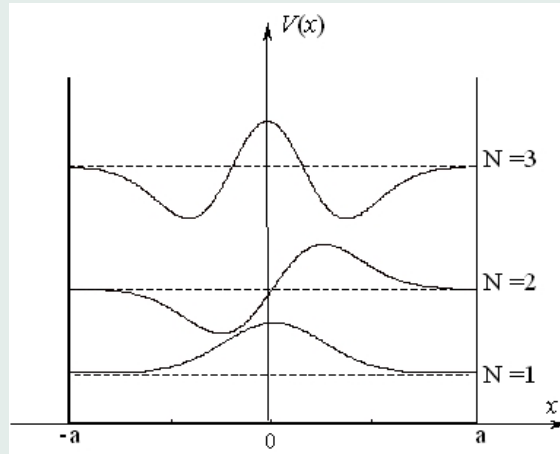


Figure 3.13 : Fonctions d'onde et niveaux d'énergie d'une particule dans un puits de potentiel



Page de titre

Sommaire



Page 186 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Nous avons représenté sur la figure 3.13 les positions des niveaux d'énergie et dessiné l'allure des fonctions d'onde pour l'état fondamental ($N = 1$) et les deux premiers états excités ($N = 2, N = 3$).

5.2.2. Remarques

5.2.2.1. Etat fondamental

Alors que l'état fondamental de la particule classique est caractérisé par une énergie nulle, l'état fondamental ($N = 1$) de la particule quantique est tel que :

$$E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} \neq 0 \quad (3.73)$$

Ce résultat est une conséquence du principe d'incertitude de Heisenberg, en effet :

$$\Delta x \approx 2a \quad \text{et} \quad \Delta p \approx p - (-p) = 2p \quad (3.74)$$

ce qui donne :

$$\Delta x \Delta p \approx 4ap \geq h \quad \text{et} \quad p \geq \frac{h}{4a} \quad (3.75)$$

La particule étant libre à l'intérieur du puits on a :

$$E = \frac{P^2}{2m} \quad \text{soit} \quad E \geq \frac{1}{2m} \left(\frac{h}{4a} \right)^2$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 187 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

donc :

$$E \geq \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2}$$

On aura alors toujours $E \geq E_1$.

5.2.2.2. Analogie avec les cordes vibrantes :

A l'intérieur du puits la particule est dans des états stationnaires. On peut donc faire une analogie avec la corde vibrante en prenant pour longueur d'onde associée à la particule la longueur d'onde de De Broglie. On sait que lorsque la corde de longueur L est le siège d'ondes stationnaires de longueur d'onde λ , on a :

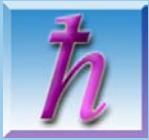
$$L = N \frac{\lambda}{2} \tag{3.76}$$

Dans le cas du puits de potentiel on a :

$$L = 2a \text{ et } \lambda = \lambda_{DB} = \frac{h}{P} \tag{3.77}$$

On aura donc :

$$2a = \frac{Nh}{2P} \text{ soit : } P = N \frac{h}{4a}$$



Page de titre

Sommaire



Page 188 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

et l'énergie E est telle que :

$$E = \frac{P^2}{2m} = \frac{1}{2m} N^2 \left(\frac{h}{4a} \right)^2 = \frac{1}{2m} N^2 \left(\frac{2\pi\hbar}{4a} \right)^2 \quad (3.78)$$

soit :

$$E = N^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} \quad (3.79)$$

qui est un résultat identique à celui trouvé à partir des conditions de quantification (3.68) et (3.69).

5.2.2.3. Puits de potentiel quelconque

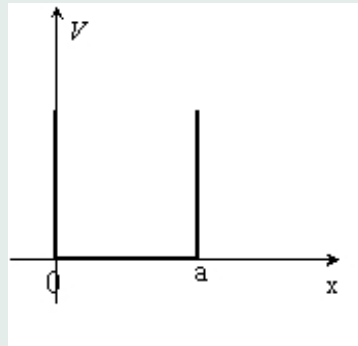


Figure 3.14 : Puits de potentiel quelconque


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 189 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

Si le potentiel $V(x)$ n'est pas pair, comme c'est le cas du potentiel représenté sur la figure 3.14, une démarche analogue à la précédente conduirait aux énergies et aux fonctions d'onde suivantes :

$$E_n = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \quad \text{et} \quad \varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \left[\frac{n\pi}{a} x \right] \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (3.80)$$

5.3. Boite de Potentiel

C'est une généralisation à trois dimensions du puits infini (fig. 3.15). La particule est dans ce cas placée dans le potentiel défini par :

$$V(x, y, z) = \begin{cases} 0 & \text{pour } 0 < x < a, 0 < y < a, 0 < z < a \\ \infty & \text{ailleurs} \end{cases} \quad (3.81)$$



Page de titre

Sommaire



Page 190 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

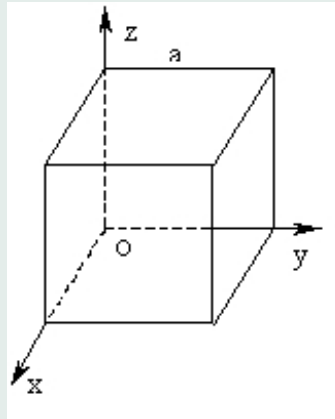


Figure 3.15 : Boite de potentiel cubique

L'équation aux valeurs propres s'écrit :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(x, y, z)\right]\Psi(x, y, z) = E\Psi(x, y, z) \quad (3.82)$$

avec $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$

A l'extérieur de la boîte la fonction d'onde est nulle car le potentiel est infini.
A l'intérieur de la boîte où le potentiel est nul, l'équation aux valeurs propres


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 191 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

devient :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\Psi(x, y, z) = E\Psi(x, y, z) \quad (3.83)$$

Cette équation se résout en séparant les variables :

$$\Psi(x, y, z) = \Psi_1(x) * \Psi_2(y) * \Psi_3(z) \quad (3.84)$$

ce qui conduit à trois équations du type :

$$\frac{1}{\Psi_i(x_i)} \frac{\partial^2 \Psi_i(x_i)}{\partial x_i^2} = -k_i^2 \quad (3.85)$$

où $i = 1, 2, 3$ et $x_1 = x$, $x_2 = y$ et $x_3 = z$.

Les solutions de ces équations sont :

$$\Psi_i(x_i) = A \sin(k_i x_i + \delta_{x_i}) \quad (3.86)$$

Les conditions de continuité en $x = 0$, $y = 0$ et $z = 0$ et en $x = a$, $y = a$ et $z = 0$ donnent :

$$\delta_x = \delta_y = \delta_z = 0 \quad (3.87)$$

et

$$ak_x = n_x \pi, \quad ak_y = n_y \pi, \quad ak_z = n_z \pi \quad (3.88)$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 192 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

ce qui conduit en définitive aux énergies propres et fonctions propres suivantes de la particule :

$$E_n = (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \quad (3.89)$$

$$\Psi_{n_x, n_y, n_z}(x, y, z) = A \sin\left(n_x \frac{\pi}{a} x\right) \sin\left(n_y \frac{\pi}{a} y\right) \sin\left(n_z \frac{\pi}{a} z\right) \quad (3.90)$$

La constante A s'obtient en normalisant la fonction d'onde :

$$\int \Psi_{n_x, n_y, n_z}^* \Psi_{n_x, n_y, n_z} dV = |A|^2 \int_0^a \sin^2(k_x x) dx \int_0^a \sin^2(k_y y) dy \int_0^a \sin^2(k_z z) dz = 1 \quad (3.91)$$

on aura après un calcul d'intégration simple :

$$|A| = \sqrt{\frac{8}{a^3}} \quad (3.92)$$

En posant $n^2 = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2$, on peut écrire enfin :

$$E_n = N^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \quad (3.93)$$

$$\Psi_{n_x, n_y, n_z}(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{a^3}} \sin\left(n_x \frac{\pi}{a} x\right) \sin\left(n_y \frac{\pi}{a} y\right) \sin\left(n_z \frac{\pi}{a} z\right) \quad (3.94)$$



Page de titre

Sommaire



Page 193 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Dans ce cas, une même énergie peut correspondre à plusieurs fonctions propres car plusieurs jeux des nombres entiers n_x , n_y , n_z peuvent donner une même valeur de N^2 . On dit alors que l'énergie est dégénérée ; son degré de dégénérescence g est le nombre de fonctions propres linéairement indépendantes correspondant à cette même valeur de l'énergie. Il est facile de déterminer le degré de dégénérescence g comme le montre le tableau suivant

où on a posé : $E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$.

Energie	Combinaisons (n_x, n_y, n_z)	Degré de dégénérescence
$3E_1$	(1, 1, 1)	1
$6E_1$	(2, 1, 1), (1, 2, 1), (1, 1, 2)	3
$9E_1$	(2, 2, 1), (2, 1, 2), (1, 2, 2)	3
$11E_1$	(3, 1, 1), (1, 3, 1), (1, 1, 3)	3
$12E_1$	(2, 2, 2)	1
$14E_1$	(1, 3, 2), (2, 1, 3), (3, 1, 2), (1, 2, 3), (3, 2, 1), (2, 3, 1)	6



Page de titre

Sommaire



Page 194 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Lorsque la boîte est rectangulaire d'arêtes a, b, c on montre facilement que les énergies propres et fonctions propres sont données par :

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2} \right) \quad (3.95)$$

$$\Psi_{n_x, n_y, n_z}(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{abc}} \sin\left(n_x \frac{\pi}{a} x\right) \sin\left(n_y \frac{\pi}{a} y\right) \sin\left(n_z \frac{\pi}{a} z\right) \quad (3.96)$$

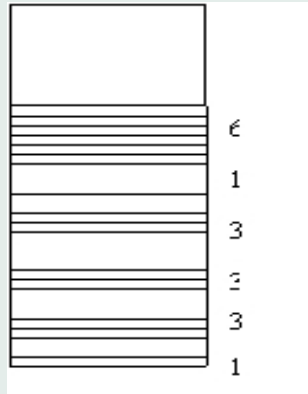


Figure 3.16 : Levée de dégénérescence des niveaux d'énergie dans une boîte rectangulaire

Dans ce cas et comme le montre la figure 3.16, la dégénérescence est levée. Dans le cas où a, b , et c ne diffèrent pas beaucoup, tous les niveaux

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 195 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

associés au triplet (n_x, n_y, n_z) sont proches les uns des autres et on dit qu'on a des niveaux "multiplets". De telles structures d'états en multiplets sont appelées des "couches" et donnent lieu à de modèles très utilisés en physique atomique et en physique nucléaire.



Page de titre

Sommaire



Page 196 de 978

Retour

Plein écran

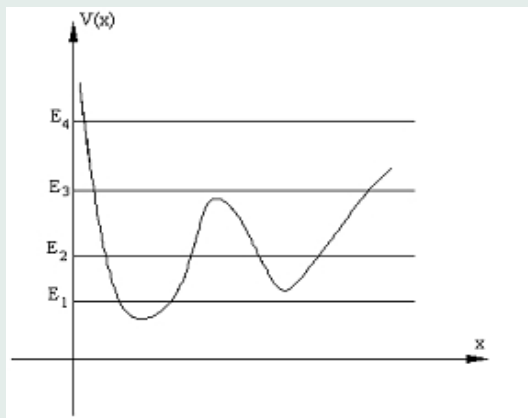
Fermer

Quitter

Exercices et Problèmes

EP 3.1 Discussion classique d'une courbe de potentiel

On considère une particule de masse m , en mouvement sur l'axe $\overrightarrow{Ox}$ sous l'effet de forces dérivant du potentiel $V(x)$ décrit sur la figure ci-dessous :



- 1- Déterminer les positions d'équilibre de la particule et préciser leur nature.
- 2- Discuter le mouvement de la particule lorsque son énergie totale E est égale à l'une des valeurs indiquées sur la figure : $E = E_1$, $E = E_2$, $E = E_3$, $E = E_4$.

EP 3.2 Effet Tunnel et applications



Page de titre

Sommaire



Page 197 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

1- On considère un flux de particules de masse m et d'énergie E qui venant de la région des x négatifs, arrive sur la barrière de potentiel de hauteur V_0 et d'épaisseur a représentée sur la figure 1 et définie par :

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{pour } x < 0 & \text{(I)} \\ V_0 & \text{pour } 0 \leq x \leq a & \text{(II)} \\ 0 & \text{pour } x \geq a & \text{(III)} \end{cases}$$

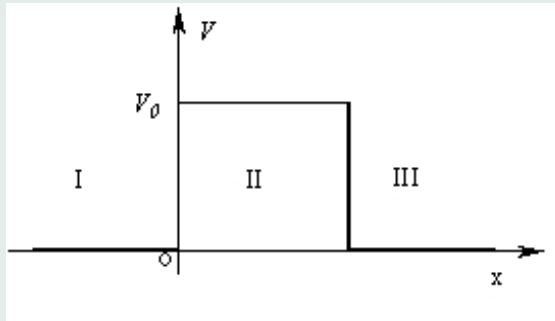


Figure 1

On suppose que l'énergie E de ces particules est inférieure à V_0 .

a- Décrire le comportement classique des particules

b- Ecrire l'équation de Schrödinger et donner les solutions $\varphi_1(x)$, $\varphi_2(x)$ et $\varphi_3(x)$ dans les trois régions I, II, III.



Page de titre

Sommaire



Page 198 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

on posera :

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

c- Ecrire les conditions aux limites et en déduire l'expression du coefficient de transmission $T(E)$ des particules qui ont pu franchir la barrière.

d- En se plaçant dans l'approximation de la barrière épaisse ($\rho a \gg 1$) et en supposant la hauteur V_0 de la barrière grande par rapport à E_0 , montrer que $T(E)$ se comporte comme $e^{-2\rho a}$.

e- On peut utiliser les résultats de la question précédente pour traiter de façon approximative une barrière de forme quelconque en la considérant comme une succession de barrière plates infinitésimalement minces : (fig. 3...). Montrer que dans ce cas le coefficient de transmission est égal à :

$$T(E) = \exp\left(-\frac{S}{\hbar}\right) \quad \text{avec} \quad S = 2 \int_{x_1}^{x_2} [2m(V(x) - E)]^{\frac{1}{2}} dx$$

2- La radioactivité α

On donne sur la figure 2 une représentation schématique du potentiel que voit une particule α au voisinage du noyau : le potentiel d'interaction entre une particule α et le noyau est composé d'un puits de potentiel attractif, dû aux forces nucléaires de courte portée, et d'une partie électrostatique répulsive.



Page de titre

Sommaire



Page 199 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

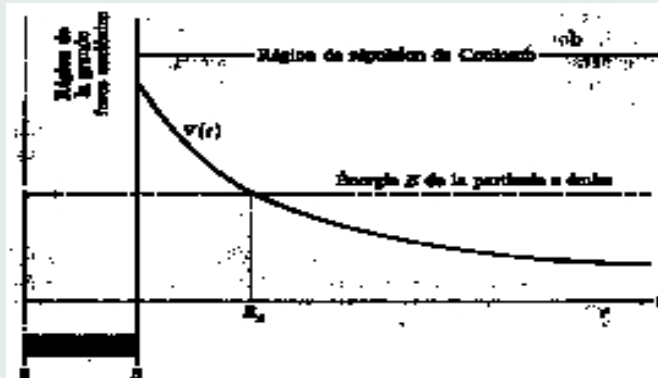


Figure 2

a- Sachant que les énergies des particules α émises se trouvent typiquement dans le domaine $4 - 10 \text{ MeV}$, calculer le potentiel V_m au sommet de la barrière.

On rappelle que le rayon d'un noyau de nombre de masse A est donné par : $R \cong r_0 A^{1/3}$ où $r_0 = 1.2 \times 10^{-15} \text{ m}$.

Evaluer V_m dans le cas de l'isotope de l'uranium ${}_{92}\text{U}^{238}$: $A = 238$; $Z = 92$.

b- Dédire l'explication de la radioactivité α par la théorie quantique.

c- Expliquer la durée de vie relativement longue (de l'ordre de 10^{10} années) de certains noyaux radioactifs α .

3- Microscopie à effet tunnel

Ce microscope est utilisé pour visualiser l'état d'une surface métallique à l'échelle atomique et moléculaire. Son principe consiste à déplacer au dessus de la surface


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 200 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

qu'on suppose rugueuse une électrode pointue à laquelle on applique une tension E (fig. 3) et à mesurer l'intensité I du courant qui passe dans ce "circuit".

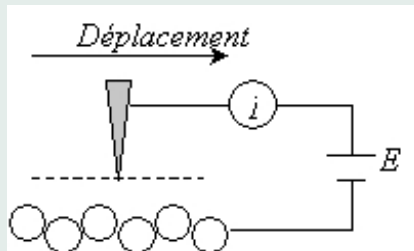


Figure 3

- Que représente V_0 dans cette expérience
- Montrer que l'intensité I du courant varie suivant une loi de type $e^{-\rho a}$ où a est la distance entre l'électrode et la surface.
- Pourquoi la mesure de I permet d'avoir une image très précise de la surface.



Page de titre

Sommaire



Page 201 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

EP 3.3 Puits infini : Niveau de Fermi

1- On considère un électron de masse m en mouvement dans un puits de potentiel infini $V(x)$ de largeur L tel que :

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{pour } 0 < x < L \\ \infty & \text{ailleurs} \end{cases}$$

a- Ecrire l'équation de Schrödinger pour cet électron et donner ses solutions.

b- En utilisant les conditions aux limites pour $x = 0$ et $x = L$, montrer que les énergies de l'électron sont données par :

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2$$

+où n est un nombre entier.

2- On place maintenant dans le puits N électrons libres obéissant au principe d'exclusion de Pauli, principe qui interdit à deux électrons d'occuper le même état quantique. Chaque niveau ne peut alors être occupé que par deux électrons de spins antiparallèles.

Le niveau rempli le plus élevé est appelé niveau de Fermi. Calculer l'énergie de ce niveau.



Page de titre

Sommaire



Page 202 de 978

Retour

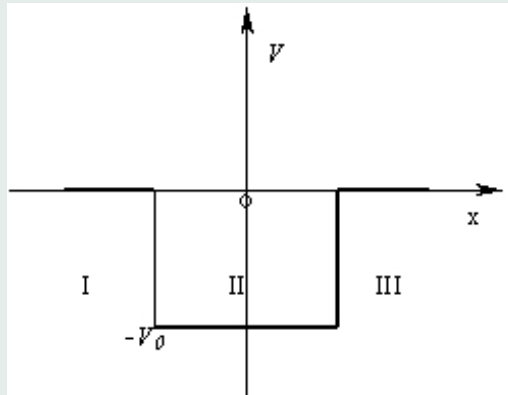
Plein écran

Fermer

Quitter

EP 3.4 Puits fini symétrique

On considère un puits rectangulaire de largeur a . Pour $-a \leq x \leq a$, le potentiel est égal à $-V_0$, avec $V_0 > 0$. A l'extérieur du puits le potentiel est nul.



On se propose d'étudier l'action de ce puits sur un flux de particules identiques de masse m et d'énergie E :

1. Etats liés :


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 203 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

On suppose que l'énergie E des particules est négative et est telle que $-V_0 < E < 0$.

a- Déterminer la fonction d'onde des particules dans les régions I, II et III.

On posera :

$$\rho^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2} \quad \text{et} \quad k^2 = \frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2}$$

b- En écrivant les conditions de raccordement de la fonction d'onde et de sa dérivée en $x = -a$ et $x = +a$, montrer que la quantification de l'énergie est donnée par les relations suivantes :

$$\operatorname{tg}(ka) = \frac{\rho}{k} \quad \text{et} \quad \operatorname{cotg}(ka) = -\frac{\rho}{k}$$

c- Déterminer graphiquement les niveaux d'énergie des états liés de la particule dans le puits.

d- Déterminer ces niveaux d'énergie lorsque le puits devient infini .

2- Etats du continuum :

On suppose maintenant que l'énergie E est positive.

a- Déterminer le facteur de transmission T défini comme le rapport du flux de particules transmises au flux de particules incidentes.

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 204 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

b- Déterminer le facteur de réflexion R défini comme le rapport du flux de particules réfléchies au flux de particules incidentes.

Montrer que $T + R = 1$.

c- Montrer que T est égal à 1 pour certaines valeurs de l'énergie E des particules.

d- Les particules envisagées sont des électrons. Sachant que le puits de potentiel a une largeur $a = 2 \text{ \AA}$ et une profondeur $V_0 = 8.5 \text{ eV}$, déterminer les valeurs de $\frac{E}{V_0}$

telles que $T = 1$ et tracer la courbe donnant T en fonction de $\frac{E}{V_0}$.

e- Quel est le système optique qui présente une analogie avec ce puits.



Page de titre

Sommaire



Page 205 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

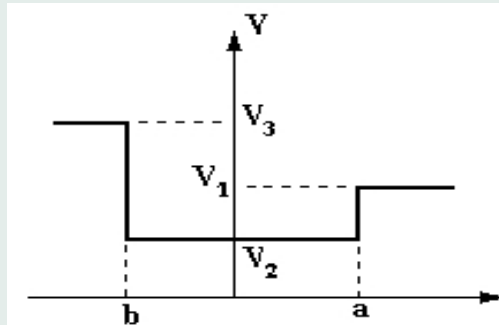
Quitter

EP 3.5 Puits fini asymétrique

On considère le puits de potentiel représenté sur la figure ci-dessous et décrit par le potentiel $V(x)$ tel que :

$$V(x) = \begin{cases} V_1 & \text{pour } a < x \quad \text{(I)} \\ V_2 & \text{pour } b < x < a \quad \text{(II)} \\ V_3 & \text{pour } x < b \quad \text{(III)} \end{cases}$$

avec $V_2 < V_1 < V_3$.



On se propose d'étudier l'action de ce puits sur un flux de particules identiques de masse m et d'énergie E .



Page de titre

Sommaire



Page 206 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Etudier le spectre discret et le spectre continu des niveaux d'énergie de ces particules. Montrer que lorsque $b = -a$ et que $V_1 = V_3 = 0$ et $V_2 = -V_0$, on retrouve les résultats obtenus dans l'exercice EP3.4.

EP 3.6 Etats d'une particule dans un potentiel $V(x) = -V_0/ch^2(\frac{x}{a})$

On considère le puits de potentiel défini par :

$$V(x) = -\frac{V_0}{ch^2(\frac{x}{a})}$$

1- Ecrire l'équation de Schrödinger décrivant les états d'une particule de masse m , en mouvements, sous l'action de forces dérivant du potentiel $V(x)$.

2- On considère la fonction $\varphi(x) = ch^\lambda(\frac{x}{a})$; ($\lambda < 0$).

a- Montrer que cette fonction est solution de l'équation de Schrödinger pour des valeurs de λ qu'on déterminera en fonction de V_0 et montrer que les énergies

correspondantes sont définies par $E = -\frac{\hbar^2}{2ma^2}\lambda^2$.

b- Donner une valeur approchée E_0 de E lorsque V_0 est très petit

$$(V_0 \ll \frac{\hbar^2}{8ma^2}).$$

c- Donner une valeur approchée E_∞ de E lorsque V_0 est très grand

$$(V_0 \gg \frac{\hbar^2}{8ma^2}).$$



Page de titre

Sommaire



Page 207 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

3- Lorsque V_0 est grand, la particule reste au fond du puits, il est légitime de remplacer le potentiel $V(x)$ par un potentiel harmonique $V_H(x)$.

a- En développant $V(x)$ au voisinage de $x = 0$ donner la forme de $V_H(x)$.

b- Ecrire l'hamiltonien H_0 décrivant le mouvement de la particule.

c- En déduire la constante de force k et la pulsation ω du mouvement.

d- Calculer l'énergie du niveau fondamental.

EP 3.7 Quantification gravitationnelle

On se propose d'étudier les niveaux d'énergie d'une particule de masse m dans le champ de gravitation à la surface de la terre. On suppose pour simplifier, que le problème est à une dimension, c'est à dire que la particule est astreinte à se déplacer seulement suivant l'axe $\vec{Oz}$ et dans le potentiel défini par :

$$\begin{cases} V(z) = \infty & \text{pour } z < 0 \\ V(z) = mgz & \text{pour } z \geq 0 \end{cases}$$

1- Ecrire l'équation aux valeurs propres de la particule. On notera E_n et $\varphi_n(z)$ les énergies propres et les fonctions propres.

2- Donner les conditions aux limites que doivent satisfaire les fonctions propres en $z = 0$ et en $z = \infty$.


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 208 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

3- En posant $z = z_0 x$ et $E = E_0 \varepsilon$, ramener l'équation aux valeurs propres à une équation à variables sans dimensions de la forme :

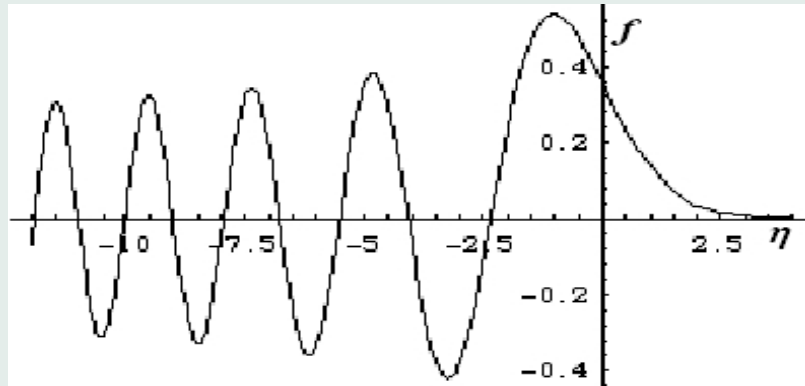
$$-\varphi''(x) + x\varphi(x) = \varepsilon\varphi(x)$$

Donner les valeurs de z_0 et E_0 .

4- Sachant que les solutions de l'équation différentielle suivante :

$$f''(\eta) - \eta f(\eta) = 0$$

sont des fonctions spéciales d'Airy s'annulant pour $\eta \rightarrow \infty$ et pouvant être représentées par le graphe ci-dessous, on demande de déterminer les niveaux d'énergie E_n de la particule et les fonctions d'onde correspondantes.



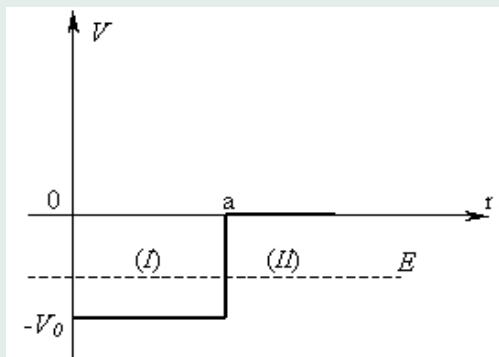

[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 209 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

5- Calculer les deux premiers niveaux d'énergie. Quelle serait la fréquence d'un photon émis ou absorbé lors d'une transition entre ces deux états ? Conclure quant à la prise en considération de cette quantification dans les problèmes courants.

EP 3.8 Etats liés d'une particule dans un puits de potentiel sphérique

On considère une particule de masse m dans l'espace à trois dimensions, soumise à un potentiel constant ($-V_0$) avec $V_0 > 0$ à l'intérieur d'une sphère de rayon a centrée sur l'origine et un potentiel nul à l'extérieur de la sphère. On s'intéresse aux états liés stationnaires d'énergies E négatives de cette particule ($-V_0 < E < 0$) c'est à dire aux états liés, et plus précisément, à ceux parmi de ces états à symétrie sphérique, autrement dit, dont la fonction d'onde ne dépend que de la distance r au centre de la sphère.





Page de titre

Sommaire



Page 210 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

1. Ecrire l'équation de Schrödinger indépendante du temps dans les deux régions (I : $r < a$) et (II : $r > a$).

On rappelle que le laplacien d'une fonction $\Psi(r)$ ne dépend que de r et qu'il s'écrit :

$$\Delta\Psi = \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2}(r\Psi)$$

2. Montrer que les solutions mathématiques de cette équation dans les deux régions sont de la forme :

$$\begin{cases} r\Psi_I(r) &= A \sin(\lambda r) + B \cos(\lambda r) \\ r\Psi_{II}(r) &= C e^{-kr} + D e^{kr} \end{cases}$$

Expliciter λ et k .

3. a- Sachant que l'intégrale $\int |\Psi|^2 d\tau$ doit être finie, justifier que la solution physique de l'équation de Schrödinger dans la région (II) est donnée par :

$$\Psi_{II}(r) = \frac{C}{r} e^{-kr}$$

b- En effectuant un développement limité de $r\Psi_I(r)$ au voisinage de $r=0$, justifier que la solution physiquement acceptable de l'équation de Schrödinger dans la région (I) est donnée par :

$$\Psi_I(r) = \frac{A}{r} \sin(\lambda r)$$



Page de titre

Sommaire



Page 211 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

c- Représenter graphiquement l'allure générale des fonctions d'onde $\Psi(r)$.

4. a- Ecrire en les justifiant les conditions de continuité pour la fonction $\Psi(r)$ et sa dérivée $\Psi'(r)$.

b- Montrer que les valeurs négatives possibles de l'énergie E sont les solutions de l'équation de quantification :

$$\cot g(\lambda a) = \frac{-k}{\lambda}$$

5. a- Montrer que cette équation peut s'écrire sous la forme :

$$\begin{cases} |\sin(\lambda a)| = \frac{\lambda a}{\lambda_0 a} \\ \operatorname{tg}(\lambda a) < 0 \end{cases}$$

où λ_0 est une constante que l'on explicitera.

b- Résoudre graphiquement cette équation et montrer que le nombre d'états liés dépend de V_0 et de a .

α - Pour un rayon a fixé, quelle est la condition sur V_0 pour n'obtenir aucun état lié ?

β - Pour un rayon a fixé, quelle est la condition sur V_0 pour obtenir un seul état lié ?

γ - Pour un rayon a fixé, quelle est la condition sur V_0 pour obtenir un nombre n d'états liés ?

6- Déterminer la probabilité $P(r)dr$ de trouver la particule entre les sphères de rayons r et $r + dr$.



Page de titre

Sommaire



Page 212 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Représenter l'allure générale de la densité de probabilité $P(r)$ pour r variant de 0 à l'infini.

7- Application au deuton.

Le potentiel précédent modélise l'attraction entre un proton et un neutron situé à la distance r l'un de l'autre. Cette attraction est due aux forces nucléaires appelées "interaction fortes".

Le deuton est un système lié formé d'un proton et d'un neutron, c'est un noyau de deutérium qui n'existe que dans un seul état lié et cet état est sphérique.

L'énergie de ce deuton évaluée à partir de son défaut de masse vaut :

$$E = - (M_{\text{proton}} + M_{\text{neutron}} - M_{\text{deuton}}) c^2 = 3.57 \times 10^{-13} \text{ J}$$

avec :

$$M_{\text{proton}} \sim M_{\text{neutron}} = 1.67 \times 10^{-27} \text{ Kg}$$

l'étude du deuton se ramène à l'étude précédente en remplaçant m par la masse réduite du système : (*proton + neutron*).

a- Calculer la masse réduite du système.

b- En utilisant les résultats de la question (5. b)), déduire la valeur maximale possible pour le rayon a du puits de potentiel sachant que la solution numérique de l'équation :

$$\left(\frac{3\pi}{2} \right) \sin(\alpha) = \alpha \quad \text{est} \quad \alpha = 2.57$$



Page de titre

Sommaire



Page 213 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

EP 3.9 Effet MASER

La molécule d'ammoniac NH_3 est formée de trois atomes d'hydrogène H situés aux sommets d'un triangle équilatéral et d'un atome d'azote N situé sur l'axe du triangle à une distance x du plan des hydrogènes.

On néglige le mouvement des atomes d'hydrogène dans leur plan et on ne s'intéresse qu'au mouvement d'ensemble du plan des hydrogènes par rapport à l'atome d'azote. On est donc ramené à un problème à une dimension, le seul paramètre étant la distance x entre l'azote pris comme origine (fixe) et le centre de gravité G mobile des atomes d'hydrogène.

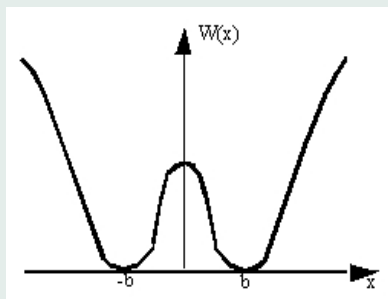


figure 1

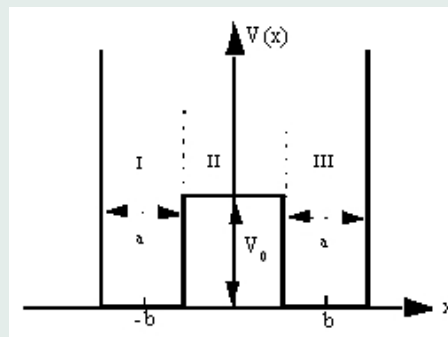


figure 2

L'énergie potentielle d'interaction $W(x)$ entre les atomes d'azote et d'hydrogène est représentée sur la figure 1. Pour simplifier, nous pouvons remplacer le potentiel



Page de titre

Sommaire



Page 214 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

$W(x)$ par le potentiel $V(x)$ représenté sur la figure 2.

Le problème se ramène donc à l'étude d'une particule unique, de masse m , mobile dans le potentiel $V(x)$ défini par :

$$V(x) = \begin{cases} 0 & -b - \frac{a}{2} < x < -b + \frac{a}{2} \\ V_0 & -b + \frac{a}{2} < x < b - \frac{a}{2} \\ 0 & b - \frac{a}{2} < x < b + \frac{a}{2} \\ \infty & \text{ailleurs} \end{cases}$$

On s'intéresse au cas où $E < V_0$.

1. Calculs préliminaires

a. Montrer que lorsque le potentiel $V(x)$ est pair, les fonctions d'onde se classent en fonctions symétriques ou antisymétriques.

b. Ecrire l'équation de Schrödinger dans les différentes régions.



Page de titre

Sommaire



Page 215 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

c. Montrer que les fonctions d'onde de la particule dans les trois régions sont de la forme :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \Psi_I(x) &= \pm A \sin k \left(b + \frac{a}{2} + x \right) \\ \Psi_{II}(x) &= \begin{cases} \Psi_{II}^S(x) = B \operatorname{ch}(\rho x) & : \text{ solution symétrique} \\ \Psi_{II}^A(x) = B \operatorname{sh}(\rho x) & : \text{ solution antisymétrique} \end{cases} \\ \Psi_{III}(x) &= A \sin k \left(b + \frac{a}{2} - x \right) \end{array} \right.$$

Expliciter k et ρ en fonction de E , m et V_0 .

d. En écrivant les conditions de continuité, montrer que les conditions de quantification de l'énergie sont données par les relations :

$$tgka = -\frac{k}{\rho} \coth \rho \left(b - \frac{a}{2} \right) \quad \text{pour le cas symétrique}$$

$$tgka = -\frac{k}{\rho} th \rho \left(b - \frac{a}{2} \right) \quad \text{pour le cas antisymétrique}$$

2. Quantification de l'énergie

On suppose que $E \ll V_0$ ($\rho \gg k$; $\rho^2 \approx \frac{2mV_0}{\hbar^2}$).

a. Montrer que les relations précédentes se mettent sous la forme :

$$tgka = -ka \cdot \frac{1 \pm 2e^{-\rho(2b-a)}}{\rho a}$$



Page de titre

Sommaire



Page 216 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

(+ pour le cas symétrique ; - pour le cas antisymétrique)

On posera $\alpha_S = \frac{1 + 2e^{-\rho(2b-a)}}{\rho a}$ et $\alpha_A = \frac{1 - 2e^{-\rho(2b-a)}}{\rho a}$

b. Résoudre graphiquement les équations :

$$tg(ka) = -\alpha_S ka \quad \text{et} \quad tg(ka) = \alpha_A ka$$

c. Montrer que les solutions donnant les énergies des deux niveaux les plus bas sont données par les relations :

$$k^S = \frac{\pi}{(1 + \alpha_S)a} \quad ; \quad k^A = \frac{\pi}{(1 + \alpha_A)a}$$

avec α_S et α_A très inférieures à 1.

d. En déduire les énergies E^A et E^S des niveaux les plus bas.

3. Application : le MASER à Ammoniac

a. Calculer la différence d'énergie $E^A - E^S$ et montrer qu'elle peut s'écrire sous la forme :

$$E^A - E^S = \frac{4\pi^2 \hbar^2}{ma^2} \frac{e^{-\rho(2b-a)}}{\rho a}$$

b. Calculer la fréquence ν de l'onde électromagnétique correspondant à la transition entre ces deux niveaux.



Page de titre

Sommaire



Page 217 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

c. Evaluer la fréquence ν et la longueur d'onde λ correspondantes lorsque :

$$E^A - E^S = 0,98 \times 10^{-4} \text{ eV}$$

EP 3.10 Etats liés d'une particule dans un puits delta

On considère une particule en mouvement dans le puits de potentiel en fonction delta :

$$V(x) = -\alpha\delta(x)$$

où α est une constante positive dont on donnera les dimensions

1 - a - Ecrire l'équation de Schrödinger et l'intégrer entre $x = -\varepsilon$ et $x = +\varepsilon$.

b - En faisant tendre ε vers zéro, montrer que la dérivée de la fonction d'onde $\varphi(x)$ subit en $x = 0$ une discontinuité telle que :

$$\varphi'(\varepsilon) - \varphi'(-\varepsilon) = -\frac{2m}{\hbar^2}\alpha\varphi(0)$$

2 - On se place dans le cas où l'énergie de la particule est négative (état lié).

a - Montrer que $\varphi(x)$ peut s'écrire :

$$\varphi(x) = A_1 e^{\rho x} + A_1' e^{-\rho x} \quad \text{pour } x < 0$$

$$\varphi(x) = A_2 e^{\rho x} + A_2' e^{-\rho x} \quad \text{pour } x > 0$$



Page de titre

Sommaire



Page 218 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

où ρ est une constante que l'on exprimera en fonction de E et m .

b - En utilisant les résultats de la question précédente, calculer la matrice M définie par :

$$\begin{pmatrix} A_2 \\ A_2' \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} A_1 \\ A_1' \end{pmatrix}$$

c - Ecrire alors que $\varphi(x)$ est de carré sommable et en déduire les valeurs possibles de l'énergie. Calculer les fonctions d'onde normées correspondantes.

d - Représenter graphiquement ces fonctions d'onde et donner un ordre de grandeur de leur largeur Δx .

3 - a - Montrer que la probabilité dP pour qu'une mesure de l'impulsion dans un des états stationnaires normés calculés précédemment, donne un résultat compris entre p et $p + dp$ est :

$$dP = \frac{2}{\pi \hbar} \frac{\rho^3}{(\rho^2 + p^2/\hbar^2)^2} dp$$

On rappelle que $dP = \left| \tilde{\Psi}(p) \right|^2 dp$ où $\tilde{\Psi}(p)$ est la transformée de Fourier de $\Psi(x)$.

b - Pour quelle valeur de p cette probabilité est-elle maximale ? Dans quel domaine de dimension p prend-elle des valeurs appréciables ?

Donner alors un ordre de grandeur du produit $\Delta x \Delta p$.

EP 3.11 Puits composés de plusieurs fonctions delta



Page de titre

Sommaire



Page 219 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

1. Puits double

On considère une particule en mouvement dans un potentiel $V(x)$ décrit par :

$$V(x) = -a\delta(x - x_0) - a\delta(x - x_1) \quad \text{avec } x_1 > x_0$$

Ces deux puits définissent trois régions où les fonctions d'onde sont caractérisées par les coefficients (A_0, B_0) , (A_1, B_1) et (A_2, B_2) pour respectivement $x < x_0$, $x_0 < x < x_1$ et $x > x_1$.

a. En utilisant les résultats de EP3.10, montrer qu'on peut écrire :

$$\begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} = M_2 \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix}$$

où M_2 est une matrice de passage qu'on explicitera.

b. En déduire que l'énergie des états liés est donnée par l'équation de quantification :

$$\exp(-\rho\ell) = \pm(1 - \frac{2\rho}{\lambda})$$

où $\ell = x - x_0$, $\rho^2 = \frac{-2mE}{\hbar^2}$ et λ une constante qu'on explicitera.

c. Résoudre graphiquement l'équation de quantification et montrer qu'il peut exister un ou deux états liés.


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 220 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

Quelle est la valeur critique de ℓ ?

2. Puits triple :

L'énergie potentielle de la particule est dans ce cas :

$$V(x) = -a\delta(x - x_0) - a\delta(x - x_1) - a\delta(x - x_2)$$

Et on pose :

$$\ell_1 = x_1 - x_0 > 0$$

$$\ell_2 = x_2 - x_1 > 0$$

a. Ecrire la matrice de passage M_3 reliant les coefficients de la fonction d'onde de la région $x > x_2$ à ceux de la fonction d'onde de la région $x < x_0$, soit :

$$\begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix} = M_3 \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix}$$

b. Ecrire l'équation de quantification de l'énergie et en déduire le nombre maximal d'états liés.

3. Peigne de Dirac



Page de titre

Sommaire



Page 221 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

La particule se déplace dans ce cas dans un potentiel composé de plusieurs fonctions de Dirac et décrit par l'expression :

$$V(x) = -a \sum_{i=1}^{i=n} \delta(x - x_i)$$

En utilisant le formalisme des matrices de passage décrit précédemment, déterminer l'équation donnant les niveaux d'énergie des états liés de la particule.

EP 3.12 : Potentiel de Kronig-Penney

Le potentiel de Kronig-Penney est formé d'une succession périodique de barrières de potentiels rectangulaires de largeurs b séparées les une des autres par une distance c . La période de ce potentiel est $a = b + c$. Ce potentiel constitue une approximation simple pour décrire le spectre d'énergie d'une particule se déplaçant dans un potentiel périodique quelconque. On l'utilise en particulier pour mettre en évidence l'existence des bandes d'énergie permises et interdites pour les électrons dans les solides où le potentiel périodique résulte de l'interaction coulombienne existant entre l'électron en mouvement et les atomes du réseau cristallin.

Ce potentiel est représenté sur la figure ci-dessous et est défini par :

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{pour } n(b+c) < x < (b+c) + c \\ V_0 & \text{pour } n(b+c) + c < x < (n+1)(b+c) \end{cases}$$



Page de titre

Sommaire



Page 222 de 978

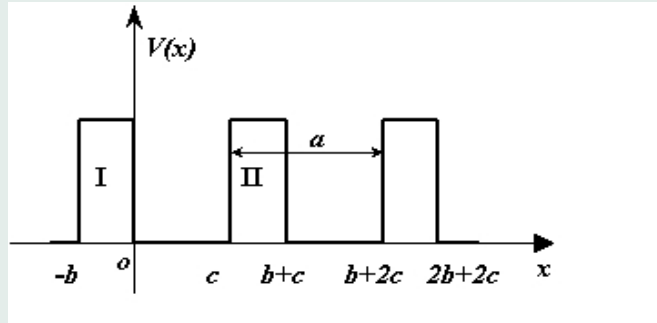
Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

où V_0 est positif et n un entier positif, négatif ou nul.



1. Montrer que lorsqu'une particule se déplace dans un potentiel périodique vérifiant la condition :

$$V(x) = V(x + a)$$

La fonction d'onde $\Psi(x)$ de cette particule vérifie la condition :

$$\Psi(x + a) = \exp(ikx)\Psi(x)$$

où k est un nombre réel ayant la dimension d'un nombre d'onde.

2. Montrer que cette périodicité de la fonction d'onde autorise à ne considérer pour l'étude du problème qu'une seule période ; par exemple $[-b, c]$.



Page de titre

Sommaire



Page 223 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

3. Ecrire l'équation de Schrödinger dans les régions I et II pour un électron de masse m se déplaçant dans le solide avec une énergie E telle que $E > V_0$.

En déduire les fonctions d'onde de l'électron dans ces régions.

On posera :

$$k_1^2 = \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} \quad \text{et} \quad k_2^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

4. Ecrire les conditions de continuité en $x = 0$ et $x = c$ pour la fonction d'onde et sa dérivée et montrer que la résolution du système obtenu conduit à la condition de quantification suivante :

$$\cos(ka) = \cos(k_1b) \cos(k_2c) - \frac{k_1^2 + k_2^2}{2k_1k_2} \sin(k_1b) \sin(k_2c)$$

où k peut être interprété comme un nombre d'onde effectif associé au mouvement de l'électron à l'intérieur du solide.

Que devient la condition de quantification lorsque l'énergie E de l'électron est inférieure à V_0 ($0 < E \leq V_0$).

5. Les deux conditions de quantification précédentes ($E > V_0$ et $0 < E \leq V_0$) constituent selon la valeur de E considérée, la relation de dispersion entre k et E .

Montrer que cette relation prédit l'existence de régions permises et de régions interdites pour l'électron.

Vérifier que si l'énergie potentielle de l'électron est partout nulle, on retrouve la relation $E = f(k)$ caractéristique de l'électron libre.



Page de titre

Sommaire



Page 224 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

6. On se place maintenant dans l'hypothèse où les inégalités suivantes sont satisfaites :

$$qb \ll 1 \text{ (avec } iq = k_1), E \ll V_0, c \ll b$$

Montrer que la condition de quantification se réduit à la forme suivante :

$$\cos(ka) = P \frac{\sin(k_2 a)}{(k_2 a)} + \cos(k_2 a)$$

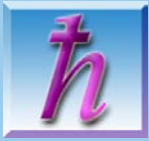
Expliciter le terme P .

7. Représenter graphiquement pour $P = \frac{3\pi}{2}$ l'évolution en fonction de a du deuxième membre de la relation précédente. En déduire l'existence de bandes d'énergie alternativement permises et interdites.

Combien d'états électroniques peut contenir chacune des bandes permises.

Que devient le spectre d'énergie lorsque P tend vers l'infini.

Evaluer pour $a = 3\text{\AA}$, la largeur énergétique de la première bande permise et de la bande interdite qui la suit.



Page de titre

Sommaire



Page 225 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Chapitre 4

Bases mathématiques de la mécanique quantique

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 226 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

Dans les chapitres précédents, nous avons montré l'existence de la dualité onde-corpuscule, aussi bien pour le rayonnement que pour les particules. Pour ces dernières nous avons pu dégager quatre exigences essentielles :

- L'existence d'une fonction d'onde dont le carré de l'amplitude représente la probabilité de présence de la particule en chaque point de l'espace.
- L'existence d'une sorte de "Principe fondamental de la mécanique quantique" qui est l'équation de Schrödinger dont les solutions sont justement les fonctions d'onde de la particule.
- L'existence d'une incertitude sur la mesure des grandeurs physiques qui est régie par le principe d'incertitude de Heisenberg.
- Enfin la quantification d'un certain nombre de grandeurs physiques telles que l'énergie, dont le spectre peut être discret.

Ces considérations montrent l'importance jouée par la fonction d'onde en physique quantique et il est donc nécessaire d'étudier les propriétés mathématiques de l'espace des fonctions d'onde et des opérateurs agissant sur ces fonctions à l'intérieur de cet espace.

Toutefois, nous ne prétendons pas présenter ici un formalisme mathématique complet et rigoureux, mais regrouper les diverses notions utiles en mécanique quantique telles que la notion de représentations, la notation de Dirac et l'algèbre des opérateurs.

Pour simplifier davantage le formalisme on se limitera à un espace à une dimension, les résultats obtenus se généraliseront aisément dans $\mathbb{R}^3$.



Page de titre

Sommaire



Page 227 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

1. Espace ξ des fonctions d'onde d'une particule

L'espace des fonctions d'onde d'une particule est un espace de fonctions de carrés sommables car nous avons vu que $\int |\psi|^2 d^3r$ est toujours une quantité finie et égale à l'unité puisqu'elle représente la probabilité totale de trouver la particule dans l'espace. Cet espace qu'on note $\mathcal{L}^2$ est un espace de Hilbert et est de dimension infinie, car une fonction est déterminée par une infinité de coordonnées qui sont les valeurs prises par cette fonction pour les diverses valeurs de la variable. Toutefois, d'un point de vue physique $\mathcal{L}^2$ est trop vaste car les fonctions d'onde doivent être non seulement partout définies, continues et indéfiniment dérivables mais surtout à support borné pour que la particule se trouve dans une région finie de l'espace. On se limitera donc à l'espace ξ qui contient de pareilles fonctions et qui est un sous-espace de l'espace $\mathcal{L}^2$ de Hilbert.

1.1. Structure de ξ

1.1.1. Définition :

ξ est un espace vectoriel formé des fonctions de carré sommable. Ainsi si les fonctions $\Psi_1(x)$ et $\Psi_2(x)$ appartiennent à ξ et si λ_1 et λ_2 sont deux


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 228 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

nombre complexes quelconques alors la fonction $\Psi(x)$ donnée par :

$$\Psi(x) = \lambda_1 \Psi_1(x) + \lambda_2 \Psi_2(x) \quad (4.1)$$

appartient également à ξ .

Pour le montrer, il suffit de développer $|\Psi(x)|^2$:

$$|\Psi(x)|^2 = |\lambda_1|^2 |\Psi_1(x)|^2 + |\lambda_2|^2 |\Psi_2(x)|^2 + \lambda_1^* \lambda_2 \Psi_1^*(x) \Psi_2(x) + \lambda_1 \lambda_2^* \Psi_1(x) \Psi_2^*(x) \quad (4.2)$$

Comme, d'après l'inégalité de Schwarz on a :

$$\left| \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_1 \Psi_2 dx \right| \leq \sqrt{\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi_1|^2 dx} \sqrt{\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi_2|^2 dx} \quad (4.3)$$

alors $\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x)|^2 dx$ qui est inférieure à une intégrale convergente, est elle même convergente et $\Psi(x)$ est une fonction de carré sommable et appartient à ξ .

1.1.2. Produit scalaire

On définit le produit scalaire dans ξ d'une fonction $\phi(x)$ par une fonction $\Psi(x)$ par le nombre complexe noté $\langle \phi | \psi \rangle$ et valant :

$$\langle \phi | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi^*(x) \psi(x) dx \quad (4.4)$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 229 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

Les propriétés de ce produit scalaire sont :

$$\langle \phi | \psi \rangle = \langle \psi | \phi \rangle \quad (4.5)$$

$$\langle \phi | \lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2 \rangle = \lambda_1 \langle \phi | \psi_1 \rangle + \lambda_2 \langle \phi | \psi_2 \rangle \quad (4.6)$$

$$\langle \lambda_1 \phi_1 + \lambda_2 \phi_2 | \psi \rangle = \lambda_1^* \langle \phi_1 | \psi \rangle + \lambda_2^* \langle \phi_2 | \psi \rangle \quad (4.7)$$

$$\langle \phi | \psi \rangle = 0 \quad (4.8)$$

Cette dernière relation implique que les deux fonctions ϕ et ψ sont orthogonales.

$\langle \psi | \psi \rangle$ est un réel positif qui est nul si et seulement si $\psi = 0$, sa racine positive $\sqrt{\langle \psi | \psi \rangle}$ est appelée norme de ψ .

1.2. Base orthonormée complète discrète de ξ

1.2.1. Définition

Soit un ensemble dénombrable de fonctions de carré sommable $\{u_i(x)\}$ ($i = 1, 2, \dots, n, \dots$).

- Cet ensemble est orthonormé si :

$$\langle u_i | u_j \rangle = \int u_i^*(x) u_j(x) dx = \delta_{ij} \quad (4.9)$$

où δ_{ij} est le symbole de Kronecker.


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 230 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

- Il est complet si toute fonction $\psi(x)$ peut être développée d'une façon unique suivant les $u_i(x)$:

$$\psi(x) = \sum_i c_i u_i(x) \quad (4.10)$$

Les coefficients c_i sont appelés composantes de $\psi(x)$ sur les $u_i(x)$.

Les fonctions $u_i(x)$ satisfaisant les conditions (4.9) et (4.10) forment alors une **base orthonormée complète discrète**.

1.2.2. Composantes de $\Psi(x)$

On a d'après (4.4), (4.9) et (4.10) :

$$\langle u_j | \psi \rangle = \int u_j^*(x) \psi(x) dx = \sum_i c_i \langle u_j(x) | u_i(x) \rangle = \sum_i c_i \delta_{ij} = c_j \quad (4.11)$$

La composante c_i de $\psi(x)$ sur les fonctions $u_i(x)$ est donc égale au produit scalaire de $\psi(x)$ par $u_i(x)$ soit :

$$c_i = \langle u_i | \psi \rangle = \int u_i^*(x) \psi(x) dx \quad (4.12)$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 231 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

1.2.3. Expression du produit scalaire et de la norme

Soient $\Psi(x)$ et $\Phi(x)$ deux fonctions dont les développements s'écrivent :

$$\Psi(x) = \sum_i c_i u_i(x) \quad (4.13)$$

$$\Phi(x) = \sum_j b_j u_j(x) \quad (4.14)$$

Le produit scalaire $\langle \Phi | \Psi \rangle$ s'écrit alors :

$$\begin{aligned} \langle \Phi | \Psi \rangle &= \sum_i \sum_j b_j^* c_i \int u_j^*(x) u_i(x) dx \\ &= \sum_i \sum_j b_j^* c_i \delta_{ij} = \sum_i b_i^* c_i \end{aligned} \quad (4.15)$$

soit :

$$\langle \Phi | \Psi \rangle = \sum_i b_i^* c_i \quad (4.16)$$

Ce qui donne pour le carré de la norme de la fonction $\Psi(x)$:

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \sum_i |c_i|^2 \quad (4.17)$$



Page de titre

Sommaire



Page 232 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

1.2.4. Relation de fermeture

On a :

$$\Psi(x) = \sum_i c_i u_i(x) = \sum_i \langle u_i | \Psi \rangle u_i(x) = \sum_i \left[\int u_i^*(x') \Psi(x') dx' \right] u_i(x) \quad (4.18)$$

En admettant qu'on peut intervertir $\sum_i$ et $\int dx'$, il vient :

$$\Psi(x) = \int \left[\sum_i u_i(x) u_i^*(x') \right] \Psi(x') dx' = \int F(x, x') \Psi(x') dx' \quad (4.19)$$

Cette écriture de $\Psi(x)$ est caractéristique de la fonction de Dirac $\delta(x - x')$ (cf. EP4.17) :

$$\Psi(x) = \int \delta(x - x') \Psi(x') dx' \quad (4.20)$$

$\Psi(x)$ étant quelconque, on en déduit alors :

$$\sum_i u_i(\mathbf{x}) u_i^*(\mathbf{x}') = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (4.21)$$

La relation (4.21) est appelée **relation de fermeture**. Elle traduit mathématiquement le caractère complet du système $\{u_i\}$ qui constitue une base orthonormée complète.



Page de titre

Sommaire



Page 233 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

1.3. Base orthonormée complète continue de ξ

1.3.1. Définition

Une base orthonormée complète continue est constituée d'un ensemble de fonctions $v_\alpha(x)$ repérées par un indice α variant de façon continue et satisfaisant aux deux relations suivantes :

$$\int v_\alpha^*(\mathbf{x}) v_\beta(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \delta(\alpha - \beta) : \text{Relation d'orthogonalité} \quad (4.22)$$

$$\int v_\alpha(\mathbf{x}) v_\alpha^*(\mathbf{x}') d\alpha = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') : \text{Relation de fermeture} \quad (4.23)$$

On remarque que pour $\beta = \alpha$, la fonction $v_\alpha(x)$ n'est pas de carré sommable et n'appartient donc pas à ξ . Elle peut néanmoins servir de base pour les vecteurs de ξ .

1.3.2. Composantes de $\Psi(x)$

Considérons le produit scalaire $c_\alpha = \langle v_\alpha | \psi \rangle$, il vaut d'après (4.4) :

$$c_\alpha = \langle v_\alpha | \psi \rangle = \int v_\alpha^*(x) \Psi(x) dx \quad (4.24)$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 234 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

Calculons l'intégrale :

$$\int d\alpha c_{\alpha} v_{\alpha}(x) = \int d\alpha \int dx' v_{\alpha}^{*}(x') \Psi(x') v_{\alpha}(x) \quad (4.25)$$

En admettant qu'il est possible d'invertir l'ordre d'intégration il vient :

$$\int d\alpha c_{\alpha} v_{\alpha}(x) = \int dx' \int [d\alpha v_{\alpha}^{*}(x') v_{\alpha}(x)] \Psi(x') = \int dx' \delta(x - x') \Psi(x') \quad (4.26)$$

Comme : $\int dx' \delta(x - x') \Psi(x') = \Psi(x)$ on a alors

$$\Psi(\mathbf{x}) = \int d\alpha \mathbf{c}_{\alpha} \mathbf{v}_{\alpha}(\mathbf{x}) \quad (4.27)$$

c_{α} apparaît donc comme la composante de $\Psi(x)$ sur $v_{\alpha}(x)$, ce qui généralise le résultat obtenu pour la base discrète et on a :

$$\mathbf{c}_{\alpha} = \langle \mathbf{v}_{\alpha} | \Psi \rangle \quad (4.28)$$



Page de titre

Sommaire



Page 235 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

1.3.3. Expression du produit scalaire et de la norme

Soient deux fonctions $\Psi(x)$ et $\Phi(x)$ dont les développements sont :

$$\Psi(x) = \int d\alpha c_\alpha v_\alpha(x) \quad (4.29)$$

$$\Phi(x) = \int d\alpha' b_{\alpha'} v_{\alpha'}(x) \quad (4.30)$$

Le produit scalaire s'écrit :

$$\langle \Phi | \Psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi^*(x) \Psi(x) dx = \iiint d\alpha' d\alpha dx b_{\alpha'}^* c_\alpha v_{\alpha'}^*(x) v_\alpha(x) \quad (4.31)$$

En admettant qu'on peut intervertir l'ordre d'intégration, il vient :

$$\begin{aligned} \langle \Phi | \Psi \rangle &= \iint d\alpha' d\alpha b_{\alpha'}^* c_\alpha \int v_{\alpha'}^*(x) v_\alpha(x) dx \\ &= \iint d\alpha' d\alpha b_{\alpha'}^* c_\alpha \delta(\alpha - \alpha') \\ &= \int d\alpha b_\alpha^* c_\alpha \end{aligned} \quad (4.32)$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 236 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

soit :

$$\langle \Phi | \Psi \rangle = \int d\alpha \mathbf{b}_\alpha^* \mathbf{c}_\alpha \quad (4.33)$$

et on obtient pour le carré de la norme de la fonction $\Psi(x)$:

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \int d\alpha |\mathbf{c}_\alpha|^2 \quad (4.34)$$

On remarque que toutes les formules relatives à la base discrète se généralisent par les règles de correspondance suivantes :

$$\begin{aligned} i &\longleftrightarrow \alpha \\ \sum_i &\longleftrightarrow \int d\alpha \\ \delta_{ij} &\longleftrightarrow \delta(\alpha - \alpha') \end{aligned}$$

1.3.4. Exemples de fonctions $\mathbf{v}_\alpha(\mathbf{x})$

1.3.4.1. Les fonctions delta :

C'est l'ensemble des fonctions localisées aux différents points x_0 :

$$v_{x_0}(x) = \delta(x - x_0) \quad (4.35)$$



Page de titre

Sommaire



Page 237 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

x_0 est une abscisse qui joue le rôle de α et qui varie de $-\infty$ à $+\infty$.

Les $v_{x_0}(x)$ vérifient les relations d'orthogonalité et de fermeture, on a en effet :

$$\int dx v_{x_0}^*(x) v_{x'_0}(x) = \int \delta(x - x_0) \delta(x - x'_0) dx = \delta(x_0 - x'_0) \quad (4.36)$$

$$\int dx_0 v_{x_0}(x) v_{x'_0}^*(x) = \int \delta(x - x_0) \delta(x' - x_0) dx_0 = \delta(x - x') \quad (4.37)$$

Les $v_{x_0}(x)$ forment donc une base orthonormée complète continue et toute fonction $\Psi(x)$ se développe de façon unique suivant les $v_{x_0}(x)$:

$$\Psi(x) = \int dx_0 c_{x_0} v_{x_0}(x) \quad (4.38)$$

avec :

$$c_{x_0} = \langle v_{x_0}(x) | \Psi(x) \rangle = \int \delta(x - x_0) \Psi(x) dx = \Psi(x_0) \quad (4.39)$$

de sorte que :

$$\Psi(x) = \int \Psi(x_0) \delta(x - x_0) dx_0 \quad (4.40)$$

C'est un résultat bien connu (cf. EP4.17) qui exprime que toute fonction $\Psi(x)$ peut être considérée comme une superposition linéaire de fonctions $\delta(x - x_0)$,



Page de titre

Sommaire



Page 238 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

centrées aux divers points x_0 , le coefficient multipliant la fonction $\delta(x - x_0)$ centrée au point x_0 étant la valeur de $\psi(x)$ en x_0 .

On écrit souvent pour alléger le formalisme :

$$\Psi(x) = \langle x | \Psi \rangle \quad (4.41)$$

C'est la représentation $\{\mathbf{x}\}$.

1.3.4.2. Les ondes planes :

C'est l'ensemble des fonctions définies par.

$$v_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar} \quad (4.42)$$

p est une composante de l'impulsion qui joue le rôle de α et qui varie de $-\infty$ à $+\infty$.

Les $v_p(x)$ vérifient les relations d'orthogonalité et de fermeture. on a en effet :

$$\begin{aligned} \int dx v_p^*(x) v_{p'}(x) &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int e^{i(p'-p)x/\hbar} dx = \frac{1}{2\pi} \int e^{i(p'-p)u} du \\ &= \delta(p - p') \end{aligned} \quad (4.43)$$

$$\begin{aligned} \int dp v_p(x) v_p^*(x') &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int e^{i(x-x')p/\hbar} dp = \frac{1}{2\pi} \int e^{i(x-x')k} dk \\ &= \delta(x - x') \end{aligned} \quad (4.44)$$



Page de titre

Sommaire



Page 239 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

où $u = \frac{x}{\hbar}$ et $k = \frac{p}{\hbar}$; le résultat des intégrales découlant des transformées de Fourier des fonctions de Dirac.

Les $v_p(x)$ forment donc une base orthonormée complète continue et toute fonction $\Psi(x)$ se développe de façon unique suivant les $v_p(x)$:

$$\Psi(x) = \int dp c_p v_p(x) \quad (4.45)$$

avec :

$$c_p = \langle v_p | \Psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int e^{-ipx/\hbar} \Psi(x) dx = \bar{\Psi}(p) \quad (4.46)$$

$\bar{\Psi}(p)$ n'est autre que la transformée de Fourier de $\Psi(x)$, de sorte qu'on a :

$$\Psi(x) = \int dp \bar{\Psi}(p) v_p(x) \quad (4.47)$$

On retrouve donc le résultat bien connu des transformées de Fourier (cf. EP2.15) : toute fonction $\Psi(x)$ peut être considérée comme une superposition linéaire d'ondes planes, le coefficient multipliant l'onde plane étant la transformée de Fourier $\bar{\Psi}(p)$ de $\Psi(x)$

On écrit souvent pour simplifier le formalisme :

$$\bar{\Psi}(p) = \langle p | \Psi \rangle \quad (4.48)$$

C'est la représentation $\{p\}$.

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 240 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

2. Notion de représentation - Notations de Dirac

2.1. Définition

Choisir une représentation c'est se donner une base orthonormée complète (discrète ou continue) suivant laquelle se décompose chaque fonction de ξ .

Ainsi une même fonction peut être représentée par plusieurs ensembles de coordonnées $(C_i, \Psi(x_0), \bar{\Psi}(p); \dots)$. Pour s'affranchir de la base on peut, comme en géométrie euclidienne, représenter l'état quantique de la particule par un vecteur appartenant à un espace vectoriel qu'on appelle espace des états de la particule et qu'on peut confondre avec ξ .

On notera $|\Psi\rangle$ ce vecteur et on l'appellera vecteur "ket" : C'est la notation de Dirac dont on verra la commodité tout au long de ce cours.

2.2. Vecteurs "kets" et vecteurs "bras"

On représente le vecteur ket $|\Psi\rangle$ dans une base donnée en rangeant ses coordonnées verticalement sous la forme d'une matrice à une colonne et à



Page de titre

Sommaire



Page 241 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

plusieurs lignes :

$$|\Psi\rangle = \begin{vmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_i \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \Psi(x) \\ \Psi(x') \\ \vdots \\ \Psi(x^i) \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \bar{\Psi}(p) \\ \bar{\Psi}(p') \\ \vdots \\ \bar{\Psi}(p^i) \end{vmatrix} \quad (4.49)$$

A chaque vecteur ket $|\Psi\rangle$ on associe un nouvel être noté $\langle\Psi|$ qu'on appelle vecteur bra. Ses coordonnées dans une représentation donnée sont les complexes conjugués des coordonnées de $|\Psi\rangle$ dans la même représentation : On les range horizontalement sous forme d'une matrice à une ligne et à plusieurs colonnes.

$$\begin{aligned} \langle\Psi| &= |c_1^* \ c_2^* \ \dots \ c_i^* \dots| = |\dots \Psi^*(x) \ \dots \Psi^*(x') \ \dots \Psi^*(x_i)| \\ &= |\dots \bar{\Psi}^*(p) \ \dots \bar{\Psi}^*(p') \ \dots \bar{\Psi}^*(p_i) \dots| \end{aligned} \quad (4.50)$$

L'ensemble des vecteurs bras constitue un espace qu'on note ξ^* et qu'on appelle **espace dual** de ξ .

2.3. Correspondance entre ket et bra

A tout ket correspond un bra et la correspondance est antilinéaire :

$$|\Psi\rangle = \lambda_1 |\Psi_1\rangle + \lambda_2 |\Psi_2\rangle \implies \langle\Psi| = \lambda_1^* \langle\Psi_1| + \lambda_2^* \langle\Psi_2| \quad (4.51)$$

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 242 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

Comme $|\lambda\Psi\rangle = \lambda |\Psi\rangle$ alors $\langle\lambda\Psi| = \lambda^* \langle\Psi|$.

Cette correspondance est à la base des propriétés du produit scalaire défini précédemment.

A tout bra ne correspond pas nécessairement un ket, car de façon générale l'espace dual ξ^* de ξ ne lui est pas isomorphe.



Page de titre

Sommaire



Page 243 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

3. Opérateurs linéaires

3.1. Définition

Un opérateur linéaire A fait correspondre à tout ket $|\Psi\rangle$ appartenant à ξ un autre ket $|\Psi'\rangle$ appartenant à ξ . La correspondance étant linéaire :

$$|\Psi'\rangle = A |\Psi\rangle \quad (4.52)$$

$$A(\lambda_1 |\Psi_1\rangle + \lambda_2 |\Psi_2\rangle) = \lambda_1 A |\Psi_1\rangle + \lambda_2 A |\Psi_2\rangle \quad (4.53)$$

Exemples :

Opérateur X : $\Psi(x) \longrightarrow x\Psi(x)$

Opérateur P : $\Psi(x) \longrightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x)$

Opérateur π : $\Psi(x) \longrightarrow \Psi(-x)$

L'action de chacun de ces opérateurs étant définie dans la représentation $\{x\}$.



Page de titre

Sommaire



Page 244 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

3.2. Produit de deux opérateurs - Commutateur

Le produit de deux opérateurs linéaires A et B , noté AB est défini de la façon suivante :

$$(AB) |\Psi\rangle = A(B |\Psi\rangle) \quad (4.54)$$

B agit d'abord, A ensuite.

En général, le produit AB est différent du produit BA .

On définit le commutateur de A et B qu'on note $[A, B]$ par l'opérateur :

$$[A, B] = AB - BA \quad (4.55)$$

Si $[A, B] = 0$, on dit que les deux opérateurs commutent.

Exemple : Commutateur : $[X, P]$

Dans la représentation $\{x\}$ on a :

$$\begin{aligned} XP\Psi &= x \frac{\hbar}{i} \frac{d\Psi}{dx} = \frac{\hbar}{i} x \frac{d\Psi}{dx} \\ PX\Psi &= \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} (x\Psi) = \frac{\hbar}{i} x \frac{d\Psi}{dx} + \frac{\hbar}{i} \Psi \\ (XP - PX)\Psi &= -\frac{\hbar}{i} \Psi = i\hbar\Psi \end{aligned} \quad (4.56)$$



Page de titre

Sommaire



Page 245 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Ψ étant quelconque, on aura :

$$[\mathbf{X}, \mathbf{P}] = i\hbar \quad (4.57)$$

3.3. Représentation d'un opérateur par une matrice

On appelle éléments de matrice de l'opérateur A dans la base orthonormée complète discrète $\{u_i\}$ les nombres complexes A_{ij} tels que :

$$A_{ij} = \langle u_i | A | u_j \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} u_i^*(x) [A u_j(x)] dx \quad (4.58)$$

Si on connaît les coordonnées c_i de $|\Psi\rangle$, on peut en déduire les coordonnées c'_i de $|\Psi'\rangle = A |\Psi\rangle$.

En effet on a :

$$|\Psi\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle$$

$$|\Psi'\rangle = \sum_i c'_i |u_i\rangle \quad (4.59)$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 246 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

et

$$c'_j = \langle u_j | \Psi' \rangle = \langle u_j | \sum_i c_i A | u_i \rangle \quad (4.60)$$

$$= \sum_i \langle u_j | A | u_i \rangle c_i = \sum_i A_{ji} c_i$$

soit :

$$c'_i = \sum_j A_{ij} c_j \quad (4.61)$$

L'équation $|\Psi'\rangle = A |\Psi\rangle$ s'écrit donc sous la forme matricielle suivante :

$$\begin{pmatrix} c'_1 \\ c'_2 \\ \vdots \\ c'_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1j} \\ A_{21} & A_{22} & \dots & A_{2j} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ A_{i1} & A_{i2} & \dots & A_{ij} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_i \end{pmatrix} \quad (4.62)$$

Le même formalisme peut se concevoir dans la base continue $\{v_\alpha\}$; on aura en effet :

$$A_{\alpha\alpha'} = \langle v_\alpha | A | v_{\alpha'} \rangle \text{ et } c_{\alpha'} = \int d\alpha' A_{\alpha\alpha'} c_{\alpha'} \quad (4.63)$$



Page de titre

Sommaire

◀

▶

◀

▶

Page 247 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

On définit également l'élément de matrice de A entre $\langle \Phi |$ et $|\Psi\rangle$, c'est le scalaire :

$$\langle \Phi | A | \Psi \rangle = \sum_i \sum_j b_i^* A_{ij} c_j \quad (4.64)$$

On aura de même pour la base continue $\{v_\alpha\}$:

$$\langle \Phi | A | \Psi \rangle = \iint d\alpha d\alpha' b_\alpha^* A_{\alpha\alpha'} c_{\alpha'} \quad (4.65)$$

3.4. Exemple d'opérateur linéaire : Le projecteur

On appelle projecteur sur l'état normé $|\Psi\rangle$ l'opérateur P_Ψ défini par :

$$P_\Psi = |\Psi\rangle \langle \Psi| \quad (4.66)$$

P_Ψ est bien un opérateur, car dans une base donnée, il est représenté par une matrice. On a en effet dans la base $\{u_i\}$:

$$P_\Psi = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1^* & c_2^* & \cdots & c_i^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_1 c_1^* & c_1 c_2^* & \cdots & c_1 c_i^* & \cdots \\ c_2 c_1^* & c_2 c_2^* & \cdots & c_2 c_i^* & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ c_i c_1^* & c_i c_2^* & \cdots & \cdots & c_i c_i^* \end{pmatrix} \quad (4.67)$$



Page de titre

Sommaire



Page 248 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Faisons agir P_Ψ sur un ket $|\Phi\rangle$ quelconque, on a :

$$P_\Psi |\Phi\rangle = |\Psi\rangle \langle \Psi | \Phi \rangle = \lambda |\Psi\rangle \quad \text{avec} \quad \lambda = \langle \Psi | \Phi \rangle \quad (4.68)$$

L'interprétation géométrique de P_Ψ est donc la suivante :

P_Ψ agissant sur un ket $|\Phi\rangle$ donne un ket proportionnel à $|\Psi\rangle$, le coefficient de proportionnalité étant le produit scalaire $\langle \Psi | \Phi \rangle$ c'est à dire la projection de $|\Phi\rangle$ sur $|\Psi\rangle$: P_Ψ est donc l'opérateur projection orthogonale sur le ket $|\Psi\rangle$.

On a aussi :

$$(P_\Psi)^2 = P_\Psi P_\Psi = |\Psi\rangle \langle \Psi | \Psi \rangle \langle \Psi | = |\Psi\rangle \langle \Psi | = P_\Psi \quad (4.69)$$

Projeter deux fois de suite sur un vecteur donné est équivalent à projeter une seule fois.

3.5. Relation de fermeture

Considérons dans la base orthonormée complète discrète $\{u_i\}$, l'opérateur $P_{\{u_i\}}$ défini par :

$$P_{\{u_i\}} = \sum_i |u_i\rangle \langle u_i| \quad (4.70)$$

Faisons agir cet opérateur sur un ket $|\Psi\rangle$, on obtient :

$$P_{\{u_i\}} |\Psi\rangle = \sum_i |u_i\rangle \langle u_i | \Psi \rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle = |\Psi\rangle \quad (4.71)$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 249 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

On a donc quelque soit $|\Psi\rangle$:

$$P_{\{u_i\}} = \sum_i |u_i\rangle \langle u_i| = 1 \quad (4.72)$$

La même démarche conduite dans une base orthonormée complète continue $\{v_\alpha\}$ donne :

$$P_{\{v_\alpha\}} = \int d\alpha |v_\alpha\rangle \langle v_\alpha| = 1 \quad (4.73)$$

Les relations (4.70) et (4.71) sont connues sous le nom de “Relations de Fermeture” ou de “UN de Dirac”.

L'interprétation géométrique de $P_{\{u_i\}}$ est la suivante :

$P_{\{u_i\}}$ est le projecteur sur l'espace ξ' sous-tendu par les $|u_i\rangle$. Comme la base $\{|u_i\rangle\}$ est complète, ξ' n'est autre que ξ , et projeter sur ξ est équivalent à appliquer l'opérateur unité. Il en est de même pour $P_{\{v_\alpha\}}$.

3.6. Application de la relation de fermeture : changement de base

Il s'agit de déterminer les composantes d'un vecteur, les éléments de matrice d'un opérateur ou la forme de certaines expressions mathématiques dans un changement de base. Pour simplifier on considère qu'on passe d'une


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 250 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

base orthonormée discrète $\{|u_i\rangle\}$ à une base orthonormée discrète $\{|w_\ell\rangle\}$ telle que :

$$\langle u_i | w_\ell \rangle = S_{i\ell} \quad \text{et} \quad \text{donc} \quad \langle w_\ell | u_i \rangle = S_{i\ell}^*$$

Les relations de fermeture s'écrivent dans les deux bases :

$$P_{\{u_i\}} = \sum_i |u_i\rangle \langle u_i| = 1 \quad (4.74)$$

$$P_{\{w_\ell\}} = \sum_\ell |w_\ell\rangle \langle w_\ell| = 1 \quad (4.75)$$

a)- Transformation des composantes d'un vecteur :

Soit le vecteur $|\Psi\rangle$:

Dans la base $\{|u_i\rangle\}$ ses coordonnées sont : $c_i = \langle u_i | \Psi \rangle$

Dans la base $\{|w_\ell\rangle\}$ ses coordonnées sont : $b_\ell = \langle w_\ell | \Psi \rangle$



Page de titre

Sommaire



Page 251 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

On a dans la base $\{w_\ell\}$:

$$\begin{aligned}
 b_\ell &= \langle w_\ell | \Psi \rangle \\
 &= \langle w_\ell | P_{\{u_i\}} | \Psi \rangle \\
 &= \langle w_\ell | \sum_i |u_i\rangle \langle u_i | \Psi \rangle \\
 &= \sum_i \langle w_\ell | u_i \rangle \langle u_i | \Psi \rangle
 \end{aligned} \tag{4.76}$$

soit :

$$b_\ell = \sum_i S_{i\ell}^* c_i \tag{4.77}$$

b)- Transformation des éléments de matrice d'un opérateur A :

Dans la base $\{u_i\}$ les éléments de matrice de A sont : $A_{ij} = \langle u_i | A | u_j \rangle$.

Dans la base $\{w_\ell\}$ les éléments de matrice de A sont : $A_{\ell m} = \langle w_\ell | A | w_m \rangle$.



Page de titre

Sommaire



Page 252 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

On a dans la base $\{w_\ell\}$:

$$\begin{aligned}
 A_{\ell m} &= \langle w_\ell | A | w_m \rangle \\
 &= \langle w_\ell | P_{\{u_i\}} A P_{\{u_j\}} | w_m \rangle \\
 &= \sum_i \sum_j \langle w_\ell | u_i \rangle \langle u_i | A | u_j \rangle \langle u_j | w_m \rangle
 \end{aligned} \tag{4.78}$$

soit :

$$A_{\ell m} = \sum_i \sum_j S_{i\ell}^* A_{ij} S_{jm} \tag{4.79}$$

c)- Invariance de la trace d'un opérateur $\mathbf{A}$ dans un changement de base :

Dans la base $\{u_i\}$, on a :

$$(Tr A)_{\{u_i\}} = \sum_i \langle u_i | A | u_i \rangle \tag{4.80}$$

Dans la base $\{w_\ell\}$, on a

$$(Tr A)_{\{w_\ell\}} = \sum_\ell \langle w_\ell | A | w_\ell \rangle \tag{4.81}$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 253 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

En utilisant la relation de fermeture il vient :

$$\begin{aligned}
 \sum_i \langle u_i | A | u_i \rangle &= \sum_i \langle u_i | \sum_{\ell} | w_{\ell} \rangle \langle w_{\ell} | A | u_i \rangle \\
 &= \sum_i \sum_{\ell} \langle u_i | w_{\ell} \rangle \langle w_{\ell} | A | u_i \rangle \\
 &= \sum_{\ell} \sum_i \langle w_{\ell} | A | u_i \rangle \langle u_i | w_{\ell} \rangle \\
 &= \sum_{\ell} \langle w_{\ell} | A | \sum_i | u_i \rangle \langle u_i | w_{\ell} \rangle \\
 &= \sum_{\ell} \langle w_{\ell} | A | w_{\ell} \rangle
 \end{aligned} \tag{4.82}$$

soit :

$$(Tr A)_{\{u_i\}} = (Tr A)_{\{w_i\}} \tag{4.83}$$



Page de titre

Sommaire



Page 254 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

4. Opérateurs adjoints

4.1. Définitions

a)- Deux opérateurs A et A^+ sont dits adjoints si les matrices qui les représentent dans une base donnée $\{u_i\}$ sont adjointes l'une de l'autre, c'est à dire si l'on a :

$$\langle u_j | A^+ | u_i \rangle = \langle u_i | A | u_j \rangle^* \quad (4.84)$$

Cette définition se généralise pour deux kets $|\Psi\rangle$ et $|\Phi\rangle$ quelconques :

$$\langle \Phi | A^+ | \Psi \rangle = \langle \Psi | A | \Phi \rangle^* \quad (4.85)$$

b)- Une autre définition de l'opérateur A^+ adjoint de A est :

$$|\Psi'\rangle = A |\Psi\rangle \iff \langle \Psi' | = \langle \Psi | A^+ \quad (4.86)$$

En effet :

$$\langle u_i | \Psi \rangle = \sum_j \langle u_i | A | u_j \rangle \langle u_j | \Psi \rangle \quad (4.87)$$

En prenant l'expression conjuguée de $\langle u_i | \Psi \rangle$ il vient :

$$\langle \Psi' | u_i \rangle = \sum_j \langle \Psi | u_j \rangle \langle u_j | A^+ | u_i \rangle = \langle \Psi | A^+ | u_i \rangle \quad (4.88)$$



Page de titre

Sommaire



Page 255 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

$|u_i\rangle$ étant quelconque on a alors : $\langle \Psi| = \langle \Psi| A^+$ ce qui revient à écrire :

$$\langle A\Psi| = \langle \Psi| A^+ \quad (4.89)$$

4.2. Propriétés

En utilisant les définitions précédentes on montre aisément que :

$$(A^+)^+ = A \quad (4.90)$$

$$(A + B)^+ = A^+ + B^+ \quad (4.91)$$

$$(\lambda A)^+ = \lambda^* A^+ \quad (4.92)$$

$$(AB)^+ = B^+ A^+ \quad (4.93)$$

Cette dernière propriété se démontre en écrivant que $|\Psi'\rangle = AB|\Psi\rangle$ et en posant $|\Phi\rangle = B|\Psi\rangle$ il vient alors :

$|\Psi'\rangle = A|\Phi\rangle$ ce qui implique que $\langle \Psi'| = \langle \phi| A^+$
soit :

$$\langle \Psi'| = \langle \Psi| B^+ A^+ = \langle \Psi| (AB)^+ \quad (4.94)$$

4.3. Règles de conjugaison

Pour obtenir l'expression conjuguée d'une expression donnée il faut :

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 256 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

- Renverser l'ordre des termes.
- Remplacer ket par bra et réciproquement.
- Prendre le complexe conjugué des constantes.
- Remplacer les opérateurs par leurs adjoints.

Ainsi par exemple, l'expression conjuguée de $\lambda AB |\Psi\rangle$ est $\lambda^* \langle \Psi| B^+ A^+$.



Page de titre

Sommaire



Page 257 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

5. Opérateurs hermitiques

5.1. Définitions

Un opérateur A est hermitique s'il est égal à son adjoint c'est à dire si : $A = A^+$. Il s'ensuit que les éléments de matrice de A dans une représentation donnée $\{u_i\}$ sont tels que :

$$A_{ij} = A_{ji}^* \quad (4.95)$$

et plus généralement pour deux kets $|\Psi\rangle$ et $|\Phi\rangle$ quelconques :

$$\langle \Psi | A | \Phi \rangle = \langle \Phi | A | \Psi \rangle^* \quad (4.96)$$

En utilisant (4.89) on peut également écrire :

$$\langle A\Phi | \Psi \rangle = \langle \Phi | A\Psi \rangle \quad (4.97)$$

5.2. Exemples : Opérateurs P_Ψ , X , P

Pour $P_\Psi = |\Psi\rangle \langle \Psi|$, la démonstration est immédiate, on a en effet :

$$P_\Psi^+ = |\Psi\rangle \langle \Psi| = P_\Psi \quad (4.98)$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)


Page 258 de 978

[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

Pour X et P on peut montrer facilement qu'en se plaçant dans la représentation $\{x\}$ on a :

$$\langle \Phi | X \Psi \rangle = \langle X \Phi | \Psi \rangle \quad (4.99)$$

$$\langle \Phi | P \Psi \rangle = \langle P \Phi | \Psi \rangle \quad (4.100)$$

5.3. Remarque

Le produit de deux opérateurs hermitiques n'est hermitique que si A et B commutent :

En effet :

$$(AB)^+ = B^+ A^+ = BA \quad (4.101)$$

BA n'est égal à AB que si $[A, B] = 0$



Page de titre

Sommaire



Page 259 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

6. Vecteurs propres et valeurs propres d'un opérateur

6.1. Définition

On dit que $|\phi_n\rangle$ est vecteur propre ou ket propre de l'opérateur A avec la valeur propre a_n si :

$$A |\phi_n\rangle = a_n |\phi_n\rangle \quad (4.102)$$

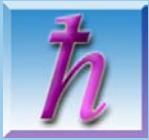
6.2. Remarques

1- En multipliant les deux membres de l'égalité (4.102) par le scalaire b , on voit que $b|\phi_n\rangle$ est aussi ket propre de A avec la valeur propre a_n . Si $|\phi_n\rangle$ est normé à l'unité, il est donc fixé à un facteur de phase près et on ne considérera pas comme différents deux kets normés correspondant à la même valeur propre et ne différant que par une phase $e^{i\theta}$. ($|\phi_n\rangle \propto e^{i\theta} |\phi_n\rangle$)

2- a_n est dite valeur propre dégénérée s'il lui correspond au moins deux vecteurs propres normés différents : un indice supplémentaire α est alors nécessaire pour distinguer les divers kets propres correspondant à a_n :

$$A |\phi_n^\alpha\rangle = a_n |\phi_n^\alpha\rangle \quad (4.103)$$

L'ensemble des $|\phi_n^\alpha\rangle$ sous-tend un sous-espace ξ_n appelé sous-espace de dégénérescence de la valeur propre a_n .



Page de titre

Sommaire



Page 260 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

3- $A|u_n\rangle = a_n|u_n\rangle$ implique que $\langle u_n|A^+ = a_n^*\langle u_n|$.

Ainsi, si $|u_n\rangle$ est ket propre de A avec la valeur propre a_n , $\langle u_n|$ est bra propre de A^+ avec la valeur propre a_n^* .

6.3. Equation caractéristique

Pour déterminer les valeurs propres λ d'un opérateur A , il faut chercher s'il existe des vecteurs $|\Psi\rangle$ tel que :

$$A|\Psi\rangle = \lambda|\Psi\rangle \quad (4.104)$$

La projection de cette égalité sur une base orthonormée $\{|u_i\rangle\}$ donne :

$$\langle u_i|A|\Psi\rangle = \lambda\langle u_i|\Psi\rangle = \lambda c_i \quad (4.105)$$

En insérant le projecteur $P\{u_j\}$ entre A et $|\Psi\rangle$ on obtient :

$$\langle u_i|A\sum_j|u_j\rangle\langle u_j|\Psi\rangle = \sum_j\langle u_i|A|u_j\rangle\langle u_j|\Psi\rangle = \sum_j A_{ij}c_j \quad (4.106)$$

soit :

$$\sum_j A_{ij}c_j = \lambda c_i \quad (4.107)$$



Page de titre

Sommaire



Page 261 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

ou encore

$$\sum_j (A_{ij} - \lambda \delta_{ij}) c_j = 0 \quad (4.108)$$

On aura un système d'équations linéaires homogènes qui admet une solution différente de zéro si et seulement si le déterminant correspondant est nul, soit :

$$\det(\mathbf{A} - \lambda \mathbf{I}) = 0 \quad (4.109)$$

c'est à dire :

$$\begin{vmatrix} A_{11} - \lambda & A_{12} & \cdots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} - \lambda & \cdots & A_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{n1} & \cdots & \cdots & A_{nn} - \lambda \end{vmatrix} = 0 \quad (4.110)$$

L'équation de degré n en λ , obtenue en annulant le déterminant est appelée **équation caractéristique**. Ses racines λ sont les valeurs propres de l'opérateur A .



Page de titre

Sommaire



Page 262 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

6.4. Vecteurs propres et valeurs propres d'un opérateur hermitique

6.4.1. Les valeurs propres d'un opérateur hermitique sont réelles

En effet si on a :

$$A |\phi_n\rangle = a_n |\phi_n\rangle \quad (4.111)$$

alors :

$$\langle \phi_n | A^+ = a_n^* \langle \phi_n | \quad (4.112)$$

En projetant les équations (4.111) et (4.112) sur $|\phi_n\rangle$ il vient :

$$\langle \phi_n | A |\phi_n\rangle = a_n \langle \phi_n | \phi_n\rangle = a_n \quad (4.113)$$

et

$$\langle \phi_n | A^+ |\phi_n\rangle = a_n^* \langle \phi_n | \phi_n\rangle = a_n^* \quad (4.114)$$

Comme $A = A^+$, on obtient d'après (4.113) et (4.114) :

$$\mathbf{a_n} = \mathbf{a_n^*}$$

a_n est donc une valeur propre réelle et par conséquent :

$$\langle \phi_n | A = a_n \langle \phi_n | \quad (4.115)$$

Ce qui montre que, si $|\phi_n\rangle$ est ket propre de A avec la valeur propre a_n , $\langle \phi_n |$ est bra propre de A avec la même valeur propre a_n .



Page de titre

Sommaire



Page 263 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

6.4.2. Deux vecteurs propres correspondant à des valeurs propres différentes sont orthogonaux.

Soient deux vecteurs propres $|\phi_n\rangle$ et $|\phi_m\rangle$ de A correspondant aux valeurs propres différentes a_n et a_m :

On a :

$$A |\phi_n\rangle = a_n |\phi_n\rangle \quad (4.116)$$

et

$$\langle \phi_m | A = a_m \langle \phi_m | \quad (4.117)$$

En multipliant (4.116) par $\langle \phi_m |$ à gauche et (4.117) par $|\phi_n\rangle$ à droite, on obtient :

$$\langle \phi_m | A |\phi_n\rangle = a_n \langle \phi_m | \phi_n\rangle \quad (4.118)$$

et

$$\langle \phi_m | A |\phi_n\rangle = a_m \langle \phi_m | \phi_n\rangle \quad (4.119)$$

En retranchant membre à membre les équations (4.118) et (4.119), on trouve :

$$(a_n - a_m) \langle \phi_m | \phi_n\rangle = 0 \quad (4.120)$$

Comme $a_m \neq a_n$ alors : $\langle \phi_m | \phi_n\rangle = 0$ et $|\phi_n\rangle$ et $|\phi_m\rangle$ sont orthogonaux.



Page de titre

Sommaire



Page 264 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

6.4.3. Système orthonormé de vecteurs propres

Soient $\{|\phi_n^\alpha\rangle\}$ les vecteurs propres normés d'un opérateur hermitique A .
D'après précédemment :

$$\text{si } n \neq n', \text{ on a } \langle \phi_{n'}^{\alpha'} | \phi_n^\alpha \rangle = 0 \quad (4.121)$$

Dans le sous-espace de dégénérescence ξ_n associée à la valeur propre a_n on peut toujours choisir les $|\phi_n^\alpha\rangle$ orthonormés de sorte qu'on a :

$$\langle \phi_n^{\alpha'} | \phi_n^\alpha \rangle = \delta_{\alpha\alpha'} \quad (4.122)$$

En combinant (4.121) et (4.122) on obtient en définitive :

$$\langle \phi_{n'}^{\alpha'} | \phi_n^\alpha \rangle = \delta_{nn'} \delta_{\alpha\alpha'} \quad (4.123)$$

On dit alors que les $\{|\phi_n^\alpha\rangle\}$ forment un système orthonormé de vecteurs propres.


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 265 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

7. Observables

7.1. Définition

Une observable est un opérateur hermitique dont le système de vecteurs propres $\{|u_n^\alpha\rangle\}$ est non seulement orthonormé mais complet; c'est à dire qu'on a toujours :

$$\langle u_n^{\alpha'} | u_n^\alpha \rangle = \delta_{nn} \delta_{\alpha\alpha'} \quad (4.124)$$

$$\sum_n \sum_\alpha |u_n^\alpha\rangle \langle u_n^\alpha| = 1 \quad (4.125)$$

Les $\{|u_n^\alpha\rangle\}$ peuvent alors servir de base dans l'étude du système considéré.

7.2. Exemples d'observables :

7.2.1. Le projecteur :

Le projecteur $P_\Psi = |\Psi\rangle \langle \Psi|$ est hermitique et on a : $P_\Psi^2 = P_\Psi$: les valeurs propres λ de P_Ψ sont réelles et sont données par :

$$\lambda^2 = \lambda, \quad \text{soit} \quad \lambda = 1 \quad \text{ou} \quad \lambda = 0$$



Page de titre

Sommaire



Page 266 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

La valeur propre $\lambda = 1$ est simple et lui correspond le vecteur propre $|\Psi_1\rangle$ alors que $\lambda = 0$ est dégénérée et lui correspond l'ensemble des vecteurs orthonormés sous-tendant le sous-espace orthogonal à $|\Psi_1\rangle$. Les vecteurs propres de P_Ψ forment donc un système complet et P_Ψ est une observable.

7.2.2. Opérateur X :

Il est hermitique et son équation aux valeurs propres s'écrit en représentation $\{x\}$:

$$x \varphi_{x'}(x) = x' \varphi_{x'}(x) \quad (4.126)$$

$\varphi_{x'}$ étant la fonction propre correspondant à la valeur propre x' .

Comme on a (cf. EP4.17) :

$$x \delta(x - x') = x' \delta(x - x') \quad (4.127)$$

donc :

$$\varphi_{x'}(x) = \delta(x - x') \quad (4.128)$$

$\delta(x - x')$ est donc fonction propre de l'opérateur X avec la valeur propre x' .

On sait que l'ensemble des fonctions $\delta(x - x')$ centrées aux divers points x' constitue une base orthonormée continue. L'opérateur X est donc bien une observable.



Page de titre

Sommaire



Page 267 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

En notation de Dirac nous avons appelé $|x\rangle$ le ket correspondant à la fonction $\delta(x - x')$ centrée au point x' , l'équation aux valeurs propres peut s'écrire donc :

$$x |x\rangle = x' |x\rangle \quad (4.129)$$

Les relations d'orthogonalité et de fermeture pour la base $\{|x\rangle\}$ s'écrivent :

$$\langle x | x' \rangle = \delta(x - x') \quad (4.130)$$

$$\int dx |x\rangle \langle x| = 1 \quad (4.131)$$

7.2.3. Opérateur P :

P est hermitique et son équation aux valeurs propres dans la représentation $\{x\}$ est :

$$\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \varphi_{p'}(x) = p' \varphi_{p'}(x) \quad (4.132)$$

$\varphi_{p'}(x)$ est la fonction propre de P correspondant à la valeur propre p' .

La solution de l'équation est :

$$\varphi_{p'}(x) = A \exp\left(\frac{ip'x}{\hbar}\right) \quad (4.133)$$



Page de titre

Sommaire



Page 268 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

A est un coefficient de normalisation et nous avons montré que si :
 $A = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$ alors l'ensemble des $\varphi_{p'}(x)$ constitue une base orthonormée complète. L'opérateur P est donc bien une observable.

En notation de Dirac $|p\rangle$ est le ket qui correspond à la fonction $\varphi_{p'}(x)$, l'équation aux valeurs propres s'écrit :

$$p |p\rangle = p' |p\rangle \quad (4.134)$$

Les relations d'orthogonalités et de fermeture s'écrivent dans la base $\{|p\rangle\}$:

$$\langle p | p' \rangle = \delta(p - p') \quad (4.135)$$

$$\int dp |p\rangle \langle p| = 1 \quad (4.136)$$

7.3. Observables qui commutent

7.3.1. Théorème 1

“Si deux observables A et B commutent, on peut toujours trouver un système de vecteurs propres communs et réciproquement”.



Page de titre

Sommaire



Page 269 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Soit $|\phi_n^\alpha\rangle$ un ket propre de A avec la valeur propre a_n ,

$$A |\phi_n^\alpha\rangle = a_n |\phi_n^\alpha\rangle \quad (4.137)$$

Comme A et B commutent, il vient :

$$AB |\phi_n^\alpha\rangle = BA |\phi_n^\alpha\rangle = a_n B |\phi_n^\alpha\rangle \quad (4.138)$$

soit :

$$A(B |\phi_n^\alpha\rangle) = a_n (B |\phi_n^\alpha\rangle) \quad (4.139)$$

$B |\phi_n^\alpha\rangle$ est donc ket propre de A avec la même valeur propre a_n .

On distingue alors deux cas :

* a_n est une valeur propre non dégénérée :

Dans ce cas $|\phi_n^\alpha\rangle$ et $B |\phi_n^\alpha\rangle$ ne peuvent différer que par un facteur multiplicatif, l'indice α n'est plus nécessaire et on a :

$$B |\phi_n\rangle = b_n |\phi_n\rangle \quad (4.140)$$

$|\phi_n\rangle$ qui est ket propre de A avec la valeur propre a_n est aussi ket propre de B avec une valeur propre b_n généralement différente de a_n .



Page de titre

Sommaire



Page 270 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

* a_n est une valeur propre dégénérée :

Dans ce cas $B |\phi_n^\alpha\rangle$ appartient au sous-espace de dégénérescence ξ_n sous-tendu par les $\{|\phi_n^\alpha\rangle\}$. ξ_n est donc invariant sous l'action de B .

Soit $|\chi_{n,m}^\beta\rangle$ les vecteurs propres de B , de valeur propre b_m contenus dans ξ_n . On a :

$$B |\chi_{n,m}^\beta\rangle = b_m |\chi_{n,m}^\beta\rangle \quad (4.141)$$

L'indice β distingue les différents vecteurs propres correspondant à b_m lorsque cette dernière est dégénérée.

$|\chi_{n,m}^\beta\rangle$ est ket propre de B avec la valeur propre b_m , comme il appartient à ξ_n il est également ket propre de A avec la valeur propre a_n : il est donc ket propre commun à A et B .

7.3.2. Théorème 2

"Si deux observables A et B commutent, l'élément de matrice de B entre deux vecteurs propres de A , de valeurs propres différentes est nul".

Soient $\{|\phi_n^\alpha\rangle\}$ les kets propres de A sous-tendant ξ_n .

$[A, B] = 0$ implique que $\langle \phi_{n'}^{\alpha'} | [A, B] | \phi_n^\alpha \rangle = 0$.

C'est à dire : α

$$\langle \phi_{n'}^{\alpha'} | AB | \phi_n^\alpha \rangle - \langle \phi_{n'}^{\alpha'} | BA | \phi_n^\alpha \rangle = 0 \quad (4.142)$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 271 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

ou encore :

$$a_{n'} \langle \phi_{n'}^{\alpha'} | B | \phi_n^{\alpha} \rangle - a_n \langle \phi_{n'}^{\alpha'} | B | \phi_n^{\alpha} \rangle = 0 \quad (4.143)$$

soit :

$$(a_n - a_{n'}) \langle \phi_{n'}^{\alpha'} | B | \phi_n^{\alpha} \rangle = 0 \quad (4.144)$$

comme $a_{n'} \neq a_n$, alors : $\langle \phi_{n'}^{\alpha'} | B | \phi_n^{\alpha} \rangle = 0$

7.4. Généralisation

Une observable A , a en général un spectre en partie discret (a_n) et en partie continue (a_v) on admettra les relations d'orthogonalité et de fermeture suivante.

$$\langle u_n | u_{n'} \rangle = \delta_{nn'} \quad (4.145)$$

$$\langle u_v | u_{v'} \rangle = \delta(v - v') \quad (4.146)$$

$$\langle u_v | u_v \rangle = 0 \quad (4.147)$$

$$\sum |u_n\rangle \langle u_n| + \int |u_v\rangle \langle u_v| dv = 1 \quad (4.148)$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 272 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

7.5. Ensemble complet d'observables qui commutent

Soit une observable A et une base de ξ formée des vecteurs propres $\{|u_n^\alpha\rangle\}$ de A . Si aucune des valeurs propres de A n'est dégénérée, les divers vecteurs de base peuvent être repérés par la valeur propre a_n et l'indice α dans $|u_n^\alpha\rangle$ est inutile. Dans ce cas tous les sous-espaces propres ξ_n associés à a_n sont de dimension 1 et la donnée de la valeur propre a_n détermine de manière unique le vecteur propre correspondant $|u_n\rangle$. Il existe donc une seule base de ξ formée avec des vecteurs propres de A et on dit que l'observable A constitue à elle seule un ensemble complet d'observables qui commutent (E.C.O.C.) dans ξ .

Si au contraire certaines valeurs propres de A sont dégénérées (il suffit qu'une le soit) la donnée de a_n ne suffit plus à caractériser un seul vecteur de base puisque les sous-espaces propres ξ_n sont de dimension supérieure à 1. Dans ce cas la base des vecteurs propres de A n'est pas unique et A ne constitue plus à lui seul un E.C.O.C.

Considérons alors une autre observable B qui commute avec A et construisons une base orthonormée de vecteurs propres communs à A et B en résolvant l'équation aux valeurs propres de B à l'intérieur de chaque sous-espace ξ_n .

Si dans ξ_n , toutes les valeurs propres b_m de B sont non dégénérées la donnée du couple (a_n, b_m) spécifie complètement le vecteur propre commun à A et B : ces vecteurs propres constituent alors une base unique et on dit


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 273 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

que A et B forment un E.C.O.C.

Si par contre b_m est dégénérée, l'ensemble des $|\chi_{n,m}^\beta\rangle$ sous-tend un sous-espace ξ_m de ξ_n tel que tout vecteur de ξ_m est vecteur propre commun de A et B avec les valeurs propres a_n et b_m , mais au couple (a_n, b_m) correspond plusieurs vecteurs propres et la base formée par ces vecteurs n'est pas unique. On cherche alors une autre observable C commutant avec A et B et on diagonalise C à l'intérieur de ξ_m . Si toutes les valeurs propres c_p de C à l'intérieur de ξ_m sont non dégénérées, la donnée du triplet (a_n, b_m, c_p) spécifie complètement le vecteur propre commun unique, sinon on prendra une quatrième observable D

En conclusion :

Une suite $A, B, C, \dots$ d'observables forment un E.C.O.C, si ces observables commutent 2 à 2 et si chaque vecteur propre de leur système de base commun est défini de façon unique par la donnée des valeurs propres $a_n, b_m, c_p, \dots$ correspondantes de $A, B, C, \dots$



Page de titre

Sommaire



Page 274 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

8. Opérateurs unitaires

8.1. Définition

Un opérateur U est unitaire si son inverse U^{-1} est égal à son adjoint :

$$UU^+ = U^+U = 1 \quad (4.149)$$

8.2. Transformation sur les vecteurs

Le transformé $|\varphi'_1\rangle$ d'un ket $|\varphi_1\rangle$ par une transformation unitaire associée à l'opérateur U est défini par :

$$|\varphi'_1\rangle = U |\varphi_1\rangle \quad (4.150)$$

Si $|\varphi'_2\rangle$ est le transformé de $|\varphi_2\rangle$ par U on a aussi :

$$|\varphi'_2\rangle = U |\varphi_2\rangle \quad (4.151)$$

On a alors pour les vecteurs bras :

$$\langle\varphi'_1| = \langle\varphi_1| U^+ \quad (4.152)$$

$$\langle\varphi'_2| = \langle\varphi_2| U^+ \quad (4.153)$$



Page de titre

Sommaire



Page 275 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

On en déduit que :

$$\langle \varphi'_1 | \varphi'_1 \rangle = \langle \varphi_1 | U^+ U | \varphi_1 \rangle = \langle \varphi_1 | \varphi_1 \rangle \quad (4.154)$$

$$\langle \varphi'_2 | \varphi'_1 \rangle = \langle \varphi_2 | U^+ U | \varphi_1 \rangle = \langle \varphi_2 | \varphi_1 \rangle \quad (4.155)$$

Une transformation unitaire conserve donc la norme et le produit scalaire.

8.3. Transformation sur les opérateurs

8.3.1. Définition

Soit l'équation :

$$|\Psi\rangle = A |\varphi\rangle \quad (4.156)$$

Il s'agit de déterminer l'opérateur A' tel que :

$$|\Psi'\rangle = A' |\varphi'\rangle \quad (4.157)$$

où $|\Psi'\rangle$ et $|\varphi'\rangle$ sont respectivement les vecteurs transformés de $|\Psi\rangle$ et $|\varphi\rangle$ par la transformation unitaire associée à l'opérateur U on a :

$$|\Psi'\rangle = U |\Psi\rangle \quad (4.158)$$

$$|\varphi'\rangle = U |\varphi\rangle \quad (4.159)$$



Page de titre

Sommaire



Page 276 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Les équations (4.157), (4.158) et (4.159) donnent :

$$U |\Psi\rangle = A' U |\varphi\rangle \quad (4.160)$$

En multipliant à gauche les deux membres par U^+ , on obtient :

$$U^+ U |\Psi\rangle = U^+ A' U |\varphi\rangle \quad (4.161)$$

soit :

$$|\Psi\rangle = U^+ A' U |\varphi\rangle = A |\varphi\rangle \quad (4.162)$$

ce qui donne :

$$A = U^+ A' U \quad (4.163)$$

ou encore :

$$A' = U A U^+ \quad (4.164)$$

8.3.2. Propriétés :

* Si A est hermitique A' l'est aussi

* Les valeurs propres de A' sont celles de A , car l'équation aux valeurs propres $A |\varphi\rangle = \lambda |\varphi\rangle$ se transforme en $A' |\varphi'\rangle = \lambda |\varphi'\rangle$



Page de titre

Sommaire



Page 277 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

* Le produit de deux transformations unitaires U et V est une transformation unitaire.

En effet comme : $UU^+ = U^+U = 1$ et $VV^+ = V^+V = 1$
il vient :

$$(UV)(UV)^+ = UVV^+U^+ = 1 \quad (4.165)$$

* Les éléments de matrice de U dans une base orthonormée discrète $\{|v_i\rangle\}$ sont tels que :

$$\sum_{\ell} U_{\ell i}^* U_{\ell j} = \delta_{ij} \quad (4.166)$$

En effet on a :

$$\langle v_i | U^+ U | v_j \rangle = \langle v_i | v_j \rangle = \delta_{ij} \quad (4.167)$$

En insérant la relation de fermeture entre U et U^+ , on a :

$$\begin{aligned} \langle v_i | U^+ U | v_j \rangle &= \sum_{\ell} \langle v_i | U^+ | v_{\ell} \rangle \langle v_{\ell} | U | v_j \rangle \\ &= \sum_{\ell} U_{i\ell}^+ U_{\ell j} \\ &= \sum_{\ell} U_{\ell i}^* U_{\ell j} \end{aligned} \quad (4.168)$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 278 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

soit :

$$\sum_{\ell} U_{\ell i}^* U_{\ell j} = \delta_{ij} \quad (4.169)$$

Ce qui montre que :

Lorsqu'une matrice est unitaire, la somme des produits des éléments d'une colonne par les complexes conjugués des éléments d'une autre colonne est nulle si les deux colonnes sont différentes et égale à un dans le cas contraire.

8.4. Opérateur unitaire infinitésimal

On considère un opérateur unitaire $U(\varepsilon)$ fonction d'une variable réelle et infiniment petite ε et tel que $U(\varepsilon)$ tend vers l'opérateur unité lorsque cette variable tend vers 0.

On peut alors développer $U(\varepsilon)$ en puissance de ε :

$$U(\varepsilon) = 1 + \varepsilon G + \varepsilon^2 G^2 + \dots \quad (4.170)$$

on a alors :

$$U(\varepsilon)^+ = 1 + \varepsilon G^+ + \dots \quad (4.171)$$

et

$$U(\varepsilon)U(\varepsilon)^+ = U(\varepsilon)^+U(\varepsilon) = 1 + \varepsilon(G + G^+) + \dots \quad (4.172)$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 279 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

Comme $U(\varepsilon)$ est unitaire, on a au premier ordre :

$$G + G^+ = 0 \quad (4.173)$$

c'est à dire :

$$G = -G^+ \quad (4.174)$$

On dit que l'opérateur G est antihermitique et on peut poser : $F = iG$ où F est un opérateur hermitique.

L'opérateur unitaire infinitésimal prend alors la forme suivante :

$$U(\varepsilon) = 1 - i\varepsilon F \quad (4.175)$$

La transformation A' d'un opérateur A est alors :

$$A' = U(\varepsilon)AU(\varepsilon)^+ = A - i\varepsilon[F, A] \quad (4.176)$$

soit encore :

$$A' - A = -i\varepsilon[F, A] \quad (4.177)$$



Page de titre

Sommaire



Page 280 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

9. Produit tensoriel d'espaces d'états

C'est une opération très utile qui va nous permettre de généraliser les notions présentées sur l'espace à une dimension ξ_x à l'espace à trois dimensions ξ_r d'une particule. Elle nous permettra également d'étudier l'espace des états orbitaux ou de spins de deux particules et d'incorporer en général, dans un même formalisme, la partie orbitale et la partie spin décrivant l'état quantique d'une même particule.

9.1. Définition

Soit un espace ξ_1 de dimension n_1 sous-tendu par les vecteurs de base $|u_i(1)\rangle$ ($i = 1, \dots, n_1$) dont le vecteur le plus général est désigné $|\varphi(1)\rangle$ et un espace ξ_2 de dimension n_2 sous-tendu par les vecteurs de base $|v_\ell(2)\rangle$ ($\ell = 1, \dots, n_2$) et de vecteur général $|\chi(2)\rangle$.

On appelle produit tensoriel de ξ_1 par ξ_2 , l'espace vectoriel ξ à $n_1.n_2$ dimensions, noté :

$$\xi = \xi_1 \otimes \xi_2 \quad (4.178)$$

et tel que à tout couple de vecteurs $|\varphi(1)\rangle$ appartenant à ξ_1 et $|\chi(2)\rangle$ appartenant à ξ_2 on peut faire correspondre un vecteur $|\Psi\rangle$ de ξ noté $|\Psi\rangle = |\varphi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle$ qu'on appelle produit tensoriel de $|\varphi(1)\rangle$ et $|\chi(2)\rangle$.

Pour simplifier, on note aussi : $|\Psi\rangle = |\varphi(1)\chi(2)\rangle$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 281 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

9.2. Propriétés

Le produit tensoriel satisfait aux propriétés suivantes :

1- Il est associatif par rapport à la multiplication par un scalaire :

$$\begin{aligned} \lambda [|\varphi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle] &= [\lambda |\varphi(1)\rangle] \otimes |\chi(2)\rangle \\ &= |\varphi(1)\rangle \otimes [\lambda |\chi(2)\rangle] \end{aligned} \quad (4.179)$$

2- Il est distributif par rapport à l'addition vectorielle :

$$\begin{aligned} |\varphi(1)\rangle \otimes [\lambda_1 |\chi_1(2)\rangle + \lambda_2 |\chi_2(2)\rangle] &= \\ \lambda_1 |\varphi(1)\rangle \otimes |\chi_1(2)\rangle + \lambda_2 |\varphi(1)\rangle \otimes |\chi_2(2)\rangle \end{aligned}$$

3- L'ensemble des vecteurs $\{|u_i(1)\rangle \otimes |v_\ell(2)\rangle\}$ constitue une base orthonormée dans ξ . En effet on a :

$$\begin{aligned} [\langle u_i(1) | \otimes \langle v_\ell(2) |] [|u_j(1)\rangle \otimes |v_m(2)\rangle] &= \\ \langle u_i(1) | u_j(1)\rangle \langle v_\ell(2) | v_m(2)\rangle &= \delta_{ij} \delta_{\ell m} \end{aligned} \quad (4.180)$$



Page de titre

Sommaire



Page 282 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

9.3. Composantes d'un vecteur produit

Soient a_i et b_ℓ les composantes de $|\varphi(1)\rangle$ et de $|\chi(2)\rangle$ respectivement dans les bases $\{|u_i(1)\rangle\}$ et $\{|v_\ell(2)\rangle\}$. On a :

$$|\varphi(1)\rangle = \sum_i a_i |u_i(1)\rangle \text{ et } |\chi(2)\rangle = \sum_\ell b_\ell |v_\ell(2)\rangle \quad (4.181)$$

D'après les propriétés précédentes on aura :

$$|\Psi\rangle = |\varphi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle = \sum_i \sum_\ell a_i b_\ell |u_i(1)\rangle \otimes |v_\ell(2)\rangle \quad (4.182)$$

Les composantes d'un vecteur produit tensoriel sont donc les produits des composantes des deux vecteurs du produit.

9.4. Produit scalaire dans ξ

Soient les vecteurs :

$$|\Psi\rangle = |\varphi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle \quad (4.183)$$

$$|\Psi'\rangle = |\varphi'(1)\rangle \otimes |\chi'(2)\rangle$$

On définit leur produit scalaire par :

$$\langle \Psi | \Psi' \rangle = \langle \varphi(1) | \varphi'(1) \rangle \langle \chi(2) | \chi'(2) \rangle \quad (4.184)$$



Page de titre

Sommaire



Page 283 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

9.5. Prolongement dans ξ d'un opérateur agissant dans ξ_1 ou ξ_2

Soit $A(1)$ un opérateur agissant dans ξ_1 . On lui associe un opérateur $\tilde{A}(1)$ agissant dans ξ , défini de la manière suivante :

$$\tilde{A}(1)[|\varphi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle] = [A(1)|\varphi(1)\rangle] \otimes |\chi(2)\rangle \quad (4.185)$$

$\tilde{A}(1)$ est appelé prolongement de $A(1)$ dans ξ .

On définit de façon analogue le prolongement $\tilde{B}(2)$ d'un opérateur $B(2)$ agissant initialement dans ξ_2 .

9.6. Produit tensoriel de deux opérateurs $A(1)$ et $B(2)$

Soient $A(1)$ et $B(2)$ deux opérateurs agissant dans ξ_1 et ξ_2 . On appelle produit tensoriel de ces deux opérateurs qu'on note $A(1) \otimes B(2)$ un opérateur agissant dans l'espace produit et défini ainsi :

$$[A(1) \otimes B(2)][|\varphi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle] = [A(1)|\varphi(1)\rangle] \otimes [B(2)|\chi(2)\rangle]$$

Lorsque $A(1) \otimes B(2)$ agit sur un vecteur produit, chaque opérateur du produit agit sur le vecteur du produit appartenant à l'espace dans lequel il agit.


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 284 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

On vérifie facilement que :

$$\tilde{A}(1) = A(1) \otimes I(2) \quad (4.186)$$

$$\tilde{B}(2) = I(1) \otimes B(2) \quad (4.187)$$

où $I(1)$ et $I(2)$ sont les opérateurs identités respectivement dans ξ_1 et ξ_2 .

On note aussi pour simplifier :

$$A(1) \otimes B(2) = A(1)B(2) \quad (4.188)$$

9.7. Etats propres et valeurs propres de $\tilde{A}(1)$

On a :

$$A(1) |\varphi_n(1)\rangle = a_n |\varphi_n(1)\rangle \quad (4.189)$$

$$\begin{aligned} \tilde{A}(1)[|\varphi_n(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle] &= [A(1) |\varphi_n(1)\rangle] \otimes |\chi(2)\rangle \\ &= a_n [|\varphi_n(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle] \end{aligned} \quad (4.190)$$

$|\varphi_n(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle$ est donc état propre de $\tilde{A}(1)$ avec la valeur propre a_n .

De même :

$$\tilde{A}(1)[|\varphi_n(1)\rangle \otimes |v_\ell(2)\rangle] = a_n [|\varphi_n(1)\rangle \otimes |v_\ell(2)\rangle] \quad (4.191)$$



Page de titre

Sommaire



Page 285 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Les $|v_\ell(2)\rangle$ formant une base orthonormée dans ξ_2 , on voit qu'il existe au moins n_2 vecteurs orthogonaux $|\varphi_n(1)\rangle \otimes |v_\ell(2)\rangle$ ($\ell = 1, \dots, n_2$) qui sont états propres de $\tilde{A}(1)$ avec la valeur propre a_n . Ainsi, même si a_n n'est pas dégénérée pour $A(1)$ dans ξ_1 , **elle est dégénérée au moins n_2 fois pour $\tilde{A}(1)$ dans l'espace ξ .**

9.8. États propres et Valeurs propres de $\tilde{A}(1) + \tilde{B}(2)$

On a :

$$A(1) |\varphi_n(1)\rangle = a_n |\varphi_n(1)\rangle \quad (4.192)$$

$$B(2) |\chi_m(2)\rangle = b_m |\chi_m(2)\rangle \quad (4.193)$$

On a d'après précédemment il vient :

$$\tilde{A}(1)[|\varphi_n(1)\rangle \otimes |\chi_m(2)\rangle] = a_n[|\varphi_n(1)\rangle \otimes |\chi_m(2)\rangle] \quad (4.194)$$

$$\tilde{B}(2)[|\varphi_n(1)\rangle \otimes |\chi_m(2)\rangle] = b_m[|\varphi_n(1)\rangle \otimes |\chi_m(2)\rangle] \quad (4.195)$$

On en déduit que :

$$[\tilde{A}(1) + \tilde{B}(2)][|\varphi_n(1)\rangle \otimes |\chi_m(2)\rangle] = (a_n + b_m)[|\varphi_n(1)\rangle \otimes |\chi_m(2)\rangle] \quad (4.196)$$

Les états propres de $\tilde{A}(1) + \tilde{B}(2)$ sont les produits tensoriels d'un état propre de $A(1)$ par un état propre de $B(2)$ et les valeurs propres de

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 286 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

$\tilde{A}(1) + \tilde{B}(2)$ sont la somme des valeurs propres correspondantes de $A(1)$ et $B(2)$.

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 287 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

Exercices et Problèmes

EP 4.1 Inégalité de Schwarz

Sachant que dans l'espace des états ξ , tout ket $|\Psi\rangle$ vérifie l'inégalité : $\langle\Psi|\Psi\rangle \geq 0$ où $\langle\Psi|\Psi\rangle$ est un réel qui représente la norme au carré du ket $|\Psi\rangle$. Montrer que si $|\varphi_1\rangle$ et $|\varphi_2\rangle$ sont des kets quelconques appartenant à ξ on a toujours l'inégalité suivante appelée inégalité de Schwarz :

$$|\langle\varphi_1|\varphi_2\rangle|^2 \leq \langle\varphi_1|\varphi_1\rangle \langle\varphi_2|\varphi_2\rangle$$

EP 4.2 Algèbre des commutateurs



Page de titre

Sommaire



Page 288 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

1 - A , B et C étant des opérateurs linéaires, montrer que :

a - $[A, B] = -[B, A]$

b - $[A, B + C] = [A, B] + [A, C]$

c - $[A, B]^+ = [B^+, A^+]$

où A^+ , B^+ sont les opérateurs adjoints de A et B .

d - $[A, BC] = [A, B]C + B[A, C]$

e - Si $[A, [A, B]] = [B, [A, B]] = 0$ alors $[A, F(B)] = [A, B] F'(B)$

$F(B)$ étant un opérateur fonction de B .

2 - Q et P étant les opérateurs position et impulsion associés aux variables q et p avec $P = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q}$, montrer que :

a - $[Q, P] = i\hbar$

b - $[Q, P^n] = i\hbar n P^{n-1}$

c - $[P, Q^n] = -i\hbar n Q^{n-1}$



Page de titre

Sommaire



Page 289 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

$$\mathbf{d} - [Q, G(P)] = i\hbar G'(P)$$

$$\mathbf{e} - [P, R(Q)] = -i\hbar R'(Q)$$

où $G(P)$ et $R(Q)$ sont respectivement des fonctions des opérateurs P et Q .

3 - On suppose que les deux opérateurs A et B ne commutent pas ($[A, B] \neq 0$) mais vérifient la relation

$$[A, [A, B]] = [B, [A, B]] = 0$$

a - Montrer que :

$$[A, B^n] = \sum_{s=0}^{n-1} B^s [A, B] B^{n-s-1}$$

b - Calculer le commutateur : $[B^n, [A, B]]$ avec n un entier positif

c - Montrer que :

$$[A, B^n] = nB^{n-1} [A, B]$$

EP 4.3 Dérivation d'un opérateur



Page de titre

Sommaire



Page 290 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Soient $A(t)$ et $B(t)$ deux opérateurs qui dépendent d'une variable t .

Par définition, la dérivée $\frac{dA}{dt}$ de $A(t)$ par rapport à t est donnée par la limite (si elle existe) :

$$\frac{dA}{dt} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{[A(t + \Delta t) - A(t)]}{\Delta t}$$

Soient $A_{ij}(t) = \langle u_i | A(t) | u_j \rangle$ les éléments de matrice de A dans la base orthonormée discrète $\{|u_i\rangle\}$ indépendante de t .

Les éléments de matrice de $\frac{dA}{dt}$ dans cette base sont :

$$\left(\frac{dA}{dt} \right)_{ij} = \langle u_i | \frac{dA}{dt} | u_j \rangle$$

1 - Vérifier que

$$\text{a - } \left(\frac{dA}{dt} \right)_{ij} = \frac{d(A_{ij})}{dt}$$

$$\text{b - } \frac{d}{dt}(A + B) = \frac{dA}{dt} + \frac{dB}{dt}$$

$$\text{c - } \frac{dAB}{dt} = \frac{dA}{dt}B + A\frac{dB}{dt}$$



Page de titre

Sommaire



Page 291 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

2 - Montrer que :

$$a - \frac{d}{dt} e^{At} = e^{At} A = A e^{At}$$

$$b - \frac{d}{dt} (e^{At} e^{Bt}) = A e^{At} e^{Bt} + e^{At} B e^{Bt}$$

EP 4.4 Formule de Glauber

Soient deux opérateurs A et B qui commutent avec leur commutateur et considérons l'opérateur $F(t)$ fonction de la variable t définie par :

$$F(t) = e^{At} e^{Bt}$$

1 - Montrer que la dérivée $\frac{dF}{dt}$ peut s'écrire sous la forme :

$$\frac{dF}{dt} = (A + e^{At} B e^{-At}) F(t)$$

2 - Calculer le commutateur $[e^{At}, B]$ et montrer que $F(t)$ est solution de l'équation différentielle :

$$\frac{dF}{dt} = (A + B + t[A, B]) F(t)$$



Page de titre

Sommaire



Page 292 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

En intégrant cette équation montrer que :

$$F(t) = e^{(A+B)t + \frac{1}{2}[A,B]t^2}$$

3 - En déduire la formule de Glauber donnée par :

$$e^A e^B = e^{(A+B)} e^{\frac{1}{2}[A,B]}$$

EP 4.5 Fonction d'opérateurs

Considérons une fonction $f(z)$ d'une variable z et supposons qu'elle est développable, dans un certain domaine, en série entière de z :

$$f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n z^n$$

Par définition la fonction correspondante de l'opérateur linéaire A est l'opérateur A défini par :

$$F(A) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n A^n$$

Par exemple l'opérateur e^A est défini par :

$$e^A = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{A^n}{n!} = 1 + A + \frac{A^2}{2!} + \cdots + \frac{A^n}{n!} + \cdots$$



Page de titre

Sommaire



Page 293 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

1 - Montrer que si $|\varphi_a\rangle$ est vecteur propre de A avec la valeur propre a , alors $|\varphi_a\rangle$ est aussi vecteur propre de $F(A)$ avec la valeur propre $f(a)$.

2 - Montrer que si dans une représentation donnée, la matrice représentant l'opérateur A est diagonale (auquel cas ses éléments sont les valeurs propres a_i de A) alors $F(A)$ est représentée dans la même base par la matrice diagonale d'éléments $f(a_i)$.

$$\text{Appliquer ce résultat à la matrice } A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

EP 4.6 Trace d'un opérateur

La trace d'un opérateur A qu'on note $Tr A$ est la somme de ses éléments de matrice diagonaux. Dans une base orthonormée discrète $\{|u_i\rangle\}$, elle est définie par :

$$Tr A = \sum_i \langle u_i | A | u_i \rangle$$

1 - Montrer que la trace d'un opérateur est invariante dans un changement de base.

2 - Montrer que pour trois opérateurs donnés A , B et C on a les relations importantes suivantes :

$$Tr AB = Tr BA$$

$$Tr ABC = Tr BCA = Tr CAB$$



Page de titre

Sommaire



Page 294 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

3 - On considère dans la base $\{|u_i\rangle\}$ l'opérateur $\rho(t)$ appelé matrice densité et défini par :

$$\rho(t) = |\Psi(t)\rangle \langle \Psi(t)|$$

où $|\Psi(t)\rangle$ est un ket normé qui s'écrit dans la base $\{|u_i\rangle\}$ sous la forme :

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |u_n\rangle$$

a - Montrer que $\rho(t)$ est hermitique.

b - Montrer qu'il est idempotent c'est à dire : $\rho^2(t) = \rho(t)$.

c - Calculer la trace de $\rho(t)$.

EP 4.7 Procédé d'orthogonalisation de Schmidt

Soit A un opérateur hermitique possédant une valeur propre a doublement dégénérée correspondant aux vecteurs propres $|\varphi_1\rangle$ et $|\varphi_2\rangle$ tels que :

$$\begin{cases} \langle \varphi_1 | \varphi_1 \rangle = \langle \varphi_2 | \varphi_2 \rangle = 1 \\ \langle \varphi_1 | \varphi_2 \rangle \neq 0 \end{cases}$$

1 - Montrer que le ket $|u\rangle = \lambda_1 |\varphi_1\rangle + \lambda_2 |\varphi_2\rangle$ est vecteur propre de A avec la valeur propre a . λ_1 et λ_2 étant deux constantes.



Page de titre

Sommaire



Page 295 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

2 - En imposant les conditions :

$$\begin{cases} \langle u | u \rangle = 1 \\ \langle u | \varphi_1 \rangle = 0 \end{cases}$$

calculer λ_1 et λ_2 et montrer qu'on peut toujours construire deux combinaisons linéaires orthogonales de $|\varphi_1\rangle$ et $|\varphi_2\rangle$ qui sont vecteurs propres de A correspondant à la valeur propre dégénérée a .

3 - Montrer que ce procédé (dit de Schmidt) peut être généralisé à un ensemble de vecteurs propres associés à une même valeur propre.

EP 4.8 Identité de Kubo

On considère deux opérateurs linéaires A et B quelconques, un paramètre scalaire λ et un troisième opérateur H , pouvant être un hamiltonien. Vérifier l'identité suivante dite identité de Kubo :

$$[e^{-\beta H}, A] = e^{-\beta H} \int_0^\beta e^{\lambda H} [A, H] e^{-\lambda H} d\lambda$$

On rappelle que pour vérifier que deux fonctions sont identiques, il suffit de vérifier l'identité pour une valeur particulière de la variable et de montrer que les deux fonctions obéissent à une même équation différentielle.



Page de titre

Sommaire



Page 296 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

EP 4.9 Théorème du Viriel

On considère une particule se déplaçant sur l'axe $\overrightarrow{Ox}$ et dont l'hamiltonien est défini par :

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(X)$$

où X et P sont les opérateurs position et impulsion de la particule..

Soit $\{|\varphi_n\rangle\}$ une base orthonormée discrète formée par les vecteurs propres de H tels que :

$$H |\varphi_n\rangle = E_n |\varphi_n\rangle$$

1 - Montrer que :

$$\langle\varphi_n| P |\varphi_{n'}\rangle = \alpha \langle\varphi_n| X |\varphi_{n'}\rangle$$

où α est un coefficient qui ne dépend que de la différence $E_n - E_{n'}$ et qu'on explicitera.

2 - En utilisant la relation de fermeture, en déduire l'égalité :

$$\sum_{n'} |(E_n - E_{n'})|^2 |\langle\varphi_n| X |\varphi_{n'}\rangle|^2 = \frac{\hbar^2}{2m} \langle\varphi_n| P^2 |\varphi_n\rangle$$



Page de titre

Sommaire



Page 297 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

3 - Soit A un opérateur quelconque :

a - Montrer que :

$$\langle \varphi_n | [A, H] | \varphi_n \rangle = 0$$

b - Calculer en fonction de P , X , $V(X)$ les commutateurs :

$$[H, P], [H, X] \text{ et } [H, XP]$$

c - Montrer que :

$$\langle \varphi_n | P | \varphi_n \rangle = 0$$

d - Etablir une relation entre $\langle \varphi_n | \frac{P^2}{2m} | \varphi_n \rangle$ et $\langle \varphi_n | X \frac{dV}{dX} | \varphi_n \rangle$ dans le cas où $V(X) = V_0 X^k$ avec k entier ≥ 2 et $V_0 > 0$.

Interpréter le résultat obtenu.

EP 4.10 Représentations $\{|\vec{r}\rangle\}$ et $\{|\vec{p}\rangle\}$

On désigne sous le terme d'observables conjuguées, les couples d'observables (Q, P) telles que $[Q, P] = i\hbar$. Ces observables apparaissent fréquemment en mécanique quantique comme opérateurs associés à des grandeurs classiques conjuguées telles que la position et l'impulsion.

A-Opérateur de translation



Page de titre

Sommaire



Page 298 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

On considère l'opérateur

$$\mathcal{S}(\lambda) = \exp(-i\lambda \frac{P}{h})$$

où λ est une constante réelle.

1- Montrer que :

a- $\mathcal{S}(\lambda)$ est unitaire

b- $[Q, \mathcal{S}(\lambda)] = \lambda \mathcal{S}(\lambda)$

c- Si $|q\rangle$ est ket propre de Q avec la valeur propre q . $\mathcal{S}(\lambda) |q\rangle$ est ket propre de Q avec la valeur propre $(q + \lambda)$.

2- En déduire que :

a- $\mathcal{S}(\lambda)$ représente l'opérateur de translation de λ sur la variable q .

b- Le spectre de Q est un spectre continu, constitué de l'ensemble des réels.

3-Montrer que le même raisonnement s'applique à l'observable P : donner en particulier l'expression de l'opérateur de translation $\mathcal{S}(\mu)$ de μ sur la variable p .

B-Représentation $\{|q\rangle$ et $|p\rangle\}$

1-Représentation $\{|q\rangle\}$

Q étant une observable, l'ensemble de ses kets propres $\{|q\rangle ; (q \in \mathbb{R})\}$ constitue une base continue de l'espace des états ξ , sur laquelle tout état du système est représenté par la fonction d'onde $\psi(q) = \langle q | \psi \rangle$.

a- Montrer que

$$\langle q | Q | \psi \rangle = q\psi(q), \quad \langle q | \mathcal{S}(\lambda) | \psi \rangle = \psi(q - \lambda)$$



Page de titre

Sommaire



Page 299 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

b- Action de P en représentation $\{|q\rangle\}$.

Montrer que pour une translation infinitésimale ε :

$$\mathcal{S}(\varepsilon) = I - i \frac{\varepsilon}{\hbar} P$$

En déduire que :

$$\langle q | P | \psi \rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dq} \psi(q) \quad (1)$$

Ce qui démontre en toute généralité que l'action de P en représentation $\{|q\rangle\}$ est celle de $\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dq}$.

2-Représentation $\{|p\rangle\}$

a- En utilisant (1), montrer que la fonction d'onde normée $V_p(q)$ associée en représentation $\{|q\rangle\}$ au vecteur propre $|p\rangle$ de P correspondant à la valeur propre p s'écrit :

$$V_p(q) = \langle q | p \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} pq\right)$$

b- Montrer que la fonction d'onde associée à un ket $|\psi\rangle$ en représentation $\{|p\rangle\}$ s'écrit :

$$\bar{\psi}(p) = \langle p | \psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} pq\right) \psi(q) dq \quad (2)$$



Page de titre

Sommaire



Page 300 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

On constate ainsi que les fonctions d'onde en représentation $\{|q\rangle$ et $|p\rangle\}$ sont transformées de Fourier l'une de l'autre.

c- Par un raisonnement analogue à ce qui a été fait au paragraphe précédent, montrer que l'action de Q en représentation $\{|p\rangle\}$ est celle de $-\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dp}$.

C- Ecart quadratique moyen de deux observables conjuguées

1- Relation d'incertitude de Heisenberg

Il s'agit de montrer que, quel que soit le vecteur d'état du système, les écarts quadratiques moyens sur P et Q vérifient l'inégalité :

$$\Delta P \cdot \Delta Q \geq \frac{\hbar}{2}$$

a- On pose $Q' = Q - \langle Q \rangle$, $P' = P - \langle P \rangle$

Montrer que : $[Q', P'] = -i\hbar$; $\Delta Q = \sqrt{\langle Q'^2 \rangle}$, $\Delta P = \sqrt{\langle P'^2 \rangle}$

b- On considère le ket $|\phi\rangle = (Q' + i\lambda P') |\psi\rangle$. En utilisant le fait que sa norme est toujours positive ou nulle, montrer que :

$$\Delta P \cdot \Delta Q \geq \frac{\hbar}{2} \quad (3)$$

2- Paquet minimum

a- Montrer que l'égalité (3) est obtenue quand $|\phi\rangle = 0$. Quelle est la valeur λ_0 de λ associée



Page de titre

Sommaire



Page 301 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

b- Caractériser l'état ainsi obtenu et montrer que la fonction d'onde qui lui est associée en représentation $\{|q\rangle\}$ est un paquet gaussien.

c-Montrer qu'on obtient un résultat similaire en représentation $\{|p\rangle\}$

EP 4.11 Equation de Schrödinger en représentation $\{|\vec{p}\rangle\}$

On considère une particule de masse m et d'hamiltonien :

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(\vec{R})$$

Montrer que lorsqu'on passe de la représentation $\{|\vec{r}\rangle\}$ à la représentation $\{|\vec{p}\rangle\}$, l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{d\Psi}{dt} = H\Psi$$

se transforme en une équation intégraldifférentielle donnée par :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi(\vec{p}, t) = \frac{p^2}{2m} \Phi(\vec{p}, t) + \int U(\vec{p} - \vec{p}') \Phi(\vec{p}', t) d\vec{p}'$$

où $\Phi(\vec{p}, t) = \langle \vec{p} | \Psi \rangle$ représente la "fonction d'onde" de la particule en représentation $\{|\vec{p}\rangle\}$ et $U(\vec{p})$ tel que :

$$U(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int V(\vec{r}) \exp(-i\frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar}) d^3r$$



Page de titre

Sommaire



Page 302 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

On rappelle que :

$$\langle \vec{r} | \vec{p} \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp(i \frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar})$$

EP 4.12 Fonction d'onde en représentation $\{|\vec{p}\rangle\}$

Une particule de masse m se déplace dans le potentiel $V(x)$ défini par :

$$\begin{cases} V(x) = Ax & \text{pour } x > 0 \\ V(x) = \infty & \text{pour } x < 0 \end{cases}$$

où A est une constante positive.

On s'intéresse uniquement au cas où l'énergie est positive.

- 1 - Exprimer l'opérateur X en représentation $\{|\vec{p}\rangle\}$.
- 2 - Ecrire l'équation de Schrödinger en représentation $\{|\vec{p}\rangle\}$.
- 3 - Intégrer l'équation de Schrödinger et montrer que la fonction d'onde dans l'espace des moments s'écrit :

$$\bar{\Psi}(p) = C \exp \left\{ \frac{i}{A\hbar} \left(\frac{p^3}{6m} - Ep \right) \right\}$$

Normaliser cette fonction dans le sens de Dirac et déduire la constante C .

- 4 - Ecrire alors la forme intégrale de la fonction d'onde $\Psi(x)$ en représentation $\{|x\rangle\}$ et donner sa signification physique.



Page de titre

Sommaire



Page 303 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

EP 4.13 Hamiltonien perturbé

On considère un système physique dont l'hamiltonien H peut se mettre sous la forme $H = H_0 + W$ où H_0 est un opérateur indépendant du temps et W un opérateur "petit" par rapport à H_0 et qu'on appellera perturbation stationnaire.

On suppose que H_0 admet un spectre discret et on note E_p^0 ses valeurs propres et $\{|\varphi_p^\alpha\rangle\}$ la base orthonormée formée par ses vecteurs propres.

On se propose de déterminer la valeur propre E et le vecteur propre $|\Psi\rangle$ de H ($H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$) lorsque la valeur propre de H_0 est non dégénérée (E_0^n) et associée au ket propre $|\varphi_n\rangle$.

On pose : $\langle\varphi_n|\Psi\rangle = 1$ et $Q = 1 - |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|$

1 - Montrer que :

a - $E = E_n^0 + \langle\varphi_n|W|\Psi\rangle$

b - $(E - H_0)(|\Psi\rangle - |\varphi_n\rangle) = QW|\Psi\rangle$

c - En déduire que $|\Psi\rangle$ satisfait l'équation récurrente suivante :

$$|\Psi\rangle = |\varphi_n\rangle + RW|\Psi\rangle$$

où R est un opérateur que l'on déterminera.



Page de titre

Sommaire



Page 304 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

2 - a - Montrer que $|\Psi\rangle$ et E s'écrivent :

$$|\Psi\rangle = \sum_{p=0}^{\infty} (RW)^p |\varphi_n\rangle$$

$$E = E_n^0 + \sum_{p=0}^{\infty} \langle \varphi_n | W (RW)^p | \varphi_n \rangle$$

b - Montrer que R s'écrit sous la forme :

$$R = \sum_{p \neq n} \sum_{\alpha=1}^{g_p} \frac{|\varphi_p^\alpha\rangle \langle \varphi_p^\alpha|}{E - E_p^0}$$

c - Expliciter E et $|\Psi\rangle$ pour $p \leq 1$.

On rappelle que si on a $A|\varphi\rangle = a|\varphi\rangle$; ($a \neq 0$) alors : $A^{-1}|\varphi\rangle = \frac{1}{a}|\varphi\rangle$.

EP 4.14 Niveaux d'énergie fonctions d'un paramètre

Soit $H(\lambda)$ un hamiltonien dépendant d'un paramètre λ et $E(\lambda)$ une de ses valeurs propres correspondant au vecteur propre normalisé $|\Psi(\lambda)\rangle$.

1 - Montrer que :

$$\frac{d}{d\lambda} E(\lambda) = \langle \Psi(\lambda) | \frac{\partial H}{\partial \lambda} | \Psi(\lambda) \rangle$$



Page de titre

Sommaire



Page 305 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

2 - On considère une particule dans un potentiel central de sorte que son hamiltonien et son équation de Schrödinger s'écrivent :

$$H = T + V = \frac{P^2}{2m} + V(r) \quad \text{avec } r = |\vec{r}|$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(\vec{r}) + V(r)\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r})$$

a - Comment se transforme l'équation de Schrödinger dans l'homothétie : $\vec{r} \rightarrow \lambda \vec{r}$

On posera $\varphi(\vec{r}) = \Psi(\lambda\vec{r})$ et on remarquera que la valeur propre E reste invariante dans cette transformation.

b - On suppose que le potentiel est de la forme : $V(r) = V_0 r^k$

Montrer en utilisant la question 1 et en prenant $\lambda = 1$, qu'on a la relation :

$$2 \langle \varphi | T | \varphi \rangle = k \langle \varphi | V | \varphi \rangle$$

c - On peut utiliser les résultats précédents pour étudier les niveaux d'énergie d'atomes semblables à l'hydrogène pour lequel on a montré que ces niveaux sont donnés par :

$$E_n = -\frac{E_1}{n^2}$$

et que les longueurs d'onde λ des rayonnements émis sont tels que :

$$\frac{1}{\lambda} = R\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2}\right)$$



Page de titre

Sommaire



Page 306 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

n et n' étant des entiers et R la constante de Rydberg.

α - On remplace dans l'atome d'hydrogène l'électron par un lepton μ qui a les mêmes propriétés que l'électron mais de masse deux fois plus grande.

Quelles sont les longueurs d'onde des rayonnements émis ?

β - On remplace dans l'atome d'hydrogène le proton par un ion dont la charge est Z fois celle du proton.

Quelles sont dans ce cas les longueurs d'onde des radiations émises ?

EP 4.15 Quantification du champ électromagnétique

On considère une particule de masse m et de charge q placée dans un champ électromagnétique dérivant des potentiels vecteur $A(\vec{r})$ et scalaire $\Phi(\vec{r})$ ne dépendant pas des vitesses. On suppose que l'hamiltonien de cette particule s'écrit sous la forme :

$$H = \frac{1}{2m}(\vec{P} - q\vec{A})^2 + q\Phi$$

où $\vec{P}(P_x, P_y, P_z)$ représente l'opérateur impulsion de la particule.

On introduit les opérateurs V_x, V_y, V_z composantes de l'opérateur $\vec{V}$ défini par :

$$\vec{V} = \frac{i}{\hbar} [H, \vec{R}]$$

où $\vec{R}(X, Y, Z)$ est l'opérateur vecteur position de la particule.



Page de titre

Sommaire



Page 307 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

1- Calculer V_x, V_y et V_z et montrer que l'opérateur $\vec{V}$ est donné par :

$$\vec{V} = \frac{1}{m}(\vec{P} - q\vec{A})$$

En déduire que $\vec{V}$ est l'opérateur vitesse de la particule.

2- Calculer les commutateurs $[V_x, V_y]$, $[V_y, V_z]$ et $[V_z, V_x]$ et montrer qu'ils peuvent s'écrire sous la forme :

$$[V_x, V_y] = i \frac{\hbar}{m^2} q B_z$$

$$[V_y, V_z] = i \frac{\hbar}{m^2} q e B_x$$

$$[V_z, V_x] = i \frac{\hbar}{m^2} q B_y$$

où B_x, B_y et B_z sont les composantes d'un champ magnétique $\vec{B}$ défini par $\vec{B} = \text{rot } \vec{A}$.

3- On suppose pour toute la suite du problème que le champ magnétique $\vec{B}$ est constant et est dirigé suivant l'axe $\vec{Oz}$ ($\vec{B} = B\vec{k}$) et que le champ électrique est nul ; ceci entraîne que :

$$\Phi = 0, \quad A_z = 0, \quad A_x = -\frac{1}{2}BY \quad \text{et} \quad A_y = +\frac{1}{2}BX$$



Page de titre

Sommaire



Page 308 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

a- Montrer que dans ce cas l'hamiltonien H est la somme de deux hamiltoniens H_{xy} et H_z qui commutent entre eux et qui sont tels que :

$$H_{xy} = \frac{1}{2}m(V_x^2 - V_y^2) \text{ et } H_z = \frac{P_z^2}{2m}$$

b- Donner les fonctions propres $\varphi(z)$ et les énergies propres E_z de H_z .

4- On introduit les opérateurs Q et P définis par :

$$Q = \left(\frac{m^2}{\hbar q B}\right)^{1/2} V_x, \quad P = \left(\frac{m^2}{\hbar q B}\right)^{1/2} V_y \text{ et on pose } \omega = \frac{qB}{m}$$

a- Vérifier que $[Q, P] = i$

b- Ecrire H_{xy} en fonction de Q et P .

c- Sachant que les énergies propres et les fonctions propres de l'hamiltonien $H_x = \frac{P_x^2}{2m} + \frac{1}{2m}\omega^2 X^2$ sont $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$ et $|\varphi_n\rangle$ donner les énergies propres et les fonctions propres de l'hamiltonien total H .

EP 4.16 Ensemble de deux observables qui commutent

On définit dans une certaine représentation les opérateurs A et B par leurs matrices :

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \text{ et } B = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -2i \\ 0 & 2i & 0 \end{pmatrix}$$

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 309 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

1- A et B sont-ils hermitiques ?

2- Montrer que A et B commutent.

3- Trouver les valeurs propres de A et B .

4- Trouver un ensemble de vecteurs propres communs à A et B .

L'ensemble $\{A, B\}$ constitue-il un E.C.O.C. ?


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 310 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

EP 4.17 Distribution de Dirac

La “fonction δ ” de Dirac est définie par :

$$* \quad \delta(x) = \begin{cases} \infty & \text{pour } x = 0 \\ 0 & \text{pour } x \neq 0 \end{cases}$$

$$* \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) dx = 1$$

$$* \quad \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \delta(x) dx = f(0) \quad \text{ou plus généralement}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \delta(x - a) dx = f(a)$$

Pour le physicien, $\delta(x - a)$ représente un pic centré sur le point $x = a$, d'aire égale à l'unité, infiniment étroit et infiniment haut ;

1- Montrer que les fonctions suivantes tendent vers la fonction “fonction δ ” quand

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 311 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#) $\epsilon \rightarrow 0$

a - $\frac{1}{2\epsilon} \exp\left(\frac{-|x|}{\epsilon}\right)$

b - $\frac{1}{\pi} \frac{\epsilon}{x^2 + \epsilon^2}$

c - $\frac{1}{\epsilon\sqrt{\pi}} \exp\left(\frac{-x^2}{\epsilon^2}\right)$

d - $\frac{1}{\pi} \frac{\sin(x/\epsilon)}{x}$

e - $\frac{\epsilon}{\pi} \frac{\sin^2(x/\epsilon)}{x^2}$



Page de titre

Sommaire



Page 312 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

2- Montrer les propriétés suivantes de la fonction “fonction δ ”.

a - $\delta(-x) = \delta(x)$

b - $\delta(\alpha x) = \frac{1}{|\alpha|} \delta(x), \alpha \neq 0$

c - $f(x) \delta(x - a) = f(a) \delta(x - a)$

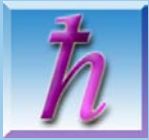
d - $\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - a) \delta(x - b) dx = \delta(a - b)$

e - $\delta(x - x_0) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp ik(x - x_0) dk$

relation connue sous le nom de représentation intégrale de la fonction δ .

f - $\delta(x) = \frac{d\Theta}{dx}$ où $\Theta(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x \geq 0 \\ 0 & \text{si } x < 0 \end{cases}$

$\Theta(x)$ est la fonction d'Heaviside ou fonction escalier.



Page de titre

Sommaire



Page 313 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Chapitre 5

Postulats de la mécanique quantique

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 314 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

En mécanique classique l'état d'une particule à un instant donné est complètement défini lorsqu'on connaît son vecteur position $\vec{r}$ et son vecteur quantité de mouvement $\vec{p}$. De plus comme toutes les grandeurs physiques associées à cette particule s'expriment en fonction de $\vec{r}$ et $\vec{p}$, on peut les mesurer avec toute la précision nécessaire sans perturber le mouvement de la particule. Enfin si l'on connaît les forces qui s'exercent sur la particule en chaque point de l'espace, on peut, en résolvant les équations de Newton prédire sa position et sa vitesse à tout instant ultérieur. Il en est de même pour l'état d'un système matériel qui est complètement déterminé si l'on connaît en fonction du temps la position et la vitesse de chacun de ses points.

A l'échelle quantique nous avons vu qu'on ne peut mesurer simultanément la position et la vitesse de la particule et ce fait ne provient pas de la précision limitée des instruments de mesure mais des propriétés de la nature elle même, exprimées par les relations d'incertitude de Heisenberg. La position et la quantité de mouvement d'une particule ne caractérisent plus son état puisqu'on ne peut plus les mesurer simultanément et définir ainsi une trajectoire.

A la description classique en termes de position et d'impulsion il faut donc substituer une description quantique en termes d'autres données représentatives de l'état du système et des grandeurs physiques qui lui sont associées. Ces données ont déjà été introduites de façon qualitative et partielle dans les trois premiers chapitres : ce sont la fonction d'onde et les opérateurs que nous allons maintenant préciser dans le cadre du formalisme

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 315 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

mathématique développé au chapitre 4.

Cette nouvelle vision, différente de notre manière de pensée classique est construite à partir des postulats de la mécanique quantique qui vont nous permettre de décrire :

- L'état d'un système physique à un instant donné.
- Les grandeurs physiques associées au système et la prédiction du résultat de leur mesure.
- L'évolution du système au cours du temps.
- Les règles de quantification des grandeurs physiques.

Il faut remarquer que la validité de ces postulats et par conséquent celle de la théorie quantique est plus que largement confortée par toutes les expériences effectuées dans les différents domaines de la physique microscopique.

On commencera par énoncer les postulats et on analysera ensuite leur contenu physique et leurs conséquences.



Page de titre

Sommaire



Page 316 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

1. Énoncé des postulats

1.1. Premier postulat : Etat d'un système

L'état d'un système physique est complètement défini à tout instant t par la donnée d'un ket $|\Psi(t)\rangle$ appartenant à l'espace des états ξ . $|\Psi(t)\rangle$ est appelé vecteur d'état.

Comme $|\Psi(t)\rangle$ appartient à l'espace vectoriel ξ il en résulte que les états du système sont linéairement superposables. Ainsi si $|\Psi_1(t)\rangle$ et $|\Psi_2(t)\rangle$ sont deux états possibles d'un système physique, toute combinaison linéaire $\lambda_1 |\Psi_1(t)\rangle + \lambda_2 |\Psi_2(t)\rangle$ est aussi un état du système.

L'état d'un système peut également être défini par les composantes de $|\Psi(t)\rangle$ dans une représentation donnée. Ainsi en représentation $\{|\vec{r}\rangle\}$ la coordonnée $\langle \vec{r} | \Psi(t) \rangle$ qui n'est autre que la fonction d'onde $\Psi(\vec{r}, t)$ définit aussi l'état du système. $\Psi(\vec{r}, t)$ est une fonction de carré sommable qui appartient au sous-espace de Hilbert défini dans le chapitre précédent.

En général la norme de $|\Psi(t)\rangle$ est arbitraire mais il est commode d'utiliser des vecteurs d'état normés, c'est à dire pour lesquels :

$$\langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle = 1 \quad (5.1)$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 317 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

ce qui conduit à :

$$\langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle = \int \langle \Psi(t) | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \Psi(t) \rangle = \int \Psi^*(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t) = 1 \quad (5.2)$$

1.2. Deuxième postulat : Description d'une grandeur physique

En mécanique classique lorsqu'on connaît l'état du système on déduit immédiatement toutes les grandeurs physiques qui lui sont associées car états et grandeurs physiques sont décrits par les mêmes variables dynamiques $\vec{r}(t)$ et $\vec{p}(t)$.

En mécanique quantique état d'un système et grandeurs mesurables sont représentés par des êtres mathématiques différents : alors que l'état est décrit par un vecteur, les grandeurs physiques sont décrites par des opérateurs.

1.3. Troisième postulat : Mesure d'une grandeur physique

1.3.1. Résultat de la mesure

La mesure d'une grandeur physique A ne peut donner comme résultat que l'une des valeurs propres de l'observable A correspondante.

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 318 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

A cause de l'hermiticité de A la mesure donnera toujours une valeur réelle et lorsque le spectre de A est discret les résultats qu'on obtient sont quantifiés.

1.3.2. Prédiction de la mesure

A la différence de la mécanique classique où le résultat de la mesure d'une grandeur physique est toujours certain et reproductible lorsque la mesure se fait dans les mêmes conditions, la mécanique quantique introduit un indéterminisme qui fait que la prédiction de la mesure est de type probabiliste. Cette probabilité dépend à la fois de l'état du système et de la nature du spectre des valeurs propres.

Si l'état $|\Psi\rangle$ du système se confond avec un vecteur propre $|\varphi_n\rangle$ de A correspondant à la valeur propre a_n , le résultat de la mesure de A est certain, c'est a_n . S'il n'en est pas ainsi on ne peut prévoir que statistiquement le résultat de la mesure.

Les postulats qui suivent et qu'on appelle **postulats de décomposition spectrale** donnent les règles qui permettent de calculer la probabilité de cette mesure.



Page de titre

Sommaire



Page 319 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

1.3.2.1. Spectre discret non dégénéré

Lorsqu'on mesure la grandeur physique $\mathcal{A}$ sur un système dans l'état $|\Psi(t)\rangle$, la probabilité d'obtenir comme résultat la valeur propre non dégénérée de l'observable A correspondante est :

$$P(a_n) = |\langle \varphi_n | \Psi \rangle|^2 \quad (5.3)$$

$|\varphi_n\rangle$ étant le vecteur propre normé de A correspondant à la valeur propre a_n

Dans ce cas les $|\varphi_n\rangle$ constituent une base dans ξ et le vecteur d'état s'écrit :

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n |\varphi_n\rangle \quad (5.4)$$

avec $c_n = \langle \varphi_n | \Psi \rangle$

La probabilité $P(a_n)$ peut s'écrire alors :

$$P(a_n) = |c_n|^2 \quad (5.5)$$



Page de titre

Sommaire



Page 320 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

1.3.2.2. Spectre discret dégénéré

Lorsqu'on mesure la grandeur physique $\mathcal{A}$ sur un système dans l'état $|\Psi(t)\rangle$, la probabilité d'obtenir comme résultat la valeur propre dégénérée de l'observable A correspondante est :

$$P(a_n) = \sum_{\alpha=1}^{g_n} |\langle \varphi_n^\alpha | \Psi \rangle|^2 \quad (5.6)$$

g_n est le degré de dégénérescence de la valeur propre a_n et $\{|\varphi_n^\alpha\rangle\}$ ($\alpha = 1, \dots, g_n$) un système orthonormé de vecteurs propres associé à a_n et sous-tendant le sous-espace de dégénérescence ξ_n .

Comme les $\{|\varphi_n^\alpha\rangle\}$ constituent une base dans ξ_n , $|\Psi(t)\rangle$ peut être développé sur cette base et on a :

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n \sum_{\alpha=1}^{g_n} c_n^\alpha |u_n^\alpha\rangle \quad (5.7)$$

avec $c_n^\alpha = \langle \varphi_n^\alpha | \Psi \rangle$
ce qui permet d'écrire $P(a_n)$ sous la forme :

$$P(a_n) = \sum_{\alpha=1}^{g_n} |c_n^\alpha|^2 \quad (5.8)$$



Page de titre

Sommaire



Page 321 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

- $P(a_n)$ est bien sûr indépendante du choix de la base $\{|\varphi_n^\alpha\rangle\}$ dans ξ_n .
On peut d'ailleurs montrer qu'elle n'est autre que le carré du module de la projection de $|\Psi\rangle$ sur ξ_n .

En effet $P(a_n)$ peut s'écrire :

$$\begin{aligned} P(a_n) &= \sum_{\alpha=1}^{g_n} \langle \Psi | \varphi_n^\alpha \rangle \langle \varphi_n^\alpha | \Psi \rangle \\ &= \langle \Psi | \sum_{\alpha} |\varphi_n^\alpha\rangle \langle \varphi_n^\alpha | \Psi \rangle \\ &= \langle \Psi | P_n | \Psi \rangle \end{aligned} \quad (5.9)$$

où $P_n = \sum_{\alpha=1}^{g_n} |\varphi_n^\alpha\rangle \langle \varphi_n^\alpha|$ est le projecteur sur le sous-espace ξ_n .

En se rappelant que P_n est un opérateur hermitique ($P_n = P_n^+$) et que $P_n = P_n^2$ on aura donc :

$$P(a_n) = \langle \psi | P_n^2 | \psi \rangle = \langle \psi | P_n^+ P_n | \psi \rangle = |P_n | \psi \rangle|^2 \quad (5.10)$$

soit encore :

$$P(a_n) = \langle \psi | P_n | \psi \rangle = |P_n | \psi \rangle|^2 \quad (5.11)$$

relation qui est générale et valable dans le cas d'un spectre discret non dégénéré.



Page de titre

Sommaire



Page 322 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

- On peut vérifier aussi que la probabilité totale est égale à 1. Comme $|\Psi\rangle$ est normé on a en effet :

$$P = \sum_n P(a_n) = \sum_n \sum_\alpha |c_\alpha^\alpha|^2 = \langle \psi | \psi \rangle = 1 \quad (5.12)$$

1.3.2.3. Spectre continu non dégénéré.

Lorsqu'on mesure la grandeur physique $\mathcal{A}$ sur un système dans l'état $|\Psi\rangle$, la probabilité $dP(\alpha)$ d'obtenir un résultat compris entre α et $\alpha + d\alpha$ est :

$$dP(\alpha) = |\langle \mathbf{v}_\alpha | \psi \rangle|^2 d\alpha \quad (5.13)$$

$|\mathbf{v}_\alpha\rangle$ étant le vecteur propre correspondant à la valeur propre continue α de l'observable A associée à $\mathcal{A}$.

Les $\{|\mathbf{v}_\alpha\rangle\}$ formant une base continue dans ξ , le vecteur d'état $|\psi\rangle$ s'écrit :

$$|\psi\rangle = \int d\alpha c_\alpha |\mathbf{v}_\alpha\rangle \quad \text{avec} \quad c_\alpha = \langle \mathbf{v}_\alpha | \psi \rangle \quad (5.14)$$

La probabilité $dP(\alpha)$ prend alors la forme suivante :

$$dP(\alpha) = |c_\alpha|^2 d\alpha \quad (5.15)$$

et on a bien évidemment :

$$P = \int dP(\alpha) = \int |c_\alpha|^2 d\alpha = 1 \quad (5.16)$$



Page de titre

Sommaire



Page 323 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

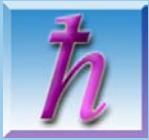
Quitter

1.3.3. Réduction du paquet d'ondes

Les postulats sur la prédiction de la mesure nous enseignent que lorsqu'on connaît l'état $|\Psi(t)\rangle$ du système à un instant donné, on peut prédire les probabilités d'obtenir les divers résultats possibles de mesure d'une grandeur physique. Toutefois lorsqu'on effectue cette mesure, on obtient un seul de ces résultats possibles et immédiatement après la mesure on a une certitude du résultat obtenu qui se traduit par un changement du vecteur d'état du système, qui saute de son état initial à son état compatible avec le résultat de la mesure. La mesure perturbe donc le système.

Si la mesure de $\mathcal{A}$ donne une valeur propre non dégénérée a_n de l'observable A on postule que l'état du système immédiatement après la mesure est le vecteur propre $|\varphi_n\rangle$ associé à a_n . En effet la certitude de la mesure implique une probabilité $P(a_n) = |\langle\Psi | \varphi_n\rangle|^2$ égale à l'unité donc un vecteur d'état $|\Psi\rangle$ qui s'identifie à $|\varphi_n\rangle$.

Si la mesure de $\mathcal{A}$ donne une valeur propre dégénérée a_n de l'observable A , le même raisonnement que précédemment conduit à un état du système qui s'identifie à la combinaison linéaire $\sum_{\alpha} c_n^{\alpha} |\varphi_n^{\alpha}\rangle$ qu'on doit normer, de sorte


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 324 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

que l'état du système immédiatement après la mesure est :

$$| \psi_n \rangle = \frac{\sum_{\alpha} c_n^{\alpha} | \varphi_n^{\alpha} \rangle}{\sqrt{\sum_{\alpha} |c_n^{\alpha}|^2}} \quad (5.17)$$

Comme :

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha} c_n^{\alpha} | \varphi_n^{\alpha} \rangle &= \sum_{\alpha} \langle \varphi_n^{\alpha} | \Psi \rangle | \varphi_n^{\alpha} \rangle \\ &= \sum_{\alpha} | \varphi_n^{\alpha} \rangle \langle \varphi_n^{\alpha} | \Psi \rangle \\ &= P_n | \Psi \rangle \end{aligned} \quad (5.18)$$

et :

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha} |c_n^{\alpha}|^2 &= \sum_{\alpha} \langle \Psi | \varphi_n^{\alpha} \rangle \langle \varphi_n^{\alpha} | \Psi \rangle \\ &= \langle \Psi | P_n | \Psi \rangle \end{aligned} \quad (5.19)$$

On aura alors :

$$| \psi_n \rangle = \frac{P_n | \Psi \rangle}{\sqrt{\langle \Psi | P_n | \Psi \rangle}} \quad (5.20)$$



Page de titre

Sommaire



Page 325 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Le postulat de réduction du paquet d'ondes s'énonce alors ainsi :

Lorsque la mesure de la grandeur physique A sur le système dans l'état $|\Psi\rangle$ donne le résultat a_n , l'état du système immédiatement après la mesure est la projection normée $\frac{P_n |\Psi\rangle}{\sqrt{\langle\Psi|P_n|\Psi\rangle}}$ de $|\Psi\rangle$ sur le sous-espace propre associé à a_n . Si a_n est non dégénérée, cet état est le vecteur propre $|\varphi_n\rangle$ correspondant.

1.4. Quatrième postulat : Evolution dans le temps

En mécanique classique l'évolution au cours du temps du mouvement d'un système de n particules peut être obtenue soit à partir des équations de Lagrange soit à partir des équations de Hamilton-Jacobi qui s'écrivent :

$$\frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \quad (5.21)$$

$$\frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} \quad (5.22)$$

où $\mathcal{H}$ est l'hamiltonien du système et p_i les moments conjugués de chacune des coordonnées généralisées q_i .

Dans le cas d'un système constitué d'une seule particule de masse m soumise à des forces dérivant d'un potentiel $V(\vec{r})$, les q_i sont les



Page de titre

Sommaire



Page 326 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

composantes du vecteur $\vec{r}$ et les p_i sont les composantes du vecteur quantité de mouvement $\vec{p}$.

Comme $\mathcal{H}$ s'écrit :

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}) \quad (5.23)$$

Les équations de Hamilton-Jacobi deviennent :

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = \frac{\vec{p}}{m} \quad (5.24)$$

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = -\vec{\nabla} V(\vec{r}) \quad (5.25)$$

qui ne sont autres que les équations de Newton.

Ces équations permettent donc d'atteindre les évolutions de $\vec{r}$ et de $\vec{p}$ au cours du temps et par la même l'évolution de toutes les grandeurs associées au système.

L'évolution dans le temps de l'état d'un système ou d'une particule est donc régie par les équations de Hamilton-Jacobi ou de Newton. Comme ce sont des équations différentielles du premier ordre, l'état à un instant t quelconque est déterminé de façon unique si on connaît cet état à l'instant initial t_0 .

En mécanique quantique nous avons vu dans les premiers chapitres que l'évolution au cours du temps de l'état quantique d'une particule est décrite par



Page de titre

Sommaire



Page 327 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

l'équations de Schrödinger. Le quatrième postulat généralise ce formalisme à tout système physique et s'énonce comme suit :

L'évolution au cours du temps de l'état d'un système physique est décrite par l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = H(t) |\Psi(t)\rangle \quad (5.26)$$

où $|\Psi(t)\rangle$ est le vecteur d'état du système et $H(t)$ l'observable associée à son énergie totale.

$H(t)$ est appelé opérateur hamiltonien. Pour une particule, il s'écrit en représentation $|\vec{r}\rangle$:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \quad (5.27)$$

L'équation de Schrödinger s'écrit alors dans cette représentation :

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}, t) \right) \Psi(\vec{r}, t) \quad (5.28)$$

1.5. Cinquième postulat : Quantification des grandeurs physiques

Ce postulat indique les règles de construction d'une observable A associée à une grandeur physique $\mathcal{A}$ ayant un équivalent classique. Comme la grandeur



Page de titre

Sommaire



Page 328 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

$\mathcal{A}$ s'exprime en fonction des variables dynamiques $\vec{r}$ et $\vec{p}$, l'observable A s'exprimera en fonction des opérateurs $\vec{R}$ et $\vec{P}$ suivant les règles de quantification suivantes :

-Au vecteur position $\vec{r}(x, y, z)$ de la particule est associée l'observable $\vec{R}(X, Y, Z)$.

-A l'impulsion $\vec{p}(p_x, p_y, p_z)$ de la particule est associée l'observable $\vec{P}(P_X, P_Y, P_Z)$.

-A toute grandeur physique $\mathcal{A}$ définie classiquement est associée une observable A obtenue en remplaçant dans l'expression convenablement symétrisée de $\mathcal{A}$, $\vec{r}$ et $\vec{p}$ par les observables $\vec{R}$ et $\vec{P}$ respectivement.

- En représentation $\{|\vec{r}\rangle\}$, aux coordonnées x, y, z de la particule correspondent les opérateurs X (multiplication par x), Y (multiplication par y) et Z (multiplication par z) et aux composantes p_x, p_y, p_z de $\vec{p}$ correspondent les opérateurs P_x, P_y, P_z tels que :

$$P_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad (5.29)$$

$$P_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \quad (5.30)$$

$$P_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \quad (5.31)$$



Page de titre

Sommaire



Page 329 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

au vecteur $\vec{p}$ correspond alors l'opérateur :

$$\vec{P} = -i\hbar\vec{\nabla} \quad (5.32)$$

- La symétrisation préalable de $\mathcal{A}$ est due à la non commutation des composantes de $\vec{R}$ et $\vec{P}$. Ainsi lorsque l'expression de $\mathcal{A}$ contient à la fois x et p_x , y et p_y , z et p_z sous forme de produit cette symétrisation est nécessaire, dans le cas contraire le remplacement direct est suffisant.

Exemples :

- L'opérateur associé à $\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2$ est :

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2X^2 \quad (5.33)$$

- L'opérateur associé à $\mathcal{A} = xp_x + yp_y$ est :

$$A = \frac{1}{2}(XP_x + P_xX) + \frac{1}{2}(YP_y + P_yY) \quad (5.34)$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 330 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

2. Valeurs moyennes et compatibilité des observables

Les postulats de la mesure introduisent un indéterminisme que ne connaissait pas la mécanique classique. En effet la prédiction du résultat d'une grandeur physique est incertaine et l'état du système est perturbé par la mesure et est décrit par une fonction d'onde qui représente une amplitude de probabilité. On va montrer néanmoins qu'il est possible d'avoir une idée sur le résultat des mesures et sur la dispersion de ces résultats par des considérations probabilistes :

2.1. Valeur moyenne d'une observable

Lorsqu'on mesure la grandeur physique $\mathcal{A}$ sur un grand nombre de systèmes identiques tous dans le même état $|\Psi\rangle$. On définit la valeur moyenne de $\mathcal{A}$ dans cet état comme la moyenne des résultats obtenus et on la note $\langle A \rangle$.

Comme chaque mesure de $\mathcal{A}$ donne, par exemple, dans le cas d'un spectre discret non dégénéré, la valeur propre a_n avec la probabilité $P(a_n)$:


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)


Page 331 de 978

[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

$P(a_n) = |\langle \varphi_n | \Psi \rangle|^2$, $\langle A \rangle$ sera égale à :

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_n a_n P(a_n)}{\sum_n P(a_n)} \quad (5.35)$$

Si le ket $|\Psi\rangle$ est normé, $P(a_n) = \sum_n |c_n|^2 = 1$ et on aura :

$$\langle A \rangle = \sum_n a_n P(a_n) \quad (5.36)$$

Ce résultat peut s'écrire sous une autre forme plus pratique en explicitant $P(a_n)$, on aura :

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \sum_n a_n \langle \Psi | \varphi_n \rangle \langle \varphi_n | \Psi \rangle \\ &= \sum_n \langle \Psi | A | \varphi_n \rangle \langle \varphi_n | \Psi \rangle \\ &= \langle \Psi | A \sum_n | \varphi_n \rangle \langle \varphi_n | \Psi \rangle \\ &= \langle \Psi | A | \Psi \rangle \end{aligned} \quad (5.37)$$

soit :

$$\langle \mathbf{A} \rangle = \langle \Psi | \mathbf{A} | \Psi \rangle \quad (5.38)$$



Page de titre

Sommaire



Page 332 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

$\langle A \rangle$ est la valeur moyenne de A dans l'état $|\Psi\rangle$, c'est une moyenne d'ensemble qu'il ne faut pas confondre avec la moyenne dans le temps.

Remarques :

- Si l'observable A a un spectre continu, le même raisonnement conduit à :

$$\begin{aligned}
 \langle A \rangle &= \int \alpha dP(\alpha) \\
 &= \int \alpha \langle \Psi | v_\alpha \rangle \langle v_\alpha | \Psi \rangle d\alpha \\
 &= \langle \Psi | A \int d\alpha | v_\alpha \rangle \langle v_\alpha | \Psi \rangle \\
 &= \langle \Psi | A | \Psi \rangle
 \end{aligned} \tag{5.39}$$

- Si le ket $|\Psi\rangle$ n'est pas normé on aura :

$$\langle A \rangle = \frac{\langle \Psi | A | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \tag{5.40}$$

- Pour calculer $\langle A \rangle$ on se place en général dans une représentation donnée. Ainsi dans la représentation $\{|\vec{r}\rangle\}$ on aura pour les valeurs moyennes de X et P_x :

$$\langle X \rangle = \langle \Psi | X | \Psi \rangle = \int \Psi^*(x) x \Psi(x) dx \tag{5.41}$$

$$\langle P_x \rangle = \langle \Psi | P_x | \Psi \rangle = \int \Psi^*(x) \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) dx \tag{5.42}$$



Page de titre

Sommaire



Page 333 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

2.2. Ecart quadratique moyen

La valeur moyenne $\langle A \rangle$ donne l'ordre de grandeur de la valeur de A lorsque le système est dans l'état $|\Psi\rangle$ mais ne nous donne aucune information sur la dispersion des résultats.

Pour avoir cette information, on pourrait par exemple prendre pour chaque mesure de A , la différence entre la valeur obtenue et $\langle A \rangle$; on calculera ensuite la moyenne de ces écarts en divisant leur somme par le nombre d'expériences; mais cela conduit à un résultat nul car à cause de la définition même de $\langle A \rangle$ les écarts positifs compensent les écarts négatifs et on a évidemment : $\langle A - \langle A \rangle \rangle = 0$.

Pour pallier cette difficulté et éviter cette compensation. On définit un écart ΔA de telle façon que $(\Delta A)^2$ soit la moyenne des carrés des écarts c'est à dire :

$$(\Delta A)^2 = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle \quad (5.43)$$

ΔA est appelé écart quadratique moyen qu'on définit par :

$$\Delta A = \sqrt{\langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle} \quad (5.44)$$

ou encore :

$$\Delta A = \sqrt{\langle \Psi | (A - \langle A \rangle)^2 | \Psi \rangle} \quad (5.45)$$



Page de titre

Sommaire



Page 334 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

$(\Delta A)^2$ est appelé variance du système.

D'autre part on a :

$$\begin{aligned}\langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle &= \langle (A - 2A \langle A \rangle + \langle A \rangle^2) \rangle \\ &= \langle A^2 \rangle - 2 \langle A \rangle^2 + \langle A \rangle^2 \\ &= \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2\end{aligned}\tag{5.46}$$

Ce qui donne :

$$\Delta A = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}\tag{5.47}$$

2.3. Relations d'Heisenberg

Considérons un système physique dans l'état $|\Psi\rangle$ et deux observables A et B qui ne commutent pas ($[A, B] \neq 0$).

D'après précédemment on a :

$$\begin{aligned}(\Delta A)^2 &= \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \\ (\Delta B)^2 &= \langle (B - \langle B \rangle)^2 \rangle = \langle B^2 \rangle - \langle B \rangle^2\end{aligned}\tag{5.48}$$

Introduisons les opérateurs A' et B' définis par :

$$A' = A - \langle A \rangle \quad \text{et} \quad B' = B - \langle B \rangle\tag{5.49}$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 335 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

A' et B' représentent l'écart des opérateurs A et B par rapport à leur valeur moyenne. Comme $\langle A \rangle$ et $\langle B \rangle$ sont des scalaires on a : $[A', B'] = [A, B]$

Considérons le vecteur $|\Psi'\rangle$ transformé de $|\Psi\rangle$ par l'application de l'opérateur $\lambda A' + iB'$ où λ est un paramètre réel quelconque :

$$|\Psi'\rangle = (\lambda A' + iB') |\Psi\rangle \quad (5.50)$$

On a :

$$\begin{aligned} \langle \Psi' | \Psi' \rangle &= \langle \Psi | (\lambda A' - iB') (\lambda A' + iB') | \Psi \rangle \\ &= \langle A'^2 \rangle \lambda^2 + i [A', B'] \lambda + \langle B'^2 \rangle \end{aligned} \quad (5.51)$$

$\langle \Psi' | \Psi' \rangle$ étant une quantité positive, le polynôme du second degré en λ doit être toujours positif ou nul. Pourqu'il en soit toujours ainsi quelque soit λ il faut que son discriminant soit négatif, c'est à dire :

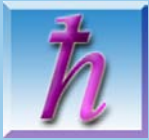
$$(i \langle [A', B'] \rangle)^2 - 4 \langle A'^2 \rangle \langle B'^2 \rangle \leq 0 \quad (5.52)$$

soit :

$$\langle A'^2 \rangle \langle B'^2 \rangle \geq \frac{1}{4} (i \langle [A', B'] \rangle)^2 \quad (5.53)$$

ou encore :

$$\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [A', B'] \rangle| \quad (5.54)$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 336 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

En appliquant cette inégalité aux composantes des observables $\vec{R}$ et $\vec{P}$ qui sont telles que :

$$[X, P_x] = [Y, P_y] = [Z, P_z] = i\hbar \quad (5.55)$$

On obtient :

$$\Delta X . \Delta P_x \geq \frac{\hbar}{2} \quad (5.56)$$

$$\Delta Y . \Delta P_y \geq \frac{\hbar}{2} \quad (5.57)$$

$$\Delta Z . \Delta P_z \geq \frac{\hbar}{2} \quad (5.58)$$

Ces trois inégalités constituent **les inégalités spatiales d'Heisenberg**.

On ne peut donc définir avec précision à la fois position et impulsion de la particule, d'où l'impossibilité de déterminer une trajectoire car cela implique la connaissance exacte de x, y, z et de leurs dérivées.

On est tenté d'appliquer le même type d'inégalité au couple énergie (E) et temps (t), mais bien que cela conduise à la quatrième relation d'Heisenberg ($\Delta E . \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$) la démonstration est fautive car à la différence de l'énergie le temps n'est pas une observable en mécanique quantique. La quantité Δt s'interprète simplement comme la durée du temps nécessaire pour que l'énergie du système varie de manière appréciable.



Page de titre

Sommaire



Page 337 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

2.4. Observables compatibles et incompatibles

Pour simplifier, supposons que l'espace des états est à deux dimensions et considérons deux observables A et B . Soient a_1, a_2 et $|a_1\rangle, |a_2\rangle$ les valeurs propres et les vecteurs propres de A et b_1, b_2 et $|b_1\rangle, |b_2\rangle$ ceux de B .

- Si A et B ne commutent pas les vecteurs propres de A et B ne coïncident pas. Ainsi si une mesure de A dans l'état $|\Psi\rangle$ a donné a_1 , le système passe alors dans l'état $|a_1\rangle$; $|a_1\rangle$ n'étant colinéaire ni à $|b_1\rangle$ ni à $|b_2\rangle$, si nous mesurons B il est impossible de prévoir si le résultat de la mesure sera b_1 ou b_2 . Si le résultat est b_2 le système saute dans l'état $|b_2\rangle$. Si de nouveau on mesure A le résultat est imprévisible puisque $|b_2\rangle$ n'est colinéaire ni à $|a_1\rangle$ ni à $|a_2\rangle$.

La mesure de B nous a fait perdre toutes les informations que nous avons obtenues sur A lors de la première mesure : Les observables A et B sont dites incompatibles. C'est à dire qu'on ne peut les mesurer simultanément.

- Si au contraire A et B commutent $|a_1\rangle$ coïncide avec $|b_1\rangle$ et $|a_2\rangle$ avec $|b_2\rangle$. Si la mesure de A a donné a_1 , l'état du système passe à $|a_1\rangle$, $|a_1\rangle$ étant aussi vecteur propre de B , la mesure de B donne b_1 avec certitude et ne modifie pas le vecteur d'état, de sorte qu'une nouvelle mesure de A redonne a_1 .

La mesure de B n'a pas fait perdre les informations acquises sur A . Les deux observables A et B sont dites compatibles, c'est à dire

[Page de titre](#)[Sommaire](#)

Page 338 de 978

[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

mesurables simultanément.



Page de titre

Sommaire



Page 339 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

3. Conservation de la probabilité et lien avec la mécanique classique

L'équation de Schrödinger joue un rôle fondamental en mécanique quantique car elle régit l'évolution dans le temps des systèmes physiques et est à l'origine de la conservation de la probabilité et du lien avec la mécanique classique.

3.1. Conservation de la norme du vecteur d'état

La norme du vecteur d'état $|\Psi(t)\rangle$ se conserve au cours du temps.

En effet, dérivons le carré de la norme par rapport au temps :

$$\frac{d}{dt} \langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle = \frac{d\langle \Psi(t) |}{dt} | \Psi(t) \rangle + \langle \Psi(t) | \frac{d}{dt} | \Psi(t) \rangle \quad (5.59)$$

comme :

$$H | \Psi(t) \rangle = i\hbar \frac{d}{dt} | \Psi(t) \rangle \quad (5.60)$$

on a :

$$\langle \Psi(t) | H^\dagger = -i\hbar \frac{d\langle \Psi(t) |}{dt} \quad (5.61)$$



Page de titre

Sommaire



Page 340 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

l'hamiltonien H étant hermitique ($H^+ = H$) on a :

$$\frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = \frac{1}{i\hbar} H |\Psi(t)\rangle \quad (5.62)$$

$$\frac{d}{dt} \langle \Psi(t) | = -\frac{1}{i\hbar} \langle \Psi(t) | H \quad (5.63)$$

ce qui donne :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle &= -\frac{1}{i\hbar} \langle \Psi(t) | H | \Psi(t) \rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle \Psi(t) | H | \Psi(t) \rangle \\ &= 0 \end{aligned} \quad (5.64)$$

qui implique que :

$$\langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle = \text{constante} \quad (5.65)$$

comme le vecteur d'état du système est en général normé, on aura :

$$\langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle = 1 \quad (5.66)$$

La conservation de la norme est indispensable à l'interprétation du carré du module $|\Psi(\vec{r}, t)|^2$ de la fonction d'onde d'une particule comme sa densité de probabilité de présence au point $\vec{r}$ et à l'instant t , ce qui s'exprime par :

$$\langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle = \int |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r = 1 \quad (5.67)$$



Page de titre

Sommaire



Page 341 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

3.2. Conservation locale de la probabilité

3.2.1. Densité et courant de probabilité

Considérons une particule dont l'état est décrit par $|\Psi(t)\rangle$.
D'après la relation $\int |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r = 1$ et en posant :

$$|\Psi(\vec{r}, t)|^2 = \rho(\vec{r}, t) \quad (5.68)$$

on a :

$$\int \rho(\vec{r}, t) d^3r = 1 \quad (5.69)$$

$\rho(\vec{r}, t)$ est une densité de probabilité et la probabilité $dP(\vec{r}, t)$ de trouver la particule à l'instant t dans le volume élémentaire d^3r situé au point $\vec{r}$ est :

$$dP(\vec{r}, t) = \rho(\vec{r}, t) d^3r \quad (5.70)$$

La relation (5.69) exprime la conservation globale de la probabilité, il doit donc lui correspondre une équation de conservation locale pour la densité de probabilité. Cette situation se rencontre dans de nombreux domaines de la physique où à la loi de conservation globale d'une grandeur physique correspond une loi de conservation locale pour sa densité. C'est le cas par exemple de la conservation totale de la charge électrique à laquelle



Page de titre

Sommaire



Page 342 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

correspond une loi de conservation locale de la densité de charges qui s'exprime par :

$$\frac{\partial \rho(\vec{r}, t)}{\partial t} + \text{div } \vec{J}(\vec{r}, t) = 0 \quad (5.71)$$

où $\vec{J}(\vec{r}, t)$ est le vecteur densité de courant et $\rho(\vec{r}, t)$ la densité volumique de charges.

On va montrer qu'on peut définir un vecteur $\vec{J}(\vec{r}, t)$ appelé courant de probabilité qui satisfait une équation locale. Pour ce faire écrivons en représentation $\{|\vec{r}\rangle\}$ l'équation de Schrödinger et son complexe conjugué pour une particule plongée dans un potentiel $V(\vec{r}, t)$. On a alors :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t) \quad (5.72)$$

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi^*(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi^*(\vec{r}, t) + V(\vec{r}, t) \Psi^*(\vec{r}, t) \quad (5.73)$$

En multipliant la première équation par $\Psi^*(\vec{r}, t)$ et la deuxième par $\Psi(\vec{r}, t)$ et en faisant la différence il vient :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} [\Psi(\vec{r}, t) \Psi^*(\vec{r}, t)] = -\frac{\hbar^2}{2m} [\Psi^*(\vec{r}, t) \Delta \Psi(\vec{r}, t) - \Psi(\vec{r}, t) \Delta \Psi^*(\vec{r}, t)] \quad (5.74)$$



Page de titre

Sommaire



Page 343 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

soit encore :

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{r}, t) + \frac{\hbar}{2im} [\Psi^*(\vec{r}, t) \Delta \Psi(\vec{r}, t) - \Psi(\vec{r}, t) \Delta \Psi^*(\vec{r}, t)] = 0 \quad (5.75)$$

En comparant avec (5.71) on en déduit que :

$$\text{div } \vec{J}(\vec{r}, t) = \frac{\hbar}{2im} [\Psi^*(\vec{r}, t) \Delta \Psi(\vec{r}, t) - \Psi(\vec{r}, t) \Delta \Psi^*(\vec{r}, t)] \quad (5.76)$$

où $\vec{J}(\vec{r}, t)$ peut être interprété comme un courant de probabilité.

L'expression entre crochet dans le second membre de (5.76) peut s'écrire :

$$\Psi^* \Delta \Psi - \Psi \Delta \Psi^* = \vec{\nabla} (\Psi^* \vec{\nabla} \Psi - \Psi \vec{\nabla} \Psi^*) \quad (5.77)$$

car $\vec{\nabla} (f \vec{\nabla} g) = (\vec{\nabla} f)(\vec{\nabla} g) + f \Delta g$, ce qui conduit à :

$$\text{div } \vec{J}(\vec{r}, t) = \frac{\hbar}{2im} \text{div} [\Psi^*(\vec{r}, t) \vec{\nabla} \Psi(\vec{r}, t) - \Psi(\vec{r}, t) \vec{\nabla} \Psi^*(\vec{r}, t)] \quad (5.78)$$

soit pour le courant de probabilité $\vec{J}(\vec{r}, t)$:

$$\vec{J}(\vec{r}, t) = \frac{\hbar}{2im} [\Psi^*(\vec{r}, t) \vec{\nabla} \Psi(\vec{r}, t) - \Psi(\vec{r}, t) \vec{\nabla} \Psi^*(\vec{r}, t)] \quad (5.79)$$



Page de titre

Sommaire



Page 344 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

3.2.2. Opérateurs associés à la densité et au courant de probabilité

- La densité de probabilité s'écrit :

$$\rho(\vec{r}, t) = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 = \langle \Psi(t) | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \Psi(t) \rangle \quad (5.80)$$

$\rho(\vec{r}, t)$ apparaît comme la valeur moyenne de l'opérateur ρ défini par :

$$\rho = |\vec{r}\rangle \langle \vec{r}| \quad (5.81)$$

ρ est appelé opérateur densité de probabilité.

- Le courant de probabilité peut s'écrire sous la forme :

$$\vec{J}(\vec{r}, t) = \frac{1}{2m} \left[\langle \Psi | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \vec{P} + \vec{P} | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \Psi \rangle \right] \quad (5.82)$$

car : $\vec{P} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$ et $\Psi(\vec{r}, t) = \langle \vec{r} | \Psi \rangle$

$\vec{J}(\vec{r}, t)$ apparaît donc comme la valeur moyenne de l'opérateur $\vec{J}$ défini par :

$$\begin{aligned} \vec{J} &= \frac{1}{2m} \left[|\vec{r}\rangle \langle \vec{r} | \vec{P} + \vec{P} | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \right] \\ &= \frac{1}{m} \left[|\vec{r}\rangle \langle \vec{r} | \vec{P} | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \right] \end{aligned} \quad (5.83)$$

$\vec{J}$ est appelé opérateur courant de probabilité.



Page de titre

Sommaire



Page 345 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

3.3. Lien avec la mécanique classique

3.3.1. Evolution des valeurs moyennes

Considérons une observable A et un système dans l'état normé $|\Psi(t)\rangle$. La valeur moyenne $\langle A \rangle = \langle \Psi | A | \Psi \rangle$ peut varier au cours du temps car d'une part le vecteur d'état $|\Psi(t)\rangle$ dépend du temps et d'autre part l'observable A peut être une fonction explicite du temps.

L'évolution de $\langle A \rangle$ s'obtient en dérivant son expression par rapport au temps ; on a :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle A \rangle &= \frac{d}{dt} (\langle \Psi(t) | A | \Psi(t) \rangle) \\ &= \left(\frac{d\langle \Psi |}{dt} \right) A | \Psi \rangle + \langle \Psi | A | \left(\frac{d | \Psi \rangle}{dt} \right) + \langle \Psi | \frac{\partial A}{\partial t} | \Psi \rangle \end{aligned} \quad (5.84)$$

En utilisant (5.62) et (5.63) il vient :

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle \Psi | AH - HA | \Psi \rangle + \langle \Psi | \frac{\partial A}{\partial t} | \Psi \rangle \quad (5.85)$$

soit en définitive :

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [A, H] \rangle + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle \quad (5.86)$$



Page de titre

Sommaire



Page 346 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Si l'observable A ne dépend pas explicitement du temps on aura :

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [A, H] \rangle \quad (5.87)$$

Les équations (5.86) et (5.87) constituent le **théorème d'Ehrenfest**.

3.3.2. Application aux observables position et impulsion ($\vec{R}$ et $\vec{P}$)

Considérons le cas d'une particule de masse m en mouvement sous l'action de forces dérivant d'un potentiel scalaire indépendant du temps $V(\vec{r})$. L'hamiltonien de la particule est donc :

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(\vec{R}) \quad (5.88)$$

Examinons alors l'évolution des valeurs moyennes des observables $\vec{R}$ et $\vec{P}$ qui ne dépendent pas explicitement du temps :

On a :

$$\frac{d}{dt} \langle \vec{R} \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [\vec{R}, H] \rangle = \frac{1}{i\hbar} [\vec{R}, \frac{\vec{P}^2}{2m}] \quad (5.89)$$

$$\frac{d}{dt} \langle \vec{P} \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [\vec{P}, H] \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [\vec{P}, V(\vec{R})] \rangle \quad (5.90)$$



Page de titre

Sommaire



Page 347 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Les règles de commutation nous permettent de calculer facilement le commutateur $[\vec{R}, \frac{\vec{P}^2}{2m}]$ qu'on trouve égal à :

$$[\vec{R}, \frac{\vec{P}^2}{2m}] = \frac{i\hbar}{m} \vec{P} \quad (5.91)$$

car : $[R_i, P_i^n] = i\hbar n P_i^{n-1}$ (R_i et P_i étant les composantes de $\vec{R}$ et $\vec{P}$)

Quant au commutateur $[\vec{P}, V(\vec{R})]$ on l'obtient en développant $V(\vec{R})$ en série entière de $\vec{R}$ et en utilisant la relation $[P_i, R_i^n] = -i\hbar n R_i^{n-1}$.

On obtient alors :

$$\frac{d}{dt} \langle \vec{R} \rangle = \frac{\langle P \rangle}{m} \quad (5.92)$$

$$\frac{d}{dt} \langle \vec{P} \rangle = - \langle \vec{\nabla} V(\vec{R}) \rangle \quad (5.93)$$

Ces deux relations ne sont autres que les équations de Newton pour les valeurs moyennes.

En mécanique classique ces équations s'écrivent en effet pour une particule soumise à une force $\vec{F}$ dérivant d'un potentiel $V(\vec{r})$:

$$m \frac{d\vec{r}}{dt} = \frac{\vec{p}}{m} = \vec{v} \quad (5.94)$$

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = \vec{F} = -\vec{\nabla} V(\vec{r}) \quad (5.95)$$



Page de titre

Sommaire



Page 348 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Ce qui montre que :

Les valeurs moyennes des observables obéissent aux équations classiques.

3.4. Importance de l'amplitude de probabilité

Considérons un système physique décrit par l'état $|\psi\rangle$ qui est une superposition linéaire des états $|\psi_1\rangle$ et $|\psi_2\rangle$, c'est à dire que l'on a :

$$|\psi\rangle = \lambda_1 |\psi_1\rangle + \lambda_2 |\psi_2\rangle \quad (5.96)$$

La probabilité de trouver le système dans l'état $|\psi_1\rangle$ est donc $|\lambda_1|^2$ et la probabilité de le trouver dans l'état $|\psi_2\rangle$ est $|\lambda_2|^2$.

Si on mesure une grandeur physique $\mathcal{A}$ associée au système. Les résultats de la mesure sont les valeurs propres a_n de l'observable A correspondante. Dans l'hypothèse où a_n est une valeur propre non dégénérée correspondant au vecteur propre $|\varphi_n\rangle$:

La probabilité de trouver a_n quand le système est dans l'état $|\psi_1\rangle$ est $\mathcal{P}_1(a_n) = |\langle \varphi_n | \psi_1 \rangle|^2 = |\alpha_1|^2$

La probabilité de trouver a_n quand le système est dans l'état $|\psi_2\rangle$ est $\mathcal{P}_2(a_n) = |\langle \varphi_n | \psi_2 \rangle|^2 = |\alpha_2|^2$

Si le système est dans l'état $|\psi\rangle$ on est tenté de dire que la probabilité de



Page de titre

Sommaire



Page 349 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

trouver comme résultat de la mesure de $\mathcal{A}$ la valeur propre a_n est :

$$\mathcal{P}(a_n) = |\lambda_1|^2 \mathcal{P}_1(a_n) + |\lambda_2|^2 \mathcal{P}_2(a_n) = |\lambda_1|^2 |\alpha_1|^2 + |\lambda_2|^2 |\alpha_2|^2 \quad (5.97)$$

C'est à dire la probabilité que le système soit dans l'état $|\psi_1\rangle$ multiplié par la probabilité que dans $|\psi_1\rangle$ on a le résultat a_n , augmenté de la même quantité relative au système dans l'état $|\psi_2\rangle$.

Ceci est complètement faux car :

On doit toujours commencer par calculer l'amplitude de probabilité.

En effet, la probabilité de trouver a_n dans l'état $|\psi\rangle$ est :

$$\mathcal{P}(a_n) = |\langle \varphi_n | \psi \rangle|^2 \quad (5.98)$$

avec

$$\begin{aligned} \langle \varphi_n | \psi \rangle &= \lambda_1 \langle \varphi_n | \psi_1 \rangle + \lambda_2 \langle \varphi_n | \psi_2 \rangle \\ &= \lambda_1 \alpha_1 + \lambda_2 \alpha_2 \end{aligned} \quad (5.99)$$

soit :

$$\mathcal{P}(a_n) = |\lambda_1|^2 |\alpha_1|^2 + |\lambda_2|^2 |\alpha_2|^2 + \lambda_1^* \lambda_2 \alpha_1^* \alpha_2 + \lambda_1 \lambda_2^* \alpha_1 \alpha_2^* \quad (5.100)$$

Le premier raisonnement, qui parait par ailleurs logique, élimine le terme d'interférence qui est capital. C'est pourquoi le calcul de l'amplitude de probabilité $\langle \varphi_n | \psi \rangle$ doit être effectué en premier.



Page de titre

Sommaire



Page 350 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

4. Systèmes conservatifs

En mécanique classique lorsque les forces appliquées à un système matériel dérivent toutes d'un potentiel, il y a conservation de l'énergie mécanique et les forces sont dites conservatives. On dit aussi que l'énergie est une constante du mouvement.

En mécanique quantique un système est dit conservatif lorsque son hamiltonien H ne dépend pas explicitement du temps. On va voir qu'un tel système possède des propriétés particulières du point de vue de son évolution et de la mesure des observables qui lui sont associées

4.1. Résolution de l'équation de Schrödinger

Supposons pour simplifier que le spectre du hamiltonien est discret et non dégénéré, c'est à dire qu'on a :

$$H | \varphi_n \rangle = E_n | \varphi_n \rangle \quad (5.101)$$

Les énergies propres et états propres E_n et $| \varphi_n \rangle$ sont indépendants du temps et les $| \varphi_n \rangle$ forment un système complet, l'état $| \Psi(t) \rangle$ est donc :

$$| \Psi(t) \rangle = \sum_m c_m(t) | \varphi_m \rangle \quad (5.102)$$



Page de titre

Sommaire



Page 351 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Toute la dépendance temporelle de $|\Psi(t)\rangle$ est donc contenue dans les coefficients du développement $c_m(t)$.

L'équation de Schrödinger décrivant l'évolution du système est :

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = H |\Psi(t)\rangle \quad (5.103)$$

En la projetant sur chacun des états $|\varphi_n\rangle$, il vient :

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \varphi_n | \Psi(t) \rangle = \langle \varphi_n | H | \Psi(t) \rangle \quad (5.104)$$

soit :

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} c_n(t) &= \sum_m \langle \varphi_n | H | \varphi_m \rangle c_m(t) \\ &= \sum_m E_m \langle \varphi_n | \varphi_m \rangle c_m(t) \\ &= \sum_m E_m \delta_{nm} c_m(t) \end{aligned} \quad (5.105)$$

soit encore :

$$i\hbar \frac{d}{dt} c_n(t) = E_n c_n(t) \quad (5.106)$$



Page de titre

Sommaire



Page 352 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Cette équation donne après intégration :

$$c_n(t) = c_n(0) \exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right) \quad (5.107)$$

L'évolution de $|\Psi(t)\rangle$ au cours du temps est donc simple :

Si à l'instant $t = 0$ le système est dans l'état :

$$|\Psi(0)\rangle = \sum_m c_m(0) |\varphi_m\rangle \quad (5.108)$$

A l'instant t le système sera dans l'état :

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_m c_m(0) \exp\left(-\frac{iE_m t}{\hbar}\right) |\varphi_m\rangle \quad (5.109)$$

chaque facteur du développement est multiplié par un facteur de phase $\exp\left(-\frac{iE_m t}{\hbar}\right)$ qui dépend de l'énergie E_m correspondant à $|\varphi_m\rangle$.

Si l'instant initial correspond à $t = t_0$ et non à $t = 0$ c'est à dire si l'on a :

$$|\Psi(t_0)\rangle = \sum_m c_m(t_0) |\varphi_m\rangle \quad (5.110)$$

A l'instant t le système sera dans l'état :

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_m c_m(t_0) \exp\left(-\frac{iE_m}{\hbar}(t - t_0)\right) |\varphi_m\rangle \quad (5.111)$$



Page de titre

Sommaire



Page 353 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Le même raisonnement s'effectue dans le cas où le spectre de H est continu et conduit à :

$$| \Psi(t) \rangle = \int dE [c(E, t_0) \exp(-\frac{iE}{\hbar}(t - t_0)) | \varphi_E \rangle] \quad (5.112)$$

4.2. Etats stationnaires

Si l'état $| \Psi(t_0) \rangle$ est un état propre de H , son développement ne fait intervenir que des états propres de H de même valeur propre. Ainsi si la valeur propre est E_k par exemple, tous les coefficients du développement sont nuls sauf c_k c'est à dire qu'on a :

$$c_{n \neq k}(t_0) = 0 \quad \text{et} \quad c_k(t_0) = 1 \quad (5.113)$$

A un instant t ultérieur à t_0 , la mesure de l'énergie donnera sûrement E_k et le ket $| \Psi(t) \rangle$ est tel que :

$$| \Psi(t) \rangle = \exp(-\frac{iE_k}{\hbar}(t - t_0)) | \Psi(t_0) \rangle \quad (5.114)$$

$| \Psi(t) \rangle$ et $| \Psi(t_0) \rangle$ ne diffèrent donc que d'un facteur de phase et le système se trouve dans le même état propre de H avec la même énergie E_k . On dit dans ce cas que le système est dans un état stationnaire.



Page de titre

Sommaire



Page 354 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

4.3. Constantes du mouvement et bons nombres quantiques

On appelle constante du mouvement toute observable A qui ne dépend pas explicitement du temps et qui commute avec l'hamiltonien H .

$$\frac{\partial}{\partial t} A = 0 \quad \text{et} \quad [A, H] = 0 \quad (5.115)$$

Si le système est conservatif, H est lui-même une constante du mouvement et on peut trouver un système de vecteurs propres communs à A et à H . On aura :

$$H | \varphi_n \rangle = E_n | \varphi_n \rangle \quad (5.116)$$

$$A | \varphi_n \rangle = a_n | \varphi_n \rangle \quad (5.117)$$

Si à l'instant t_0 on mesure A et qu'on trouve a_n , immédiatement après la mesure le système saute à l'état $| \varphi_n \rangle$, $| \varphi_n \rangle$ étant également état propre de H est un état stationnaire. A un instant ultérieur t le système sera toujours dans l'état $| \varphi_n \rangle$ et une nouvelle mesure de A redonnera a_n avec certitude. a_n est appelé un **bon nombre quantique**.



Page de titre

Sommaire



Page 355 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

4.4. Evolution des valeurs moyennes des grandeurs physiques

Comme l'état du système est décrit par :

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_m c_m(t_0) e^{-\frac{iE_m}{\hbar}(t-t_0)} |\varphi_n\rangle \quad (5.118)$$

On peut calculer explicitement la valeur moyenne d'une grandeur physique A dans cet état. On a :

$$\begin{aligned} \langle A(t) \rangle &= \langle \Psi(t) | A | \Psi(t) \rangle \\ &= \left[\sum_m c_m^*(t_0) e^{\frac{iE_m}{\hbar}(t-t_0)} \langle \varphi_m | \right] A \left[\sum_n c_n(t_0) e^{-\frac{iE_n}{\hbar}(t-t_0)} |\varphi_n\rangle \right] \\ &= \sum_m \sum_n c_m^*(t_0) c_n(t_0) \langle \varphi_m | A | \varphi_n \rangle e^{-\frac{i(E_m - E_n)}{\hbar}(t-t_0)} \end{aligned} \quad (5.119)$$

$\langle \varphi_m | A | \varphi_n \rangle$ sont les éléments de matrice A_{mn} de la matrice A dans la base $\{|\varphi_n\rangle\}$ et sont constants lorsque A ne dépend pas explicitement du temps. $\langle A(t) \rangle$ s'écrit donc :

$$\langle A(t) \rangle = \sum_m \sum_n c_m^*(t_0) c_n(t_0) A_{mn} e^{-\frac{i(E_m - E_n)}{\hbar}(t-t_0)} \quad (5.120)$$

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 356 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

Cette expression montre que l'évolution de $\langle A(t) \rangle$ est décrite par une série de termes oscillant aux fréquences $\nu_{mn} = \frac{E_m - E_n}{\hbar}$. Ces fréquences appelées fréquences de Bohr sont caractéristiques du système et indépendants de A . Ainsi pour un atome par exemple, les valeurs moyennes des diverses grandeurs qui lui sont associées oscillent aux diverses fréquences de Bohr et on comprend pourquoi le rayonnement émis par l'atome ne comprend que ces fréquences, ce qui explique intuitivement la relation de Bohr reliant les fréquences spectrales émises ou absorbées aux différentes énergies atomiques.

On remarque aussi à partir de cette relation que chaque fréquence ν_{mn} intervient avec un poids qui dépend de l'élément de matrice A_{mn} ; ainsi si $A_{mn} = 0$ la fréquence ν_{mn} est absente du spectre d'où les règles de sélection des divers types de transitions reposent sur l'étude des éléments non diagonaux des observables.


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 357 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

5. Opérateur d'évolution

5.1. Définition

L'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{d}{dt} | \Psi(t) \rangle = H | \Psi(t) \rangle \quad (5.121)$$

permet d'écrire :

$$d | \Psi(t) \rangle = | \Psi(t + dt) \rangle - | \Psi(t) \rangle = -\frac{i}{\hbar} H | \Psi(t) \rangle dt \quad (5.122)$$

soit :

$$| \Psi(t + dt) \rangle = (1 - \frac{i}{\hbar} H dt) | \Psi(t) \rangle \quad (5.123)$$

En posant :

$$(1 - \frac{i}{\hbar} H dt) = U(t + dt, t) \quad (5.124)$$

il vient :

$$| \Psi(t + dt) \rangle = U(t + dt, t) | \Psi(t) \rangle \quad (5.125)$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 358 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

H étant hermitique l'opérateur $U(t + dt, t)$ est un opérateur unitaire infinitésimal ($U = 1 + i\varepsilon F$).

Si on considère un intervalle de temps fini $[t_0, t]$ on peut le diviser en un très grand nombre d'intervalles infinitésimaux correspondant à des opérateurs unitaires infinitésimaux U_i .

Le passage de l'état $|\Psi(t_0)\rangle$ à l'état $|\Psi(t)\rangle$ s'effectue par un produit de ces transformations infinitésimales et on aura :

$$|\Psi(t)\rangle = \Pi_i U_i |\Psi(t_0)\rangle \quad (5.126)$$

Comme le produit de deux opérateurs unitaires est unitaire le produit total $\Pi_i U_i$ est un opérateur unitaire qu'on note $U(t, t_0)$ de sorte que l'on a :

$$|\Psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\Psi(t_0)\rangle \quad (5.127)$$

$U(t, t_0)$ est appelé opérateur d'évolution et on a bien sûr $U(t_0, t_0) = 1$

L'équation de Schrödinger s'écrit alors :

$$i\hbar \frac{d}{dt}(U(t, t_0) |\Psi(t_0)\rangle) = HU(t, t_0) |\Psi(t_0)\rangle \quad (5.128)$$

ce qui nous permet d'atteindre l'évolution de $U(t, t_0)$ par l'équation :

$$i\hbar \frac{d}{dt}U(t, t_0) = HU(t, t_0) \quad (5.129)$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 359 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

Lorsque l'hamiltonien H ne dépend pas du temps, cette équation s'intègre facilement pour donner :

$$U(t, t_0) = e^{-\frac{iH}{\hbar}(t-t_0)} \quad (5.130)$$

On peut avec cette transformation retrouver l'expression (5.111) donnant l'évolution de $|\Psi(t)\rangle$:

En effet si :

$$|\Psi(t_0)\rangle = \sum_n c_n(t_0) |\varphi_n\rangle \quad (5.131)$$

il vient :

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t_0) \exp\left(-\frac{iH}{\hbar}(t-t_0)\right) |\varphi_n\rangle \quad (5.132)$$

or

$$\begin{aligned} \exp\left(-\frac{iH}{\hbar}(t-t_0)\right) |\varphi_n\rangle &= \sum_k \left[-\frac{iH(t-t_0)}{\hbar} \right]^k \frac{1}{k!} |\varphi_n\rangle \\ &= \sum_k \left[-\frac{i(t-t_0)}{\hbar} \right]^k \frac{1}{k!} H^k |\varphi_n\rangle \end{aligned} \quad (5.133)$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 360 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

comme

$$H |\varphi_n\rangle = E_n |\varphi_n\rangle \quad (5.134)$$

on a :

$$H^k |\varphi_n\rangle = E_n^k |\varphi_n\rangle \quad (5.135)$$

ce qui donne :

$$\begin{aligned} \exp\left(-\frac{iH}{\hbar}(t-t_0)\right) |\varphi_n\rangle &= \sum_k \left[-\frac{i(t-t_0)}{\hbar}\right]^k \frac{1}{k!} E_n^k |\varphi_n\rangle \\ &= \sum_k \left[-\frac{iE_n(t-t_0)}{\hbar}\right]^k \frac{1}{k!} |\varphi_n\rangle \\ &= \exp\left(-\frac{iE_n(t-t_0)}{\hbar}\right) |\varphi_n\rangle \end{aligned} \quad (5.136)$$

soit pour $|\Psi(t)\rangle$:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t_0) e^{-\frac{iE_n}{\hbar}(t-t_0)} |\varphi_n\rangle \quad (5.137)$$

On retrouve donc l'expression (5.111).



Page de titre

Sommaire



Page 361 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

5.2. Représentation de Heisenberg

5.2.1. Points de vue de Schrödinger et de Heisenberg

Dans le formalisme qu'on a développé précédemment on a utilisé des opérateurs indépendants du temps correspondant aux observables du système et on a atteint l'évolution de ce système à partir du vecteur d'état $|\Psi(t)\rangle$: c'est la représentation de Schrödinger et on convient de noter dans cette représentation les observables par A_s et le vecteur d'état par $|\Psi_s(t)\rangle$.

On peut chercher une transformation unitaire sur les états propres de sorte que le transformé de $|\Psi_s(t)\rangle$ soit indépendant du temps alors que les transformés des observables A_s dépendent du temps :

C'est la représentation de Heisenberg et on notera $|\Psi_H\rangle$ le vecteur d'état et A_H l'observable.

D'après (5.127) on a :

$$|\Psi_s(t)\rangle = U(t, t_0) |\Psi_s(t_0)\rangle \quad (5.138)$$

Pour avoir un vecteur d'état constant il suffit d'effectuer la transformation unitaire associée à $U^+(t, t_0)$ sur le ket $|\Psi_s(t)\rangle$, soit :

$$\begin{aligned} |\Psi_H\rangle &= U^+(t, t_0) |\Psi_s(t)\rangle \\ &= U^+(t, t_0) U(t, t_0) |\Psi_s(t_0)\rangle = |\Psi_s(t_0)\rangle \end{aligned} \quad (5.139)$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 362 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

Dans la représentation de Heisenberg, le vecteur d'état constant coïncide donc avec $|\Psi_s(t_0)\rangle$ à l'instant t_0 :

$$|\Psi_H\rangle = |\Psi_s(t_0)\rangle \quad (5.140)$$

Pour avoir l'observable dépendante du temps on utilise l'expression (4.163) et on a :

$$A_H(t) = U^+(t, t_0) A_s U(t, t_0) \quad (5.141)$$

Si le système est conservatif (H_s indépendant du temps) et si A_s commute avec H_s , A_H sera indépendant du temps.

En effet dans ce cas l'opérateur d'évolution est tel que :

$$U(t, t_0) = \exp\left(-i \frac{H(t - t_0)}{\hbar}\right) \quad (5.142)$$

Si A_s commute avec H_s , il commutera aussi avec $U(t, t_0)$ de sorte que :

$$A_H(t) = U^+(t, t_0) A_s U(t, t_0) = U^+(t, t_0) U(t, t_0) A_s = A_s \quad (5.143)$$

5.2.2. Equation de Heisenberg :

Elle décrit l'évolution dans le temps de l'observable A_H :


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 363 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

On a :

$$A_H(t) = U^+(t, t_0) A_s U(t, t_0) \quad (5.144)$$

soit :

$$\begin{aligned} \frac{dA_H}{dt} &= \frac{dU^+(t, t_0)}{dt} A_s U(t, t_0) + U^+(t, t_0) \frac{\partial A_s}{\partial t} U(t, t_0) \\ &\quad + U^+(t, t_0) A_s \frac{dU(t, t_0)}{dt} \end{aligned} \quad (5.145)$$

Comme :

$$i\hbar \frac{dU(t, t_0)}{dt} = H_s U(t, t_0) \quad (5.146)$$

et

$$-i\hbar \frac{dU^+(t, t_0)}{dt} = U^+(t, t_0) H_s \quad (5.147)$$

il vient :

$$\frac{dA_H}{dt} = -\frac{1}{i\hbar} U^+ H_s A_s U + \frac{1}{i\hbar} U^+ A_s H_s U + U^+ \frac{\partial A_s}{\partial t} U \quad (5.148)$$



Page de titre

Sommaire



Page 364 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

En insérant entre H_s et A_s le produit $U(t, t_0)U^+(t, t_0)$ on aura :

$$\begin{aligned}
 \frac{dA_H}{dt} &= -\frac{1}{i\hbar}U^+H_sUU^+A_sU + \frac{1}{i\hbar}U^+A_sUU^+H_sU + U^+\frac{\partial A_s}{\partial t}U \\
 &= -\frac{1}{i\hbar}H_HA_H + \frac{1}{i\hbar}A_HH_H + \left(\frac{\partial A_s}{\partial t}\right)_H \\
 &= \frac{1}{i\hbar}(A_HH_H - H_HA_H) + \left(\frac{\partial A_s}{\partial t}\right)_H
 \end{aligned}
 \tag{5.149}$$

soit :

$$i\hbar \frac{d\mathbf{A}_H}{dt} = [\mathbf{A}_H, \mathbf{H}_H] + i\hbar \left(\frac{\partial \mathbf{A}_s}{\partial t}\right)_H
 \tag{5.150}$$

qui est l'équation de Heisenberg.

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 365 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

6. Application des postulats : système à deux niveaux

Les postulats constituent l'ensemble des règles qui permettent, pour un problème donné, de déterminer l'évolution de l'état du système et de faire les prévisions sur le résultat de la mesure des grandeurs physiques associées à ce système. Les chapitres qui suivent montreront l'importance des postulats et en constituent en fait tous des applications potentielles.

Nous allons dans ce paragraphe examiner de façon simple des systèmes qu'on rencontre souvent en physique et qui impliquent des phénomènes de grande importance (oscillations quantiques, résonance quantique,...) : Ce sont les systèmes à deux niveaux.

Ces systèmes qui sont des systèmes modèles permettent de comprendre la physique quantique à travers une approche didactique simple qui se prête à une grande généralisation.

Dans un système à deux niveaux l'espace des états est un espace à deux dimensions sous- tendu par une base formée des états propres de l'hamiltonien du système ; Comme exemple de tels systèmes on peut citer le spin $\frac{1}{2}$ qui sera étudié dans le chapitre 9 et tout autre système physique contenant deux états dont les énergies sont voisines et très différentes de celles des autres états du systèmes. Le couplage de ces états par une perturbation extérieure, qui est à la base de nombreuses applications, peut


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 366 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

être étudié dans le cadre d'un formalisme mathématique considérablement simplifié.

6.1. Position du problème :

Soit un système physique dont l'espace des états à deux dimensions admet pour base orthonormée le système des vecteurs propre $|\varphi_1\rangle$ et $|\varphi_2\rangle$ de l'hamiltonien H_0 de valeurs propres non dégénérées E_1 et E_2 .

On suppose que le système est soumis à une perturbation extérieure décrite par l'opérateur hermitique et indépendant du temps W , de sorte que l'hamiltonien total du système s'écrit :

$$H = H_0 + W \quad (5.151)$$

on désigne par $|\Psi_1\rangle$ et $|\Psi_2\rangle$ les états propres de H et ε_1 et ε_2 ses valeurs propres de sorte qu'on a :

$$H |\Psi_1\rangle = \varepsilon_1 |\Psi_1\rangle \quad (5.152)$$

$$H |\Psi_2\rangle = \varepsilon_2 |\Psi_2\rangle \quad (5.153)$$

H_0 est souvent appelé hamiltonien non perturbé et W est appelé perturbation ou couplage car il peut induire des transitions entre les deux états non perturbés $|\varphi_1\rangle$ et $|\varphi_2\rangle$



Page de titre

Sommaire



Page 367 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Dans la base $\{|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle\}$ les matrices représentant W et H sont :

$$W = \begin{pmatrix} W_{11} & W_{12} \\ W_{21} & W_{22} \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad H = \begin{pmatrix} E_1 + W_{11} & W_{12} \\ W_{21} & E_2 + W_{22} \end{pmatrix} \quad (5.154)$$

où W_{11} et W_{22} sont réels et $W_{12} = W_{21}^*$

6.2. Effet du couplage sur les états stationnaires du système

La diagonalisation de la matrice représentant H dans la base $\{|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle\}$ ne pose pas de difficulté majeure et donne pour les valeurs propres et vecteurs propres de H :

$$\begin{cases} \varepsilon_1 = \frac{1}{2} (E_1 + E_2 + W_{11} + W_{22}) \\ \quad + \frac{1}{2} [(E_1 - E_2 + W_{11} - W_{22})^2 + 4 |W_{12}|^2]^{\frac{1}{2}} \\ \varepsilon_2 = \frac{1}{2} (E_1 + E_2 + W_{11} + W_{22}) \\ \quad - \frac{1}{2} [(E_1 - E_2 + W_{11} - W_{22})^2 + 4 |W_{12}|^2]^{\frac{1}{2}} \end{cases} \quad (5.155)$$



Page de titre

Sommaire



Page 368 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

et

$$\begin{cases} |\Psi_1\rangle = \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\varphi}{2}} |\varphi_1\rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{i\frac{\varphi}{2}} |\varphi_2\rangle \\ |\Psi_2\rangle = -\sin \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\varphi}{2}} |\varphi_1\rangle + \cos \frac{\theta}{2} e^{i\frac{\varphi}{2}} |\varphi_2\rangle \end{cases} \quad (5.156)$$

où l'angle θ est tel que :

$$\tan \theta = \frac{2 |W_{12}|}{E_1 - E_2 + W_{11} - W_{22}} \quad (5.157)$$

avec :

 $0 \leq \theta \leq \pi$ et φ est l'argument du nombre complexe W_{12} ($W_{21} = e^{i\varphi} |W_{12}|$).

On vérifie bien qu'en l'absence de couplage ($W = 0$), ε_1 et ε_2 s'identifient à E_1 et E_2 et $|\Psi_1\rangle$ et $|\Psi_2\rangle$ s'identifient à $|\varphi_1\rangle$ et $|\varphi_2\rangle$ ($\theta = \varphi = 0$).

On remarque aussi que si la matrice W est diagonale ($W_{12} = W_{21} = 0$) les vecteurs propres de H sont les mêmes que ceux de H_0 et ses valeurs propres sont $E_1 + W_{11}$ et $E_2 + W_{22}$.

Enfin si la matrice de W est purement non diagonale ($W_{11} = W_{22} = 0$) et c'est la situation physique la plus intéressante. Les valeurs propres et vecteurs propres de H sont tels que :

$$\varepsilon_1 = \frac{1}{2} (E_1 + E_2) + \frac{1}{2} [(E_1 - E_2)^2 + 4 |W_{12}|^2]^{\frac{1}{2}} \quad (5.158)$$

$$\varepsilon_2 = \frac{1}{2} (E_1 + E_2) - \frac{1}{2} [(E_1 - E_2)^2 + 4 |W_{12}|^2]^{\frac{1}{2}} \quad (5.159)$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 369 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

et les angles θ et φ sont définis par :

$$tg\theta = \frac{2|W_{12}|}{E_1 - E_2} \quad (5.160)$$

$$W_{21} = e^{i\varphi} |W_{21}| \quad (5.161)$$

6.3. Oscillations du système entre les états non perturbés

6.3.1. Evolution dans le temps

Supposons que la matrice représentant $\hat{W}$ est purement non diagonale et que l'état du système à l'instant t est décrit par le ket :

$$|\Psi(t)\rangle = \lambda_1(t) |\varphi_1\rangle + \lambda_2(t) |\varphi_2\rangle \quad (5.162)$$

L'évolution de cet état est donnée par l'équation de Schrödinger :

$$\frac{d|\Psi(t)\rangle}{dt} = (H_0 + W) |\Psi(t)\rangle \quad (5.163)$$

La projection de cette équation sur la base $\{|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle\}$ nous donne le système suivant :

$$i\hbar \frac{d}{dt} \lambda_1(t) = E_1 \lambda_1(t) + W_{12} \lambda_2(t) \quad (5.164)$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} \lambda_2(t) = W_{21} \lambda_1(t) + E_2 \lambda_2(t) \quad (5.165)$$



Page de titre

Sommaire



Page 370 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

C'est un système linéaire d'équations différentielles couplées dont les coefficients sont les éléments de matrice du hamiltonien H dont on a calculé les valeurs propres (ε_1 et ε_2) et les vecteurs propres ($|\Psi_1\rangle$ et $|\Psi_2\rangle$).

Si à l'instant $t = 0$ on décompose le ket $|\Psi(0)\rangle$ sur $|\Psi_1\rangle$ et $|\Psi_2\rangle$ c'est à dire qu'on écrit :

$$|\Psi(0)\rangle = \alpha |\Psi_1\rangle + \beta |\Psi_2\rangle \quad (5.166)$$

L'état $|\Psi(t)\rangle$ est donné à l'instant ultérieur par l'expression (5.109) soit :

$$|\Psi(t)\rangle = \alpha \exp\left(-\frac{i\varepsilon_1 t}{\hbar}\right) |\Psi_1\rangle + \beta \exp\left(-\frac{i\varepsilon_2 t}{\hbar}\right) |\Psi_2\rangle \quad (5.167)$$

Les constantes α et β étant fixées par les conditions initiales, on peut après projection de $|\Psi(t)\rangle$ sur la base $\{|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle\}$ et identification avec (5.162) déterminer $\lambda_1(t)$ et $\lambda_2(t)$.

6.3.2. Oscillations de Rabi

Supposons qu'à l'instant $t = 0$, le système est dans l'état propre $|\varphi_1\rangle$ de l'hamiltonien non perturbé H_0 , c'est à dire : $|\Psi(0)\rangle = |\varphi_1\rangle$ et calculons la probabilité $\mathcal{P}_{12}(t)$ de le trouver à l'instant t dans l'état $|\varphi_2\rangle$.

D'après les postulats de la mesure $\mathcal{P}_{12}(t)$ est donné par :

$$\mathcal{P}_{12}(t) = |\langle \varphi_2 | \Psi(t) \rangle|^2 \quad (5.168)$$



Page de titre

Sommaire



Page 371 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Pour calculer $\mathcal{P}_{12}(t)$ il faut d'abord écrire $|\Psi(0)\rangle$ et $|\Psi(t)\rangle$ dans la base $\{|\Psi_1\rangle, |\Psi_2\rangle\}$ où H est diagonal.

En utilisant les résultats du paragraphe précédent on a :

$$|\Psi(0)\rangle = |\varphi_1\rangle = e^{+\frac{i\varphi}{2}} \left(\cos \frac{\theta}{2} |\Psi_1\rangle - \sin \frac{\theta}{2} |\Psi_2\rangle \right) \quad (5.169)$$

$$|\Psi(t)\rangle = e^{+\frac{i\varphi}{2}} \left(\cos \frac{\theta}{2} e^{-\frac{i\varepsilon_1 t}{\hbar}} |\Psi_1\rangle - \sin \frac{\theta}{2} e^{-\frac{i\varepsilon_2 t}{\hbar}} |\Psi_2\rangle \right) \quad (5.170)$$

L'amplitude de probabilité de trouver le système dans l'état $|\varphi_2\rangle$ est donc :

$$\langle \varphi_2 | \Psi(t) \rangle = e^{+\frac{i\varphi}{2}} \left(\cos \frac{\theta}{2} e^{-\frac{i\varepsilon_1 t}{\hbar}} \langle \varphi_2 | \Psi_1 \rangle - \sin \frac{\theta}{2} e^{-\frac{i\varepsilon_2 t}{\hbar}} \langle \varphi_2 | \Psi_2 \rangle \right) \quad (5.171)$$

qui donne après calcul :

$$\langle \varphi_2 | \Psi(t) \rangle = e^{i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} \left(e^{-\frac{i\varepsilon_1 t}{\hbar}} - e^{-\frac{i\varepsilon_2 t}{\hbar}} \right) \quad (5.172)$$

Ce qui permet d'avoir :

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{12}(t) &= \frac{1}{2} \sin^2 \theta \left[1 - \cos \left(\frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\hbar} t \right) \right] \\ &= \sin^2 \theta \sin^2 \left(\frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{2\hbar} t \right) \end{aligned} \quad (5.173)$$



Page de titre

Sommaire



Page 372 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Et en utilisant les expressions de θ , ε_1 et ε_2 on obtient :

$$\mathcal{P}_{12}(t) = \frac{4 |W_{12}|^2}{(E_1 - E_2)^2 + 4 |W_{12}|^2} \sin^2 \left[\sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4 |W_{12}|^2} t / 2\hbar \right] \quad (5.174)$$

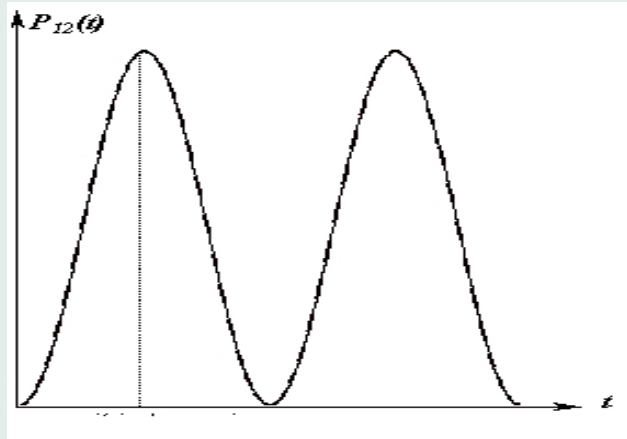


Figure 5.1 : Variation de la probabilité $\mathcal{P}_{12}(t)$ en fonction du temps

Cette formule est appelée formule de Rabi, elle montre que la probabilité $\mathcal{P}_{12}(t)$ oscille au cours du temps avec l'unique fréquence de Bohr $\left(\frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\hbar} \right)$

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 373 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

du système (fig. 5.1), ce qui prouve que ce système effectue une oscillation entre les deux états propres $|\varphi_1\rangle$ et $|\varphi_2\rangle$ de l'hamiltonien non perturbé H_0 .



Page de titre

Sommaire



Page 374 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Exercices et Problèmes

EP 5.1 : Particule dans un potentiel coulombien

I- On considère un espace à une dimension sur lequel x désigne la coordonnée “position”, qui peut prendre toutes les valeurs positives et négatives.

Une particule de masse m est soumise au potentiel $V(x) = -\frac{A}{|x|}$, A étant une constante positive.

On désigne par E l'énergie de la particule, dont on envisage un état lié stationnaire ($E < 0$).

1- Donner l'opérateur hamiltonien H de la particule et écrire son équation aux valeurs propres en désignant par $\varphi(x)$ ses vecteurs propres.

2- Vérifier que cette équation admet, pour des valeurs, respectivement, de la longueur a et de l'énergie E_0 , que l'on calculera en fonction de m , A et $\hbar$, une solution appartenant à l'espace des fonctions d'onde, de la forme :

$$\varphi_1(x) = \alpha x \exp\left(-\frac{|x|}{a}\right)$$

où α est une constante.

3- Calculer la constante α de manière que $\varphi_1(x)$ soit normée. Montrer que la densité de probabilité de présence de la particule est maximale pour une valeur de $|x|$ que l'on calculera en fonction de a . Représenter graphiquement, $\varphi_1(x)$ puis la densité de probabilité de présence, en fonction de x .


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)


Page 375 de 978

[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

4- La particule étant dans l'état décrit par :

$$\Psi_1(x, t) = \varphi_1(x) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_0 t\right)$$

a- Donner sans calcul, mais en les justifiant, les valeurs moyennes $\langle X \rangle_{\Psi_1}$ et $\langle \vec{P} \rangle_{\Psi_1}$ des observables X et P , associées aux grandeurs position et impulsion x et $\vec{p}$ de la particule.

b- Calculer les valeurs moyennes $\langle V \rangle_{\Psi_1}$ et $\langle T \rangle_{\Psi_1}$ des observables V et T associées au potentiel $V(x)$ et à l'énergie cinétique $\frac{P^2}{2m}$.

c- Calculer $\langle V \rangle_{\Psi_1} + \langle T \rangle_{\Psi_1}$ et commenter le résultat obtenu.



Page de titre

Sommaire



Page 376 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

EP 5.2 : Hamiltonien perturbé

On considère un système physique décrit par l'hamiltonien H_0 . Les trois états de base du système sont représentés par les trois kets $|\varphi_1\rangle$, $|\varphi_2\rangle$, $|\varphi_3\rangle$, états propres de H_0 avec la même valeur propre E_0 :

$$H_0 |\varphi_1\rangle = E_0 |\varphi_1\rangle ; H_0 |\varphi_2\rangle = E_0 |\varphi_2\rangle ; H_0 |\varphi_3\rangle = E_0 |\varphi_3\rangle$$

Le couplage entre les différents états précédents est décrit par un opérateur W dont les seuls éléments de matrice non nuls sont :

$$\langle \varphi_1 | W | \varphi_3 \rangle = \langle \varphi_3 | W | \varphi_1 \rangle = \langle \varphi_1 | W | \varphi_2 \rangle = \langle \varphi_2 | W | \varphi_1 \rangle = \frac{\lambda}{\sqrt{2}}$$

où λ est une constante réelle telle que : $0 < \lambda < E_0$

1- Ecrire la matrice représentant l'hamiltonien total $H = H_0 + W$ dans la base $\{|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, |\varphi_3\rangle\}$.

2- a- Déterminer les valeurs propres $\varepsilon_-, \varepsilon_0, \varepsilon_+$ de l'hamiltonien total H .

b- Déterminer les vecteurs propres correspondants qu'on notera respectivement $\{|\psi_-\rangle, |\psi_0\rangle, |\psi_+\rangle\}$.

3- Le système est à l'instant $t = 0$ dans l'état $|\psi(0)\rangle = |\varphi_1\rangle$

a- Exprimer $|\psi(0)\rangle$ dans la base $\{|\psi_-\rangle, |\psi_0\rangle, |\psi_+\rangle\}$.

b- Déterminer l'état $|\psi(t)\rangle$ du système à un instant t ultérieur.

c- Calculer la valeur moyenne de H dans l'état $|\psi(t)\rangle$.



Page de titre

Sommaire



Page 377 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Conclure.

EP 5.3 : Mesure d'observables (1)

On considère un système physique dont l'espace des états qui est de dimension trois est rapporté à la base orthonormée formée par les trois kets $|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle$.

Ces kets de base sont vecteurs propres de deux opérateurs A et B :

$$\begin{aligned} A|u_1\rangle &= a|u_1\rangle & B|u_1\rangle &= b|u_1\rangle \\ A|u_2\rangle &= -a|u_2\rangle & B|u_2\rangle &= b|u_2\rangle \\ A|u_3\rangle &= -a|u_3\rangle & B|u_3\rangle &= 0 \end{aligned}$$

où a et b sont des constantes réelles non nulles.

- 1- a- Ecrire les matrices représentant ces deux opérateurs dans la base $\{|u_i\rangle\}$.
 b- Les opérateurs A et B sont-ils des observables ?
 c- A constitue-t-il un E.C.O.C à lui seul ? Même question pour B .
 d- L'ensemble $\{A, B\}$ forme-t-il un E.C.O.C ?

- 2- A l'instant $t = 0$, l'état du système est décrit par le ket :

$$|\psi(0)\rangle = C \left[|u_1\rangle + i|u_2\rangle - \sqrt{2}|u_3\rangle \right]$$

où c est une constante.

- a- Calculer C pour que ce ket soit normé.


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 378 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

b-Si l'on mesure A à l'instant $t = 0$, quelles valeurs peut-on trouver, et avec quelles probabilités ? Même question pour B .

c- Supposons qu'une mesure de B à l'instant $t = 0$ donne b . Quel est le ket normé $|\psi'(0)\rangle$ qui représente l'état du système immédiatement après la mesure ?

d- Peut-on mesurer simultanément A et B sur le système dans l'état $|\psi(0)\rangle$? Si oui, quels résultats peut donner une telle mesure simultanée, et avec quelles probabilités ?

EP 5.4 : Mesure d'observables (2)

On considère un système physique dont l'espace des états est à trois dimensions. On choisit dans cet espace une base orthonormée complète constituée de trois kets $|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle$ que l'on note $\{|u_i\rangle\}$.

Ces kets de base sont vecteurs propres de deux opérateurs A et B indépendants du temps définis par :

$$\begin{aligned} A|u_1\rangle &= a|u_1\rangle & A|u_2\rangle &= a|u_2\rangle & A|u_3\rangle &= 0 \\ B|u_1\rangle &= b|u_1\rangle & B|u_2\rangle &= -b|u_2\rangle & B|u_3\rangle &= -b|u_3\rangle \end{aligned}$$

où a et b sont des constantes réelles non nulles.



Page de titre

Sommaire



Page 379 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

L'hamiltonien du système est aussi indépendant du temps, et tel que

$$H |u_1\rangle = E |u_1\rangle + \frac{E}{\sqrt{3}} |u_2\rangle$$

$$H |u_2\rangle = \frac{E}{\sqrt{3}} |u_1\rangle - E |u_2\rangle$$

$$H |u_3\rangle = E |u_3\rangle$$

où E est une constante réelle non nulle.

1- Les opérateurs A et B sont-ils des observables ? Forment-ils à eux deux un E.C.O.C.

2- A l'instant $t = 0$, l'état du système est décrit par le ket :

$$|\Psi(0)\rangle = |u_1\rangle + \frac{i}{\sqrt{2}} |u_2\rangle - |u_3\rangle$$

a- Normaliser ce vecteur

b- Si, à cet instant on mesure simultanément A et B , quels résultats peut-on obtenir dans cette mesure, et avec quelles probabilités ?

c- Même question si l'on mesure seulement A .

d- Calculer les valeurs moyennes $\langle A \rangle$ et $\langle B \rangle$ de A et B dans l'état $|\Psi(0)\rangle$ et leurs écarts quadratiques moyens ΔA et ΔB .

3- Quelle est la matrice représentant l'hamiltonien H dans la base $\{|u_i\rangle\}$?

4- A et B sont -ils des constantes du mouvement ?



Page de titre

Sommaire



Page 380 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

5- Quelles sont les valeurs possibles de l'énergie du système ?

6-Déterminer les états stationnaires du système (on donnera leurs développement normalisés sur les états de base)

7- Si l'on mesure l'énergie du système dans l'état $|\Psi(0)\rangle$, quels résultats peut-on obtenir ? et avec quelles probabilités ?

8- Ecrire le ket $|\Psi(t)\rangle$ représentant l'état du système à l'instant t .

EP 5.5 : Mesure d'observables (3)

On considère un système physique dont l'espace des états, qui est de dimension 3 est rapporté à la base orthonormée $\{|u_i\rangle\}, i = 1, 2, 3$.

Dans cette base, on considère l'opérateur hamiltonien H du système ainsi qu'une observable A représentés par les matrices suivantes :

$$(H) = \hbar\omega_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (A) = a \begin{pmatrix} 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1/2 \\ 0 & 1/2 & 1 \end{pmatrix}$$

ω_0 , a et b sont des constantes réelles positives.

1-a- Trouver les valeurs propres de A.

b- A forme-t-il un E.C.O.C. à lui seul ?

c- Donner un système de vecteurs propres de A.

d- A et H forment-ils un E.C.O.C. ?



Page de titre

Sommaire



Page 381 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

2-A l'instant $t = 0$ le système est dans l'état :

$$|\Psi(0)\rangle = \frac{1}{2} |u_1\rangle + \frac{1}{2} |u_2\rangle + \frac{i}{\sqrt{2}} |u_3\rangle$$

a- On mesure A à cet instant. Quelles valeurs peut-on trouver et avec quelles probabilités ?

b- Cette mesure donne effectivement $a/2$. Quel est l'état $|\varphi(0)\rangle$ du système immédiatement après cette mesure.

c- Quel est dans ce cas l'état $|\varphi(t)\rangle$ du système à un instant t ultérieur ?

3- On définit une autre observable B par :

$$B |u_1\rangle = b(|u_2\rangle - |u_3\rangle)$$

$$B |u_2\rangle = b(|u_1\rangle + |u_3\rangle)$$

$$B |u_3\rangle = b(-|u_1\rangle + |u_2\rangle)$$

a- Quelle est la matrice représentant B dans la base $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle\}$.

b- Trouver les valeurs propres de B .

c- Montrer que $\{H, A, B\}$ est un E.C.O.C. Trouver la base de l'espace des états constituée de vecteurs propres communs à ces trois observables.

d- A l'instant $t = 0$, le système étant dans l'état $|\Psi(0)\rangle$ on mesure simultanément A et B , quelles valeurs peut-on obtenir et avec quelle probabilité ?

EP 5.6 : Mesure d'observables (4)



Page de titre

Sommaire



Page 382 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

On considère que l'espace des états à trois dimensions est rapporté à une base orthonormée $\{|u_i\rangle\}, i = 1, 2, 3$, l'hamiltonien H et deux observables A et B sont représentées par les matrices suivantes :

$$(H) = \hbar\omega_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \quad (A) = a \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (B) = b \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

ω_0 , a et b sont des constantes réelles positives. A l'instant $t = 0$ le système physique est décrit par :

$$|\Psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |u_1\rangle + \frac{1}{2} |u_2\rangle - \frac{i}{\sqrt{2}} |u_3\rangle$$

1- a- On mesure à l'instant initial l'énergie du système, quelles valeurs peut-on trouver et avec quelles probabilités ?

b- Calculer dans l'état $|\Psi(0)\rangle$, $\langle H \rangle$ et ΔH .

2- a- Au lieu de mesurer H à l'instant $t = 0$, on mesure A . Quels sont les résultats possibles et leurs probabilités ? Quel est le vecteur d'état immédiatement après la mesure ?

b- H et A forment-elles un E.C.O.C ?.

3- Calculer $|\Psi(t)\rangle$ à l'instant t .

4- Calculer les valeurs moyennes $\langle A \rangle_t$ et $\langle B \rangle_t$ de A et B à l'instant t .

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 383 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

5- Quels résultats obtient-on si l'on mesure à l'instant t l'observable A ? Même question pour l'observable B , avec quelles probabilités ?

Retrouver $\langle B \rangle_t$ en utilisant la théorie des probabilités.



Page de titre

Sommaire



Page 384 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

EP 5.7 : Mesure d'observables (5)

Soient $|\psi_1\rangle$ et $|\psi_2\rangle$ deux vecteurs propres normalisés d'un hamiltonien H correspondant à des valeurs propres différentes E_1 et E_2 .

On pose $\frac{E_1 - E_2}{\hbar} = \omega$.

1-Montrer que $|\psi_1\rangle$ et $|\psi_2\rangle$ sont orthogonaux.

2-On considère le vecteur d'état $|\psi\rangle$ défini par :

$$|\psi_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_1\rangle - |\psi_2\rangle)$$

Calculer la valeur moyenne $\langle H \rangle$ de l'énergie pour l'état $|\psi_-\rangle$, ainsi que l'écart quadratique moyen ΔH .

3-On suppose qu'à l'instant $t = 0$, le système décrit par H se trouve dans l'état $|\psi(0)\rangle = |\psi_-\rangle$. Quel est le vecteur d'état $|\psi(t)\rangle$ du système à l'instant t ?

4-On considère l'observable A définie par :

$$A|\psi_1\rangle = |\psi_2\rangle, \quad A|\psi_2\rangle = |\psi_1\rangle$$

Quelles sont les valeurs propres a de l'observable A ?

5-Construire les combinaisons linéaires $|\psi_{\pm}\rangle$ de $|\psi_1\rangle$ et $|\psi_2\rangle$ vecteurs propres de A .

6-On suppose qu'à l'instant $t = 0$, le système se trouve dans l'état $|\psi_-\rangle$ relatif à la valeur propre $a = -1$. Quelle est la probabilité lors d'une mesure de l'observable A effectuée à l'instant t , de trouver la valeur $a = -1$?



Page de titre

Sommaire



Page 385 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

EP 5.8 : Mesure d'observables (6)

On considère un système physique dont l'espace des états, de dimension trois, est rapporté à une base orthonormée $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle\}$.

On suppose que l'hamiltonien H et deux opérateurs A , B sont définis dans cette représentation par les matrices :

$$(H) = \hbar\omega_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (A) = a \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (B) = b \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

1- a- Ces opérateurs sont-ils des observables ?

b- Montrer que $[H, A] = 0$

c- Déterminer la base des vecteurs propres communs à H et A . On notera ces kets $|h, a\rangle$, h et a étant les valeurs propres associées à H et A .

Parmi les ensembles d'opérateurs : $\{H\}$, $\{A\}$, $\{H, A\}$, indiquer lesquels forment un E.C.O.C. ?

d- Montrer que $[B, H] \neq 0$ et que $[B, A] \neq 0$

Donner l'expression des vecteurs propres de B sur la base $\{|u_i\rangle\}$.

2- A l'instant $t = 0$, le système est dans l'état :

$$|\Psi(0)\rangle = \sqrt{2}|u_1\rangle + |u_2\rangle - |u_3\rangle$$



Page de titre

Sommaire



Page 386 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

a- Normer ce vecteur.

b- On effectue une mesure de A :

α - A l'instant $t = 0$, quelles valeurs peut on trouver et avec quelles probabilités ?

β - La mesure ayant donnée $(-a)$, quel est l'état du système immédiatement après la mesure ?

γ - On laisse s'écouler un intervalle de temps t . Calculer $|\Psi(t)\rangle$.

δ - On recommence alors la mesure de A . Quelles valeurs peut-on trouver et avec quelles probabilités ?

c- On suppose maintenant qu'immédiatement après la mesure de A ayant donnée $(-a)$ on fait une mesure de B

α - Quels résultats peut-on trouver et avec quelles probabilités ?

β - La mesure de B ayant donnée $(+b)$, quel est l'état du système juste après la mesure ?

γ - Donner l'état du système après un intervalle de temps t .

δ - On recommence alors la mesure de B . Quelles prévisions peut-on faire ? Expliquer la différence avec la mesure de A .

EP 5.9 : Relations d'Heisenberg

1- Relation d'incertitude position-impulsion :



Page de titre

Sommaire



Page 387 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Soient A et B deux observables indépendantes du temps agissant dans l'espace des états d'un système physique d'hamiltonien H indépendant du temps.

Le système étant dans l'état normé $|\Psi(t)\rangle$, on notera :

$$\langle A \rangle = \langle \Psi(t) | A | \Psi(t) \rangle ; \quad A' = A - \langle A \rangle ; \quad (\Delta A)^2 = \langle \Psi(t) | (A')^2 | \Psi(t) \rangle$$

$$\langle B \rangle = \langle \Psi(t) | B | \Psi(t) \rangle ; \quad B' = B - \langle B \rangle ; \quad (\Delta B)^2 = \langle \Psi(t) | (B')^2 | \Psi(t) \rangle$$

a- Montrer que $[A', B'] = [A, B]$.

b- Montrer que : $\langle \Psi(t) | [A, B] | \Psi(t) \rangle$ est imaginaire pur.

c- On pose $|\varphi(t)\rangle = (A' + i\lambda B') |\Psi(t)\rangle$, $\lambda \in \mathbb{R}$

α - Calculer $\langle \varphi(t) | \varphi(t) \rangle$

β - En déduire que :

$$\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [A, B] \rangle|$$

d- X, Y, Z étant les composantes de l'observable position $\vec{R}$ et P_x, P_y, P_z les composantes de l'observable impulsion $\vec{P}$, établir les trois inégalités position-impulsion de Heisenberg.

2- Relation d'incertitude temps-énergie

Soit $|\Psi\rangle$ l'état d'un système dont l'hamiltonien ne dépend pas explicitement du temps, et pour lequel l'écart quadratique moyen sur l'énergie est ΔE . Soit A une



Page de titre

Sommaire



Page 388 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

observable ne dépendant pas explicitement du temps, de valeur moyenne $\langle A \rangle$ et d'écart quadratique moyen ΔA .

a- Démontrer la relation :

$$(\Delta A) (\Delta E) \geq \frac{\hbar}{2} \left| \frac{d}{dt} \langle A \rangle \right|$$

b- Donner une interprétation précise de la relation d'incertitude temps-énergie.

EP 5.10 : Matrice densité

On considère un système physique décrit par l'hamiltonien H et dont le vecteur d'état normé à l'instant t est :

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |\varphi_n\rangle$$

où les $|\varphi_n\rangle$ forment une base orthonormée.

On définit l'opérateur densité :

$$\rho(t) = |\Psi(t)\rangle \langle \Psi(t)|$$

1- Montrer que ρ est un opérateur hermitique est que sa trace est égale à l'unité : $\text{tr} \rho = 1$.



Page de titre

Sommaire



Page 389 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

2- Déterminer dans la base $\{|\varphi_n\rangle\}$ les éléments de matrice de ρ .

3- Soit A une observable. Démontrer que la valeur moyenne de A dans l'état $|\Psi(t)\rangle$ s'écrit :

$$\langle A \rangle_t = \text{tr} \rho A$$

4- Quelle est l'équation d'évolution de l'opérateur ρ ? On calculera pour cela la dérivée $\frac{\partial \rho}{\partial t}$.

5- Soit $P(a_n)$ la probabilité d'obtenir le résultat a_n en effectuant la mesure de l'observable A . Donner l'expression de $P(a_n)$ en fonction de ρ . On utilisera le fait que $P(a_n)$ est la valeur moyenne du projecteur P_n sur le sous-espace propre associé à a_n .

EP 5.11 : Molécule diatomique

On considère un électron d'une molécule diatomique formée de deux atomes A et B . Soient $|\varphi_A\rangle$ et $|\varphi_B\rangle$ deux états normés et orthogonaux de cet électron correspondant à deux fonctions d'onde localisées autour de A et de B . Lorsqu'on néglige la possibilité pour l'électron de sauter de A vers B (ou de B vers A) son énergie est décrite par l'hamiltonien H_0 qui a pour états propres $|\varphi_A\rangle$ et $|\varphi_B\rangle$ avec la même valeur propre E_0 .

Pour rendre compte phénoménologiquement de la possibilité pour l'électron de passer d'un noyau à l'autre, on ajoute à H_0 un terme W défini sur la base



Page de titre

Sommaire



Page 390 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

 $\{|\varphi_A\rangle, |\varphi_B\rangle\}$ par :

$$W|\varphi_A\rangle = -a|\varphi_B\rangle, \quad W|\varphi_B\rangle = -a|\varphi_A\rangle$$

1- Calculer les énergies et les états stationnaires de l'hamiltonien total $H = H_0 + W$.

2- A l'instant initial, l'électron est dans l'état $|\varphi_B\rangle$. Déterminer la localisation de l'électron aux temps ultérieurs c'est à dire les probabilités $P_A(t)$ et $P_B(t)$ qu'à l'électron d'être localisé autour des atomes A et B . Y-a-t-il des valeurs de t pour lesquelles l'électron est parfaitement localisé ?

EP 5.12 : Molécule triatomique

On considère un électron d'une molécule linéaire formée de trois atomes équidistants A, B et C . On désigne par $|\varphi_A\rangle$, $|\varphi_B\rangle$ et $|\varphi_C\rangle$ trois états normés et orthogonaux de cet électron correspondant respectivement à trois fonctions d'onde localisées autour des atomes A, B et C . On se limitera dans toute la suite au sous-espace des états engendré par $|\varphi_A\rangle$, $|\varphi_B\rangle$ et $|\varphi_C\rangle$.

Lorsqu'on néglige la possibilité pour l'électron de sauter d'un noyau à l'autre son énergie est décrite par l'hamiltonien H_0 qui admet pour états propres les trois états $|\varphi_A\rangle$, $|\varphi_B\rangle$ et $|\varphi_C\rangle$ avec la même valeur propre E_0 .

Le couplage entre ces trois états est décrit par un hamiltonien supplémentaire W



Page de titre

Sommaire



Page 391 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

défini par :

$$W |\varphi_A\rangle = -a |\varphi_B\rangle$$

$$W |\varphi_B\rangle = -a |\varphi_A\rangle - a |\varphi_C\rangle$$

$$W |\varphi_C\rangle = -a |\varphi_B\rangle$$

où a est une constante réelle positive.

1- a-Ecrire la matrice représentant l'hamiltonien $H = H_0 + W$ dans la base $\{|\varphi_A\rangle, |\varphi_B\rangle, |\varphi_C\rangle\}$.

b- Calculer les énergies et les états stationnaires de l'hamiltonien H .

On notera E_1, E_2 et E_3 ces énergies que l'on classera par ordre croissant et l'on notera $|E_1\rangle, |E_2\rangle$ et $|E_3\rangle$ les états propres correspondants.

2- A l'instant $t = 0$ l'électron est dans l'état $|\Psi(0)\rangle = |\varphi_A\rangle$

a- Exprimer $|\varphi_A\rangle$ en fonction des états propres de H .

b- Déterminer l'état $|\Psi(t)\rangle$ de l'électron à un instant ultérieur t .

c- Déterminer à cet instant la localisation de l'électron, c'est à dire les probabilités $P_A(t), P_B(t), P_C(t)$ qu'a l'électron d'être localisé autour des atomes A, B et C .

d- Y-a-il des valeurs de t pour lesquelles l'électron est parfaitement localisé autour de l'atome A, B et C ?

3- Soit D l'observable ayant pour états propres $|\varphi_A\rangle, |\varphi_B\rangle$ et $|\varphi_C\rangle$ avec les valeurs propres respectives $-d, 0, d$.

On mesure D à l'instant t . Quelles valeurs peut-on trouver, et avec quelles probabilités ?



Page de titre

Sommaire



Page 392 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

4- Lorsque l'état initial de l'électron est quelconque, quelles sont les fréquences de Bohr susceptibles d'apparaître dans l'évolution de $\langle D \rangle$? Quelles sont les fréquences des ondes électromagnétiques susceptibles d'être absorbées ou émises par la molécule ?

EP 5.13 : Molécule à 6 atomes

On considère un électron d'une molécule à 6 atomes (1,2,...,6) formant un hexagone régulier. On appelle $|\varphi_n\rangle$ ($n = 1$ à 6) l'état où il est localisé sur le $n^{\text{ème}}$ atome. Dans la suite, on se limitera pour les états de l'électron à l'espace engendré par les $|\varphi_n\rangle$ supposés orthonormés.

1- Soit R , l'opérateur défini dans la base $\{|\varphi_n\rangle\}$ par :

$$R|\varphi_1\rangle = |\varphi_2\rangle, \quad R|\varphi_2\rangle = |\varphi_3\rangle, \dots, R|\varphi_5\rangle = |\varphi_1\rangle$$

a- Montrer que R est un opérateur unitaire.

b- Calculer R^6 . En déduire les valeurs propres r_k et les vecteurs propres $|r_k\rangle$ de R

2- Lorsqu'on néglige la possibilité pour l'électron de passer d'un atome à un autre, son énergie est décrite par l'hamiltonien H_0 qui admet pour états propres les six états $|\varphi_n\rangle$ avec la même valeur propre E_0 . On décrit la possibilité pour l'électron de sauter d'un atome à l'autre en ajoutant à H_0 , l'hamiltonien W donné sur la base $\{|\varphi_n\rangle\}$



Page de titre

Sommaire



Page 393 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

par :

$$W |\varphi_1\rangle = -a |\varphi_2\rangle - a |\varphi_6\rangle$$

$$W |\varphi_2\rangle = -a |\varphi_3\rangle - a |\varphi_1\rangle$$

$$\vdots$$

$$W |\varphi_6\rangle = -a |\varphi_1\rangle - a |\varphi_5\rangle$$

a- Exprimer W en fonction des opérateurs R et R^+ .

b-Calculer les commutateurs $[H, R]$ et $[W, R]$. Déterminer les valeurs propres et les états propres de $H = H_0 + W$ et préciser leur dégénérescence.

c- Quelle est la probabilité de trouver l'électron sur l'un quelconque des six atomes.

EP 5.14 : Densité de courant de probabilité

On considère un flux de particules de masse m se déplaçant dans un potentiel $V(\vec{r})$ et dont l'état quantique est décrit par la fonction d'onde $\psi(\vec{r})$.

1- En écrivant l'équation de Schrödinger et sa conjuguée montrer que la densité de courant de particules $\vec{J}$ s'écrit sous la forme :

$$\vec{J} = \frac{i\hbar}{2m} (\psi \vec{\nabla} \psi^* - \psi^* \vec{\nabla} \psi)$$



Page de titre

Sommaire



Page 394 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

2- On suppose que les particules sont décrites par l'onde sphérique $\psi(\vec{r})$ défini par :

$$\psi(\vec{r}) = \frac{\exp(i \vec{k} \cdot \vec{r})}{r} \quad \text{avec} \quad \vec{k} = k \frac{\vec{r}}{r}$$

a- Calculer la densité de courant $\vec{J}$.

b- Montrer que $\vec{J}$ peut se mettre sous la forme

$$\vec{J} = \frac{\vec{u}}{r^2}$$

où $\vec{u}$ est une vitesse dont on précisera la signification.

c- Calculer le nombre de particules qui traversent par seconde la surface d'une sphère de rayon r .

3- On suppose maintenant que les particules se déplacent dans un potentiel $V(x)$ et on introduit le wronskien $W(y_1, y_2)$ de deux fonctions $y_1(x)$ et $y_2(x)$ que l'on définit par :

$$W(y_1, y_2) = y_1 \frac{dy_2}{dx} - y_2 \frac{dy_1}{dx}$$

a- En utilisant l'équation de Schrödinger satisfaite par la fonction d'onde $\psi(x)$ montrer que l'on a :

$$\frac{d}{dx} W(\psi, \psi^*) = 0$$



Page de titre

Sommaire



Page 395 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

b- Ecrire la relation qui existe entre le wronskien $W(\psi, \psi^*)$ et le flux de probabilité $J(x)$.

c- Montrer que le flux de probabilité se conserve.

d- Vérifier le résultat précédent dans le cas où $V(x)$ est représenté par une marche de potentiel ($V(x) = 0$ pour $x < 0$ et $V(x) = V_0$ pour $x > 0$) et que l'énergie des particules E est supérieure à V_0 .

EP 5.15 : Représentation d'interaction

On considère un système physique d'hamiltonien H_0 et d'opérateur d'évolution $U_0(t, t_0)$

1- Montrer que :

$$H_0 = \left[i\hbar \frac{d}{dt} (U_0(t, t_0)) \right] U_0^+(t, t_0)$$

2- On soumet le système à une perturbation $W(t)$ de sorte que son hamiltonien devient : $H(t) = H_0(t) + W(t)$ et son opérateur d'évolution $U(t, t_0)$.

a- Exprimer $i\hbar \frac{d}{dt} U(t, t_0)$ en fonction de $U_0(t, t_0)$, $U_0^+(t, t_0)$, $W(t)$ et $U(t, t_0)$.

b- En posant $U_0^+(t, t_0)U(t, t_0) = U_1(t, t_0)$, montrer que :

$$i\hbar \frac{d}{dt} U_1(t, t_0) = W_I(t)U_1(t, t_0)$$



Page de titre

Sommaire



Page 396 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

où $W_I(t) = U_0^+(t, t_0)W(t)U_0(t, t_0)$.

c- Soit $|\Psi(t)\rangle$ l'état du système à l'instant t et A une observable. On notera $A_I(t) = U_0^+(t, t_0)AU_0(t, t_0)$ et $|\Psi_I(t)\rangle = U_0^+(t, t_0)|\Psi(t)\rangle$ les transformés de A et de $|\Psi(t)\rangle$ par la transformation d'opérateur $U_0^+(t, t_0)$.

Montrer que l'évolution de $|\Psi_I(t)\rangle$ et de $A_I(t)$ est donnée par :

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi_I(t)\rangle = W_I(t) |\Psi_I(t)\rangle$$

et

$$i\hbar \frac{d}{dt} A_I(t) = [A, H_0]_I + i\hbar \left(\frac{dA}{dt} \right)_I$$

Ce mode de description est appelé représentation d'interaction.

EP 5.16 : Fonction de Green

L'énergie d'un système conservatif est représentée par un hamiltonien H dont les valeurs propres et les états propres stationnaires sont notés E_n et $|u_n\rangle$.

L'évolution entre les instants t_0 et t d'un état $|\psi\rangle$ de ce système est caractérisée par la relation :

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \exp -\frac{i}{\hbar} H(t - t_0) |\psi(t_0)\rangle \\ &= \sum_n \langle u_n | \psi(t_0) \rangle \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n(t - t_0)\right) |u_n\rangle \end{aligned}$$



Page de titre

Sommaire



Page 397 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Si on suppose que le spectre de H est discret et non dégénéré. Montrer qu'on peut définir dans la représentation $\{\vec{r}\}$ une fonction $G(\vec{r}, t, \vec{r}', t_0)$ pour $t > t_0$, telle que :

$$\psi(\vec{r}, t) = \int G(\vec{r}, t, \vec{r}', t_0) \psi(\vec{r}', t_0) d^3 r'$$

$\psi(\vec{r}', t_0)$ étant la fonction d'onde qui représente l'état $|\psi(t_0)\rangle$ au point $\vec{r}'$.

Donner la forme de la fonction $G(\vec{r}, t, \vec{r}', t_0)$ et montrer que cette fonction tend vers la fonction de Dirac $\delta(r - r')$ lorsque t tend vers t_0 .

$G(\vec{r}, t, \vec{r}', t_0)$ est appelée fonction de Green ou encore résolvante de H .

EP 5.17 : Mesures portant sur un système de deux particules

On considère un système physique formé de deux particules (1) et (2), de même masse m , placées dans un même puits de potentiel infini de largeur a , et n'interagissant pas entre elles. On désigne par $\xi(1)$, $\xi(2)$ et ξ , les espaces des états respectifs des particules (1), (2) et du système global, et par $|\varphi_n(1)\rangle$ et $|\varphi_p(2)\rangle$ les états propres normés des hamiltoniens $H(1)$ et $H(2)$ des deux particules.

1- On introduit le système de kets de ξ : $|\varphi_n \varphi_p\rangle = |\varphi_n(1)\rangle \otimes |\varphi_p(2)\rangle$.

a- Montrer qu'ils forment une base orthonormée de ξ .

b- Quels sont, dans ξ , les valeurs propres et les sous-espaces propres des opérateurs $H(1)$, $H(2)$ et $H = H(1) + H(2)$?

c- Parmi les ensembles d'observables $\{H(1)\}$, $\{H\}$, $\{H(1), H(2)\}$, $\{H, H(1)\}$, lesquels forment un E.C.O.C. ?


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 398 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

2- On suppose que à l'instant $t = 0$ le système est dans l'état :

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} |\varphi_1\varphi_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} |\varphi_1\varphi_2\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} |\varphi_2\varphi_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} |\varphi_2\varphi_2\rangle$$

a- Quel est l'état du système à l'instant t ?

b- On mesure l'énergie totale. Quels résultats peut-on obtenir et avec quelles probabilités ?

c- On mesure $H(1)$. Quels résultats peut-on obtenir et avec quels probabilités ?

3- Montrer que :

a- $|\psi(0)\rangle$ est un ket produit tensoriel : $|\psi(0)\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle$.

b- Cette propriété se conserve au cours du temps.

c- $\langle H(1)H(2) \rangle = \langle H(1) \rangle \langle H(2) \rangle$

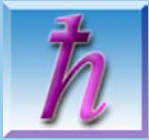
4- On considère maintenant l'état :

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}} |\varphi_1\varphi_1\rangle + \sqrt{\frac{3}{5}} |\varphi_1\varphi_2\rangle + \frac{1}{\sqrt{5}} |\varphi_2\varphi_1\rangle$$

a- Montrer que $|\psi(0)\rangle$ n'est pas un ket produit tensoriel.

b- Que deviennent les réponses aux questions 3- b,c ?

c- En déduire que dans un état du type $|\psi(0)\rangle$ il existe des corrélations entre les états des deux particules.



Page de titre

Sommaire



Page 399 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Chapitre 6

Oscillateur harmonique


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 400 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

L'oscillateur harmonique est le modèle le plus simple qu'on puisse utiliser pour décrire les états de vibration d'un système physique.

Un grand nombre de systèmes sont régis, au moins d'une manière approchée par les équations de l'oscillateur harmonique et chaque fois qu'on étudie le comportement d'un système au voisinage d'une position d'équilibre stable x_0 , correspondante à un minimum du potentiel on aboutit à des équations qui à la limite des petites oscillations sont celles de l'oscillateur harmonique.

En effet dans ces cas on peut développer le potentiel $V(x)$ au voisinage de x_0 en série de Taylor jusqu'au second ordre :

$$V(x) = V(x_0) + \left(\frac{dV}{dx}\right)_{x_0}(x - x_0) + \frac{1}{2}\left(\frac{d^2V}{dx^2}\right)_{x_0}(x - x_0)^2 + \dots \quad (6.1)$$

Dans ce développement :

- Le premier terme $V(x_0)$ est constant et correspond à la valeur de $V(x)$ au point x_0 .
- Le deuxième terme est nul car la dérivée première de $V(x)$ s'annule en x_0 puisque $V(x)$ est minimal en ce point.
- Dans le troisième terme la quantité $\left(\frac{d^2V}{dx^2}\right)_{x_0}$ est une constante positive, c'est la dérivée seconde du potentiel $V(x)$ au point x_0 où il est minimal.


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 401 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

En posant :

$$\left(\frac{d^2V}{dx^2}\right)_{x_0} = k \quad (6.2)$$

On aura au voisinage de la position d'équilibre stable x_0 :

$$V(x) \simeq V(x_0) + \frac{1}{2}k(x - x_0)^2 \quad (6.3)$$

qui est une fonction parabolique de l'écart à la position d'équilibre $x - x_0$. Cette approximation du potentiel au voisinage de la position d'équilibre est appelée : approximation harmonique.

A titre d'exemple on peut citer le potentiel de Lehnard-Jones qui décrit l'interaction entre deux atomes distants de r dans un gaz rare et qui est défini par .

$$V(r) = V_0 \left[\left(\frac{r_0}{r}\right)^{12} - 2\left(\frac{r_0}{r}\right)^6 \right] \quad (6.4)$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

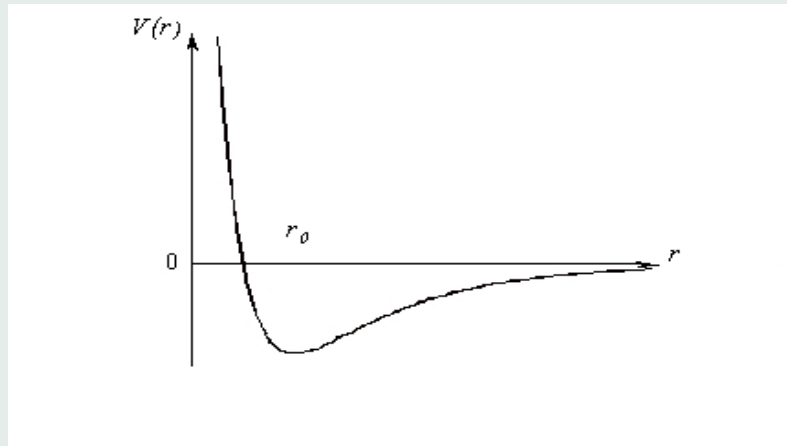
[Page 402 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)


Figure 6.1 : Potentiel de Lehnard-Jones

Ce potentiel admet un minimum au point r_0 et son expression approchée au voisinage de cette position d'équilibre s'exprime par un potentiel harmonique valant :

$$V(r) \simeq -V_0 + \frac{36V_0}{r_0^2}(r - r_0)^2 \quad (6.5)$$

Les résultats qu'on va établir dans ce chapitre sont applicables à toute une série de phénomènes physiques importants : vibration des atomes d'une molécule, oscillations des atomes dans un réseau cristallin, quantification du

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 403 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

champ électromagnétique,.... De plus l'oscillateur harmonique constitue un exemple d'application simple et pédagogique du formalisme général de la mécanique quantique.

Nous traiterons d'abord l'oscillateur à une dimension et on généralisera au cas de l'oscillateur isotrope à plusieurs dimensions qu'on rencontre dans de nombreux problèmes physiques.



Page de titre

Sommaire



Page 404 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

1. L'oscillateur harmonique classique

L'exemple le plus courant est celui d'une particule de masse m se déplaçant sans frottement sur l'axe horizontal $\overrightarrow{Ox}$ sous l'action d'une force de rappel proportionnelle à l'élongation ($\overrightarrow{F} = -kx\overrightarrow{u}_x$) et dérivant du potentiel $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$ (fig. 6.2).

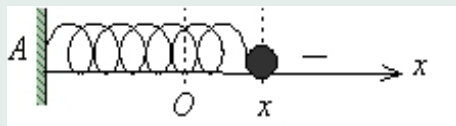


Figure 6.2 : Oscillateur classique à une dimension

L'équation du mouvement de la particule sur l'axe $\overrightarrow{Ox}$ s'écrit :

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = -kx \quad (6.6)$$

soit :

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \omega^2 x = 0 \quad (6.7)$$



Page de titre

Sommaire



Page 405 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

avec $\omega^2 = \frac{k}{m}$

La solution de cette équation est purement sinusoïdale et s'écrit :

$$x = x_0 \cos(\omega t - \theta) \quad (6.8)$$

La particule est donc animée d'un mouvement oscillatoire sinusoïdal d'amplitude x_0 , de pulsation ω et de phase θ . x_0 et θ étant déterminés par les conditions initiales.

Les énergies cinétique et potentielle de la particule valent respectivement :

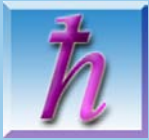
$$T = \frac{1}{2}m\left(\frac{dx}{dt}\right)^2 = \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2}m\omega^2 x_0^2 \sin^2(\omega t - \theta) \quad (6.9)$$

$$V = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 x_0^2 \cos^2(\omega t - \theta) \quad (6.10)$$

de sorte que son énergie totale est :

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 x_0^2 \quad (6.11)$$

L'énergie E de la particule est donc constante. Ainsi si l'on se fixe E , les limites $\pm x_0$ du mouvement classique s'obtiennent facilement à partir de l'intersection de la parabole décrivant $V(x)$ avec la droite parallèle à $\vec{Ox}$ et

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 406 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

d'ordonnée E (fig. 6.3). En ces points l'énergie potentielle est minimale et égale à E et l'énergie cinétique est nulle. Le mouvement classique est donc borné et se limite à des oscillations entre les points d'abscisses $-x_0$ et $+x_0$.

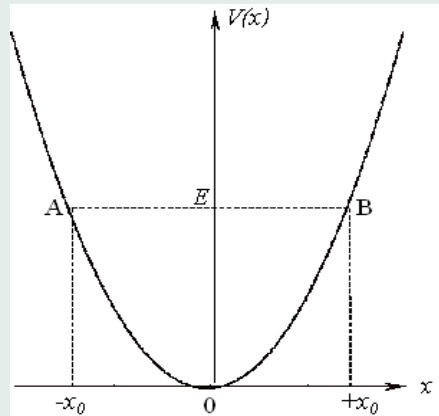


Figure 6.3 : Energie potentielle d'un oscillateur harmonique à une dimension



Page de titre

Sommaire



Page 407 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

2. L'oscillateur quantique

2.1. Hamiltonien

En mécanique quantique on associe aux grandeurs classiques x et p les observables X et P vérifiant la relation de commutation : $[X, P] = i\hbar$.

On obtient alors à partir de (6.11)

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2 \quad (6.12)$$

comme H ne dépend pas explicitement du temps, l'étude quantique se ramène à la résolution de l'équation aux valeurs propres :

$$\left(\frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2\right) |\varphi\rangle = E |\varphi\rangle \quad (6.13)$$

qui s'écrit en représentation $\{|x\rangle\}$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \varphi(x) = E\varphi(x) \quad (6.14)$$

C'est une équation différentielle de forme connue qui peut se résoudre en cherchant des solutions sous forme de développement en série entière (cf EP 6.1), mais on va utiliser une méthode plus élégante basée sur une algèbre opératorielle.



Page de titre

Sommaire



Page 408 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

2.2. Propriétés générales des énergies propres et fonctions propres

a- Le spectre d'énergie est nécessairement discret car la particule classique reste toujours confinée dans une région limitée de l'espace.

b- Les valeurs propres de l'hamiltonien sont positives.

En effet, on a :

$$\left(\frac{P^2}{2m} + V\right) |\varphi\rangle = E |\varphi\rangle \quad (6.15)$$

en projetant sur $|\varphi\rangle$ on obtient :

$$\frac{1}{2m} \langle \varphi | P^2 | \varphi \rangle + \langle \varphi | V | \varphi \rangle = E \quad (6.16)$$

Le premier terme est positif car $\langle \varphi | P^2 | \varphi \rangle$ n'est autre que le carré de la norme de $P | \varphi \rangle$, quand au deuxième terme on peut le majorer car le potentiel harmonique $V(x)$ admet toujours un minimum V_m de sorte que :

$$\langle \varphi | V | \varphi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} V(x) |\varphi(x)|^2 dx \geq V_m \int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi(x)|^2 dx \geq V_m \quad (6.17)$$

En remplaçant ces deux termes par des quantités qui leurs sont inférieures ou égales, il vient :

$$E \geq V_m \quad (6.18)$$

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 409 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

Dans le cas où V_m est nul on aura alors :

$$E \geq 0 \quad (6.19)$$

c - Les fonctions propres de H ont une parité bien définie, en effet le potentiel étant pair ces fonctions sont soit paires ou impaires (cf §1.3 du chapitre 2).



Page de titre

Sommaire

◀

▶

◀

▶

Page 410 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

3. Valeurs propres de $\hat{H}$

3.1. Notations

Dans l'équation aux valeurs propres, figurent $\hbar$, m , ω et il est plus commode pour résoudre le problème d'utiliser des quantités sans dimensions et des équations adimensionnelles qui simplifient considérablement les calculs :

En posant $\varepsilon = \frac{E}{\hbar\omega}$ et en divisant les deux membres de l'équation (6.13) par $\hbar\omega$ on obtient :

$$\frac{1}{2} \left[\frac{P^2}{m\hbar\omega} + \frac{X^2}{\hbar/m\omega} \right] |\varphi\rangle = \varepsilon |\varphi\rangle \quad (6.20)$$

ε étant sans dimensions, il en est de même du crochet, on posera alors :

$$\hat{X} = \frac{X}{\sqrt{\hbar/m\omega}} \quad (6.21)$$

$$\hat{P} = \frac{P}{\sqrt{m\hbar\omega}} \quad (6.22)$$

où les observables $\hat{X}$ et $\hat{P}$ sont sans dimensions.

On comptera donc les énergies en unités de $\hbar\omega$, les longueurs en unités de $\sqrt{\hbar/m\omega}$ et les impulsions en unités de $\sqrt{m\hbar\omega}$.


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 411 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

On a aussi :

$$[\hat{X}, \hat{P}] = i \quad (6.23)$$

L'hamiltonien H s'écrit alors :

$$H = \hbar\omega \hat{H} \quad (6.24)$$

avec

$$\hat{H} = \frac{1}{2}(\hat{X}^2 + \hat{P}^2) \quad (6.25)$$

On cherchera alors les solutions de l'équation aux valeurs propres suivante :

$$\hat{H} |\varphi_\nu^\alpha\rangle = \varepsilon_\nu |\varphi_\nu^\alpha\rangle \quad (6.26)$$

où l'observable $\hat{H}$ et les valeurs propres ε_ν sont sans dimensions. L'indice ν peut à priori être discret ou continu et l'indice α permet de distinguer éventuellement les différents vecteurs propres associés à une même valeur propre ε_ν .



Page de titre

Sommaire



Page 412 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

3.2. Opérateurs a , a^+ , N

Comme l'opérateur $\hat{H}$ est une somme de deux carrés on peut le factoriser en tenant compte de la non commutativité des observables $\hat{X}$ et $\hat{P}$. On aura :

$$\begin{aligned}\frac{\hat{X}^2 + \hat{P}^2}{2} &= \left(\frac{\hat{X} - i\hat{P}}{\sqrt{2}}\right)\left(\frac{\hat{X} + i\hat{P}}{\sqrt{2}}\right) + \frac{i}{2}\hat{P}\hat{X} - \frac{i}{2}\hat{X}\hat{P} \\ &= \left(\frac{\hat{X} - i\hat{P}}{\sqrt{2}}\right)\left(\frac{\hat{X} + i\hat{P}}{\sqrt{2}}\right) - \frac{i}{2}[\hat{X}, \hat{P}]\end{aligned}\quad (6.27)$$

Posons :

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} + i\hat{P}) \quad (6.28)$$

$$a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} - i\hat{P}) \quad (6.29)$$

Ce qui revient à écrire :

$$\hat{X} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a^+ + a) \quad (6.30)$$

$$\hat{P} = \frac{i}{\sqrt{2}}(a^+ - a) \quad (6.31)$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 413 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

L'opérateur H s'écrit alors :

$$\hat{H} = a^+ a + \frac{1}{2} \quad (6.32)$$

a et a^+ sont des opérateurs non hermitiques et sont adjoints l'un de l'autre. Leur commutateur est :

$$[a, a^+] = \frac{1}{2} [\hat{X} + i\hat{P}, \hat{X} - i\hat{P}] = \frac{i}{2} [\hat{P}, \hat{X}] + \frac{i}{2} [\hat{P}, \hat{X}] \quad (6.33)$$

soit :

$$[a, a^+] = 1 \quad (6.34)$$

Introduisons l'opérateur N défini par :

$$N = a^+ a \quad (6.35)$$

on aura :

$$\hat{H} = N + \frac{1}{2} \quad (6.36)$$

et

$$H = (N + \frac{1}{2}) \hbar \omega \quad (6.37)$$



Page de titre

Sommaire



Page 414 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Les vecteurs propres de H sont donc aussi vecteurs propres de N et réciproquement.

N est un opérateur hermitique et ses commutateurs avec a et a^+ sont :

$$[N, a] = a^+aa - aa^+a = (a^+a - aa^+)a = -a \quad (6.38)$$

$$[N, a^+] = a^+aa^+ - a^+a^+a = a^+(aa^+ - a^+a) = a \quad (6.39)$$

soit :

$$[N, \mathbf{a}] = -\mathbf{a} \quad (6.40)$$

$$[N, \mathbf{a}^+] = \mathbf{a}^+ \quad (6.41)$$

3.3. Valeurs propres de N

Soient ν et $|\varphi_\nu\rangle$ les valeurs propres et vecteurs propres de N , on a donc :

$$N |\varphi_\nu\rangle = \nu |\varphi_\nu\rangle \quad (6.42)$$

D'après (6.37), les $|\varphi_\nu\rangle$ sont aussi vecteurs propres de H avec les valeurs propres $(\nu + \frac{1}{2})\hbar\omega$.

Il s'agit donc de déterminer les valeurs que peut prendre ν .



Page de titre

Sommaire



Page 415 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

3.3.1. Propriétés des valeurs propres et des vecteurs propres de N

Si $|\varphi_\nu\rangle$ est vecteur propre de N avec la valeur propre ν :

- (i) ν est nécessairement positive ou nulle.
- (ii) - Si $\nu = 0$; $a|\varphi_\nu\rangle = 0$.
 - Si $\nu \neq 0$; $a|\varphi_\nu\rangle$ est un vecteur non nul de norme $\nu\langle\varphi_\nu|\varphi_\nu\rangle$ et c'est un vecteur propre de N correspondant à la valeur propre $\nu - 1$.
- (iii) $a^+|\varphi_\nu\rangle$ est toujours non nul, sa norme est $(\nu + 1)\langle\varphi_\nu|\varphi_\nu\rangle$ et c'est un vecteur propre de N correspondant à la valeur propre $\nu + 1$.

En effet :

(i) Pour $|\varphi_\nu\rangle$ non nul on a :

$$\begin{aligned}
 |a|\varphi_\nu\rangle|^2 &= \langle\varphi_\nu| a^+ a |\varphi_\nu\rangle \\
 &= \langle\varphi_\nu| N |\varphi_\nu\rangle \\
 &= \nu\langle\varphi_\nu|\varphi_\nu\rangle \\
 &= \nu ||\varphi_\nu\rangle|^2
 \end{aligned} \tag{6.43}$$

soit :

$$\nu = \frac{|a|\varphi_\nu\rangle|^2}{||\varphi_\nu\rangle|^2} \geq 0 \tag{6.44}$$

- Si $\nu = 0$ alors $a|\varphi_\nu\rangle = 0$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 416 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

- Si $\nu \neq 0$ alors $a|\varphi_\nu\rangle$ est vecteur propre de N avec la valeur propre ν .

(ii) On a également $Na = aN - a$ donc :

$$Na|\varphi_\nu\rangle = (aN - a)|\varphi_\nu\rangle = aN|\varphi_\nu\rangle - a|\varphi_\nu\rangle \quad (6.45)$$

d'où :

$$N(a|\varphi_\nu\rangle) = (\nu - 1)a|\varphi_\nu\rangle \quad (6.46)$$

Si $|\varphi_\nu\rangle$ est ket propre de N avec la valeur propre ν , $a|\varphi_\nu\rangle$ est ket propre de N avec la valeur propre $\nu - 1$.

(iii) On a aussi :

$$Na^+ = a^+N + a^+ \quad (6.47)$$

donc :

$$Na^+|\varphi_\nu\rangle = (a^+N + a^+)|\varphi_\nu\rangle = a^+N|\varphi_\nu\rangle + a^+|\varphi_\nu\rangle \quad (6.48)$$

d'où :

$$Na^+|\varphi_\nu\rangle = (\nu + 1)a^+|\varphi_\nu\rangle \quad (6.49)$$



Page de titre

Sommaire



Page 417 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

$$\begin{aligned}
 |a^+ |\varphi_\nu\rangle|^2 &= \langle \varphi_\nu | aa^+ | \varphi_\nu \rangle = \langle \varphi_\nu | N + 1 | \varphi_\nu \rangle \\
 &= (\nu + 1) \langle \varphi_\nu | \varphi_\nu \rangle = (\nu + 1) || \varphi_\nu ||^2
 \end{aligned}
 \tag{6.50}$$

Si $|\varphi_\nu\rangle$ est ket propre de N avec la valeur propre ν , $a^+ |\varphi_\nu\rangle$ est ket propre de N avec la valeur propre $\nu + 1$.

3.3.2. Spectre de N

Les valeurs propres ν de l'opérateur N sont positives ou nulles.

Soit ν la valeur propre de N et $|\varphi_\nu\rangle$ le vecteur propre correspondant, on a donc :

$$N |\varphi_\nu\rangle = \nu |\varphi_\nu\rangle \quad \text{et} \quad \nu \geq 0 \tag{6.51}$$

Supposons que ν est non entier et montrons que ceci est en contradiction avec les propriétés précédentes :

Si ν est non entier on peut toujours trouver un entier $n \geq 0$ tel que : $n < \nu < n + 1$.

Par applications successives de l'opérateur a sur le vecteur $|\varphi_\nu\rangle$ nous formons la suite des vecteurs : $a |\varphi_\nu\rangle, a^2 |\varphi_\nu\rangle, \dots, a^n |\varphi_\nu\rangle$ qui sont vecteurs propres de N avec les valeurs propres $\nu - 1, \nu - 2, \dots, \nu - n$.

En effet on a déjà montré que $a |\varphi_\nu\rangle$ est vecteur propre de N avec la valeur propre $\nu - 1$, montrons que $a^2 |\varphi_\nu\rangle$ est vecteur propre de N avec la valeur propre $\nu - 2$.



Page de titre

Sommaire



Page 418 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

On a :

$$\begin{aligned}
 N(a^2 |\varphi_\nu\rangle) &= Na(a |\varphi_\nu\rangle) \\
 &= (aN - a)(a |\varphi_\nu\rangle) \\
 &= aN(a |\varphi_\nu\rangle) - a^2 |\varphi_\nu\rangle \\
 &= (\nu - 1)a(a |\varphi_\nu\rangle) - a^2 |\varphi_\nu\rangle \\
 &= (\nu - 1)(a^2 |\varphi_\nu\rangle) - a^2 |\varphi_\nu\rangle \\
 &= (\nu - 2)a^2 |\varphi_\nu\rangle
 \end{aligned} \tag{6.52}$$

et de même pour les autres puissances de a .

$a^n |\varphi_\nu\rangle$ est donc vecteur propre de N avec la valeur propre $\nu - n$, telle que : $0 < \nu - n < 1$.

Comme $\nu - n$ est positif, d'après les propriétés 3.3.1, $a(a^n |\varphi_\nu\rangle)$ est non nul et est vecteur propre de N avec la valeur propre $\nu - n - 1$ qui est négative ce qui est impossible : les valeurs propres de N ne peuvent pas être positives et non entières.

Supposons maintenant que ν est un entier positif ou nul : $\nu = n$

$a^n |\varphi_\nu\rangle$ est alors un vecteur propre de N correspondant à la valeur propre 0 et d'après les propriétés 3.3.1 on aura :

$$a(a^n |\varphi_n\rangle) = 0 \tag{6.53}$$

La suite de vecteurs propres de N obtenus par action répétée de l'opérateur a sur $|\varphi_n\rangle$ est donc limitée lorsque n est entier ; on ne peut ja-



Page de titre

Sommaire



Page 419 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

mais obtenir de vecteurs propres non nuls de N correspondant à une valeur propre négative.

On peut faire le même raisonnement par applications successives de a^+ sur $|\varphi_\nu\rangle$.

En conclusion ν ne peut être qu'un entier positif ou nul et les valeurs propres de N sont donc $n = 0, 1, 2, \dots$:

Comme :

$$H = (N + \frac{1}{2})\hbar\omega \quad (6.54)$$

On conclut que les valeurs propres de l'hamiltonien de l'oscillateur harmonique sont donnés par :

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega \quad (6.55)$$

L'équation aux valeurs propres étant :

$$\mathbf{H} | \varphi_n \rangle = E_n | \varphi_n \rangle \quad (6.56)$$

L'énergie de l'oscillateur harmonique est donc quantifiée et ne peut pas prendre n'importe quelle valeur. De plus, sa plus faible valeur qui correspond à l'état fondamental ($n = 0$) n'est pas nulle mais égale à $\frac{\hbar\omega}{2}$.



Page de titre

Sommaire



Page 420 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

3.4. Interprétations des opérateurs a et a^+

Si on part d'un état propre $|\varphi_n\rangle$ de H (fig. 6.4) correspondant à la valeur propre :

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \quad (6.57)$$

- Par application de a : on passe à l'état propre associé à la valeur propre E_{n-1} telle que :

$$E_{n-1} = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega - \hbar\omega = E_n - \hbar\omega \quad (6.58)$$

Il y a annihilation d'un quantum d'énergie $\hbar\omega$.

- Par application de a^+ : on passe au vecteur propre associé à la valeur propre E_{n+1} telle que :

$$E_{n+1} = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega + \hbar\omega = E_n + \hbar\omega \quad (6.59)$$

Il y a création d'un quantum d'énergie $\hbar\omega$.


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

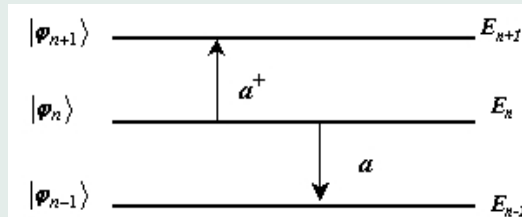
[Page 421 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)


Figure 6.4 : Opérateurs création et annihilation

Pour cette raison :

- L'opérateur a est appelé opérateur d'annihilation.
- L'opérateur a^+ est appelé opérateur de création.



Page de titre

Sommaire



Page 422 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

4. Etats propres de H

Nous avons vu dans 3.3 que les états propres de l'hamiltonien H associés aux valeurs propres E_n sont les états propres $|\varphi_n\rangle$ de l'opérateur N associés aux valeurs propres n . N étant un opérateur hermitique à spectre discret, dont aucune des valeurs propres n'est dégénérée, constitue à lui seul un E.C.O.C.. Ses états propres forment donc une base orthonormée complète $\{|\varphi_n\rangle\}$ et on a :

$$\langle \varphi_n | \varphi_{n'} \rangle = \delta_{nn'} \quad (6.60)$$

$$\sum_n |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n| = 1 \quad (6.61)$$

Pour déterminer les $|\varphi_n\rangle$ il faut résoudre l'équation aux valeurs propres :

$$N |\varphi_n\rangle = n |\varphi_n\rangle \quad (6.62)$$

Au lieu d'effectuer cette résolution pour chaque entier n , nous allons montrer que la connaissance de l'état fondamental $|\varphi_0\rangle$ nous permet d'atteindre tous les autres états $|\varphi_n\rangle$.

Pour déterminer $|\varphi_0\rangle$ solution de l'équation $N |\varphi_0\rangle = 0$, il est plus simple d'utiliser les propriétés 3.3.1 et de résoudre dans une représentation donnée l'équation :

$$a |\varphi_0\rangle = 0 \quad (6.63)$$



Page de titre

Sommaire



Page 423 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

L'opérateur d'annihilation a en effet une structure plus simple que l'opérateur N et se prête plus facilement à cette résolution.

4.1. Relations entre les états $|\varphi_n\rangle$

* Le vecteur $a |\varphi_n\rangle$ n'est pas nul et est état propre de N avec la valeur propre $n - 1$, comme cette valeur propre n'est pas dégénérée et est associée à l'état propre $|\varphi_{n-1}\rangle$, il existe un nombre c_n tel que :

$$a |\varphi_n\rangle = c_n |\varphi_{n-1}\rangle \quad (6.64)$$

Le carré de la norme de $a |\varphi_n\rangle$ étant égale à n d'après les propriétés 3.3.1, on a alors :

$$|c_n|^2 = n \quad (6.65)$$

soit :

$$|c_n| = \sqrt{n} \quad (6.66)$$

* De même le vecteur $a^+ |\varphi_n\rangle$ n'est pas nul et est état propre de N avec la valeur propre $n + 1$, cette valeur propre non dégénérée est également associée à l'état propre $|\varphi_{n+1}\rangle$, il existe donc un nombre d_n tel que :

$$|d_n|^2 = n + 1 \quad (6.67)$$



Page de titre

Sommaire



Page 424 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

soit :

$$|d_n| = \sqrt{n+1} \quad (6.68)$$

Si l'on considère que les phases relatives de $|\varphi_{n-1}\rangle$, $|\varphi_n\rangle$ et $|\varphi_{n+1}\rangle$ sont telles que les nombres c_n et d_n soient réels et positifs on obtient alors :

$$a |\varphi_n\rangle = \sqrt{n} |\varphi_{n-1}\rangle \quad (6.69)$$

$$a^+ |\varphi_n\rangle = \sqrt{n+1} |\varphi_{n+1}\rangle \quad (6.70)$$

$$a |\varphi_0\rangle = 0 \quad (6.71)$$

Ces relations sont très importantes et sont à la base de toutes les propriétés de l'oscillateur harmonique.

4.2. Détermination de l'état $|\varphi_n\rangle$

Comme $a^+ |\varphi_n\rangle = \sqrt{n+1} |\varphi_{n+1}\rangle$, on a la suite de vecteurs :

$$\begin{aligned} |\varphi_n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n}} a^+ |\varphi_{n-1}\rangle \\ |\varphi_{n-1}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n-1}} a^+ |\varphi_{n-2}\rangle \\ &\vdots \\ |\varphi_1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{1}} a^+ |\varphi_0\rangle \end{aligned} \quad (6.72)$$



Page de titre

Sommaire



Page 425 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Ce qui permet d'écrire :

$$|\varphi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} \frac{1}{\sqrt{n-1}} \cdots \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{1}} (a^+)^n |\varphi_0\rangle \quad (6.73)$$

soit encore :

$$|\varphi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^+)^n |\varphi_0\rangle \quad (6.74)$$

C'est à dire que l'on peut obtenir tous les $|\varphi_n\rangle$ à partir de l'état propre fondamental $|\varphi_0\rangle$.

L'ensemble des états propres de N (ou de H) peut être ainsi complètement déterminé à partir de l'état fondamental $|\varphi_0\rangle$. Cet ensemble constitue, comme on l'a vu, une base $\{|\varphi_n\rangle\}$ dans ξ car N (ou H) forme à lui seul un ensemble complet d'observables qui commutent.

4.3. Forme des opérateurs dans la base $\{|\varphi_n\rangle\}$

Nous avons vu que dans un problème à une dimension toutes les observables s'expriment en fonction des opérateurs X et P . Comme X et P sont des combinaisons linéaires des opérateurs a et a^+ et que l'action de ces opérateurs sur les vecteurs de base $\{|\varphi_n\rangle\}$ est simple, il y a tout intérêt à utiliser la représentation $\{|\varphi_n\rangle\}$ pour calculer les éléments de matrice et les valeurs moyennes de ces observables.



Page de titre

Sommaire



Page 426 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Ainsi et d'après (6.62), (6.69) et (6.70) les éléments de matrice des opérateurs N , a , a^+ , X et P dans cette représentation s'écrivent :

$$\langle \varphi_{n'} | N | \varphi_n \rangle = n \delta_{n',n} \quad (6.75)$$

$$\langle \varphi_{n'} | a | \varphi_n \rangle = \sqrt{n} \delta_{n',n-1} \quad (6.76)$$

$$\langle \varphi_{n'} | a^+ | \varphi_n \rangle = \sqrt{n+1} \delta_{n',n+1} \quad (6.77)$$

$$\langle \varphi_{n'} | X | \varphi_n \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left[\sqrt{n+1} \delta_{n',n+1} + \sqrt{n} \delta_{n',n-1} \right] \quad (6.78)$$

$$\langle \varphi_{n'} | P | \varphi_n \rangle = i \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \left[\sqrt{n+1} \delta_{n',n+1} - \sqrt{n} \delta_{n',n-1} \right] \quad (6.79)$$

Les matrices représentant N , a et a^+ dans la base $\{ | \varphi_n \rangle \}$ sont bien hermitique et s'écrivent :

$$N = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 2 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 3 & \cdots & \cdots & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & n & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \end{pmatrix} \quad (6.80)$$



Page de titre

Sommaire



Page 427 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

$$a = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \cdots & \cdots & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & \sqrt{n} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \end{pmatrix} \quad (6.81)$$

$$a^+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & & & & \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & \sqrt{n+1} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \end{pmatrix} \quad (6.82)$$

Les matrices représentant X et P sont elles aussi hermitiques et se déduisent simplement des deux dernières matrices précédentes.



Page de titre

Sommaire



Page 428 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

5. Fonctions propres de H

Nous allons nous placer dans la représentation $\{|x\rangle\}$ pour déterminer les fonctions d'onde $\varphi_n(x)$ qui représentent les fonctions propres de l'hamiltonien H .

Ces fonctions d'onde sont :

$$\varphi_n(x) = \langle x | \varphi_n \rangle \quad (6.83)$$

5.1. Fonction d'onde de l'état fondamental :

Cette fonction notée $\varphi_0(x)$ est associée à la valeur propre $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ de l'hamiltonien. Elle s'obtient comme on l'a remarqué au paragraphe 4 à partir de l'équation $a|\varphi_0\rangle = 0$.

En représentation $\{|x\rangle\}$ l'expression de l'opérateur a est :

$$\begin{aligned} a &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{x} + i\hat{p}) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{x}{\sqrt{\hbar/m\omega}} + \frac{ip}{\sqrt{\hbar m\omega}} \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{x}{\sqrt{\hbar/m\omega}} + \frac{i}{\sqrt{\hbar m\omega}} \hbar \frac{d}{dx} \right) \end{aligned} \quad (6.84)$$



Page de titre

Sommaire



Page 429 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

soit :

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x + \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{d}{dx} \right) \quad (6.85)$$

De sorte que l'équation $a |\varphi_0\rangle = 0$ s'écrit dans cette représentation :

$$\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x + \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{d}{dx} \right) \varphi_0(x) = 0 \quad (6.86)$$

où $\varphi_0(x) = \langle x | \varphi_0 \rangle$

C'est une équation différentielle du premier ordre dont la solution générale est :

$$\varphi_0(x) = C \exp\left(\frac{-m\omega}{2\hbar} x^2\right) \quad (6.87)$$

 C est une constante d'intégration qui s'obtient en normalisant la fonction d'onde :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_0^*(x) \varphi_0(x) dx = |C|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(\frac{-m\omega}{\hbar} x^2\right) dx = |C|^2 \sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}} = 1 \quad (6.88)$$

soit :

$$|C| = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \quad (6.89)$$



Page de titre

Sommaire



Page 430 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

comme $\varphi_0(x)$ est définie à une phase près on peut choisir la constante C réelle et écrire :

$$\varphi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left(\frac{-m\omega}{2\hbar}x^2\right) \quad (6.90)$$

qui est la fonction d'onde associée à l'état fondamental $|\varphi_0\rangle$.

5.2. Fonctions d'onde associés aux autres états $|\varphi_n\rangle$

Pour obtenir les fonctions $\varphi_n(x)$ associées aux autres états stationnaires $|\varphi_n\rangle$ il suffit d'utiliser l'expression (6.74)

$$|\varphi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^+)^n |\varphi_0\rangle \quad (6.91)$$

et d'écrire l'opérateur a^+ en représentation $\{|x\rangle\}$; soit :

$$a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x - \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{d}{dx} \right) \quad (6.92)$$



Page de titre

Sommaire



Page 431 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

on obtient alors :

$$\begin{aligned}
 \varphi_n(x) &= \langle x | \varphi_n \rangle \\
 &= \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle x | (a^+)^n | \varphi_0 \rangle \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x - \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{d}{dx} \right)^n \varphi_0(x)
 \end{aligned} \tag{6.93}$$

soit :

$$\varphi_n(x) = \left[\frac{1}{2^n n!} \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^n \right]^{\frac{1}{2}} \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar} \right)^{\frac{1}{4}} \left(\frac{m\omega}{\hbar} x - \frac{d}{dx} \right)^n \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right) \tag{6.94}$$

On remarque que chaque dérivation de $\exp(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2)$ par rapport à x introduit un facteur x supplémentaire, la fonction $\varphi_n(x)$ est égale donc au produit d'un polynôme de degré n par la gaussienne $\exp(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2)$. Ce polynôme qu'on note H_n est appelé polynôme d'Hermite. Comme le potentiel est pair, la parité de ce polynôme est égale à $(-1)^n$ et les fonctions d'onde sont successivement paires et impaires.


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 432 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

Les fonctions $\varphi_n(x)$ peuvent donc s'écrire sous la forme :

$$\varphi_n(\mathbf{x}) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \mathbf{x}\right) \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} \mathbf{x}^2\right) \quad (6.95)$$

Les polynômes d'Hermite qui sont bien connus en mathématiques peuvent être obtenus à partir de l'une des trois relations récurrentes suivantes :

$$H_n(u) = \left(2u - \frac{d}{du}\right) H_{n-1}(u) \quad (6.96)$$

$$H_n(u) = 2u H_{n-1}(u) - 2(n-1) H_{n-2}(u) \quad (6.97)$$

$$H_n(u) = (-1)^n e^{u^2} \frac{d^n}{du^n} e^{-u^2} \quad (6.98)$$

Les trois premiers polynômes ont pour expression :

$$H_0(u) = 1 \quad (6.99)$$

$$H_1(u) = 2u \quad (6.100)$$

$$H_2(u) = 4u^2 - 2 \quad (6.101)$$

De sorte que les trois premières fonctions d'onde de l'oscillateur harmonique



Page de titre

Sommaire

◀

▶

◀

▶

Page 433 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

s'écrivent :

$$\varphi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) \quad (6.102)$$

$$\varphi_1(x) = \left[\left(\frac{4m\omega}{\pi\hbar}\right)^3\right]^{\frac{1}{4}} x \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) \quad (6.103)$$

$$\varphi_2(x) = \left(\frac{m\omega}{4\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \left(2\frac{m\omega}{\hbar}x^2 - 1\right) \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) \quad (6.104)$$

La figure 6.5 montre l'allure de ces fonctions. On remarque sur cette figure la grande ressemblance avec ce qui a été établi pour les fonctions d'onde d'une particule dans un puits de potentiel infini (fig. 3.13).

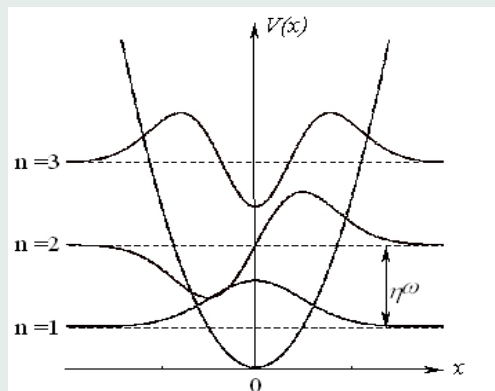


Figure 6.5 : Potentiel, niveaux d'énergie et fonctions d'onde de l'oscillateur



Page de titre

Sommaire



Page 434 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

6. Valeurs moyennes des opérateurs X et P dans l'état $|\varphi_n\rangle$

Nous allons calculer les valeurs moyennes de X et P ainsi que leurs écarts quadratiques moyens dans les états $|\varphi_n\rangle$, ce qui nous permettra de vérifier le principe d'incertitude de Heisenberg. On établira ensuite les équations d'évolution de ces valeurs moyennes et on montrera qu'elles obéissent aux équations d'évolution classiques.

6.1. Valeurs moyennes et écarts quadratiques moyens de X et P

Comme X et P ne commutent pas avec l'hamiltonien H , les états propres $|\varphi_n\rangle$ de H ne sont pas états propres de X et P . Le résultat de la mesure de l'observable X ou P sur un oscillateur dans l'état $|\varphi_n\rangle$ n'est donc pas certain et on ne peut l'obtenir qu'avec une certaine probabilité :

La probabilité de trouver pour X un résultat compris entre x et $x + dx$ est $|\varphi_n(x)|^2 dx$.

La probabilité de trouver pour P un résultat compris entre p et $p + dp$ est $|\overline{\varphi_n}(p)|^2 dp$.

Calculons les valeurs moyennes de X et P :



Page de titre

Sommaire



Page 435 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Comme :

$$X = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a^+ + a) \quad (6.105)$$

$$P = \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (a^+ - a) \quad (6.106)$$

On a d'après (6.55) et (6.56) :

$$\langle \varphi_n | \mathbf{X} | \varphi_n \rangle = 0 \quad (6.107)$$

$$\langle \varphi_n | \mathbf{P} | \varphi_n \rangle = 0 \quad (6.108)$$

Les valeurs moyennes des observables position X et impulsion P sont donc nulles lorsque l'oscillateur est dans l'état $|\varphi_n\rangle$.

Calculons alors les écarts quadratiques moyens ΔX et ΔP dans cet état.

On a :

$$(\Delta X)^2 = \langle \varphi_n | X^2 | \varphi_n \rangle - (\langle \varphi_n | X | \varphi_n \rangle)^2 = \langle \varphi_n | X^2 | \varphi_n \rangle \quad (6.109)$$

$$(\Delta P)^2 = \langle \varphi_n | P^2 | \varphi_n \rangle - (\langle \varphi_n | P | \varphi_n \rangle)^2 = \langle \varphi_n | P^2 | \varphi_n \rangle \quad (6.110)$$

Il s'agit donc de calculer les valeurs moyennes de X^2 et de P^2 dans l'état $|\varphi_n\rangle$.


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 436 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

Nous avons d'après (6.28) et (6.29).

$$\begin{aligned}
 X^2 &= \frac{\hbar}{2m\omega} (a^+ + a)(a^+ + a) \\
 &= \frac{\hbar}{2m\omega} (a^{+2} + aa^+ + a^+a + a^2) \\
 &= \frac{\hbar}{2m\omega} \left[2a^+a + 1 + \frac{1}{2} (a^{+2} + a^2) \right]
 \end{aligned}
 \tag{6.111}$$

$$\begin{aligned}
 P^2 &= \frac{-m\hbar\omega}{2} (a^+ - a)(a^+ - a) \\
 &= \frac{-m\hbar\omega}{2} (a^{+2} - aa^+ - a^+a + a^2) \\
 &= \frac{-m\hbar\omega}{2} \left[-2a^+a - 1 + \frac{1}{2} (a^{+2} + a^2) \right]
 \end{aligned}
 \tag{6.112}$$



Page de titre

Sommaire



Page 437 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Les termes en a^{+2} et a^2 conduisent à des éléments de matrice diagonaux nuls, car $a^{+2} | \varphi_n \rangle$ est proportionnel à $| \varphi_{n+2} \rangle$ et $a^2 | \varphi_n \rangle$ à $| \varphi_{n-2} \rangle$ qui sont tous orthogonaux à $| \varphi_n \rangle$.

On aura donc :

$$\langle \varphi_n | X^2 | \varphi_n \rangle = \frac{\hbar}{m\omega} \langle \varphi_n | N + \frac{1}{2} | \varphi_n \rangle = (n + \frac{1}{2}) \frac{\hbar}{m\omega} \quad (6.113)$$

$$\langle \varphi_n | P^2 | \varphi_n \rangle = \frac{m\hbar\omega}{2} \langle \varphi_n | N + \frac{1}{2} | \varphi_n \rangle = (n + \frac{1}{2}) m\hbar\omega \quad (6.114)$$

soit en définitive pour ΔX et ΔP :

$$\Delta X = \sqrt{n + \frac{1}{2}} \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \quad (6.115)$$

$$\Delta P = \sqrt{n + \frac{1}{2}} \sqrt{m\hbar\omega} \quad (6.116)$$

Le produit de ces deux écarts vaut donc :

$$\Delta X \Delta P = (n + \frac{1}{2}) \hbar \quad (6.117)$$

On voit que dans chaque état $| \varphi_n \rangle$, le produit $\Delta X \Delta P$ est bien supérieur ou égal à $\frac{\hbar}{2}$. La valeur la plus petite de ce produit, compatible avec le principe de Heisenberg est atteinte pour $n = 0$, c'est à dire dans l'état fondamental $| \varphi_0 \rangle$.



Page de titre

Sommaire



Page 438 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

6.2. Evolution dans le temps des valeurs moyennes de X et P

Considérons un oscillateur harmonique dont l'état est décrit à l'instant $t = 0$ par le ket normé $|\Psi(0)\rangle$:

$$|\Psi(0)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n(0) |\varphi_n\rangle \quad (6.118)$$

D'après la relation (5.109) l'état du système à l'instant t est :

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n(0) \exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right) |\varphi_n\rangle \quad (6.119)$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} c_n(0) \exp\left(-i\left(n + \frac{1}{2}\right)\omega t\right) |\varphi_n\rangle$$

La valeur moyenne à cet instant d'une observable A associée à l'oscillateur est donnée par :

$$\begin{aligned} \langle A(t) \rangle &= \langle \Psi(t) | A | \Psi(t) \rangle \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} c_m^*(0) c_n(0) \langle \varphi_m | A | \varphi_n \rangle e^{i(m-n)\omega t} \end{aligned} \quad (6.120)$$



Page de titre

Sommaire



Page 439 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

$\langle \varphi_m | A | \varphi_n \rangle$ est l'élément de matrice A_{mn} de l'observable dans la base $\{ | \varphi_n \rangle \}$.

$\langle A(t) \rangle$ s'écrit alors :

$$\langle \mathbf{A}(\mathbf{t}) \rangle = \sum_{\mathbf{m}=0}^{\infty} \sum_{\mathbf{n}=0}^{\infty} \mathbf{c}_{\mathbf{m}}^*(0) \mathbf{c}_{\mathbf{n}}(0) \mathbf{A}_{\mathbf{mn}} \exp(\mathbf{i}(\mathbf{m} - \mathbf{n})\omega \mathbf{t}) \quad (6.121)$$

m et n étant entiers, l'évolution dans le temps des valeurs moyennes s'effectue à la fréquence $\frac{\omega}{2\pi}$ et à ses différentes harmoniques qui sont les fréquences de Bohr de l'oscillateur harmonique.

Pour les observables X et P les seuls éléments de matrice X_{mn} et P_{mn} non nuls sont ceux pour les quels $m = n \pm 1$. Les valeurs moyennes de X et P contiennent donc uniquement les exponentielles $\exp(\pm i\omega t)$, c'est à dire qu'elles ont une évolution purement sinusoïdales de fréquence $\frac{\omega}{2\pi}$ comme c'est le cas de l'oscillateur harmonique classique. On pourra d'ailleurs trouver ce résultat en appliquant le théorème d'Ehrenfest aux observables X et P . On a en effet :

$$\frac{d}{dt} \langle X \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [X, H] \rangle = \frac{\langle P \rangle}{m} \quad (6.122)$$

$$\frac{d}{dt} \langle P \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [P, H] \rangle = -m\omega^2 \langle X \rangle \quad (6.123)$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)


Page 440 de 978

[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

En intégrant ces équations on obtient :

$$\langle \mathbf{X}(t) \rangle = \langle \mathbf{X}(0) \rangle \cos \omega t + \frac{1}{m\omega} \langle \mathbf{P}(0) \rangle \sin \omega t \quad (6.124)$$

$$\langle \mathbf{P}(t) \rangle = \langle \mathbf{P}(0) \rangle \cos \omega t - m\omega \langle \mathbf{x}(0) \rangle \sin \omega t \quad (6.125)$$

qui sont les formes classiques de l'évolution de la position et de l'impulsion de l'oscillateur harmonique.



Page de titre

Sommaire



Page 441 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

7. Oscillateur harmonique isotrope à trois dimensions

Nous allons montrer comment l'application des propriétés du produit tensoriel d'espaces d'états (cf §9 du chapitre 4) vont nous permettre de généraliser l'étude de l'oscillateur à une dimension à l'étude de l'oscillateur à trois dimensions.

7.1. Hamiltonien de l'oscillateur

Dans ce cas la particule classique est soumise à une force de rappel centrale $\vec{F} = -k\vec{r}$ dirigée vers l'origine O d'un référentiel galiléen. Cette force dérive d'un potentiel $V(r)$ tel que :

$$V(r) = \frac{1}{2}kr^2 = \frac{1}{2}m\omega^2r^2 \quad (6.126)$$

et son énergie totale est :

$$E = T + V = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2r^2 \quad (6.127)$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)
[◀](#)
[▶](#)
[◀](#)
[▶](#)
[Page 442 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

D'après les règles de quantification (cf §1.5 du chapitre 5), l'hamiltonien de l'oscillateur est :

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 R^2 \quad (6.128)$$

H ne dépend pas explicitement du temps et son équation aux valeurs propres est :

$$H |\Psi\rangle = E |\Psi\rangle \quad (6.129)$$

où le vecteur d'état $|\Psi\rangle$ appartient à l'espace des états ξ_r de la particule.

En coordonnées cartésiennes l'hamiltonien s'exprime simplement par :

$$H = \frac{1}{2m} (P_x^2 + P_y^2 + P_z^2) + \frac{1}{2}m\omega^2 (X^2 + Y^2 + Z^2) \quad (6.130)$$

7.2. Résolution de l'équation de Schrödinger

L'espace des états ξ_r peut être considéré comme le produit tensoriel des espaces des états ξ_x , ξ_y et ξ_z d'une particule en mouvement sur les axes $\vec{Ox}$, $\vec{Oy}$ et $\vec{Oz}$:

$$\xi_r = \xi_x \otimes \xi_y \otimes \xi_z \quad (6.131)$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 443 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

L'hamiltonien H de l'oscillateur peut alors s'écrire sous la forme :

$$H = H_x + H_y + H_z \quad (6.132)$$

avec :

$$H_x = \frac{P_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2 \quad (6.133)$$

$$H_y = \frac{P_y^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 Y^2 \quad (6.134)$$

$$H_z = \frac{P_z^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 Z^2 \quad (6.135)$$

H_x est donc le prolongement dans ξ_r d'un opérateur agissant dans ξ_x et H_y et H_z les prolongements dans ξ_r d'opérateurs agissant dans ξ_y et ξ_z .

Dans ξ_x , H_x est un hamiltonien d'oscillateur harmonique à une dimension et il en est de même pour H_y et H_z dans ξ_y et ξ_z .

H_x , H_y et H_z constituent respectivement des E.C.O.C. dans ξ_x , ξ_y et ξ_z mais ne sont pas des E.C.O.C. dans ξ_r .

Par contre comme ils commutent entre eux et que chacun d'eux commute avec leur somme H , l'ensemble $\{H, H_x, H_y, H_z\}$ constitue un E.C.O.C. dans ξ_r , on peut donc résoudre l'équation aux valeurs propre (6.124) en cherchant les vecteurs propres de H qui sont également vecteurs propres de H_x , H_y et H_z .



Page de titre

Sommaire



Page 444 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Comme on connaît les valeurs propres et les vecteurs propres d'un oscillateur à une dimension, on a pour les trois hamiltoniens H_x , H_y et H_z :

$$H_x |\varphi_{n_x}\rangle = E_{n_x} |\varphi_{n_x}\rangle = (n_x + \frac{1}{2})\hbar\omega |\varphi_{n_x}\rangle \quad (6.136)$$

$$H_y |\varphi_{n_y}\rangle = E_{n_y} |\varphi_{n_y}\rangle = (n_y + \frac{1}{2})\hbar\omega |\varphi_{n_y}\rangle \quad (6.137)$$

$$H_z |\varphi_{n_z}\rangle = E_{n_z} |\varphi_{n_z}\rangle = (n_z + \frac{1}{2})\hbar\omega |\varphi_{n_z}\rangle \quad (6.138)$$

où $|\varphi_{n_x}\rangle$, $|\varphi_{n_y}\rangle$ et $|\varphi_{n_z}\rangle$ appartiennent respectivement à ξ_x , ξ_y et ξ_z et n_x , n_y et n_z sont des entiers positifs ou nuls.

D'après les propriétés des produits tensoriels d'espace d'états établis dans le paragraphe 9 chapitre 4 on déduit que les états propres communs à H , H_x , H_y et H_z sont les états produits qu'on note :

$$\begin{aligned} |\psi_{n_x, n_y, n_z}\rangle &= |\varphi_{n_x}\rangle \otimes |\varphi_{n_y}\rangle \otimes |\varphi_{n_z}\rangle \\ &= |\varphi_{n_x}\rangle |\varphi_{n_y}\rangle |\varphi_{n_z}\rangle \\ &= |\varphi_{n_x}, \varphi_{n_y}, \varphi_{n_z}\rangle \end{aligned} \quad (6.139)$$

et que les valeurs propres de H sont les sommes des valeurs propres de H_x ,



Page de titre

Sommaire

◀

▶

◀

▶

Page 445 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

H_y et H_z soit :

$$\begin{aligned}
 E_{n_x, n_y, n_z} &= E_{n_x} + E_{n_y} + E_{n_z} \\
 &= \left(n_x + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega + \left(n_y + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega + \left(n_z + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \\
 &= \left[(n_x + n_y + n_z) + \frac{3}{2}\right]\hbar\omega \\
 &= \left(n + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega
 \end{aligned}
 \tag{6.140}$$

où $n = n_x + n_y + n_z$ est un entier égal à la somme de trois nombres entiers dont chacun peut prendre toutes les valeurs positives ou nulles. n sera donc aussi positif ou nul.

L'équation aux valeurs propres de l'oscillateur isotrope s'écrit en définitive :

$$H \left| \Psi_{n_x, n_y, n_z} \right\rangle = E_n \left| \Psi_{n_x, n_y, n_z} \right\rangle = \left(n + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega \left| \Psi_{n_x, n_y, n_z} \right\rangle \tag{6.141}$$

7.3. Etat propre $\left| \Psi_{n_x, n_y, n_z} \right\rangle$ de l'oscillateur isotrope

Introduisons comme au paragraphe 3.2 les trois couples d'opérateurs création et annihilation relatifs aux trois oscillateurs à une dimension en



Page de titre

Sommaire



Page 446 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

mouvement suivant $\vec{Ox}$, $\vec{Oy}$ et $\vec{Oz}$:

$$a_x = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} X + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} P_x \quad ; \quad a_x^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} X - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} P_x \quad (6.142)$$

$$a_y = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} Y + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} P_y \quad ; \quad a_y^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} Y - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} P_y \quad (6.143)$$

$$a_z = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} Z + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} P_z \quad ; \quad a_z^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} Z - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} P_z \quad (6.144)$$

Ces opérateurs qui sont les prolongements dans ξ_r d'opérateurs agissant dans ξ_x , ξ_y et ξ_z obéissent aux relations de commutation suivantes :

$$[a_x, a_x^+] = [a_y, a_y^+] = [a_z, a_z^+] = 1 \quad (6.145)$$

D'après les résultats du paragraphe 4.2 on a respectivement dans ξ_x , ξ_y et ξ_z :

$$|\varphi_{n_x}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_x!}} (a_x^+)^{n_x} |\varphi_{0x}\rangle \quad \text{avec } a_x |\varphi_{0x}\rangle = 0 \quad (6.146)$$

$$|\varphi_{n_y}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_y!}} (a_y^+)^{n_y} |\varphi_{0y}\rangle \quad \text{avec } a_y |\varphi_{0y}\rangle = 0 \quad (6.147)$$

$$|\varphi_{n_z}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_z!}} (a_z^+)^{n_z} |\varphi_{0z}\rangle \quad \text{avec } a_z |\varphi_{0z}\rangle = 0 \quad (6.148)$$



Page de titre

Sommaire



Page 447 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

de sorte que l'état $|\Psi_{n_x, n_y, n_z}\rangle$ de l'oscillateur isotrope, s'écrit dans ξ_r :

$$|\Psi_{n_x, n_y, n_z}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_x! n_y! n_z!}} (a_x^+)^{n_x} (a_y^+)^{n_y} (a_z^+)^{n_z} |\varphi_{0x}\rangle |\varphi_{0y}\rangle |\varphi_{0z}\rangle \quad (6.149)$$

On note $|\Psi_{000}\rangle = |\varphi_{0x}\rangle |\varphi_{0y}\rangle |\varphi_{0z}\rangle$

$|\Psi_{000}\rangle$ est le produit tensoriel des états fondamentaux des trois oscillateurs à une dimension et il vérifie les relations :

$$a_x |\Psi_{000}\rangle = a_y |\Psi_{000}\rangle = a_z |\Psi_{000}\rangle = 0 \quad (6.150)$$

L'état $|\Psi_{n_x, n_y, n_z}\rangle$ s'écrit en définitive :

$$|\Psi_{n_x, n_y, n_z}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_x! n_y! n_z!}} (a_x^+)^{n_x} (a_y^+)^{n_y} (a_z^+)^{n_z} |\Psi_{000}\rangle \quad (6.151)$$

et la fonction d'onde qui lui est associée est :

$$\Psi_{n_x, n_y, n_z}(x, y, z) = \langle r | \Psi_{n_x, n_y, n_z} \rangle = \langle x | \varphi_{n_x} \rangle \langle y | \varphi_{n_y} \rangle \langle z | \varphi_{n_z} \rangle \quad (6.152)$$

soit :

$$\Psi_{n_x, n_y, n_z}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) = \varphi_{n_x}(\mathbf{x}) \varphi_{n_y}(\mathbf{y}) \varphi_{n_z}(\mathbf{z}) \quad (6.153)$$



Page de titre

Sommaire

◀

▶

◀

▶

Page 448 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

La fonction d'onde associée à l'état fondamental étant :

$$\begin{aligned}
 \Psi_{000}(x, y, z) &= \langle r | \Psi_{000} \rangle = \langle x | \varphi_{0x} \rangle \langle y | \varphi_{0y} \rangle \langle z | \varphi_{0z} \rangle \\
 &= \varphi_0(x) \varphi_0(y) \varphi_0(z) \\
 &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{3}{4}} \exp \left[-\frac{m\omega}{2\hbar} (x^2 + y^2 + z^2) \right]
 \end{aligned}
 \tag{6.154}$$

7.4. Dégénérescence des niveaux de l'oscillateur isotrope

A la différence de l'oscillateur à une dimension, l'hamiltonien de l'oscillateur isotrope à trois dimensions ne constitue pas à lui seul un ensemble complet d'observables qui commutent, car les niveaux d'énergie E_n sont dégénérés.

Pour déterminer le degré de dégénérescence g_n correspondant au niveau E_n il faut chercher toutes les combinaisons (n_x, n_y, n_z) qui correspondent à une même valeur E_n de l'énergie.

Pour n fixé on peut choisir n valeurs pour $n_x : (0, 1, \dots, n)$ et il faut ensuite déterminer le nombre de couples possibles (n_y, n_z) . Pour une valeur de n_x donnée on doit avoir $n_y + n_z = n - n_x$. Il y a pour cela $(n - n_x + 1)$ possibilités qui sont : $(0, n - n_x), (1, n - n_x - 1), \dots, (n - n_x, 0)$.


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 449 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

La dégénérescence du niveau E_n est donc :

$$g_n = \sum_{n_x=0}^n (n - n_x + 1) \quad (6.155)$$

Cette somme peut se calculer facilement par :

$$g_n = (n+1) \sum_{n_x=0}^n 1 - \sum_{n_x=0}^n n_x \quad (6.156)$$

$$= (n+1)(n+1) - \frac{n(n+1)}{2}$$

soit :

$$g_n = \frac{(n+1)(n+2)}{2} \quad (6.157)$$

Ce résultat signifie que tous les niveaux de l'oscillateur sont dégénérés sauf le niveau fondamental pour lequel $n = 0$ et $E_0 = \frac{3}{2}\hbar\omega$.

7.5. Généralisation d'un oscillateur isotrope à ℓ dimensions

Dans ce cas l'hamiltonien de l'oscillateur s'écrit :

$$H = \sum_{i=1}^{\ell} H_i = \sum_{i=1}^{\ell} \frac{P_i^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X_i^2 \quad (6.158)$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 450 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

H_i étant l'hamiltonien opérant dans l'espace ξ_i relatif à (P_i, X_i) et dont l'équation aux valeurs propres est :

$$H_i |\varphi_{n_i}\rangle = E_{n_i} |\varphi_{n_i}\rangle = (n_i + \frac{1}{2})\hbar\omega |\varphi_{n_i}\rangle \quad (6.159)$$

L'espace des états de l'oscillateur est le produit tensoriel de tous les espaces ξ_i :

$$\xi = \xi_1 \otimes \xi_2 \otimes \dots \otimes \xi_\ell \quad (6.160)$$

et l'équation aux valeurs propres de l'hamiltonien total H est :

$$H |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle \quad (6.161)$$

où $|\psi_n\rangle$ et E_n sont telles que :

$$|\psi_n\rangle = |\varphi_{n_1}\rangle \otimes |\varphi_{n_2}\rangle \otimes \dots \otimes |\varphi_{n_\ell}\rangle = |\varphi_{n_1, n_2, \dots, n_\ell}\rangle \quad (6.162)$$

$$E_n = \sum_{i=1}^{\ell} E_{n_i} = \sum_{i=1}^{\ell} (n_i + \frac{1}{2})\hbar\omega = (n + \frac{\ell}{2})\hbar\omega \quad (6.163)$$

avec $n = \sum_{i=1}^{\ell} n_i$.


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)


Page 451 de 978

[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

On a donc en définitive :

$$|\psi_{\mathbf{n}}\rangle = |\varphi_{\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2, \dots, \mathbf{n}_\ell}\rangle \quad (6.164)$$

$$\mathbf{E}_{\mathbf{n}} = \left(\mathbf{n} + \frac{\ell}{2}\right)\hbar\omega \quad (6.165)$$

E_n est alors $C_{n+\ell-1}^n$ fois dégénérée.



Page de titre

Sommaire



Page 452 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Exercices et Problèmes

EP 6.1 : Méthode polynômiale

Il s'agit de retrouver par une méthode polynômiale les énergies et les fonctions propres d'un oscillateur harmonique à une dimension de masse m , de pulsation ω et dont l'hamiltonien s'écrit en représentation $\{|x\rangle\}$:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$

1- Ecrire l'équation de Schrödinger de l'oscillateur en posant $\varepsilon = \frac{E}{\hbar\omega}$ et $\alpha = \frac{m\omega}{\hbar}$,
où E représente l'énergie totale de l'oscillateur.

2- Montrer que cette équation possède une solution asymptotique pour x tendant vers l'infini de la forme :

$$\varphi_\infty(x) = C \exp\left(-\frac{\alpha x^2}{2}\right)$$

3- On cherche la solution générale de la forme :

$$\varphi(x) = \varphi_\infty(x) h(x)$$



Page de titre

Sommaire



Page 453 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

a- En posant $y = \alpha x$, montrer que l'équation de Schrödinger se transforme en l'équation différentielle suivante :

$$H''(y) - 2yH'(y) + (2\varepsilon - 1)H(y) = 0$$

où $H(y)$ est un polynôme.

b- On écrit $H(y)$ sous forme d'un développement en série :

$$H(y) = \sum_0^{\infty} a_p y^p \quad \text{avec } p \text{ entier}$$

Montrer que les coefficients a_p sont liés entre eux par la relation de récurrence suivante :

$$a_{p+2} = \frac{-(2p+1) - 2\varepsilon}{(p+1)(p+2)} a_p$$

c- Montrer que pour les grandes valeurs de p la série $\sum a_p y^p$ se confond avec celle qui représente le développement de $\exp(y^2)$.

d- Montrer que pour que $\varphi(x)$ soit bornée il faut limiter le développement $H(y)$ et donc le bloquer à partir d'un certain rang.

En déduire alors les valeurs possibles de l'énergie E ainsi que sa quantification.

4- $H(y)$ est un polynôme de degré n pair ou impair, c'est le polynôme d'Hermite qui est défini par :

$$H_n(y) = (-1)^n e^{y^2} \frac{d^n}{dy^n} (e^{-y^2})$$



Page de titre

Sommaire



Page 454 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

a- Donner la forme normalisée des fonctions d'onde et calculer les fonctions correspondant au niveau fondamental et aux deux premiers niveaux excités.

b- Représenter ces fonctions ainsi que les niveaux d'énergie qui leur correspondent.

EP 6.2 : Relation d'Heisenberg

Soit un oscillateur harmonique à une dimension ayant pour hamiltonien :

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2$$

1-Montrer que l'énergie de l'oscillateur peut s'écrire :

$$E_n = m\omega^2 \langle X^2 \rangle_n$$

où $\langle X^2 \rangle_n$ est la valeur moyenne de X^2 dans l'état $|\varphi_n\rangle$.

2- Calculer $\langle X^4 \rangle_n$

3- Calculer $\Delta X = \sqrt{\langle X^2 \rangle_n - \langle X \rangle_n^2}$ et $\Delta P = \sqrt{\langle P^2 \rangle_n - \langle P \rangle_n^2}$

4- En déduire que dans un état propre n , on a :

$$\Delta X \cdot \Delta P = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar$$



Page de titre

Sommaire



Page 455 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Que remarquez vous pour $n = 0$?

EP 6.3 : Probabilité de mesure

On considère un oscillateur harmonique de masse m et de pulsation ω . A l'instant $t = 0$, l'état de cet oscillateur est donné par :

$$|\psi(0)\rangle = \sum_n a_n |\varphi_n\rangle$$

où les états $|\varphi_n\rangle$ sont les états stationnaires, d'énergies $(n + \frac{1}{2})\hbar\omega$.

1- Quelle est la probabilité P pour qu'une mesure de l'énergie de l'oscillateur, effectuée à un instant $t > 0$ quelconque, donne un résultat supérieur à $2\hbar\omega$?

Lorsque $P = 0$, quels sont les coefficients a_n non nuls ?

2- On suppose à partir de maintenant que seuls a_0 et a_1 sont différents de zéro. Ecrire en fonction de a_0 et a_1 la condition de normalisation de $|\psi(0)\rangle$ et la valeur moyenne $\langle H \rangle$ de l'énergie. On impose de plus $\langle H \rangle = \hbar\omega$, calculer $|a_0|^2$ et $|a_1|^2$.

3- Le vecteur d'état normé $|\psi(0)\rangle$ n'étant défini qu'à un facteur de phase global près, on fixe ce facteur de phase en prenant a_0 réel et positif. On pose $a_1 = |a_1| e^{i\theta_1}$. En plus de $\langle H \rangle = \hbar\omega$, on suppose que :

$$\langle X \rangle = \frac{1}{2} \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^{\frac{1}{2}}$$



Page de titre

Sommaire



Page 456 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Calculer θ_1 .

4- $|\psi(0)\rangle$ étant ainsi déterminé, écrire $|\psi(t)\rangle$ pour $t > 0$ et calculer la valeur de θ_1 à l'instant t . En déduire la valeur moyenne $\langle X \rangle(t)$ de la position à l'instant t .

EP 6.4 : Etats quasi-classiques de l'oscillateur harmonique

L'hamiltonien d'un oscillateur harmonique isotrope à une dimension $H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2$ peut s'écrire, en introduisant les observables :

$$\hat{X} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} X, \quad \hat{P} = \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}} P$$

et les opérateurs d'annihilation a et de création a^+

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} + i\hat{P}), \quad a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} - i\hat{P})$$

sous la forme :

$$H = \hbar\omega \left(a^+ a + \frac{1}{2} \right)$$

On se propose ici d'étudier les états propres $|\alpha\rangle$ de l'opérateur a :

$$a |\alpha\rangle = \alpha |\alpha\rangle$$



Page de titre

Sommaire



Page 457 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

qui sont appelés états “quasi-classiques” comme on pourra le comprendre à la fin du problème.

1- On décompose $|\alpha\rangle$ sur la base habituelle $\{|\varphi_n\rangle\}$ des états propres de H :

$$|\alpha\rangle = \sum_n c_n |\varphi_n\rangle$$

En utilisant la relation de récurrence $a |\varphi_n\rangle = \sqrt{n} |\varphi_{n-1}\rangle$, montrer que pour toute valeur de α complexe, il existe une relation de récurrence simple entre les coefficients c_n correspondants, permettant de les calculer tous à partir de c_0 , et que par conséquent, il existe un état propre $|\alpha\rangle$ de a quel que soit α .

Calculer les coefficients c_n en normalisant $|\alpha\rangle$: $\langle\alpha|\alpha\rangle = 1$.

Quelle est la probabilité de trouver $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$ lors d'une mesure de l'énergie sur l'état $|\alpha\rangle$?

2- Calculer la valeur moyenne de l'énergie $\langle E \rangle$ et l'écart quadratique ΔE quand l'oscillateur est dans l'état $|\alpha\rangle$.

Montrer que l'énergie est d'autant mieux définie que $|\alpha|$ est grand.

3- Calculer $\langle x \rangle$, Δx , $\langle p \rangle$, Δp dans un état $|\alpha\rangle$.

Que vaut, dans cet état, $\Delta x \cdot \Delta p$?

4- On suppose qu'à l'instant $t = 0$, l'oscillateur est dans un état $|\alpha\rangle$, montrer qu'à chaque instant ultérieur t , il est dans un autre état propre $|\alpha(t)\rangle$ de l'opérateur a .

5- Que valent, à l'instant t , $\langle x \rangle$, $\langle p \rangle$ et $\Delta x \cdot \Delta p$?

Pourquoi, appelle-t-on les états $|\alpha\rangle$ pour $|\alpha| \gg 1$, états “quasi-classiques” ?



Page de titre

Sommaire



Page 458 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

EP 6.5 : Oscillateur harmonique chargé dans un champ électrique constant

On considère un oscillateur harmonique à une dimension de masse m , de charge q ($q > 0$) et de pulsation ω .

On note $H_0 = \frac{P_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2$ son hamiltonien et $\{|\varphi_n\rangle\}$ la base orthonormée formée par les vecteurs propres de H_0 et $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$ les valeurs propres correspondantes.

On soumet cet oscillateur à un champ électrique constant ξ_0 , de sorte que son hamiltonien devient $H = H_0 - q\xi_0 X$.

On se propose de déterminer les vecteurs propres orthonormés de H et les valeurs propres correspondantes.

1-Montrer que H peut s'écrire sous la forme :

$$H = \frac{P_X^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \left(X - \frac{q\xi_0}{m\omega^2}\right)^2 - \frac{q^2\xi_0^2}{2m\omega^2}$$

2- On pose :

$$H'_0 = \frac{(P'_x)^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 (X')^2$$



Page de titre

Sommaire



Page 459 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

avec

$$P'_x = P_x$$

$$X' = X - \frac{q\xi_0}{m\omega^2}$$

On considère la transformation linéaire d'opérateur S agissant sur les kets et les observables associés à l'oscillateur et définie par :

$$P'_x = SP_xS^+$$

$$X' = SX S^+$$

$$H'_0 = SH_0S^+$$

a- Montrer que S est unitaire.

b- Montrer que $H'_0 |\phi_n\rangle = E_n |\phi_n\rangle$ où $|\phi_n\rangle = S |\varphi_n\rangle$.

c- Déterminer les valeurs propres de H et les vecteurs propres orthonormés correspondants.

3- On se propose de trouver une forme explicite de $|\phi_n\rangle$:

a- Montrer que $[P_x, S] = 0$ et $[X, S] = \frac{q\xi_0}{m\omega^2} S$

b- En écrivant S sous la forme $S = \exp(i\lambda Q)$ où $\lambda \neq 0$ et Q un opérateur hermitien, montrer que $[P_x, Q] = 0$ et $[X, Q] = -\frac{1}{\lambda} \frac{q\xi_0}{m\omega^2}$



Page de titre

Sommaire



Page 460 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

c- En déduire la forme la plus simple de Q et celle de $|\phi_n\rangle$.

EP 6.6 : Oscillateur harmonique chargé dans un champ électrique variable

Un oscillateur harmonique à une dimension est constitué par une particule de masse m , de charge q et d'énergie potentielle $V(X) = \frac{1}{2}m\omega^2 X^2$; on suppose que la particule est plongée dans un champ électrique $\vec{\xi}(t)$ parallèle à $\vec{Ox}$ et dépendant du temps, de sorte qu'il faut ajouter à $V(X)$ l'énergie potentielle :

$$W(t) = -q\xi(t)X$$

1- Ecrire l'hamiltonien $H(t)$ de la particule en fonction des opérateurs a et a^+ .
Calculer les commutateurs de a et a^+ avec $H(t)$

2- Soit $\alpha(t)$ le nombre défini par :

$$\alpha(t) = \langle \psi(t) | a | \psi(t) \rangle$$

où $|\psi(t)\rangle$ est le vecteur d'état normé de la particule étudiée. Déduire des résultats de la question précédente que $\alpha(t)$ satisfait l'équation différentielle :

$$\frac{d}{dt}\alpha(t) = -i\omega\alpha(t) + i\lambda(t)$$



Page de titre

Sommaire



Page 461 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

où $\lambda(t)$ est défini par :

$$\lambda(t) = \frac{q}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \xi(t)$$

Intégrer cette équation différentielle. Quelles sont à l'instant t les valeurs moyennes de la position et de l'impulsion de la particule ?.

3- Le ket $|\varphi(t)\rangle$ est défini par :

$$|\varphi(t)\rangle = [a - \alpha(t)] |\psi(t)\rangle$$

où $\alpha(t)$ a la valeur calculée en 2-.

En utilisant les résultats des questions 1- et 2-, montrer que l'évolution de $|\varphi(t)\rangle$ est donnée par :

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\varphi(t)\rangle = [H(t) + \hbar\omega] |\varphi(t)\rangle$$

Comment varie la norme de $|\varphi(t)\rangle$ en fonction du temps ?

4- On suppose que $|\psi(0)\rangle$ est vecteur propre de a avec la valeur propre $\alpha(0)$: montrer que $|\psi(t)\rangle$ est également vecteur propre de a , avec une valeur propre que l'on calculera.

En déduire, en fonction de $\alpha(0)$ la valeur moyenne à l'instant t de l'hamiltonien non-perturbé $H_0(t) = H(t) - W(t)$. Donner les écarts quadratiques moyens ΔX , ΔP et ΔH_0 : comment varient-ils en fonction du temps ?.



Page de titre

Sommaire



Page 462 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

5- On suppose qu'à l'instant $t = 0$, l'oscillateur est dans l'état fondamental $|\varphi_0\rangle$. Le champ électrique agit entre les instants 0 et T , puis s'annule. Quelle est, lorsque $t > T$, l'évolution des valeurs moyennes $\langle X \rangle(t)$ et $\langle P \rangle(t)$?

6- Application :

On suppose qu'entre les instants 0 et T , le champ $\xi(t)$ est donné par $\xi(t) = \xi_0 \cos(\omega' t)$: discuter en fonction de $\Delta\omega = \omega' - \omega$ les phénomènes observés (résonance). Si, à l'instant $t > T$, on mesure l'énergie, quels résultats peut-on trouver et avec quelles probabilités ?

EP 6.7 : Oscillateur harmonique et opérateur de translation

On considère un oscillateur harmonique à une dimension, d'hamiltonien H et d'états stationnaires $|\varphi_n\rangle$.

$$H |\varphi_n\rangle = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega |\varphi_n\rangle$$

L'opérateur $T(k)$ est défini par :

$$T(k) = e^{ikx}$$

1- $T(k)$ est-il unitaire ? Montrer que ses éléments de matrice vérifient quel que



Page de titre

Sommaire



Page 463 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

soit n :

$$\sum_{n'} |\langle \varphi_n | T(k) | \varphi_{n'} \rangle|^2 = 1$$

2- Exprimer $T(k)$ en fonction des opérateurs a et a^+ . Utiliser la formule de Glauber (EP 4.) et les relations de commutation de X et P : pour mettre $T(k)$ sous forme d'un produit d'opérateurs exponentiels.

3- Etablir les relations :

$$e^{\lambda a} |\varphi_0\rangle = |\varphi_0\rangle$$

$$\langle \varphi_n | T(k) | \varphi_0 \rangle = \frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}}$$

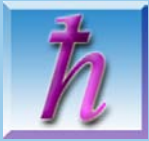
où λ est un paramètre complexe quelconque.

4- En déduire l'expression, en fonction de $E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ et $E_\omega = \hbar\omega$, de l'élément de matrice :

$$\langle \varphi_0 | T(k) | \varphi_n \rangle$$

Que se produit-il lorsque k tend vers zéro ? pouvait-on prévoir directement ce résultat ?

EP 6.8 : Oscillateur harmonique et opérateur d'évolution



Page de titre

Sommaire



Page 464 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

L'opérateur d'évolution $U(t, 0)$ d'un oscillateur harmonique à une dimension s'écrit :

$$U(t, 0) = e^{-i \frac{Ht}{\hbar}}$$

avec

$$H = \hbar\omega(a^+a + \frac{1}{2})$$

1- On considère les opérateurs :

$$a(t) = U^+(t, 0)aU(t, 0)$$

et

$$a^+(t) = U^+(t, 0)a^+U(t, 0)$$

En calculant leur action sur les kets propres $|\varphi_n\rangle$ de H , trouver l'expression de $a(t)$ et $a^+(t)$ en fonction de a et a^+ .

2- Calculer les opérateurs $X(t)$ et $P(t)$ obtenus à partir des opérateurs position X et impulsion P par la transformation unitaire.

$$X(t) = U^+(t, 0)XU(t, 0)$$

$$P(t) = U^+(t, 0)PU(t, 0)$$



Page de titre

Sommaire



Page 465 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Comment s'interprètent les relations ainsi obtenues.

3- Montrer que $U^+(\frac{\pi}{2\omega}, 0) |x\rangle$ est vecteur propre de P avec une valeur propre que l'on précisera. Etablir de même que $U^+(\frac{\pi}{2\omega}, 0) |p\rangle$ est vecteur propre de X .

4- Dédurre de la question précédente :

$$U^+(\frac{\pi}{2\omega}, 0) |x\rangle = \sqrt{\omega\pi} \exp(i\frac{\pi}{4}) |p = m\omega x\rangle$$

5- A l'instant $t = 0$ la fonction d'onde de l'oscillateur est $\psi(x, 0)$. Comment peut-on obtenir à partir de $\psi(x, 0)$ la fonction d'onde de l'oscillateur à tous les instants ultérieurs $t_q = \frac{q\pi}{2\omega}$.

6- On prend pour $\psi(x, 0)$ la fonction d'onde $\varphi_n(x)$ associée à un état stationnaire. Dédurre de la 5ème question la relation qui existe entre $\varphi_n(x)$ et sa transformée de Fourier $\tilde{\varphi}_n(p)$.

EP 6.9 : Modes propres de vibration de deux oscillateurs couplés (1)

On considère deux particules (1) et (2) de même masse m , se déplaçant sur l'axe $\vec{Ox}$ et interagissant par le potentiel :

$$V = \frac{1}{2}m\omega^2 \left[(X_1 - a)^2 + (X_2 + a)^2 + 2\lambda (X_1 - X_2)^2 \right]$$



Page de titre

Sommaire



Page 466 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

où ω est une constante ayant la dimension d'une pulsation, X_1 et X_2 les opérateurs position des deux particules sur $\vec{Ox}$, a , une constante ayant la dimension d'un déplacement et λ une constante positive sans dimension que nous appellerons constante de couplage.

1- Ecrire l'hamiltonien H du système des deux particules en fonction de V et des opérateurs impulsion P_1 et P_2 .

2- On introduit les opérateurs X_G, P_G et X_R, P_R définis par :

$$X_G = \frac{1}{2}(X_1 + X_2) \quad \text{et} \quad X_R = X_1 - X_2$$

$$P_G = P_1 + P_2 \quad \text{et} \quad P_R = \frac{1}{2}(P_1 - P_2)$$

et les masses μ_G et μ_R telles que $\mu_G = 2m$ et $\mu_R = \frac{m}{2}$

a- Calculer les commutateurs : $[X_G, X_R], [P_G, P_R], [X_G, P_G], [X_R, P_R], [X_G, P_R], [X_R, P_G]$.

b- Montrer alors que H peut se mettre sous la forme :

$$H = H_G + H_R + \frac{4\lambda}{1 + 4\lambda} m \omega^2 a^2$$

où H_G et H_R sont tels que :

$$H_G = \frac{P_G^2}{2\mu_G} + \frac{1}{2} \mu_G \omega_G^2 X_G^2 \quad \text{et} \quad H_R = \frac{P_R^2}{2\mu_R} + \frac{1}{2} \mu_R \omega_R^2 \left(X_R - \frac{2a}{1 + 4\lambda} \right)^2$$

Expliciter ω_G et ω_R Interpréter ?



Page de titre

Sommaire



Page 467 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

c- Déterminer les vecteurs propres $|\varphi_n^G\rangle$ et $|\varphi_p^R\rangle$ et les valeurs propres E_n^G et E_p^R des hamiltoniens H_G et H_R .

On posera :

$$a_G^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\sqrt{\frac{\mu_G \omega_G}{\hbar}} X_G - i \frac{P_G}{\sqrt{\mu_G \hbar \omega_G}} \right]$$

et

$$a_R^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\sqrt{\frac{\mu_R \omega_R}{\hbar}} X_R - i \frac{P_R}{\sqrt{\mu_R \hbar \omega_R}} \right]$$

avec :

$$X_R' = X_R - \frac{2a}{1 + 4\lambda}$$

3- Déterminer les états stationnaires $|\varphi_{n,p}\rangle$ et les énergies $E_{n,p}$ du système des deux particules.

Y-a-t-il dégénérescence des niveaux d'énergie, expliquer ?

EP 6.10 : Modes propres de vibration de deux oscillateurs couplés (2)

On considère un système constitué par deux oscillateurs harmoniques linéaires identiques de masses m et de pulsations propres ω_0 , repérés par leurs coordonnées rectilignes respectives x_1 et x_2 .



Page de titre

Sommaire



Page 468 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

1- On suppose que les deux oscillateurs sont sans interaction mutuelle.

a- Ecrire l'hamiltonien H_0 du système

b- Montrer que les valeurs possibles $E_0(n)$ de l'énergie du système s'expriment en fonction d'un entier n positif ou nul. Quel est le degré de dégénérescence d des niveaux d'énergie ?

c- Représenter le schéma de ces niveaux pour le fondamental et pour les deux premiers états excités.

2- Les deux oscillateurs sont en réalité couplés par un potentiel W tel que :

$$W = \lambda_m \omega_0^2 X_1 X_2$$

où λ est une constante positive inférieure à l'unité et X_1 et X_2 les opérateurs associés aux coordonnées x_1 et x_2 .

a- Ecrire l'hamiltonien H_1 du système.

b- On introduit les nouvelles coordonnées q_1 et q_2 telles que :

$$q_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 + x_2)$$

et

$$q_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 - x_2)$$

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 469 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

Montrer que H_1 peut s'écrire comme la somme de deux hamiltoniens décrivant des modes d'oscillations indépendants de pulsations ω_+ et ω_- qu'on explicitera.

c- Montrer que les valeurs possibles de l'énergie $E(n_+, n_-)$ du système décrit par H_1 s'expriment en fonction de deux nombres entiers n_+ et n_- positifs ou nuls.

d- Que devient l'expression de $E(n_+, n_-)$ dans le cas d'un couplage faible ($\lambda \ll 1$). On pose $n = n_+ + n_-$. Représenter le diagramme de niveaux d'énergie correspondant à $n = 0, 1, 2$.



Page de titre

Sommaire



Page 470 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

EP 6.11 : Modes propres de vibration de deux oscillateurs couplés (3)

On considère un système physique formé de deux oscillateurs harmoniques à une dimension de même masse m et couplés par un potentiel $W = \lambda m \omega_0^2 X_1 X_2$. λ est une constante positive inférieure à 1, ω_0 la pulsation propre des oscillateurs et X_1 et X_2 les opérateurs positions respectifs associés aux abscisses x_1 et x_2 .

On note $\vec{P}_1$ et $\vec{P}_2$ les opérateurs impulsions des deux oscillateurs. Soit H l'hamiltonien du système des deux oscillateurs couplés :

$$H = H_0 + W$$

avec

$$H_0 = \frac{P_1^2 + P_2^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_0^2 (X_1^2 + X_2^2)$$

1- Montrer qu'en l'absence de couplage ($\lambda = 0$) la fonction d'onde du système est égale à :

$\varphi(x_1, x_2) = \varphi_{n_1}(x_1) \varphi_{n_2}(x_2)$ où les φ_{n_i} sont les fonctions propres de l'hamiltonien d'un oscillateur harmonique à une dimension.

Déterminer les énergies possibles du système et leur degré de dégénérescence.

2- On suppose maintenant que λ est différent de zéro ($\lambda \neq 0$) et on introduit les



Page de titre

Sommaire



Page 471 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

variables u et v telles que :

$$u = \frac{x_1 + x_2}{2}$$

$$v = x_1 - x_2$$

On pose $M = 2m$ et $\mu = \frac{m}{2}$.et on note $p_u = M \frac{du}{dt}$ et $p_v = M \frac{dv}{dt}$ les quantités de mouvement associées aux variables u et v .

a- Montrer que :

$$\vec{p}_u = \vec{p}_1 + \vec{p}_2 \quad \text{et} \quad \vec{p}_v = \frac{\vec{p}_1 - \vec{p}_2}{2}$$

b- Montrer que $(u, \vec{p}_u)$ et $(v, \vec{p}_v)$ sont les positions et les quantités de mouvement associées respectivement au mouvement du centre de masse du système et au mouvement relatif des deux oscillateurs.3- Soient U et V les opérateurs positions associés aux variables u et v et P_u et P_v les opérateurs impulsions associés aux quantités de mouvement $\vec{p}_u$ et $\vec{p}_v$.

Calculer les commutateurs :

$$[U, V], [U, P_u], [V, P_u], [U, P_v], [V, P_v] \quad \text{et} \quad [P_u, P_v]$$



Page de titre

Sommaire



Page 472 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

4- a- Ecrire l'hamiltonien H du système en fonction des opérateurs U , V , P_u et P_v .

b- Interpréter le résultat obtenu

c- Montrer que la fonction d'onde du système peut être mise sous la forme :

$$\psi(u, v) = \psi_N(u) \psi_n(v)$$

d- Déterminer les valeurs propres du système.

On posera :

$$\Omega^2 = \omega_0^2(1 + \lambda) \quad \text{et} \quad \omega^2 = \omega_0^2(1 - \lambda)$$

5- Soient les opérateurs :

$$a_u = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{U} + i \hat{P}_u) \quad \text{et} \quad a_v = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{V} + i \hat{P}_v)$$

avec

$$\hat{U} = \sqrt{\frac{M\Omega}{\hbar}} U \quad \hat{V} = \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}} V$$

$$\hat{P}_u = \frac{1}{\sqrt{M\hbar\Omega}} P_u \quad \hat{P}_v = \frac{1}{\sqrt{\mu\hbar\omega}} P_v$$



Page de titre

Sommaire



Page 473 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

a- Calculer les opérateurs : $N_u = a_u^+ a_u$ et $N_v = a_v^+ a_v$ et en déduire l'expression de H en fonction de ces deux opérateurs.

b- Soit $\psi(t)$ le ket décrivant l'état des deux oscillateurs couplés à l'instant t .

-Calculer $\frac{d}{dt} \langle a_u \rangle$ et $\frac{d}{dt} \langle a_v \rangle$

-Calculer $\langle u \rangle(t)$ et $\langle v \rangle(t)$

c- En déduire $\langle X_1 \rangle(t)$ et $\langle X_2 \rangle(t)$.

Quel phénomène physique est ainsi mis en évidence ?

d- Déterminer explicitement $\langle X_1 \rangle(t)$ et $\langle X_2 \rangle(t)$ et représenter leur variation en fonction du temps lorsque :

$$\langle a_u \rangle(t=0) = \alpha_0 \quad \langle a_v \rangle(t=0) = \beta_0$$

où α_0 et β_0 sont des réels positifs vérifiant la relation :

$$\frac{\alpha_0^2}{\beta_0^2} = \frac{\Omega}{4\omega} \frac{M}{\mu}$$

EP 6.12 : Modes propres de vibration de deux oscillateurs couplés (4)

On considère deux particules discernables (1) et (2) de même masse m , se déplaçant sur l'axe $\vec{Ox}$, où elles sont repérées par leur abscisses x_1 et x_2 .

I- On suppose d'abord que les particules sont indépendantes, mais rappelées par des forces extérieures à des positions d'équilibre respectives $-\frac{a}{2}$ et $+\frac{a}{2}$. Leur énergie



Page de titre

Sommaire



Page 474 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

potentielle est alors :

$$U_0(x_1, x_2) = \frac{1}{2}m\omega^2(x_1 + \frac{a}{2})^2 + \frac{1}{2}m\omega^2(x_2 - \frac{a}{2})^2$$

On désignera par $q_1 = (x_1 + \frac{a}{2})$ et $q_2 = (x_2 - \frac{a}{2})$ les déplacements des deux particules par rapport à leurs positions d'équilibre et par p_1 et p_2 leurs impulsions.

1- Ecrire l'hamiltonien H_0 du système des deux particules en fonction des observables Q_1, Q_2 associées à q_1 et q_2 et P_1, P_2 associées à p_1 et p_2 .

Calculer les six commutateurs :

$$[Q_1, Q_2], [P_1, P_2], [Q_1, P_1], [Q_1, P_2], [Q_2, P_1], [Q_2, P_2]$$

2- Montrer que l'énergie du système s'exprime en fonction d'un entier n positif ou nul. Quel est le degré de dégénérescence d des niveaux d'énergie ? Représenter sur un schéma les trois premiers niveaux d'énergie en indiquant leur degré de dégénérescence.

II- On suppose maintenant que les deux particules sont couplées par un potentiel d'interaction mutuelle W correspondant à une force qui rappelle les deux particules à la distance a lorsque leurs déplacements les en écartent.

W est donné par :

$$W(x_1, x_2) = \frac{1}{2}C(x_2 - x_1 - a)^2$$



Page de titre

Sommaire



Page 475 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

où C est une constante réelle différente de zéro.

1- Ecrire le nouvel hamiltonien H du système en fonction de Q_1, P_1 et Q_2, P_2 .

2- On introduit les nouvelles observables, dites variables normales :

$$Q_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}}(Q_2 \pm Q_1)$$

$$P_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}}(P_2 \pm P_1)$$

Calculer les quatre commutateurs :

$$[Q_+, P_+] , [Q_-, P_-] , [Q_+, P_-] \text{ et } [Q_-, P_+]$$

3- Exprimer l'hamiltonien H en fonction des variables normales. Montrer qu'il peut s'écrire comme la somme de deux hamiltoniens décrivant des modes d'oscillations indépendants de pulsation ω_+ et ω_- appelées modes propres du système. Exprimer ω_+ et ω_- en fonction de ω, C et m .

4- Montrer que les valeurs possibles de l'énergie E du système s'expriment en fonction de deux nombres entiers n_+ et n_- positifs ou nuls. Représenter le schéma des trois premiers niveaux d'énergie dans la limite du couplage faible ($C \ll \frac{1}{2}m\omega^2$) et le comparer au schéma obtenu au 1-2°).

5- Donner brièvement une interprétation physique des deux modes de vibrations ω_+ et ω_- qui permet de comprendre intuitivement pourquoi ω_- est fonction de C alors que ω_+ en est indépendant.



Page de titre

Sommaire



Page 476 de 978

Retour

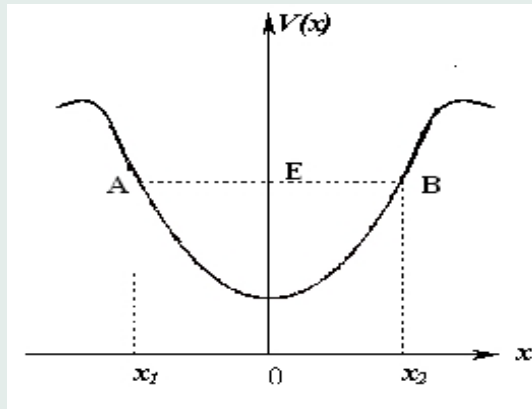
Plein écran

Fermer

Quitter

EP 6.13 : Méthode WKB

On considère un potentiel $V(x)$ décrit par la figure ci-dessous et un état d'énergie E pour une particule de masse m soumise à ce potentiel. Soit $\psi(x)$ la fonction d'onde correspondante.



1- Soit $u(x) = -i\hbar \frac{\psi'(x)}{\psi(x)}$. Donner l'expression de ψ en fonction de u .

Déduire de l'équation de Schrödinger satisfaite par ψ l'équation différentielle satisfaite par u .



Page de titre

Sommaire



Page 477 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

2- On cherche une approximation appelée “approximation semi-classique” dans laquelle $\hbar$ est une quantité petite qui tend vers zéro. On développera $u(x)$ en puissance de $\hbar$:

$$u(x) = u_0(x) - i\hbar u_1(x) - \hbar^2 u_2(x) \dots$$

et on mènera le calcul en annulant successivement les termes en $\hbar^0$, puis $\hbar$.

Déterminer ainsi les fonctions u_0 et u_1 et une forme de $\psi(x)$.

3- On suppose que le mouvement classique est un va et vient entre deux points A et B d'abscisse x_1 et x_2 appelés points tournants. En adoptant pour ψ une forme approchée réelle, montrer que cette fonction présente effectivement, et suivant le cas, un comportement oscillatoire ou exponentiel mais que l'amplitude de la fonction d'onde est très incorrectement décrite au voisinage de x_1 et x_2 .

4- Cette dernière circonstance rend difficile le raccordement des fonctions d'onde. On opérera de la manière suivante :

a- L'un des points tournants, x_2 par exemple ($x_2 > x_1$) est pris momentanément comme origine des abscisses.

Au voisinage de $x = 0$ on a :

$$E - V(x) \approx -\beta^2 x$$

Pour $x > 0$ on a :

$$\psi \approx A(x) \exp \left(-\frac{1}{\hbar} \int_0^x \beta \sqrt{x} dx \right)$$



Page de titre

Sommaire



Page 478 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Pour $x < 0$ on a :

$$\psi \approx B(x) \cos \left(\frac{1}{\hbar} \int_x^0 \beta \sqrt{x} dx \right) - \delta$$

b- Les fonctions $A(x)$ et $B(x)$ ont un comportement singulier en $x = 0$; on les ignorera par la suite. De la condition de continuité sur ψ et ψ' , déduire alors la valeur que doit prendre δ .

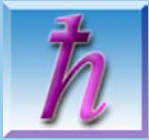
c- On fera le même calcul en supposant maintenant que $E - V(x)$, au voisinage du point tournant est en $\beta^2 x$.

5- Montrer alors que l'énergie doit être telle que l'on ait :

$$2 \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(E - V(x))} dx = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar$$

Interpréter ce résultat et étudier le cas : $V(x) = \frac{1}{2} kx^2$.

Cette méthode qui vient d'être exposée est connue sous le nom de méthode de Wentzel Kramers et Brillouin (WKB).



Page de titre

Sommaire



Page 479 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Chapitre 7

Moment cinétique


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 480 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

Le moment cinétique joue déjà un rôle important en mécanique classique. C'est une constante du mouvement dans le cas d'un système isolé et sa connaissance nous permet en principe d'atteindre les lois qui régissent le mouvement de ce système.

Pour une particule de masse m et d'impulsion $\vec{p}$ située à une distance r de l'origine O d'un référentiel $R(O, \vec{i}, \vec{j}, \vec{k})$ le moment cinétique $\vec{\mathcal{L}}$ est défini comme le produit vectoriel :

$$\vec{\mathcal{L}} = \vec{r} \wedge \vec{p} \quad (7.1)$$

C'est un vecteur axial orbital dont les composantes cartésiennes sont données par :

$$\vec{\mathcal{L}} = \begin{vmatrix} x \\ y \\ z \end{vmatrix} \wedge \begin{vmatrix} p_x \\ p_y \\ p_z \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} yp_z - zp_y \\ zp_x - xp_z \\ xp_y - yp_x \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \mathcal{L}_x \\ \mathcal{L}_y \\ \mathcal{L}_z \end{vmatrix} \quad (7.2)$$

En mécanique quantique l'étude des moments cinétiques est extrêmement importante et les propriétés qu'on va présenter interviennent dans de nombreux domaines de la physique : classification des spectres atomiques, spins des particules élémentaires, magnétisme, ...

L'analyse de ces phénomènes nécessite l'introduction en plus des moments cinétiques orbitaux ayant des équivalents classiques des moments

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 481 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

cinétiques typiquement quantiques et n'ayant aucun équivalent classique qu'on appelle des moments cinétiques intrinsèques ou de spin.

On désignera dans toute la suite par $\vec{L}$ un moment cinétique orbital, par $\vec{S}$ un moment cinétique de spin et par $\vec{J}$ un moment cinétique quelconque qui peut être $\vec{L}$ ou $\vec{S}$ ou une combinaison linéaire de $\vec{L}$ et $\vec{S}$.



Page de titre

Sommaire



Page 482 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

1. Définitions et relations de commutation

1.1. Moment cinétique orbital

1.1.1. Définition

C'est l'observable $\vec{L}$ associée au moment cinétique classique $\vec{\mathcal{L}}$:

$$\vec{L} = \vec{R} \wedge \vec{P} \quad (7.3)$$

Les composantes L_x , L_y et L_z de $\vec{L}$ s'obtiennent en associant aux variables de positions x, y et z et aux variables d'impulsion p_x, p_y, p_z les observables X, Y, Z et P_x, P_y, P_z de sorte qu'on a :

$$\begin{cases} L_x = YP_z - ZP_y \\ L_y = ZP_x - XP_z \\ L_z = XP_y - YP_x \end{cases} \quad (7.4)$$

L_x, L_y et L_z sont des opérateurs hermitiques car Y, P_z et Z, P_y commutent entre eux et il en est de même pour Z, P_x et X, P_z et X, P_y et Y, P_x

On introduit également l'opérateur $\vec{L}^2$:

$$\vec{L}^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 \quad (7.5)$$

L_x^2, L_y^2 et L_z^2 sont également des opérateurs hermitiques et il en est de même pour l'opérateurs $\vec{L}^2$.



Page de titre

Sommaire



Page 483 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

1.1.2. Relations de commutation

(i) Commutateurs $[\mathbf{L}_\alpha, \mathbf{L}_\beta]$

Calculons le commutateur $[L_x, L_y]$

$$\begin{aligned}
 [L_x, L_y] &= [Y P_z - Z P_y, Z P_x - X P_z] \\
 &= Y P_x [P_z, Z] + X P_y [Z, P_z] \\
 &= Y P_x (-i\hbar) + X P_y (i\hbar) \\
 &= i\hbar (X P_y - Y P_x) \\
 &= i\hbar L_z
 \end{aligned} \tag{7.6}$$

Un calcul similaire donne les deux autres commutateurs $[L_y, L_z]$ et $[L_z, L_x]$ de sorte qu'on a :

$$[\mathbf{L}_x, \mathbf{L}_y] = i\hbar \mathbf{L}_z \tag{7.7}$$

$$[\mathbf{L}_y, \mathbf{L}_z] = i\hbar \mathbf{L}_x \tag{7.8}$$

$$[\mathbf{L}_z, \mathbf{L}_x] = i\hbar \mathbf{L}_y \tag{7.9}$$

Ce résultat établi pour une particule se généralise à un système de plusieurs particules puisque le moment cinétique orbital de ce système est :

$$\vec{L} = \sum_{i=1}^n \vec{L}_i \quad \text{avec} \quad \vec{L}_i = \vec{R}_i \wedge \vec{P}_i \tag{7.10}$$



Page de titre

Sommaire



Page 484 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

On remarque que L_x , L_y et L_z ne commutent pas entre eux, on ne peut donc les mesurer simultanément.

(ii) Commutateur $[\vec{L}^2, \vec{L}]$

Il s'écrit :

$$[\vec{L}^2, \vec{L}] = [L_x^2 + L_y^2 + L_z^2, \vec{L}] \quad (7.11)$$

Les composantes de $\vec{L}$ étant L_x , L_y et L_z ; il s'agit donc de calculer les commutateurs $[\vec{L}^2, L_x]$, $[\vec{L}^2, L_y]$ et $[\vec{L}^2, L_z]$.

Calculons par exemple $[\vec{L}^2, L_x]$, on a :

$$\begin{aligned} [\vec{L}^2, L_x] &= [L_x^2 + L_y^2 + L_z^2, L_x] \\ &= [L_x^2, L_x] + [L_y^2, L_x] + [L_z^2, L_x] \end{aligned} \quad (7.12)$$

Le premier terme $[L_x^2, L_x]$ est nul car L_x commute évidemment avec lui-même et donc avec son carré. Les deux autres termes donnent :

$$\begin{aligned} [L_y^2, L_x] &= L_y^2 L_x - L_x L_y^2 = L_y [L_y, L_x] + [L_y, L_x] L_y \\ &= -i\hbar (L_y L_z + L_z L_y) \end{aligned} \quad (7.13)$$

$$\begin{aligned} [L_z^2, L_x] &= L_z^2 L_x - L_x L_z^2 = L_z [L_z, L_x] + [L_z, L_x] L_z \\ &= i\hbar (L_z L_y + L_y L_z) \end{aligned} \quad (7.14)$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 485 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

La somme de ces deux commutateurs est nulle et il s'en suit que :

$$[\vec{L}^2, L_x] = 0$$

Un calcul similaire donne le même résultat pour $[\vec{L}^2, L_y]$ et $[\vec{L}^2, L_z]$ et on obtient en définitive :

$$[\vec{L}^2, \vec{L}] = \mathbf{0} \quad (7.15)$$

Ce résultat est important et montre qu'on peut mesurer simultanément $\vec{L}^2$ et une composante quelconque de $\vec{L}$, c'est à dire qu'on peut mesurer simultanément la longueur du moment cinétique et sa projection sur un axe.

1.2. Définition générale d'un moment cinétique

On appellera moment cinétique tout opérateur vectoriel $\vec{J}$ dont les trois composantes J_x , J_y et J_z sont des observables satisfaisant aux relations de commutation suivantes :

$$[J_x, J_y] = i\hbar J_z \quad (7.16)$$

$$[J_y, J_z] = i\hbar J_x \quad (7.17)$$

$$[J_z, J_x] = i\hbar J_y \quad (7.18)$$

$$[\vec{J}^2, \vec{J}] = \mathbf{0} \quad (7.19)$$



Page de titre

Sommaire



Page 486 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

2. Valeurs propres et vecteurs propres de $\vec{J}^2$ et J_z

2.1. Valeurs propres de $\vec{J}^2$ et J_z

Comme $\vec{J}^2$ et J_z commutent, on peut chercher un système de vecteurs communs $\{|a, m\rangle\}$.

On aura alors :

$$\vec{J}^2 |a, m\rangle = a\hbar^2 |a, m\rangle \quad (7.20)$$

$$J_z |a, m\rangle = m\hbar |a, m\rangle \quad (7.21)$$

Cette écriture se justifie par le fait que $\vec{J}^2$ a la dimension de $\hbar^2$ et J_z a la dimension de $\hbar$. Les nombres a et m sont donc des réels dont on va déterminer les caractéristiques. On a :

$$\begin{aligned} \langle a, m | \vec{J}^2 |a, m\rangle &= \langle a, m | J_x^2 |a, m\rangle + \langle a, m | J_y^2 |a, m\rangle + \langle a, m | J_z^2 |a, m\rangle \\ &= |J_x |a, m\rangle|^2 + |J_y |a, m\rangle|^2 + |J_z |a, m\rangle|^2 \end{aligned} \quad (7.22)$$

et

$$\begin{aligned} \langle a, m | \vec{J}^2 |a, m\rangle &= a\hbar^2 \langle a, m | a, m\rangle \\ &= a\hbar^2 |a, m\rangle|^2 \end{aligned} \quad (7.23)$$



Page de titre

Sommaire



Page 487 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Les termes des deux égalités étant tous positifs à part a on en déduit nécessairement que a est positif ou nul. On peut poser alors :

$$a = j(j + 1) \quad (7.24)$$

où j est un nombre positif ou nul tel que, à toute valeur de a , correspond une valeur de j est réciproquement.

L'introduction de cette notation est destinée à simplifier les raisonnements qui vont suivre et se justifie par le fait que l'équation du second degré en j : $j(j + 1) = a$, a toujours une racine positive ou nulle et une seule.

Les équations aux valeurs propres de J^2 et J_z peuvent s'écrire donc :

$$J^2 |j, m\rangle = j(j + 1)\hbar^2 |j, m\rangle \quad (7.25)$$

$$J_z |j, m\rangle = m\hbar |j, m\rangle \quad (7.26)$$

2.2. Opérateurs J_+ et J_-

Au lieu d'utiliser les composantes J_x et J_y , il est plus commode d'introduire les opérateurs définis par :

$$J_+ = J_x + iJ_y \quad (7.27)$$

$$J_- = J_x - iJ_y \quad (7.28)$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 488 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

Ces opérateurs ne sont pas hermitiques mais sont adjoints l'un de l'autre. Ils vérifient des relations de commutation caractéristiques qui sont utiles pour la suite et qu'on va établir

(i) Commutateurs $[\mathbf{J}_z, \mathbf{J}_\pm]$:

$$\begin{aligned} [J_z, J_+] &= [J_z, J_x + iJ_y] = [J_z, J_x] - i[J_y, J_z] \\ &= i\hbar J_y + \hbar J_x = \hbar j_+ \end{aligned} \quad (7.29)$$

$$\begin{aligned} [J_z, J_-] &= [J_z, J_x - iJ_y] = [J_z, J_x] + i[J_y, J_z] \\ &= i\hbar J_y - \hbar J_x = -\hbar j_- \end{aligned} \quad (7.30)$$

soit :

$$[\mathbf{J}_z, \mathbf{J}_\pm] = \pm \hbar \mathbf{J}_\pm \quad (7.31)$$

(ii) Commutateur $[J_+, J_-]$:

On a :

$$\begin{aligned} J_\pm J_\mp &= (J_x \pm iJ_y)(J_x \mp iJ_y) \\ &= J_x^2 + J_y^2 \mp i(J_x J_y - J_y J_x) \\ &= J_x^2 + J_y^2 \pm \hbar J_z \\ &= \vec{J}^2 - J_z^2 \pm \hbar J_z \end{aligned} \quad (7.32)$$



Page de titre

Sommaire



Page 489 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

soit :

$$J_+ J_- = \vec{J}^2 - J_z^2 + \hbar J_z \quad (7.33)$$

$$J_- J_+ = \vec{J}^2 - J_z^2 - \hbar J_z \quad (7.34)$$

ce qui permet d'écrire :

$$[\mathbf{J}_+, \mathbf{J}_-] = 2\hbar \mathbf{J}_z \quad (7.35)$$

$$\{\mathbf{J}_+, \mathbf{J}_-\} = 2(\vec{J}^2 - J_z^2) \quad (7.36)$$

où $\{J_+, J_-\} = J_+ J_- + J_- J_+$ est l'anticommutateur de J_+ et J_- .(iii) Commutateurs $[\vec{J}^2, J_\pm]$ et $[\vec{J}^2, J_z]$

on a aussi :

$$[\vec{J}^2, \mathbf{J}_+] = [\vec{J}^2, \mathbf{J}_-] = [\vec{J}^2, \mathbf{J}_z] = \mathbf{0} \quad (7.37)$$

car $\vec{J}^2$ commute avec J_x, J_y et J_z et donc aussi avec $J_x \pm iJ_y$.

On a en définitive :

$$\begin{aligned} [\mathbf{J}_z, \mathbf{J}_+] &= \hbar \mathbf{J}_+ \\ [\mathbf{J}_z, \mathbf{J}_-] &= -\hbar \mathbf{J}_- \\ [\mathbf{J}_+, \mathbf{J}_-] &= 2\hbar \mathbf{J}_z \\ [\vec{J}^2, \mathbf{J}_+] &= [\vec{J}^2, \mathbf{J}_-] = [\vec{J}^2, \mathbf{J}_z] = \mathbf{0} \\ \{\mathbf{J}_+, \mathbf{J}_-\} &= 2(\vec{J}^2 - J_z^2) \end{aligned} \quad (7.38)$$



Page de titre

Sommaire



Page 490 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

2.3. Utilité de J_+ et J_-

$J_+ |j, m\rangle$ et $J_- |j, m\rangle$ sont des vecteurs propres de $\vec{J}^2$ et J_z et peuvent servir d'intermédiaire de calculs très utiles dans la théorie des moments cinétiques. En effet on a :

$$[J_z, J_+] = \hbar J_+ \quad (7.39)$$

soit

$$J_z J_+ = J_+ J_z + \hbar J_+ \quad (7.40)$$

Faisons agir les deux membres de cette égalité sur le ket $|j, m\rangle$:

$$\begin{aligned} J_z J_+ |j, m\rangle &= J_+ J_z |j, m\rangle + \hbar J_+ |j, m\rangle \\ &= J_+ (m\hbar |j, m\rangle) + \hbar J_+ |j, m\rangle \\ &= (m+1)\hbar J_+ |j, m\rangle \end{aligned} \quad (7.41)$$

$J_+ |j, m\rangle$ est donc vecteur propre de J_z avec la valeur propre $(m+1)\hbar$. Comme $\vec{J}^2$ commute avec J_+ , $J_+ |j, m\rangle$ est également vecteur propre de $\vec{J}^2$:

$$\text{En effet : } [\vec{J}^2, J_+] = 0 \quad \text{soit} \quad \vec{J}^2 J_+ = J_+ \vec{J}^2$$

Et en faisant agir ces deux propriétés d'opérateurs sur le ket $|j, m\rangle$ on a :

$$\begin{aligned} \vec{J}^2 J_+ |j, m\rangle &= J_+ \vec{J}^2 |j, m\rangle \\ &= j(j+1)\hbar^2 J_+ |j, m\rangle \end{aligned} \quad (7.42)$$



Page de titre

Sommaire



Page 491 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

En définitive et en faisant la même démarche pour J_- on peut conclure que :

* $J_+ |j, m\rangle$ est un vecteur propre commun à J^2 et J_z avec les valeurs propres $j(j+1)\hbar^2$ et $(m+1)\hbar$

* $J_- |j, m\rangle$ est un vecteur propre commun à J^2 et J_z avec les valeurs propres $j(j+1)\hbar^2$ et $(m-1)\hbar$

Soit :

$$\begin{cases} J_z (J_+ |j, m\rangle) = (m+1) \hbar (J_+ |j, m\rangle) \\ J^2 (J_+ |j, m\rangle) = j(j+1) \hbar^2 (J_+ |j, m\rangle) \end{cases} \quad (7.43)$$

et

$$\begin{cases} J_z (J_- |j, m\rangle) = (m-1) \hbar (J_- |j, m\rangle) \\ J^2 (J_- |j, m\rangle) = j(j+1) \hbar^2 (J_- |j, m\rangle) \end{cases} \quad (7.44)$$

2.4. Spectres de $\vec{J}^2$ et J_z

2.4.1. Règles de sélection sur m

a- Théorème 1

Si $|j, m\rangle$ est un vecteur propre non nul de $\vec{J}^2$ et J_z , j et m satisfont aux propriétés suivantes :



Page de titre

Sommaire



Page 492 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

(i) $-j \leq m \leq j$

(ii) Si $m = j$, alors $J_+ |j, j\rangle = 0$
 Si $m \neq j$, alors $J_+ |j, m\rangle$ est un vecteur non nul
 dont le carré de la norme est :
 $\hbar^2 (j - m) (j + m + 1) \langle j, m | j, m \rangle$

(iii) Si $m = -j$, alors $J_- |j, -j\rangle = 0$
 Si $m \neq -j$, alors $J_- |j, m\rangle$ est un vecteur non nul
 dont le carré de la norme est :
 $\hbar^2 (j + m) (j + m + 1) \langle j, m | j, m \rangle$

b- Démonstration

(i) Soit le ket $J_+ |j, m\rangle$ et considérons sa norme au carré :

$$\begin{aligned}
 |J_+ |j, m\rangle|^2 &= \langle j, m | J_- J_+ |j, m\rangle \\
 &= \langle j, m | \vec{J}^2 - J_z^2 - \hbar J_z |j, m\rangle \\
 &= \langle j, m | j(j+1) - m^2 - m |j, m\rangle \hbar^2 \\
 &= \{j(j+1) - m^2 - m\} \hbar^2 \langle j, m | j, m\rangle \\
 &= (j - m) (j + m + 1) \hbar^2 \langle j, m | j, m\rangle
 \end{aligned} \tag{7.45}$$

Comme les deux membres sont strictement positifs ou nuls on en déduit que :

$$(j - m) (j + m + 1) \geq 0 \tag{7.46}$$



Page de titre

Sommaire



Page 493 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

ce qui montre que :

$$-j - 1 \leq m \leq j \quad (7.47)$$

Considérons maintenant le ket $J_- |j, m\rangle$ on a :

$$\begin{aligned} |J_- |j, m\rangle|^2 &= \langle j, m | J_+ J_- |j, m\rangle \\ &= \langle j, m | \vec{J}^2 - J_z^2 + \hbar J_z |j, m\rangle \\ &= \langle j, m | j(j+1) - m^2 + m |j, m\rangle \hbar^2 \\ &= \{j(j+1) - m^2 + m\} \hbar^2 \langle j, m | j, m\rangle \\ &= (j+m)(j-m+1) \hbar^2 \langle j, m | j, m\rangle \end{aligned} \quad (7.48)$$

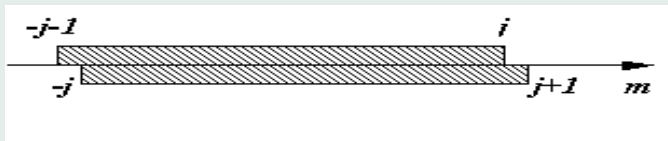
ce qui conduit à :

$$(j+m)(j-m+1) \geq 0$$

et

$$-j \leq m \leq j+1 \quad (7.49)$$

Les deux inéquations (7.46) et (7.49) sont donc simultanément compatibles dans le domaine où m est compris entre $-j$ et $+j$.





Page de titre

Sommaire



Page 494 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

On obtient donc une règle de sélection sur m qui s'écrit :

$$-j \leq m \leq +j \quad (7.50)$$

(ii) • Si $m = j$

Comme : $|J_+ |j, m\rangle|^2 = (j - m)(j + m + 1) \hbar^2 \langle j, m | j, m \rangle$

alors : $|J_+ |j, j\rangle|^2 = 0$ ce qui ne peut être réalisé que si :

$$J_+ |j, j\rangle = 0 \quad (7.51)$$

• Si $m \neq j$

alors : $J_+ |j, m\rangle$ est un vecteur non nul dont le carré de la norme est $(j - m)(j + m + 1) \hbar^2 \langle j, m | j, m \rangle$.

(iii) • Si $m = -j$

Comme :

$$|J_- |j, m\rangle|^2 = (j + m)(j - m + 1) \hbar^2 \langle j, m | j, m \rangle \quad (7.52)$$

alors : $|J_- |j, -j\rangle|^2 = 0$ ce qui ne peut être réalisé que si :

$$J_- |j, -j\rangle = 0 \quad (7.53)$$

• Si $m \neq -j$

alors $J_- |j, m\rangle$ est un vecteur non nul dont le carré de la norme est $(j + m)(j - m + 1) \hbar^2 \langle j, m | j, m \rangle$.



Page de titre

Sommaire



Page 495 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

2.4.2. Règles de sélection sur j

a- Théorème 2

S'il existe un vecteur propre $|j, m\rangle$ commun à $\vec{J}^2$ et J_z avec les valeurs propres $j(j+1)\hbar^2$ et $m\hbar$ alors :

(i) j est nécessairement un nombre entier ou demi-entier positif ou nul :

$$j = 0, \frac{1}{2}, 1, \dots$$

(ii) j étant fixé, m ne peut prendre que l'une des $2j+1$ valeurs suivantes :

$$m = -j, -j+1, \dots, j-2, j-1, j$$

b-Démonstration

Soit $|j, m\rangle$ le ket décrivant l'état du moment cinétique

* Considérons les vecteurs obtenus par applications successives de J_+ sur $|j, m\rangle$

$$J_+ |j, m\rangle, J_+^2 |j, m\rangle, \dots, J_+^n |j, m\rangle$$

Ils sont tous vecteurs propres de J_z avec les valeurs propres $(m+1)\hbar, (m+2)\hbar, \dots, (m+n)\hbar$



Page de titre

Sommaire



Page 496 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

En effet, on a déjà démontré que $J_+ |j, m\rangle$ est vecteur propre de J_z avec la valeur propre $(m + 1) \hbar$

Montrons que $J_+^2 |j, m\rangle$ est vecteur propre de J_z avec la valeur propre $(m + 2) \hbar$. On a :

$$\begin{aligned}
 J_z (J_+^2 |j, m\rangle) &= J_z J_+ (J_+ |j, m\rangle) \\
 &= (J_+ J_z + \hbar J_+) (J_+ |j, m\rangle) \\
 &= J_+ J_z (J_+ |j, m\rangle) + \hbar J_+^2 |j, m\rangle \\
 &= J_+ [(m + 1) \hbar J_+ |j, m\rangle] + \hbar J_+^2 |j, m\rangle \\
 &= (m + 1) \hbar J_+^2 |j, m\rangle + \hbar J_+^2 |j, m\rangle \\
 &= (m + 2) \hbar (J_+^2 |j, m\rangle)
 \end{aligned} \tag{7.54}$$

On montrera de même que $J_+^p |j, m\rangle$ est vecteur propre de J_z avec la valeur propre $(m + p) \hbar$ où p est un entier positif ou nul.

Supposons que p est tel que :

$$j - 1 < m + p \leq j \tag{7.55}$$

Cela veut dire que si on classe par ordre croissant les valeurs propres de J_z , $(m + p) \hbar$ serait soit l'avant dernière valeur propre si $m + p < j$ ou la dernière si $m + p = j$. Supposons que $(m + p) \hbar$ est l'avant dernière valeur propre de J_z , d'après le théorème 1 par application de J_+ on obtient le vecteur :

$$J_+ (J_+^p |j, m\rangle) = J_+^{p+1} |j, m\rangle \text{ qui est non nul}$$



Page de titre

Sommaire



Page 497 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

ce vecteur serait vecteur propre de J_z avec la valeur propre $(m + p + 1) \hbar$:

$$J_z (J_+^{p+1} |j, m\rangle) = (m + p + 1) \hbar (J_+^{p+1} |j, m\rangle) \quad (7.56)$$

or la valeur $m + p + 1$ est par hypothèse supérieure à j ce qui est en contradiction avec le théorème 1.

Il faut donc nécessairement que $m + p = j$, dans ce cas $J_+^p |j, m\rangle$ correspond à la valeur propre j de J_z et d'après le théorème 1, $J_+ (J_+^p |j, m\rangle)$ est nul.

La suite des vecteurs propres de J_z et $\vec{J}^2$ obtenus par action répétée de J_+ sur $|j, m\rangle$ est donc limitée. Les vecteurs de cette suite doivent d'annuler tous à partir d'un rang p tel que : $m + p = j$

* Soient maintenant les vecteurs : $J_- |j, m\rangle, J_-^2 |j, m\rangle, \dots, J_-^n |j, m\rangle$ obtenus par applications successives de J_- sur les $|j, m\rangle$.

Ils sont tous vecteurs propres de J_z avec les valeurs propres qu'on montre de proche en proche égales à $(m - 1) \hbar, (m - 2) \hbar, \dots, (m - n) \hbar$

Soit q l'entier positif ou nul tel que :

$$-j \leq m - q < -j + 1 \quad (7.57)$$

on montre par un raisonnement analogue au précédent que q est tel que :

$$m - q = -j$$

car la suite $J_- |j, m\rangle, \dots, J_-^n |j, m\rangle$ doit être limitée pour qu'il n'y ait pas contradiction avec le théorème 1



Page de titre

Sommaire



Page 498 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

En combinant les deux relations obtenues :

$$\begin{aligned} m + p &= j \\ m - q &= -j \end{aligned} \quad (7.58)$$

on obtient :

$$j = \frac{p+q}{2} \quad (7.59)$$

p et q étant des entiers positifs ou nul, $2j$ est aussi entier positif ou nul et j est entier ou demi-entier positif ou nul.

Les règles de sélection sur j et m sont donc :

$$j = 0, \frac{1}{2}, 1, \dots \quad (7.60)$$

$$m = -j, -j+1, \dots, j-2, j-1, j \quad (7.61)$$

2.4.3. Récapitulation

Lorsque $j(j+1)\hbar^2$ et $m\hbar$ sont les valeurs propres de $\vec{J}^2$ et J_z correspondant au vecteur propre commun $|j, m\rangle$

(i) les seules valeurs possibles pour j sont les nombres entiers ou demi-entiers positifs ou nuls, c'est à dire :

$$j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$$



Page de titre

Sommaire



Page 499 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

(ii) pour une valeur fixée de j , les seules valeurs possibles pour m sont les $(2j + 1)$ nombres : $-j, -j + 1, \dots, j - 1, j$. m est donc entier si j est entier et demi-entier si j est demi-entier.

2.5. Vecteurs propres de $\vec{J}^2$ et J_z

Si le vecteur propre $|j, m\rangle$ commun à $\vec{J}^2$ et J_z existe, comme m peut prendre $2j + 1$ valeurs, on peut construire les $(2j + 1)$ vecteurs propres de $\vec{J}^2$ et J_z par action répétée des opérateurs J_+ et J_-

En effet :

$*J_+ |j, m\rangle$ est vecteur propre de $\vec{J}^2$ et J_z avec les valeurs propres $j(j + 1)\hbar^2$ et $(m + 1)\hbar$. Ces valeurs propres étant non dégénérées, $J_+ |j, m\rangle$ doit être égal à un facteur de phase près au vecteur propre $|j, m + 1\rangle$, soit :

$$J_+ |j, m\rangle = c_m |j, m + 1\rangle \quad (7.62)$$

et d'après (7.45) on a :

$$\begin{aligned} \langle j, m | J_- J_+ | j, m \rangle &= (j - m)(j + m + 1) \hbar^2 \langle j, m | j, m \rangle \\ &= |c_m|^2 \langle j, m + 1 | j, m + 1 \rangle \end{aligned} \quad (7.63)$$

En supposant les vecteurs $|j, m\rangle$ normés on obtient :

$$|c_m|^2 = (j - m)(j + m + 1) \hbar^2 \quad (7.64)$$



Page de titre

Sommaire



Page 500 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

*De même, $J_- |j, m\rangle$ est vecteur propre de $\vec{J}^2$ et J_z avec les valeurs propres $j(j+1)\hbar^2$ et $(m-1)\hbar$. ces valeurs propres étant non dégénérées $J_- |j, m\rangle$ est égal à un facteur de phase près au vecteur propre $|j, m-1\rangle$.

Soit :

$$J_- |j, m\rangle = d_m |j, m-1\rangle \quad (7.65)$$

et d'après (7.47) on a :

$$\begin{aligned} \langle j, m | J_+ J_- | j, m\rangle &= (j+m)(j-m+1)\hbar^2 \langle j, m | j, m\rangle \\ &= |d_m|^2 \langle j, m-1 | j, m-1\rangle \end{aligned} \quad (7.66)$$

ce qui donne :

$$|d_m|^2 = (j+m)(j-m+1)\hbar^2 \quad (7.67)$$

En choisissant les phases relatives de $|j, m-1\rangle$, $|j, m\rangle$ et $|j, m+1\rangle$ de façon que c_m et d_m soient réels positifs on obtient :

$$c_m = \sqrt{(j-m)(j+m+1)}\hbar = \sqrt{j(j+1) - m(m+1)}\hbar \quad (7.68)$$

$$d_m = \sqrt{(j+m)(j-m+1)}\hbar = \sqrt{j(j+1) - m(m-1)}\hbar \quad (7.69)$$

ce qui donne en définitive

$$J_+ |j, m\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} |j, m+1\rangle \quad (7.70)$$

$$J_- |j, m\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} |j, m-1\rangle \quad (7.71)$$



Page de titre

Sommaire



Page 501 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

On peut donc à partir de $|j, m\rangle$ construire les $(2j + 1)$ vecteurs propres communs à $\vec{J}^2$ et J_z .

Comme l'action de J_+ sur $|j, m\rangle$ nous amène au ket supérieur $|j, m + 1\rangle$ et celle de J_- au ket inférieur $|j, m - 1\rangle$, on appelle souvent les opérateurs J_+ et J_- , respectivement, opérateur de “montée” et opérateur de “descente”.

2.6. Mesure de J_x et J_y

Comme les $|j, m\rangle$ ne sont pas vecteurs propres de J_x et J_y , la mesure de ces observables dans un système dans l'état $|j, m\rangle$ ne peut être connue avec certitude. On ne peut que calculer leur valeur moyenne et l'incertitude sur le résultat de leur mesure, qui est donnée par leur écart quadratique moyen.

2.6.1. Valeurs moyennes de J_x et J_y dans l'état $|j, m\rangle$

D'après (7.27) et (7.28) on peut écrire :

$$J_x = \frac{1}{2} (J_+ + J_-) \quad (7.72)$$

$$J_y = \frac{1}{2i} (J_+ - J_-) \quad (7.73)$$



Page de titre

Sommaire



Page 502 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

On aura alors :

$$\langle J_x \rangle = \langle j, m | J_x | j, m \rangle = \frac{1}{2} \langle j, m | J_+ + J_- | j, m \rangle = 0 \quad (7.74)$$

$$\langle J_y \rangle = \langle j, m | J_y | j, m \rangle = \frac{1}{2i} \langle j, m | J_+ - J_- | j, m \rangle = 0$$

car l'action de J_+ et J_- sur $|j, m\rangle$ donne $|j, m \pm 1\rangle$ qui sont orthogonaux à $|j, m\rangle$ donc :

$$\langle J_x \rangle = \langle J_y \rangle = 0 \quad (7.75)$$

La valeur moyenne des résultats de la mesure de J_x et J_y est nulle lorsque le système est dans l'état $|j, m\rangle$

2.6.2. Ecart quadratique moyen de J_x et J_y dans l'état $|j, m\rangle$

D'après la relation (5.47) du chapitre 5 on a :

$$\begin{aligned} (\Delta J_x)^2 &= \langle J_x^2 \rangle - \langle J_x \rangle^2 = \langle J_x^2 \rangle \\ (\Delta J_y)^2 &= \langle J_y^2 \rangle - \langle J_y \rangle^2 = \langle J_y^2 \rangle \end{aligned} \quad (7.76)$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 503 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

or d'après (7.72), (7.73) et (7.36) on a :

$$\begin{aligned}
 J_x^2 &= \frac{1}{4} (J_+^2 + J_-^2 + J_+ J_- + J_- J_+) \\
 &= \frac{1}{4} (J_+^2 + J_-^2 + 2\vec{J}^2 - 2J_z^2)
 \end{aligned}
 \tag{7.77}$$

$$\begin{aligned}
 J_y^2 &= -\frac{1}{4} (J_+^2 + J_-^2 - J_+ J_- - J_- J_+) \\
 &= -\frac{1}{4} (J_+^2 + J_-^2 - 2\vec{J}^2 - 2J_z^2)
 \end{aligned}
 \tag{7.78}$$

L'action de J_+^2 et J_-^2 sur le vecteur $|j, m\rangle$ donne les vecteurs $|j, m \pm 2\rangle$ qui lui sont orthogonaux on aura alors :

$$\begin{aligned}
 \langle J_x^2 \rangle &= \langle j, m | J_x^2 | j, m \rangle \\
 &= \frac{1}{2} \langle j, m | \vec{J}^2 - J_z^2 | j, m \rangle \\
 &= \frac{1}{2} \{j(j+1) - m^2\} \hbar^2
 \end{aligned}
 \tag{7.79}$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 504 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

$$\begin{aligned}
 \langle J_y^2 \rangle &= \langle j, m | J_y^2 | j, m \rangle \\
 &= \frac{1}{2} \langle j, m | \vec{J}^2 - J_z^2 | j, m \rangle \\
 &= \frac{1}{2} \{ j(j+1) - m^2 \} \hbar^2
 \end{aligned} \tag{7.80}$$

ce qui donne :

$$\Delta J_x = \Delta J_y = \sqrt{\frac{j(j+1) - m^2}{2}} \hbar \tag{7.81}$$

On remarque que l'incertitude sur les résultats de mesure de J_x et J_y dans l'état $|j, m\rangle$ n'est jamais nulle sauf pour $j = 0$. On aura bien sûr toujours $\Delta J_z = 0$.



Page de titre

Sommaire



Page 505 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

3. Représentation $\{|j, m\rangle\}$

3.1. Etats de base

Considérons un moment cinétique $\vec{J}$ agissant dans un espace d'état ξ . Comme $\vec{J}^2$ et J_z^2 constituent un E.C.O.C. dans ξ , leur vecteur propre commun $|j, m\rangle$ est unique pour j et m donnés et les $|j, m\rangle$ peuvent constituer une base de ξ . C'est la base $\{|j, m\rangle\}$ pour la quelle les relations d'orthonormalisation et de fermeture s'écrivent :

$$\langle j, m | j', m' \rangle = \delta_{jj'} \delta_{mm'} \quad (7.82)$$

$$\sum_j \sum_{m=-j}^{+j} |j, m\rangle \langle j, m| = 1 \quad (7.83)$$

Toutefois, et en général un système physique peut faire intervenir d'autres observables $A, B, \dots$ et le véritable ECOC correspondant n'est plus $\{\vec{J}^2, J_z^2\}$ mais $\{\vec{J}^2, J_z^2, A, B, \dots\}$ de sorte que la base correspondante est $\{|\alpha, \beta, \dots, j, m\rangle\}$, où α et $\beta, \dots$ sont les valeurs propres des observables $A, B, \dots$. Cependant l'existence de ces autres observables n'affecte évidemment pas la diagonalisation de $\vec{J}^2$ et J_z , qui seule nous intéresse ici. Une fois cette diagonalisation effectuée, il nous incombe de diagonaliser les autres observables de l'ECOC incluant $\vec{J}^2$ et J_z .



Page de titre

Sommaire



Page 506 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Ainsi par exemple si $\{A, \vec{J}^2, J_z\}$ est le véritable ECOC du système physique considéré, la base propre commune $\{|\alpha, j, m\rangle\}$ est bien unique et l'on a :

$$A |\alpha, j, m\rangle = \alpha |\alpha, j, m\rangle \quad (7.84)$$

$$\vec{J}^2 |\alpha, j, m\rangle = j(j+1) \hbar^2 |\alpha, j, m\rangle \quad (7.85)$$

$$J_z |\alpha, j, m\rangle = m\hbar |\alpha, j, m\rangle \quad (7.86)$$

et les relations d'orthonormalisation et de fermeture s'écrivent :

$$\langle \alpha, \mathbf{m}, \mathbf{j} | \alpha', \mathbf{j}', \mathbf{m}' \rangle = \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{\mathbf{j}\mathbf{j}'} \delta_{\mathbf{m}\mathbf{m}'} \quad (7.87)$$

$$\sum_{\alpha} \sum_{\mathbf{j}} \sum_{\mathbf{m}=-\mathbf{j}}^{+\mathbf{j}} |\alpha, \mathbf{j}, \mathbf{m}\rangle \langle \alpha, \mathbf{j}, \mathbf{m}| = 1 \quad (7.88)$$

Pour toute la suite, il est plus commode bien qu'abusif de considérer uniquement l' ECOC $\{\vec{J}^2, J_z\}$ et de travailler dans la base $\{|j, m\rangle\}$

3.2. Forme des opérateurs dans la base $\{|j, m\rangle\}$

L'utilisation de la base $\{|j, m\rangle\}$ permet de simplifier considérablement la recherche des matrices qui représentent une composante de $\vec{J}$ ou toute autre



Page de titre

Sommaire



Page 507 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

fonction opératorielle $F(\vec{J})$ car toutes ces fonctions d'expriment en fonction de $\vec{J}^2$, J_z et $J_{\pm}$ dont l'action sur les vecteurs de base $|j, m\rangle$ est simple. On a en effet :

$$\vec{J}^2 |j, m\rangle = j(j+1) \hbar^2 |j, m\rangle \quad (7.89)$$

$$J_z |j, m\rangle = m \hbar |j, m\rangle \quad (7.90)$$

$$J_+ |j, m\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} |j, m+1\rangle \quad (7.91)$$

$$J_- |j, m\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} |j, m-1\rangle \quad (7.92)$$

$$J_+ |j, j\rangle = 0 \quad (7.93)$$

$$J_- |j, -j\rangle = 0 \quad (7.94)$$

3.2.1. Éléments de matrice d'un opérateur

Les éléments de matrice d'un opérateur A dans la base $\{|j, m\rangle\}$ sont donnés par $\langle j', m' | A | j, m\rangle$

Ainsi pour $\vec{J}^2$, J_z , $J_{\pm}$, J_x et J_y , on a :

$$\begin{aligned} \langle j', m' | \vec{J}^2 | j, m\rangle &= j(j+1) \hbar^2 \delta_{j',j} \delta_{m',m} \\ \langle j', m' | J_z | j, m\rangle &= m \hbar \delta_{j',j} \delta_{m',m} \\ \langle j', m' | J_+ | j, m\rangle &= \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} \delta_{j',j} \delta_{m',m+1} \\ \langle j', m' | J_- | j, m\rangle &= \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} \delta_{j',j} \delta_{m',m-1} \end{aligned} \quad (7.95)$$



Page de titre

Sommaire



Page 508 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

$$\begin{aligned}
 \langle j', m' | J_x | j, m \rangle &= \frac{1}{2} \langle j', m' | J_+ + J_- | j, m \rangle \\
 &= \frac{\hbar}{2} \delta_{j', j} \left[\frac{\sqrt{j(j+1) - m(m+1)} \delta_{m', m+1} +}{\sqrt{j(j+1) - m(m-1)} \delta_{m', m-1}} \right]
 \end{aligned}
 \tag{7.96}$$

$$\begin{aligned}
 \langle j', m' | J_y | j, m \rangle &= -\frac{i}{2} \langle j', m' | J_+ - J_- | j, m \rangle \\
 &= -\frac{i\hbar}{2} \delta_{j', j} \left[\frac{\sqrt{j(j+1) - m(m+1)} \delta_{m', m+1} -}{\sqrt{j(j+1) - m(m-1)} \delta_{m', m-1}} \right]
 \end{aligned}
 \tag{7.97}$$

3.2.2. Structure des matrices

Dans toutes les relations précédentes on remarque que les éléments de matrice des opérateurs sont multipliés par $\delta_{j', j}$. La structure générale de ces matrices est donc diagonale en bloc. Par exemple pour j entier ces matrices ont la forme suivantes :



Page de titre

Sommaire



Page 509 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

$\begin{matrix} j,m\rangle \\ \langle j',m' \end{matrix}$	$ 0,0\rangle$	$ 1,1\rangle, 1,0\rangle, 1,-1\rangle$	$ 2,2\rangle, 2,1\rangle, 2,0\rangle, 2,-1\rangle, 2,-2\rangle$	$ 3,3\rangle, 3,2\rangle, 3,1\rangle, \dots$
$\langle 0,0 $	$\xi(0)$	0	0	0
$\langle 1,1 $ $\langle 1,0 $ $\langle 1,-1 $	0	$\xi(1)$	0	0
$\langle 2,2 $ $\langle 2,1 $ $\langle 2,0 $ $\langle 2,-1 $ $\langle 2,-2 $	0	0	$\xi(2)$	0
$\langle 3,3 $ $\langle 3,2 $ $\langle 3,1 $ M	0	0	0	$\xi(3)$

A cause du $\delta_{j',j}$, toutes les sous matrices reliant les $(2j+1)$ kets $|j, m\rangle$ (j fixe, $m = j, j-1, \dots, -j$) aux $(2j'+1)$ bras $\langle j', m'|$ (j' fixe, $m' = j', j'-1, \dots, -j'$)


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 510 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

$1, \dots - j')$ sont identiquement nulles lorsque $j' \neq j$ (matrices rectangles).

quand $j' = j$, Les sous matrices qui sont carrées sont non nulles, chacune d'entre elles est de dimension $2j + 1$.

Chaque matrice se décompose donc en une infinité de sous matrices carrées, une pour chaque valeur de j ayant $(2j + 1)$ lignes et $(2j + 1)$ colonnes. Les $(2j + 1)$ vecteurs $|j, m\rangle$ (j fixe) sous tendent le sous espace $\xi(j)$ de dégénérescence de la valeur propre $j(j + 1)\hbar^2$ de $\vec{J}^2$. Ces deux $(2j + 1)$ vecteurs sont orthogonaux et sont tous vecteurs propres de $\vec{J}^2$ avec la valeur propre $j(j + 1)\hbar^2$.

on peut donc étudier les opérateurs $\vec{J}^2, J_z, \dots$ à l'intérieur de chaque sous espace $\xi(j)$ de dimension finie $2j + 1$; chacun de ces opérateurs agissant sur un vecteur quelconque de $\xi(j)$ redonne un vecteur de $\xi(j)$. $\xi(j)$ est donc invariant sous l'effet de ces opérateurs.

A titre d'exemple, dans l'espace $\xi(1)$ de dimension 3, les matrices représentant les observables $\vec{J}^2, J_z, J_{\pm}$ et J_x et J_y s'écrivent :


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)


Page 511 de 978

[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

$$\vec{J}^2 = 2\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad J_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$J_+ = \sqrt{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad J_- = \sqrt{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$J_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad J_y = \frac{i\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$



Page de titre

Sommaire



Page 512 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

4. Moment cinétique orbital

Nous allons appliquer les résultats précédents au moment cinétique orbital $\vec{L} = \vec{R} \wedge \vec{P}$ qui a un équivalent classique et qui intervient dans l'étude de nombreux systèmes quantiques. On utilisera la représentation $\{|\vec{r}\rangle\}$ en coordonnées sphériques qui rend mieux compte de certaines propriétés de symétrie du système et qui s'adapte en particulier au mouvement d'une particule dans un potentiel central $V(r)$.

4.1. Composantes de $\vec{L}$ en représentation $\{|\vec{r}\rangle\}$

En représentation $\{|\vec{r}\rangle\}$ les observables $\vec{R}$ et $\vec{P}$ correspondent respectivement à l'opérateur multiplication par $\vec{r}$ et à l'opérateur différentiel $\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}$ de sorte qu'en coordonnées cartésiennes :

$$\vec{L} = \vec{r} \wedge \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} \quad (7.98)$$



Page de titre

Sommaire



Page 513 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Et les trois composantes de $\vec{L}$ s'écrivent alors :

$$L_x = \frac{\hbar}{i} \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \quad (7.99)$$

$$L_y = \frac{\hbar}{i} \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \quad (7.100)$$

$$L_z = \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \quad (7.101)$$

Il est particulièrement plus commode d'utiliser les coordonnées sphériques $\{r, \theta, \varphi\}$ pour résoudre l'équation aux valeurs propres de l'opérateur moment cinétique orbital car, on verra, que ses composantes n'agissent que sur les variables angulaires θ et φ .

Le vecteur position $\vec{r} = \overrightarrow{OM}$ s'exprimera alors dans la base sphérique où les coordonnées r, θ, φ définies sur la figure 7.1 sont liées aux coordonnées cartésiennes :

$$\begin{cases} x = r \sin \theta \cos \varphi \\ y = r \sin \theta \sin \varphi \\ z = r \cos \theta \end{cases} \quad \text{avec} \quad \begin{cases} r \geq 0 \\ 0 \leq \theta \leq \pi \\ 0 \leq \varphi \leq 2\pi \end{cases}$$



Page de titre

Sommaire



Page 514 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

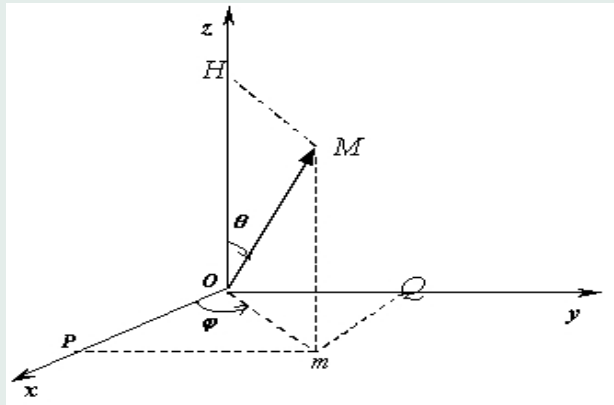


Figure 7.1 : Représentation du vecteur position $\overrightarrow{OM}$ en coordonnées sphériques

L'élément de volume $d\tau = dx dy dz$ s'écrit : $d\tau = r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi = r^2 dr d\Omega$ où $d\Omega$ est l'élément d'angle solide dans la direction d'angle θ et φ :

$$d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi$$

Les formules de changement de variables entre les deux système de coor-


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 515 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

données sont donc :

$$\begin{cases} r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \\ \cos \theta = \frac{z}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \\ \operatorname{tg} \varphi = \frac{y}{x} \end{cases} \quad (7.102)$$

et les dérivées partielles cartésiennes s'écrivent :

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial r}{\partial x} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \varphi}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (7.103)$$

avec : $\frac{\partial r}{\partial x} = \frac{x}{r}$, $\frac{\partial \theta}{\partial x} = \frac{xz}{\sin \theta r^3}$ et $\frac{\partial \varphi}{\partial x} = \frac{-y}{x^2 + y^2}$ et des expressions analogues pour $\frac{\partial}{\partial y}$ et $\frac{\partial}{\partial z}$.

Après un calcul laborieux mais non difficile on obtient pour la composante


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 516 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

L_z du moment cinétique et pour $\vec{L}^2$ et $L_{\pm}$:

$$L_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (7.104)$$

$$\vec{L}^2 = -\frac{\hbar^2}{\sin^2 \theta} \left[\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \quad (7.105)$$

$$L_{\pm} = \pm \hbar e^{\pm i\varphi} \left[\frac{\partial}{\partial \theta} \pm i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] \quad (7.106)$$

On remarque que L_z apparaît comme le moment conjugué p_{φ} de la variable φ

on peut montrer aussi que dans la base sphérique les composantes de $\vec{L}$ sont :

$$L_r = 0 \quad (7.107)$$

$$L_{\theta} = -\frac{\hbar}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (7.108)$$

$$L_{\varphi} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \theta} \quad (7.109)$$



Page de titre

Sommaire

◀

▶

◀

▶

Page 517 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

4.2. Equations aux valeurs propres

En représentation $\{|\ell, m\rangle\}$ les équations aux valeurs propres de $\vec{L}^2$ et L_z s'écrivent :

$$\vec{L}^2 |\ell, m\rangle = \ell(\ell + 1) \hbar^2 |\ell, m\rangle \quad (7.110)$$

$$L_z |\ell, m\rangle = m\hbar |\ell, m\rangle \quad (7.111)$$

où les $|\ell, m\rangle$ sont les vecteurs propres communs à $\vec{L}^2$ et L_z associées aux valeurs propres $\ell(\ell + 1) \hbar^2$ et $m\hbar$.

En représentation $\{|\vec{r}\rangle\}$ les fonctions propres associées à ces valeurs propres sont solution des équations aux dérivées partielles suivantes :

$$\begin{aligned} -\frac{1}{\sin^2 \theta} \left[\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta}) + \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \Psi_{\ell m}(r, \theta, \varphi) &= \ell(\ell + 1) \Psi_{\ell m}(r, \theta, \varphi) \\ -i \frac{\partial}{\partial \varphi} \Psi_{\ell m}(r, \theta, \varphi) &= m \Psi_{\ell m}(r, \theta, \varphi) \end{aligned} \quad (7.112)$$

où la fonction $\Psi_{\ell m}(r, \theta, \varphi)$ est telle que $\Psi_{\ell m}(r, \theta, \varphi) = \langle \vec{r} | \ell m \rangle$.

On remarque que la coordonnée r n'apparaît pas dans les opérateurs différentiels, on peut alors poser :

$$\Psi_{\ell m}(r, \theta, \varphi) = f(r) Y_{\ell}^m(\theta, \varphi) \quad (7.113)$$



Page de titre

Sommaire



Page 518 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

On considérera alors $Y_\ell^m(\theta, \varphi)$ comme la fonction propre commune à $\vec{L}^2$ et L_z associée aux valeurs propres $\ell(\ell+1)\hbar^2$ et $m\hbar$ de sorte que les équations aux valeurs propres de ces opérateurs peuvent s'écrire :

$$\vec{L}^2 Y_\ell^m(\theta, \varphi) = \ell(\ell+1)\hbar^2 Y_\ell^m(\theta, \varphi) \quad (7.114)$$

$$L_z Y_\ell^m(\theta, \varphi) = m\hbar Y_\ell^m(\theta, \varphi) \quad (7.115)$$

La fonction $f(r)$ apparaît comme une constante d'intégration des équations aux dérivées partielles, le fait que son choix est arbitraire montre que $\vec{L}^2$ et L_z ne forment pas un E.C.O.C. dans l'espace ξ_r .

4.3. Spectre de $\vec{L}^2$ et L_z

D'après (7.112) et (7.115) on a :

$$-i\frac{\partial}{\partial\varphi} Y_\ell^m(\theta, \varphi) = m Y_\ell^m(\theta, \varphi) \quad (7.116)$$

Cette équation donne après intégration :

$$Y_\ell^m(\theta, \varphi) = F_\ell^m(\theta) e^{im\varphi} \quad (7.117)$$

où $F_\ell^m(\theta)$ est une fonction ne dépendant que de θ .



Page de titre

Sommaire



Page 519 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Comme la fonction $Y_\ell^m(\theta, \varphi)$ est continue et uniforme, elle n'admet qu'une seule valeur en un point donné de l'espace. Ainsi pour les points identiques définis par (r, θ, φ) et $(r, \theta, \varphi + 2\pi)$ on doit avoir :

$$Y_\ell^m(\theta, \varphi) = Y_\ell^m(\theta, \varphi + 2\pi) \quad (7.118)$$

ce qui entraîne que :

$$\exp(2im\pi) = 1 \quad (7.119)$$

Cette égalité montre que m doit être entier, car s'il est demi-entier on aurait $\exp(2im\pi) = -1$.

Comme : $m = -\ell, -\ell+1, \dots, \ell-1, \ell$; ℓ aussi doit être entier : $\ell = 0, 1, 2, \dots$ soit :

$$\begin{cases} \ell \text{ est entier} \geq 0 \\ -\ell \leq m \text{ entier} \leq +\ell \end{cases}$$

En conclusion, dans le cas d'un moment cinétique orbital ℓ et m ne peuvent être qu'entiers

ℓ est appelé : nombre quantique azimutal

m est appelé : nombre quantique magnétique

4.4. Fonctions propres de $\vec{L}^2$ et L_z

Pour définir complètement les fonctions $Y_\ell^m(\theta, \varphi)$ il faut chercher la dépendance en θ de $F_\ell^m(\theta)$. Pour ce faire prenons le cas particulier où $m = \ell$;


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 520 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

on aura d'après (7.51)

$$L_+ Y_\ell^\ell(\theta, \varphi) = 0 \quad (7.120)$$

soit :

$$L_+ F_\ell^\ell(\theta) e^{i\ell\varphi} = 0 \quad (7.121)$$

qui s'écrit d'après (7.106) :

$$e^{i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot g \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) F_\ell^\ell(\theta) e^{i\ell\varphi} = 0 \quad (7.122)$$

ce qui donne :

$$\left(\frac{d}{d\theta} - \ell \cot g \theta \right) F_\ell^\ell(\theta) = 0 \quad (7.123)$$

soit : $\frac{dF_\ell^\ell(\theta)}{F_\ell^\ell(\theta)} = \ell \cot g \theta d\theta = \ell \frac{d(\sin \theta)}{\sin \theta}$, dont la solution générale est :

$$F_\ell^\ell(\theta) = c_\ell (\sin \theta)^\ell \quad (7.124)$$

où c_ℓ est une constante de normalisation.



Page de titre

Sommaire



Page 521 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

On aura donc pour chaque valeur entière positive ou nulle de ℓ une fonction $Y_\ell^\ell(\theta, \varphi)$ unique définie par :

$$Y_\ell^\ell(\theta, \varphi) = c_\ell (\sin \theta)^\ell e^{i\ell\varphi} \quad (7.125)$$

Par action répétée de L_- sur Y_ℓ^ℓ , on génère donc les fonctions : $Y_\ell^{\ell-1}, Y_\ell^{\ell-2}, \dots, Y_\ell^m, \dots, Y_\ell^{-\ell}$ correspondant aux différentes valeurs de m .

On voit donc qu'au couple de valeurs propres $\ell(\ell+1)\hbar^2$ et $m\hbar$ de $\vec{L}^2$ et L_z correspond une fonction propre et une seule $Y_\ell^m(\theta, \varphi)$ calculable sans ambiguïté.

Les fonctions $Y_\ell^m(\theta, \varphi)$ sont appelées harmoniques sphériques.

4.5. Propriétés des harmoniques sphériques

4.5.1. Relation entre les $Y_\ell^m(\theta, \varphi)$

D'après (7.70) et (7.71) on a :

$$L_\pm Y_\ell^m(\theta, \varphi) = \hbar \sqrt{\ell(\ell+1) - m(m \pm 1)} Y_\ell^{m \pm 1} \quad (7.126)$$

Sachant que $Y_\ell^m(\theta, \varphi) = F_\ell^m(\theta) e^{im\varphi}$ et en utilisant les expressions différentielles des opérateurs L_+ et L_- , on obtient facilement :

$$e^{\pm i\varphi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial \theta} - m \cot g\theta \right) Y_\ell^m(\theta, \varphi) = \sqrt{\ell(\ell+1) - m(m \pm 1)} Y_\ell^{m \pm 1}(\theta, \varphi) \quad (7.127)$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 522 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

4.5.2. Normalisation et fermeture

$\vec{L}^2$ et L_z constituent un E.C.O.C. dans l'espace ξ_Ω des fonctions de θ et φ , leurs fonctions propres $Y_\ell^m(\theta, \varphi)$ forment donc une base dans cet espace.

Ces fonctions doivent alors satisfaire aux conditions de normalisation, d'orthogonalité et de fermeture :

(i) Normalisation

La condition de normalisation s'écrit :

$$\int Y_\ell^{m*}(\theta, \varphi) Y_\ell^m(\theta, \varphi) d\Omega = 1 \quad (7.128)$$

soit :

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta Y_\ell^{m*}(\theta, \varphi) Y_\ell^m(\theta, \varphi) d\theta = 1 \quad (7.129)$$

En utilisant la relation (7.125) on obtient pour les $Y_\ell^\ell(\theta, \varphi)$:

$$2\pi |c_\ell|^2 \int_0^\pi (\sin \theta)^{2\ell} \sin \theta d\theta = 1 \quad (7.130)$$

En remarquant que $(\sin \theta)^{2\ell} = (1 - \cos^2 \theta)^\ell$ et $\sin \theta d\theta = d(\cos \theta)$, l'intégration de (7.130) conduit à :

$$|c_\ell| = \frac{1}{2^\ell \ell!} \sqrt{\frac{(2\ell+1)!}{4\pi}}$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 523 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

Par convention on prend $c_\ell = (-1)^\ell |c_\ell|$ ce qui fixe la phase de c_ℓ , on aura alors :

$$\mathbf{Y}_\ell^\ell(\theta, \varphi) = \frac{(-1)^\ell}{2^\ell \ell!} \sqrt{\frac{(2\ell+1)!}{4\pi}} (\sin \theta)^\ell \mathbf{e}^{i\ell\varphi} \quad (7.131)$$

Comme d'après (7.126) on a :

$$L_- Y_\ell^m(\theta, \varphi) = \hbar \sqrt{(\ell-m)(\ell-m+1)} Y_\ell^{m-1}(\theta, \varphi) \quad (7.132)$$

en appliquant $(\ell-m)$ fois l'opérateur L_- à $Y_\ell^\ell(\theta, \varphi)$ on peut atteindre $Y_\ell^m(\theta, \varphi)$. On aura ainsi :

$$(L_-)^{\ell-m} Y_\ell^\ell(\theta, \varphi) =$$

$$\hbar^{\ell-m} \sqrt{(2\ell)(1) \times (2\ell-1) \times (2) \times \dots \times (v+m+1)(\ell-m)} Y_\ell^m(\theta, \varphi)$$

c'est à dire :

$$\mathbf{Y}_\ell^m(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{(\ell+m)!}{(2\ell)!(\ell-m)!}} \left(\frac{\mathbf{L}_-}{\hbar} \right)^{\ell-m} \mathbf{Y}_\ell^\ell(\theta, \varphi) \quad (7.133)$$



Page de titre

Sommaire



Page 524 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

ce qui donne après un calcul relativement lourd :

$$\mathbf{Y}_\ell^m(\theta, \varphi) = \frac{(-1)^\ell}{2^\ell \ell!} \sqrt{\frac{(2\ell+1)! (\ell+m)!}{4\pi (\ell-m)!}} e^{im\varphi} (\sin \theta)^{-m} \frac{d^{(\ell-m)}}{d(\cos \theta)^{\ell-m}} (\sin \theta)^{2\ell} \quad (7.134)$$

(ii) Orthonormalisation

La condition d'orthonormalisation s'écrit :

$$\int Y_{\ell'}^{*m'}(\theta, \varphi) Y_\ell^m(\theta, \varphi) d\Omega = \delta_{\ell'\ell} \delta_{m'm} \quad (7.135)$$

soit encore :

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta Y_{\ell'}^{m'*}(\theta, \varphi) Y_\ell^m(\theta, \varphi) d\theta = \delta_{\ell'\ell} \delta_{m'm} \quad (7.136)$$

(iii) Fermeture

Toute fonction $f(\theta, \varphi)$ peut être développée dans l'espace ξ_Ω sur les harmoniques sphériques. Elle s'écrit :

$$f(\theta, \varphi) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{m=\ell} c_{\ell,m} Y_\ell^m(\theta, \varphi) \quad (7.137)$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 525 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

avec

$$c_{\ell,m} = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta Y_\ell^m(\theta, \varphi) f(\theta, \varphi) d\theta \quad (7.138)$$

Les harmoniques sphériques constituent donc une base orthonormée complète dans ξ_Ω . Ceci se traduit par la relation de fermeture suivante :

$$\sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{m=\ell} Y_\ell^m(\theta, \varphi) Y_\ell^{m*}(\theta', \varphi') = \delta(\cos \theta - \cos \theta') \delta(\varphi - \varphi') \quad (7.139)$$

Car l'intégration sur la variable θ ne se fait pas avec l'élément différentiel $d\theta$ mais avec l'élément $\sin \theta d\theta = -d(\cos \theta)$. Comme la fonction δ d'une fonction $f(x)$ est telle que (EP 4.17) :

$$\delta[f(x)] = \sum_i \frac{1}{|f'(x_i)|} \delta(x - x_i) \quad (7.140)$$

où $f'(x)$ est la dérivée de $f(x)$ est les x_i sont les zéros simples de la fonction $f(x)$. On a donc dans ce cas :

$$\delta(\cos \theta - \cos \theta') = \frac{1}{\sin \theta} \delta(\varphi - \varphi') \quad (7.141)$$



Page de titre

Sommaire



Page 526 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

ce qui permet de réécrire la relation de fermeture sous la forme :

$$\sum_{\ell=0}^{\infty} \mathbf{Y}_{\ell}^{\mathbf{m}}(\theta, \varphi) \mathbf{Y}_{\ell}^{\mathbf{m}*}(\theta', \varphi') = \frac{1}{\sin \theta} \delta(\theta - \theta') \delta(\varphi - \varphi') \quad (7.142)$$

4.5.3. Parité

La transformation des coordonnées sphériques d'un point quelconque dans une symétrie par rapport à l'origine se traduit par le changement de θ en $\pi - \theta$ et de φ en $\pi + \varphi$.

On aura pour la fonction $Y_{\ell}^{\ell}(\theta, \varphi)$:

$$Y_{\ell}^{\ell}(\pi - \theta, \pi + \varphi) = c_{\ell} (\sin \theta)^{\ell} e^{i\ell\varphi} e^{i\ell\pi} = (-1)^{\ell} Y_{\ell}^{\ell}(\theta, \varphi) \quad (7.143)$$

D'autre part comme dans cette transformation $\left(\frac{\partial}{\partial \theta} \rightarrow -\frac{\partial}{\partial \theta} \text{ et } \frac{\partial}{\partial \varphi} \rightarrow \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$, les opérateurs L_{+} et L_{-} restent inchangés, leur application à la construction des Y_{ℓ}^m conduit à :

$$Y_{\ell}^{\mathbf{m}}(\pi - \theta, \pi + \varphi) = (-1)^{\ell} Y_{\ell}^{\mathbf{m}}(\theta, \varphi) \quad (7.144)$$

Les harmoniques sphériques ont donc une parité indépendante de m et égale à $(-1)^{\ell}$. Elle sont paires si ℓ est pair, impaires si ℓ est impair.

Enfin on peut montrer qu'avec le choix de phase qu'on a fait on a :

$$\mathbf{Y}_{\ell}^{\mathbf{m}*}(\theta, \varphi) = (-1)^m \mathbf{Y}_{-\ell}^{-m}(\theta, \varphi) \quad (7.145)$$



Page de titre

Sommaire



Page 527 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

4.5.4. Premières harmoniques sphériques

Les harmoniques sphériques jouent un rôle fondamental en physique atomique et moléculaire. Elles constituent, ainsi que leurs combinaisons linéaires, les orbitales atomiques des électrons externes des atomes mono-valents et particulièrement de l'atome d'hydrogène qu'on verra au chapitre suivant. Les premières harmoniques sphériques sont :

- Pour $\ell = 0$; $m = 0$

On a une seule fonction de symétrie sphérique appelée "fonction s " :

$$Y_0^0(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \quad (7.146)$$

- Pour $\ell = 1$; $m = 1, 0, -1$

On a trois fonctions appelées "fonctions p " :

$$Y_1^1(\theta, \varphi) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\varphi} \quad (7.147)$$

$$Y_1^0(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \quad (7.148)$$

$$Y_1^{-1}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{-i\varphi} \quad (7.149)$$

- Pour $\ell = 2$; $m = 2, 1, 0, -1, -2$



Page de titre

Sommaire



Page 528 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

On a cinq fonctions appelées “fonctions d ” :

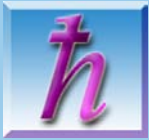
$$Y_2^{\pm 2}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\varphi} \quad (7.150)$$

$$Y_2^{\pm 1}(\theta, \varphi) = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\varphi} \quad (7.151)$$

$$Y_2^0(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{15}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1) \quad (7.152)$$

et ainsi de suite ; la notation $s, p, d, \dots$ est appelée notation spectroscopique

On représente ces fonctions en portant dans chaque direction d'angles (θ, φ) le module carré $|Y_\ell^m(\theta, \varphi)|^2$. On obtient une surface de révolution autour de l'axe $\vec{Oz}$ car $Y_\ell^m(\theta, \varphi)$ ne dépend de φ que par le facteur $e^{im\varphi}$ et par conséquent $|Y_\ell^m(\theta, \varphi)|^2$ est indépendant de φ . Il suffit donc de représenter la section de cette surface par un plan contenant oz comme c'est le cas sur la figure 7.2 pour $\ell = 0, 1, 2$ et $m = 0$



Page de titre

Sommaire



Page 529 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

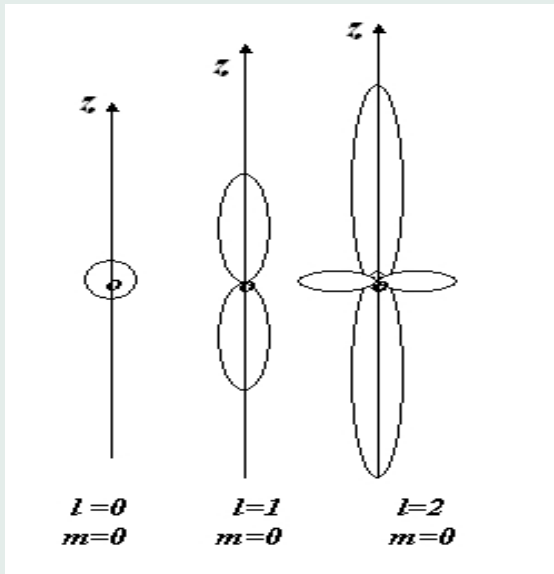


Figure 7.2 : Représentation de $Y_\ell^m(\theta, \varphi)$ pour $\ell = 0, 1, 2$ et $m = 0$

4.6. Description physique de l'état $|\ell, m\rangle$

L'état $|\ell, m\rangle$ est l'état d'un système physique où la mesure de $\vec{L}^2$ et de la projection L_z du moment cinétique $\vec{L}$ sur un axe $\vec{Oz}$ donne avec certitude les



Page de titre

Sommaire



Page 530 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

résultats $\ell(\ell+1)\hbar^2$ et $m\hbar$.

On peut donc envisager de représenter le système par un vecteur de longueur $\sqrt{\ell(\ell+1)}\hbar$ et de projection sur $\vec{Oz}$, $m\hbar$ mais on ne peut prévoir avec certitude la valeur des projections de $\vec{L}$ sur $\vec{Ox}$ et $\vec{Oy}$ car l'état $|\ell, m\rangle$ n'est pas un état propre de L_x et L_y .

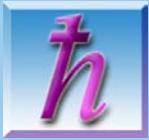
On peut cependant utiliser les résultats du paragraphe 2.6 et calculer les valeurs moyennes et les écarts quadratiques moyens de L_x et L_y qu'on trouve égaux à :

$$\langle L_x \rangle = \langle L_y \rangle = 0 \quad (7.153)$$

$$\Delta L_x = \Delta L_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \sqrt{\ell(\ell+1) - m^2} \quad (7.154)$$

Ces considérations suggèrent l'image classique suivante :

Soit un moment cinétique classique $\vec{\mathcal{L}}$ de module $\hbar\sqrt{\ell(\ell+1)}$, de projection sur $\vec{Oz}$, $m\hbar$ et d'angles polaires θ et φ .



Page de titre

Sommaire



Page 531 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

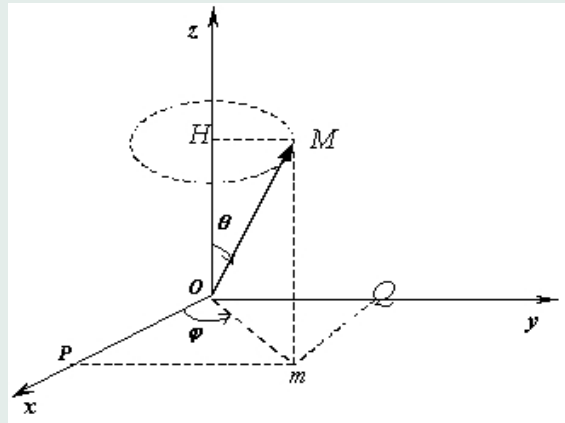


Figure 7.3 : Précession d'un moment cinétique classique

On a :

$$\begin{cases} |\overrightarrow{OM}| &= \hbar\sqrt{\ell(\ell+1)} \\ \overline{OH} &= m\hbar = \mathcal{L}_z \\ \overline{Om} &= \sqrt{OM^2 - m^2M^2} = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1) - m^2} \end{cases} \quad (7.155)$$



Page de titre

Sommaire



Page 532 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Les composantes L_x et L_y sont :

$$\mathcal{L}_x = \overline{OP} = \overline{Om} \cos \varphi = \hbar \sqrt{\ell(\ell+1) - m^2} \cos \varphi \quad (7.156)$$

$$\mathcal{L}_y = \overline{OQ} = \overline{Om} \sin \varphi = \hbar \sqrt{\ell(\ell+1) - m^2} \sin \varphi \quad (7.157)$$

Lorsque $|\overrightarrow{OM}|$ et θ restent constants et φ varie de façon aléatoire entre 0 et 2π , les valeurs moyennes de L_x , L_y et L_x^2 et L_y^2 sont :

$$\langle \mathcal{L}_x \rangle = \int_0^{2\pi} \hbar \sqrt{\ell(\ell+1) - m^2} \cos \varphi d\varphi = 0 \quad (7.158)$$

$$\langle \mathcal{L}_y \rangle = \int_0^{2\pi} \hbar \sqrt{\ell(\ell+1) - m^2} \sin \varphi d\varphi = 0 \quad (7.159)$$

et

$$\langle \mathcal{L}_x^2 \rangle = \int_0^{2\pi} \hbar^2 [\ell(\ell+1) - m^2] \cos^2 \varphi d\varphi = \frac{\hbar^2}{2} [\ell(\ell+1) - m^2] \quad (7.160)$$

$$\langle \mathcal{L}_y^2 \rangle = \int_0^{2\pi} \hbar^2 [\ell(\ell+1) - m^2] \sin^2 \varphi d\varphi = \frac{\hbar^2}{2} [\ell(\ell+1) - m^2] \quad (7.161)$$

Ces valeurs moyennes sont identiques aux valeurs moyennes quantiques (relations (7.74), (7.79) et (7.80)).


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 533 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

Le moment cinétique d'une particule dans l'état $|\ell, m\rangle$ se comporte, du point de vue des valeurs moyennes de ses composantes et de leur carré comme un moment cinétique classique de longueur $\hbar\sqrt{\ell(\ell+1)}$ et de projection sur oz , $m\hbar$ mais pour lequel l'angle φ a une valeur aléatoire. $\vec{L}$ se déplace donc sur un cône de demi-angle au sommet θ .

Cette équivalence ne doit pas cependant être poussée plus loin car une mesure unique de L_x donne n'importe quelle valeur comprise entre $\hbar\sqrt{\ell(\ell+1) - m^2}$ et $-\hbar\sqrt{\ell(\ell+1) - m^2}$ alors qu'une mesure de L_x ne donne que l'une des valeurs propres de L_x dans $\xi(\ell)$.



Page de titre

Sommaire



Page 534 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Exercices et Problèmes

EP 7.1 : Composantes de $\vec{L}$

Soit $\vec{L}$ l'opérateur moment cinétique orbital d'une particule

a- Montrer que ses composantes L_x, L_y, L_z s'écrivent en coordonnées sphériques sous la forme :

$$L_x = \frac{\hbar}{i} \left[-\cos \varphi \cot g \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} - \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} \right]$$

$$L_y = \frac{\hbar}{i} \left[-\sin \varphi \cot g \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} + \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} \right]$$

$$L_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

b- En déduire les expressions de $\vec{L}^2$ et $L_{\pm}$:

$$\vec{L}^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta}) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]$$

$$L_{\pm} = L_x \pm iL_y = \hbar e^{\pm i\varphi} \left[\pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot g \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right]$$

EP 7.2 : Propriétés des harmoniques sphériques



Page de titre

Sommaire



Page 535 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

On considère une particule de moment cinétique orbital $\vec{L} = \vec{R} \wedge \vec{P}$ où $\vec{R}$ et $\vec{P}$ sont respectivement les opérateurs position et impulsion.

1- Calculer le commutateur $[L_x, L_y]$. En déduire par une permutation circulaire, les commutateurs $[L_y, L_z]$ et $[L_z, L_x]$.

2- a) Montrer que $[\vec{L}^2, L_z] = 0$

b) Soit $|\ell, m\rangle$ les vecteurs propres communs à $\vec{L}^2$ et L_z . Préciser leur degré de dégénérescence.

3- Dans la représentation $\{\vec{r}\}$, les fonctions propres de $\vec{L}^2$ et L_z sont les harmoniques sphériques $Y_\ell^m(\theta, \varphi)$. On introduit les opérateurs L_+ et L_- définis par :

$$L_{\pm} = \hbar e^{\pm i\varphi} \left[\pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right]$$

a) En appliquant L_z à $Y_\ell^m(\theta, \varphi)$, montrer que : $Y_\ell^m(\theta, \varphi) = F_\ell(\theta) e^{im\varphi}$;

on donne $L_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}$.

b) En appliquant L_+ à $Y_\ell^\ell(\theta, \varphi)$ montrer que $Y_\ell^\ell(\theta, \varphi) = c_\ell (\sin \theta)^\ell e^{i\ell\theta}$ où c_ℓ est une constante arbitraire.

c) En imposant à $Y_\ell^\ell(\theta, \varphi)$ d'être normée,

α) Déterminer la constante c_0 correspondant à $\ell = 0$. On choisira sa phase nulle.

β) Montrer que c_1 se met sous la forme $|c_1| = \sqrt{\frac{\ell}{2\pi I_\ell}}$ où l'intégrale



Page de titre

Sommaire



Page 536 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

$I_\ell = \int_0^\pi (\sin \theta)^{2\ell+1} d\theta$ vérifie la relation :

$$I_\ell = \frac{2\ell}{(2\ell+1)} I_{\ell-1}$$

En déduire que :

$$|c_1| = \frac{1}{2^\ell \ell!} \sqrt{\frac{(2\ell+1)!}{4\pi}}$$

Pour définir complètement c_1 , il faut choisir sa phase. La convention habituelle consiste à prendre $c_1 = (-1)^\ell |c_1|$

d) En se rappelant que le changement de $\vec{r}$ en $(-\vec{r})$ (symétrie par rapport à l'origine des coordonnées) se traduit en coordonnées sphériques par :

$$r \Rightarrow r, \theta \Rightarrow \pi - \theta \text{ et } \varphi \Rightarrow \varphi + \pi$$

montrer que $Y_\ell^\ell(\theta, \varphi)$ est de même parité que ℓ .

c) Sachant que l'opérateur L_- est pair, en déduire la parité des harmoniques sphériques $Y_\ell^m(\theta, \varphi)$.

EP 7.3 : Parité des harmoniques sphériques

Soit l'opérateur Π unitaire représentant la réflexion de l'espace ou opérateur parité. Il est défini en représentation $\{|\vec{r}\rangle\}$ par son action dans l'espace des états ξ sur les fonctions $\psi(\vec{r})$ par :

$$\Pi \psi(\vec{r}) = \psi(-\vec{r})$$



Page de titre

Sommaire



Page 537 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

1- Réécrire cette relation en explicitant les coordonnées sphériques r, θ, φ .

2- $\vec{R}$, $\vec{P}$ et $\vec{L}$ étant les opérateurs position, impulsion et moment cinétique orbital, montrer que :

$$\Pi \vec{R} \Pi^{-1} = -\vec{R}$$

$$\Pi \vec{P} \Pi^{-1} = -\vec{P}$$

$$\Pi \vec{L} \Pi^{-1} = \vec{L}$$

En déduire que la position et l'impulsion sont des vecteurs et le moment cinétique un pseudovecteur.

3- Montrer que Π commute avec les composantes de $\vec{L}$, en déduire que les harmoniques sphériques ont une parité déterminée, autrement dit qu'elles sont fonctions propres de π .

$$\Pi Y_\ell^m(\theta, \varphi) = \varepsilon_{\ell m} Y_\ell^m(\theta, \varphi) \quad \text{avec } \varepsilon_{\ell m} = \pm 1$$

4- Déduire de la commutation de π avec L_+ que la parité $\varepsilon_{\ell m}$ de $Y_\ell^m(\theta, \varphi)$ ne dépend en fait que de ℓ et non de m .

5- En considérant l'harmonique sphérique $Y_\ell^\ell(\theta, \varphi)$ établir que :

$$\varepsilon_{\ell m} = (-1)^\ell$$

En déduire que :

$$Y_\ell^m(\pi - \theta, \pi + \varphi) = (-1)^\ell Y_\ell^m(\theta, \varphi)$$



Page de titre

Sommaire



Page 538 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

EP 7.4 : Propriétés de l'opérateur $\vec{J}$

On considère un système physique dont l'espace des états qui est à trois dimensions est rapporté à la base orthonormée formée par les trois vecteurs $|+1\rangle$, $|0\rangle$ et $|-1\rangle$.

On définit dans cette base les opérateurs J_+ , J_- et J_z par :

$$\begin{aligned} J_+ |1\rangle &= 0 & J_- |+1\rangle &= \sqrt{2} |0\rangle & J_z |+1\rangle &= |+1\rangle \\ J_+ |-1\rangle &= \sqrt{2} |0\rangle & J_- |-1\rangle &= 0 & J_z |-1\rangle &= -|-1\rangle \\ J_+ |0\rangle &= \sqrt{2} |+1\rangle & J_- |0\rangle &= \sqrt{2} |-1\rangle & J_z |0\rangle &= 0 \end{aligned}$$

1-a- Ecrire les matrices représentant J_+ , J_- et J_z dans la base

$$\{|-1\rangle, |0\rangle, |+1\rangle\}.$$

b- On considère les deux opérateurs J_x et J_y définis par :

$$\begin{aligned} J_x &= \frac{1}{2}(J_+ + J_-) \\ J_y &= \frac{1}{2i}(J_+ - J_-) \end{aligned}$$

Ces opérateurs sont-ils hermitiques, écrire les matrices qui les représentent.

c- Déterminer les valeurs propres et vecteurs propres de J_x et J_y .

d- Calculer les commutateurs $[J_x, J_y]$, $[J_y, J_z]$ et $[J_z, J_x]$.



Page de titre

Sommaire



Page 539 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

e- Calculer l'opérateur $\vec{J}^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$. Montrer qu'il commute avec J_x , J_y et J_z .

2- Le système considéré est placé dans des conditions physiques telles que son hamiltonien s'écrit

$$H = E_0 + \frac{E_1}{\hbar^2} \vec{J}^2 + \frac{E_2}{\hbar} J_z$$

où E_0 , E_1 et E_2 sont des constantes réelles supposées connues.

a- Déterminer les énergies propres et vecteurs propres de H .

b- J_x , J_y et J_z sont-elles des constantes du mouvement ?

EP 7.5 : Composantes d'un moment cinétique orbital $\ell = 1$

On considère le système de moment cinétique $\ell = 1$; une base de son espace des états est constituée par les vecteurs propres $|\ell, m\rangle$ de L_z et $\vec{L}^2$.

Ce système qui possède un moment quadripolaire est plongé dans un gradient de champ électrique, de sorte que son hamiltonien s'écrit :

$$H_0 = \frac{\omega_0}{\hbar} (L_u^2 - L_v^2)$$

où L_u et L_v sont les composantes de $\vec{L}$ sur les deux directions $\vec{u}$ et $\vec{v}$ du plan xOz situées à 45° de $\vec{Ox}$ et $\vec{Oz}$ respectivement et ω_0 une constante réelle.



Page de titre

Sommaire



Page 540 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

1- Ecrire les matrices représentant $\vec{L}^2$, L_z et L_x dans la base $\{|\ell, m\rangle\}$. On donne :

$$L_x = \frac{1}{2}(L_+ + L_-)$$

$$L_{\pm} |\ell m\rangle = \hbar \sqrt{\ell(\ell+1) - m(m \pm 1)} |\ell, m \pm 1\rangle$$

2- a- Exprimer les composantes L_u et L_v en fonction de L_x et L_z .

b- Montrer que H_0 se met sous la forme :

$$H_0 = \frac{\omega_0}{\hbar} (L_x L_z + L_z L_x)$$

c- En déduire la matrice représentant H_0 dans la base :

$$\{|\ell, m\rangle\} = \{|1, 1\rangle, |1, 0\rangle, |1, -1\rangle\}.$$

3- Déterminer les énergies E_i^0 ($i = 1, 2, 3$) du système ainsi que les états stationnaires $|\varphi_i^0\rangle$ qui leur correspondent.

4- A l'instant $t = 0$, le système est dans l'état : $|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|1, 1\rangle - |1, -1\rangle]$

a- Quel est le vecteur d'état $|\psi(t)\rangle$ à l'instant t ?

b- A cet instant, on mesure L_z ; que trouve-t-on comme résultats et avec quelles probabilités ?

5- a- Calculer les valeurs moyennes $\langle L_x \rangle(t)$, $\langle L_y \rangle(t)$ et $\langle L_z \rangle(t)$ à l'instant t ?

b- Quel est le mouvement effectué par $\langle \vec{L} \rangle$?



Page de titre

Sommaire



Page 541 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

EP 7.6 : Opérateur rotation

Dans l'espace à trois dimensions, on considère une particule de moment cinétique orbital $\vec{L} = \vec{R} \wedge \vec{P}$ où $\vec{R}$ et $\vec{P}$ sont respectivement les opérateurs position et impulsion. Soit L_z la composante de $\vec{L}$ suivant l'axe $\vec{Oz}$ et $\{|\ell, m\rangle\}$ l'ensemble des vecteurs propres communs à $\vec{L}^2$ et L_z associés aux valeurs propres $\ell(\ell+1)\hbar^2$ et $m\hbar$.

Soit $U(\varphi)$ l'opérateur unitaire défini par :

$$U(\varphi) = \exp\left(-\frac{i\varphi L_z}{\hbar}\right)$$

où φ est un paramètre réel sans dimensions. K étant un opérateur quelconque, on désigne par $\tilde{K}$ le transformé de K par l'opérateur unitaire $U(\varphi)$:

$$\tilde{K} = U(\varphi) K U^\dagger(\varphi)$$

1- On pose $L_+ = L_x + iL_y$, $L_- = L_x - iL_y$. Calculer $\tilde{L}_+ |\ell, m\rangle$ et en déduire que L_+ et $\tilde{L}_+$ sont proportionnels ; calculer la constante de proportionnalité. Même question pour L_- et $\tilde{L}_-$.

2- Exprimer $\tilde{L}_x$, $\tilde{L}_y$ et $\tilde{L}_z$ en fonction de L_x , L_y et L_z . Quelle transformation géométrique peut-on associer au passage de L à $\tilde{L}$?



Page de titre

Sommaire



Page 542 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

3- Calculer les commutateurs $[X \pm iY, L_z]$ et $[Z, L_z]$. En déduire que les kets $(X \pm iY) |\ell, m\rangle$ et $Z |\ell, m\rangle$ sont vecteurs propres de L_z avec des valeurs propres que l'on calculera. Quelle relation doit nécessairement exister entre m et m' pour que l'élément de matrice $\langle \ell', m' | X \pm iY | \ell, m \rangle$ ne soit pas nul ? Même question pour $\langle \ell', m' | Z | \ell, m \rangle$.

4- En comparant les éléments de matrice de $\widetilde{X + iY}$ et $\tilde{Z}$ à ceux de $X \pm iY$ et Z , calculer $\tilde{X}, \tilde{Y}, \tilde{Z}$ en fonction de X, Y, Z . Quelle est l'interprétation géométrique de ce résultat ?

EP 7.7 : Opérateur rotation infinitésimale

On considère un système physique dans l'état $|\psi_0\rangle$. Si on lui fait subir une rotation $R_u(\varphi)$ d'un angle φ autour de l'axe de vecteur unitaire $\vec{u}$ il est alors représenté par le ket $|\psi\rangle$.

Soit $R_u(\varphi)$ l'opérateur tel que : $|\psi\rangle = R_u(\varphi) |\psi_0\rangle$. $R_u(\varphi)$ est l'opérateur rotation de l'angle φ autour de l'axe de vecteur unitaire $\vec{u}$.

Si $\vec{J}$ est le moment cinétique total du système, sa composante J_u est liée à l'opérateur de rotation infinitésimale d'angle $d\varphi$ par la relation :

$$R_u(\varphi) \simeq 1 - \frac{i}{\hbar} d\varphi J_u$$

1-Justifier cette relation dans le cas où $\vec{J} = \vec{L}$ est un moment cinétique orbital.



Page de titre

Sommaire



Page 543 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

2- Montrer en utilisant la conservation de la norme de $|\psi\rangle$ dans la rotation $R_u(\varphi)$ que R est un opérateur unitaire ($R = R_u(\varphi)$)

3- Soit A_0 un opérateur hermitique représentant une grandeur physique et A son transformé dans une rotation. En écrivant que la valeur moyenne de A_0 dans l'état $|\psi_0\rangle$ est la même que la valeur moyenne de A dans l'état $|\psi\rangle$.

Etablir que :

$$A_0 = \mathcal{R}^+ A \mathcal{R}$$

En déduire que, si A_0 est invariant par rotation ($A = A_0$), on a toujours :

$$[A, J_u] = 0 \quad \text{et} \quad [A, \vec{J}^2] = 0$$

EP 7.8 : Oscillateur à deux dimensions

On considère un oscillateur harmonique à deux dimensions dont l'hamiltonien s'écrit :

$$H = \frac{1}{2m}(P_x^2 + P_y^2) + \frac{1}{2}m\omega^2(X^2 + Y^2)$$

On peut résoudre le problème en considérant que cet hamiltonien est la somme de deux hamiltoniens H_x et H_y à une dimension et en appliquant les propriétés du produit tensoriel, mais on va utiliser une autre démarche qui consiste à chercher les



Page de titre

Sommaire



Page 544 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

fonctions propres communes de H et de la composante L_z du moment cinétique orbital $\vec{L}$.

1- Exprimer H et L_z en fonction des opérateurs de création et d'annihilation a_x, a_x^+ et a_y, a_y^+ associés aux oscillateurs à une dimension d'hamiltonien H_x et H_y .

Montrer que H et L_z commutent.

2- On introduit les opérateurs a_d et a_g définis par :

$$a_d = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_x - ia_y)$$

$$a_g = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_x + ia_y)$$

Montrer que :

$$[a_d, a_d^+] = [a_g, a_g^+] = 1$$

$$[a_d, a_g] = [a_d^+, a_g^+] = [a_d, a_g^+] = [a_g, a_d^+] = 0$$

3- On introduit maintenant les opérateurs N_d et N_g tels que :

$$N_d = a_d^+ a_d$$

$$N_g = a_g^+ a_g$$



Page de titre

Sommaire



Page 545 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

a- Vérifier que :

$$\begin{aligned} [N_d, a_d] &= -a_d & [N_d, a_d^+] &= a_d \\ [N_g, a_g] &= -a_g & [N_g, a_g^+] &= a_g \quad \text{et} \quad [N_d, N_g] = 0 \end{aligned}$$

b- Exprimer H et L_z en fonction de N_d et N_g .c- Donner les expressions des valeurs propres de H et L_z .

On appellera n_d et n_g les valeurs propres respectives de N_d et N_g .
et on posera :

$$n_d + n_g = n_+$$

$$n_d - n_g = n_-$$

d- Donner l'expression générale des vecteurs propres communs à H et L_z construits à partir de l'état fondamental $|\varphi_{00}\rangle$ en fonction des opérateurs a_d^+ et a_g^+ .
On notera $|\chi_{nm}\rangle$ ces vecteurs propres.

e- H et L_z forment-ils un E.C.O.C ? justifier votre réponse.

4- On va chercher les fonctions d'onde associées aux états propres communs à H et L_z .

a- Ecrire en représentation $\{|\vec{r}\rangle\}$ la fonction d'onde associée à l'état fondamental.b- Ecrire les opérateurs a_d^+ et a_g^+ en représentation $\{|\vec{r}\rangle\}$.

c- En utilisant les coordonnées polaires :

$$x = \rho \cos \theta$$

$$y = \rho \sin \theta$$



Page de titre

Sommaire



Page 546 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Ecrire la fonction d'onde associée à l'état fondamental et montrer que les opérateurs a_d^+ et a_g^+ s'expriment sous la forme :

$$a_d^+ = \frac{1}{2} e^{i\theta} \left[\beta \rho - \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{i}{\beta \rho} \frac{\partial}{\partial \theta} \right]$$

$$a_g^+ = \frac{1}{2} e^{-i\theta} \left[\beta \rho - \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{i}{\beta \rho} \frac{\partial}{\partial \theta} \right]$$

d- Etablir l'expression des fonctions d'onde associées aux deux premiers états excités ($n = 1, m = -1$ et $n = m = 1$).

5- On suppose que le système est dans l'état :

$$|\varphi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|\chi_{n=1,m=1}\rangle + |\chi_{n=1,m=-1}\rangle]$$

a- Quelle est la densité de probabilité de le trouver à la distance ρ de l'origine. Tracer la courbe correspondante.

b- Quelle est la densité de probabilité de le trouver dans la direction θ .

Tracer la courbe correspondante.

On donne : $\int_0^\infty U^3 \exp(-\beta^2 U^2) dU = \frac{1}{2\beta^4}.$

EP 7.9 : Particule chargée dans un champ électrique et magnétique



Page de titre

Sommaire



Page 547 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Le mouvement d'une particule chargée de masse m soumise à la fois à l'action d'un champ magnétique porté par l'axe $\vec{Oz}$ d'un repère $(Oxyz)$ et d'un champ électrique de symétrie de révolution autour de l'axe $\vec{Oz}$ peut être décomposé en deux oscillations harmoniques : l'une se propageant dans la direction $\vec{Oz}$ et décrite par un hamiltonien H_Z , l'autre confinée dans le plan xOy et décrite par un hamiltonien H_{XY} .

On s'intéresse dans ce problème à l'étude de l'hamiltonien H_{XY} . On montre que H_{XY} est l'hamiltonien d'un oscillateur harmonique à deux dimensions plongé dans un champ magnétique $\vec{B}$. H_{xy} s'écrit sous la forme :

$$H_{XY} = \frac{P_X^2 + P_Y^2}{2m} + \frac{1}{2}m\left(\frac{\omega_C^2}{4} - \frac{\omega_Z^2}{2}\right)(X^2 + Y^2) + \frac{\omega_C}{2}(XP_Y - YP_X)$$

où ω_C est la pulsation cyclotron de la particule et ω_Z est la pulsation propre du mouvement axial de la particule suivant $\vec{Oz}$.

1- On considère d'abord le problème radial en l'absence de champ électrique $\omega_Z = 0$ et on introduit les opérateurs annihilation de quanta circulaires droits et gauches définis respectivement par :

$$a_d = \frac{1}{2} \left[\beta(X - iY) + \frac{i}{\beta\hbar}(P_x - iP_y) \right]$$

$$a_g = \frac{1}{2} \left[\beta(X + iY) + \frac{i}{\beta\hbar}(P_x + iP_y) \right]$$



Page de titre

Sommaire



Page 548 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

avec $\beta = \sqrt{\frac{m\omega_C}{2\hbar}}$ et les opérateurs créations associés a_d^+ et a_g^+ .

a- Montrer que les opérateurs nombre de quanta circulaires gauches $N_g = a_g^+ a_g$ et droits $N_d = a_d^+ a_d$ s'expriment par :

$$N_g = \frac{1}{4} \left[\frac{m\omega_C}{2\hbar} (X^2 + Y^2) + \frac{2}{m\omega_C \hbar} (P_X^2 + P_Y^2) \right] - \frac{L_Z}{2\hbar} - \frac{1}{2}$$

$$N_d = \frac{1}{4} \left[\frac{m\omega_C}{2\hbar} (X^2 + Y^2) + \frac{2}{m\omega_C \hbar} (P_X^2 + P_Y^2) \right] + \frac{L_Z}{2\hbar} - \frac{1}{2}$$

En déduire L_Z en fonction de N_d et N_g .

b- Montrer que H_{XY} s'écrit alors sous la forme :

$$H_{XY} = \hbar\omega_C \left(N_d + \frac{1}{2} \right)$$

Donner les valeurs propres de cet hamiltonien ainsi que leur degré de dégénérescence. Expliquer cette dégénérescence.

2- On étudie maintenant l'hamiltonien H_{XY} en présence du champ électrique ($\omega_Z \neq 0$) et on utilise la même démarche que précédemment en introduisant les opérateurs :

$$a'_d = \frac{1}{2} \left[\beta' (X - iY) + \frac{i}{\beta' \hbar} (P_x - iP_y) \right]$$

$$a'_g = \frac{1}{2} \left[\beta' (X + iY) + \frac{i}{\beta' \hbar} (P_x + iP_y) \right]$$



Page de titre

Sommaire



Page 549 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

avec $\beta' \neq \beta$.

a- Calculer :

$$N'_d = (a'_d)^+ a'_d$$

$$N'_g = (a'_g)^+ a'_g$$

b- Montrer que :

$$H_{XY} = \hbar\omega'_C(N'_d + \frac{1}{2}) - \hbar\omega_m(N'_g + \frac{1}{2})$$

c- Exprimer alors ω'_C, ω_m et β' en fonction de ω_C et ω_Z .

d- Décrire le spectre d'énergie de cet hamiltonien et préciser ses dégénérescence éventuelles.

EP 7.10 : Rotateur rigide

1- Un rotateur rigide plan peut être constitué d'un point matériel de masse m astreint à se mouvoir librement sur un cercle de rayon r dans la plan.

a- Ecrire l'équation de Schrödinger en coordonnées polaires et montrer que la fonction d'onde est de la forme

$$\psi(\varphi) = A \exp(im\varphi)$$



Page de titre

Sommaire



Page 550 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

calculer la constante de normalisation A .

b- Exprimer les niveaux d'énergie du rotateur en fonction de son moment d'inertie I et donner leur degré de dégénérescence. Montrer qu'on peut former plusieurs bases orthonormées, Donner les deux les plus simples.

c- Déterminer l'opérateur associé à la composante du moment cinétique perpendiculaire au plan de rotation. Quelles sont les fonctions propres et valeurs propres de cet opérateur.

d- L'état du rotateur étant décrit par la fonction d'onde $\psi = A \cos^2 \varphi$, calculer la valeur moyenne du moment cinétique ainsi que ses différentes valeurs possibles et leurs probabilités respectives dans cet état.

2- On considère maintenant un rotateur rigide spatial. Ecrire son hamiltonien et montrer que ses énergies propres et fonctions propres sont :

$$E_\ell = \ell(\ell + 1) \frac{\hbar^2}{2I} \quad \text{et} \quad \psi_{\ell,m}(\theta, \varphi) = Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$$

avec $\ell = 0, 1, 2, \dots$ et $m = \ell, (\ell - 1), \dots, -\ell$

Donner le degré de dégénérescence de chaque niveau énergétique du rotateur.

3- Appliquer les résultats précédents à la détermination de l'énergie de rotation d'une molécule diatomique de masse réduite μ . On considère que cette molécule est formée de deux points matériels de masses m_1 et m_2 , rigidement liés, à une certaine distance l'un de l'autre et l'ensemble tournant librement autour de son centre de gravité.

EP 7.11 : Piège à électrons



Page de titre

Sommaire



Page 551 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

On place un électron (charge $-q$, masse m) dans un champ magnétique $\vec{B}$ uniforme parallèle à $\vec{Oz}$ et de même sens et dans un champ électrique dérivant d'un potentiel $V(\vec{r})$.

L'hamiltonien de l'électron dans la superposition de ces champs est donné par :

$$H = \frac{1}{2m}(\vec{P} + q\vec{A}(\vec{r}))^2 + V(\vec{r}) + (1 + a)\frac{q}{m}\vec{S} \cdot \vec{B}$$

où $\vec{P}$ et $\vec{S}$ sont l'impulsion et le spin de l'électron, a est l'anomalie gyromagnétique du spin, $\vec{A}(\vec{r})$ et $V(\vec{r})$ sont respectivement le potentiel vecteur et l'énergie potentielle électrostatique et sont tels que

$$\vec{A} = \frac{1}{2}(\vec{B} \wedge \vec{r})$$

$$V(\vec{r}) = \frac{m\omega_0^2}{4}(2z^2 - x^2 - y^2)$$

$\vec{r}$ étant le vecteur position de l'électron dans un référentiel d'inertie $(\vec{Ox}, \vec{Oy}, \vec{Oz})$ et ω_0 une constante positive.

On pose $\omega_c = \frac{qB}{m}$ où B est le module du champ magnétique et on suppose que ω_c est beaucoup plus grande que ω_0 .

1- Montrer que l'hamiltonien peut se mettre sous la forme d'une somme de trois termes :

$$H = H_Z + H_T + H_S$$



Page de titre

Sommaire



Page 552 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

où :

$$H_Z = \frac{P_Z^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 Z^2$$

$$H_T = \frac{1}{2m}(P_x^2 + P_y^2) + \frac{1}{2}m\Omega^2(X^2 + Y^2) + \frac{1}{2}\omega_c L_Z$$

$$H_S = (1 + a)\omega_c S_Z$$

X, Y, Z étant les trois composantes de l'observable position, L_Z et S_Z sont respectivement les composantes suivant $\vec{Oz}$ du moment cinétique orbital $\vec{L}$ et du spin $\vec{S}$ de l'électron.

Exprimer Ω en fonction de ω_c et ω_0 .

2- Montrer que H_Z, H_T et H_S commutent. En déduire la forme de leurs fonctions propres communes ainsi que celle des énergies propres du hamiltonien total H .

3- Donner les valeurs propres et les vecteurs propres de H_S . On posera $\omega_S = \frac{1}{2}(1 + a)\omega_c$ et on notera $|+\rangle$ et $|-\rangle$ les vecteurs propres de S_z .

4- On introduit les opérateurs de création a_z^+ et d'annihilation a_z :

$$a_z^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha Z - \frac{i}{\alpha\hbar}P_Z)$$

$$a_z = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha Z + \frac{i}{\alpha\hbar}P_Z)$$

avec $\alpha = \sqrt{\frac{m\omega_0}{\hbar}}$



Page de titre

Sommaire



Page 553 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

a- Montrer que $[a_Z, a_Z^+] = 1$

b- Montrer que H_Z peut s'écrire sous la forme :

$$H_Z = (N_Z + \frac{1}{2})\hbar\omega_0 \quad \text{avec} \quad N_Z = a_Z^+ a_Z$$

c- Donner sans démonstration les valeurs propres de N_Z et H_Z .

5- On étudie maintenant l'hamiltonien H_T relatif au mouvement de l'électron dans le plan xOy . Pour cela on introduit les opérateurs de création et d'annihilation circulaires droit et gauche a_d et a_g définis par :

$$a_d = \frac{1}{2} \left[\beta(X - iY) + \frac{i}{\beta\hbar}(P_x - iP_y) \right]$$

$$a_g = \frac{1}{2} \left[\beta(X + iY) + \frac{i}{\beta\hbar}(P_x + iP_y) \right]$$

où β est une constante réelle.

a- Montrer que quelque soit β :

$$[a_d, a_d^+] = [a_g, a_g^+] = 1$$

où a_d^+ et a_g^+ sont les opérateurs adjoints a_d et a_g .

b- Montrer que si $N_d = a_d^+ a_d$ et $N_g = a_g^+ a_g$ on a :

$$L_Z = \hbar(N_d - N_g)$$



Page de titre

Sommaire



Page 554 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

c- Montrer que par un choix approprié de β , l'hamiltonien H_T peut se mettre sous la forme :

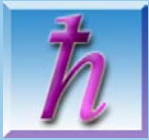
$$H_T = \hbar\omega'_c(N_d + \frac{1}{2}) - \hbar\omega_m(N_g + \frac{1}{2})$$

- Exprimer ω'_c et ω_m en fonction de ω_c et ω_0 .
- Déterminer les valeurs propres de H_T .

6- Montrer alors, en utilisant tout ce qui précède, que les valeurs propres du hamiltonien total H sont de la forme :

$$E = \hbar\omega_0(n_Z + \frac{1}{2}) + \hbar\omega'_c(n_c + \frac{1}{2}) - \hbar\omega_m(n_m + \frac{1}{2}) + \varepsilon\hbar\omega_S$$

où $\varepsilon = \pm 1$ et n_Z, n_c et n_m sont des nombres entiers.



Page de titre

Sommaire



Page 555 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Chapitre 8

Particule dans un potentiel central. Atome d'hydrogène

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 556 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

Un potentiel central est un potentiel qui ne dépend que de la distance r de la particule à l'origine des coordonnées. Il intervient dans de nombreux systèmes physiques dont l'un des plus importants est celui d'une particule plongée dans un potentiel coulombien.

On montrera dans ce chapitre, comment la connaissance des harmoniques sphériques $Y_\ell^m(\theta, \varphi)$ fonctions propres de $\vec{L}^2$ et L_z permet de simplifier considérablement le problème de la recherche des fonctions propres et valeurs propres de l'hamiltonien du système.

On étudiera également le cas d'un système de deux particules dont l'interaction mutuelle est décrite par un potentiel ne dépendant que de leur position relative $(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$ et on montrera comment on peut se ramener à un problème à une seule particule, problème qui se simplifie davantage lorsque le potentiel d'interaction des deux particules ne dépend que de leur distance et se ramène à l'étude d'une particule en mouvement dans un potentiel central.

On appliquera enfin cette étude à la recherche des états propres et énergies propres de l'atome d'hydrogène qui constitue le système atomique le plus simple.



Page de titre

Sommaire



Page 557 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

1. Etats d'une particule dans un potentiel central

On considère une particule de masse μ et de vecteur position $\vec{r}$ en mouvement dans un potentiel central $V(r)$.

En mécanique classique, l'énergie E de la particule est une constante du mouvement et il en est de même pour son moment cinétique $\vec{L}$ par rapport à un point fixe O . La trajectoire de la particule est dans ce cas plane et située dans le plan perpendiculaire à $\vec{L}$ et passant par O .

En mécanique quantique, il s'agit de résoudre l'équation aux valeurs propres de l'hamiltonien H associé à l'énergie E de la particule.

1.1. Hamiltonien de la particule

En représentation $\{|\vec{r}\rangle\}$ l'hamiltonien H de la particule s'écrit :

$$H = \frac{-\hbar^2}{2\mu} \Delta + V(r) \quad (8.1)$$

Comme le potentiel est central, les coordonnées sphériques sont mieux adaptées et le laplacien Δ s'écrit :

$$\Delta = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \left[\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \quad (8.2)$$



Page de titre

Sommaire

◀

▶

◀

▶

Page 558 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Nous avons montré dans le chapitre précédent que l'opérateur $\vec{L}^2$ s'écrit en coordonnées sphériques :

$$\vec{L}^2 = -\frac{\hbar^2}{\sin^2 \theta} \left[\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \quad (8.3)$$

On voit alors que le laplacien peut se mettre sous la forme :

$$\Delta = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{\vec{L}^2}{\hbar^2 r^2} \quad (8.4)$$

de sorte que l'hamiltonien s'écrit en définitive :

$$H = \frac{-\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{\vec{L}^2}{2\mu r^2} + V(r) \quad (8.5)$$

ce qui permet d'écrire l'équation aux valeurs propres sous la forme :

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{\vec{L}^2}{2\mu r^2} + V(r) \right] \Psi(r, \theta, \varphi) = E \Psi(r, \theta, \varphi) \quad (8.6)$$

où $\Psi(r, \theta, \varphi)$ est la fonction propre de l'hamiltonien et E son énergie propre.



Page de titre

Sommaire



Page 559 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

1.2. Séparation des variables

L'expression (8.5) de l'hamiltonien montre que toute la dépendance en θ et φ est contenue dans l'opérateur $\vec{L}^2$.

$\vec{L}^2$ commute donc avec le premier et le dernier terme de H qui n'agissent que sur la variable r . Comme il commute avec lui-même, on a donc :

$$[H, \vec{L}^2] = 0$$

De même l'opérateur $L_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}$ (relation (7.104)) qui ne dépend que de φ et qui commute avec $\vec{L}^2$, commute aussi avec H soit : $[H, L_z] = 0$.

L'ensemble $\{H, \vec{L}^2, L_z\}$ constitue donc un E.C.O.C. et les trois observables $H, \vec{L}^2$ et L_z admettent un système commun de fonctions propres de sorte que l'on a :

$$\begin{cases} H \Psi(r, \theta, \varphi) = E \Psi(r, \theta, \varphi) & (a) \\ \vec{L}^2 \Psi(r, \theta, \varphi) = \ell(\ell + 1) \hbar^2 \Psi(r, \theta, \varphi) & (b) \\ L_z \Psi(r, \theta, \varphi) = m \hbar \Psi(r, \theta, \varphi) & (c) \end{cases} \quad (8.7)$$

Mais nous savons déjà d'après le chapitre 7(cf. §4) que les fonctions propres communes à $\vec{L}^2$ et L_z et correspondant à des valeurs de ℓ et m fixées sont les harmoniques sphériques $Y_\ell^m(\theta, \varphi)$. Les fonctions $\Psi(r, \theta, \varphi)$ sont donc forcément les produits d'une fonction $R(r)$ de la variable r par l'harmonique



Page de titre

Sommaire



Page 560 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

sphérique $Y_\ell^m(\theta, \varphi)$, soit :

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r) Y_\ell^m(\theta, \varphi) \quad (8.8)$$

Quelle que soit la fonction radiale $R(r)$, $\Psi(r, \theta, \varphi)$ est solution des équations (8.7.b) et (8.7.c) et le problème consiste donc à déterminer $R(r)$ pour que $\Psi(r, \theta, \varphi)$ soit également fonction propre de H .

En utilisant le fait que :

$$\begin{aligned} \vec{L}^2 \Psi(r, \theta, \varphi) &= \vec{L}^2 R(r) Y_\ell^m(\theta, \varphi) \\ &= R(r) \vec{L}^2 Y_\ell^m(\theta, \varphi) \\ &= \ell(\ell + 1) \hbar^2 R(r) Y_\ell^m(\theta, \varphi) \end{aligned} \quad (8.9)$$

D'après (8.6) on voit que $Y_\ell^m(\theta, \varphi)$ peut se mettre en facteur dans chacun des deux membres de l'équation aux valeurs propres de H . Après simplification on aboutit à l'équation radiale suivante :

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{\ell(\ell + 1) \hbar^2}{2\mu r^2} + V(r) \right] R(r) = E R(r) \quad (8.10)$$

1.3. Comportement de la dépendance radiale

a- Dans l'équation radiale l'opérateur différentiel dépend de ℓ mais pas de m , il en sera donc de même pour la fonction radiale et pour l'énergie et on écrira : $R(r) = R_\ell(r)$ et $E = E_\ell$.



Page de titre

Sommaire



Page 561 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

b- Pour une valeur fixée de ℓ , il faut un indice supplémentaire n pour repérer les différentes valeurs propres et fonctions propres de H , on les notera alors $E_{n,\ell}$ et $\Psi_{n,\ell,m}(r, \theta, \varphi) = R_{n,\ell}(r) Y_\ell^m(\theta, \varphi)$.

L'équation radiale s'écrira donc :

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mu r^2} + V(r) \right] R_{n,\ell}(r) = E_{n,\ell} R_{n,\ell}(r) \quad (8.11)$$

c- Pour simplifier les calculs, il est commode de poser :

$$R_{n,\ell}(r) = \frac{U_{n,\ell}(r)}{r} \quad (8.12)$$

où $U_{n,\ell}(r)$ est une fonction de r .

En multipliant par r les deux membres de l'équation radiale on obtient :

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + V(r) \right] U_{n,\ell}(r) = E_{n,\ell} U_{n,\ell}(r) \quad (8.13)$$

Cette équation différentielle obtenue pour $U_{n,\ell}(r)$ peut s'interpréter comme une équation de Schrödinger à une dimension relative à une particule de masse μ se déplaçant dans un potentiel effectif $V_{eff}(r)$ tel que :

$$V_{eff}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \quad (8.14)$$



Page de titre

Sommaire



Page 562 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

où la variable r ne peut prendre que des valeurs réelles positives ou nulles.

Le terme $\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}$ est toujours positif ou nul et correspondrait à l'énergie potentielle dont dérive la force $\vec{f} = -\frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{\mu} \frac{\vec{r}}{r^2}$ qui tend toujours à éloigner la particule de l'origine O . On appellera ce terme le "potentiel centrifuge".

d- La fonction d'onde $\Psi_{n,\ell,m}(r, \theta, \varphi)$ doit être de carré sommable, elle doit donc être bornée pour toute valeur de r . Pour que cela soit réalisable il faut que $U_{n,\ell}(0) = 0$ pour que cette fonction soit finie à l'origine.

e- La condition de normalisation de $\Psi_{n,\ell,m}(r, \theta, \varphi)$ s'écrit :

$$\int |\Psi_{n,\ell,m}(r, \theta, \varphi)|^2 d^3r = \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} |R_{n,\ell}(r)|^2 |Y_\ell^m(\theta, \varphi)|^2 r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi = 1 \quad (8.15)$$

Comme les fonctions sphériques $Y_\ell^m(\theta, \varphi)$ sont normées on a ;

$$\int_0^\pi \int_0^{2\pi} |Y_\ell^m(\theta, \varphi)|^2 \sin \theta d\theta d\varphi = 1 \quad (8.16)$$



Page de titre

Sommaire



Page 563 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

et par suite :

$$\int_0^{\infty} |R_{n,\ell}(r)|^2 r^2 dr = 1 \quad (8.17)$$

soit encore :

$$\int_0^{+\infty} |U_{n,\ell}(r)|^2 dr = 1 \quad (8.18)$$

Pour pouvoir considérer l'équation différentielle en $U_{n,\ell}(r)$ comme une véritable équation de Schrödinger, on doit prolonger la solution $U_{n,\ell}(r)$ pour r négatif par $U_{n,\ell}(r) = 0$. Ceci s'obtient en prolongeant $V_{eff}(r)$ par $V_{eff}(r) = +\infty$ pour tout $r < 0$.

La fonction d'onde s'annulera donc pour r négatif et on aura :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |U_{n,\ell}(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} = 1$$

1.4. Nombres quantiques et dégénérescence des niveaux

Les fonctions propres de l'hamiltonien H s'écrivent donc :

$$\Psi_{n,\ell,m}(r, \theta, \varphi) = \frac{1}{r} U_{n,\ell}(r) Y_{\ell}^m(\theta, \varphi) \quad (8.19)$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 564 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

Les nombres réels n, ℓ, m sont appelés nombres quantiques.

n est le nombre quantique radial.

ℓ est le nombre quantique azimutal.

m est le nombre quantique magnétique.

Les $(2\ell + 1)$ fonctions $\Psi_{n,\ell,m}(r, \theta, \varphi)$ avec n, ℓ fixes et m variant de $-\ell$ à $+\ell$ sont fonctions propres de H avec la même valeur propre $E_{n,\ell}$. $E_{n,\ell}$ est donc dégénérée au moins $(2\ell + 1)$ fois. Cette dégénérescence qui ne dépend pas de la forme du potentiel est appelée **dégénérescence essentielle**.

Il peut arriver que pour une certaine forme du potentiel il y ait coïncidence entre deux valeurs propres $E_{n,\ell}$ et $E_{n',\ell'}$. Cette coïncidence est alors appelée **dégénérescence accidentelle**.



Page de titre

Sommaire



Page 565 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

2. Mouvement relatif de deux particules en interaction

On considère un système isolé constitué de deux particules de masses m_1 et m_2 soumises uniquement à leur interaction mutuelle, qui est décrite par un potentiel $V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$, dépendant seulement de leurs positions relatives $\vec{r}_1 - \vec{r}_2$; $\vec{r}_1$ et $\vec{r}_2$ étant les vecteurs positions des deux particules dans un référentiel d'inertie d'origine O .

2.1. Mouvement Classique

2.1.1. Particule relative

Les équations du mouvement des deux particules soumises à leur forces d'interactions mutuelles $\vec{F}_{12}$ et $\vec{F}_{21}$ ($\vec{F}_{12} = -\vec{F}_{21}$) s'écrivent dans le référentiel d'inertie :

$$\begin{cases} m_1 \frac{d^2 \vec{r}_1}{dt^2} = \vec{F}_{12} \\ m_2 \frac{d^2 \vec{r}_2}{dt^2} = \vec{F}_{21} \end{cases} \quad (8.20)$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 566 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

Ces deux équations peuvent se regrouper et se mettre sous la forme :

$$\frac{d^2 \vec{r}_1}{dt^2} - \frac{d^2 \vec{r}_2}{dt^2} = \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) \vec{F}_{12} \quad (8.21)$$

En posant :

$\vec{r}_1 - \vec{r}_2 = \vec{r}$: position relative de la première particule par rapport à la deuxième.

$\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} = \frac{1}{\mu}$: μ étant la masse réduite du système des deux particules.

l'équation (8.21) s'écrit :

$$\mu \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} = \vec{F}_{12} \quad (8.22)$$

Dans le référentiel d'inertie le mouvement des deux particules est équivalent à celui d'une particule unique appelée particule relative, de masse la masse réduite du système, de position la position relative des deux particules et soumise à la force d'interaction s'exerçant entre les deux particules.



Page de titre

Sommaire



Page 567 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

2.1.2. Hamiltonien classique

Dans le référentiel d'inertie l'énergie mécanique du système des deux particules est :

$$\mathcal{H} = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m_2} + V(\vec{\mathbf{r}}_1 - \vec{\mathbf{r}}_2) \quad (8.23)$$

où $\vec{\mathbf{p}}_1 = m_1 \vec{\mathbf{V}}_1$ et $\vec{\mathbf{p}}_2 = m_2 \vec{\mathbf{V}}_2$ sont les quantités de mouvement des deux particules.

Soit G le centre de masse du système dont la position est définie par :

$$\vec{\mathbf{r}}_G = \frac{m_1 \vec{\mathbf{r}}_1 + m_2 \vec{\mathbf{r}}_2}{m_1 + m_2} \quad (8.24)$$

En combinant cette relation avec celle donnant la position $\vec{\mathbf{r}}$ on obtient :

$$\begin{cases} \vec{\mathbf{r}}_1 = \vec{\mathbf{r}}_G + \frac{m_2}{m_1 + m_2} \vec{\mathbf{r}} \\ \vec{\mathbf{r}}_2 = \vec{\mathbf{r}}_G - \frac{m_1}{m_1 + m_2} \vec{\mathbf{r}} \end{cases} \quad (8.25)$$

En reportant les expressions (8.25) dans la relation (8.23) donnant l'hamiltonien classique et en utilisant (8.24), on obtient :

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} M \vec{\mathbf{V}}_G^2 + \frac{1}{2} \mu \vec{\mathbf{V}}^2 + V(r) \quad (8.26)$$



Page de titre

Sommaire



Page 568 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

où M est la masse totale du système ($M = m_1 + m_2$) et $\vec{V}_G$ et $\vec{V}$ sont respectivement les vitesses du centre de masse et de la particule relative dans le référentiel d'inertie : $\vec{V}_G = \frac{d\vec{r}_G}{dt}$ et $\vec{V} = \frac{d\vec{r}}{dt}$

En utilisant les relations :

$$M \vec{V}_G = \vec{P}_G = \vec{p}_1 + \vec{p}_2 \quad (8.27)$$

$$\mu \vec{V} = \vec{P} = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} (\vec{V}_1 - \vec{V}_2) = \frac{m_2 \vec{p}_1 - m_1 \vec{p}_2}{m_1 + m_2} \quad (8.28)$$

$$\frac{\vec{P}}{\mu} = \frac{\vec{p}_1}{m_1} - \frac{\vec{p}_2}{m_2} \quad (8.29)$$

où $\vec{P}_G$ est l'impulsion totale du système et $\vec{P}$ l'impulsion relative des deux particules, l'hamiltonien classique prend la forme suivante :

$$\mathcal{H} = \frac{\mathbf{P}_G^2}{2M} + \frac{\mathbf{P}^2}{2\mu} + V(\vec{r}) \quad (8.30)$$

- Le premier terme représente l'énergie cinétique du centre de masse dans le référentiel d'inertie. Ce terme est nul dans le référentiel du centre de masse où $\vec{P}_G = \vec{0}$.



Page de titre

Sommaire



Page 569 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

- Le deuxième terme représente l'énergie du système des deux particules dans le référentiel du centre de masse.

L'étude du mouvement relatif des deux particules dans le référentiel du centre de masse se ramène donc à celle du mouvement de la particule relative de masse μ , de position $\vec{r}$ et d'impulsion $\vec{P}$ plongée dans le potentiel $V(\vec{r})$.

2.2. Etude quantique

2.2.1. Hamiltonien du système

Aux vecteurs positions et impulsions classiques $\vec{r}_1$, $\vec{r}_2$, $\vec{r}$, $\vec{r}_G$ et $\vec{p}_1$, $\vec{p}_2$, $\vec{p}$, $\vec{p}_G$ on associe les opérateurs positions et impulsions $\vec{R}_1$, $\vec{R}_2$, $\vec{R}$, $\vec{R}_G$ et $\vec{P}_1$, $\vec{P}_2$, $\vec{P}$, $\vec{P}_G$ dont les composantes vérifient les relations de commutation canoniques :

$$\begin{cases} [X_1, P_{1x}] = [X_2, P_{2x}] = [X, P] &= [X_G, P_{Gx}] = i\hbar \\ [X_1, P_{2x}] = [X_2, P_{1x}] = [X, P_{Gx}] &= [X_G, P_x] = \dots = 0 \end{cases} \quad (8.31)$$

et des relations analogues pour les composantes selon les axes $\vec{Oy}$ et $\vec{Oz}$.

L'opérateur hamiltonien s'écrit donc à partir de ces règles de quantification :

$$H = \frac{\mathbf{P}_1^2}{2m_1} + \frac{\mathbf{P}_2^2}{2m_2} + V(\vec{R}_1 - \vec{R}_2) \quad (8.32)$$



Page de titre

Sommaire



Page 570 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

ou encore

$$\mathbf{H} = \frac{\mathbf{P}_G^2}{2M} + \frac{\mathbf{P}^2}{2\mu} + V(\vec{r}) \quad (8.33)$$

Cette dernière expression montre que l'hamiltonien se met sous la forme de deux termes :

$$H = H_G + H_r \quad (8.34)$$

avec :

$$\begin{cases} H_G = \frac{P_G^2}{2M} \\ H_r = \frac{P^2}{2\mu} + V(\vec{r}) \end{cases} \quad (8.35)$$

H_G est l'hamiltonien du centre de masse du système des deux particules et H_r l'hamiltonien de la particule relative.

Comme $\vec{R}_G$ et $\vec{P}_G$ commutent avec $\vec{R}$ et $\vec{P}$ on en déduit que H_G et H_r commutent entre eux : $[H_G, H_r] = 0$

2.2.2. Fonctions propres et valeurs propres de $\mathbf{H}$

H_G et H_r commutent entre eux et commutent donc avec l'hamiltonien H . L'ensemble $\{H_G, H_r, H\}$ constitue un E.C.O.C. et les trois observables admettent un système commun de vecteurs propres.



Page de titre

Sommaire



Page 571 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Soit $|\Psi\rangle$ le vecteur propre commun, les équations aux valeurs propres des trois observables sont :

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_G |\Psi\rangle &= \mathbf{E}_G |\Psi\rangle \\ \mathbf{H}_r |\Psi\rangle &= \mathbf{E}_r |\Psi\rangle \\ \mathbf{H} |\Psi\rangle &= \mathbf{E} |\Psi\rangle \end{aligned} \quad (8.36)$$

ce qui entraîne que :

$$E = E_G + E_r \quad (8.37)$$

On peut alors considérer l'espace des états ξ du système comme le produit tensoriel $\xi_{r_G} \otimes \xi_r$ de l'espace des états ξ_{r_G} associé à l'observable $\vec{R}_G$ par l'espace ξ_r associé à $\vec{R}$.

H_G et H_r apparaissent alors comme les prolongements dans ξ d'opérateurs n'agissant que dans ξ_{r_G} et ξ_r respectivement (cf. §9 du chapitre 4).

On peut donc chercher une base de vecteurs propres $|\Psi\rangle$ sous la forme de vecteurs produits :

$$|\Psi\rangle = |\chi_G\rangle \otimes |\varphi_r\rangle \quad (8.38)$$

avec :

$$\begin{aligned} H_G |\chi_G\rangle &= E_G |\chi_G\rangle & |\chi_G\rangle &\text{appartenant à } \xi_{r_G} \\ H_r |\varphi_r\rangle &= E_r |\varphi_r\rangle & |\varphi_r\rangle &\text{appartenant à } \xi_r \end{aligned} \quad (8.39)$$



Page de titre

Sommaire



Page 572 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

En écrivant ces équations en représentation $\{|\vec{r}_G\rangle\}$ et $\{|\vec{r}\rangle\}$ où l'action des opérateurs $\vec{R}_G$ et $\vec{R}$ se traduit par la multiplication par les variables $\vec{r}_G$ et $\vec{r}$ et où $\vec{P}_G$ et $\vec{P}$ deviennent les opérateurs différentiels $\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}_G$ et $\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}_r$ on obtient :

$$\frac{-\hbar^2}{2M}\Delta_G\chi_G(\vec{r}_G) = E_G\chi_G(\vec{r}_G) \quad (8.40)$$

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2\mu}\Delta + V(\vec{r}) \right] \varphi_r(\vec{r}) = E_r \varphi_r(\vec{r}) \quad (8.41)$$

avec

$$\chi_G(\vec{r}_G) = \langle \vec{r}_G | \chi_G \rangle \quad \text{et} \quad \varphi_r(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \varphi_r \rangle \quad (8.42)$$

- L'équation (8.40) montre que la particule associée au centre de masse est libre et sa fonction d'onde est une onde plane ayant pour expression :

$$\chi_G(\vec{r}_G) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\vec{p}_G \cdot \vec{r}_G / \hbar} \quad (8.43)$$

- L'équation (8.41) est l'équation d'onde dans le référentiel du centre de masse de la particule relative plongée dans le potentiel $V(\vec{r})$.

Lorsque le potentiel d'interaction entre les deux particules ne dépend que de leur distance $|\vec{r}_1 - \vec{r}_2| = r$ et pas de la direction du vecteur $\vec{r}_1 - \vec{r}_2 = \vec{r}$, la particule relative va être soumise à un potentiel central $V(r)$ et l'étude de ses états quantiques se ramène au problème traité dans paragraphe 1.



Page de titre

Sommaire



Page 573 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

2.2.3. Moment cinétique du système

Le moment cinétique orbital total du système des deux particules s'écrit :

$$\vec{J} = \vec{L}_1 + \vec{L}_2 \quad (8.44)$$

avec :

$$\begin{aligned} \vec{L}_1 &= \vec{R}_1 \wedge \vec{P}_1 \\ \vec{L}_2 &= \vec{R}_2 \wedge \vec{P}_2 \end{aligned} \quad (8.45)$$

On montre aisément que $\vec{J}$ peut se mettre sous la forme :

$$\vec{J} = \vec{L}_G + \vec{L} \quad (8.46)$$

où $\vec{L}_G$ et $\vec{L}$ sont les moments cinétiques associés respectivement au centre de masse et à la particule relative :

$$\begin{aligned} \vec{L}_G &= \vec{R}_G \wedge \vec{P}_G \\ \vec{L} &= \vec{R} \wedge \vec{P} \end{aligned} \quad (8.47)$$



Page de titre

Sommaire



Page 574 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

3. L'atome d'hydrogène

L'hydrogène est le principal constituant de l'univers (70% en masse et 90% en nombre d'atomes). Sa combustion en hélium est à l'origine de l'énergie rayonnée par le soleil et par les autres étoiles.

L'atome d'hydrogène est constitué d'un proton et d'un électron. Il est, en raison de sa simplicité, le seul atome pour lequel l'équation de Schrödinger est soluble rigoureusement. Son étude est donc extrêmement importante et se transpose au moins qualitativement à n'importe quel atome du tableau périodique et parfois même quantitativement aux atomes alcalins et aux atomes ionisés ne conservant plus qu'un seul électron.

L'étude de l'atome d'hydrogène est donc indispensable pour aborder la physique atomique, la physique moléculaire, la chimie et tant d'autres domaines relatifs à la structure de la matière.

3.1. Données relatives à l'atome d'hydrogène

Le proton et l'électron de charges q et $-q$ ($q = 1.610^{-19} \text{ C}$) ont pour masses respectives :

$$m_p = 1.710^{-27} \text{ kg}$$

$$m_e = 0.9110^{-30} \text{ kg}$$

L'atome d'hydrogène est donc un système de deux particules dont l'interaction est essentiellement d'origine électrostatique et est décrite par le poten-



Page de titre

Sommaire



Page 575 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

tiel :

$$V(r) = \frac{-q^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} = \frac{-e^2}{r} \quad (8.48)$$

où r est la distance des deux particules et $e^2 = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0}$.

Les résultats du paragraphe précédent nous permettent d'étudier ce système dans le référentiel du centre de masse où l'hamiltonien de la particule relative s'écrit :

$$H_r = \frac{\vec{P}^2}{2\mu} - \frac{e^2}{r} \quad (8.49)$$

Comme la masse du proton est supérieure à celle de l'électron ($m_p \sim 1800m_e$), la masse réduite du système est voisine de m_e :

$$\mu = \frac{m_p m_e}{m_p + m_e} = \frac{m_e}{1 + \frac{m_e}{m_p}} \sim m_e \left(1 - \frac{m_e}{m_p}\right) \sim m_e \quad (8.50)$$

Ce qui signifie que le centre de masse du système est presque confondu avec la position du proton et que la particule relative s'identifie avec une bonne approximation à l'électron. Toutefois l'écart entre m_e et μ est suffisamment important pour être détecté expérimentalement : c'est l'effet d'entraînement du noyau.



Page de titre

Sommaire



Page 576 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

L'étude menée au premier chapitre dans le cadre du modèle semi-classique de Bohr où l'électron décrit autour du proton une orbite circulaire de rayon r nous a permis de retrouver la formule empirique de Balmer et de définir deux données utiles pour la suite de l'exposé et qui sont :

- Le rayon de Bohr a_0 qui caractérise la dimension de l'atome :

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2} = 0.52 \text{Å} \quad (8.51)$$

- L'énergie d'ionisation E_1 qui est l'énergie qu'il faut fournir à l'atome dans son état fondamental pour en arracher l'électron :

$$E_1 = \frac{\mu e^4}{2\hbar^2} = 13.6 \text{ eV} \quad (8.52)$$

3.2. Etude quantique

3.2.1. Equation aux valeurs propres

L'équation aux valeurs propres de l'hamiltonien qui décrit le mouvement relatif du proton et de l'électron dans le référentiel du centre de masse s'écrit en représentation $\{|\vec{r}\rangle\}$:

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2\mu} \Delta - \frac{e^2}{r} \right] \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r}) \quad (8.53)$$



Page de titre

Sommaire



Page 577 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Comme le potentiel est central on peut appliquer les résultats du paragraphe 2 et écrire les fonctions propres $\Psi(\vec{r})$ sous la forme :

$$\Psi_{k,\ell,m}(r, \theta, \varphi) = \frac{1}{r} U_{k,\ell}(r) Y_{\ell}^m(\theta, \varphi) \quad (8.54)$$

où $U_{k,\ell}(r)$ est la solution de l'équation radiale (8.13) qui s'écrit dans ce cas :

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \ell(\ell+1) \frac{\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{e^2}{r} \right] U_{k,\ell}(r) = E_{k,\ell} U_{k,\ell}(r) \quad (8.55)$$

avec : $U_{k,\ell}(0) = 0$

soit encore :

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + V_{eff}(r) \right] U_{k,\ell}(r) = E_{k,\ell} U_{k,\ell}(r) \quad (8.56)$$

avec : $V_{eff}(r) = \ell(\ell+1) \frac{\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{e^2}{r}$

Il s'agit de résoudre l'équation (8.56) dans le cas où le spectre de H est discret.

3.2.2. Spectre continu et spectre discret

La figure 8.1 montre l'allure du potentiel effectif $V_{eff}(r)$ en fonction de la variable r pour les nombres quantiques azimutaux $\ell = 0, 1, 2$:



Page de titre

Sommaire



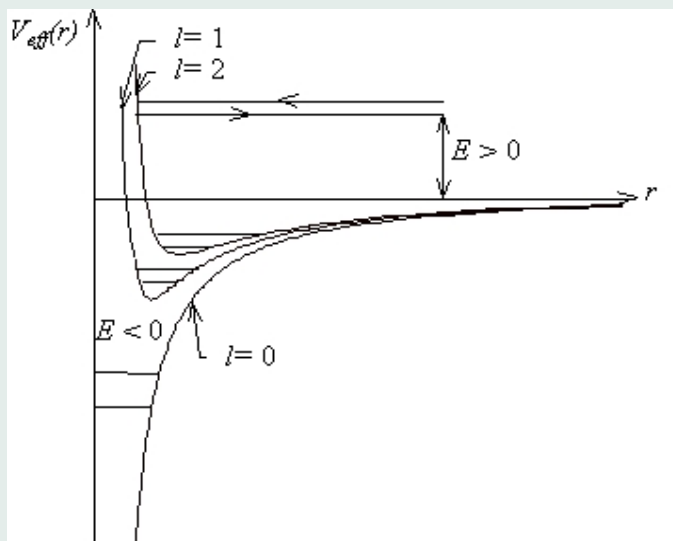
Page 578 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Figure 8.1 : Allure de $V_{eff}(r)$ en fonction de r pour $\ell = 0, 1, 2$

(i) Pour une valeur positive de l'énergie E , le mouvement classique n'est pas borné, il est limité à gauche mais non à droite. Ainsi si la particule vient de l'infini elle est diffusée par le potentiel puis repart de l'infini : c'est la diffusion par un potentiel coulombien ou diffusion de Rutherford. Le spectre de H est dans ce cas continu et les fonctions propres correspondantes ne sont pas de carré sommable.



Page de titre

Sommaire



Page 579 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

(ii) Pour une valeur négative de l'énergie E , le mouvement classique est borné et correspond à une trajectoire fermée. Il en résulte que l'équation aux valeurs propres n'a de solutions acceptables que pour certaines valeurs de l'énergie. Le spectre de H est donc discret et correspond aux niveaux d'énergie de l'atome. C'est ce que nous allons prouver par la suite.

3.2.3. Résolution de l'équation radiale

3.2.3.1. Changement de variables

Pour résoudre plus facilement l'équation radiale et simplifier l'exposé, on va utiliser des grandeurs sans dimensions et prendre comme unités de longueur et d'énergie le rayon de Bohr a_0 et l'énergie d'ionisation E_1 . On posera :

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho = \frac{r}{a_0} \\ \lambda_{k,\ell} = \sqrt{-E_{k,\ell}/E_1} \end{array} \right. \quad \text{c'est à dire : } \left\{ \begin{array}{l} r = \rho a_0 \\ E_{k,\ell} = -\lambda_{k,\ell}^2 E_1 \end{array} \right. \quad (8.57)$$

L'équation radiale (8.55) s'écrit alors :

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2\mu} \frac{\mu^2 e^4}{\hbar^4} \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{\mu^2 e^4}{\hbar^4} \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} - \frac{\mu e^4}{\hbar^2 \rho} \right] U_{k,\ell}(\rho) = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2} \lambda_{k,\ell}^2 U_{k,\ell}(\rho) \quad (8.58)$$



Page de titre

Sommaire



Page 580 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

soit après simplification :

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} + \frac{2}{\rho} - \lambda_{k,\ell}^2 \right] U_{k,\ell}(\rho) = 0 \quad (8.59)$$

Pour résoudre cette équation nous allons développer la fonction $U_{k,\ell}(\rho)$ en séries entières.

3.2.3.2. Comportement asymptotique

Lorsque le paramètre sans dimension ρ tend vers l'infini, les termes en $\frac{1}{\rho}$ et en $\frac{1}{\rho^2}$ deviennent négligeables devant la quantité constante $\lambda_{k,\ell}^2$. L'équation radiale se réduit alors à :

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \lambda_{k,\ell}^2 \right] U_{k,\ell}(\rho) = 0 \quad (8.60)$$

Cette équation admet pour solutions les fonctions $e^{\pm \lambda_{k,\ell} \rho}$ comme $U_{k,\ell}(\rho)$ doit être bornée à l'infini, nous ne retiendrons que les solutions $e^{-\lambda_{k,\ell} \rho}$.

La solution générale de l'équation radiale sera alors de la forme :

$$U_{k,\ell}(\rho) = e^{-\lambda_{k,\ell} \rho} V_{k,\ell}(\rho) \quad (8.61)$$



Page de titre

Sommaire



Page 581 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

où $V_{k,\ell}(\rho)$ est une fonction qui vérifie l'équation différentielle suivante :

$$\left\{ \frac{d^2}{d\rho^2} - 2\lambda_{k,\ell} \frac{d}{d\rho} + \left[\frac{2}{\rho} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} \right] \right\} V_{k,\ell}(\rho) = 0 \quad (8.62)$$

avec : $V_{k,\ell}(0) = 0$.

3.2.3.3. Solution sous forme de séries entières

On va chercher les solutions de l'équation radiale en développant $V_{k,\ell}(\rho)$ en puissances de ρ . On posera pour des raisons dont on verra l'utilité par la suite :

$$V_{k,\ell}(\rho) = \rho^s \sum_{p=0}^{\infty} c_p \rho^p$$

s est strictement positif à cause de la condition (8.62) et c_0 est le premier coefficient non nul du développement.

On a :

$$\begin{aligned} \frac{dV_{k,\ell}(\rho)}{d\rho} &= \sum_{p=0}^{\infty} (p+s) c_p \rho^{p+s-1} \\ \frac{d^2 V_{k,\ell}(\rho)}{d\rho^2} &= \sum_{p=0}^{\infty} (p+s)(p+s-1) c_p \rho^{p+s-2} \end{aligned} \quad (8.63)$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 582 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

En partant de l'équation (8.62) et en égalant à zéro le coefficient de ρ^{p+s-2} qui est le terme de plus bas degré, il vient :

$$[(p+s)(p+s-1) - \ell(\ell+1)] c_p - 2 [\lambda_{k,\ell}(p+s-1) - 1] c_{p-1} = 0 \quad (8.64)$$

Pour $p = 0$, on a $c_0 \neq 0$ et $c_{-1} = 0$, ce qui implique que :

$$s(s-1) - \ell(\ell+1) = 0 \quad (8.65)$$

On voit que s ne peut prendre que l'une des deux valeurs :

$$\begin{cases} s = \ell + 1 \\ s = -\ell \end{cases} \quad (8.66)$$

Comme s est strictement positif, on a nécessairement $s = \ell + 1$ et $V_{k,\ell}(\rho)$ s'écrit :

$$V_{k,\ell}(\rho) = \rho^{\ell+1} \sum_{p=0}^{\infty} c_p \rho^p \quad (8.67)$$

On aboutit alors à la relation de récurrence suivante :

$$c_p = \frac{2 [\lambda_{k,\ell}(p+\ell) - 1]}{p(p+2\ell+1)} c_{p-1} \quad (8.68)$$



Page de titre

Sommaire



Page 583 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Cette relation permet de calculer c_p en fonction de c_0 .

Pour p tendant vers l'infini on a :

$$\frac{c_p}{c_{p-1}} \sim \frac{2\lambda_{k,\ell}}{p} \quad (8.69)$$

Ce qui montre que $\frac{c_p}{c_{p-1}}$ tend vers zéro quand p tend vers l'infini. On en déduit que la série correspondante est convergente quel que soit ρ et que pour une valeur quelconque de $\lambda_{k,\ell}$ on peut déterminer sans ambiguïté les $V_{k,\ell}(\rho)$ et par suite les $U_{k,\ell}(\rho)$.

3.2.4. Quantification de l'énergie

Considérons le développement en série entière de la fonction $e^{2\lambda_{k,\ell}\rho}$:

$$e^{2\lambda_{k,\ell}\rho} = \sum_{p=0}^{\infty} \frac{(2\lambda_{k,\ell}\rho)^p}{p!} = \sum_{p=0}^{\infty} \frac{(2\lambda_{k,\ell})^p}{p!} \rho^p = \sum_{p=0}^{\infty} a_p \rho^p \quad (8.70)$$

On remarque que les coefficients a_p de ce développement sont tels que :

$$\frac{a_p}{a_{p-1}} = \frac{2\lambda_{k,\ell}}{p} \quad (8.71)$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 584 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

Ce rapport qui est égal à celui obtenu dans (8.69) montre que pour les grandes valeurs de ρ le comportement de la série $\sum c_p \rho^p$ est dominé par $e^{2\lambda_{k,\ell} \rho}$. On en déduit alors que pour les grandes valeurs de ρ , la fonction $U_{k,\ell}(\rho)$ correspondante est :

$$U_{k,\ell}(\rho) = \rho^{\ell+1} e^{\lambda_{k,\ell} \rho} \quad (8.72)$$

Cette fonction est divergente et est non acceptable physiquement. Pour y remédier, il suffit de réduire le développement à un polynôme comportant un nombre fini de termes. On admettra alors qu'il existe un nombre entier k strictement positif tel que quel que soit p supérieur ou égal à k le coefficient correspondant c_p est nul ainsi que tous les coefficients de rang supérieur. On aura alors d'après (8.68).

$$\lambda_{k,\ell}(k + \ell) - 1 = 0 \quad (8.73)$$

soit :

$$\lambda_{k,\ell} = \frac{1}{k + \ell} \quad (8.74)$$

Ainsi pour ℓ donné, les seules énergies négatives possibles sont donc :

$$E_{k,\ell} = \frac{-E_1}{(k + \ell)^2} \quad ; \quad k = 1, 2, 3... \quad (8.75)$$



Page de titre

Sommaire



Page 585 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

On remarque que l'énergie $E_{k,\ell}$ ne dépend pas de k et ℓ séparément mais seulement de leur somme. On peut alors poser :

$$n = k + \ell \quad (8.76)$$

Ce qui donne pour les différents niveaux d'énergie de l'atome d'hydrogène :

$$E_n = \frac{-E_1}{n^2} \quad ; \quad n = 1, 2, 3... \quad (8.77)$$

On retrouve donc la formule de Bohr établie au chapitre 1(expression (1.35)). Le nombre n qui repère l'énergie est alors appelé nombre quantique principal.

Comme les observables H , $\tilde{L}^2$ et L_z constituent un E.C.O.C. et que la donnée des trois nombres n , ℓ et m équivaut à celle de leurs valeurs propres respectives, il est plus logique de repérer les fonctions d'onde associées à leurs vecteurs propres communs non pas par les trois nombres quantiques k , ℓ et m comme nous l'avons fait jusqu'à présent mais par n , ℓ et m . On notera alors $\Psi_{n,\ell,m}(r, \theta, \varphi)$ la fonction d'onde associée à l'énergie E_n .

3.2.5. Fonctions radiales

Les fonctions radiales sont définies d'après (8.12) et (8.61) en remplaçant le nombre n par k par :

$$R_{k,\ell}(r) = \frac{U_{k,\ell}(r)}{r} = \frac{e^{-\lambda_{k,\ell} \rho}}{r} V_{k,\ell}(\rho) \quad (8.78)$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 586 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

$V_{k,\ell}(\rho)$ est un polynôme dont le terme de plus bas degré est en $\rho^{\ell+1}$ et celui de plus haut degré en $\rho^{k+\ell}$. Ses différents coefficients se calculent en fonction de c_0 à partir de la relation de récurrence (8.68) qui s'écrit en tenant compte de (8.74) :

$$c_p = \frac{2(p-k)}{p(p+2\ell+1)(p+\ell)} c_{p-1} \quad (8.79)$$

c_0 étant déterminé à un facteur de phase près par la condition de normalisation (8.18).

En revenant à la variable r la fonction radiale prend en définitive la forme suivante :

$$R_{k,\ell}(r) = C_{k,\ell} e^{-r/k a_0} L_{k,\ell}\left(\frac{r}{a_0}\right) \quad (8.80)$$

$C_{k,\ell}$ est une constante de normalisation et $L_{k,\ell}(r)$ est un polynôme de degré $n-1$ dont le terme de degré le plus bas est ℓ . $L_{k,\ell}(r)$ est appelé polynôme de Laguerre et est bien connu par les mathématiciens.



Page de titre

Sommaire



Page 587 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

A titre d'exemple, les trois premières fonctions radiales sont :

$$\begin{aligned}
 R_{1,0}(r) &= 2(a_0)^{-3/2} e^{-r/a_0} \\
 R_{2,0}(r) &= 2(a_0)^{-3/2} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-r/2a_0} \\
 R_{2,1}(r) &= 2(a_0)^{-3/2} (3)^{-1/2} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0}
 \end{aligned} \tag{8.81}$$

3.3. Niveaux d'énergie de l'atome d'hydrogène

D'après (8.77) l'énergie E_n de chacun des niveaux ne dépend que de n . Si l'on se fixe une valeur donnée de n , plusieurs valeurs de ℓ sont possibles : $\ell = 0, 1, 2, \dots, n-1$ et à chacune de ces valeurs correspondent $(2\ell + 1)$ valeurs possibles de m ($m = -\ell, -\ell + 1, \dots, \ell$) : c'est ce que nous avons appelé dans 1.4 dégénérescence essentielle.

La dégénérescence totale d'un niveau d'énergie E_n est donc :

$$g_n = \sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell + 1) = \frac{2n(n-1)}{2} + n = n^2 \tag{8.82}$$

Mais il existe en plus, d'après la relation (8.75), des dégénérescences accidentelles liées au fait que deux valeurs propres $E_{k,\ell}$ et $E_{k',\ell'}$ correspondant à des équations radiales différentes ($\ell' \neq \ell$) sont égales si $k + \ell = k' + \ell'$.

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 588 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

Le nombre quantique principal n caractérise ce que l'on appelle une **couche électronique**. Chaque couche comporte n **sous-couches** correspondant chacune à l'une des valeurs de ℓ et chaque sous-couche comporte $(2\ell + 1)$ états distincts associés aux $(2\ell + 1)$ valeurs possibles de m pour ℓ fixé.

Ainsi le niveau fondamental $n = 1$ caractérise la couche K qui comprend la seule sous-couche $1s$, le premier niveau excité ($n = 2$) caractérise la couche L qui comprend les sous-couches $2s, 2p$.

Sur la figure 8.2 nous avons représenté le spectre d'énergie de l'atome d'hydrogène. On range les niveaux d'énergie par colonnes verticales pour chaque valeur de ℓ : $\ell = 0(s)$, $\ell = 1(p)$, $\ell = 2(d)$.

L'ordonnée de chaque niveau est proportionnelle à son énergie et ne dépend que de n . On remarque également l'apparition de dégénérescences accidentelles liées à des mêmes valeurs d'énergie E_n .



Page de titre

Sommaire



Page 589 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

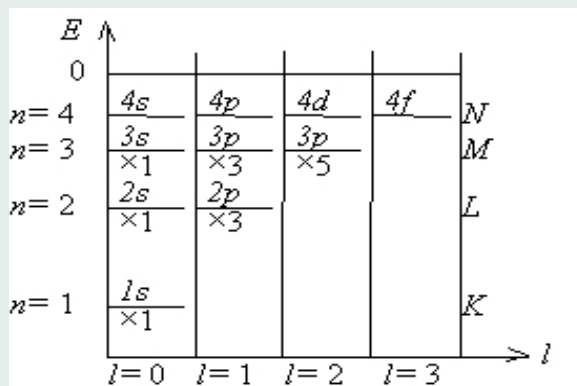


Figure 8.2 : Niveaux d'énergie de l'atome d'hydrogène

3.4. Fonctions d'onde

Les fonctions d'onde $\Psi_{n,\ell,m}(r, \theta, \varphi)$ sont des produits d'une fonction radiale par une harmonique sphérique $Y_{\ell}^m(\theta, \varphi)$ qui contient la dépendance angulaire.

3.4.1. Dépendance angulaire

Nous avons vu dans le paragraphe 4.5.4 du chapitre 7 que cette dépendance peut être visualisée en portant dans chaque direction d'angles



Page de titre

Sommaire



Page 590 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

(θ, φ) une longueur proportionnelle à $|Y_\ell^m(\theta, \varphi)|^2$. On obtient des surfaces de révolution autour de l'axe $\vec{Oz}$ telles que celles, représentées sur la figure 7.2 et visualisant les harmoniques Y_0^0, Y_0^1, Y_2^0 .

3.4.2. Dépendance radiale

Cette dépendance est décrite par les fonctions radiales $R_{n,\ell}(r)$ dont chacune est caractéristique d'une sous-couche.

Ces fonctions sont données par (8.80) :

$$R_{n,\ell}(r) = C_{n,\ell} e^{-r/na_0} L_{n,\ell}\left(\frac{r}{a_0}\right) \quad (8.83)$$

Comme le terme de plus bas degré de $L_{n,\ell}(r)$ est r^ℓ , le comportement de $R_{n,\ell}(r)$ au voisinage de $r = 0$ est aussi en r^ℓ et par conséquent seuls les états appartenant aux sous-couches s pour lesquelles $\ell = 0$ donnent une probabilité de présence non nulle à l'origine. Cela est illustré sur la figure 8.3 où on a représenté la dépendance radiale des fonctions d'onde associées aux premiers niveaux de l'atome d'hydrogène.



Page de titre

Sommaire



Page 591 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

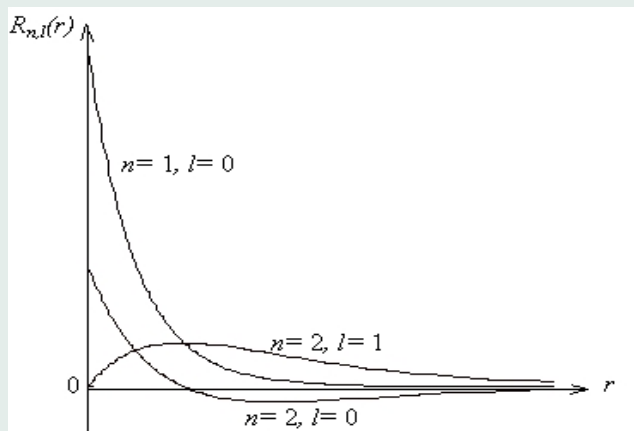


Figure 8.3 : Dépendance radiale des fonctions d'onde des premiers niveaux de l'atome d'hydrogène

3.4.3. Orbitales atomiques

Les fonctions d'onde $\Psi_{n,\ell,m}(\vec{r})$ correspondant aux niveaux d'énergie de l'atome d'hydrogène sont calculables pour tout triplet de nombres quantiques n, ℓ, m ; ces nombres repèrent respectivement l'énergie E_n , le carré du moment cinétique $\ell(\ell+1)\hbar^2$ et la composante $m\hbar$ du moment cinétique sur $\vec{Oz}$. Le tableau 8.1 donne l'expression de ces fonctions pour les premiers niveaux d'énergie.

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 592 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

Les fonctions $\Psi_{n,\ell,m}(\vec{r})$ qui correspondent à des états stationnaires de l'atome sont souvent appelées orbitales atomiques.

Comme les fonctions radiales $R_{n,\ell}(r)$ sont réelles et les harmoniques sphériques sont complexes sauf pour $m = 0$, les orbitales atomiques sont en général des fonctions complexes. Toutefois en superposant les orbitales $\Psi_{n,\ell,m}(\vec{r})$ et $\Psi_{n,\ell,-m}(\vec{r})$ on peut construire des orbitales réelles qui ont une dépendance angulaire simple que l'on peut représenter graphiquement, directement et sans passage par le carré du module de la fonction d'onde.



Page de titre

Sommaire



Page 593 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

niveau 1s	$\Psi_{n=1,\ell=0,m=0} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}$
niveau 2s	$\Psi_{n=2,\ell=0,m=0} = \frac{1}{\sqrt{8\pi a_0^3}} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-r/2a_0}$
niveau 2p	$\Psi_{n=2,\ell=1,m=1} = -\frac{1}{8\sqrt{\pi a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0} \sin \theta e^{i\varphi}$ $\Psi_{n=2,\ell=1,m=0} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0} \cos \theta$ $\Psi_{n=2,\ell=1,m=-1} = \frac{1}{8\sqrt{\pi a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0} \sin \theta e^{-i\varphi}$

Tableau 8.1 : Expression des fonctions d'onde $\Psi_{n,\ell,m}(r, \theta, \varphi)$ pour les premiers niveaux de l'atome d'hydrogène

On représente généralement les orbitales atomiques en fixant r et en portant sur chaque direction d'angles (θ, φ) un segment de longueur $\Psi(r, \theta, \varphi)$. Les orbitales atomiques les plus utilisés sont les orbitales s et les orbitales p .

(i) Orbitales s



Page de titre

Sommaire



Page 594 de 978

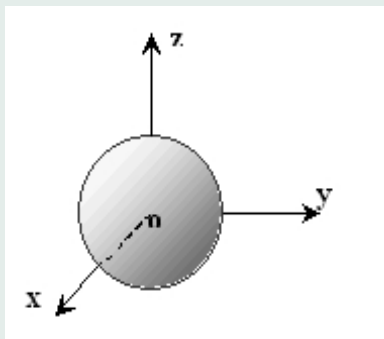
Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Elles correspondent à $\ell = m = 0$, la fonction d'onde $\Psi_{n,0,0}(r, \theta, \varphi)$ est réelle et notée $\Psi_{ns}(\vec{r})$. La surface obtenue en fixant r et en faisant varier θ et φ est une sphère centrée en O (fig. 8.4).

Figure 8.4 : Orbitale atomique s de l'hydrogène

(ii) Orbitales p

Elles correspondent à $\ell = 1$ et $m = -1, 0, +1$ et sont décrites par des



Page de titre

Sommaire



Page 595 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

fonctions $\Psi_{n,\ell,m}(r, \theta, \varphi)$ notés $\Psi_{np}(\vec{r})$ qui sont :

$$\left\{ \begin{array}{l} \Psi_{n,1,1}(\vec{r}) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} R_{n,1}(r) \sin \theta e^{i\varphi} \\ \Psi_{n,1,1}(\vec{r}) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} R_{n,1}(r) \cos \theta \\ \Psi_{n,1,-1}(\vec{r}) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} R_{n,1}(r) \sin \theta e^{-i\varphi} \end{array} \right. \quad (8.84)$$

En formant trois superpositions linéaires de ces fonctions on peut construire trois fonctions réelles qui sont :

$$\left\{ \begin{array}{l} \Psi_{n,1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} R_{n,1}(r) \frac{z}{r} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} [\Psi_{n,1,1} - \Psi_{n,1,-1}] = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} R_{n,1}(r) \frac{x}{r} \\ \frac{i}{\sqrt{2}} [\Psi_{n,1,1} + \Psi_{n,1,-1}] = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} R_{n,1}(r) \frac{y}{r} \end{array} \right. \quad (8.85)$$

Ces fonctions sont désignées sous le nom d'orbitales p_z , p_x , p_y . Elles sont notées $\Psi_{n,p_z}(\vec{r})$, $\Psi_{n,p_x}(\vec{r})$ et $\Psi_{n,p_y}(\vec{r})$ et sont représentées sur la figure 8.5 .



Page de titre

Sommaire



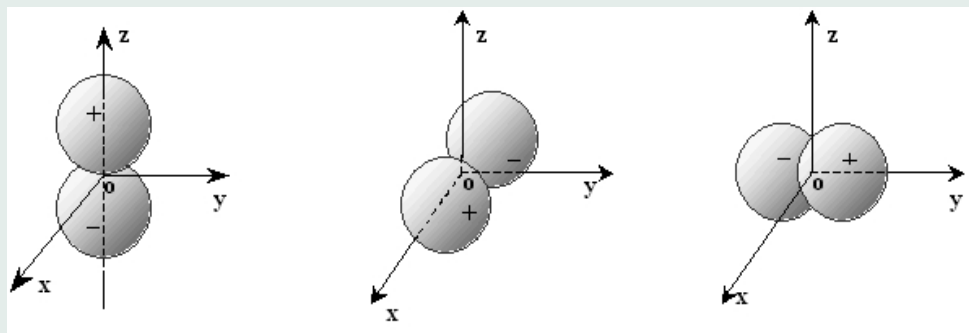
Page 596 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Figure 8.5 : Orbitales atomiques p_z , p_x et p_y de l'hydrogène

On remarque que les orbitales p_x et p_y se déduisent respectivement de l'orbitale p_z par des rotations d'angles $+\frac{\pi}{2}$ et $-\frac{\pi}{2}$ autour de $\vec{Oy}$ et $\vec{Ox}$.

Enfin une superposition linéaire d'orbitales atomiques correspondant à un même nombre quantique principal n mais à des ℓ et m différents est appelée orbitale hybride. Cette orbitale est d'une grande importance dans la formation des liaisons chimiques. Les orbitales hybrides les plus connues sont les orbitales sp , les orbitales sp^2 et les orbitales sp^3 .

Sur la figure 8.6 nous avons représenté à titre d'exemple la dépendance angulaire de l'orbitale hybride $\Psi_{n,s,p_z}(\vec{r})$ obtenue par superposition linéaire des deux orbitales atomiques $\Psi_{n,s}(\vec{r})$ et $\Psi_{n,p_z}(\vec{r})$.



Page de titre

Sommaire



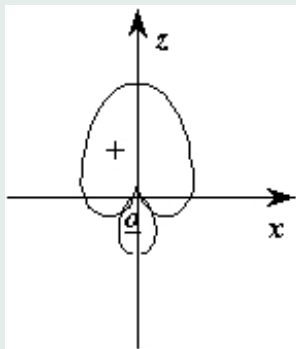
Page 597 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Figure 8.6 : Orbitale atomique hybride sp_z

3.5. Systèmes hydrogéoïdes

Un système hydrogéoïde qualifie un atome ou un ion formé d'un noyau et d'un seul électron comme l'atome d'hydrogène. Le deutérium, le tritium, l'ion He^+ sont des exemples de tels systèmes et les résultats établis précédemment pour l'atome d'hydrogène se transposent intégralement en changeant la masse réduite et le rang Z de l'atome.

Le potentiel d'interaction entre le noyau de charge Zq et l'électron de


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 598 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

charge $-q$ est :

$$V(r) = -\frac{Zq^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} = -\frac{Ze^2}{r} \quad (8.86)$$

Et l'équation radiale adimensionnelle (8.59) prend la forme :

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} + \frac{2Z}{\rho} - \lambda_{k,\ell}^2 \right] U_{k,\ell}(\rho) = 0 \quad (8.87)$$

Si on divise tous les termes de cette équation par Z^2 , elle prend la même forme que l'équation radiale de l'hydrogène à condition de substituer ρ' à ρZ et $\lambda'_{k,\ell}$ à $\lambda_{k,\ell}/Z$.

Les systèmes hydrogénoïdes ont donc les mêmes fonctions d'onde que l'atome d'hydrogène mais les dimensions sont réduites d'un facteur Z et les énergies sont multipliées par un facteur Z^2 .

Ainsi le rayon de Bohr et l'énergie d'ionisation de ces systèmes sont tels que :

$$a_0(Z) = \frac{a_0}{Z} \quad (8.88)$$

$$E_1(Z) = Z^2 E_1$$

a_0 et E_1 étant respectivement le rayon de Bohr et l'énergie d'ionisation de l'atome d'hydrogène.

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 599 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

Ces systèmes sont donc plus petits que l'atome d'hydrogène car le noyau et l'électron sont plus fortement liés, de plus leur énergie augmente de façon quadratique avec Z .



Page de titre

Sommaire



Page 600 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Exercices et Problèmes

EP 8.1 Oscillateur harmonique isotrope à deux dimensions

Le mouvement d'un oscillateur harmonique à deux dimensions est décrit par l'hamiltonien :

$$H = \frac{1}{2\mu} (P_x^2 + P_y^2) + \frac{1}{2}\mu\omega^2 (X^2 + Y^2)$$

où μ et ω sont respectivement la masse et la pulsation de l'oscillateur et X , Y et P_x , P_y les opérateurs position et impulsion.

1 - En considérant que l'espace des états ξ de l'oscillateur est le produit tensoriel des deux espaces d'états ξ_x et ξ_y correspondant à son mouvement suivant les axes $\vec{Ox}$ et $\vec{Oy}$ ($\xi = \xi_x \otimes \xi_y$) :

a - Montrer que l'hamiltonien H peut s'écrire comme une somme de deux opérateurs hamiltoniens, prolongement d'opérateurs qui agissent au départ dans un seul des deux espaces.

b - Quels sont les valeurs et vecteurs propres de H dans l'espace des états ξ .

c - Quelles sont les énergies du niveau fondamental et du premier niveau excité. Donner leur degré de dégénérescence.

2 - La méthode précédente a l'inconvénient de ne pas faire apparaître sur les états propres la symétrie de révolution du potentiel. Pour respecter la symétrie du problème, il est préférable de résoudre directement l'équation aux valeurs propres de



Page de titre

Sommaire



Page 601 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

H en coordonnées polaires (r, φ) tels que :

$$x = r \cos \varphi ; \quad y = r \sin \varphi$$

a - Ecrire l'hamiltonien H en fonction de r et φ . On rappelle que le laplacien s'écrit en coordonnées polaires :

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \left[r \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]$$

b - Trouver l'équation aux valeurs propres en fonction des variables réduites :

$$\rho = \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}} r \quad \text{et} \quad \varepsilon = \frac{E}{\hbar\omega}$$

c - On peut montrer que les fonctions propres sont de la forme :

$$\Psi(\rho, \varphi) = R(\rho) \Phi(\varphi)$$

avec $\Phi(\varphi) = C \exp(-im\varphi)$

Montrer alors que m est un entier ($m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$)

d - Montrer que l'équation satisfaite par $R(\rho)$ se met sous la forme :

$$\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \left(\rho \frac{dR(\rho)}{d\rho} \right) - \frac{m^2}{\rho^2} R(\rho) + (2\varepsilon - \rho^2) R(\rho) = 0$$



Page de titre

Sommaire



Page 602 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

3 - On se propose de résoudre cette équation par la méthode polynômiale.

a - Montrer qu'elle admet comme solution asymptotique physiquement satisfaisante pour $\rho \rightarrow \infty$:

$$R^-(\rho) = e^{-\left(\frac{\rho^2}{2}\right)}$$

$R(\rho)$ peut s'écrire, alors sous la forme :

$$R(\rho) = R^-(\rho)f(\rho)$$

b - Montrer que $f(\rho)$ obéit à l'équation :

$$f'' + \left(\frac{1}{\rho} - 2\rho\right) f' + \left(2\varepsilon - 2 - \frac{m^2}{\rho^2}\right) f = 0$$

c - On cherche une solution de cette équation sous la forme d'une série :

$$f(\rho) = \rho^s \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^{s+k} \quad \text{avec } a_0 \neq 0 \text{ et } s \text{ entier}$$

α - Trouver la relation de récurrence entre les termes a_k et a_{k-2} de la série.

β - Montrer que s est lié simplement à m (on vérifie la relation de récurrence pour $k = 0$).



Page de titre

Sommaire



Page 603 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

γ - Montrer que si l'on veut que $R(\infty)$ s'annule (état lié), il faut que la série s'arrête à partir d'un rang n .

δ - En déduire que l'énergie E est quantifiée sous la forme :

$$E_N = (N + 1) \hbar \omega$$

Exprimer N en fonction de m et n . En déduire la dégénérescence de E_N .

EP 8.2 Oscillateur harmonique isotrope à trois dimensions

Nous allons étudier l'oscillateur harmonique isotrope à trois dimensions par la méthode du potentiel central. Cet oscillateur est constitué par une particule sans spin de masse μ soumise au potentiel :

$$V(r) = \frac{1}{2} \mu \omega^2 r^2$$

1 - Ecrire en représentation $\{|\vec{r}\rangle\}$ l'équation aux valeurs propres de l'hamiltonien H de la particule.

2 - Indiquer sans démonstration la forme générale des fonctions d'onde stationnaires de la particule et écrire l'équation radiale correspondante.

3 - Montrer que par une transformation simple, l'équation radiale peut se mettre sous la forme :

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \beta^4 r^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + \varepsilon_{k,\ell} \right] U_{k,\ell}(r) = 0$$



Page de titre

Sommaire



Page 604 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

où $\beta^2 = \frac{\mu\omega}{\hbar}$ et $\varepsilon_{k,\ell}$ est proportionnel à l'énergie.

Donner les conditions que doit satisfaire la fonction $U_{k,\ell}(r)$.

4 - On désire résoudre l'équation précédente par la méthode polynômiale en posant :

$$U_{k,\ell}(r) = \exp\left(\frac{\beta^2 r^2}{2}\right) V_{k,\ell}(r)$$

a - Que devient l'équation précédente et la condition supplémentaire en termes des fonctions $V_{k,\ell}(r)$.

b - En cherchant une solution de la forme :

$$V_{k,\ell}(r) = r^s \sum_{q=0}^{\infty} a_q r^q \text{ avec } a_0 \neq 0 \text{ et } s \text{ entier}$$

et en tenant compte des exigences physiques adéquates, trouver une relation de récurrence entre les coefficients a_q .

c - Montrer alors que $\varepsilon_{k,\ell}$ peut s'écrire sous la forme :

$$\varepsilon_{k,\ell} = (2k + 2\ell + 3)\beta^2$$

où k est un entier pair, positif ou nul.

5 - Ecrire l'expression de l'énergie $E_{k,\ell}$ et trouver le degré de dégénérescence du niveau fondamental et des deux premiers niveaux excités.



Page de titre

Sommaire



Page 605 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

EP 8.3 Spectre de vibration-rotation d'une molécule diatomique

On se place dans l'approximation de Born-Oppenheimer qui consiste à traiter séparément le mouvement des électrons et celui des noyaux de masse beaucoup plus grande et de vitesse beaucoup plus petite. Dans cette approximation la fonction d'onde totale de la molécule se réduit à un produit de fonction d'onde électronique par une fonction d'onde nucléaire. On ne s'intéressera qu'à la fonction d'onde et à l'hamiltonien des noyaux et on se ramène, en fait, au problème de deux particules en interaction. Nous tiendrons compte simultanément de tous les degrés de liberté : vibration des deux noyaux autour de leur position d'équilibre et rotation de l'ensemble autour du centre de masse.

I- Séparation des mouvements de translation et des mouvements de vibration-rotation

1- Ecrire l'hamiltonien classique $\mathcal{H}$ du système des deux noyaux en fonction de leurs masses respectives m_1 et m_2 , de leur quantités de mouvement $\vec{p}_1$ et $\vec{p}_2$ et du potentiel d'interaction $V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$; $\vec{r}_1$ et $\vec{r}_2$ étant les vecteurs positions des noyaux dans un référentiel d'inertie.

- Montrer que l'hamiltonien du système peut s'écrire sous la forme :

$$\mathcal{H} = \frac{p_G^2}{2M} + \frac{p^2}{\mu} + V(r)$$



Page de titre

Sommaire



Page 606 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

où M et μ sont la masse totale et la masse réduite du système des deux particules et $\vec{p}_G$ et $\vec{p}$ sont respectivement la quantité de mouvement totale du système et la quantité de mouvement de la particule relative.

2- Ecrire l'hamiltonien quantique et montrer qu'il se met sous la forme :

$$H = H_G + H_r$$

Expliciter H_G et H_r et montrer que l'ensemble $\{H, H_G, H_r\}$ constitue un E.C.O.C.

En déduire que la fonction d'onde du système est de la forme :

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \chi(\vec{R}_G) \varphi(\vec{r})$$

3- Ecrire l'équation de Schrödinger pour $\chi(\vec{R}_G)$. Interprétation physique.

4- On se place maintenant dans le repère du centre de masse et on s'intéresse uniquement au mouvement relatif des noyaux décrit par la fonction $\varphi(\vec{r})$.

Montrer que cette fonction peut s'écrire sous la forme

$$\varphi_{\nu, \ell, m} = R_{\nu, \ell} Y_{\ell, m}(\theta, \varphi)$$

où les $Y_{\ell, m}(\theta, \varphi)$ ne sont autres que les harmoniques sphériques (ν : nombre quantique qui permet de classer les niveaux d'énergie).

On rappelle que : $P^2 = P_r^2 + \frac{\vec{L}^2}{r^2}$ où $P_r = \frac{\hbar}{i} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r$ et $\vec{L} = \vec{r} \wedge \vec{P}$.



Page de titre

Sommaire



Page 607 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

5- On pose : $R_{\nu,\ell}(r) = \frac{U_{\nu,\ell}}{r}$. Quelles conditions aux limites doit-on imposer à $U_{\nu,\ell}(r)$? Montrer que $U_{\nu,\ell}(r)$ satisfait à l'équation radiale :

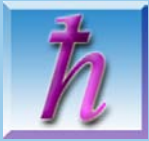
$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + V(r) + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \right] U_{\nu,\ell}(r) = E_{\nu,\ell} U_{\nu,\ell}(r)$$

II- Energies propres du système

Le potentiel $V(r)$ est central et est représenté sur la figure 1. Pour simplifier le problème on se placera dans l'approximation harmonique, c'est-à-dire qu'on se limitera dans le développement de $V(r)$ autour de la position d'équilibre $r = r_e$ aux deux premiers termes :

$$V(r) = V(r_e) + \frac{1}{2}k(r - r_e)^2$$

où k est une constante de rappel.



Page de titre

Sommaire



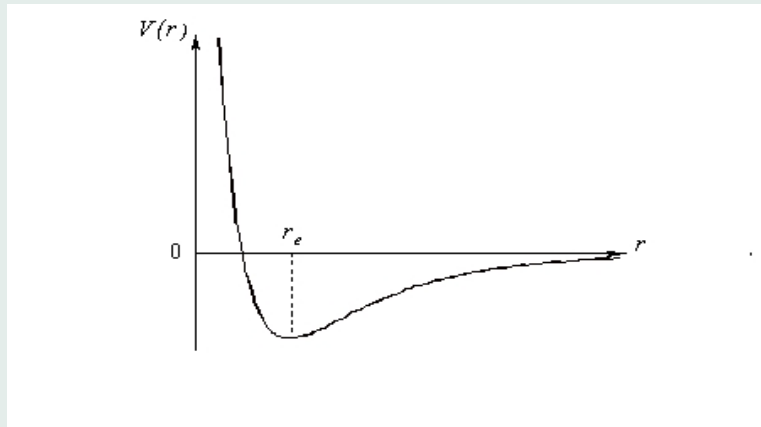
Page 608 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

1- Cas où $\ell = 0$

Exprimer les niveaux d'énergie en fonction de $V(r_e)$, de $\omega = \sqrt{\frac{k}{\mu}}$ et du nombre quantique de vibration ν .

2- Cas où $\ell \neq 0$

On peut montrer que le potentiel centrifuge : $\frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mu r^2}$ varie très peu en fonction de r , on remplacera donc dans l'équation radiale ce terme par sa valeur à l'équilibre et on posera $B = \frac{\hbar^2}{4\pi\mu r_e^2}$. B est appelée constante de rotationnalité.



Page de titre

Sommaire



Page 609 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

a- Montrer alors que les fonctions radiales $U_{v,\ell}$ sont indépendantes du nombre quantique ℓ :

$$U_{v,\ell}(r) = U_v(r)$$

b- Montrer que les énergies possibles du système sont :

$$E_{v,\ell} = V(r_e) + \left(v + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega + B\hbar\ell(\ell + 1)$$

c- Application numérique :

Calculer la constante rotationnelle B et la fréquence de vibration de la molécule HCl . On donne :

$$r_r = 1.3 \times 10^{-10} m, \mu = 1.6 \times 10^{-27} Kg, k = 4.8 \times 10^2 J/m^2$$

III Règles de sélection

On suppose que la molécule possède un moment dipolaire électrique parallèle à son axe et qui peut s'écrire en première approximation :

$$D(r) = d_0 + d_1(r - r_e)$$



Page de titre

Sommaire



Page 610 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Dans une telle molécule les fréquences des ondes électromagnétiques polarisées suivant $\vec{Oz}$, que la molécule peut absorber, correspondent à des transitions entre les différents niveaux d'énergie. On montre que la probabilité de transition entre un niveau $|\varphi_{\nu'\ell'm'}\rangle$ et $|\varphi_{\nu\ell m}\rangle$ est proportionnelle au carré de l'élément de matrice :

$$\langle \varphi_{\nu'\ell'm'} | D(r) \cos \theta | \varphi_{\nu\ell m} \rangle$$

où θ est l'angle que fait l'axe de la molécule avec l'axe $\vec{Oz}$.

1 - Montrer qu'on ne peut observer de transition entre deux niveaux de vibration ν et ν' que si $\nu' - \nu = 0, \pm 1$: (règle de sélection $\Delta\nu = 0, \pm 1$).

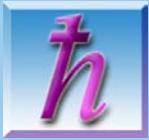
2 - Montrer qu'on ne peut envisager de transition entre deux niveaux de rotation ℓ et ℓ' que si $\ell' - \ell = \pm 1$: (règle de sélection $\Delta\ell = \pm 1$).

EP 8.4 Rotations et vibrations anharmoniques d'une molécule diatomique

L'étude des mouvements de rotation et de vibration des noyaux des molécules diatomiques conduit à introduire une fonction d'onde $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ satisfaisant à l'équation :

$$-\left(\frac{\hbar^2}{2m_1} \Delta_1 + \frac{\hbar^2}{2m_2} \Delta_2 \right) \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) + V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \varepsilon \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$$

où m_1 et m_2 sont les masses des noyaux, $\vec{r}_1(x_1, y_1, z_1)$ et $\vec{r}_2(x_2, y_2, z_2)$ leurs vecteurs positions, Δ_1 et Δ_2 les opérateurs laplaciens, V est l'énergie potentielle

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 611 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

du système qu'on suppose ne dépendre que de la position relative des noyaux et ε est l'énergie totale du système.

On repère le centre de masse G du système par son vecteur position $\vec{r}_G(X, Y, Z)$ et on pose $\vec{r}_1 - \vec{r}_2 = \vec{r}(x, y, z)$.



Page de titre

Sommaire



Page 612 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

I- Calculs Préliminaires

1 - Montrer que l'on a :

$$\frac{\Delta_1}{m_1} + \frac{\Delta_2}{m_2} = \frac{\Delta_G}{M} + \frac{\Delta_r}{\mu}$$

où Δ_G et Δ_r sont des opérateurs laplaciens se rapportant au mouvement du centre de masse et au mouvement relatif des deux noyaux :

$$\Delta_g = \frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{\partial^2}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2}{\partial Z^2} \quad \Delta_r = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

et M et μ respectivement la masse totale du système des deux noyaux et sa masse réduite définies par :

$$M = m_1 + m_2 \quad \text{et} \quad \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$

2 - En posant $\Psi = \chi(\vec{r}_g) \varphi(\vec{r})$, montrer que le problème peut être ramené à celui d'une particule unique de fonction d'onde $\varphi(\vec{r})$ se déplaçant dans un potentiel central $V(r)$ ne dépendant que de la distance r entre les noyaux.

3 - Montrer que l'équation satisfaite par $\varphi(\vec{r})$ peut être intégrée par la méthode de la séparation des variables en coordonnées sphériques (r, θ, φ) et que la fonction $u(r) = rR(r)$, où $R(r)$ est la partie radiale de la fonction d'onde, satisfait à l'équation.

$$\frac{d^2 u(r)}{dr^2} + \left[\frac{2\mu}{\hbar^2} (E - V(r)) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \hbar^2 \right] u(r) = 0; \quad (\ell \text{ entier} \geq 0)$$



Page de titre

Sommaire



Page 613 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

On rappelle qu'en coordonnées sphériques :

$$\Delta = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \left[\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]$$

$$\vec{L}^2 = -\frac{\hbar^2}{\sin^2 \theta} \left[\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]$$

II - Vibration et rotation d'une molécule diatomique

1 - On admet que l'énergie potentielle $V(r)$ a la forme suivante :

$$V(r) = -2V_0 \left(\frac{r_0}{r} - \frac{1}{2} \frac{r_0^2}{r^2} \right)$$

a - Quelle est la signification physique de r_0 et de V_0 .

b - En introduisant le paramètre $\rho = \frac{r}{r_0}$ donner l'allure de la courbe représentant V en fonction de ρ .

c - On considère le potentiel effectif $W(r)$ tel que :

$$W(r) = V(r) + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mu r^2}$$

Pour quelle valeur ρ_0 de ρ (ℓ étant quelconque) W est-il minimal, quelle est la valeur de ce minimum ?

On posera :

$$A = \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mu r_0^2}$$



Page de titre

Sommaire



Page 614 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

2 - On désire résoudre de façon exacte l'équation que satisfait $u(\rho)$:

a- Montrer qu'en posant :

$$\alpha = \left(\frac{-2\mu r_0^2 E}{\hbar^2} \right)^{1/2} ; \quad \beta = \frac{4\mu r_0^2 V_0}{\hbar^2}$$

et

$$\frac{2\mu r_0^2 V_0}{\hbar^2} + \ell(\ell + 1) = \nu(\nu + 1); \quad (\nu > 0)$$

L'équation satisfaite par $U(\rho)$ est telle que :

$$\frac{d^2 u}{d\rho^2} + \left[-\alpha^2 + \frac{\beta}{\rho} - \frac{\nu(\nu + 1)}{\rho^2} \right] u = 0$$

b - Montrer qu'en cherchant une solution de la forme :

$$u(\rho) = \rho^{\nu+1} \exp(-\alpha\rho) f(\rho)$$

l'équation différentielle que doit vérifier $f(\rho)$ est :

$$\rho \frac{d^2 f}{d\rho^2} + [2(\nu + 1) - 2\alpha\rho] \frac{df}{d\rho} - [2\alpha(\nu + 1) - \beta] f(\rho) = 0$$



Page de titre

Sommaire



Page 615 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Montrer qu'en opérant le changement de variable $\xi = 2\alpha\rho$ cette équation devient :

$$\xi \frac{d^2 f}{d\xi^2} + [2(\nu + 1) - \xi] \frac{df}{d\xi} - \left[(\nu + 1) - \frac{\beta}{2\alpha} \right] f(\xi) = 0$$

c - Montrer que pour que $f(\xi)$ ait un comportement physique cohérent, il faut qu'elle se limite à un polynôme de degré ν tel que :

$$\nu + 1 - \frac{\beta}{2\alpha} = -\nu$$

3 - Montrer que les énergies des niveaux de la molécule sont données par :

$$E_{\nu,\ell} = -\frac{8\mu r_0^2 V_0^2}{\hbar^2} \left[2\nu + 1 + \sqrt{(2\ell + 1)^2 + \frac{8\mu r_0^2 V_0}{\hbar^2}} \right]^{-2}$$

où ν et ℓ sont des nombres entiers positifs dont on donnera la signification physique.

4 - On suppose d'abord que $\ell = 0$, établir que pour V_0 suffisamment grand et pour les faibles valeurs de ν , l'expression de $E_{\nu,0}$ peut s'écrire en première approximation :

$$E_{\nu,0} \simeq -V_0 + \left(\nu + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_0$$

Donner la valeur de ω_0 et montrer que les premiers états excités correspondent à des vibrations harmoniques de faibles amplitudes autour de la position d'équilibre $r = r_0$.



Page de titre

Sommaire



Page 616 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

5 - Dans le cas général où ℓ est non nul mais pas trop grand, montrer qu'une meilleure approximation de $E_{v,\ell}$ est telle que :

$$E_{v,\ell} \simeq -V_0 + (v + \frac{1}{2})\hbar\omega_0 + \frac{(\ell + \frac{1}{2})^2\hbar^2}{2\mu r_0^2} - 3\frac{(v + \frac{1}{2})^2\hbar^2}{2\mu r_0^2}$$

Montrer que cette expression est relative à des rotations et à des vibrations anharmoniques de faibles amplitudes.

III - Application à la molécule HB_r :

En utilisant la formule trouvée dans II.5 pour $E_{v,\ell}$ calculer en électronvolts, les niveaux d'énergie de la molécule HB_r correspondant à :

$$v = 0 \quad \ell = 0 \quad \text{et} \quad \ell = 1$$

$$v = 1 \quad \ell = 0 \quad \text{et} \quad \ell = 1$$

Commenter les résultats obtenus.

On donne :

$$\begin{aligned} M_H &= 1.66 \cdot 10^{-27} \text{ Kg} & M_{B_r} &= 1.33 \cdot 10^{-25} \text{ Kg} & r_0 &= 1.41 \text{ \AA} \\ V_0 &= 4.06 \cdot 10^{-19} \text{ J} & e &= 1.602 \cdot 10^{-19} \text{ C} & h &= 6.6210 \cdot 10^{-34} \text{ J.S} \end{aligned}$$

EP 8.5 Atome d'hydrogène



Page de titre

Sommaire



Page 617 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

L'atome d'hydrogène est constitué d'un proton et d'un électron interagissant par un potentiel central d'origine électrostatique tel que

$$V(r) = -\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} = -\frac{e^2}{r}$$

où r désigne la distance entre les deux particules et $e^2 = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0}$, q étant la charge de l'électron.

On désignera par m_p et m_e les masses respectives du proton et de l'électron et par μ la masse réduite du système qu'ils forment.

On montre que dans le système de centre de masse, l'hamiltonien du système est :

$$H_0 = \frac{p^2}{2\mu} - \frac{e^2}{r}$$

où $\vec{p}$ est la quantité de mouvement de la particule de masse μ .

On rappelle que l'opérateur laplacien en coordonnées sphériques (r, θ, φ) est donné par :

$$\Delta = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{\vec{L}^2}{\hbar^2 r^2}$$

où $\vec{L}^2$ est le carré du moment cinétique orbital de l'atome d'hydrogène qui s'exprime en fonction de θ et φ par :

$$\vec{L}^2 = -\frac{\hbar^2}{\sin^2 \theta} \left[\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]$$



Page de titre

Sommaire



Page 618 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

1 - Ecrire l'équation aux valeurs propres et montrer que les fonctions d'onde de H_0 sont de la forme :

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = R_{k\ell}(r) Y_{\ell}^m(\theta, \varphi)$$

où $R_{k\ell}(r)$ est la dépendance radiale et $Y_{\ell}^m(\theta, \varphi)$ les harmoniques sphériques.

2 - En posant $R_{k\ell}(r) = \frac{U_{k\ell}(r)}{r}$, écrire l'équation vérifiée par les fonctions $U_{k\ell}(r)$ et donner les conditions qu'elles doivent satisfaire.

3 - En effectuant le changement de variable suivant : $r = a_0 \rho$ avec $a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}$, montrer que l'équation vérifiée par les fonctions $U_{k\ell}(\rho)$ peut s'écrire :

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} + \frac{2}{\rho} + W_{k\ell} \right] U_{k\ell}(\rho) = 0 \quad (1)$$

où

$$W_{k\ell} = \frac{2\mu a_0^2}{\hbar^2} E_{k\ell} = \frac{E_{k\ell}}{E_1}$$

4- On peut montrer que $W_{k\ell}$ est négatif de sorte que l'on peut poser :

$$W_{k\ell} = -\varepsilon_{k\ell}^2$$



Page de titre

Sommaire



Page 619 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Les solutions de l'équation (1) sont de la forme :

$$U_{k\ell}(\rho) = \rho^{\ell+1} f_{k\ell}(\rho) \exp(-(\varepsilon_{k\ell}\rho))$$

où $f_{k\ell}(\rho)$ est une fonction suffisamment régulière.

a - En considérant le développement de $f_{k\ell}(\rho)$ en puissance de ρ :

$$f_{k\ell}(\rho) = \sum_{q=0}^{\infty} c_q \rho^q$$

Montrer que les coefficients c_q et c_{q-1} satisfont à la relation :

$$q(q + 2\ell + 1)c_q = 2[(q + 1)\varepsilon_{k\ell} - 1]c_{q-1}$$

b - Montrer qu'il existe un ordre $q = K$ à partir duquel les c_K sont nuls ($c_K = c_{K+1} = c_{K+2} = \dots = 0$).

c - Montrer que les énergies propres de H_0 sont données par : $E_n = -\frac{E_1}{n^2}$ avec $n = K + \ell$, préciser les valeurs de n et la dégénérescence des niveaux d'énergie.

5 - On se place dans le cas où $n = 2$.

a - Préciser les valeurs des nombres quantiques ℓ et m .

b - Donner l'énergie propre de H_0 et les états propres $|n, \ell, m\rangle$ correspondants. Préciser le degré de dégénérescence de ce niveau d'énergie.



Page de titre

Sommaire



Page 620 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

c - Ecrire dans la base $\{|n, \ell, m\rangle\}$, les matrices représentant H_0 , $\vec{L}^2$ et L_z .

6 - On plonge l'atome d'hydrogène dans un champ électrique $\vec{E}$ uniforme et parallèle à $\vec{Oz}$ (effet Stark). Son hamiltonien devient :

$$H = H_0 + W$$

avec

$$W = -eEz \quad \text{et} \quad E = \|\vec{E}\|$$

Dans le cas où $n = 2$, W est alors représenté dans la base standard $\{|n, \ell, m\rangle\}$ par la matrice dont les seuls éléments non nuls sont :

$$\langle 210|W|200\rangle = \langle 200|W|210\rangle = \beta$$

β est un réel positif.

On prendra les vecteurs de base dans l'ordre suivant :

$$\{|200\rangle, |211\rangle, |210\rangle, |21-1\rangle\}$$

a - Ecrire la matrice représentant H dans cette base.

b - Calculer les énergies propres et les états propres de H . Préciser leur degré de dégénérescence.

EP 8.6 Evolution des composantes de $\vec{L}$ dans l'atome d'hydrogène



Page de titre

Sommaire



Page 621 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

On considère un atome d'hydrogène dans les états $2p$ et on construit la base propre commune à H , $\vec{L}^2$ et L_Z .

- 1 - Donner les valeurs des nombres quantiques n, ℓ, m pour ces états.
- 2 - On note par $|\Psi_+\rangle$, $|\Psi_0\rangle$, $|\Psi_-\rangle$ les états de base correspondant à $m = 1, 0, -1$.

On plonge l'atome d'hydrogène dans un champ magnétique extérieur $\vec{B}$ parallèle à $\vec{Oz}$ et on suppose que l'énergie d'interaction est :

$$W = -\alpha \vec{B} \cdot \vec{L}$$

Calculer les niveaux d'énergie E du système (on posera $\alpha |\vec{B}| = \omega$).

- 3 - On considère l'état $|\Psi_1\rangle = \frac{1}{2} |\Psi_+\rangle + \sqrt{2} |\Psi_0\rangle + |\Psi_-\rangle$.

Calculer $\langle E \rangle$ et $\Delta E^2 = \langle (E - \langle E \rangle)^2 \rangle$ dans l'état $|\Psi_1\rangle$.

- 4 - En supposant qu'à l'instant $t = 0$ le système est dans l'état $|\Psi_1\rangle$ calculer l'état $|\Psi(t)\rangle$ du système à l'instant t . Montrer que dans cet état $\langle L_Z \rangle$ ne dépend pas du temps et donner sa valeur.

- 5 - Ecrire les matrices représentant L_X et L_Y dans la base $\{|\Psi_\pm\rangle, |\Psi_0\rangle\}$.

Calculer les valeurs moyennes $\langle L_X \rangle$ et $\langle L_Y \rangle$ dans l'état $|\Psi(t)\rangle$, interpréter le résultat.

- 6 - Quels sont les valeurs propres de L_X et L_Y ?

EP 8.7 Potentiel coulombien perturbé



Page de titre

Sommaire



Page 622 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

On considère une particule de masse m en mouvement dans le potentiel central $V(r)$ tel que :

$$V(r) = \frac{A}{r^2} - \frac{B}{r}$$

où A et B sont des constantes positives.

1 - Ecrire l'équation aux valeurs propres décrivant l'état quantique de la particule et montrer que les fonctions propres sont de la forme :

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = R_{n\ell}(r)Y_{\ell}^m(\theta, \varphi)$$

2 - Montrer que l'équation radiale peut s'écrire sous la forme :

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E_n - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - \frac{A}{r^2} + \frac{B}{r} \right] R = 0$$

où ℓ le nombre quantique azimutal et E_n l'énergie propre.

3 - En posant :

$$* S(S+1) = \ell(\ell+1) + \frac{2mA}{\hbar^2} \quad \text{où } S \text{ n'est pas nécessairement entier.}$$

$$* a_1 = \frac{\hbar^2}{Bm}$$

$$* na_1 = \frac{\hbar}{\sqrt{-2mE}}$$



Page de titre

Sommaire



Page 623 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

$$^* \rho = \frac{2r}{na_1}$$

Montrer que l'équation radiale se ramène après ce changement de paramètres

à :

$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{dR}{d\rho} + \left[-\frac{1}{n^2} + \frac{2}{\rho} - \frac{S(S+1)}{\rho^2} \right] R = 0$$

Montrer que comme dans le cas de l'atome d'hydrogène on doit avoir :

$$n - 1 - S = n'$$

où n' est entier positif ou nul.

4 - En déduire alors que les énergies propres de la particule sont données par :

$$E_n = E_{n'\ell} = -\frac{2B^2 m}{\hbar^2} \left[2n' + 1 + \sqrt{(2\ell + 1)^2 + \frac{8mA}{\hbar^2}} \right]$$

5 - Montrer que les fonctions propres sont de la forme :

$$R(\rho) = \exp\left(-\frac{\rho}{a}\right) \rho^S f(\rho)$$

où $f(\rho)$ est un polynôme de degré n' .

EP 8.8 Effet Zeeman Normal



Page de titre

Sommaire



Page 624 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

On se propose de montrer pourquoi dans un champ magnétique une raie spectrale se décompose en plusieurs raies polarisées. Soit un atome de Sodium placé dans un champ magnétique uniforme. On néglige le spin de l'électron et on prend pour potentiel électrostatique de l'atome le potentiel central $V(r)$ tel que :

$$V(r) = \frac{-Ze^2}{r} \left(1 + \frac{a}{r}\right)$$

a est une constante positive

L'hamiltonien total s'écrit alors : $H = H_0 - \vec{\mu} \cdot \vec{B}$ où H_0 est l'hamiltonien de l'atome en l'absence de champ magnétique.

1 - Ecrire l'équation aux valeurs propres de H et montrer que les niveaux d'énergie sont de la forme :

$$E_{n\ell m} = E_{n\ell} - \gamma B m \hbar$$

où les $E_{n\ell}$ sont supposées connus et γ la constante gyromagnétique.

Déterminer la dégénérescence de ces niveaux et la comparer au cas où $B = 0$.

2 - Montrer que les fonctions propres $\Psi(\vec{r})$ de l'hamiltonien de l'atome sont également fonctions propres de l'opérateur $L_z = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}$. En déduire la dépendance

φ de ces fonctions.

3 - On définit l'opérateur dipôle électrique par $\vec{M} = e\vec{R}$

où $\vec{R}$ est l'opérateur position de l'électron.



Page de titre

Sommaire



Page 625 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Calculer les valeurs moyennes $\langle M_x \rangle$, $\langle M_y \rangle$ et $\langle M_z \rangle$ des composantes de ce dipôle dans un état $|\Psi(t)\rangle$ quelconque.

On rappelle que du fait que l'hamiltonien de l'atome est indépendant du temps $|\Psi(t)\rangle$ s'écrit :

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{n\ell m} c_{n\ell m} \exp(iE_{n\ell m}) |n\ell m\rangle$$

4 - Sachant que les harmoniques sphériques $Y_{\ell}^m(\theta, \varphi)$ ont une parité $(-1)^{\ell}$.

Montrer que les trois composantes de l'élément de matrice $\langle \Psi_{n\ell m} | \vec{M} | \Psi_{n'\ell'm'} \rangle$ sont nulles si $\ell = \ell'$.

5 - Trouver les valeurs de $\Delta m = (m - m')$ pour lesquelles une au moins des composantes de $\langle \Psi_{n\ell m} | \vec{M} | \Psi_{n'\ell'm'} \rangle$ est différente de 0.

6 - Sachant que les valeurs moyennes des diverses grandeurs atomiques (dipôle électrique,...) oscillent aux diverses fréquences de Bohr et que seules ces fréquences puissent être rayonnées par l'atome, trouver les transitions dipolaires induites par $\langle M_x \rangle$, $\langle M_y \rangle$ et $\langle M_z \rangle$ à champ nul et en présence du champ $\vec{B}$ et montrer que les raies émises sont décomposées en plusieurs raies polarisées.

EP 8.9 Grandeurs moyennes dans un atome



Page de titre

Sommaire



Page 626 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

On considère l'atome d'hydrogène dans un état propre $|n\ell m\rangle$ d'énergie E_n . La fonction d'onde associée à cet état stationnaire est :

$$\Psi_{n\ell m}(r, \theta, \varphi) = R_{n\ell}(r) Y_{\ell}^m(\theta, \varphi)$$

Soit $\hat{r}$ l'opérateur position de l'électron, on se propose de calculer les valeurs moyennes $\left\langle \frac{1}{\hat{r}} \right\rangle$, $\left\langle \frac{1}{\hat{r}^2} \right\rangle$ et $\left\langle \frac{1}{\hat{r}^3} \right\rangle$ dans les états $1s$, $2s$ et $2p$. Ces valeurs moyennes interviennent dans le calcul de nombreuses expressions utilisées en physique atomique.

Les fonctions radiales $R_{n\ell}(r)$ correspondant aux états $1s$, $2s$ et $2p$ sont :

$$R_{10}(r) = 2(a_0)^{-\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right)$$

$$R_{20}(r) = 2(2a_0)^{-\frac{3}{2}} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) \exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right)$$

$$R_{21}(r) = (2a_0)^{-\frac{3}{2}} (3)^{-\frac{1}{2}} \frac{r}{a_0} \exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right)$$

où a_0 est le rayon de Bohr $\left(a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}\right)$.

1 - Montrer que la valeur moyenne $\langle \hat{r}^q \rangle$ de la puissance $q^{\text{ème}}$ (q entier positif ou négatif) de l'opérateur position, ne dépend pas de m .



Page de titre

Sommaire



Page 627 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

2 - Le calcul des $\langle \hat{r}^q \rangle$ fait apparaître des intégrales de la forme :

$$I(k, p) = \int_0^\infty r^k \exp\left(-\frac{\rho r}{a_0}\right) dr$$

où p et k sont des entiers et $k \geq 0$.

a - Montrer qu'on a la relation de récurrence :

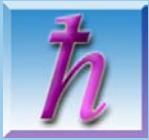
$$I(k, p) = \frac{k a_0}{p} I(k-1, p)$$

b - En déduire que :

$$I(k, p) = k! \left(\frac{a_0}{p}\right)^{k+1}$$

3 - Montrer alors que les valeurs moyennes cherchées sont :

$$\left\{ \begin{array}{l} \left\langle \frac{1}{\hat{r}} \right\rangle_{1s} = \frac{1}{a_0} \\ \left\langle \frac{1}{\hat{r}} \right\rangle_{2s} = \frac{1}{4a_0} \\ \left\langle \frac{1}{\hat{r}} \right\rangle_{2p} = \frac{1}{4a_0} \end{array} \right. \quad \left\{ \begin{array}{l} \left\langle \frac{1}{\hat{r}^2} \right\rangle_{1s} = \frac{2}{a_0^2} \\ \left\langle \frac{1}{\hat{r}^2} \right\rangle_{2s} = \frac{1}{4a_0^2} \\ \left\langle \frac{1}{\hat{r}^2} \right\rangle_{2p} = \frac{1}{12a_0^2} \end{array} \right. \quad \left\{ \left\langle \frac{1}{\hat{r}^3} \right\rangle_{2p} = \frac{1}{24a_0^3} \right.$$



Page de titre

Sommaire



Page 628 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

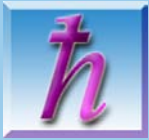
Vérifier que pour un état $|n\ell m\rangle$ on a en général :

$$\left\langle \frac{1}{\hat{r}} \right\rangle_{n\ell m} = \frac{1}{n^2} \frac{1}{a_0}$$

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

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

Expliquer pourquoi la valeur moyenne de $\frac{1}{\hat{r}^3}$ n'a pas de sens pour les états $1s$ et $2s$.



Page de titre

Sommaire



Page 629 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Chapitre 9

Spin des particules



Page de titre

Sommaire



Page 630 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Les observables étudiées jusqu'à présent ont toutes un équivalent classique et c'est d'ailleurs à partir de la définition des grandeurs classiques qui leur sont associées que nous avons trouvé leur forme. Comme ces observables s'expriment en fonction des opérateurs position et impulsion $\vec{R}$ et $\vec{P}$, elles correspondent nécessairement à des degrés de liberté externes.

Cette restriction quantique pour les grandeurs classiques a accumulé beaucoup de succès et semblait répondre à toutes les exigences de la physique, malheureusement un grand nombre de faits expérimentaux (expérience de Stern et Gerlach, effet Zeeman anormal, clivages des raies spectrales,...) n'ont pu être interprétés dans le cadre de ce formalisme et il a fallu introduire une grandeur correspondant à un degré de liberté interne et qui n'a pas d'équivalent classique : le spin

On peut comprendre l'origine de ce degré de liberté dans le cadre d'une théorie quantique relativiste mais, à ce niveau nous postulerons son existence en faisant remarquer quand même que le mot spin, venant de l'anglais "to spin" qui signifie tourner autour de soi-même, introduit un degré de rotation de la particule ponctuelle autour d'elle même qui vient s'ajouter aux trois degrés de liberté de translation qu'on a considéré jusqu'à présent.

C'est à partir de nombreux résultats expérimentaux incompris, que Goudsmit et Uhlenbeck ont, en 1925, fait l'hypothèse de l'existence d'un degré de liberté interne pour l'électron, qui est son moment cinétique propre ou moment cinétique intrinsèque caractérisé par un nombre quantique $s = \frac{1}{2}$ et appelé

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 631 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

spin.

Ce degré de liberté interne est d'une grande importance au niveau quantique et toutes les particules existant dans la nature ont un spin, au même titre qu'elles ont une masse ou une charge. Ce spin détermine en grande partie leur comportement.

Nous allons dans ce chapitre décrire et commenter l'expérience de Stern et Gerlach et tenter de nous familiariser avec la technique et la manipulation du spin $\frac{1}{2}$. En introduisant l'espace des états de spin et en étudiant le comportement d'un système de deux spins $\frac{1}{2}$. On introduira également les spineurs qui décrivent aussi bien l'état de spin que l'état orbital d'une particule et on présentera en guise d'application le phénomène de résonance magnétique.



Page de titre

Sommaire



Page 632 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

1. Expérience de Stern et Gerlach

1.1. Dispositif expérimental

Cette expérience réalisée en 1922 a mis en évidence pour la première fois l'existence d'un moment cinétique intrinsèque ou spin et consiste à étudier la déviation d'un jet d'atomes neutres paramagnétiques dans un champ magnétique fortement inhomogène.

Des atomes d'argent s'échappent par un trou percé dans une enceinte E chauffée à haute température. Ils se propagent ensuite en ligne droite dans le vide où baigne tout l'appareillage (fig. 9.1).

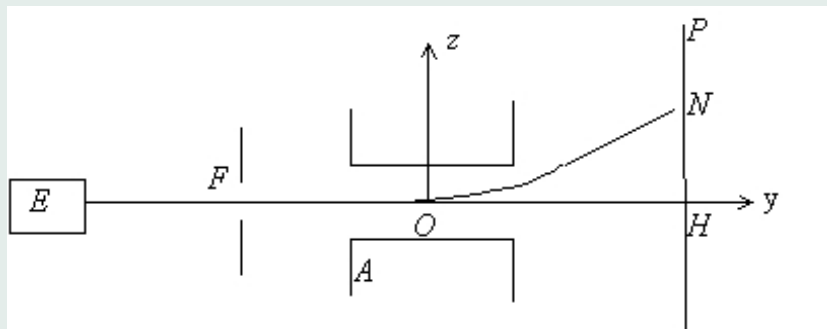


Figure 9.1 : Schéma de l'expérience de Stern et Gerlach



Page de titre

Sommaire



Page 633 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Une fente collimatrice F sélectionne les atomes dont la vitesse est parallèle à $\vec{Oy}$. Le jet obtenu traverse l'entrefer d'un électroaimant A au centre duquel règne un champ magnétique $\vec{B}(z)$ parallèle à $\vec{Oz}$, fortement inhomogène et d'intensité de l'ordre de 1 Tesla . Chaque atome subit une certaine déviation et va se condenser en un point N sur une plaque P .

1.2. Calcul classique de la déviation

Les atomes d'argent étant neutres ne subissent pas la force de Laplace. Par contre chaque atome possède un moment magnétique permanent orbital $\vec{M}$ qui est dû au déplacement des électrons autour du noyau, et est de ce fait soumis à la force $\vec{F}$ dérivant de l'énergie potentielle magnétique W :

$$W = -\vec{M} \cdot \vec{B} \quad (9.1)$$

Cette force est donnée par :

$$\vec{F} = -\vec{\nabla} W = \vec{\nabla} (\mathcal{M}_x B_x + \mathcal{M}_y B_y + \mathcal{M}_z B_z) \quad (9.2)$$

Comme $\vec{B}$ est parallèle à $\vec{Oz}$, on a :

$$\vec{F} = \vec{\nabla} (\mathcal{M}_z B_z) \quad (9.3)$$



Page de titre

Sommaire



Page 634 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Le moment total de cette force par rapport à la position de l'atome est :

$$\vec{\Gamma} = \vec{\mathcal{M}} \wedge \vec{B} \quad (9.4)$$

Si on considère que l'atome a un moment cinétique $\vec{S}$, le théorème du moment cinétique s'écrit :

$$\frac{d\vec{S}}{dt} = \vec{\Gamma} = \vec{\mathcal{M}} \wedge \vec{B} \quad (9.5)$$

$\vec{S}$ est un moment cinétique électronique qui peut être dû à la rotation des électrons autour d'eux même. On peut montrer et on l'admettra que dans un niveau atomique donné $\vec{\mathcal{M}}$ et $\vec{S}$ sont parallèles :

$$\vec{\mathcal{M}} = \gamma \vec{S} \quad (9.6)$$

la constante de proportionnalité γ est appelée rapport gyromagnétique du niveau considéré.

Le théorème du moment cinétique s'écrit alors :

$$\frac{d\vec{S}}{dt} = \gamma \vec{S} \wedge \vec{B} \quad (9.7)$$



Page de titre

Sommaire



Page 635 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

ou encore :

$$\begin{cases} \frac{d\vec{S}}{dt} = -\gamma \vec{B} \wedge \vec{S} \\ \frac{d\vec{M}}{dt} = \gamma \vec{B} \wedge \vec{M} \end{cases} \quad (9.8)$$

Ces relations sont équivalentes à celles donnant le vecteur vitesse d'un point matériel P en rotation autour d'un axe $\vec{Oz}$ avec la vitesse angulaire $\vec{\omega} = \omega \vec{k}$

$$\left(\frac{d\vec{OP}}{dt} = \vec{\omega} \wedge \vec{OP} \right)$$

Par analogie, le moment cinétique $\vec{S}$ (ou le moment magnétique $\vec{M}$) tourne alors autour du champ magnétique $\vec{B}$ avec une vitesse angulaire égale à $\omega = \gamma |\vec{B}|$

L'atome se comporte donc comme un gyroscope et l'effet de $\vec{I}$ est de faire précesser $\vec{S}$ (ou $\vec{M}$) autour de $\vec{B}$ (fig. 9.2) en laissant constant l'angle $\theta = (\vec{M}, \vec{B})$.



Page de titre

Sommaire



Page 636 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

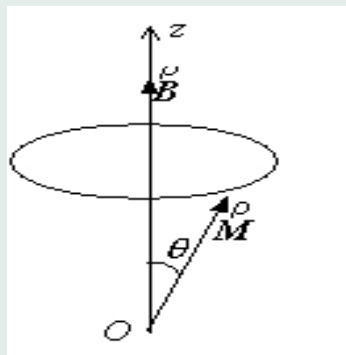


Figure 9.2 : Précession du moment magnétique autour du champ $\vec{B}$

A cause de la grande valeur que peut prendre ω les composantes M_x et M_y n'interviennent que par leur valeur moyenne dans le temps qui est nulle, quant à la composante M_z , elle va rester constante.

La force $\vec{F}$ qui s'exerce sur l'atome est donc :

$$\vec{F} = \mathcal{M}_z \vec{\nabla} B_z \quad (9.9)$$

Comme $\frac{\partial B_z}{\partial x} = \frac{\partial B_z}{\partial y} = 0$, la force subie par l'atome est donc parallèle à $\vec{Oz}$ et proportionnelle à M :

$$\vec{F} = \mathcal{M}_z \left(\frac{\partial B_z}{\partial z} \right) \vec{k}$$



Page de titre

Sommaire



Page 637 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Cette force étant responsable de la déviation HN de l'atome, HN est alors proportionnelle à M_z ou S_z . Mesurer HN revient donc à mesurer M_z ou S_z .

A l'entrée de l'entrefer, les moments des atomes sont répartis de façon isotrope : toutes les valeurs de M_z comprise entre $+M$ et $-M$ sont réalisées dans le jet et on s'attend à ce que le jet vienne former sur P une seule tache, large, symétrique autour de H . Les limites N_1 et N_2 de cette tache correspondent aux atomes pour lesquels $\vec{M}$ est parallèle ou antiparallèle à $\vec{Oz}$ (fig. 9.3).

1.3. Résultats de l'expérience et conclusion

Stern et Gerlach n'observent pas une tache unique centrée en H mais deux taches centrées aux points N_1 et N_2 symétriques par rapport à H (fig. 9.3), la largeur de ces deux taches correspondant à l'effet de la dispersion des vitesses et de la largeur finie de la fente.



Page de titre

Sommaire



Page 638 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

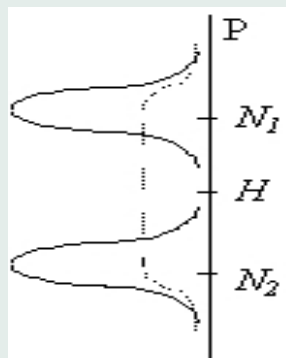


Figure 9.3 : Taches observées dans l'expérience de Stern et Gerlach

L'expérience infirme donc les prévisions de la physique classique et implique l'idée de quantification. Comme la déviation constitue une mesure de M_z ou S_z on est donc amené à quantifier $\vec{M}$ ou $\vec{S}$ pour expliquer les deux taches observées.

$\vec{S}$ étant un moment cinétique, l'observable $\vec{S}$ qui lui correspond doit être telle que s est demi-entier ou plus précisément égal à $\frac{1}{2}$ pourqu'on puisse avoir deux valeurs de m ($m = +\frac{1}{2}$ et $m = -\frac{1}{2}$) et expliquer ainsi les deux tâches correspondants aux deux valeurs de S_z .



Page de titre

Sommaire



Page 639 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Le moment cinétique $\vec{S}$ n'est donc pas un moment cinétique orbital car pour ce dernier les valeurs de s seraient entières. $\vec{S}$ n'a alors pas d'équivalent classique et on l'appelle moment cinétique intrinsèque ou de spin et on conviendra de l'appeler spin $\frac{1}{2}$. Ce spin n'est pas propre à l'électron uniquement mais caractérise toutes les particules (protons, neutrons,...) pour les quelles le moment cinétique $\vec{J}$ correspond à des valeurs propres $j = \frac{1}{2}$ et $m = \pm \frac{1}{2}$.

Bien qu'historiquement on réserve le mot "spin" au seul cas $j = \frac{1}{2}$. Actuellement on désigne par ce mot le moment cinétique propre d'une particule par opposition à son moment cinétique orbital ; le spin peut alors prendre toute la série des valeurs vues au chapitre 7 :

Par exemple $j = 0$ pour le méson π , $j = 1$ pour le photon ou le deutéron, $j = \frac{3}{2}$ pour certaines particules élémentaires,...



Page de titre

Sommaire



Page 640 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

2. Espace des états de spin $\frac{1}{2}$

La propriété fondamentale d'une particule de spin $\frac{1}{2}$ est que lors de la mesure de la projection de son moment cinétique intrinsèque (ou spin) suivant un axe quelconque, les seuls résultats que l'on puisse obtenir sont les deux valeurs $+\frac{\hbar}{2}$ et $-\frac{\hbar}{2}$. Il en résulte que tout état de spin est une superposition linéaire de deux états de base dont le choix est arbitraire et que par conséquent le degré de liberté de spin se décrit dans un espace de Hilbert à deux dimensions qu'on notera ξ_S .

A la grandeur classique $\vec{S}$ de composantes S_x, S_y, S_z est associé donc l'opérateur de spin $\vec{S}$ de composantes S_x, S_y, S_z ou plus généralement S_u où $\vec{u}$ est un vecteur unitaire quelconque.

2.1. Espace des états de spin de S_z

A S_z nous associons S_z qui a, d'après les résultats de l'expérience de Stern et Gerlach deux valeurs propres opposées $+\frac{\hbar}{2}$ et $-\frac{\hbar}{2}$ non dégénérées. A ces valeurs propres on associe deux vecteurs propres qu'on note $|\pm\frac{1}{2}\rangle$, ou



Page de titre

Sommaire



Page 641 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

$|\uparrow\downarrow\rangle$ ou plus simplement $|\pm\rangle$ de sorte qu'on a :

$$\begin{cases} S_z |+\rangle = +\frac{\hbar}{2} |+\rangle \\ S_z |-\rangle = -\frac{\hbar}{2} |-\rangle \end{cases} \quad (9.10)$$

L'observable S_z forme donc à elle seule un E.C.O.C. et les deux vecteurs propres $|\pm\rangle$ constituent une base unique de l'espace des états de spin ξ_S associé à S_z . Cette base est orthonormée complète et discrète c'est à dire qu'on a :

$$\begin{cases} \langle + | + \rangle = \langle - | - \rangle = 1 \\ \langle + | - \rangle = \langle - | + \rangle = 0 \\ |+\rangle \langle +| + |-\rangle \langle -| = 1 \end{cases} \quad (9.11)$$

Le vecteur normé le plus général de ξ_S est une superposition linéaire de $|+\rangle$ et $|-\rangle$ et s'écrit :

$$|\Psi\rangle = \alpha_+ |+\rangle + \alpha_- |-\rangle \quad (9.12)$$

où α_+ et α_- sont deux nombres complexes tels que :

$$|\alpha_+|^2 + |\alpha_-|^2 = 1 \quad (9.13)$$



Page de titre

Sommaire



Page 642 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Dans la base $\{|\pm\rangle\}$, la matrice représentant S_z est diagonale et s'écrit :

$$S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (9.14)$$

2.2. Autres observables de spin :

2.2.1. Observables S_x et S_y

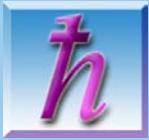
Aux composantes S_x et S_y de $\vec{S}$ sont associées les observables S_x et S_y . L'action de ces observables sur les vecteurs de base $|\pm\rangle$ s'obtient en utilisant les relations :

$$S_x = \frac{1}{2} (S_+ + S_-) \quad (9.15)$$

$$S_y = \frac{1}{2i} (S_+ - S_-) \quad (9.16)$$

avec $S_{\pm} |s, m\rangle = \hbar \sqrt{s(s+1) - m(m \pm 1)} |s, m \pm 1\rangle$, soit :

$$\begin{aligned} S_+ \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle &= S_+ |+\rangle = 0 \\ S_- \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle &= S_- |+\rangle = \hbar |-\rangle \end{aligned} \quad (9.17)$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)


Page 643 de 978

[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

et

$$S_+ \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = S_+ |-\rangle = \hbar |+\rangle \quad (9.18)$$

$$S_- \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = S_- |-\rangle = 0$$

ce qui donne :

$$\begin{aligned} S_x |+\rangle &= \frac{\hbar}{2} |-\rangle \\ S_x |-\rangle &= \frac{\hbar}{2} |+\rangle \end{aligned} \quad (9.19)$$

et

$$\begin{aligned} S_y |+\rangle &= \frac{i\hbar}{2} |-\rangle \\ S_y |-\rangle &= -\frac{i\hbar}{2} |+\rangle \end{aligned} \quad (9.20)$$

de sorte que la représentation matricielle des observables S_x et S_y dans la base $\{| \pm \rangle\}$ diagonalisant $\vec{S}^2$ et S_z est décrite par :

$$\mathbf{S}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (9.21)$$



Page de titre

Sommaire



Page 644 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

et

$$S_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (9.22)$$

2.2.2. Observable S_u

La composante S_u de $\vec{S}$ suivant un vecteur unitaire $\vec{u}$ caractérisé par les angles polaires θ et φ (fig. 9.4) s'écrit :

$$S_u = \vec{S} \cdot \vec{u} = S_x \sin \theta \cos \varphi + S_y \sin \theta \sin \varphi + S_z \cos \theta$$

L'observable S_u qui lui est associée est :

$$S_u = S_x \sin \theta \cos \varphi + S_y \sin \theta \sin \varphi + S_z \cos \theta$$

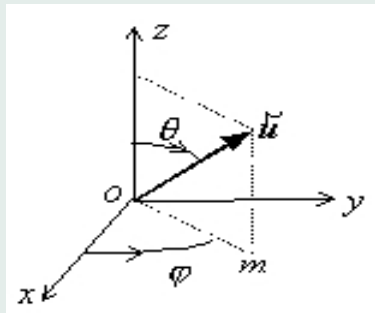


Figure 9.4 : Représentation du vecteur unitaire $\vec{u}$

En utilisant (9.14), (9.21) et (9.22) on trouve pour la matrice représentant S_u dans la base $\{| \pm \rangle\}$:

$$S_u = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\varphi} \\ \sin \theta e^{i\varphi} & -\cos \theta \end{pmatrix} \quad (9.23)$$

Le calcul des valeurs propres de S_x , S_y et S_u donne $+\frac{\hbar}{2}$ et $-\frac{\hbar}{2}$ c'est à dire les mêmes valeurs propres de S_z . Ce résultat est satisfaisant car on peut tourner en bloc l'appareillage de Stern et Gerlach de sorte que le champ magnétique $\vec{B}$ soit parallèle à $\vec{Ox}$, $\vec{Oy}$ ou $\vec{u}$. Comme toutes les directions de l'espace sont équivalentes, les phénomènes observés sur la plaque doivent rester inchangés dans de telles rotations : La mesure de S_x , S_y ou S_u ne peut donc donner que l'un des deux résultats $+\frac{\hbar}{2}$ et $-\frac{\hbar}{2}$.

Quand au calcul des vecteurs propres de ces trois observables il ne présente pas de difficulté majeure et donne respectivement pour S_x , S_y et S_u :

$$| \pm \rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}} [| + \rangle \pm | - \rangle] \quad (9.24)$$

$$| \pm \rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}} [| + \rangle \pm i | - \rangle] \quad (9.25)$$

Page de titre

Sommaire

◀

▶

◀

▶

Page 645 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter



Page de titre

Sommaire

◀

▶

◀

▶

Page 646 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

et

$$\begin{cases} |+\rangle_u = \cos \frac{\theta}{2} \exp(-\frac{i\varphi}{2}) |+\rangle + \sin \frac{\theta}{2} \exp(\frac{i\varphi}{2}) |-\rangle \\ |-\rangle_u = -\sin \frac{\theta}{2} \exp(-\frac{i\varphi}{2}) |+\rangle + \cos \frac{\theta}{2} \exp(\frac{i\varphi}{2}) |-\rangle \end{cases} \quad (9.26)$$

2.3. Matrices de Pauli

2.3.1. Définition

Il est commode d'introduire l'opérateur sans dimension $\vec{\sigma}$ tel que l'observable $\vec{S}$ s'écrit :

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma} \quad (9.27)$$

Les matrices $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ représentant les trois composantes de $\vec{\sigma}$ dans la base $\{| \pm \rangle\}$ sont appelées "matrices de Pauli".

En se référant à l'expression (9.14), (9.21) et (9.22) on voit que ces matrices s'écrivent :

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$



Page de titre

Sommaire



Page 647 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Ces matrices sont hermitiques et ont toutes la même équation caractéristique : $\lambda^2 - 1 = 0$ de sorte que leurs valeurs propres sont $\lambda = \pm 1$

Leurs vecteurs propres sont bien sûr les mêmes que ceux de S_x , S_y et S_z c'est à dire que l'on a :

$$\sigma_x |\pm\rangle_x = \pm |\pm\rangle_x \quad (9.28)$$

$$\sigma_y |\pm\rangle_y = \pm |\pm\rangle_y \quad (9.29)$$

$$\sigma_z |\pm\rangle = \pm |\pm\rangle \quad (9.30)$$

2.3.2. Propriétés

A partir de leur définition, on remarque que les matrices de Pauli σ_i (avec $i = x, y, z$) vérifient les quatre propriétés suivantes :

$$\det(\sigma_i) = -1 \quad (9.31)$$

$$\text{Tr}(\sigma_i) = 0 \quad (9.32)$$

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = I \quad (9.33)$$

et

$$\begin{cases} \sigma_x \sigma_y = -\sigma_y \sigma_x = i\sigma_z \\ \sigma_y \sigma_z = -\sigma_z \sigma_y = i\sigma_x \\ \sigma_z \sigma_x = -\sigma_x \sigma_z = i\sigma_y \end{cases} \quad (9.34)$$



Page de titre

Sommaire



Page 648 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

I étant la matrice unité 2×2

(i) Les relations (9.34) montrent qu'on a :

$$\begin{aligned} [\sigma_x, \sigma_y] &= 2i\sigma_z \\ [\sigma_y, \sigma_z] &= 2i\sigma_x \\ [\sigma_z, \sigma_x] &= 2i\sigma_y \end{aligned} \quad (9.35)$$

Ce qui est conforme aux relations caractéristiques du moment cinétique de spin :

$$\begin{aligned} [S_x, S_y] &= i\hbar S_z \\ [S_y, S_z] &= i\hbar S_x \\ [S_z, S_x] &= i\hbar S_y \end{aligned} \quad (9.36)$$

(ii)- Les relations (9.34) montrent qu'on a également :

$$\begin{aligned} \sigma_x \sigma_y + \sigma_y \sigma_x &= \{\sigma_x, \sigma_y\} = 0 \\ \sigma_y \sigma_z + \sigma_z \sigma_y &= \{\sigma_y, \sigma_z\} = 0 \\ \sigma_z \sigma_x + \sigma_x \sigma_z &= \{\sigma_z, \sigma_x\} = 0 \end{aligned} \quad (9.37)$$

On dit que les matrices σ_i anticommulent entre elles, c'est à dire que leur anticommutateur $\{\sigma_i, \sigma_j\}$ est nul. Compte tenu de (9.33) on a également :

$$\sigma_x \sigma_y \sigma_z = iI$$

(iii)- Les relations (9.33) et (9.34) peuvent être condensés sous la forme :

$$\sigma_j \sigma_k = i \sum_e \varepsilon_{jke} \sigma_e + \delta_{jk} I \quad (9.38)$$



Page de titre

Sommaire



Page 649 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

où δ_{jk} est le symbole de Kronecker et ε_{jkl} est tel que :

$$\varepsilon_{jkl} = \begin{cases} 0 & \text{si } j, k, \ell \text{ ne sont pas tous différents} \\ 1 & \text{si } j, k, \ell \text{ est une permutation paire de } x, y, z \\ -1 & \text{si } j, k, \ell \text{ est une permutation impaire de } x, y, z \end{cases}$$

2.4. Valeurs moyennes des observables de spin dans l'état le plus général

Supposons que le système est dans son état le plus général $|\Psi\rangle$, les valeurs moyennes des observables S_x , S_y et S_z dans cet état sont (Chapitre 5 §) : $\langle\Psi|S_x|\Psi\rangle$, $\langle\Psi|S_y|\Psi\rangle$, $\langle\Psi|S_z|\Psi\rangle$.

2.4.1. Etat le plus général

La relation 12 indique que l'état le plus général de l'espace des états de spin est de la forme :

$$|\Psi\rangle = \alpha_+ |+\rangle + \alpha_- |-\rangle \quad \text{avec} \quad |\alpha_+|^2 + |\alpha_-|^2 = 1$$

On va montrer que cet état est proportionnel à l'état $|+\rangle_u$ décrit précédemment, où $\vec{u}$ est un vecteur unitaire repéré par les angles polaires θ et φ : compte tenu de la condition de normalisation de $|\Psi\rangle$, il existe forcément un



Page de titre

Sommaire



Page 650 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

angle θ tel que :

$$\begin{cases} |\alpha_+| = \cos \frac{\theta}{2} \\ |\alpha_-| = \sin \frac{\theta}{2} \end{cases} \quad (9.39)$$

Si l'on impose en plus la condition : $0 \leq \theta \leq \pi$, l'équation : $tg \frac{\theta}{2} = \left| \frac{\alpha_-}{\alpha_+} \right|$, détermine θ de façon unique.

Comme les phases de α_+ et α_- n'interviennent que par leur différence on peut poser alors :

$$\varphi = Arg \alpha_- - Arg \alpha_+ \quad (9.40)$$

$$\chi = Arg \alpha_- + Arg \alpha_+ \quad (9.41)$$

on aura alors :

$$Arg \alpha_+ = \frac{1}{2} (\chi - \varphi) \quad (9.42)$$

$$Arg \alpha_- = \frac{1}{2} (\chi + \varphi) \quad (9.43)$$

Il s'en suit alors que l'état le plus général $|\Psi\rangle$ s'écrit :

$$|\Psi\rangle = \exp(i\frac{\chi}{2}) \left[\cos \frac{\theta}{2} \exp(\frac{-i\varphi}{2}) |+\rangle + \sin \frac{\theta}{2} \exp(\frac{i\varphi}{2}) |-\rangle \right] \quad (9.44)$$



Page de titre

Sommaire



Page 651 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Si l'on compare cette expression à la relation (9.26), on remarque que $|\Psi\rangle$ ne diffère du ket $|+\rangle_u$ que par le facteur de phase $\exp(i\frac{\chi}{2})$ qui est sans signification physique. On en conclut alors que l'état le plus général de l'espace des états de spin est un état proportionnel au ket $|+\rangle_u$:

$$|\Psi\rangle \propto |+\rangle_u \quad (9.45)$$

2.4.2. Valeurs moyennes

Les valeurs moyennes de S_x , S_y et S_z se calculent aisément :

$$\langle \Psi | S_x | \Psi \rangle = \frac{\hbar}{2} \langle \Psi | \sigma_x | \Psi \rangle \quad (9.46)$$

$$\langle \Psi | S_y | \Psi \rangle = \frac{\hbar}{2} \langle \Psi | \sigma_y | \Psi \rangle \quad (9.47)$$

$$\langle \Psi | S_z | \Psi \rangle = \frac{\hbar}{2} \langle \Psi | \sigma_z | \Psi \rangle \quad (9.48)$$

soit en effectuant le calcul et en simplifiant la notation :

$$\begin{cases} \langle S_x \rangle = \frac{\hbar}{2} \sin \theta \cos \varphi \\ \langle S_y \rangle = \frac{\hbar}{2} \sin \theta \sin \varphi \\ \langle S_z \rangle = \frac{\hbar}{2} \cos \theta \end{cases} \quad (9.49)$$



Page de titre

Sommaire



Page 652 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

On remarque que ces valeurs moyennes sont égales aux composantes d'un moment cinétique classique de module $\frac{\hbar}{2}$ orienté suivant le vecteur $\vec{u}$. Il ne faut cependant pas perdre de vue qu'une mesure de ces observables ne donnera que l'un des deux résultats $+\frac{\hbar}{2}$ ou $-\frac{\hbar}{2}$.

2.5. Evolution d'un spin $\frac{1}{2}$ dans un champ magnétique uniforme :

2.5.1. Hamiltonien d'interaction

En électromagnétisme classique on montre qu'on associe à une particule de charge q de masse m et de moment angulaire $\vec{\mathcal{L}}$.

Un moment magnétique $\vec{\mathcal{M}}$ valant :

$$\vec{\mathcal{M}} = \frac{q}{2m} \vec{\mathcal{L}} \quad (9.50)$$

On démontre également que l'énergie potentielle associée à ce moment lorsque la charge est placée dans un champ magnétique uniforme $\vec{B}_0$ est :

$$W = -\vec{\mathcal{M}} \cdot \vec{B}_0 \quad (9.51)$$



Page de titre

Sommaire



Page 653 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Si le champ est orienté suivant $\vec{Oz}$ on aura :

$$W = -\mathcal{M}_z B_0 = -\gamma B_0 S_z \quad (9.52)$$

L'hamiltonien H décrivant l'évolution du spin dans le champ $\vec{B}_0$ s'obtient en associant à S_z l'observable S_z , soit :

$$H = -\gamma B_0 S_z = \omega_0 S_z \quad (9.53)$$

on voit que les vecteurs propres de H sont ceux de S_z , c'est à dire $|+\rangle$ et $|-\rangle$ et que ses valeurs propres sont telles que :

$$H |+\rangle = +\frac{\hbar\omega_0}{2} |+\rangle = E_+ |+\rangle \quad (9.54)$$

$$H |-\rangle = -\frac{\hbar\omega_0}{2} |-\rangle = E_- |-\rangle \quad (9.55)$$

Le spectre de H comporte donc deux niveaux d'énergie E_+ et E_- séparés de $\hbar\omega_0$.

Nous avons représenté sur la figure 9.5 la disposition de ces niveaux dans le cas de l'atome d'argent où γ est négatif et donc ω_0 positif.

L'existence de deux niveaux définit alors une "fréquence de Bohr" unique pour l'atome qui est :

$$\nu = \frac{1}{h} (E_+ - E_-) = \frac{\omega_0}{2\pi} \quad (9.56)$$



Page de titre

Sommaire



Page 654 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

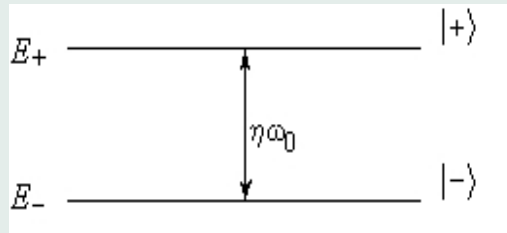


Figure 9.5 : Niveaux d'énergie d'un spin $\frac{1}{2}$ placé dans un champ magnétique B_0 ($\omega_0 > 0$)

2.5.2. Précession de Larmor

Supposons qu'à l'instant initial $t = 0$ le spin est dans l'état $|\Psi(0)\rangle$ décrit par :

$$|\Psi(0)\rangle = \cos \frac{\theta}{2} \exp\left(\frac{-i\varphi}{2}\right) |+\rangle + \sin \frac{\theta}{2} \exp\left(\frac{i\varphi}{2}\right) |-\rangle \quad (9.57)$$

Comme le système est conservatif et que $|\Psi(0)\rangle$ est développé sur les états propres de H , l'évolution dans le temps de $|\Psi(0)\rangle$ est donnée par :

$$|\Psi(t)\rangle = \cos \frac{\theta}{2} e^{\frac{-i\varphi}{2}} e^{\frac{-iE_+}{\hbar}t} |+\rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{\frac{i\varphi}{2}} e^{\frac{-iE_-}{\hbar}t} |-\rangle \quad (9.58)$$



Page de titre

Sommaire



Page 655 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

soit en remplaçant E_+ et E_- par leurs valeurs :

$$|\Psi(t)\rangle = \cos \frac{\theta}{2} e^{-i(\varphi+\omega_0 t)/2} |+\rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{i(\varphi+\omega_0 t)/2} |-\rangle \quad (9.59)$$

la présence du champ $\vec{B}_0$ induit donc un déphasage proportionnel au temps entre les coefficients affectés à $|+\rangle$ et $|-\rangle$. Comme l'état $|\Psi\rangle$ est proportionnel à l'état $|+\rangle_u$ de l'observable S_u , on voit que la direction $\vec{u}(t)$ suivant la quelle la composante du spin vaut $+\frac{\hbar}{2}$ est définie par :

$$\begin{cases} \theta(t) = \theta \\ \varphi(t) = \varphi + \omega_0 t \end{cases} \quad (9.60)$$

L'angle entre $\vec{u}(t)$ et $\vec{Oz}$ reste constant mais $\vec{u}(t)$ tourne autour de $\vec{Oz}$ à la vitesse angulaire ω_0 proportionnelle à B_0 .

Nous retrouvons donc le phénomène décrit au paragraphe 1.2 pour un moment magnétique classique et qui s'appelle . ω_0 est alors appelée pulsation de Larmor.

D'ailleurs un calcul des valeurs moyennes des observables S_x, S_y et S_z


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 656 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

donne :

$$\langle S_x \rangle = \frac{\hbar}{2} \sin \theta \cos(\varphi + \omega_0 t) \quad (9.61)$$

$$\langle S_y \rangle = \frac{\hbar}{2} \sin \theta \sin(\varphi + \omega_0 t) \quad (9.62)$$

$$\langle S_z \rangle = \frac{\hbar}{2} \cos \theta \quad (9.63)$$

Ce qui montre que l'évolution de ces valeurs moyennes est identique à celles des composantes d'un moment cinétique classique de module $\frac{\hbar}{2}$ et tournant autour de $\vec{B}_0$ à la vitesse angulaire ω_0 .



Page de titre

Sommaire



Page 657 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

3. Système de deux spins $\frac{1}{2}$

3.1. Espace des états

On considère deux particules de spins $\frac{1}{2}$ repérées par les indices (1) et (2) et dont les observables de spin sont respectivement $\vec{S}_1$ et $\vec{S}_2$. L'état de spin de la particule (1) seule, est défini par un ket appartenant à un espace à deux dimensions $\xi_S(1)$ et celui de la particule (2) seule est défini par un ket appartenant à un espace $\xi_S(2)$ à deux dimensions :

- Dans $\xi_S(1)$, la base est formée par les états propres de S_{1z} qu'on note : $|1, \pm\frac{1}{2}\rangle$ ou $|1, \uparrow\downarrow\rangle$ ou encore $|1, \pm\rangle$ et le ket le plus général s'écrit :

$$|\varphi(1)\rangle = \alpha_+^1 |1, +\rangle + \alpha_-^1 |1, -\rangle \quad (9.64)$$

- Dans $\xi_S(2)$, la base est formée par les états propres de S_{2z} qu'on note : $|2, \pm\frac{1}{2}\rangle$ ou $|2, \uparrow\downarrow\rangle$ ou encore $|2, \pm\rangle$ et le ket le plus général s'écrit :

$$|\chi(2)\rangle = \alpha_+^2 |2, +\rangle + \alpha_-^2 |2, -\rangle \quad (9.65)$$

où $\alpha_{\pm}^{1,2}$ sont des nombres complexes quelconques.

Lorsqu'on réunit les deux particules en un seul système, l'espace des états ξ_S de ce système n'est autre que le produit tensoriel des deux espaces $\xi_S(1)$



Page de titre

Sommaire



Page 658 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

et $\xi_S(2)$, soit :

$$\xi_S = \xi_S(1) \otimes \xi_S(2) \quad (9.66)$$

On obtient une base de ξ_S en multipliant tensoriellement les deux bases relatives à $\xi_S(1)$ et $\xi_S(2)$, on obtient ainsi la base suivante associée à l'espace à quatre dimensions ξ_S :

$$|1, +\rangle \otimes |2, +\rangle = |++\rangle \quad (9.67)$$

$$|1, +\rangle \otimes |2, -\rangle = |+-\rangle \quad (9.68)$$

$$|1, -\rangle \otimes |2, +\rangle = |-+\rangle \quad (9.69)$$

$$|1, -\rangle \otimes |2, -\rangle = |--\rangle \quad (9.70)$$

Cette base est comme les précédentes, une base orthonormée complète. Par exemple pour l'état de base $|-+\rangle$, la composante suivant $\vec{O}_z$ du spin de la particule (1) est $-\frac{\hbar}{2}$ et celle du spin de la particule (2) est $+\frac{\hbar}{2}$.

3.2. Ensemble complets d'observables qui commutent dans ξ_S

Dans $\xi_S(1)$, S_{1z} constitue à lui seul un E.C.O.C. puisque la donnée de la valeur propre $+\frac{\hbar}{2}$ (ou $-\frac{\hbar}{2}$) spécifie sans ambiguïté le vecteur propre correspondant $|1, +\rangle$ (ou $|1, -\rangle$).



Page de titre

Sommaire



Page 659 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Dans ξ_S , par contre le prolongement $\tilde{S}_{1z}$ de S_{1z} ne constitue plus un E.C.O.C. A la valeur propre $+\frac{\hbar}{2}$ de $\tilde{S}_{1z}$ on peut associer deux vecteurs propres orthogonaux $|++\rangle$ et $|+-\rangle$: les valeurs propres de $\tilde{S}_{1z}$ sont donc doublement dégénérées et il en est de même pour $\tilde{S}_{2z}$. $\tilde{S}_{1z}$ et $\tilde{S}_{2z}$ ne constituent donc pas à eux seuls un E.C.O.C. dans ξ_S .

Par ailleurs $\tilde{S}_{1z}$ et $\tilde{S}_{2z}$ commutent car chacun d'eux n'agit que sur la partie du ket produit qui appartient à son espace ; donc à tout jeu de valeurs propres respectives de $\tilde{S}_{1z}$ et $\tilde{S}_{2z}$ correspond un vecteur produit unique. Ainsi à la valeur propre $+\frac{\hbar}{2}$ de S_{1z} et $-\frac{\hbar}{2}$ de S_{2z} correspond le seul vecteur $|+-\rangle$.

$\{\tilde{S}_{1z}, \tilde{S}_{2z}\}$ constituent donc un E.C.O.C. dans ξ_S , il en est de même pour $\{\tilde{S}_{1x}, \tilde{S}_{2x}\}$, $\{\tilde{S}_{1y}, \tilde{S}_{2y}\}$, $\{\tilde{S}_{1z}, \tilde{S}_{2x}\}$, ...

Les vecteurs propres communs aux deux observables formant ces ensembles s'obtiennent par produit tensoriel de leurs vecteurs propres respectifs dans $\xi_S(1)$ et $\xi_S(2)$.



Page de titre

Sommaire



Page 660 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Par exemple, pour l'ensembles $\{\tilde{S}_{1z}, \tilde{S}_{2x}\}$ ces vecteurs sont :

$$|1, +\rangle \otimes |2, +\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}} [|++\rangle + |--\rangle] \quad (9.71)$$

$$|1, +\rangle \otimes |2, -\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}} [|++\rangle - |+-\rangle] \quad (9.72)$$

$$|1, -\rangle \otimes |2, +\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}} [| -+\rangle + |--\rangle] \quad (9.73)$$

$$|1, -\rangle \otimes |2, -\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}} [| -+\rangle - |--\rangle] \quad (9.74)$$

3.3. Etat le plus général d'un système de deux spins

Nous avons vu dans le paragraphe 3.1 que les vecteurs les plus généraux de $\xi_S(1)$ et $\xi_S(2)$ sont :

$$|\varphi(1)\rangle = \alpha_+^1 |+\rangle + \alpha_-^1 |-\rangle \quad (9.75)$$

$$|\chi(2)\rangle = \alpha_+^2 |+\rangle + \alpha_-^2 |-\rangle \quad (9.76)$$

le vecteur le plus général de ξ_S qu'on note $|\Psi\rangle$ se construit en effectuant le produit tensoriel des deux vecteurs précédents, soit :

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= |\varphi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle \\ &= \alpha_+^1 \alpha_+^2 |++\rangle + \alpha_+^1 \alpha_-^2 |+-\rangle + \alpha_-^1 \alpha_+^2 |-+\rangle + \alpha_-^1 \alpha_-^2 |--\rangle \end{aligned}$$



Page de titre

Sommaire



Page 661 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

soit :

$$|\Psi\rangle = \alpha |++\rangle + \beta |+-\rangle + \gamma |-+\rangle + \delta |--\rangle \quad (9.77)$$

Ce ket est donc une combinaison linéaire des vecteurs de base. Pour le normer il faut satisfaire à la condition :

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 + |\gamma|^2 + |\delta|^2 = 1 \quad (9.78)$$

En général, si l'on se donne $|\Psi\rangle$, il n'est pas toujours possible de trouver deux kets $|\varphi(1)\rangle$ et $|\chi(2)\rangle$ dont il soit le produit tensoriel.

En effet pour que : $\alpha = \alpha_+^1 \alpha_+^2$, $\beta = \alpha_+^1 \alpha_-^2$, $\gamma = \alpha_-^1 \alpha_+^2$, $\delta = \alpha_-^1 \alpha_-^2$, il faudrait que :

$$\alpha\delta = \beta\gamma \quad (9.79)$$

Comme α, β, γ et δ sont quelconques, il n'y a aucune raison pour que cette condition soit toujours remplie.



Page de titre

Sommaire



Page 662 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

4. Les spineurs

Une particule de spin $\frac{1}{2}$ a des degrés de liberté externes qui caractérisent son mouvement orbital et des degrés de liberté internes qui caractérisent son état de spin. En tenant compte de l'ensemble de ces degrés de liberté, l'état quantique de la particule est caractérisé par un ket appartenant à l'espace ξ , produit tensoriel de l'espace orbital ξ_r et de l'espace des états de spin ξ_S : $\xi = \xi_r \otimes \xi_S$

4.1. Base de ξ

Pour déterminer une base de ξ , il faut trouver un ensemble complet d'observables qui commutent dans ξ et qui sont des prolongements d'observables agissant dans ξ_r et dans ξ_S .

Dans ξ_r on peut choisir pour E.C.O.C. l'un des ensembles $\{X, Y, Z\}$ ou $\{P_x, P_y, P_z\}$, ou bien dans le cas d'un potentiel central $\{H, \vec{L}^2, L_z\}$.

Dans ξ_S on prend l'ensemble $\{\vec{S}^2, S_z\}$ ou l'ensemble formé de $\vec{S}^2$ et de toute autre composante de $\vec{S}$



Page de titre

Sommaire



Page 663 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Dans ξ les divers E.C.O.C. peuvent être alors :

$$\{X, Y, Z, \vec{S}^2, S_z\} \quad (9.80)$$

$$\{P_x, P_y, P_z, \vec{S}^2, S_z\} \quad (9.81)$$

$$\{H, \vec{L}^2, L_z, \vec{S}^2, S_z\} \quad (9.82)$$

ou tout autre ensemble impliquant des observables pertinentes de ξ_r et ξ_s .

Il est plus simple d'utiliser le premier ensemble qui nous est plus familier, de plus comme tous les kets de ξ sont vecteurs propres de $\vec{S}^2$, on peut supprimer $\vec{S}^2$ de cet ensemble.

Une base de ξ peut alors être obtenue par l'ensemble des vecteurs produits tensoriels des kets $|\vec{r}\rangle = |x, y, z\rangle$ et des kets $|\pm\rangle$ de ξ_s qui constituent des bases dans ξ_r et dans ξ_s . On notera cette base commune $\{|\vec{r}, \varepsilon\rangle\}$ soit :

$$|\vec{r}, \varepsilon\rangle = |\vec{r}\rangle \otimes |\varepsilon\rangle = |x, y, z, \varepsilon\rangle \quad (9.83)$$

où x, y, z sont les composantes du vecteur position $\vec{r}$ et peuvent varier de $-\infty$ à $+\infty$ et ε est égal à $+$ ou $-$. $|\vec{r}, \varepsilon\rangle$ est par définition un vecteur propre



Page de titre

Sommaire



Page 664 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

commun à $X, Y, Z, \vec{S}^2$ et S_z :

$$X |\vec{r}, \varepsilon\rangle = x |\vec{r}, \varepsilon\rangle \quad (9.84)$$

$$Y |\vec{r}, \varepsilon\rangle = y |\vec{r}, \varepsilon\rangle \quad (9.85)$$

$$Z |\vec{r}, \varepsilon\rangle = z |\vec{r}, \varepsilon\rangle \quad (9.86)$$

$$\vec{S}^2 |\vec{r}, \varepsilon\rangle = \frac{3}{4} \hbar^2 |\vec{r}, \varepsilon\rangle \quad (9.87)$$

$$S_z |\vec{r}, \varepsilon\rangle = \varepsilon \frac{\hbar}{2} |\vec{r}, \varepsilon\rangle \quad (9.88)$$

Comme les bases $|\vec{r}\rangle$ et $|\varepsilon\rangle$ sont orthonormées complètes, respectivement, dans ξ_r et ξ_S , La base $\{|\vec{r}, \varepsilon\rangle\}$ l'est aussi dans ξ et on a les relations d'orthonormalisation et de fermeture suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{l} \langle \vec{r}', \varepsilon | \vec{r}, \varepsilon \rangle = \delta_{\varepsilon' \varepsilon} \delta(\vec{r}' - \vec{r}) \\ \sum_{\varepsilon} \int d^3r |\vec{r}, \varepsilon\rangle \langle \vec{r}, \varepsilon| = 1 \end{array} \right. \quad (9.89)$$



Page de titre

Sommaire



Page 665 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

4.2. Représentation spineur

En utilisant la relation de fermeture, on peut développer un état $|\Psi\rangle$ quelconque de ξ sur la base $\{|\vec{r}, \varepsilon\rangle\}$. on aura :

$$|\Psi\rangle = \sum_{\varepsilon} \int d^3r |\vec{r}, \varepsilon\rangle \langle \vec{r}, \varepsilon | \Psi \rangle \quad (9.90)$$

Les nombres complexes $\langle \vec{r}, \varepsilon | \Psi \rangle$ représentent donc l'ensemble des coordonnées du vecteur $|\Psi\rangle$ dans la base $\{|\vec{r}, \varepsilon\rangle\}$ on les note :

$$\langle \vec{r}, \varepsilon | \Psi \rangle = \Psi_{\varepsilon}(\vec{r}) \quad (9.91)$$

Ces nombres dépendent des trois variables continues x, y, z et de l'indice discret $\varepsilon(\pm)$.

Pour caractériser complètement l'état de la particule de spin $\frac{1}{2}$, il suffit donc de se donner les deux fonctions des variables d'espace x, y et z :

$$\Psi_+(x, y, z) = \Psi_+(\vec{r}) = \langle \vec{r}, + | \Psi \rangle \quad (9.92)$$

$$\Psi_-(x, y, z) = \Psi_-(\vec{r}) = \langle \vec{r}, - | \Psi \rangle \quad (9.93)$$

On écrit souvent ces fonctions sous la forme d'une matrice colonne à deux composantes qu'on appelle spineur et qu'on note $[\Psi](\vec{r})$:

$$[\Psi](\vec{r}) = \begin{pmatrix} \Psi_+(\vec{r}) \\ \Psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix} \quad (9.94)$$



Page de titre

Sommaire



Page 666 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Le spineur possède un adjoint qui est associé au bra $\langle \Psi |$ de l'état $|\Psi\rangle$.

On a en effet d'après (9.89) :

$$\begin{aligned}\langle \Psi | &= \sum_{\varepsilon} d^3 r \langle \Psi | \vec{r}, \varepsilon \rangle \langle \vec{r}, \varepsilon | \\ &= \sum_{\varepsilon} d^3 r \Psi_{\varepsilon}^* (\vec{r}) \langle \vec{r}, \varepsilon | \end{aligned}$$

Le bra $\langle \Psi |$ est donc représenté par les fonctions $\Psi_+^* (\vec{r})$ et $\Psi_-^* (\vec{r})$ qu'on peut écrire sous la forme d'une matrice ligne à deux composantes :

$$[\Psi]^+ (\vec{r}) = (\Psi_+^* (\vec{r}) \quad \Psi_-^* (\vec{r})) \quad (9.95)$$

qui est le spineur adjoint de $[\Psi] (\vec{r})$.

4.3. Produit scalaire et norme

Considérons deux vecteurs d'état $|\Psi\rangle$ et $|\varphi\rangle$, leur produit scalaire s'écrit :

$$\begin{aligned}\langle \Psi | \varphi \rangle &= \sum_{\varepsilon} \int d^3 r \langle \Psi | \vec{r}, \varepsilon \rangle \langle \vec{r}, \varepsilon | \varphi \rangle \\ &= \int d^3 r [\Psi_+^* (\vec{r}) \varphi_+ (\vec{r}) + \Psi_-^* (\vec{r}) \varphi_- (\vec{r})] \end{aligned}$$



Page de titre

Sommaire



Page 667 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Cette expression peut se mettre sous la forme :

$$\langle \Psi | \varphi \rangle = \int d^3r [\Psi]^+ (\vec{r}) [\varphi] (\vec{r}) \quad (9.96)$$

qui est similaire à celle donnant le produit scalaire de deux kets de ξ_r à partir des fonctions d'onde correspondantes.

La normalisation du vecteur $|\Psi\rangle$ se traduit dans cette représentation par :

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \Psi \rangle &= \int d^3r [\Psi]^+ (\vec{r}) [\Psi] (\vec{r}) \\ &= \int d^3r \left[|\Psi_+ (\vec{r})|^2 + |\Psi_- (\vec{r})|^2 \right] = 1 \end{aligned} \quad (9.97)$$

4.4. Expression d'un vecteur produit tensoriel

Certains vecteurs de ξ peuvent être des produits tensoriels d'un vecteur de ξ_r par un vecteur de ξ_s , comme c'est le cas des vecteurs de base de ξ .

S'il en est ainsi le vecteur considéré s'écrit :

$$|\Psi\rangle = |\varphi\rangle \otimes |\chi\rangle \quad (9.98)$$

avec :

$$|\varphi\rangle = \int d^3r \varphi (\vec{r}) |\vec{r}\rangle \quad (9.99)$$

$$|\chi\rangle = c_+ |+\rangle + c_- |-\rangle \quad (9.100)$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 668 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

qui sont les vecteurs les plus généraux de ξ_r et ξ_s .

Le spineur associé à $|\Psi\rangle$ aura donc pour composantes :

$$\begin{aligned}\Psi_+(\vec{r}) &= \langle \vec{r}, + | \Psi \rangle = \langle \vec{r}, + | \varphi, \chi \rangle \\ &= \langle \vec{r} | \varphi \rangle \langle + | \chi \rangle = \varphi(\vec{r})c_+\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\Psi_-(\vec{r}) &= \langle \vec{r}, - | \Psi \rangle = \langle \vec{r}, - | \varphi, \chi \rangle \\ &= \langle \vec{r} | \varphi \rangle \langle - | \chi \rangle = \varphi(\vec{r})c_-\end{aligned}$$

et prend la forme :

$$[\Psi](\vec{r}) = \begin{pmatrix} \varphi(\vec{r}) c_+ \\ \varphi(\vec{r}) c_- \end{pmatrix} = \varphi(\vec{r}) \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix} \quad (9.101)$$

La normalisation de $|\Psi\rangle$ se traduit alors par :

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \langle \varphi | \varphi \rangle \langle \chi | \chi \rangle = (|c_+|^2 + |c_-|^2) \int d^3\mathbf{r} |\varphi(\vec{r})|^2 \quad (9.102)$$

4.5. Opérateurs

En faisant agir un opérateur linéaire A sur le ket $|\Psi\rangle$ on obtient un ket $|\Psi'\rangle = A|\Psi\rangle$ appartenant à ξ .



Page de titre

Sommaire



Page 669 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

D'après les résultats précédents $|\Psi\rangle$ et $|\Psi'\rangle$ peuvent être représentés par des spineurs à deux composantes : $[\Psi](\vec{r})$ et $[\Psi'](\vec{r})$.

Ces spineurs sont tels que :

$$[\Psi'](\vec{r}) = [[A]] [\Psi](\vec{r}) \quad (9.103)$$

où $[[A]]$ est une matrice (2×2) associée à A dont les éléments deviennent en général des opérateurs différentiels vis à vis de x, y, z .

Les opérateurs de spin, définis initialement dans ξ_s n'agissent que sur les indices ε des vecteurs de base $|\vec{r}, \varepsilon\rangle$ et les opérateurs orbitaux n'agissent que sur la dépendance en $\vec{r}$ des spineurs et leur action est identique à celle qu'ils ont sur les fonctions d'onde ordinaires.

Exemples :

* Opérateur S_+

$$\begin{aligned} |\Psi'\rangle &= S_+ |\Psi\rangle \\ &= S_+ \left[\int d^3r |\vec{r}, +\rangle \Psi_+(\vec{r}) + \int d^3r |\vec{r}, -\rangle \Psi_-(\vec{r}) \right] \\ &= \hbar \int d^3r \Psi_-(\vec{r}) |\vec{r}, +\rangle \end{aligned}$$

ce qui donne pour le spineur :

$$[\Psi'](\vec{r}) = \hbar \begin{pmatrix} \Psi_-(\vec{r}) \\ 0 \end{pmatrix} = [[S_+]] [\Psi](\vec{r}) \quad (9.104)$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 670 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

soit :

$$[[S_+]] = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (9.105)$$

* Opérateur P_x

$$\begin{aligned} |\Psi'\rangle &= P_x |\Psi\rangle \\ &= P_x \left[\int d^3r |\vec{r}, +\rangle \Psi_+(\vec{r}) + \int d^3r |\vec{r}, -\rangle \Psi_-(\vec{r}) \right] \end{aligned}$$

ce qui donne pour le spineur :

$$[\Psi'](\vec{r}) = \hbar \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \Psi_+(\vec{r}) \\ \frac{\partial}{\partial x} \Psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix} = [[P_x]] [\Psi](\vec{r}) \quad (9.106)$$

soit :

$$[[P_x]] = \frac{\hbar}{i} \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial x} \end{pmatrix} \quad (9.107)$$



Page de titre

Sommaire



Page 671 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

5. Résonance magnétique

La résonance magnétique est une technique de spectroscopie appliquée aux particules ou ensemble de particules atomiques possédant un moment magnétique comme les électrons et un certain nombre de noyaux (environ cent). Son principe consiste à soumettre la particule à un champ magnétique statique assez intense et à l'exciter par un champ magnétique périodique de faible intensité. Il en résulte des effets électromagnétiques mesurables dont la signature est une raie appelée raie de résonance qui est caractéristique de l'état de spin du système étudié.

5.1. Hamiltonien

Considérons une particule de moment cinétique de spin $\vec{S}$, possédant un moment magnétique $\vec{M}$ colinéaire à $\vec{S}$:

$$\vec{M} = \gamma \vec{S}$$

où γ est le rapport gyromagnétique de la particule.

On place la particule dans un champ magnétique constant $\vec{B}_0$ dirigé selon le sens positif de l'axe $\vec{Oz}$ d'un référentiel galiléen $R(O, x, y, z)$ et on lui applique un champ $\vec{B}_1(t)$ perpendiculaire à $\vec{B}_0$, de module constant B_1 tel que $B_1 \ll B_0$ et tournant autour de $\vec{B}_0$ à la vitesse angulaire ω (fig. 9.6).



Page de titre

Sommaire



Page 672 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

On pose : $\omega_0 = -\gamma B_0$ et $\omega_1 = -\gamma B_1$

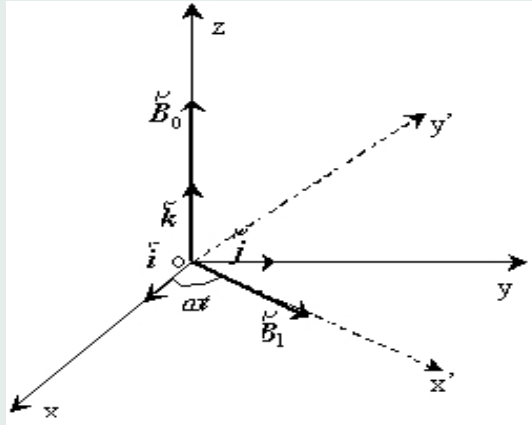


Figure 9.6 : Référentiel fixe $R(oxyz)$ et référentiel tournant $R(ox'y'z')$

Dans le référentiel fixe $R(oxyz)$ on a :

$$\vec{B}_0 = B_0 \vec{k}$$

$$\vec{B}_1 = B_1 \left(\cos \omega t \vec{i} + \sin \omega t \vec{j} \right)$$



Page de titre

Sommaire



Page 673 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

L'énergie potentielle magnétique de la particule s'écrit alors :

$$W = -\vec{\mathcal{M}} \cdot \vec{B} = -\gamma \vec{S} \cdot \vec{B} = -\gamma (S_z B_0 + S_x B_0 \cos \omega t + S_y B_0 \sin \omega t) \quad (9.108)$$

L'hamiltonien de la particule s'en déduit en associant au moment cinétique classique $\vec{S}$ l'observable de spin $\vec{S}$ soit :

$$H = -\gamma B_0 S_z - \gamma B_1 S_x \cos \omega t - \gamma B_1 S_y \sin \omega t \quad (9.109)$$

qui s'écrit sous la forme :

$$\begin{aligned} H &= \omega_0 S_z + \omega_1 (S_x \cos \omega t + S_y \sin \omega t) \\ &= \frac{\hbar \omega_0}{2} \sigma_z + \frac{\hbar \omega_1}{2} (\sigma_x \cos \omega t + \sigma_y \sin \omega t) \end{aligned} \quad (9.110)$$

5.2. Cas d'une particule de spin $\frac{1}{2}$

C'est le cas des électrons et des protons et il est à la base de la résonance magnétique électronique nucléaire (RMN) et de la résonance paramagnétique électronique (RPE).

Dans ce cas le vecteur d'état du système peut s'écrire :

$$|\Psi(t)\rangle = c_+(t) |+\rangle + c_-(t) |-\rangle \quad (9.111)$$



Page de titre

Sommaire



Page 674 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

et la matrice représentant H dans la base $\{| \pm \rangle\}$ formée par les vecteurs propres de l'observable S_z s'obtient à partir de (9.112) :

$$H = \frac{\hbar\omega_0}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} + \frac{\hbar\omega_1}{2} \cos \omega t \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \frac{\hbar\omega_1}{2} \sin \omega t \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (9.112)$$

soit :

$$H = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \omega_0 & \omega_1 e^{-i\omega t} \\ \omega_1 e^{+i\omega t} & -\omega_0 \end{pmatrix} \quad (9.113)$$

A partir de cette expression et de (9.113), on peut écrire l'équation de Schrödinger sous la forme du système suivant :

$$\begin{cases} i \frac{d}{dt} c_+ (t) = \frac{\omega_0}{2} c_+ (t) + \frac{\omega_1}{2} e^{-i\omega t} c_- (t) \\ i \frac{d}{dt} c_- (t) = \frac{\omega_1}{2} e^{i\omega t} c_+ (t) - \frac{\omega_0}{2} c_- (t) \end{cases} \quad (9.114)$$

Les équations (9.115) forment un système linéaire et homogène à coefficients dépendants du temps. Il est commode pour sa résolution de poser :

$$\begin{cases} b_+ (t) = e^{i\omega t/2} c_+ (t) \\ b_- (t) = e^{-i\omega t/2} c_- (t) \end{cases} \quad (9.115)$$



Page de titre

Sommaire



Page 675 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

En reportant (9.116) dans (9.115) on obtient :

$$\begin{cases} i \frac{d}{dt} b_+(t) = -\frac{\Delta\omega}{2} b_+(t) + \frac{\omega_1}{2} b_-(t) \\ i \frac{d}{dt} b_-(t) = \frac{\omega_1}{2} b_+(t) + \frac{\Delta\omega}{2} b_-(t) \end{cases} \quad (9.116)$$

C'est un système linéaire et homogène à coefficients constants où $\Delta\omega = \omega - \omega_0$. En dérivant ces équations par rapport au temps, on vérifie aisément qu'on aboutit au système d'équations suivantes :

$$\ddot{b}_{\pm} + \Omega^2 b_{\pm} = 0 \quad (9.117)$$

avec $\Omega^2 = \frac{1}{2} [(\Delta\omega)^2 + \omega_1^2]$

Les solutions de ce système sont de la forme :

$$b_{\pm}(t) = A_{\pm} \cos \Omega t + B_{\pm} \sin \Omega t \quad (9.118)$$

les coefficients $A_{\pm}$ et $B_{\pm}$ s'obtiennent en utilisant les conditions initiales.

Supposons par exemple qu'à l'instant $t = 0$, le système est dans l'état $|+\rangle$, c'est à dire qu'on a $b_-(0) = 0$ on obtient alors :

$$b_-(t) = A \sin \Omega t \quad (9.119)$$

$$b_+(t) = A \left[\left(\frac{2i\Omega}{\omega_1} \right) \cos \Omega t - \frac{\Delta\omega}{\omega_1} \sin \Omega t \right] \quad (9.120)$$



Page de titre

Sommaire



Page 676 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

A se calcule à partir de la condition de normalisation :

$$|b_+(t)|^2 + |b_-(t)|^2 = 1 \quad (9.121)$$

et on aboutit à :

$$|A|^2 = \left(\frac{2\omega_1}{\Omega} \right)^2 \quad (9.122)$$

$c_+(t)$ et $c_-(t)$ s'obtiennent à partir de la transformation (9.116) et on atteint en définitive :

$$|\Psi(t)\rangle = c_+(t)|+\rangle + c_-(t)|-\rangle$$

5.3. Remarques

a) On remarque que ces calculs sont semblables à ceux effectués dans le chapitre 5 sur les systèmes à deux niveaux. Cela est tout à fait normal puisque le spin $\frac{1}{2}$ est un système à deux états quantiques.

b) La transformation (9.116) est l'analogie quantique d'un changement de référentiel. En effet si on introduit le ket $|\tilde{\Psi}(t)\rangle$ et l'opérateur $\tilde{H}$ définies respectivement par :

$$|\tilde{\Psi}(t)\rangle = b_+(t)|+\rangle + b_-(t)|-\rangle \quad (9.123)$$



Page de titre

Sommaire



Page 677 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

$$\tilde{H} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} -\Delta\omega & \omega_1 \\ \omega_1 & \Delta\omega \end{pmatrix} \quad (9.124)$$

le système (9.117) s'écrit sous la forme :

$$\tilde{H} \left| \tilde{\Psi}(t) \right\rangle = i\hbar \frac{d}{dt} \left| \tilde{\Psi}(t) \right\rangle \quad (9.125)$$

qui est l'expression d'une équation de Schrödinger dans laquelle l'opérateur $\tilde{H}$ est un hamiltonien indépendant du temps et la base des vecteurs propres dépendante du temps. $\tilde{H}$ est alors de la forme :

$$\tilde{H} = -\gamma \vec{S} \cdot \vec{B}_{eff} \quad (9.126)$$

où $\vec{B}_{eff}$ est un champ magnétique effectif valant :

$$\vec{B}_{eff} = \frac{1}{\gamma} \left(-\omega_1 \vec{i}' + \Delta\omega \vec{k}' \right) \quad (9.127)$$

L'hamiltonien $\tilde{H}$ décrit alors l'interaction du spin avec un champ fixe $\vec{B}_{eff}$ dans le référentiel tournant $R(ox'y'z')$ (fig. 9.7).



Page de titre

Sommaire



Page 678 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

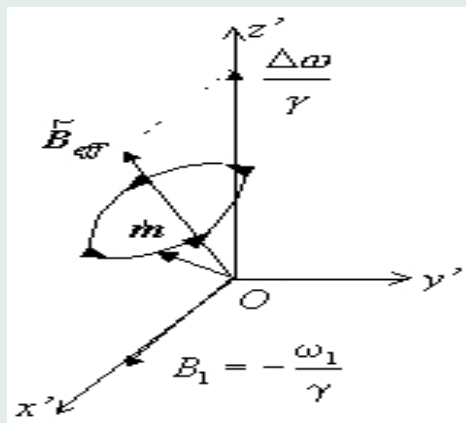


Figure 9.7 : Précession du moment magnétique $\vec{M}$ autour du champ efficace $\vec{B}_{eff}$

5.4. Résonance

Dans le champ magnétique $\vec{B}_0$, la particule peut être dans l'état $|+\rangle$ correspondant à l'énergie $\frac{\hbar\omega_0}{2}$ ($m = +\frac{1}{2}$) ou dans l'état $|-\rangle$ correspondant à l'énergie $-\frac{\hbar\omega_0}{2}$ ($m = -\frac{1}{2}$).

Supposons qu'à l'instant initial $t = 0$ la particule est dans l'état $|+\rangle$ c'est à



Page de titre

Sommaire



Page 679 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

dire qu'on a :

$$|\Psi(0)\rangle = |+\rangle \quad (9.128)$$

ou encore :

$$|\tilde{\Psi}(0)\rangle = |+\rangle \quad (9.129)$$

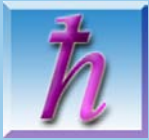
La probabilité pour trouver la particule à l'instant t dans l'état $|-\rangle$, c'est à dire la probabilité d'avoir un "retournement de spin" est :

$$P_-(t) = |\langle - | \Psi(t) \rangle|^2 = \left| \langle - | \tilde{\Psi}(t) \rangle \right|^2 = |c_-(t)|^2 = |b_-(t)|^2 \quad (9.130)$$

qui est égale d'après (9.120) :

$$P_-(t) = \frac{\omega_1^2}{\omega_1^2 + (\Delta\omega)^2} \sin^2 \left[\sqrt{\omega_1^2 + (\Delta\omega)^2} \frac{t}{2} \right] \quad (9.131)$$

Cette probabilité qu'on appelle formule de Rabi est le produit d'une lorentzienne (fig. 9.8) "piquée" en $\omega = \omega_0$ par un second terme toujours positif qui oscille entre 0 et 1.



Page de titre

Sommaire



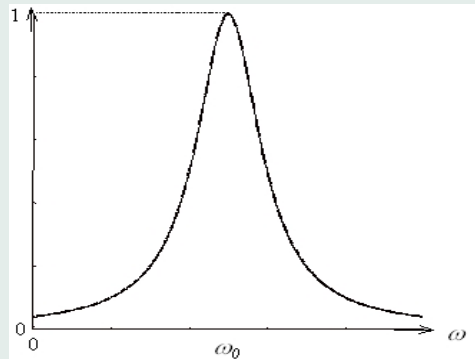
Page 680 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Figure 9.8 : Lorentzienne centrée en ω_0

La probabilité est bien sûre nulle à l'instant $t = 0$ et varie ensuite sinusoïdalement en fonction du temps entre 0 et $\frac{\omega_1^2}{\omega_1^2 + (\Delta\omega)^2}$.

- Pour $|\Delta\omega| \gg |\omega_1|$, $P_-(t)$ reste constamment très petite.
- Pour $|\Delta\omega| \ll |\omega_1|$, $P_-(t)$ peut devenir grande et lorsque $\Delta\omega = 0$,

c'est à dire pour $\omega = \omega_0$, $P_-(t)$ peut atteindre 1 aux instant $t_n = \frac{(2n+1)\pi}{\omega_1^2}$.

On dit qu'il y a résonance (fig. 9.9). On peut alors exciter la particule de l'état $|+\rangle$ à l'état $|-\rangle$.



Page de titre

Sommaire



Page 681 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

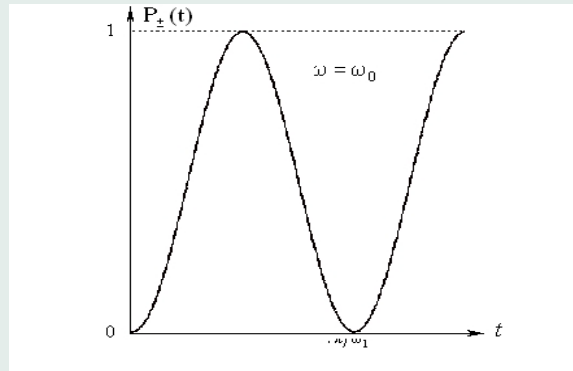


Figure 9.9 : Variation en fonction du temps de la probabilité de transition

Un champ tournant très faible est capable donc de retourner la direction du spin. La pulsation $\sqrt{\omega_1^2 + (\Delta\omega)^2}$ de $P_-(t)$ est égale à $|\gamma B_{eff}|$. Cette oscillation correspond dans le référentiel tournant à la précession du moment magnétique autour du champ efficace. On l'appelle "précession de Rabi".

5.5. Application : Résonance magnétique nucléaire(RMN)

La RMN s'applique aux noyaux dont le spin n'est pas nul. En règle générale, pour un noyau formé de Z protons et de $(A-Z)$ neutrons (A étant le nombre masse), le spin s du noyau est :



Page de titre

Sommaire



Page 682 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

- Demi-entier si A et Z sont impairs
- Entier si A est pair et Z impair
- Nul si A et Z sont pairs

Le noyau le plus utilisé en RMN est le proton (1_1H) dont la fréquence de résonance est $\nu_0 = 42.58 \text{ MHz}$ pour un champ magnétique statique B_0 de *un Tesla*. La RMN s'applique également à d'autres noyaux tel que le deutérium 2_1H ($s = 1$), le carbone ${}^{13}C$ ($s = \frac{1}{2}$), l'azote ${}^{14}N$ ($s = 1$), le phosphore ${}^{31}P$ ($s = \frac{1}{2}$),...

Dans les composés organiques formés de carbone et d'hydrogène le noyau de ${}^{12}C$ a un spin nul et ne joue aucun rôle, la RMN de ces composés est due uniquement aux protons.

Le spin du proton a pour valeur $s = \frac{1}{2}$, son moment magnétique est

$$M = \gamma s \hbar \text{ où } \gamma \text{ est le rapport gyromagnétique, } \gamma = g\beta_N/\hbar \text{ avec } \beta_N = \frac{e\hbar}{2m_p}$$

le magnéton nucléaire ; e et m_p étant respectivement la masse et la charge du proton. g est appelé facteur de Landé et vaut pour le proton $+2.72276$.

Dans un champ magnétique $\vec{B}_0$ dirigé suivant $\vec{Oz}$, on a donc deux niveaux d'énergie :

$$E_+ = \frac{\gamma \hbar}{2} B_0 = -\frac{\hbar \omega_0}{2} \text{ correspondant à l'état } |+\rangle \text{ (} m = +\frac{1}{2} \text{)}$$



Page de titre

Sommaire



Page 683 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

$$E_- = -\frac{\gamma\hbar}{2}B_0 = \frac{\hbar\omega_0}{2} \quad \text{correspondant à l'état } |-\rangle \quad (m = -\frac{1}{2})$$

Le niveau d'énergie le plus bas est celui dans lequel le spin et le moment magnétique sont orientés dans le même sens. La différence d'énergie entre les deux niveaux est $\hbar\omega_0 = h\nu_0 = E_- - E_+ = 1.75 \cdot 10^{-7} \text{ eV}$ pour $B_0 = 1 \text{ T}$

À la température T le rapport de population entre les protons dans l'état $|+\rangle$ (n_+) et ceux dans l'état $|-\rangle$ (n_-) est donné par le facteur de Boltzmann

$$\frac{n_-}{n_+} = \exp(-h\nu_0/kT) \quad (9.132)$$

où k est la constante de Boltzmann. Pour avoir une meilleure sensibilité lors du retournement de spin le niveau d'énergie le plus bas ($m = +\frac{1}{2}$) doit être le plus peuplé possible. Il faudrait donc d'après (9.131) que T soit faible et que le champ B_0 soit intense.

Pour réaliser un spectre RMN on utilise un champ magnétique intense $\vec{B}_0$ dirigé suivant $\vec{oz}$ et un champ variable faible $\vec{B}_1$ perpendiculaire à $\vec{B}_0$ produit par une bobine entourant l'échantillon (fig. 9.10) et émettant dans le domaine radiofréquence (50 à 1000 MHz).



Page de titre

Sommaire



Page 684 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

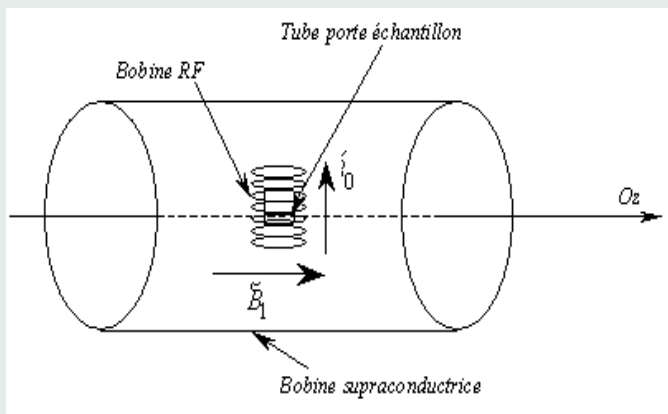


Figure 9.10 : Principe de la RMN

On fixe la fréquence de la bobine créant $\vec{B}_1$ et on balaye le champ électromagnétique selon $\vec{Oz}$ autour de la valeur B_0 pour trouver la résonance. Celle-ci se traduit par une absorption d'énergie dans la bobine radiofréquence et par l'apparition d'une force e.m induite dans une bobine de détection placée perpendiculairement à $\vec{B}_0$ et $\vec{B}_1$. Ce signal est amplifié et analysé (fig. 9.11). On utilise aussi pour obtenir le signal une autre méthode qui consiste à faire un balayage de la fréquence associée à $\vec{B}_1$ pour un champ statique $\vec{B}_0$ constant.



Page de titre

Sommaire



Page 685 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

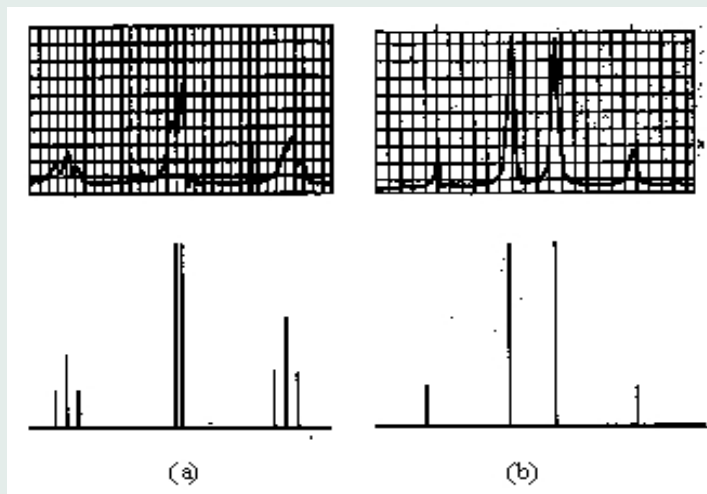


Figure 9.11 : Exemples de spectres RMN :

(a) Spectre du groupe méthyl de l'alcool éthylique

(b) Spectre du 2-bromo-5-chlorothiophène

5.5.1. Déplacement chimique

Dans une molécule la fréquence de résonance est sensible à l'environnement du proton. Cela est dû au fait que les électrons de la molécule créent au voisinage du proton, un champ magnétique très faible et de sens opposé à $\vec{B}_0$. Ces électrons produisent un effet d'écran de sorte que le champ auquel



Page de titre

Sommaire



Page 686 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

est réellement soumis le proton n'est pas $\vec{B}_0$ mais un champ légèrement plus faible $\vec{B}^*$ tel que :

$$B^* = B_0 (1 - \sigma) \quad (9.133)$$

La constante sans dimension σ est appelée constante d'écran magnétique et est de l'ordre de 10^{-5} . Considérons par exemple deux protons A et B appartenant à deux environnements différents. Pour le proton A la fréquence de résonance est $\nu_A = \nu_0 (1 - \sigma_A)$ et pour le proton B elle est $\nu_0 (1 - \sigma_B)$. On appelle déplacement chimique entre A et B la quantité δ telle que :

$$\delta = 10^6 \frac{\nu_B - \nu_A}{\nu_0} \quad (9.134)$$

δ s'exprime en partie par million (ppm)

5.5.2. Structure fine

Souvent les raies de résonance se séparent en plusieurs raies plus fines d'intensité différentes. On dit qu'on a une structure fine. Cette structure résulte des différentes interactions magnétiques entre les protons de la molécule ; les plus courantes de ces interactions sont l'interaction dipôle-dipôle et l'interaction spin-spin.

L'interaction dipôle-dipôle s'exerce entre les dipôles magnétiques associés à deux protons différents alors que l'interaction spin-spin résulte de l'interaction entre les dipôles magnétiques associés aux spins de chacun des protons.

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 687 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

5.5.3. Relaxation

Le champ oscillant $\vec{B}_1$ fait passer les spins de l'état $|+\rangle$ à l'état $|-\rangle$. La population de l'état d'énergie inférieure diminue donc au profit du niveau supérieur. On s'attend alors à ce que l'absorption d'énergie se fasse au début de l'expérience et qu'elle cesse par la suite. Il n'en est rien et un certain nombre de spins excités retombent dans l'état le plus bas. Les phénomènes responsables de cette désexcitation sont appelés processus de relaxation et sont dus à deux mécanismes :

- Le relaxation longitudinale ou relaxation spin-réseau dans la quelle le spin passe de l'état d'énergie supérieure à l'état d'énergie inférieure, il y a donc modification de population et libération d'énergie. Le temps T_1 associé à ce mécanisme est appelé temps de relaxation spin-réseau. Il est de l'ordre de la seconde pour le tissu humain.

- La relaxation transversale ou relaxation spin-spin qui concerne le mouvement de précession des spins et qui s'effectue sans échange d'énergie et sans modification de la population des niveaux. Le temps T_2 associé à ce mécanisme est appelé temps de relaxation spin-spin. T_2 est plus petit que T_1 et est de l'ordre de 100 ms pour le tissu humain.

Formellement ces mécanismes sont décrit par les équation de Bloch (1946) qui donnent la cinétique des composantes longitudinale (M_z) et transversales (M_x, M_y) de l'aimantation et qui s'écrivent dans le référentiel


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)


Page 688 de 978

[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

 fixe xyz :

$$\frac{dM_z}{dt} = -\frac{M_z - M_0}{T_1} \quad (9.135)$$

$$\frac{dM_x}{dt} = -\frac{M_x}{T_2} \quad (9.136)$$

$$\frac{dM_y}{dt} = -\frac{M_y}{T_2} \quad (9.137)$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 689 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

6. Fermions et bosons

En physique quantique une particule est un état bien défini, localisé dans l'espace et dans le temps et qui est caractérisé par des éléments invariants tels que la masse au repos, la charge, le spin, ...

Chaque espèce de particule est définie par une fonction de distribution statistique $f(T)$ dans un gaz en équilibre à la température T :

$$f(T) = \frac{g_i}{B \exp(W_i/kT) - q} \quad (9.138)$$

g_i est le poids statistique du niveau d'énergie W_i , K est la constante de Boltzmann et B une constante caractéristique de la particule.

On classe les particules en deux familles distinctes selon que leur spin est entier ou demi-entier : les fermions et les bosons.

6.1. Les fermions

Ils ont un spin demi-entier. la fonction d'onde totale d'un système de fermions est antisymétrique, ce qui signifie que deux fermions ne peuvent pas occuper le même état quantique. Cette propriété est connue sous le nom de Principe d'exclusion de Pauli. Ces particules obéissent à la statistique de Fermi-Dirac pour laquelle $q = -1$. Les fermions les plus connus sont : l'électron, le proton, le neutron et le neutrino.

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 690 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

6.2. Les bosons

Ils ont un spin entier. La fonction d'onde totale d'un système de bosons est symétrique, ce qui signifie que plusieurs bosons peuvent occuper le même état quantique. Ces particules obéissent à la statistique de Bose-Einstein pour laquelle $q = 1$. Comme bosons, on peut citer le photon, La particule α , le méson π , ...



Page de titre

Sommaire



Page 691 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Exercices et Problèmes

EP 9.1 : Précession de Larmor

On considère une particule de masse m et de spin $s = \frac{1}{2}$ et on rapporte l'espace des états de spin ξ_S de cette particule à la base $\{|\pm\rangle\}$ formée par les kets propres de S_z .

1- Ecrire les matrices représentant S_x et S_y dans la base $\{|\pm\rangle\}$ sachant que :

$$S_x |\pm\rangle = \frac{\hbar}{2} |\mp\rangle ; S_y |\pm\rangle = \pm \frac{i\hbar}{2} |\mp\rangle$$

Déterminer les valeurs propres et vecteurs propres de S_x et S_y .

2- Ecrire la composante S_u du spin de la particule suivant la direction $\vec{u}$ repérée par les angles polaires θ et φ et déterminer la matrice qui la représente dans la base $\{|\pm\rangle\}$.

Donner les valeurs propres et les états propres de S_u qu'on notera $|\pm\rangle_u$.

3- Ecrire dans la base $\{|\pm\rangle\}$ le vecteur d'état de spin le plus général de la particule. Montrer qu'il peut se mettre sous la forme :

$$|\psi\rangle = \cos \frac{\theta}{2} \exp(-\frac{i\varphi}{2}) |+\rangle + \sin \frac{\theta}{2} \exp(\frac{i\varphi}{2}) |-\rangle$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 692 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

Montrer que quelque soit $|\psi\rangle$ appartenant à ξ_S on peut toujours trouver un vecteur $\vec{u}$ tel que $|\psi\rangle$ soit colinéaire à un état propre de S_u .

4- La particule de moment magnétique $\vec{M} = \gamma \vec{S}$ est plongée dans un champ magnétique uniforme $\vec{B}_0$ parallèle à l'axe $\vec{Oz}$.

a- Sachant que l'énergie potentielle magnétique est donnée par :

$E_p = -\vec{M} \cdot \vec{B}_0$, Ecrire l'hamiltonien d'interaction H de $\vec{M}$ avec $\vec{B}_0$ ainsi que la matrice qui le représente dans la base $\{|\pm\rangle\}$.

b- Trouver les valeurs propres et vecteurs propres de H .

c- On suppose qu'à l'instant $t = 0$, l'état de spin de la particule est donné par le ket $|\psi(0)\rangle \equiv |\psi\rangle$

Trouver l'état de spin $|\psi(t)\rangle$ à un instant t ultérieur.

d- En comparant l'expression de $|\psi(t)\rangle$ à l'un des états propres de S_u calculé dans 2, montrer que l'angle entre $\vec{u}(t)$ et $\vec{Oz}$ (direction de $\vec{B}_0$) reste constant et que le vecteur $\vec{M}$ tourne autour de $\vec{Oz}$ à la vitesse angulaire $\omega_0 = -\gamma B_0$ appelée pulsation de Larmor.



Page de titre

Sommaire



Page 693 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

EP 9.2 : Opérateur d'évolution d'un spin $\frac{1}{2}$

On considère une particule de spin $\frac{1}{2}$ de moment cinétique $\vec{M} = \gamma \vec{S}$ plongée dans un champ magnétique $\vec{B}_0$ de composantes :

$$\begin{cases} B_x = -\frac{\omega_x}{\gamma} \\ B_y = -\frac{\omega_y}{\gamma} \\ B_z = -\frac{\omega_z}{\gamma} \end{cases}$$

où ω_x, ω_y et ω_z sont des constantes positives.

On pose : $\omega_0 = -\gamma \left| \vec{B}_0 \right|$

1- Ecrire l'hamiltonien de la particule et donner la matrice qui le représente dans la base $\{|\pm\rangle\}$ formée des kets propres de S_z .

2- Montrer que l'opérateur d'évolution de ce spin s'écrit :

$$U(t, 0) = \exp(-iMt)$$

où M est l'opérateur défini par :

$$M = \frac{1}{\hbar} (\omega_x S_x + \omega_y S_y + \omega_z S_z)$$



Page de titre

Sommaire



Page 694 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

3- Déterminer la matrice représentant M dans la base $\{| \pm \rangle\}$.

Montrer que l'on a :

$$M^2 = \frac{1}{4}(\omega_x^2 + \omega_y^2 + \omega_z^2) = \left(\frac{\omega_0}{2}\right)^2$$

4- Montrer que l'on peut mettre l'opérateur d'évolution sous la forme :

$$U(t, 0) = \cos\left(\frac{\omega_0 t}{2}\right)I - \frac{2i}{\omega_0}M \sin\left(\frac{\omega_0 t}{2}\right)$$

où I est l'opérateur unité.

5- On considère un spin qui à l'instant $t = 0$ est dans l'état $|\psi(0)\rangle = |+\rangle$

Montrer que la probabilité $P_+(t)$ de le trouver à l'instant t dans l'état $|+\rangle$ est :

$$\mathcal{P}_+(t) = |\langle + | U(t, 0) | + \rangle|^2$$

Etablir alors la relation :

$$\mathcal{P}_+(t) = 1 - \frac{\omega_x^2 + \omega_y^2}{\omega_0^2} \sin^2\left(\frac{\omega_0 t}{2}\right)$$

EP 9.3 : Mesures de spin- Formule de Rabi

1- On considère une particule de spin $\frac{1}{2}$, de moment magnétique :



Page de titre

Sommaire



Page 695 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

$$\vec{M} = \gamma \vec{S}$$

L'espace des états de spin est rapporté à la base des vecteurs $|+\rangle$ et $|-\rangle$, vecteurs propres de S_z de valeurs propres $\pm \frac{\hbar}{2}$. A l'instant $t = 0$, l'état du système est : $|\psi(0)\rangle = |+\rangle$.

a- On mesure à l'instant $t = 0$ l'observable S_y . Quels résultats peut-on trouver et avec quelles probabilités ?

b- Au lieu d'effectuer la mesure précédente, on laisse évoluer le système librement sous l'influence d'un champ magnétique parallèle à $\vec{Ox}$, de module B_0 . Calculer l'état du système à l'instant t (on posera $\omega_0 = -\gamma B_0$).

c- Calculer, à l'instant t , les valeurs moyennes des observables S_x, S_y et S_z .

d- Etudier et représenter dans R^3 le mouvement du vecteur moyen $\langle \vec{S} \rangle$ (les composantes de $\langle \vec{S} \rangle$ sont : $\langle S_x \rangle, \langle S_y \rangle, \langle S_z \rangle$).

2- La particule de spin $\frac{1}{2}$ est maintenant soumise à la fois à un champ magnétique statique $\vec{B}_0$ orienté suivant $\vec{Oz}$ et à un champ magnétique $\vec{B}_1$ tournant à la fréquence ω dans le plan xoy . Les composantes de ce champ sont :

$$\begin{cases} B_{1x} = B_1 \cos \omega t \\ B_{1y} = B_1 \sin \omega t \end{cases}$$

a- Ecrire l'hamiltonien $H(t)$ du système (on posera $\omega_1 = -\gamma B_1$). Donner sa représentation matricielle sur la base $\{|\pm\rangle\}$ des vecteurs propres de S_z .



Page de titre

Sommaire



Page 696 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

b- L'état du système à l'instant t est : $|\psi(t)\rangle = a_+(t)|+\rangle + a_-(t)|-\rangle$

Montrer que les coefficients $a_{\pm}(t)$ satisfont au système d'équations différentielles suivant :

$$\begin{cases} i\frac{d}{dt}a_+(t) = \frac{\omega_0}{2}a_+(t) + \frac{\omega_1}{2}\exp(-i\omega t)a_-(t) \\ i\frac{d}{dt}a_-(t) = \frac{\omega_1}{2}\exp(i\omega t)a_+(t) - \frac{\omega_0}{2}a_-(t) \end{cases}$$

c- Résoudre ce système d'équations. Pour cela on fera les changements de fonction suivants :

$$\begin{cases} b_+(t) = \exp(\frac{i\omega t}{2})a_+(t) \\ b_-(t) = \exp(-\frac{i\omega t}{2})a_-(t) \end{cases}$$

et on posera $\Delta\omega = \omega - \omega_0$.

d- On suppose qu'à l'instant $t = 0$, le spin est dans l'état $|+\rangle$: $|\psi(0)\rangle = |+\rangle$

Montrer que :

$$\begin{aligned} b_+(t) &= \cos(\sqrt{\omega_1^2 + (\Delta\omega)^2}\frac{t}{2}) + i\frac{\Delta\omega}{\sqrt{\omega_1^2 + (\Delta\omega)^2}}\sin(\sqrt{\omega_1^2 + (\Delta\omega)^2}\frac{t}{2}) \\ b_-(t) &= -\frac{i\omega_1}{\sqrt{\omega_1^2 + (\Delta\omega)^2}}\sin(\sqrt{\omega_1^2 + (\Delta\omega)^2}\frac{t}{2}) \end{aligned}$$



Page de titre

Sommaire



Page 697 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

- e- Quelle est la probabilité $P_{-}(t)$ de trouver à l'instant t le système dans l'état $|-\rangle$? A quelle condition cette probabilité peut-elle atteindre l'unité ?
 Quel est, dans ce cas, l'état du système à l'instant t ?

EP 9.4 Spectre R.M.N d'un système de deux protons

On se propose d'étudier le spectre de résonance magnétique nucléaire d'un proton ou de deux protons. Le proton, noyau de spin $\frac{1}{2}$, est porteur d'un moment magnétique :

$$\vec{\mu} = \frac{g\beta_N}{\hbar} \vec{I}$$

Dans cette expression, β_N est le magnéton nucléaire et g le facteur de Landé nucléaire.

$$\begin{aligned}\beta_N &= 5,04910^{-27} \text{ Joule Tesla}^{-1} \\ g &= 5,536\end{aligned}$$

Dans tout le problème, les champs magnétiques seront caractérisés par un vecteur $\vec{B}$, mesuré en tesla.

En présence d'un champ magnétique $\vec{B}$, l'énergie magnétique de spin nucléaire s'exprime par l'hamiltonien :

$$H = -\frac{g\beta_N}{\hbar} (I_x B_x + I_y B_y + I_z B_z)$$



Page de titre

Sommaire



Page 698 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Dans toute la suite, le champ magnétique principal $\vec{B}$ sera dirigé selon l'axe $\vec{Oz}$ d'un référentiel galiléen $R(x, y, z)$.

L'espace des états de spin pour le proton sera rapporté à la base $|+\rangle, |-\rangle$ des kets propres orthonormés de I_z .

Les règles d'opération des trois composantes I_x, I_y et I_z du moment cinétique de spin $\vec{I}$ sur les kets $|+\rangle$ et $|-\rangle$ sont :

$$I_z |+\rangle = \frac{\hbar}{2} |+\rangle \quad I_x |+\rangle = \frac{\hbar}{2} |-\rangle \quad I_y |+\rangle = \frac{i\hbar}{2} |-\rangle$$

$$I_z |-\rangle = -\frac{\hbar}{2} |-\rangle \quad I_x |-\rangle = \frac{\hbar}{2} |+\rangle \quad I_y |-\rangle = \frac{i\hbar}{2} |+\rangle$$

1) a) Dans le référentiel choisi, l'hamiltonien représentant l'énergie magnétique du proton isolé s'écrit :

$$H = -\frac{g\beta_N}{\hbar} I_z B$$

Vérifier que les kets $|+\rangle$ et $|-\rangle$ sont kets propres de H . Calculer l'écart entre les deux énergies correspondantes. Si l'on veut que la fréquence ν_0 de la résonance soit égale à 6010^6 Hz , quelle valeur de champ $\vec{B}$ faut-il choisir ?.

b) Le noyau d'hydrogène est entouré d'un nuage électronique, le champ magnétique au niveau du noyau n'est plus égal au champ extérieur $\vec{B}$ mais à



Page de titre

Sommaire



Page 699 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

$\vec{B}(1 - \sigma)$, σ étant la constante d'écran (effet de blindage magnétique du nuage électronique).

Le champ magnétique $\vec{B}$, à appliquer pour observer la résonance $\nu_0 = 6010^6 \text{ Hz}$ pour un proton tel que $\sigma = 17,7810^{-6}$, n'a plus la valeur trouvée en a).

De combien diffère-t-il de cette valeur ?

c) Pour observer la résonance, on doit appliquer, en plus du champ magnétique permanent $\vec{B}$, un faible champ oscillant $\vec{B}_1$ dont la fréquence est égale à la fréquence de la résonance cherchée. Si cette condition est satisfaite, l'intensité de la raie de résonance observée sera proportionnelle au carré du module de :

$$\langle + | I_x B_{1x} + I_y B_{1y} + I_z B_{1z} | - \rangle$$

Montrer que l'intensité de la résonance est maximale si $\vec{B}_1$ est perpendiculaire à $\vec{B}$, et que l'on n'observera pas la résonance si $\vec{B}_1$ est parallèle à $\vec{B}$.

Dans la suite, le champ oscillant sera toujours supposé parallèle à $\vec{Ox}$.

2°) On considère maintenant un système formé de deux protons notés A et B , dans des sites chimiques différents définis par les constantes d'écran σ_A et σ_B ($\sigma_A > \sigma_B$).

Les spins sont supposés non couplés, ou tout au moins liés par une énergie de couplage négligeable. L'hamiltonien du système est :

$$H_1 = -\frac{g\beta_N}{\hbar} \{ (1 - \sigma_A) I_{z_A} + (1 - \sigma_B) I_{z_B} \} B$$



Page de titre

Sommaire



Page 700 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

a) On considère que l'espace des états de spin des deux protons ξ est le produit tensoriel de l'espace des états de spin de A et de B .

On obtient donc une base de ξ $\{|\Psi_1\rangle, |\Psi_2\rangle, |\Psi_3\rangle, |\Psi_4\rangle\}$ telle que :

$$|\Psi_1\rangle = |+\rangle_A \otimes |+\rangle_B \quad \text{ou plus brièvement } |+, +\rangle$$

$$|\Psi_2\rangle = |+\rangle_A \otimes |-\rangle_B \quad \text{ou plus brièvement } |+, -\rangle$$

$$|\Psi_3\rangle = |-\rangle_A \otimes |+\rangle_B \quad \text{ou plus brièvement } |-, +\rangle$$

$$|\Psi_4\rangle = |-\rangle_A \otimes |-\rangle_B \quad \text{ou plus brièvement } |-, -\rangle$$

Vérifier que ces quatre kets sont des kets propres de H . Calculer les énergies correspondantes E_1, E_2, E_3, E_4 . Faire un schéma des niveaux d'énergie.

On posera :

$$\alpha = \frac{g\beta_N B}{\hbar}(1 - \sigma_A) \quad \beta = \frac{g\beta_N B}{\hbar}(1 - \sigma_B)$$

b) L'intensité de la raie de résonance entre les états caractérisés par les kets $|\Psi_m\rangle$ et $|\Psi_n\rangle$ est proportionnelle au carré du module de

$$P_{mn} = \langle \Psi_m | I_{x_A} + I_{x_B} | \Psi_n \rangle$$

Combien de raies observera-t-on dans le spectre ? Quelles seront leurs intensités respectives ?

3) On reprend le problème de deux protons A et B dans des sites chimiques différents, mais on suppose qu'ils sont couplés par l'intermédiaire d'une constante de couplage J .



Page de titre

Sommaire



Page 701 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

a) L'hamiltonien du système s'écrit :

$$H_2 = -\frac{g\beta_N}{\hbar}((1 - \sigma_A)I_{z_A} + (1 - \sigma_B)I_{z_B})B + \frac{\hbar}{\hbar^2}J \vec{I}_A \cdot \vec{I}_B$$

avec :

$$\vec{I}_A \cdot \vec{I}_B = I_{x_A}I_{x_B} + I_{y_A}I_{y_B} + I_{z_A}I_{z_B}$$

En reprenant les notations de la question 2°, vérifier que les kets $|\Psi_1\rangle$ et $|\Psi_4\rangle$ sont kets propres de cet hamiltonien.

Calculer $H|\Psi_2\rangle$ et $H|\Psi_3\rangle$. En déduire que l'on peut trouver deux autres kets de l'hamiltonien sous la forme :

$$\begin{aligned} |\Phi_2\rangle &= |\Psi_2\rangle \cos \theta + |\Psi_3\rangle \sin \theta \\ |\Phi_3\rangle &= |\Psi_2\rangle \sin \theta - |\Psi_3\rangle \cos \theta \end{aligned}$$

Calculer les énergies correspondantes E'_2 et E'_3 et déterminer la valeur de θ .
On posera :

$$\delta = (\sigma_A - \sigma_B) \frac{g\beta_N B}{\hbar}$$

$$\nu_0 = \frac{g\beta_N B}{\hbar} \text{ et } D = \sqrt{\delta^2 + J^2}$$



Page de titre

Sommaire



Page 702 de 978

Retour

Plein écran

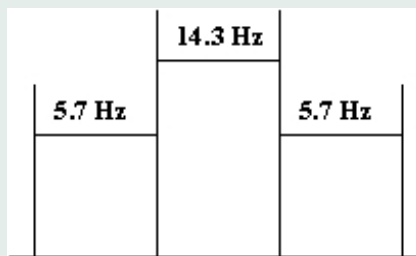
Fermer

Quitter

c) Combien trouve-t-on de raies de résonance ?. Faire un schéma des niveaux d'énergie, en indiquant les transitions possibles.

Quelles sont les intensités des raies de résonance ?.

d) Le spectre R.M.N du dibromo 2,3 thiophène enregistré à 60.10^6 Hz est composé de quatre raies dont on donne les écarts relatifs exprimés dans l'échelle des fréquences :



En déduire la valeur de δ et J , ainsi que les intensités théoriques des raies.

4°) Dans les formules précédentes, examiner le cas $\sigma_A = \sigma_B$. Quel est alors le spectre de R.M.N ?.

En déduire que le couplage des spins dans un groupe de noyaux magnétiquement équivalents n'a pas, en général, d'effet sur la résonance de ces noyaux.

EP 9.5 Résonance magnétique de deux particules de spin $\frac{1}{2}$



Page de titre

Sommaire



Page 703 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

On place un système de deux particules de spin $\frac{1}{2}$ dans un champ magnétique uniforme $\vec{B} = B \vec{k}$ où $\vec{k}$ est le vecteur unitaire de l'axe $\vec{Oz}$. Soient la base $\{|\pm, \mp\rangle\}$ formée par les quatre vecteurs propres communs à S_{1z} et S_{2z} et γ_1 et γ_2 les rapports gyromagnétiques des deux particules.

1- Ecrire l'hamiltonien du système et déterminer ses énergies propres et ses états propres ? (on posera $\alpha = \frac{\hbar B}{2}$).

Faire un diagramme de ces énergies.

2- On introduit les quatre opérateurs :

$$S_{m\pm} = S_{mx} \pm iS_{my} \quad m = 1, 2$$

Calculer l'opérateur $A = S_{1x}S_{2x} + S_{1y}S_{2y}$ en fonction de ces opérateurs, en déduire la matrice représentant A dans la base définie plus haut.

3- On suppose maintenant que les deux particules interagissent entre elles.

L'énergie d'interaction étant $W = \mu \vec{\mathcal{M}}_1 \cdot \vec{\mathcal{M}}_2$ où μ est une constante et $\vec{\mathcal{M}}_1$ et $\vec{\mathcal{M}}_2$ les moments magnétiques des deux particules.

Ecrire l'hamiltonien H du système et la matrice qui le représente.

Calculer les énergies propres de H .

On posera : $K = \frac{\mu\gamma_1\gamma_2\hbar^2}{4}$ et $E_2 = -(\gamma_1 - \gamma_2)\alpha$.

4- Déterminer les états propres de H .

On posera $\rho^2 = 4K^2 + E_2^2$ et on donnera les vecteurs d'états en fonction seulement de ρ et de E_2 .



Page de titre

Sommaire



Page 704 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

5- Le passage d'un état $|a\rangle$ d'énergie E_a à un état $|b\rangle$ d'énergie E_b est accompagné d'une émission de lumière de fréquence.

$$\nu_{ab} = \frac{E_a - E_b}{h}$$

Sachant que l'intensité de la lumière émise est égale à $I_{ab} = \beta |\langle a | S_+ | b \rangle|^2$ (avec $S_+ = S_{1+} + S_{2+}$ et β une constante) calculer les fréquences et les intensités relatives des raies émises ou absorbées par ce système. Faire un dessin.

Examiner le cas particulier où $\gamma_1 = \gamma_2$ (particules identiques).

EP 9.6 Matrices de Pauli

Soit $\vec{S}$ le moment cinétique de spin d'une particule de spin $\frac{1}{2}$ et $\vec{A}$ et $\vec{B}$ deux vecteurs ou deux opérateurs vectoriels dont chacune des composantes commute avec celles de $\vec{S}$.

1- Montrer que $\vec{\sigma}$ défini par : $\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$ satisfait la relation :

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{A})(\vec{\sigma} \cdot \vec{B}) = \vec{A} \cdot \vec{B} + i \vec{\sigma} \cdot (\vec{A} \wedge \vec{B})$$

Les composantes de $\vec{\sigma}$ étant les matrices de Pauli définies par :

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$



Page de titre

Sommaire



Page 705 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

2- σ_u étant la composante de $\vec{\sigma}$ dans la direction de vecteur unitaire $\vec{u}$, déterminer l'expression de σ_u^2 .

EP 9.7 Hamiltonien de Spin de l'atome d'hydrogène

L'électron et le proton qui composent l'atome d'hydrogène possèdent chacun un moment magnétique lié à leur spin respectif S et I :

Le moment magnétique électronique est : $\vec{\mu}_e = -\gamma_e \vec{S}$

Le moment magnétique nucléaire est : $\vec{\mu}_n = \gamma_n \vec{I}$

γ_e et γ_n sont des constantes appelées rapports gyromagnétiques.

On applique un champ magnétique statique $\vec{B}_0$ dirigé suivant l'axe $\vec{Oz}$. Si l'on néglige l'interaction entre les moments $\vec{\mu}_e$ et $\vec{\mu}_n$, l'hamiltonien magnétique du système est :

$$H_z = -(\vec{\mu}_e + \vec{\mu}_n) \cdot \vec{B}_0 = \omega_e S_z - \omega_n I_z$$

où $\omega_e = \gamma_e B_0$ et $\omega_n = \gamma_n B_0$ sont respectivement les fréquences de Larmor électronique et nucléaire.

1- S et I étant des spins $\frac{1}{2}$, on désignera par $|\pm\rangle$ les kets propres correspondants aux valeurs propres $\pm \frac{\hbar}{2}$ de la composante suivant $\vec{Oz}$ de chacun de ces spins, et on utilisera la base $\{|\pm, \mp\rangle\}$ formée par le produit tensoriel des vecteurs propres de S_z par ceux de I_z .

a- Ecrire la matrice représentant H_z dans la base $\{|\pm, \mp\rangle\}$.



Page de titre

Sommaire



Page 706 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

b- Quels sont les valeurs propres et les vecteurs propres de H_z ?

2-On tient compte maintenant des interactions entre les moments magnétiques. L'interaction dipolaire est nulle en moyenne en raison de la forme sphérique du nuage électronique, mais il existe une interaction dite de "contact" décrite par : $H_1 = a \vec{I} \cdot \vec{S}$ où a est une constante.

a-Montrer que :

$$\vec{S} \cdot \vec{I} = S_z I_z + \frac{1}{2}(S_+ I_- + S_- I_+)$$

où S_+, S_-, I_+, I_- ont leur signification habituelle.

b- Ecrire la matrice représentant l'hamiltonien total $H = H_z + H_1$ dans la base $\{|\pm, \mp\rangle\}$.

c- Trouver les valeurs propres et les vecteurs propres de H .

EP 9.8 Résonance magnétique d'un couple de protons

Une molécule possède deux protons dont les spins sont notés s_1 et s_2 et tels que $s_1 = s_2 = \frac{1}{2}$. On applique un champ magnétique $\vec{B}_0$ dirigé parallèlement à l'axe $\vec{Oz}$ ($B_0 = 10^4 \text{ Gauss}$). Si l'on néglige l'interaction entre les deux spins, l'hamiltonien du système s'écrit :

$$H_z = -\gamma B_0 (S_{1z} + S_{2z}) = +\omega_0 (S_{1z} + S_{2z})$$



Page de titre

Sommaire



Page 707 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

où $\gamma = 2.710^4 \text{ rad sec}^{-1} \text{ G}^{-1}$ est le facteur gyromagnétique du proton et $\omega_0 = -\gamma B_0$ est la fréquence de Larmor. On utilisera la base $|\pm, \pm\rangle$ formée par le produit tensoriel des vecteurs propres de S_{1z} par ceux S_{2z} .

1- Quels sont les valeurs propres et les vecteurs propres de H_z .

2- Un champ magnétique oscillant $\vec{B}_1 \cos \omega t$ peut induire des transitions entre les niveaux d'énergie E_n et E_m caractérisés par les vecteurs propres $|n\rangle$ et $|m\rangle$ si la condition de Bohr est remplie ($\hbar\omega = E_n - E_m$). La probabilité de transition correspondante P_{nm} est proportionnelle à :

$$P_{nm} \propto \left| \langle n | \vec{B}_1 \cdot (\vec{S}_1 + \vec{S}_2) | m \rangle \right|^2$$

Montrer que si $\vec{B}_1$ est parallèle à $\vec{Ox}$, il n'y a qu'une fréquence de transition permise. Donner sa valeur en sec^{-1} .

3- On suppose que les protons restent immobiles pendant le temps d'une expérience (cas des solides). L'interaction la plus importante entre les deux spins est l'interaction dipolaire, dont la partie essentielle s'écrit :

$$H_d = D(\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 - 3S_{1z}S_{2z})$$

a- Calculer le commutateur de H_z et H_d

b- Montrer que H_d peut se mettre sous la forme :

$$H_d = \frac{1}{2} D (S_{1+}S_{2-} + S_{1-}S_{2+} - 4S_{1z}S_{2z})$$



Page de titre

Sommaire



Page 708 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

avec

$$S_{1\pm} = S_{1x} \pm iS_{1y}$$

$$S_{2\pm} = S_{2x} \pm iS_{2y}$$

c- Ecrire dans la base $|\pm, \pm\rangle$, les matrices représentatives de H_z et H_d .

d- Quels sont les niveaux d'énergie du système décrit par l'hamiltonien :

$$H = H_z + H_d$$

e- Quelles sont les fréquences de transition permises dans le cas où $\vec{B}_1$ est parallèle à $\vec{Ox}$.

4- On admet que

$$D = \frac{\gamma^2}{2r^3}(1 - 3\cos^2\theta)$$

où r est la distance entre les deux protons et θ l'angle que fait l'axe proton-proton avec le champ magnétique $\vec{B}_0$.

On applique un champ oscillant $\vec{B}_1 \cos \omega_0 t$ suivant l'axe $\vec{Ox}$ et on fait varier (lentement) le champ B_0 . Montrer que le spectre de résonance est composé de raies correspondants aux valeurs du champ :

$$B_0 = B^* \pm \frac{3}{4}\gamma\hbar \frac{(1 - 3\cos^2\theta)}{r^3}$$



Page de titre

Sommaire



Page 709 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

où B^* est le champ de résonance d'un proton isolé.

Calculer l'écart maximum entre les raies en Gauss, sachant que :

$r = 1.6 \text{ \AA}$ et $h = 6.610^{-27} \text{ erg s}^{-1}$ (on effectuera les calculs en unités CGS).

5- En solution, la molécule a des mouvements extrêmement rapides (temps de rotation de l'ordre de 10^{-11} sec). Montrer que l'interaction dipolaire moyennée pour toutes les valeurs de θ est nulle (il en résulte qu'il est possible d'observer dans les liquides des structures de raies causées par des interactions bien inférieures à l'interaction dipolaire).

EP 9.9 : Spineur de l'atome d'hydrogène dans un champ magnétique

On considère un atome d'hydrogène plongé dans un champ magnétique $\vec{B}$ défini par :

$$\vec{B} = B_1 \cos \omega t \vec{i} + B_1 \sin \omega t \vec{j} + B_0 \vec{k}$$

où $\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$ sont les vecteurs de base du référentiel galiléen $R(oxyz)$ et B_1 et B_0 telle que $B_1 < B_0$.

1- Montrer que l'hamiltonien de spin de l'électron est donné par :

$$H = \frac{ge\hbar}{4m} (\sigma_x B_1 \cos \omega t + \sigma_y B_1 \sin \omega t + \sigma_z B_0)$$

où g est le facteur de Landé de l'électron, m sa masse, e sa charge et σ_x, σ_y et σ_z les matrices de Pauli.



Page de titre

Sommaire



Page 710 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Ecrire l'hamiltonien H sous forme matricielle.

2- Ecrire et résoudre l'équation aux valeurs propres de H . On décrira pour cela l'état du système par le spineur $\begin{pmatrix} \varphi_+(t) \\ \varphi_-(t) \end{pmatrix}$ qui représente la décomposition de la fonction d'onde totale sur la base $\{|\pm\rangle\}$ formée par les vecteurs propres de S_z .

On posera :

$$\omega_0 = \frac{geB_0}{4m}, \quad \omega_1 = \frac{geB_1}{4m} \text{ et } \omega_L = 2\omega_0$$

3- En supposant qu'à $t = 0$ l'électron se trouve dans l'état d'énergie le plus bas, calculer la probabilité de retournement de spin.

4- Montrer que dans le cas où ω est très proche de la fréquence de Larmor ω_L on peut exciter l'électron de l'état $m_S = -\frac{1}{2}$ à l'état $m_S = +\frac{1}{2}$.

5- Citer deux applications importantes de ce phénomène en spectroscopie.

EP 9.10 : Equation de Pauli et courant de spin

Lorsqu'on ne tient pas compte du spin, on montre que l'hamiltonien d'un électron en mouvement dans un champ électromagnétique a pour expression :

$$H_0 = \frac{1}{2m}(\vec{P} - \frac{q}{c}\vec{A})^2 + qU$$

où m , q et $\vec{P}$ sont respectivement la masse, la charge et l'impulsion de l'électron, $\vec{A}$ est le potentiel vecteur et U le potentiel scalaire. c est la célérité de la lumière.



Page de titre

Sommaire



Page 711 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

1- Montrer qu'en tenant compte du spin, l'hamiltonien de l'électron s'écrit sous la forme :

$$H = H_0 + W$$

avec

$$W = -\vec{\mathcal{M}}\vec{B} = \mu_B \vec{\sigma} \vec{B}$$

où $\vec{\mathcal{M}}$ est le moment magnétique de l'électron, μ_B le magnéton de Bohr, $\vec{\sigma}$ un opérateur hermitique associé aux matrices de Pauli et $\vec{B}$ le champ magnétique associé à l'onde électromagnétique.

2- Ecrire l'équation de Schrödinger décrivant les états quantiques de l'électron. Cette équation qui inclue le spin est appelée équation de Pauli.

Montrer que les fonctions d'onde de l'électron sont des spineurs, c'est à dire des fonctions à deux composantes qui s'écrivent sous la forme : $\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$

3- Montrer que le vecteur densité de courant $\vec{j}$ des électrons est donné par :

$$\vec{j} = -\frac{i\hbar}{2m} \left[\psi^+ \vec{\nabla} \psi - (\vec{\nabla} \psi^+) \psi \right] - \frac{q}{mc} \vec{A} \psi^+ \psi$$

En déduire l'expression de $\vec{j}$ en fonction des composantes ψ_1 et ψ_2 et de leurs complexes conjuguées.

Déterminer alors le vecteur densité de courant électrique $\vec{j}_e$.



Page de titre

Sommaire



Page 712 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

4- On remarquera que l'expression précédente ne contient pas le spin et correspond plutôt à la densité de courant produite par le mouvement orbital des électrons. Cependant le spin de l'électron produit aussi un moment magnétique qui peut être exprimé par un courant. On appellera le vecteur densité correspondant vecteur densité de courant de spin $\vec{j}_s$.

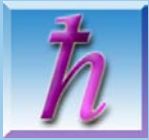
Expliquer pourquoi $\vec{j}_s$ ne peut pas apparaître dans le formalisme utilisé dans la question 3.

5- Pour calculer le vecteur densité de courant de spin on utilise l'équation de Maxwell-Ampère et on remplace l'aimantation par la densité moyenne du moment magnétique $\langle \vec{\mathcal{M}} \rangle$ obtenue en moyennant sur les états de spin.

a- Montrer que : $\langle \vec{\mathcal{M}} \rangle = -\mu_B \psi^\dagger \vec{\sigma} \psi$

b- Montrer alors que le vecteur densité de courant de spin $\vec{j}_s$ a pour expression :

$$\vec{j}_s = -\mu_B c \operatorname{rot}(\psi^\dagger \vec{\sigma} \psi)$$



Page de titre

Sommaire



Page 713 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Chapitre 10

Addition de deux moments cinétiques



Page de titre

Sommaire



Page 714 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

En mécanique classique le moment cinétique total $\vec{J}$ d'un système isolé est une constante du mouvement. Lorsqu'on réunit deux tels systèmes le moment cinétique total est la somme $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$ de leurs moments cinétiques individuels.

* Si les deux systèmes sont sans interaction alors les moments cinétiques $\vec{J}_1$ et $\vec{J}_2$ correspondants se conservent et il en est de même pour le moment cinétique total $\vec{J}$.

* Si au contraire, les deux systèmes interagissent entre eux, $\vec{J}_1$ et $\vec{J}_2$ évoluent au cours du temps et seul le moment cinétique total est une constante du mouvement. Dans ce cas $\vec{J}$ s'obtient simplement en effectuant l'addition vectorielle représentée sur la figure 10.1 :

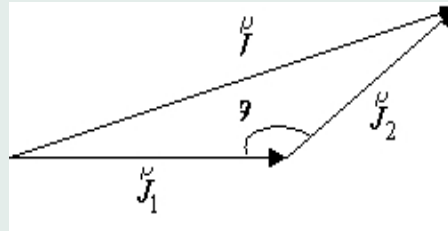
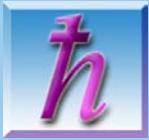


Figure 10.1 : Addition de deux moments cinétiques classiques.

Les composantes de $\vec{J}$ dans un référentiel orthonormé $R(Oxyz)$ sont les



Page de titre

Sommaire



Page 715 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

sommes des composantes de $\vec{J}_1$ et $\vec{J}_2$:

$$\begin{cases} J_x = J_{1x} + J_{2x} \\ J_y = J_{1y} + J_{2y} \\ J_z = J_{1z} + J_{2z} \end{cases} \quad (10.1)$$

Le module au carré de $\vec{J}$ est :

$$\vec{J}^2 = \left(\vec{J}_1 + \vec{J}_2 \right)^2 = J_1^2 + J_2^2 + 2\vec{J}_1 \vec{J}_2 = J_1^2 + J_2^2 + 2J_1 J_2 \cos \theta \quad (10.2)$$

Le module de $\vec{J}$ satisfait alors à la règle dite du triangle :

$$|\mathbf{J}_1 - \mathbf{J}_2| \leq \mathbf{J} \leq \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2 \quad (10.3)$$

Les situations extrêmes correspondent au cas où $\vec{J}_1$ et $\vec{J}_2$ sont colinéaires et de même sens ($\theta = 0$) et colinéaires et de sens opposés ($\theta = \pi$).

En mécanique quantique on introduit les observables moments cinétiques $\vec{J}_1$ et $\vec{J}_2$ associées aux deux systèmes dont les hamiltoniens sont H_1 et H_2 et on définit l'opérateur moment cinétique total par $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$.

* Si ces deux systèmes sont sans interaction, l'hamiltonien du système global est $H = H_1 + H_2$.



Page de titre

Sommaire



Page 716 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Comme nous savons que les trois composantes d'un moment cinétique d'un système commutent avec l'hamiltonien de ce système et que les observables liées à l'un des systèmes commutent avec toutes celles qui sont associées à l'autre on a :

$$[\vec{J}_1, H_1] = [\vec{J}_2, H_2] = 0 \quad \text{et} \quad [\vec{J}_1, H_2] = [\vec{J}_2, H_1] = 0 \quad (10.4)$$

Il vient alors que :

$$[\vec{J}_1, H] = [\vec{J}_2, H] = [\vec{J}, H] = 0 \quad (10.5)$$

$\vec{J}_1$, $\vec{J}_2$ et $\vec{J}$ sont donc séparément des constantes du mouvement.

* Si au contraire les deux systèmes sont couplés par un hamiltonien d'interaction H_{12} , l'hamiltonien du système global est :

$$H = H_1 + H_2 + H_{12} \quad (10.6)$$

$\vec{J}_1$ (ou $\vec{J}_2$) commute avec H_1 et H_2 mais non en général avec H_{12} . $\vec{J}_1$ et $\vec{J}_2$ ne sont plus constantes du mouvement. Par contre pour le système global, le moment cinétique total $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$ commute avec H et est donc constante du mouvement.

On ne peut dans ce cas faire une construction vectorielle comme en mécanique classique et il s'agit de déterminer les valeurs propres et les



Page de titre

Sommaire



Page 717 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

vecteurs propres de J^2 et J_z à partir des valeurs propres et des vecteurs propres de J_1^2 , J_{1z} et J_2^2 , J_{2z}

Signalons enfin que la relation d'addition : $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$ signifie en réalité :

$$\vec{J} = \vec{J}_1 \otimes \mathcal{I}_2 + \mathcal{I}_1 \otimes \vec{J}_2 \quad (10.7)$$

où $\mathcal{I}_1$ est l'opérateur identité dans l'espace ξ_1 associé à $\vec{J}_1$ et $\mathcal{I}_2$ est l'opérateur identité dans l'espace ξ_2 associé à $\vec{J}_2$.

Nous allons dans ce chapitre construire la base des états propres de $\vec{J}^2$ et J_z à partir de celle formée par les états propres de J_1^2 , J_{1z} , J_2^2 et J_{2z} et présenter les règles d'addition qui permettent de déterminer les valeurs propres de J^2 et J_z .

Nous traiterons d'abord le cas simple où les deux moments cinétiques qu'on va additionner sont des spins $\frac{1}{2}$ et nous aborderons ensuite le cas général de la composition de deux moments cinétiques quelconques.



Page de titre

Sommaire



Page 718 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

1. Addition de deux spins $\frac{1}{2}$

On considère un système de deux particules de spins $\frac{1}{2}$ et on note $\vec{S}_1$ et $\vec{S}_2$ leurs opérateurs de spin respectifs.

1.1. Espace des états ξ

Nous avons déjà défini dans le chapitre 9 l'espace des états de ce système. C'est un espace ξ_S à quatre dimensions obtenu en faisant le produit tensoriel des espaces de spins ξ_{S_1} et ξ_{S_2} des deux particules. Une base de cet espace est formée des états propres des prolongements dans l'espace produit des observables $S_1^2, S_{1z}, S_2^2, S_{2z}$. Cette base notée $\{|s_1, s_2, m_1, m_2\rangle\}$ ou plus simplement $\{|m_1, m_2\rangle\}$ s'écrit explicitement sous la forme :

$$\{|m_1, m_2\rangle\} = \{|+, +\rangle, |+, -\rangle, |-, +\rangle, |-, -\rangle\} \quad (10.8)$$



Page de titre

Sommaire



Page 719 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

L'action de S_1^2 , S_{1z} , S_2^2 et S_{2z} sur les vecteurs de cette base est :

$$\begin{aligned}
 S_1^2 |m_1, m_2\rangle &= s_1 (s_1 + 1) \hbar |m_1, m_2\rangle = \frac{3}{4} \hbar^2 |m_1, m_2\rangle \\
 S_2^2 |m_1, m_2\rangle &= s_2 (s_2 + 1) \hbar |m_1, m_2\rangle = \frac{3}{4} \hbar^2 |m_1, m_2\rangle \\
 S_{1z} |m_1, m_2\rangle &= m_1 \hbar |m_1, m_2\rangle \\
 S_{2z} |m_1, m_2\rangle &= m_2 \hbar |m_1, m_2\rangle
 \end{aligned} \tag{10.9}$$

où : $s_1 = s_2 = \frac{1}{2}$ et $m_1 = \pm \frac{1}{2}$, $m_2 = \pm \frac{1}{2}$

1.2. Spin total $\vec{S}$

Le spin total $\vec{S}$ du système des deux particules est défini par la relation :

$$\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2 \tag{10.10}$$

Comme les spins $\vec{S}_1$ et $\vec{S}_2$ sont des moments cinétiques, il est facile de montrer que $\vec{S}$ est aussi un moment cinétique en calculant les commutateurs



Page de titre

Sommaire



Page 720 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

de ses composantes. On a alors :

$$[S_x, S_y] = [S_{1x} + S_{2x}, S_{1y} + S_{2y}] \quad (10.11)$$

$$= [S_{1x}, S_{1y}] + [S_{2x}, S_{2y}] = i\hbar(S_{1z} + S_{2z}) = i\hbar S_z$$

$$[S_y, S_z] = [S_{1y} + S_{2y}, S_{1z} + S_{2z}] \quad (10.12)$$

$$= [S_{1y}, S_{1z}] + [S_{2y}, S_{2z}] = i\hbar(S_{1x} + S_{2x}) = i\hbar S_x$$

$$[S_z, S_x] = [S_{1z} + S_{2z}, S_{1x} + S_{2x}] \quad (10.13)$$

$$= [S_{1z}, S_{1x}] + [S_{2z}, S_{2x}] = i\hbar(S_{1y} + S_{2y}) = i\hbar S_y$$

On montre également qu'on a :

$$[\vec{S}^2, \vec{S}] = 0 \quad (10.14)$$

$\vec{S}$ satisfait donc à la définition du moment cinétique ; comme il est la somme de deux spins, il est alors un opérateur de spin.

1.3. Divers E.C.O.C. dans ξ_S

Nous savons que les observables S_1^2, S_2^2, S_{1z} et S_{2z} admettent un système commun de vecteurs propres qui constitue la base $\{|m_1, m_2\rangle\}$.



Page de titre

Sommaire



Page 721 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

L'ensemble $\{S_1^2, S_2^2, S_{1z}, S_{2z}\}$ est donc un ensemble complet d'observables qui commutent dans l'espace produit ξ_S .

Cet E.C.O.C. est bien adapté pour les spins individuels mais ne l'est pas pour le spin total.

Un E.C.O.C. plus adapté pour le spin total du système est celui constitué des observables $S_1^2, S_2^2, \vec{S}^2, S_z$.

$\{S_1^2, S_2^2, \vec{S}^2, S_z\}$ est bien un E.C.O.C. ; en effet :

$[S_1^2, S_2^2] = 0$: car les deux opérateurs $\vec{S}_1$ et $\vec{S}_2$ agissent dans des espaces

différents.

$[S_1^2, \vec{S}^2] = 0$: car S_1^2 commute avec $\vec{S}_1$ et $\vec{S}_2$ et donc avec $\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$ et par suite avec $\vec{S}^2$.

$[S_1^2, S_z] = 0$: S_1^2 commute avec S_{1z} et S_{2z} donc avec $S_{1z} + S_{2z} = S_z$

De même :

$$[S_2^2, \vec{S}^2] = [S_2^2, S_z] = 0$$

Enfin pour le commutateur $[\vec{S}^2, S_z]$ il faut effectuer le calcul car à priori $\vec{S}^2$



Page de titre

Sommaire



Page 722 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

ne commute ni avec S_{1z} ni avec S_{2z} ; on a :

$$\begin{aligned} [\vec{S}^2, S_{1z}] &= [S_1^2 + S_2^2 + 2\vec{S}_1 \vec{S}_2, S_{1z}] = [2\vec{S}_1 \vec{S}_2, S_{1z}] \\ &= 2[S_{1x}S_{2x} + S_{1y}S_{2y}, S_{1z}] = 2i\hbar(-S_{1y}S_{2x} + S_{1x}S_{2y}) \end{aligned} \quad (10.15)$$

$$\begin{aligned} [\vec{S}^2, S_{2z}] &= [S_1^2 + S_2^2 + 2\vec{S}_1 \vec{S}_2, S_{2z}] = [2\vec{S}_1 \vec{S}_2, S_{2z}] \\ &= 2[S_{1x}S_{2x} + S_{1y}S_{2y}, S_{2z}] = 2i\hbar(S_{1y}S_{2x} - S_{1x}S_{2y}) \end{aligned} \quad (10.16)$$

de telle sorte que :

$$[\vec{S}^2, S_z] = [\vec{S}^2, S_{1z} + S_{2z}] = [\vec{S}^2, S_{1z}] + [\vec{S}^2, S_{2z}] = 0 \quad (10.17)$$

Les quatre opérateurs $S_1^2, S_2^2, \vec{S}^2, S_z$ commutent donc deux à deux, ils constituent alors un E.C.O.C. et admettent une base de vecteurs propres communs dans laquelle chacun d'eux est diagonal.

Il faut remarquer que l'ensemble $\{S_1^2, S_2^2, \vec{S}^2, S_z\}$ est différent de l'ensemble $\{S_1^2, S_2^2, S_{1z}, S_{2z}\}$ car $\vec{S}^2$ ne commute ni avec S_{1z} ni avec S_{2z} . $\{S_1^2, S_2^2, \vec{S}^2, S_z\}$ étant un E.C.O.C., la donnée des valeurs propres de ces opérateurs spécifie complètement le vecteur propre correspondant qu'on note : $|s_1, s_2, S, M\rangle$.



Page de titre

Sommaire



Page 723 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Comme $s_1 = s_2 = \frac{1}{2}$, il est plus simple de noter ce vecteur $|S, M\rangle$ en sous-entendant les valeurs propres de S_1^2 et S_2^2 .

Les vecteurs $|S, M\rangle$ sous-tendent donc une nouvelle base de l'espace ξ_s qu'on note base $\{|S, M\rangle\}$.

Le spin total $\vec{S}$ étant un moment cinétique, les valeurs propres de $\vec{S}^2$ et S_z sont de la forme $S(S+1)\hbar^2$ et $M\hbar$ où M varie par saut d'une unité de $-S$ à $+S$. Les vecteurs de base $|S, M\rangle$ vérifient donc les équations :

$$S_1^2 |S, M\rangle = S_2^2 |S, M\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2 |S, M\rangle \quad (10.18)$$

$$\vec{S}^2 |S, M\rangle = S(S+1)\hbar^2 |S, M\rangle \quad (10.19)$$

$$S_z |S, M\rangle = M\hbar |S, M\rangle \quad (10.20)$$

Il s'agit de trouver les valeurs que peuvent prendre S et M et d'exprimer les vecteurs de base $|S, M\rangle$ adaptés au spin total $\vec{S}$ en fonction des vecteurs de base $|m_1, m_2\rangle$ adaptés aux spins individuels $\vec{S}_1$ et $\vec{S}_2$. Nous allons pour ce faire construire et diagonaliser les matrices 4×4 représentant S_z et $\vec{S}^2$ dans la base $\{|m_1, m_2\rangle\}$.



Page de titre

Sommaire



Page 724 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

1.4. Valeurs et vecteurs propres de S_z

L'équation aux valeurs propres S_z s'écrit dans la base $\{|m_1, m_2\rangle\}$:

$$\begin{aligned}
 S_z |m_1, m_2\rangle &= (S_{1z} + S_{2z}) |m_1, m_2\rangle \\
 &= S_{1z} |m_1\rangle \otimes |m_2\rangle + |m_1\rangle \otimes S_{2z} |m_2\rangle \\
 &= m_1 \hbar |m_1, m_2\rangle + m_2 \hbar |m_1, m_2\rangle \\
 &= (m_1 + m_2) \hbar |m_1, m_2\rangle \\
 &= M \hbar |m_1, m_2\rangle
 \end{aligned}
 \tag{10.21}$$

$|m_1, m_2\rangle$ est donc état propre de S_z avec la valeur propre $M \hbar$ avec :

$$\mathbf{M} = \mathbf{m}_1 + \mathbf{m}_2 \tag{10.22}$$

comme m_1 et m_2 peuvent être égaux à $\pm \frac{1}{2}$ on en déduit que M peut prendre les valeurs : $+1, 0$ et -1 .

- $M = +1$ correspond à :

$$\begin{cases} m_1 = +\frac{1}{2} \\ m_2 = +\frac{1}{2} \end{cases} \tag{10.23}$$

- $M = 0$ correspond à :

$$\begin{cases} m_1 = +\frac{1}{2} \\ m_2 = -\frac{1}{2} \end{cases} \quad \text{ou à} \quad \begin{cases} m_1 = -\frac{1}{2} \\ m_2 = +\frac{1}{2} \end{cases} \tag{10.24}$$



Page de titre

Sommaire



Page 725 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

- $M = -1$ correspond à :

$$\begin{cases} m_1 = -\frac{1}{2} \\ m_2 = -\frac{1}{2} \end{cases} \quad (10.25)$$

$M = +1$ et $M = -1$ sont des valeurs propres non dégénérées de S_z auxquelles correspondent un seul vecteur propre, $|++\rangle$ pour $M = +1$ et $|--\rangle$ pour $M = -1$. $M = 0$ est une valeur propre doublement dégénérée à laquelle sont associés les vecteurs propres orthogonaux $|+-\rangle$ et $|-+\rangle$ ou toute combinaison linéaire ($\alpha|+-\rangle + \beta|-+\rangle$) de ces vecteurs.

La matrice représentant S_z dans la base $\{|++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle, |--\rangle\}$ est donc :

$$S_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (10.26)$$

1.5. Valeurs et vecteurs propres de $\vec{S}^2$

Pour déterminer les valeurs propres de $\vec{S}^2$ on va calculer et diagonaliser la matrice représentant l'observable $\vec{S}^2$ dans la base $\{|m_1, m_2\rangle\}$. Cette matrice ne sera pas diagonale car $\vec{S}^2$ ne commute pas avec S_{1z} et S_{2z} .



Page de titre

Sommaire



Page 726 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

1.5.1. Matrice représentant $\vec{S}^2$

On a :

$$\begin{aligned}
 \vec{S}^2 &= \left(\vec{S}_1 + \vec{S}_2 \right)^2 \\
 &= S_1^2 + S_2^2 + 2 \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \\
 &= S_1^2 + S_2^2 + 2 (S_{1x}S_{2x} + S_{1y}S_{2y} + S_{1z}S_{2z})
 \end{aligned}
 \tag{10.27}$$

L'action de S_1^2 , S_2^2 et S_{1z} et S_{2z} sur les vecteurs de base $|m_1, m_2\rangle$ est connue mais il n'en est pas de même pour l'action de S_{1x} , S_{1y} , S_{2x} , S_{2y} . On va donc remplacer ces derniers opérateurs par leur expression en fonction des opérateurs $S_{\pm}$ dont l'action sur les $|m_1, m_2\rangle$ est donnée au chapitre 7 :

On a alors :

$$\begin{aligned}
 S_{1x} &= \frac{S_{1+} + S_{1-}}{2} & S_{2x} &= \frac{S_{2+} + S_{2-}}{2} \\
 S_{1y} &= \frac{S_{1+} - S_{1-}}{2i} & S_{2y} &= \frac{S_{2+} - S_{2-}}{2i}
 \end{aligned}
 \tag{10.28}$$

Ce qui donne :

$$\begin{aligned}
 4S_{1x}S_{2x} &= S_{1+}S_{2+} + S_{1-}S_{2-} + S_{1+}S_{2-} + S_{1-}S_{2+} \\
 4S_{1y}S_{2y} &= -S_{1+}S_{2+} - S_{1-}S_{2-} + S_{1+}S_{2-} + S_{1-}S_{2+}
 \end{aligned}
 \tag{10.29}$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 727 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

Soit :

$$2(S_{1x}S_{2x} + S_{1y}S_{2y}) = S_{1+}S_{2-} + S_{1-}S_{2+}$$

d'où :

$$\vec{S}^2 = S_1^2 + S_2^2 + 2S_{1z}S_{2z} + S_{1+}S_{2-} + S_{1-}S_{2+} \quad (10.30)$$

et l'on a :

$$\begin{aligned} \vec{S}^2 |m_1, m_2\rangle &= S_1^2 |m_1, m_2\rangle + S_2^2 |m_1, m_2\rangle + 2S_{1z}S_{2z} |m_1, m_2\rangle \\ &\quad + (S_{1+}S_{2-} + S_{1-}S_{2+}) |m_1, m_2\rangle \end{aligned} \quad (10.31)$$

soit pour chacun des termes :

$$S_1^2 |m_1, m_2\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2 |m_1, m_2\rangle$$

$$S_2^2 |m_1, m_2\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2 |m_1, m_2\rangle$$

$$2S_{1z}S_{2z} |m_1, m_2\rangle = 2m_1m_2\hbar^2 |m_1, m_2\rangle \quad (10.32)$$

$$\begin{aligned} S_{1\pm}S_{2\mp} |m_1, m_2\rangle &= \hbar^2 \sqrt{\frac{3}{4} - m_1(m_1 \pm 1)} \times \\ &\quad \sqrt{\frac{3}{4} - m_2(m_2 \mp 1)} |m_1 \pm 1, m_2 \mp 1\rangle \end{aligned}$$



Page de titre

Sommaire



Page 728 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Les $(m_i \pm 1)$ et $(m_i \mp 1)$, $i = 1, 2$, ne doivent jamais être supérieures à $+\frac{1}{2}$ ou inférieures à $-\frac{1}{2}$, sinon le ket serait nul ($S_{i+} |+\rangle = S_{i-} |-\rangle = 0$).

On en déduit alors que :

$$\begin{aligned} \vec{S}^2 |m_1, m_2\rangle &= \left(\frac{3}{2} + 2m_1m_2\right) |m_1, m_2\rangle + \\ &\sqrt{\frac{3}{4} - m_1(m_1 + 1)} \sqrt{\frac{3}{4} - m_2(m_2 - 1)} |m_1 + 1, m_2 - 1\rangle + \\ &\sqrt{\frac{3}{4} - m_1(m_1 - 1)} \sqrt{\frac{3}{4} - m_2(m_2 + 1)} |m_1 - 1, m_2 + 1\rangle \end{aligned}$$

En appliquant cette équation aux différents vecteurs de la base $\{|m_1, m_2\rangle\}$ on obtient :

$$\begin{cases} \vec{S}^2 |++\rangle = 2\hbar^2 |++\rangle \\ \vec{S}^2 |+-\rangle = \hbar^2 (|+-\rangle + |-+\rangle) \\ \vec{S}^2 |-+\rangle = \hbar^2 (|-+\rangle + |+-\rangle) \\ \vec{S}^2 |--\rangle = 2\hbar^2 |--\rangle \end{cases} \quad (10.33)$$

La matrice représentant $\vec{S}^2$ dans la base $\{|++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle, |--\rangle\}$ s'écrit


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 729 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

alors :

$$\vec{S}^2 = \hbar^2 \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \quad (10.34)$$

1.5.2. Valeurs et vecteurs propres de $\vec{S}^2$

La matrice (10.34) se décompose en deux sous-matrices 1×1 et une sous-matrice 2×2 . Pour les matrices de dimension 1, les valeurs propres sont immédiates et valent $2\hbar^2$ et les vecteurs propres qui leur correspondent sont $|u_1\rangle = |++\rangle$ et $|u_2\rangle = |--\rangle$ comme l'indiquent les équations (10.33).

Pour la matrice de dimension 2, les valeurs propres s'obtiennent à partir de l'équation caractéristique :

$$(1 - \lambda)^2 - 1 = 0 \quad (10.35)$$

dont les solutions $\lambda = 0$ et $\lambda = 2$ conduisent aux valeurs propres 0 et $2\hbar^2$ de $\vec{S}^2$.

Les vecteurs propres correspondant à ces valeurs propres s'obtiennent en résolvant :

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \quad (10.36)$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 730 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

On trouve après un calcul élémentaire :

$$|u_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+-\rangle + |-+\rangle) \quad (10.37)$$

$$|u_4\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+-\rangle - |-+\rangle) \quad (10.38)$$

L'observable $\vec{S}^2$ possède donc deux valeurs propres distinctes 0 et $2\hbar^2$, la première est non dégénérée et lui correspond le vecteur $|u_4\rangle$, la deuxième est trois fois dégénérée et les trois vecteurs $|u_1\rangle$, $|u_2\rangle$ et $|u_3\rangle$ qui lui correspondent forment une base orthonormée dans le sous-espace de dégénérescence qui lui est associé.

En résumé, les valeurs propres et vecteurs propres de $\vec{S}^2$ sont tels que :

Valeur propre	Vecteur propre
$2\hbar^2$	$ u_1\rangle = ++\rangle$ $ u_2\rangle = --\rangle$ $ u_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (+-\rangle + -+\rangle)$
0	$ u_4\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (+-\rangle - -+\rangle)$



Page de titre

Sommaire

◀

▶

◀

▶

Page 731 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

1.6. Base $|S, M\rangle$

Les valeurs propres de $\vec{S}^2$ sont $S(S+1)\hbar^2$, comme elles sont égales respectivement à 0 et $2\hbar^2$, on a :

$$\begin{array}{ll} \text{Pour } 0 & : S(S+1)\hbar^2 = 0 \quad \text{soit } S = 0 \\ \text{Pour } 2\hbar^2 & : S(S+1)\hbar^2 = 2\hbar^2 \quad \text{soit } S = 1 \end{array}$$

Le nombre quantique S peut donc prendre deux valeurs $S = 0$ et $S = 1$. La première correspond au vecteur propre $|u_4\rangle$ qui est aussi vecteur propre de S_z avec la valeur propre $M = 0$. Nous notons ce vecteur $|0, 0\rangle$:

$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle - |-+\rangle) \quad (10.39)$$

La deuxième est associée à trois vecteurs propres $|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle$ qui sont également vecteurs propres de S_z avec les valeurs propres $M = 1, -1, 0$; on note ces vecteurs $|1, 1\rangle, |1, -1\rangle$ et $|1, 0\rangle$:

$$\left\{ \begin{array}{l} |1, 1\rangle = |++\rangle \\ |1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle - |-+\rangle) \\ |1, -1\rangle = |--\rangle \end{array} \right. \quad (10.40)$$



Page de titre

Sommaire



Page 732 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

La nouvelle base $|S, M\rangle$ adaptée à l'E.C.O.C. $\{S_1^2, S_2^2, \vec{S}^2, S_z\}$ est alors $\{|0, 0\rangle, |1, 1\rangle, |1, 0\rangle, |1, -1\rangle\}$. On peut vérifier aisément que cette base est orthonormée et complète.

A partir des relations (10.39) et (10.40) on peut d'ailleurs exprimer les vecteurs de l'ancienne base $\{|m_1, m_2\rangle\}$ en fonction des $|S, M\rangle$, on aura :

$$\begin{cases} |++\rangle = |1, 1\rangle \\ |--\rangle = |1, -1\rangle \\ |+-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1, 0\rangle + |0, 0\rangle) \\ |-+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1, 0\rangle - |0, 0\rangle) \end{cases} \quad (10.41)$$

1.7. Conclusion

Lorsqu'on compose deux spins $\frac{1}{2}$ ($s_1 = s_2 = \frac{1}{2}$), les valeurs propres $S(S+1)\hbar^2$ de $\vec{S}^2$ sont telles que S est égale soit à $s_1 + s_2 = 1$ soit à $s_1 - s_2 = 0$. Les valeurs propres $M\hbar$ de S_z sont telles que M prenne les valeurs comprises entre $-S$ et $+S$.

A chaque valeur de S est associée une famille de $2S + 1$ vecteurs orthogonaux (trois pour $S = 1$, un pour $S = 0$) correspondant aux $2S + 1$ valeurs possibles de M .

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 733 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

Les trois états $|1, 1\rangle$, $|1, 0\rangle$, $|1, -1\rangle$ correspondant à $S = 1$ et $M = 1, 0, -1$ constituent les trois composantes de ce que l'on appelle un triplet, l'état $|0, 0\rangle$ est appelé un singulet.

On remarque que les trois composantes du triplet sont symétriques par rapport à l'échange des deux spins, par contre l'état singulet est anti-symétrique par rapport à cet échange.



Page de titre

Sommaire



Page 734 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

2. Addition de deux moments cinétiques quelconques

Considérons un système physique formé par la réunion de deux systèmes qu'on notera (1) et (2). Soient $\vec{J}_1$ et $\vec{J}_2$ les observables de moments cinétiques respectifs de ces deux systèmes et $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$, le moment cinétique total du système global.

2.1. Espace des états

L'espace des états ξ_1 du système (1) est rapporté à la base $\{|j_1, m_1\rangle\}$ constituée des vecteurs propres communs à J_1^2 et J_{1z} et on a :

$$\begin{aligned} J_1^2 |j_1, m_1\rangle &= j_1(j_1 + 1) \hbar^2 |j_1, m_1\rangle \\ J_{1z} |j_1, m_1\rangle &= m_1 \hbar |j_1, m_1\rangle \\ J_{1\pm} |j_1, m_1\rangle &= \hbar^2 \sqrt{j_1(j_1 + 1) - m_1(m_1 \pm 1)} |j_1, m_1 \pm 1\rangle \end{aligned} \quad (10.42)$$

De même, l'espace des états ξ_2 du système (2) est rapporté à la base $\{|j_2, m_2\rangle\}$ formée des vecteurs propres communs à J_2^2 et J_{2z} de sorte qu'on



Page de titre

Sommaire



Page 735 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

a :

$$\begin{aligned}
 J_2^2 |j_2, m_2\rangle &= j_2(j_2 + 1) \hbar^2 |j_2, m_2\rangle \\
 J_{2z} |j_2, m_2\rangle &= m_2 \hbar |j_2, m_2\rangle \\
 J_{2\pm} |j_2, m_2\rangle &= \hbar^2 \sqrt{j_2(j_2 + 1) - m_2(m_2 \pm 1)} |j_2, m_2 \pm 1\rangle
 \end{aligned} \quad (10.43)$$

En toute généralité on aurait dû noter ces vecteurs $|\alpha_1, j_1, m_1\rangle$ et $|\alpha_2, j_2, m_2\rangle$ où α_1 et α_2 sont des nombre quantiques décrivant les valeurs propres d'autres observables éventuelles agissant dans ξ_1 ou ξ_2 et formant des E.C.O.C. avec $\{J_1^2, J_z\}$ ou $\{J_2^2, J_z\}$. Nous avons préféré omettre ces nombres dans l'écriture des vecteurs de base dans le souci d'alléger l'exposé.

L'espace des états du système global est le produit tensoriel de ξ_1 et ξ_2 :

$$\xi = \xi_1 \otimes \xi_2 \quad (10.44)$$

ξ est alors rapporté à la base formée par le produit tensoriel des bases de ξ_1 et ξ_2 et notée $\{|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle\}$ avec :

$$|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle = |j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle \quad (10.45)$$

Les espaces ξ_1 et ξ_2 peuvent être considérés comme des sommes directes de sous-espaces $\xi_1(j_1)$ et $\xi_2(j_2)$ de dimensions respectives $(2j_1+1)$ et $(2j_2+1)$.



Page de titre

Sommaire



Page 736 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

On a alors

$$\xi_1 = \sum_{\otimes} \xi_1(j_1) \quad \text{et} \quad \xi_2 = \sum_{\otimes} \xi_2(j_2) \quad (10.46)$$

Il s'ensuit que ξ est la somme directe des sous-espaces $\xi(j_1, j_2)$ obtenus par produit tensoriel de $\xi_1(j_1)$ et de $\xi_2(j_2)$:

$$\xi = \sum_{\oplus} \xi(j_1, j_2) \quad \text{avec} \quad \xi(j_1, j_2) = \xi_1(j_1) \otimes \xi_2(j_2) \quad (10.47)$$

$\xi(j_1, j_2)$ a pour dimension $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ et est invariant sous l'action de $\vec{J}_1$ et $\vec{J}_2$ et de toute fonction de $\vec{J}_1$ et $\vec{J}_2$.

2.2. Changement de base

Le vecteur de base $|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle$ est vecteur propre commun des observables $\vec{J}_1^2, \vec{J}_2^2, J_{1z}$ et J_{2z} avec les valeurs propres respectives $j_1(j_1 + 1)\hbar^2$, $j_2(j_2 + 1)\hbar^2$, $m_1\hbar$ et $m_2\hbar$.

L'ensemble $\{\vec{J}_1^2, \vec{J}_2^2, J_{1z}, J_{2z}\}$ constitue donc un E.C.O.C. dans ξ et la base $\{|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle\}$ est bien adaptée à l'étude des moments cinétiques individuels $\vec{J}_1$ et $\vec{J}_2$.



Page de titre

Sommaire



Page 737 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Pour l'étude du moment cinétique total $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$, il est plus commode de considérer, comme dans le cas de deux spins $\frac{1}{2}$, la base constituée des vecteurs propres communs à l'ensemble $\vec{J}_1^2, \vec{J}_2^2, \vec{J}^2$ et J_z .

Il est facile de montrer que $\vec{J}$ est un moment cinétique en s'assurant que ses composantes vérifient les relations de commutation canoniques.

Comme $\vec{J}_1$ et $\vec{J}_2$ commutent avec $\vec{J}_1^2$ et $\vec{J}_2^2$, il en est de même de $\vec{J}$, et donc $\vec{J}^2$ et J_z commutent avec $\vec{J}_1^2$ et $\vec{J}_2^2$ soit :

$$\begin{aligned} [\vec{J}^2, J_1^2] &= [\vec{J}^2, J_2^2] = 0 \\ [J_z, J_1^2] &= [J_z, J_2^2] = 0 \\ [J_1^2, J_2^2] &= 0 \end{aligned} \tag{10.48}$$

L'ensemble $\{J_1^2, J_2^2, \vec{J}^2, J_z\}$ constituent donc un E.C.O.C. et il s'agit de construire un système de vecteurs orthonormés commun à ces observables. La base ainsi obtenue sera mieux adaptée que la base $\{|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle\}$ à l'étude du moment cinétique total du système.

Notons que dans ce cas général aussi, l'ensemble $\{J_1^2, J_2^2, \vec{J}^2, J_z\}$ est différent de $\{J_1^2, J_2^2, J_{1z}, J_{2z}\}$ car J_{1z} et J_{2z} commutent effectivement avec J_z mais pas avec $\vec{J}^2$.



Page de titre

Sommaire

◀

▶

◀

▶

Page 738 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Nous noterons la nouvelle base $\{|j_1, j_2, J, M\rangle\}$ ou plus simplement $\{|J, M\rangle\}$ puisque j_1 et j_2 sont fixés. Les nombres quantiques J et M seront tels que :

$$\vec{J}^2 |J, M\rangle = J(J+1) \hbar^2 |J, M\rangle \quad (10.49)$$

$$J_z |J, M\rangle = M \hbar |J, M\rangle \quad (10.50)$$

Il s'agit alors de déterminer J et M en connaissant j_1 et j_2 et m_1 et m_2 .

2.3. Valeurs propres de $\mathbf{J}_z$ et degrés de dégénérescence

2.3.1. Valeurs propres de $\mathbf{J}_z$

A l'intérieur d'un sous-espace $\xi(j_1, j_2)$ de dimension $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$, l'équation aux valeurs propres de J_z s'écrit :

$$\begin{aligned} J_z |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle &= (J_{1z} + J_{2z}) |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle \\ &= (J_{1z} + J_{2z}) |j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle \\ &= J_{1z} |j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle + |j_1, m_1\rangle \otimes J_{2z} |j_2, m_2\rangle \\ &= m_1 \hbar |j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle + m_2 \hbar |j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle \\ &= (m_1 + m_2) \hbar |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle \\ &= M \hbar |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle \end{aligned} \quad (10.51)$$



Page de titre

Sommaire



Page 739 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Les valeurs $M\hbar$ de J_z sont donc telles que :

$$\mathbf{M} = \mathbf{m}_1 + \mathbf{m}_2 \quad (10.52)$$

Comme : $-j_1 \leq m_1 \leq j_1$ et $-j_2 \leq m_2 \leq j_2$, on aura alors :

$$-(\mathbf{j}_1 + \mathbf{j}_2) \leq \mathbf{M} \leq \mathbf{j}_1 + \mathbf{j}_2 \quad (10.53)$$

M prend les valeurs suivantes :

$$j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 2, \dots, -(j_1 + j_2) \quad (10.54)$$

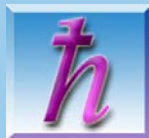
La relation (10.53) est appelée première règle de sélection.

2.3.2. Dégénérescence de $\mathbf{M}$

L'état correspondant à $M = j_1 + j_2$ est unique, par contre il y a deux façons de réaliser l'état correspondant à $M = j_1 + j_2 - 1$; on peut en effet avoir $(m_1 = j_1 - 1, m_2 = j_2)$ ou $(m_1 = j_1, m_2 = j_2 - 1)$: La valeur propre $M = j_1 + j_2 - 1$ est donc deux fois dégénérée. De façon générale la valeur propre $M = j_1 + j_2 - n$ aura une certaine dégénérescence.

Pour trouver le degré de dégénérescence $g_{j_1 j_2}(M)$ on utilise en général le procédé suivant :

On porte m_1 en abscisse et m_2 en ordonnée et à chaque vecteur $|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle$



Page de titre

Sommaire



Page 740 de 978

Retour

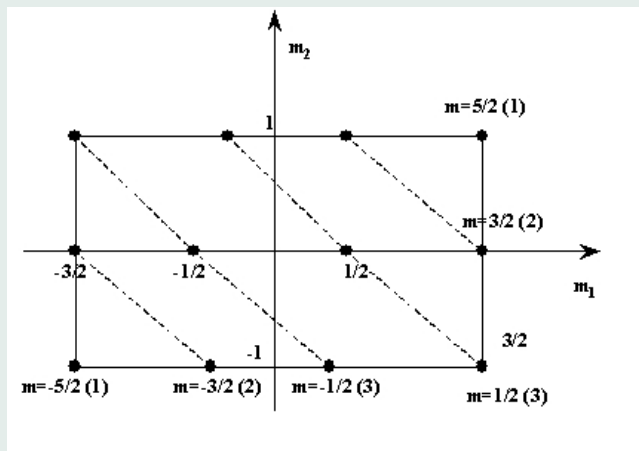
Plein écran

Fermer

Quitter

on fait correspondre un point de coordonnées (m_1, m_2) . Tous ces points sont à l'intérieur ou sur les cotés d'un rectangle dont les quatre sommets ont pour coordonnées (j_1, j_2) , $(j_1, -j_2)$, $(-j_1, -j_2)$, $(-j_1, j_2)$. Tous les points situés sur une même parallèle à la deuxième bissectrice correspondent à la même valeur de $M = m_1 + m_2$; leur nombre est donc égal à la dégénérescence de cette valeur de M .

Nous avons à titre d'exemple représenté sur la figure 10.2 le rectangle de dégénérescence correspondant à la composition de deux moments cinétiques $j_1 = \frac{3}{2}$ et $j_2 = 1$. Le degré de dégénérescence de M est noté entre parenthèses.





Page de titre

Sommaire



Page 741 de 978

Retour

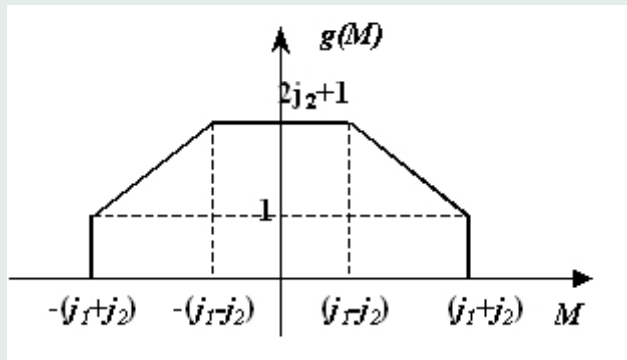
Plein écran

Fermer

Quitter

Figure10.2 : Dégénérescence des valeurs propres M de J_z

Ces résultats sont résumés sur la figure 10.3 qui montre la variation du degré de dégénérescence $g(M)$ en fonction des valeurs permises de M dans le cas général de la composition de deux moments cinétiques $\vec{J}_1$ et $\vec{J}_2$.

Figure10.3 : Variation de $g(M)$ en fonction de M



Page de titre

Sommaire



Page 742 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

2.4. Valeurs propres de $\vec{J}^2$:

2.4.1. Théorème fondamental d'addition

Les seules valeurs possibles de J qu'on peut obtenir en additionnant deux moments cinétiques $\vec{J}_1$ et $\vec{J}_2$ sont celles satisfaisant à la règle du triangle, c'est à dire :

$$|\mathbf{j}_1 + \mathbf{j}_2| \leq \mathbf{J} \leq \mathbf{j}_1 + \mathbf{j}_2 \quad (10.55)$$

2.4.2. Démonstration

La première règle de sélection (10.53) impose à M d'être comprise entre $-(j_1 + j_2)$ et $(j_1 + j_2)$, ce qui définit les valeurs maximales suivantes de m_1 et m_2 :

$$m_{1\max} = j_1 \quad (10.56)$$

$$m_{2\max} = j_2 \quad (10.57)$$

Comme : $-J \leq M \leq J$

Si l'on fixe m_1 et m_2 à leurs valeurs maximales, on obtient le maximum maximorum de J soit :

$$J_{\max} = j_1 + j_2 \quad (10.58)$$



Page de titre

Sommaire



Page 743 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

A chaque fois que J a une valeur permise, on peut lui associer un sous-espace $\xi(J)$ ayant $(2J + 1)$ dimensions qui s'identifie avec l'espace $\xi(j_1, j_2)$ défini par (10.47). La somme directe de tous ces sous-espaces forme l'espace ξ total.

On a donc :

$$\xi_{J_{\max}} \oplus \xi_{J_{\max}-1} \oplus \dots \oplus \xi_{J_{\min}} = \xi(j_1, j_2) = \xi_1(j_1) \otimes \xi_2(j_2) \quad (10.59)$$

Les dimensions des sous-espaces $\xi(J)$ exprimées avec J ou avec j_1 et j_2 doivent vérifier la relation :

$$\sum_{J_{\min}}^{J_{\max}} (2J + 1) = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1) \quad (10.60)$$

La somme de type $\sum_a^b J$ représente la somme d'une progression arithmétique de premier terme a , de dernier terme $b = a + n - 1$ et de raison 1. Sa valeur est donc :

$$\begin{aligned} \sum_a^b J &= \frac{1}{2}n(a + b) = \frac{1}{2}(b - a + 1)(a + b) \\ &= \frac{1}{2}\{b(b + 1) - a(a - 1)\} \end{aligned} \quad (10.61)$$



Page de titre

Sommaire



Page 744 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

La somme de type $\sum_a^b 1$ vaut quant à elle $b - (a - 1)$.

En reportant dans l'équation (10.60) on obtient :

$$\begin{aligned}
 \sum_{J_{\min}}^{j_1+j_2} (2J+1) &= 2 \sum_{J_{\min}}^{j_1+j_2} J + \sum_{J_{\min}}^{j_1+j_2} 1 \\
 &= \{(j_1+j_2)(j_1+j_2+1) - J_{\min}(J_{\min}-1)\} \\
 &\quad + \{(j_1+j_2) - (J_{\min}-1)\} \\
 &= (j_1+j_2)(j_1+j_2+2) - J_{\min}^2 + 1
 \end{aligned} \tag{10.62}$$

En égalant avec le deuxième membre de l'équation (10.60) on a :

$$(j_1+j_2)(j_1+j_2+2) - J_{\min}^2 + 1 = (2j_1+1)(2j_2+1) \tag{10.63}$$

qui donne après développement et simplification :

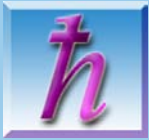
$$j_1^2 + j_2^2 - J_{\min}^2 = 2j_1j_2 \tag{10.64}$$

soit :

$$J_{\min}^2 = (j_1 - j_2)^2 \tag{10.65}$$

comme J est toujours positif ou nul on peut écrire

$$J_{\min} = |j_1 - j_2| \tag{10.66}$$

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 745 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

Ce qui démontre avec (10.58) le théorème fondamental d'addition qu'on appelle aussi la deuxième règle de sélection et qui s'écrit :

$$|\mathbf{j}_1 - \mathbf{j}_2| \leq \mathbf{J} \leq \mathbf{j}_1 + \mathbf{j}_2 \quad (10.67)$$



Page de titre

Sommaire



Page 746 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

j_1 , j_2 et J étant des entiers ou demi-entiers positifs ou nuls.

2.4.3. Valeur propre de $\vec{J}^2$

Les valeurs propres de $\vec{J}^2$ sont bien sûr $J(J+1)\hbar^2$ et l'on a :

$$\vec{J}^2 |J, M\rangle = J(J+1)\hbar^2 |J, M\rangle \quad (10.68)$$

$$J_z |J, M\rangle = M\hbar |J, M\rangle \quad (10.69)$$

Les vecteurs $|J, M\rangle$ appartiennent à l'espace $\xi(j_1, j_2) = \xi(J)$ et sont comme tous les vecteurs de cet espace vecteurs propres de J_1^2 et J_2^2 avec les valeurs propres $j_1(j_1+1)\hbar^2$ et $j_2(j_2+1)\hbar^2$ respectivement.

Remarquons que les valeurs de M sont toutes entières si j_1 et j_2 sont tous deux entiers ou tous deux demi-entiers, et toutes demi-entières si j_1 et j_2 sont l'un entier et l'autre demi-entier. Par conséquent les valeurs de J correspondantes sont elles aussi toutes entières dans le premier cas et toutes demi-entières dans le deuxième.



Page de titre

Sommaire



Page 747 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

2.5. Vecteurs propres communs à $\vec{J}^2$ et J_z

2.5.1. Coefficients de Clebsch-Gordan

A chaque couple (J, M) donné par les règles de sélection correspond un vecteur $|J, M\rangle$ qui est un vecteur propre commun à $\vec{J}^2$ et J_z . On supposera ce vecteur normé et on fixera sa phase de façon appropriée. Les vecteurs $|J, M\rangle$ constituent comme les vecteurs $|m_1, m_2\rangle$ une base orthonormée dans le sous-espace $\xi(j_1, j_2) = \xi(J)$. On passe d'une base à l'autre par la transformation unitaire :

$$|J, M\rangle = \sum_{m_1 m_2} |m_1, m_2\rangle \langle m_1, m_2 | J, M\rangle \quad (10.70)$$

où on a omis les nombres quantiques α, j_1, j_2 dans les kets pour en simplifier l'écriture.

Les coefficients $\langle m_1, m_2 | J, M\rangle$ de cette transformation sont appelés coefficients de Clebsch-Gordan (CG) ou coefficient d'addition vectorielle et ne dépendent que des nombres j_1, j_2, J, m_1, m_2, M ($\langle j_1, j_2, m_1, m_2 | J, M\rangle$). Ces coefficients permettent de connecter la base $\{|J, M\rangle\}$ adaptée au spin total à la base $\{|m_1, m_2\rangle\}$ adaptée aux spins individuels et de construire ainsi les vecteurs $|J, M\rangle$.


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 748 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

2.5.2. Détermination des coefficients de Clebsch-Gordan

2.5.2.1. Exigences

D'après précédemment le CG $\langle m_1, m_2 | J, M \rangle$ existe lorsque les deux règles de sélection sont satisfaites :

$$-(j_1 + j_2) \leq M \leq j_1 + j_2 \quad (10.71)$$

$$|j_1 - j_2| \leq J \leq j_1 + j_2 \quad (10.72)$$

avec $M = m_1 + m_2$

(i) La relation (10.70) définit les vecteurs $|J, M\rangle$ à une phase arbitraire près.

On admettra pour lever cet arbitraire que tous les CG sont réels c'est-à-dire :

$$\langle m_1, m_2 | J, M \rangle = \langle J, M | m_1 m_2 \rangle \quad (10.73)$$

En particulier pour la valeur maximale de J on aura :

$$\langle j_2, J - j_1 | J, J \rangle \geq 0 \quad (10.74)$$

(ii) Pour cette valeur maximale de J ($J = j_1 + j_2$ et $M = J$, donc $m_1 = j_1$ et $m_2 = j_2$) il n'existe qu'un seul coefficient CG possible car on a :

$$|j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle = \langle j_1, j_2 | j_1 + j_2, j_1 + j_2 \rangle |j_1, j_2\rangle \quad (10.75)$$



Page de titre

Sommaire



Page 749 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Comme les bases $\{|J, M\rangle\}$ et $\{|m_1, m_2\rangle\}$ sont orthonormées, cela impose que :

$$\langle j_1, j_2 | j_1 + j_2, j_1 + j_2 \rangle = 1 \quad (10.76)$$

Il n'existe en effet qu'un seul vecteur de poids maximum.

Les relations (10.74), (10.75) et (10.76) vont nous permettre de calculer tous les CG au moyen de relations de récurrence.

2.5.2.2. Relations de récurrence

Par application de l'opérateur J_+ au ket $|J, M\rangle$ on obtient :

$$J_+ |J, M\rangle = \sum_{m_1 m_2} \langle m_1, m_2 | J, M \rangle J_+ |m_1, m_2\rangle = a_M |J, M+1\rangle \quad (10.77)$$

or :

$$\begin{aligned} J_+ |m_1, m_2\rangle &= (J_{1+} + J_{2+}) |m_1\rangle \otimes |m_2\rangle \\ &= a_{m_1} |m_1 + 1\rangle \otimes |m_2\rangle + |m_1\rangle \otimes a_{m_2} |m_2 + 1\rangle \\ &= a_{m_1} |m_1 + 1, m_2\rangle + a_{m_2} |m_1, m_2 + 1\rangle \end{aligned} \quad (10.78)$$



Page de titre

Sommaire



Page 750 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

ce qui donne :

$$a_M |J, M+1\rangle = \sum_{m_1 m_2} \{ \langle m_1, m_2 | J, M \rangle \times (a_{m_1} |m_1+1, m_2\rangle + a_{m_2} |m_1, m_2+1\rangle) \} \quad (10.79)$$

a_M , a_{m_1} et a_{m_2} sont données par la relation (7.70) du chapitre 7 et dépendent respectivement de J , M , j_1 , m_1 et j_2 , m_2 .

En projetant la relation (10.79) sur le bras $\langle m'_1 m'_2 |$ on obtient :

$$a_M \langle m'_1, m'_2 | J, M+1 \rangle = \sum_{m_1 m_2} \langle m_1, m_2 | J, M \rangle \{ a_{m_1} \langle m'_1, m'_2 | m_1+1, m_2 \rangle + a_{m_2} \langle m'_1, m'_2 | m_1, m_2+1 \rangle \} \quad (10.80)$$

Les deux produits scalaires du second membre sont tels que :

$$\langle m'_1, m'_2 | m_1+1, m_2 \rangle \neq 0 \quad \text{pour : } \begin{cases} m'_1 = m_1+1 \\ m'_2 = m_2 \end{cases} \quad (10.81)$$

$$\langle m'_1, m'_2 | m_1, m_2+1 \rangle \neq 0 \quad \text{pour : } \begin{cases} m'_1 = m_1 \\ m'_2 = m_2+1 \end{cases} \quad (10.82)$$



Page de titre

Sommaire



Page 751 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

On obtient donc la relation de récurrence suivante :

$$a_M \langle m'_1, m'_2 | J, M+1 \rangle = a_{m'_1-1} \langle m'_1-1, m'_2 | J, M \rangle + a_{m'_2-1} \langle m'_1, m'_2-1 | J, M \rangle \quad (10.83)$$

On obtient une relation analogue par application de l'opérateur J_- à la relation (10.70), ce qui permet d'écrire la relation de récurrence la plus générale :

$$\begin{aligned} \sqrt{(J \pm M)(J \mp M + 1)} \langle \mathbf{m}_1, \mathbf{m}_2 | J, M \mp 1 \rangle = \\ \sqrt{(j_1 \mp m_1)(j_1 \pm m_1 + 1)} \langle \mathbf{m}_1 \pm 1, \mathbf{m}_2 | J, M \rangle \\ + \sqrt{(j_2 \mp m_2)(j_2 \pm m_2 + 1)} \langle \mathbf{m}_1, \mathbf{m}_2 \pm 1 | J, M \rangle \end{aligned} \quad (10.84)$$

On rappelle que dans le sous-espace $\xi(j_1, j_2)$, le ket $|m_1 = j_1, m_2 = j_2\rangle$ est l'unique vecteur propre de J_z associé à $M = j_1 + j_2$. Comme $\vec{J}^2$ et J_z commutent et que $M = j_1 + j_2$ n'est pas dégénérée, ce vecteur est aussi vecteur propre de $\vec{J}^2$ avec la valeur propre $J(J+1)\hbar^2$ où $J = j_1 + j_2$ de sorte qu'on a l'identité :

$$|\mathbf{J} = \mathbf{j}_1 + \mathbf{j}_2, \mathbf{M} = \mathbf{j}_1 + \mathbf{j}_2\rangle = |\mathbf{m}_1 = \mathbf{j}_1, \mathbf{m}_2 = \mathbf{j}_2\rangle \quad (10.85)$$

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 752 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

Ceci permet de générer par l'application répétée de J_- , tous les vecteurs $|J, M\rangle$ pour lesquels $J = j_1 + j_2$. On fera une démarche analogue pour $J = j_1 + j_2 - 1$ et ainsi de suite.

Le calcul des coefficients de CG s'effectue aisément à partir de la relation de récurrence (10.84). Toutefois, pour les nombres quantiques élevés il est plus simple d'utiliser les tables de coefficients de Clebsch-Gordan (exemple tableau 1) ou de recourir carrément à des sous-programmes d'ordinateurs.



Page de titre

Sommaire



Page 753 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Tableau.1 : Coefficients de Clebsch-Gordan ; un signe $\sqrt{}$ est sous entendu dans chaque coefficient

Tableau.1 : Coefficients de Clebsch-Gordan ; un signe $\sqrt{}$ est sous entendu dans chaque coefficient



Page de titre

Sommaire



Page 754 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

2.6. Application : Retour à l'addition de deux spins $\frac{1}{2}$

Dans ce cas $\vec{J}_1 = \vec{S}_1$ et $\vec{J}_2 = \vec{S}_2$. L'espace de Hilbert $\xi\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$ admet une base de quatre vecteurs qu'on note $\{|++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle, |--\rangle\}$ et il s'agit de passer à la base $\{|J, M\rangle\}$ adaptée au moment cinétique total. Comme :

$$\begin{aligned}
 |j_1 - j_2| \leq J \leq j_1 + j_2 & \quad \text{on a : } 0 \leq S \leq 1 \\
 & \quad \text{soit : } S = 0 \text{ et } S = 1 \\
 M = m_1 + m_2 & \quad \text{on a : } M = \pm \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \\
 & \quad \text{soit : } M = 1, 0 \text{ et } S = -1
 \end{aligned}$$

Les vecteurs $|J, M\rangle$ sont donc au nombre de quatre : $\{|1, 1\rangle, |1, 0\rangle, |1, -1\rangle, |0, 0\rangle\}$.

Pour déterminer les coefficients de CG partons de la plus grande valeur de M ($M = 1$) qui correspond à $m_1 = m_2 = \frac{1}{2}$ et pour laquelle il n'existe qu'une seule valeur de S ($S = 1$). Comme la valeur de $M = 1$ n'est pas dégénérée les vecteurs $|1, 1\rangle$ et $|++\rangle$ sont proportionnels. Pour que le coefficient de Clebsch-Gordan $\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | 1, 1 \rangle = \langle ++ | 1, 1 \rangle$ soit réel positif il faut qu'on ait :

$$|1, 1\rangle = |++\rangle \quad (10.86)$$



Page de titre

Sommaire



Page 755 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Les autres vecteurs propres associés à $S = 1$ s'obtiennent par application répétée de $S_- = S_{1-} + S_{2-}$ sur $|1, 1\rangle$, soit :

$$S_- |1, 1\rangle = \hbar\sqrt{2} |1, 0\rangle = S_{1-} |++\rangle + S_{2-} |++\rangle = \hbar(|-+\rangle + |+-\rangle) \quad (10.87)$$

ce qui donne :

$$|1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+-\rangle + |-+\rangle) \quad (10.88)$$

appliquons S_- sur $|1, 0\rangle$:

$$S_- |1, 0\rangle = \hbar\sqrt{2} |1, -1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (S_{1-} |+-\rangle + S_{2-} |-+\rangle) = \frac{2\hbar}{\sqrt{2}} |--\rangle \quad (10.89)$$

soit :

$$|1, -1\rangle = |--\rangle \quad (10.90)$$

Ayant trouvé les 3 vecteurs associés à $S = 1$, il faut trouver celui qui est associé à $S = 0$. Comme dans ce cas $M = m_1 + m_2 = 0$, ce vecteur appartient au sous-espace sous-tendu par les vecteurs $|+-\rangle$ et $|-+\rangle$ et peut s'écrire sous la forme :

$$|0, 0\rangle = a_1 |+-\rangle + a_2 |-+\rangle \quad (10.91)$$



Page de titre

Sommaire



Page 756 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

ce vecteur doit être orthogonal à $|1, 0\rangle$, donc :

$$\langle 1, 0 | 0, 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle + - | + \langle - + |) (a_1 | + - \rangle + a_2 | - + \rangle) = \frac{a_1 + a_2}{\sqrt{2}} = 0 \quad (10.92)$$

ce qui donne $a_1 = -a_2$, et comme $|0, 0\rangle$ est normalisé et que les CG doivent être réels on doit avoir $a_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}$, soit :

$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (| + - \rangle - | - + \rangle) \quad (10.93)$$

On obtient au total :

$$\text{un triplet : } \begin{cases} |1, 1\rangle = |++\rangle \\ |1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+-\rangle + |-+\rangle) \\ |1, -1\rangle = |--\rangle \end{cases} \quad (10.94)$$

$$\text{un singulet : } |0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+-\rangle - |-+\rangle) \quad (10.95)$$

Ce changement de base peut s'écrire sous la forme matricielle suivante :

$$\begin{pmatrix} |1, 1\rangle \\ |1, 0\rangle \\ |1, -1\rangle \\ |0, 0\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |++\rangle \\ |+-\rangle \\ |-+\rangle \\ |--\rangle \end{pmatrix} \quad (10.96)$$

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 757 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

Les éléments de la matrice 4×4 sont les coefficients de Clebsch-Gordan.



Page de titre

Sommaire



Page 758 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

3. Addition d'un moment cinétique orbital et d'un spin $\frac{1}{2}$

Ce problème se rencontre lorsqu'on étudie le moment cinétique total d'une particule de spin $\frac{1}{2}$ tel que l'électron ou le proton car cette particule possède à cause de son mouvement un moment cinétique orbital $\vec{L}$ dont le nombre quantique correspondant ℓ est un entier.

3.1. Espace des états

L'espace des états de la particule est le produit tensoriel de l'espace orbital et de l'espace de spin qu'on note $\xi = \xi(\ell) \otimes \xi(\frac{1}{2}) = \xi(\ell, \frac{1}{2})$. C'est un espace de dimension $2(2\ell + 1)$ dont la base est :

$$\{|\ell, \frac{1}{2}; m, m_s\rangle\} = \{|m, m_s\rangle\}$$

avec :

$$\begin{aligned} m &= \ell, \ell - 1, \dots, -\ell \\ m_s &= \pm \frac{1}{2} \end{aligned} \tag{10.97}$$

Pour simplifier davantage les calculs on notera cette base $\{|m, \pm\rangle\}$.



Page de titre

Sommaire



Page 759 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Cette base est formée des vecteurs propres communs aux observables $\vec{L}^2$, $\vec{S}^2$, L_z et S_z et il s'agit de construire la base $\{|J, M\rangle\}$ formée des vecteurs propres communs à $\vec{J}^2$ et J_z où $\vec{J}$ est le moment cinétique total de la particule qui est donné par :

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \quad (10.98)$$

Il faut signaler que si $\ell = 0$, $m = 0$ et les vecteurs $|0, \pm\rangle$ sont vecteurs propres de $\vec{J}^2$ et J_z avec les valeurs propres $J(J+1)\hbar^2$ et $M\hbar$ qui sont telles que $J = \frac{1}{2}$ et $M = \pm\frac{1}{2}$. Si par contre ℓ est non nul, J prendra deux valeurs possibles :

$$J = \ell + \frac{1}{2} \text{ et } J = \ell - \frac{1}{2} \quad (10.99)$$

A chacune de ces valeurs correspond un sous-espace $\xi(J)$ sous-tendu par $2J+1$ vecteurs $|J, M\rangle$

3.2. Détermination des $|J, M\rangle$

3.2.1. Vecteurs dans le sous-espace $\xi(\ell + \frac{1}{2})$

Le sous-espace $\xi(\ell + \frac{1}{2})$ correspondant à $J = \ell + \frac{1}{2}$ est sous-tendu par $2\ell + 2$ vecteurs $|J, M\rangle$.



Page de titre

Sommaire



Page 760 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Comme précédemment il existe un seul vecteur correspondant à $J = j_1 + j_2$ et à $M = j_1 + j_2$ avec $j_1 = \ell$ et $j_2 = \frac{1}{2}$, c'est le vecteur :

$$|\ell + \frac{1}{2}, \ell + \frac{1}{2}\rangle = |\ell, \frac{1}{2}; \ell, \frac{1}{2}\rangle = |\ell, \frac{1}{2}\rangle \text{ soit :}$$

$$|\ell + \frac{1}{2}, \ell + \frac{1}{2}\rangle = |\ell, +\rangle \quad (10.100)$$

Par action de l'opérateur J_- sur ce vecteur on a :

$$\begin{aligned} J_- |\ell + \frac{1}{2}, \ell + \frac{1}{2}\rangle &= \hbar \sqrt{(J+M)(J-M+1)} |\ell + \frac{1}{2}, \ell - \frac{1}{2}\rangle \\ &= \hbar \sqrt{2\ell+1} |\ell + \frac{1}{2}, \ell - \frac{1}{2}\rangle \end{aligned} \quad (10.101)$$

Soit :

$$\begin{aligned} |\ell + \frac{1}{2}, \ell - \frac{1}{2}\rangle &= \frac{1}{\hbar \sqrt{2\ell+1}} J_- |\ell + \frac{1}{2}, \ell + \frac{1}{2}\rangle \\ &= \frac{1}{\hbar \sqrt{2\ell+1}} (L_- + S_-) |\ell, +\rangle \\ &= \frac{1}{\hbar \sqrt{2\ell+1}} [\hbar \sqrt{2\ell} |\ell-1, +\rangle + \hbar |\ell, -\rangle] \\ &= \sqrt{\frac{2\ell}{2\ell+1}} |\ell-1, +\rangle + \sqrt{\frac{1}{2\ell+1}} |\ell, -\rangle \end{aligned} \quad (10.102)$$

En appliquant une nouvelle fois J_- on obtient par un calcul similaire :

$$|\ell + \frac{1}{2}, \ell - \frac{3}{2}\rangle = \sqrt{\frac{2\ell-1}{2\ell+1}} |\ell-2, +\rangle + \sqrt{\frac{2}{2\ell+1}} |\ell-1, -\rangle \quad (10.103)$$



Page de titre

Sommaire



Page 761 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

De façon générale, le vecteur $|\ell + \frac{1}{2}, M\rangle$ est une combinaison linéaire des deux seuls vecteurs de base associés à M , c'est à dire $|M - \frac{1}{2}, +\rangle$ et $|M + \frac{1}{2}, -\rangle$. En comparant les expressions (10.100), (10.102) et (10.103) on aboutit à la combinaison suivante :

$$|\ell + \frac{1}{2}, M\rangle = \sqrt{\frac{\ell + M + \frac{1}{2}}{2\ell + 1}} |M - \frac{1}{2}, +\rangle + \sqrt{\frac{\ell - M + \frac{1}{2}}{2\ell + 1}} |M + \frac{1}{2}, -\rangle \quad (10.104)$$

Relation qu'on peut d'ailleurs obtenir par un raisonnement de récurrence et où :

$$M = \ell + \frac{1}{2}, \ell - \frac{1}{2}, \ell - \frac{3}{2}, \dots, -\ell + \frac{1}{2}, -(\ell + \frac{1}{2}) \quad (10.105)$$

3.2.2. Vecteurs dans le sous-espace $\xi(\ell - \frac{1}{2})$

Dans ce cas ce sous-espace est sous-tendu par 2ℓ vecteurs $|J, M\rangle$ qui sont associés à la valeur $J = \ell - \frac{1}{2}$.

D'après précédemment le vecteur correspondant à la valeur maximale $\ell - \frac{1}{2}$ de M est une combinaison linéaire de $|\ell - 1, +\rangle$ et $|\ell, -\rangle$ et il est orthogonal à $|\ell + \frac{1}{2}, \ell - \frac{1}{2}\rangle$. En choisissant le coefficient de $|\ell, -\rangle$ réel positif


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 762 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

et en normant on obtient :

$$|\ell - \frac{1}{2}, \ell - \frac{1}{2}\rangle = \sqrt{\frac{2\ell}{2\ell+1}} |\ell, -\rangle - \sqrt{\frac{1}{2\ell+1}} |\ell - 1, +\rangle \quad (10.106)$$

En faisant agir l'opérateur J_- sur ce vecteur on déduit les autres vecteurs qu'on trouve égaux à :

$$|\ell - \frac{1}{2}, M\rangle = \sqrt{\frac{\ell + M + \frac{1}{2}}{2\ell + 1}} |M + \frac{1}{2}, -\rangle - \sqrt{\frac{\ell - M + \frac{1}{2}}{2\ell + 1}} |M - \frac{1}{2}, +\rangle \quad (10.107)$$

avec :

$$M = \ell - \frac{1}{2}, \ell - \frac{3}{2}, \dots, -\ell + \frac{3}{2}, -(\ell - \frac{1}{2}) \quad (10.108)$$

3.3. Représentation en formulation spineurs

Nous avons vu au chapitre 9 que les états d'une particule de spin $\frac{1}{2}$ peuvent être représentés par des spineurs. Pour les états $|\ell, \frac{1}{2}, m, m_s\rangle$ les spineurs ont


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 763 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

la forme suivante :

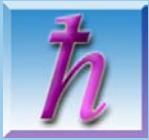
$$\left[\psi_{\ell, \frac{1}{2}; m, +} \right] (\vec{r}) = R_{k, \ell}(r) Y_{\ell}^m(\theta, \varphi) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (10.109)$$

$$\left[\psi_{\ell, \frac{1}{2}; m, -} \right] (\vec{r}) = R_{k, \ell}(r) Y_{\ell}^m(\theta, \varphi) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (10.110)$$

D'après les expressions des $|J, M\rangle$ on déduit que les spineurs qui leur sont associés s'écrivent :

$$\left[\psi_{\ell + \frac{1}{2}, M} \right] (\vec{r}) = R_{k, \ell}(r) \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{\ell + M + \frac{1}{2}}{2\ell + 1}} Y_{\ell}^{M - \frac{1}{2}}(\theta, \varphi) \\ \sqrt{\frac{\ell - M + \frac{1}{2}}{2\ell + 1}} Y_{\ell}^{M + \frac{1}{2}}(\theta, \varphi) \end{pmatrix} \quad (10.111)$$

$$\left[\psi_{\ell - \frac{1}{2}, M} \right] (\vec{r}) = R_{k, \ell}(r) \begin{pmatrix} -\sqrt{\frac{\ell - M + \frac{1}{2}}{2\ell + 1}} Y_{\ell}^{M - \frac{1}{2}}(\theta, \varphi) \\ \sqrt{\frac{\ell + M + \frac{1}{2}}{2\ell + 1}} Y_{\ell}^{M + \frac{1}{2}}(\theta, \varphi) \end{pmatrix} \quad (10.112)$$



Page de titre

Sommaire



Page 764 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

3.4. Application : Cas où $\ell = 1$

L'utilisation des expressions (10.104) et (10.107) donne pour les $|J, M\rangle$ les relations suivantes :

$$|\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle = |1, +\rangle$$

$$|\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} |0, +\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}} |1, -\rangle$$

$$|\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}} |-1, +\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |0, -\rangle$$

$$|\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\rangle = |-1, -\rangle$$

$$|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} |1, -\rangle - \sqrt{\frac{1}{3}} |0, +\rangle$$

$$|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}} |0, -\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} |-1, +\rangle$$

(10.113)

3.5. Couplage spin-orbite

Dans les atomes, les électrons qui sont des particules de spin $\frac{1}{2}$ ont également un moment cinétique orbital $\vec{L}$ dû à leur rotation autour du noyau.



Page de titre

Sommaire



Page 765 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

A l'état fondamental le nombre quantique ℓ associé à ce moment est nul mais il n'en est pas de même pour les états excités.

Dans l'atome d'hydrogène et dans l'approximation du noyau immobile l'hamiltonien est :

$$H_0 = \frac{\vec{P}^2}{2m} + V(r) \quad (10.114)$$

H_0 commute avec $\vec{L}^2$ et $\vec{S}^2$ et avec toutes les composantes de $\vec{S}$ et de $\vec{L}$ et ses états propres sont les états produits $|\ell, m\rangle \otimes |s, m_s\rangle = |\ell, s, m, m_s\rangle$ qui s'écrivent dans la représentation sphérique $\{|\vec{r}\rangle\}$ sous la forme :

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R_{n,\ell}(r) Y_\ell^m(\theta, \varphi) \chi(m_s) \quad (10.115)$$

En l'absence d'interaction entre l'atome et le champ électromagnétique qui entraîne l'émission de photons, lorsque l'électron est dans un état excité, l'atome serait dans un état stationnaire et les nombres n, ℓ, m, s, m_s sont de bons nombres quantiques et caractérisent complètement l'état quantique de l'atome.

En fait le couplage avec le champ électromagnétique introduit des effets relativistes qui engendrent trois termes supplémentaires qu'il faut ajouter à H_0 et qu'on appelle termes de structure fine, car ils conduisent à une séparation très fine des raies spectroscopiques. Ces termes dont la contribution est très faible par rapport à celle qui est associée à $H_0 (\lesssim 10^{-4})$ sont au nombre de trois :



Page de titre

Sommaire



Page 766 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

- (i) Un terme W_1 correspondant à la variation relativiste de l'énergie cinétique de l'électron et qui s'écrit :

$$W_1 = -\frac{P^4}{8m_e^3c^2} \quad (10.116)$$

- (ii) Un terme W_2 qu'on appelle terme de Darwin et qui correspond à la variation relativiste de l'énergie potentielle de l'électron. Ce terme s'écrit :

$$W_2 = \frac{\pi\hbar^2}{2m_e c^2} \left(\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \delta(\vec{r}) \quad (10.117)$$

- (iii) Un terme W_{SO} appelé couplage spin-orbite qui provient de l'interaction entre le spin de l'électron et son mouvement cinétique orbital. W_{s_0} s'écrit :

$$W_{SO} = \frac{1}{2m_e c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \vec{L} \cdot \vec{S} = \xi(r) \vec{L} \cdot \vec{S} \quad (10.118)$$

m_e , $\vec{P}$, q sont respectivement la masse, l'impulsion et la charge de l'électron; c est la vitesse de la lumière et $\delta(\vec{r})$ la fonction de Dirac. Lorsque l'on tient compte uniquement de W_{s_0} , l'hamiltonien de l'atome devient :

$$H = H_0 + W_{SO} \quad (10.119)$$



Page de titre

Sommaire



Page 767 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

On peut vérifier alors que H ne commute plus avec les composantes de $\vec{L}$ et $\vec{S}$ puisque :

$$\begin{aligned} [L_z, W_{SO}] &= \xi(r) [L_z, L_x S_x + L_y S_y + L_z S_z] \\ &= i\hbar \xi(r) \{L_y S_x - L_x S_y\} \end{aligned} \quad (10.120)$$

$$\begin{aligned} [S_z, W_{SO}] &= \xi(r) [S_z, L_x S_x + L_y S_y + L_z S_z] \\ &= i\hbar \xi(r) \{L_x S_y - L_y S_x\} \end{aligned} \quad (10.121)$$

Ce qui signifie que les nombres n, ℓ, m, s, m_s ne sont plus de bons nombres quantiques.

Cependant on peut vérifier facilement que le moment cinétique total $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ commute avec W_{SO} et donc avec H . Pour le voir il suffit d'ajouter membre à membre les égalités (10.120) et (10.121) :

$$[J_z, W_{SO}] = [L_z + S_z, W_{SO}] = 0$$

et de même pour les composantes J_x et J_y . Par conséquent, le moment cinétique total $\vec{J}$ est une constante du mouvement et pour chercher les états stationnaires de H , il est plus commode de chercher les vecteurs propres communs à $H, \vec{L}^2, \vec{S}^2, \vec{J}^2$ et J_z c'est à dire les vecteurs $|J, M\rangle$ qu'on a déjà déterminés dans le paragraphe 3.2.

Bien que W_{SO} constitue une perturbation de l'hamiltonien central H_0 , il joue un rôle important dans la structure des atomes en permettant de


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 768 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

lever la dégénérescence des niveaux électroniques, car comme nous l'avons vu, l'interaction spin-orbite dédouble chaque niveau électronique ℓ en deux niveaux $\ell + \frac{1}{2}$ et $\ell - \frac{1}{2}$ selon que $\vec{L}$ et $\vec{S}$ sont parallèles ou antiparallèles, seuls les niveaux $\ell = 0$ restent inchangés. Une signature de cet effet est le doublet du Sodium : dans ce cas la transition du premier état excité ($\ell = 1$) vers l'état fondamental ($\ell = 0$) est affectée par l'interaction spin-orbite qui lève la dégénérescence de l'état excité pour donner deux états correspondant à $j = \frac{3}{2}$ et $j = \frac{1}{2}$; les deux raies du doublet représentent la transition de chacun de ces états vers le fondamental non dégénéré. Le fait que les deux raies soient très proches l'une de l'autre ($\lambda_1 = 5890 \text{ \AA}$ et $\lambda_2 = 5896 \text{ \AA}$) prouve la faible intensité du couplage.



Page de titre

Sommaire



Page 769 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Exercices et problèmes

EP 10.1 : couplage de deux spins $\frac{1}{2}$ de particules identiques

On considère un système de deux particules identiques de spin $\frac{1}{2}$ et on note dans l'espace produit tensoriel $E = E_{S_1} \otimes E_{S_1}$ $\{|m_1, m_2\rangle = |\pm, \pm\rangle\}$ la base commune à l'ensemble $S_1^2, S_2^2, S_{1z}, S_{2z}$ et $\{|S, M\rangle\}$ la base commune à l'ensemble $S_1^2, S_2^2, \vec{S}^2, S_z$ avec $\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$.

1- Donner les différentes valeurs de S et de M et trouver les 4 relations qui connectent les deux bases.

2- L'hamiltonien du système est donné par :

$$H = H_0 + W \quad \text{avec} \quad W = \alpha \vec{S}_1 \vec{S}_2$$

où α est la constante de couplage.

On suppose que les quatre kets $|\pm, \pm\rangle$ sont tous vecteurs propres de H_0 avec la même valeur propre E_0 qui correspond à l'énergie de l'état fondamental.

a- Montrer que les kets $|S, M\rangle$ sont vecteurs propres de H .

b- En déduire que le couplage W découple le niveau E_0 en un niveau singulet $|0, 0\rangle$ d'énergie E_S et un niveau triplet $|1, M\rangle$ d'énergie E_T .

Calculer E_S et E_T .

EP 10.2 : Couplage de deux spins $\frac{1}{2}$ de particules différentes



Page de titre

Sommaire



Page 770 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

On considère un système formé de deux particules de spin identiques ($s_1 = s_2 = \frac{1}{2}$) et de moments magnétiques différents. On plonge le système dans un champ magnétique uniforme parallèle à l'axe $\vec{Oz}$ de telle sorte que son hamiltonien s'écrit sous la forme :

$$H = 2a_1 S_{1z} + 2a_2 S_{2z} + 4b \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$$

où a_1, a_2 et b sont des constantes réelles.

1- On introduit les moments cinétiques $\vec{S}$ et $\vec{S}'$ définis par :

$$\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2 \text{ et } \vec{S}' = \vec{S}_1 - \vec{S}_2$$

Exprimer H en fonction des opérateurs $\vec{S}^2, S_z$ et S'_z .

2- Ecrire la matrice représentant S'_z dans la base propre $\{|S, M_S\rangle\}$ de $\vec{S}^2$ et S_z .

3- Ecrire la matrice représentant H dans la base $\{|SM_S\rangle\}$.

On prendra les vecteurs de cette base dans l'ordre : $\{|1, 1\rangle, |1, -1\rangle, |1, 0\rangle \text{ et } |0, 0\rangle\}$.

4- Déterminer les valeurs propres et les vecteurs propres de H .



Page de titre

Sommaire



Page 771 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

EP 10.3 : Moment cinétique total d'un atome

On considère un atome et on désigne par $\vec{J}$ et $\vec{M}_J$ le moment cinétique et le moment magnétique du nuage électronique et par $\vec{I}$ et $\vec{M}_I$ le moment cinétique et le moment magnétique du noyau.

De sorte qu'on a :

$$\vec{M}_J = \gamma_L \vec{J} \quad \text{et} \quad \vec{M}_I = \gamma_I \vec{I}$$

où γ_L, γ_I sont les rapports gyromagnétiques du nuage et du noyau.

L'énergie d'interaction magnétique du nuage et du noyau est $W = a \vec{M}_J \vec{M}_I$ où a est constante qui dépend de la distribution des électrons au voisinage du noyau.

1- L'état du noyau (Energie E_I et valeur propre $I(I+1)\hbar^2$ de $\vec{I}^2$) et celui du nuage (Energie E_J et valeur propre $J(J+1)\hbar^2$ de $\vec{J}^2$) étant fixés. Déterminer les valeurs des nombres quantiques K que peut prendre le moment cinétique total $\vec{K}$ de l'atome.

2- Exprimer W en fonction de $\vec{I}^2, \vec{J}^2$ et $\vec{K}^2$.

3- Donner l'expression en fonction de I, J et K des niveaux d'énergie hyperfins de l'atome.

4- Calculer la séparation en énergie de deux niveaux hyperfins consécutifs.

EP 10.4 : Couplage d'un spin 1 et d'un spin $\frac{1}{2}$



Page de titre

Sommaire



Page 772 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

On considère une particule (1) de spin $J_1 = 1$ et on désigne par E_1 l'espace des états de J_{1z} et $\vec{J}_1^2$ dont la base est $\{|j_1, m_1\rangle\}$ et une particule (2) de spin $J_2 = 1$ et on désigne par E_2 l'espace des états de J_{2z} et $\vec{J}_2^2$ dont la base est $\{|j_2, m_2\rangle\}$.

Soit $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$ le moment cinétique total du système des deux particules.

- 1- Quelles sont les valeurs du nombre quantique J caractérisant le spin total $\vec{J}$.
- 2- Quelle est la base $|J, M\rangle$ qui rend $\vec{J}_1^2$, $\vec{J}_2^2$, $\vec{J}^2$ et J_z simultanément diagonaux.
- 3- trouver les matrices représentant $\vec{J}_1^2$, $\vec{J}_2^2$, $\vec{J}^2$ et J_z dans cette base.

EP 10.5 : Couplage spin-orbite et structure fine de la raie de résonance de l'hydrogène

L'atome d'hydrogène est constitué d'un électron et d'un proton. Ce dernier étant 1860 fois plus lourd que l'électron, on peut le considérer immobile à l'origine des coordonnées et ramener l'étude de l'atome à celle du seul électron soumis à la force d'interaction électrostatique avec le proton.

Le moment cinétique orbital de l'électron par rapport à l'origine est décrit par l'observable $\vec{L}$ et son spin par l'observable $\vec{S}$. On définit le moment cinétique total de l'électron par l'observable $\vec{J}$ telle que :

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$



Page de titre

Sommaire



Page 773 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

On sait déterminer par la théorie du potentiel central les énergies propres E_n et les états propres $|n, \ell, m\rangle$ de l'hamiltonien H_0 de l'électron.

On peut montrer que $\{H_0, \vec{L}^2, L_z, \vec{S}^2, S_z\}$ est un E.C.O.C. et on rapporte l'espace des états à une base $\{|n, \ell, m, \pm\rangle\}$ constituées des vecteurs propres communs aux observables précédentes et tels que :

$$H_0 |n, \ell, m, \pm\rangle = E_n |n, \ell, m, \pm\rangle$$

$$\vec{L}^2 |n, \ell, m, \pm\rangle = \ell(\ell+1) \hbar^2 |n, \ell, m, \pm\rangle$$

$$L_z |n, \ell, m, \pm\rangle = m\hbar |n, \ell, m, \pm\rangle$$

$$\vec{S}^2 |n, \ell, m, \pm\rangle = \frac{3}{4} \hbar^2 |n, \ell, m, \pm\rangle$$

$$S_z |n, \ell, m, \pm\rangle = \pm \frac{\hbar}{2} |n, \ell, m, \pm\rangle$$

Cette base est orthonormée et standard pour le moment cinétique et pour le spin :

$$\langle n, \ell, m, \mathcal{E} | n', \ell', m', \mathcal{E}' \rangle = \delta_{nn'} \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'} \delta_{\mathcal{E}\mathcal{E}'} \quad (\mathcal{E}, \mathcal{E}' = \pm)$$

$$L_{\pm} |n, \ell, m, \mathcal{E}\rangle = \hbar \sqrt{\ell(\ell+1) - m(m \pm 1)} |n, \ell, m \pm 1, \mathcal{E}\rangle$$

$$S_+ |n, \ell, m, +\rangle = 0; \quad S_- |n, \ell, m, +\rangle = \hbar |n, \ell, m, -\rangle$$

$$S_+ |n, \ell, m, -\rangle = \hbar |n, \ell, m, +\rangle; \quad S_- |n, \ell, m, -\rangle = 0$$

On rappelle que pour un moment cinétique $\vec{J}$ quelconque, on a :

$$\vec{J}^2 = \frac{1}{2} (J_+ J_- + J_- J_+) + J_z^2$$



Page de titre

Sommaire



Page 774 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

En réalité, H_0 n'est que le terme principal de l'hamiltonien : le mouvement de l'électron autour du noyau lui fait "voir", outre le champ électrostatique, un champ magnétique qui interagit avec le moment magnétique associé au spin $\vec{S}$. C'est le terme d'interaction correspondant, dit "couplage spin-orbite", que nous voulons étudier ici. L'hamiltonien total H s'écrit :

$$H = H_0 + \frac{A}{\hbar^2} \vec{L} \cdot \vec{S}$$

avec A une constante.

1- Montrer que les composantes de $\vec{L}$ et de $\vec{S}$ ne sont plus des constantes du mouvement, mais que celles de $\vec{J}$ le sont (Il suffira de faire la démonstration pour une seule des trois composantes).

2- On va donc chercher les vecteurs propres communs à H , $\vec{J}^2$ et J_z ; on notera $j(j+1)\hbar^2$ et $m_J\hbar$ les valeurs propres de $\vec{J}^2$ et J_z respectivement. Montrer que :

$$\vec{J}^2 = \vec{L}^2 + \vec{S}^2 + 2L_zS_z + L_+S_- + L_-S_+$$

3- Le niveau fondamental de l'atome d'hydrogène correspond à $n = 1$ et $\ell = 0$.

a- Combien de vecteurs de la base $\{|n, \ell, m, \pm\rangle\}$ sous-tendent le sous-espace $(n = 1, \ell = 0)$ défini par ces valeurs de n et ℓ ?

b- Montrer que ces vecteurs de base sont déjà vecteurs propres de J_z , quelles sont les valeurs de m_J correspondantes ?



Page de titre

Sommaire



Page 775 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

c- Montrer que ces vecteurs sont également vecteurs propres de $\vec{J}^2$, quelles sont les valeurs de j associées à chacun d'eux ?

4- La raie de résonance de l'hydrogène (raie Lyman α) correspond à une transition de l'atome entre son niveau fondamental et le niveau associé à $n = 2$ et $\ell = 1$.

a- combien de vecteurs de la base $\{|n, \ell, m, \pm\rangle\}$ sous-tendent le sous-espace $(n = 2, \ell = 1)$ défini par ces valeurs de n et ℓ ?

b- Montrer que ces vecteurs de base sont déjà vecteurs propres de J_z ; quelles sont leurs valeurs de m_J ?

5- On considère le vecteur de l'ensemble précédent associé à la valeur maximale de m_J .

a-Montrer qu'il est également vecteur propre de $\vec{J}^2$, et calculer la valeur j_0 de j correspondante ?

b- Combien y a-t-il, dans le sous-espace $(n = 2, \ell = 1)$, de vecteurs propres de $\vec{J}^2$ indépendants ayant cette même valeur j_0 de j ?

c- Parmi ces kets, construire celui qui est également vecteur propre de J_z avec la valeur propre $m_J \hbar = (j_0 - 1) \hbar$.

6- a- Montrer que qu'il existe, dans $E(n = 2, \ell = 1)$, un vecteur orthogonal à celui qui a été construit en 5-c et qui est vecteur propre de J_z avec la même valeur propre. Le construire.

b- Montrer que ce dernier ket est vecteur propre de $\vec{J}^2$, quelle valeur j_1 de j lui est associée ? combien de vecteurs propres de $\vec{J}^2$ indépendants, ayant cette même valeur j_1 de j , existe-t-il dans le sous-espace $E(n = 2, \ell = 1)$?



Page de titre

Sommaire



Page 776 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

7- En récapitulant les résultats des questions 3, 4, 5 et 6, indiquer les valeurs de j et m_J qui sont réalisées dans le sous-espace $E(n=1, \ell=0)$ et dans $E(n=2, \ell=1)$.

8- Exprimer $\vec{L} \cdot \vec{S}$ en fonction de $\vec{J}^2$, $\vec{L}^2$ et $\vec{S}^2$.

En déduire les valeurs propres de l'hamiltonien total H et leur degré de dégénérescence dans le cas des sous-espace $E(n=1, \ell=0)$ et $E(n=2, \ell=1)$.

9- Dans un spectromètre relativement peu dispersif, la transition entre l'un des états de $E(n=2, \ell=1)$ et l'un des états de $E(n=1, \ell=0)$ donne lieu à une raie spectrale unique.

a- Sachant que $E_1 = -13.6\text{eV}$ et $E_2 = -3.4\text{eV}$ calculer la fréquence et la longueur d'onde de cette raie. Dans quel domaine (rayon X , ultraviolet, visible, infrarouge, ondes hertziennes) se situe-t-elle ?

b- Si l'on améliore les caractéristiques du spectromètre au point de pouvoir mettre en évidence les effets de couplage spin-orbite, en combien de "composantes fines" verra-t-on se scinder la raie précédente ?

c- Quelle sera la séparation relative de ces composantes lorsque $A = 0.5 \cdot 10^{-4}\text{eV}$?

EP 10.6 : Addition de trois spins $\frac{1}{2}$

On considère trois particules de spin $\frac{1}{2}$ et on désigne par $\vec{S}_1, \vec{S}_2, \vec{S}_3$ ces spins respectifs.



Page de titre

Sommaire



Page 777 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Soit $\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2 + \vec{S}_3$ le moment cinétique total des trois particules et $|m_1, m_2, m_3\rangle$ les vecteurs propres communs à S_{1z}, S_{2z}, S_{3z} de valeurs propres respectives $m_1 \frac{\hbar}{2}, m_2 \frac{\hbar}{2}, m_3 \frac{\hbar}{2}$.

1- Donner en fonction des vecteurs $|m_1, m_2, m_3\rangle$ une base de vecteurs propres communs à $\vec{S}^2$ et S_z .

2- $\vec{S}^2$ et S_z forment-ils un E.C.O.C.?

EP 10.7 : R.M.N. de trois protons

Une molécule organique CH_3X est plongée dans un champ magnétique $\vec{B}_0$ orienté suivant $\vec{Oz}$. On suppose que l'hamiltonien du système formé par les trois protons (1), (2) et (3) s'écrit sous la forme : $H = H_0 + W$

où H_0 caractérise l'interaction des spins des protons ($s_1 = s_2 = s_3 = \frac{1}{2}$) avec le champ magnétique et W décrit le couplage entre les différents spins.

H_0 et W s'écrivent :

$$H_0 = \omega(S_{1z} + S_{2z} + S_{3z})$$

$$W = A(\vec{S}_1 \vec{S}_2 + \vec{S}_1 \vec{S}_3 + \vec{S}_2 \vec{S}_3)$$

où ω est une constante proportionnelle à l'intensité du champ et A la constante de couplage.

1- Soit $\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2 + \vec{S}_3$, le moment cinétique total du système formé par les trois protons et soient $|m_1, m_2, m_3\rangle$ les états propres communs aux composantes



Page de titre

Sommaire



Page 778 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

S_{1z}, S_{2z}, S_{3z} de valeurs propres respectives $m_1 \frac{\hbar}{2}, m_2 \frac{\hbar}{2}, m_3 \frac{\hbar}{2}$. On se propose de déterminer en fonction des kets $|m_1, m_2, m_3\rangle$ une base de vecteurs propres communs à $\vec{S}^2$ et S_z .

a- Indiquer les valeurs propres et les vecteurs propres de l'hamiltonien H_0 . Précisez la dégénérescence des niveaux d'énergie.

b- Soit $\vec{S}' = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$, trouver les vecteurs propres communs à $\vec{S}'^2$ et S'_z .

c- En écrivant $\vec{S} = \vec{S}' + \vec{S}_3$ trouver les vecteurs propres communs à $\vec{S}^2$ et S_z .

2- Montrer que les états stationnaires de H sont les vecteurs propres communs à $\vec{S}^2$ et S_z déterminés précédemment.

3- Calculer les énergies associées à ces états et les représenter sur un diagramme.

4- On applique au système un champ magnétique oscillant $\vec{B}_1$, parallèle à $\vec{Ox}$: $\vec{B}_1 = B_1 \sin \omega t \vec{u}_x$ ($\vec{u}_x$ est le vecteur unitaire porté par $\vec{Ox}$).

Sachant que la probabilité de transition entre deux états propres $|i\rangle$ et $|f\rangle$ de H est proportionnelle à l'élément de matrice $\langle i | S_x | f \rangle$, indiquer par des flèches sur le diagramme de 3- les transitions permises. Quelle est l'allure du spectre RMN des trois protons ?

EP 10.8 : Composition d'un spin électronique et de deux spins nucléaires

On considère une molécule diatomique paramagnétique ayant un électron célibataire et on désigne par $\vec{S}$ le spin de l'électron et par I_1 et I_2 les spins des



Page de titre

Sommaire



Page 779 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

deux noyaux.

On suppose que S, I_1 et I_2 sont des spins $\frac{1}{2}$ et on rapporte l'espace des états de spin de la molécule à la base orthonormée $\{|m_s, m_1, m_2\rangle\}$ formée des huit vecteurs propres communs à S_z, I_{1z} et I_{2z} correspondant respectivement aux valeurs propres $m_s \frac{\hbar}{2}, m_1 \frac{\hbar}{2}$ et $m_2 \frac{\hbar}{2}$ avec $m_s, m_1, m_2 = \pm$.

On plonge la molécule dans un champ magnétique uniforme $\vec{B}$ parallèle à l'axe $\vec{Oz}$ et on considère que les facteurs gyromagnétiques des noyaux sont égaux.

1-En l'absence de couplage entre les spins, l'hamiltonien de spin H_0 de la molécule s'écrit :

$$H_0 = \Omega S_z + \omega I_{1z} + \omega I_{2z}$$

où Ω et ω sont des constantes positives proportionnelles à l'intensité B du champ magnétique et telles que $\Omega > 2\omega$:

- a- Déterminer les énergies propres de H_0 et leur degré de dégénérescence.
- b- Tracer le diagramme d'énergie.

2- Lorsqu'on tient compte du couplage entre les spins l'hamiltonien de la molécule devient :

$$H = H_0 + W$$

avec :

$$W = a \vec{S} \cdot \vec{I}_1 + a \vec{S} \cdot \vec{I}_2$$



Page de titre

Sommaire



Page 780 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

où a est une constante positive.

A quelles conditions doivent satisfaire les m pour que $a \vec{S} \cdot \vec{I}_1$ et $a \vec{S} \cdot \vec{I}_2$ aient séparément un élément de matrice non nul entre $|m_s, m_1, m_2\rangle$ et $|m'_s, m'_1, m'_2\rangle$.

EP 10.9 : Système de deux spins $\frac{1}{2}$ dans le référentiel du centre de masse

On considère un système de deux particules de masses m_1 et m_2 et de spin $\frac{1}{2}$. Soient $\vec{S}_1$ et $\vec{S}_2$ leurs moments cinétiques de spin et $\vec{R}_1$ et $\vec{R}_2$ leurs opérateurs positions. On suppose que l'interaction W entre les deux particules est de la forme :

$$W = U(R) + V(R) \frac{\vec{S}_1 \vec{S}_2}{\hbar^2}$$

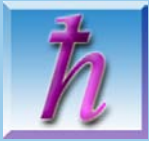
où $U(R)$ et $V(R)$ sont des fonctions d'opérateurs ne dépendant que de la distance $R = |\vec{R}_1 - \vec{R}_2|$ entre les deux particules.

1- Soit $\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$ le spin total des deux particules et P_1 et P_0 les projecteurs sur les états de spin total $S = 1$ et $S = 0$ respectivement.

a- Montrer que l'on a :

$$P_1 = \frac{3}{4} + \frac{\vec{S}_1 \vec{S}_2}{\hbar^2}$$

$$P_0 = \frac{1}{4} - \frac{\vec{S}_1 \vec{S}_2}{\hbar^2}$$



Page de titre

Sommaire



Page 781 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

b- En déduire que :

$$W = W_1(R) P_1 + W_0(R) P_0$$

où $W_1(R)$ et $W_0(R)$ sont deux fonctions de R que l'on exprimera à partir de $U(R)$ et $V(R)$.

2- Dans le référentiel du centre de masse, l'étude du système peut se ramener à celle d'une particule relative de masse la masse réduite μ du système et d'impulsion $\vec{P}$.

a- Ecrire l'hamiltonien H de la particule relative dans le référentiel du centre de masse et montrer que H commute avec $\vec{S}^2$ et ne dépend pas de S_z .

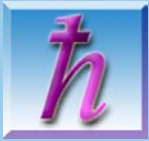
b- En déduire que l'on peut étudier séparément les états propres de H correspondant à $S = 1$ et à $S = 0$.

c- Montrer que l'on peut trouver des états propres de H , de valeurs propres E qui sont de la forme :

$$|\Psi_E\rangle = \lambda_{00} |\varphi_E^0\rangle |0, 0\rangle + \sum_{M=-1}^{+1} \lambda_{1M} |\varphi_E^1\rangle |1, M\rangle$$

où λ_{00} et λ_{1M} sont des constantes, $|\varphi_E^0\rangle$ et $|\varphi_E^1\rangle$ des vecteurs de l'espace des états E_r de la particule relative et $M\hbar$ la valeur propre de S_z .

d- Ecrire les équations aux valeurs propres vérifiées par $|\varphi_E^0\rangle$ et $|\varphi_E^1\rangle$.



Page de titre

Sommaire



Page 782 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

EP 10.10 : Théorème de Wigner-Eckart

On considère un système quantique de moment cinétique total $\vec{J}$ et on rapporte l'espace des états de ce système à la base $\{|\alpha, j, m\rangle\}$ formée par les vecteurs propres communs à $\vec{J}^2$ et J_z :

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

$$J_z |\alpha, j, m\rangle = m\hbar |\alpha, j, m\rangle$$

α étant un indice supplémentaire symbolisant l'ensemble des valeurs propres d'un certain nombre d'observables A_i formant avec $\vec{J}^2$ et J_z un E.C.O.C.. On suppose que les A_i sont des opérateurs scalaires c'est-à-dire que l'on a toujours :

$$[A_i, \vec{J}] = 0.$$

On désigne par $E(\alpha, j)$ le sous-espace à $(2j+1)$ dimensions sous-tendu par les vecteurs $|\alpha, j, m\rangle$ (α, j fixes et $-j \leq m \leq +j$) et par $P(\alpha, j)$ le projecteur sur ce sous-espace :

$$P(\alpha, j) = \sum_{m=-j}^{+j} |\alpha, j, m\rangle \langle \alpha, j, m|$$

On définit les phases relatives aux vecteurs $|\alpha, j, m\rangle$ appartenant aux mêmes sous-espace $E(\alpha, j)$ par :

$$J_{\pm} |\alpha, j, m\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} |\alpha, j, m \pm 1\rangle$$



Page de titre

Sommaire



Page 783 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Enfin on appelle opérateur vectoriel tout opérateur $\vec{V}$ dont les composantes V_x, V_y et V_z vérifient les relations de commutations suivantes :

$$[J_x, V_x] = 0$$

$$[J_x, V_y] = i\hbar V_z$$

$$[J_x, V_z] = -i\hbar V_y$$

et celles qui s'en déduisent par permutation circulaire.

1- Exemples d'opérateurs vectoriels :

a- Montrer que le moment cinétique $\vec{J}$ est un moment vectoriel

b- Montrer que pour une particule sans spin où $\vec{J} = \vec{L}$, les opérateurs position $\vec{R}$ et impulsion $\vec{P}$ sont vectoriels.

2- Restriction d'un opérateur à l'intérieur d'un sous-espace $E(\alpha, j)$.

a- Montrer que $\langle \alpha, j, m | \vec{J} | \alpha', j', m' \rangle = 0$ si $\alpha \neq \alpha'$ ou $j \neq j'$

En déduire que si $|\Psi\rangle$ appartient à $E(\alpha, j)$, $\vec{J}|\Psi\rangle$ appartient aussi à $E(\alpha, j)$ et par suite que :

$$[\vec{J}, P(\alpha, j)] = 0$$

$(\vec{J}|\Psi\rangle)$ désigne l'ensemble des kets obtenus en faisant agir une composante quelconque de $\vec{J}$ sur $|\Psi\rangle$.



Page de titre

Sommaire



Page 784 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

b- Expliquer pourquoi $P(\alpha, j)BP(\alpha, j)$ est la “restriction” de l’opérateur B à l’intérieur du sous-espace $E(\alpha, j)$.

3- Relations de commutation - Eléments de matrice de $\mathbf{V}$.

a- Montrer que $[\vec{J}, V^2] = 0$.

b- On pose :

$$V_{\pm} = V_x \pm iV_y$$

$$J_{\pm} = J_x \pm iJ_y$$

Calculer les six commutateurs $[J_{xi}, V_{\pm}]$ ($xi = x, y, z$).

c- En déduire les relations :

$$[J_+, V_+] = 0$$

$$[J_+, V_-] = +2\hbar V_z$$

$$[J_-, V_-] = 0$$

$$[J_-, V_+] = -2\hbar V_z$$

d- Montrer que $V_+ |\alpha, j, m\rangle$, $V_- |\alpha, j, m\rangle$, $V_z |\alpha, j, m\rangle$ sont vecteurs propres de J_z . Préciser les valeurs propres correspondantes.



Page de titre

Sommaire



Page 785 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

e- En conclure que :

$$\langle \alpha, j, m | V_{\pm} | \alpha, j, m' \rangle \neq 0 \Rightarrow \Delta m = m' - m = \pm 1$$

$$\langle \alpha, j, m | V_z | \alpha, j, m' \rangle \neq 0 \Rightarrow \Delta m = m' - m = 0$$

4- Théorème de Wigner-Eckart :

a- En calculant l'élément de matrice du commutateur $[J_+, V_+]$ entre $\langle \alpha, j, m+2 |$ et $|\alpha, j, m\rangle$. Montrer que si $-j \leq m \leq j-2$ on a :

$$\frac{\langle \alpha, j, m+1 | V_+ | \alpha, j, m \rangle}{\langle \alpha, j, m+1 | J_+ | \alpha, j, m \rangle} = \frac{\langle \alpha, j, m+2 | V_+ | \alpha, j, m+1 \rangle}{\langle \alpha, j, m+2 | J_+ | \alpha, j, m+1 \rangle} = \dots$$

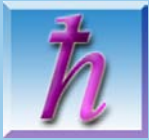
En déduire qu'à l'intérieur de l'espace $E(\alpha, j)$, les éléments de matrice de V_+ et J_+ sont proportionnels :

$$\langle \alpha, j, m | V_+ | \alpha, j, m' \rangle = \lambda_+(\alpha, j) \langle \alpha, j, m | J_+ | \alpha, j, m' \rangle$$

où $\lambda_+(\alpha, j)$ est un nombre qui ne dépend que de α et j .

b- Par un raisonnement analogue, montrer que :

$$\langle \alpha, j, m | V_- | \alpha, j, m' \rangle = \lambda_-(\alpha, j) \langle \alpha, j, m | J_- | \alpha, j, m' \rangle$$



Page de titre

Sommaire



Page 786 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

c- Calculer les éléments de matrice des commutateurs $[J_+, V_-]$ et $[J_-, V_+]$

En déduire la relation :

$$\langle \alpha, j, m | V_Z | \alpha, j, m \rangle = \hbar m \lambda_+ (\alpha, j) = \hbar m \lambda_- (\alpha, j)$$

d- En conclure que les éléments de matrice de $\vec{V}$ et $\vec{J}$ à l'intérieur du sous-espace $E(\alpha, j)$ sont proportionnels :

$$P(\alpha, j) V_z P(\alpha, j) = \lambda(\alpha, j) P(\alpha, j) J_z$$

$$P(\alpha, j) V_{\pm} P(\alpha, j) = \lambda(\alpha, j) P(\alpha, j) J_{\pm}$$

Ceci établit dans un cas particulier (restriction d'un opérateur vectoriel à l'intérieur de $E(\alpha, j)$), le théorème de Wigner-Eckart :

“A l'intérieur du sous-espace $\xi(\alpha, j)$, tous les opérateurs vectoriels $\vec{V}$ sont proportionnels à $\vec{J}$ ”.

$$\vec{V} = \lambda(\alpha, j) \vec{J}$$



Page de titre

Sommaire



Page 787 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

EP 10.11 : Tenseur de structure fine (Zero-field Splitting)

On considère un système de deux spins $\frac{1}{2}$ dont l'interaction est décrite par l'hamiltonien :

$$H = D \left(S_z^2 - \frac{2}{3} \right) + E (S_x^2 - S_y^2)$$

S_x, S_y et S_z sont les composantes du spin total $\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$ et D et E sont des constantes relatives à l'interaction dipolaire des deux spins qu'on appelle constantes de structure fine.

On note $(|\alpha_1\rangle, |\beta_1\rangle)$ et $(|\alpha_2\rangle, |\beta_2\rangle)$ les états propres des observables S_{1z}, S_{2z} respectivement et on rappelle que les observables S_{1x}, S_{2x} et S_{1y}, S_{2y} s'expriment en fonction des opérateurs S_{1+}, S_{1-} et S_{2+}, S_{2-} .

1- On considère les trois composantes de l'état triplet ($S = 1$) définies par :

$$|T_1\rangle = |\alpha_1, \alpha_2\rangle$$

$$|T_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\alpha_1, \beta_2\rangle + |\beta_1, \alpha_2\rangle)$$

$$|T_{-1}\rangle = |\beta_1, \beta_2\rangle$$

Déterminer en fonction de ces composantes :



Page de titre

Sommaire



Page 788 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

a- L'action de S_x , S_y et S_z sur $|T_1\rangle$, $|T_0\rangle$ et $|T_{-1}\rangle$ b- L'action de S_x^2 , S_y^2 et S_z^2 sur $|T_1\rangle$, $|T_0\rangle$ et $|T_{-1}\rangle$ c- L'action de S_x^2 , S_y^2 et S_z^2 sur les vecteurs $|\chi_+\rangle$ et $|\chi_-\rangle$ définis par :

$$|\chi_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|T_1\rangle + |T_{-1}\rangle)$$

$$|\chi_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|T_1\rangle - |T_{-1}\rangle)$$

2. En déduire les états propres et les valeurs propres (communément appelés Zero-field Splitting) de l'hamiltonien H .

3. Tracer le diagramme des énergies pour $D > 0$, $E < 0$ et $|D| > |E|$ et en déduire les fréquences des transitions qui interviennent lorsque les éléments de matrice $\langle \Psi | S_u | \Phi \rangle$ sont différents de zéro.

$|\Psi\rangle$ et $|\Phi\rangle$ représentent deux états propres de H et $u = x, y$ ou z .



Page de titre

Sommaire



Page 789 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

EP 10.12 Modèles du noyau

Les noyaux des atomes sont constitués de particules appelées nucléons. Le nucléon est caractérisé par sa masse M , son spin $S = \frac{1}{2}$ et ses deux états de charge. On distingue ces deux états par un nombre quantique τ qui prend deux valeurs $\tau = +1$ dans l'état proton et $\tau = 0$ dans l'état neutron. Les nucléons obéissent au principe d'exclusion de Pauli qui s'applique à l'ensemble des particules quantiques. On admet que la stabilité d'un noyau résulte de l'interaction indépendante de la charge des A nucléons pris deux à deux qui le constituent. On a pu cependant montrer que le $i^{\text{ième}}$ nucléon est soumis à un potentiel moyen U_i dû à tous les autres nucléons qui s'exprime simplement. L'hamiltonien approché du noyau s'écrit ainsi :

$$H = \sum_{i=1}^A \left(\frac{P_i^2}{2M} + U_i \right)$$

1- Un grand nombre de propriétés des noyaux s'obtient en choisissant pour U_i , un potentiel d'oscillateur harmonique à trois dimensions isotrope.

$$U_i = \frac{1}{2} M \omega^2 (x_i^2 + y_i^2 + z_i^2)$$

(x_i, y_i, z_i) étant les coordonnées d'espace du $i^{\text{ième}}$ nucléon et ω une pulsation caractéristique. On cherche alors les états stationnaires d'énergie du $i^{\text{ième}}$ nucléon.



Page de titre

Sommaire



Page 790 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

a- En tenant compte du spin du $i^{\text{ème}}$ nucléon et des résultats connus de l'oscillateur harmonique à une dimension, donner les valeurs de l'énergie E des états stationnaires et préciser l'ensemble des nombres quantiques qui caractérisent ces états. Montrer que les énergies peuvent s'exprimer à l'aide d'un seul nombre quantique N . Donner explicitement l'énergie et la dégénérescence de l'état fondamental et du premier état excité. On ne s'intéressera dans toute la suite du problème qu'à ces deux seuls états.

b- En explicitant la partie spatiale des fonctions propres de H , quelle est l'action de l'opérateur moment cinétique orbital $\vec{L}$ sur l'état fondamental ?. Rechercher les combinaisons linéaires des fonctions d'onde du premier niveau excité qui sont fonctions propres de $\vec{L}^2$, quelles sont les valeurs propres correspondantes ?. Donner le nouvel ensemble de nombres quantiques que l'on peut utiliser pour caractériser le niveau fondamental et le premier état excité, préciser l'E.C.O.C. correspondant.

c- On pose $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$, moment cinétique total. Quels sont alors les valeurs propres de $\vec{J}^2$ et J_z dans l'état fondamental et dans les états du premier niveau excité ?. Quel est alors le troisième ensemble de nombres quantiques que l'on peut utiliser pour caractériser ces états et préciser l'E.C.O.C. correspondant.

2- En fait le potentiel U_i donné en 1 n'est pas suffisant pour décrire correctement les noyaux des atomes. On doit ajouter à U_i un terme d'interaction spin-orbite de telle sorte que le nouveau potentiel devient :

$$U_i = \frac{1}{2}M\omega^2(x_i^2 + y_i^2 + z_i^2) - \frac{\eta}{\hbar^2}\vec{L}_i \cdot \vec{S}_i$$



Page de titre

Sommaire



Page 791 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

η étant une constante à ajuster empiriquement.

a- Calculer les commutateurs de L_z et S_z avec le terme spin-orbite. Donner les valeurs du commutateur de chacune des composantes de $\vec{J}$ avec le terme spin-orbite. Préciser alors quel doit être l'E.C.O.C. permettant de décrire les états propres du nouvel hamiltonien H' correspondant et l'ensemble des nombres quantiques nécessaires pour caractériser ces états.

b- Quelles sont les énergies des états stationnaires du $i^{\text{ème}}$ nucléon ?.

c- Calculer ces énergies pour le niveau fondamental et les deux premiers niveaux excités sachant que $\eta = 0,1 \hbar\omega$. Quelle est la dégénérescence de ces niveaux ?.

3- L'état d'un système de A nucléons est décrit en les distribuant dans les différents états stationnaires individuels trouvés dans 2. Une "couche" est l'ensemble des états quantiques définis en 2 et une "configuration" est une distribution des A nucléons dans différentes couches. Une "couche" est dite complète lorsqu'on y a réparti le nombre maximum de nucléons compatible avec le principe d'exclusion de Pauli.

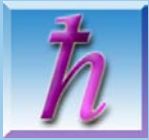
a- Les noyaux dont les configurations correspondent à des couches complètes ont des propriétés de stabilité remarquables. Les nombres de neutrons (ou de proton) qui les constituent sont appelés nombres magiques. Quels sont les trois premiers nombres magiques ? . Quels sont les noyaux correspondants ?.

Expliquer qualitativement pourquoi le moment cinétique total I d'une couche complète est égal à zéro.

b- Quelle est la configuration de l'état fondamental du noyau ${}^5\text{Li}$ constitué de 3 protons et 2 neutrons ? . Quelle est la configuration du premier état excité de ${}^5\text{Li}$?.

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 792 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

Quel est son moment cinétique total ? Calculer l'énergie d'excitation sachant que $\hbar\omega = 20 \text{ Mev}$.



Page de titre

Sommaire



Page 793 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Chapitre 11

Perturbations stationnaires et méthode variationnelle

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 794 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

L'étude quantique d'un système physique est basée sur la résolution de l'équation de Schrödinger associée à ce système. Cette résolution ne peut se faire exactement que dans des cas très particuliers où l'hamiltonien est suffisamment simple pour être facilement diagonalisable et dans ces cas on a accès aux formes analytiques des énergies et des fonctions d'onde.

Dans le cas général, l'équation de Schrödinger est trop compliquée pour qu'on puisse trouver les solutions sous formes analytiques. Par exemple on ne sait pas traiter, même en ne tenant compte que de l'interaction électrostatique, les atomes à deux ou plusieurs électrons; on ne sait pas diagonaliser exactement l'hamiltonien d'un système lorsqu'on incorpore le couplage spin-orbite, le couplage avec un champ électromagnétique, les effets relativistes, l'effet du champ cristallin ...,

Dans ces cas, on utilise en général la résolution numérique, mais il est quand même utile, pour s'assurer du bien-fondé des hypothèses faites et de l'importance de la hiérarchie des interactions introduites, d'avoir au moins une formulation approximative des solutions analytiques; on a alors recours à des méthodes d'approximation. Ces méthodes très largement utilisées correspondent à la démarche habituelle du physicien qui commence pour un problème donné par dégager les effets principaux et d'expliquer ensuite les détails provenant des effets secondaires, négligés en première approximation, et qui sont souvent sources d'applications et de meilleure compréhension des lois physiques.

Les méthodes d'approximation sont nombreuses en physique quantique

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 795 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

mais on va introduire dans ce chapitre deux d'entre elles qui sont relatives à des phénomènes indépendants du temps et qui sont importantes et facilement utilisables : les perturbations stationnaires et la méthode variationnelle. On abordera dans le chapitre suivant les perturbations dépendant du temps.


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 796 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

1. Méthodes des perturbations stationnaires

1.1. Principe de la méthode

Cette méthode s'applique dans les cas où le système réel est stationnaire et peut être décrit par de petites modifications d'un système idéal dont les solutions de l'équation de Schrödinger peuvent être obtenues facilement. L'hamiltonien du système est alors de la forme :

$$H = H_0 + W \quad (11.1)$$

où H_0 est un opérateur indépendant du temps et dont on connaît les valeurs propres et les états propres et W est un opérateur dont les éléments de matrice dans une représentation donnée sont petits par rapport à ceux de H_0 .

H_0 est appelé "hamiltonien non perturbé" et W est appelé "perturbation". Si W ne dépend pas du temps, la perturbation est dite stationnaire ; ce que nous supposons dans la suite.

Nous supposons également que les énergies propres E de H_0 forment un spectre discret et nous les repérons par un indice entier n . Les états propres correspondants sont notés $|\phi_n^\alpha\rangle$, l'indice α permettant de distinguer, dans le cas d'une énergie propre E_n dégénérée, les divers vecteurs du sous-espace de dégénérescence qui lui est associé. On a alors :

$$H_0 |\phi_n^\alpha\rangle = E_n |\phi_n^\alpha\rangle \quad (11.2)$$



Page de titre

Sommaire



Page 797 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

où l'ensemble des $|\phi_n^\alpha\rangle$ forme une base orthonormée de l'espace des états, soit :

$$\langle \phi_{n'}^{\alpha'} | \phi_n^\alpha \rangle = \delta_{nn'} \delta_{\alpha\alpha'} \quad (11.3)$$

$$\sum_n \sum_\alpha |\phi_n^\alpha\rangle \langle \phi_n^\alpha| = 1 \quad (11.4)$$

Pour bien comprendre les modifications apportées par la perturbation, on introduit un paramètre réel λ que l'on peut faire varier de manière continue entre 0 et 1 ($0 < \lambda < 1$), ce qui permet d'installer progressivement la perturbation et on écrit alors :

$$H(\lambda) = H_0 + \lambda W \quad (11.5)$$

Pour $\lambda = 0$, $H(\lambda)$ coïncide avec l'hamiltonien non perturbé H_0 et pour $\lambda = 1$, $H(\lambda)$ s'identifie à l'hamiltonien perturbé H . Les valeurs propres et les vecteurs propres $E(\lambda)$ et $|\Psi(\lambda)\rangle$ de $H(\lambda)$ dépendent en général de λ . Pour λ très petit devant l'unité, ils restent voisins de ceux de H_0 vers lesquels ils tendent lorsque λ tend 0.

Nous avons représenté sur la figure 11.1 un exemple de variation des valeurs propres $E(\lambda)$ en fonction de λ . Pour $\lambda = 0$, on obtient le spectre de H_0 . Pour les valeurs propres dégénérées on remarque que l'application de W peut lever d'éventuelles dégénérescences.


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)


Page 798 de 978

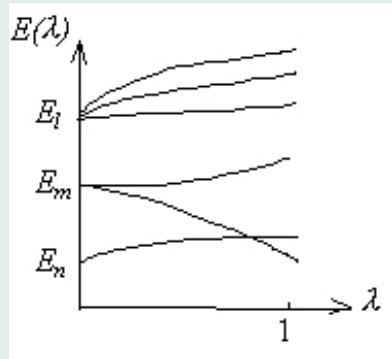
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)


Figure 11.1 : Modification des niveaux d'énergie en fonction de l'intensité de la perturbation

Nous allons dans la suite résoudre de manière approchée l'équation aux valeurs propres de $H(\lambda)$ en développant les énergies et les états propres de $H(\lambda)$ en série de puissance du paramètre λ qu'on appellera paramètre de perturbation.


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)
[◀](#)
[▶](#)
[◀](#)
[▶](#)
[Page 799 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

1.2. Equation aux valeurs propres de $H(\lambda)$

1.2.1. Equations de perturbation

L'équation aux valeurs propres de $H(\lambda)$ s'écrit :

$$H(\lambda) |\Psi(\lambda)\rangle = E(\lambda) |\Psi(\lambda)\rangle \quad (11.6)$$

Soit :

$$(H_0 + \lambda W) |\Psi(\lambda)\rangle = E(\lambda) |\Psi(\lambda)\rangle \quad (11.7)$$

Comme le paramètre λ est compris entre 0 et 1, on admet que $E(\lambda)$ et $|\Psi(\lambda)\rangle$ peuvent être développés en puissance de λ sous la forme :

$$E(\lambda) = \varepsilon_0 + \lambda \varepsilon_1 + \lambda^2 \varepsilon_2 + \dots + \lambda^p \varepsilon_p + \dots = \sum_{p=0}^{\infty} \lambda^p \varepsilon_p \quad (11.8)$$

$$|\Psi(\lambda)\rangle = |0\rangle + \lambda |1\rangle + \lambda^2 |2\rangle + \dots + \lambda^p |p\rangle + \dots = \sum_{p=0}^{\infty} \lambda^p |p\rangle \quad (11.9)$$

En reportant ces développements dans (7) on obtient :

$$(H_0 + \lambda W) \left(\sum_{p=0}^{\infty} \lambda^p |p\rangle \right) = \left(\sum_{p=0}^{\infty} \lambda^p \varepsilon_p \right) \left(\sum_{p=0}^{\infty} \lambda^p |p\rangle \right) \quad (11.10)$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)


Page 800 de 978

[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

En égalant les coefficients des puissances successives de λ dans les deux membres on obtient l'ensemble des équations suivantes dites équations de perturbation :

*Ordre 0 : (λ^0)

$$(H_0 - \varepsilon_0) |0\rangle = 0 \quad (11.11)$$

*Ordre 1 : (λ^1)

$$(H_0 - \varepsilon_0) |1\rangle + (W - \varepsilon_1) |0\rangle = 0 \quad (11.12)$$

*Ordre 2 : (λ^2)

$$(H_0 - \varepsilon_0) |2\rangle + (W - \varepsilon_1) |1\rangle - \varepsilon_2 |0\rangle = 0 \quad (11.13)$$

$$\vdots$$

$$\dots\dots\dots$$

*Ordre p : (λ^p)

$$(H_0 - \varepsilon_0) |p\rangle + (W - \varepsilon_1) |p-1\rangle - \varepsilon_2 |p-2\rangle \dots - \varepsilon_p |0\rangle = 0 \quad (11.14)$$

On se limitera en fait aux trois premières équations, c'est à dire qu'on négligera dans le développement de $E(\lambda)$ et $|\Psi(\lambda)\rangle$ les termes d'ordre supérieur à 2.



Page de titre

Sommaire



Page 801 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

1.2.2. Norme de $|\Psi(\lambda)\rangle$

La définition de $|\Psi(\lambda)\rangle$ ne lui impose pas d'être normée. On verra qu'il est plus commode que $|\Psi(\lambda)\rangle$ satisfasse à la condition :

$$\langle 0 | \Psi(\lambda) \rangle = \langle 0 | 0 \rangle = 1 \quad (11.15)$$

Cette condition étant valable quelque soit le paramètre λ , il vient :

$$\langle 0 | 1 \rangle = \langle 0 | 2 \rangle = \dots = \langle 0 | p \rangle = 0 \quad (11.16)$$

Ce qui implique que $|\Psi(\lambda)\rangle$ s'obtient en ajoutant à $|0\rangle$ un vecteur $|v\rangle$:

$$|v\rangle = \lambda |1\rangle + \lambda^2 |2\rangle + \dots + \lambda^p |p\rangle \quad (11.17)$$

qui est perpendiculaire à $|0\rangle$ et qui s'annule pour $\lambda = 0$.

1.3. Perturbation d'un niveau non dégénéré

Lorsque la valeur propre E_n de l'hamiltonien non perturbé H_0 est non dégénérée, il lui correspond un seul vecteur propre $|\phi_n\rangle$. C'est à dire qu'on a :

$$H_0 |\phi_n\rangle = E_n |\phi_n\rangle \quad (11.18)$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 802 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

mais les autres valeurs propres $E_{m \neq n}$ peuvent être dégénérées de sorte qu'on a :

$$H_0 |\phi_m^\alpha\rangle = E_m |\phi_m^\alpha\rangle \quad (11.19)$$

Avant l'établissement de la perturbation, c'est à dire à l'ordre 0 dans les développements (11.8) et (11.9) on aura donc :

$$\varepsilon_0 = E_n \quad (11.20)$$

$$|0\rangle = |\phi_n\rangle \quad (11.21)$$

1.3.1. Correction à l'ordre général

1.3.1.1. Correction à l'énergie

La projection des équations de perturbation (11-14) sur l'état $|0\rangle$ donne en tenant compte de (11.15) :

$$\begin{aligned} \varepsilon_0 &= \langle 0 | H_0 | 0 \rangle \\ \varepsilon_1 &= \langle 0 | W | 0 \rangle \\ \varepsilon_2 &= \langle 0 | W | 1 \rangle \\ &\vdots \\ \varepsilon_{\mathbf{p}} &= \langle \mathbf{0} | \mathbf{W} | \mathbf{p} - 1 \rangle \end{aligned} \quad (11.22)$$



Page de titre

Sommaire



Page 803 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

1.3.1.2. Correction au vecteur propre

La projection de l'équation générale (11.14) sur l'état $|\phi_m^\alpha\rangle$ donne :

* Pour $m \neq n$:

$$\langle \phi_m^\alpha | p \rangle = \frac{1}{E_n - E_m} \left\{ \langle \phi_m^\alpha | W - \varepsilon_1 | p - 1 \rangle - \varepsilon_2 \langle \phi_m^\alpha | p - 2 \rangle \cdots - \varepsilon_{p-1} \langle \phi_m^\alpha | 1 \rangle \right\} \quad (11.23)$$

* Pour $m = n$

$$\langle \phi_m | p \rangle = 0 \quad \text{car} \quad \langle 0 | p \rangle = 0 \quad (11.24)$$

Comme la base des vecteurs propres associée à H_0 est complète on a :

$$|\phi_n\rangle \langle \phi_n| + \sum_m \sum_\alpha |\phi_m^\alpha\rangle \langle \phi_m^\alpha| = 1 \quad (11.25)$$

Ce qui permet en multipliant cette équation par $|p\rangle$ d'obtenir la correction de l'état perturbé à l'ordre p :

$$|p\rangle = \sum_{m \neq n} \sum_\alpha \langle \phi_m^\alpha | p \rangle |\phi_m^\alpha\rangle \quad (11.26)$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 804 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

En utilisant la relation (11.23) on obtient :

$$|p\rangle = \sum_{m \neq n} \sum_{\alpha} \frac{\langle \phi_m^{\alpha} | [W | p-1\rangle - \varepsilon_1 | p-1\rangle - \dots - \varepsilon_{p-1} | 1\rangle]}{E_n - E_m} | \phi_m^{\alpha} \rangle \quad (11.27)$$

1.3.2. Correction au premier ordre

1.3.2.1. Correction à l'énergie

D'après (11.22) on a :

$$\varepsilon_1 = \langle 0 | W | 0 \rangle \quad (11.28)$$

soit :

$$\varepsilon_1 = \langle \phi_n | W | \phi_n \rangle \quad (11.29)$$

La correction au premier ordre à l'énergie non dégénérée E_n est donc égale à la valeur moyenne de la perturbation W dans l'état non-perturbé $|\phi_n\rangle$.

1.3.2.2. Correction au vecteur propre

On a d'après (11.27) :

$$|1\rangle = \sum_{m \neq n} \sum_{\alpha} \frac{\langle \phi_m^{\alpha} | W | 0 \rangle}{E_n - E_m} | \phi_m^{\alpha} \rangle \quad (11.30)$$



Page de titre

Sommaire



Page 805 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

soit d'après (11.20)

$$|1\rangle = \sum_{m \neq n} \sum_{\alpha} \frac{\langle \phi_m^{\alpha} | W | \phi_n \rangle}{E_n - E_m} | \phi_m^{\alpha} \rangle \quad (11.31)$$

La correction au premier ordre du vecteur d'état est une superposition linéaire de tous les états non perturbés autres que $|\phi_n\rangle$. On dit que la perturbation engendre une "contamination" de l'état $|\phi_n\rangle$ par les états $|\phi_m^{\alpha}\rangle$. Cette contamination est d'autant plus importante que le couplage caractérisé par l'élément de matrice $\langle \phi_m^{\alpha} | W | \phi_n \rangle$ est fort et que le niveau contaminant E_m est proche de E_n .

1.3.3. Correction au deuxième ordre

1.3.3.1. Correction à l'énergie

Elle est, d'après (11.20) et (11.21), égale à :

$$\varepsilon_2 = \langle \phi_n | W | 1 \rangle \quad (11.32)$$

soit en utilisant (11.31) :

$$\varepsilon_2 = \sum_{m \neq n} \sum_{\alpha} \frac{\langle \phi_n | W | \phi_m^{\alpha} \rangle}{E_n - E_m} \langle \phi_m^{\alpha} | W | \phi_n \rangle \quad (11.33)$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 806 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

On obtient :

$$\varepsilon_2 = \sum_{m \neq n} \sum_{\alpha} \frac{|\langle \phi_n | W | \phi_m^\alpha \rangle|^2}{E_n - E_m} \quad (11.34)$$

On peut dans le cas où la série est difficile à calculer avoir une idée de la contribution de ce terme en faisant une majoration. En effet, on sait que les dénominateurs sont tous supérieurs en module à la distance ΔE entre E_n et le niveau qui lui est le plus proche, c'est à dire :

$$|E_n - E_m| \geq \Delta E \quad (11.35)$$

on aura alors :

$$|\varepsilon_2| \leq \frac{1}{\Delta E} \sum_{m \neq n} \sum_{\alpha} |\langle \phi_n | W | \phi_m^\alpha \rangle|^2 \quad (11.36)$$

et d'après (11.25) on a :

$$\sum_{m \neq n} \sum_{\alpha} |\phi_m^\alpha \rangle \langle \phi_m^\alpha| = 1 - |\phi_n \rangle \langle \phi_n| \quad (11.37)$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 807 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

Ce qui donne :

$$\begin{aligned}
 \sum_{m \neq n} \sum_{\alpha} |\langle \phi_n | W | \phi_m^{\alpha} \rangle|^2 &= \langle \phi_n | W (\sum_{m \neq n} \sum_{\alpha} | \phi_m^{\alpha} \rangle \langle \phi_m^{\alpha} |) W | \phi_n \rangle \quad (11.38) \\
 &= \langle \phi_n | W (1 - | \phi_n \rangle \langle \phi_n |) W | \phi_n \rangle \\
 &= \langle \phi_n | W^2 | \phi_n \rangle - \langle \phi_n | W | \phi_n \rangle^2 \\
 &= \langle W^2 \rangle - \langle W \rangle^2 \\
 &= (\Delta W)^2 \quad (11.39)
 \end{aligned}$$

où ΔW est l'écart quadratique moyen de la perturbation W dans l'état non perturbé $|\phi_n\rangle$

En reportant (11.39) dans l'inégalité (11.36) on obtient :

$$|\varepsilon_2| \leq \frac{1}{\Delta E} (\Delta W)^2 \quad (11.40)$$

Ce qui permet d'avoir une idée sur l'ordre de grandeur de l'erreur commise sur l'énergie lorsqu'on ne tient compte que de la correction au premier ordre.

1.3.3.2. Correction au vecteur propre



Page de titre

Sommaire



Page 808 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Elle s'obtient facilement à partir de (11.27) et elle s'écrit :

$$\begin{aligned}
 |2\rangle &= \sum_{m \neq n} \sum_{\alpha} \frac{1}{E_n - E_m} \langle \phi_m^{\alpha} | (W |1\rangle - \varepsilon_1 |1\rangle - \varepsilon_2 |0\rangle) | \phi_m^{\alpha} \rangle \\
 &= \sum_{m \neq n} \sum_{\alpha} \frac{1}{E_n - E_m} \{ \langle \phi_m^{\alpha} | W - \varepsilon_1 |1\rangle - \varepsilon_2 \langle \phi_m^{\alpha} | \phi_n \rangle \} | \phi_m^{\alpha} \rangle \\
 &= \sum_{m \neq n} \sum_{\alpha} \frac{\langle \phi_m^{\alpha} | W - \varepsilon_1 |1\rangle}{E_n - E_m} | \phi_m^{\alpha} \rangle
 \end{aligned} \tag{11.41}$$

relation qu'on peut expliciter en remplaçant ε_1 et $|1\rangle$ par leurs expressions (11.29) et (11.31).

1.3.4. Généralisation

Les calculs des différents ε_p et $|p\rangle$ peut se poursuivre suivant le même principe mais on se limite en général à la correction au vecteur propre à l'ordre 1 et à celle de la valeur propre à l'ordre 2.

Les valeurs propres et les vecteurs propres de l'hamiltonien perturbé H s'obtiennent en faisant $\lambda = 1$ dans les développements (11.8) et (11.9) de


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 809 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

$|\Psi(\lambda)\rangle$ et $E(\lambda)$. On obtient en définitive :

$$|\Psi\rangle = |\phi_n\rangle + \sum_{m \neq n} \sum_{\alpha} \frac{\langle \phi_m^{\alpha} | \mathbf{W} | \phi_n \rangle}{E_n - E_m} |\phi_m^{\alpha}\rangle + \dots \quad (11.42)$$

$$E = E_n + \langle \phi_n | \mathbf{W} | \phi_n \rangle + \sum_{m \neq n} \sum_{\alpha} \frac{|\langle \phi_n | \mathbf{W} | \phi_m^{\alpha} \rangle|^2}{E_n - E_m} + \dots \quad (11.43)$$

1.3.5. Constante de renormalisation

L'état perturbé $|\Psi(\lambda)\rangle$ n'est pas normé, on a simplement imposé la condition $\langle 0 | \Psi(\lambda) \rangle = 1$ (11.15) qui a entraîné les relations (11.16).

Pour normaliser $|\Psi(\lambda)\rangle$ on pose :

$$\langle \Psi(\lambda) | \Psi(\lambda) \rangle = N^{-1} \quad (11.44)$$

Comme d'après (11.9) on a :

$$\langle \Psi(\lambda) | \Psi(\lambda) \rangle = \langle 0 | 0 \rangle + \lambda^2 \langle 1 | 1 \rangle + \dots \quad (11.45)$$

il vient :

$$\langle 0 | 0 \rangle + \lambda^2 \langle 1 | 1 \rangle + \dots = N^{-1} \quad (11.46)$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 810 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

En utilisant les relations (11.15) et (11.31) :

$$\langle 0 | 0 \rangle = 1 \quad (11.47)$$

$$|1\rangle = \sum_{m \neq n} \sum_{\alpha} \frac{|\langle \phi_m^{\alpha} | W | \phi_n \rangle|}{E_n - E_m} |\phi_m^{\alpha}\rangle \quad (11.48)$$

on a :

$$\langle 1 | 1 \rangle = \sum_{m \neq n} \sum_{\alpha} \frac{|\langle \phi_n | W | \phi_m^{\alpha} \rangle|^2}{(E_n - E_m)^2} \quad (11.49)$$

Ce qui conduit à :

$$N^{-1} = 1 + \lambda^2 \sum_{m \neq n} \sum_{\alpha} \frac{|\langle \phi_n | W | \phi_m^{\alpha} \rangle|^2}{(E_n - E_m)^2} + \dots \quad (11.50)$$

λ étant petit devant l'unité, on peut écrire en première approximation :

$$N \simeq 1 - \lambda^2 \sum_{m \neq n} \sum_{\alpha} \frac{|\langle \phi_n | W | \phi_m^{\alpha} \rangle|^2}{(E_n - E_m)^2} + \dots \quad (11.51)$$

Par ailleurs en dérivant par rapport à E_n , le développement de $E(\lambda)$ donné par (11.8) et (11.43), on obtient :

$$\frac{\partial E(\lambda)}{\partial E_n} = 1 - \lambda^2 \sum_{m \neq n} \sum_{\alpha} \frac{|\langle \phi_n | W | \phi_m^{\alpha} \rangle|^2}{(E_n - E_m)^2} + \dots \quad (11.52)$$



Page de titre

Sommaire



Page 811 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

En comparant les expressions (11.51) et (11.52) on peut écrire :

$$N \simeq \frac{\partial E(\lambda)}{\partial E_n} \quad (11.53)$$

Ce résultat peut être généralisé à tous les ordres de perturbation ce qui nous permet d'affirmer que la constante de renormalisation des états perturbés à l'ordre p est la dérivée partielle de l'énergie perturbée développée à cet ordre, par rapport à l'énergie non perturbée.

Enfin, dans l'expression (11.51) de N , le deuxième terme peut s'interpréter comme une probabilité de fuite vers les états différents de n .

1.3.6. Application : Oscillateur anharmonique :

C'est un oscillateur dont l'hamiltonien H_0 est perturbé par l'opérateur W tel que :

$$W = \sigma \hbar \omega \tilde{X}^3 \quad (11.54)$$

où σ est un nombre réel sans dimension très inférieur à 1 et $\hat{X}$ l'opérateur défini par :

$$\tilde{X} = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} X \quad (11.55)$$



Page de titre

Sommaire



Page 812 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

où X est l'opérateur position.

L'hamiltonien de l'oscillateur est donc :

$$\begin{aligned} H &= H_0 + W = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2 + \sigma\hbar\omega\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{3/2} X^3 \\ &= \frac{P^2}{2m} + V(x) \end{aligned} \quad (11.56)$$

Nous avons représenté sur la figure 11.2 les variations en fonction de la position x du potentiel $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 + W(x)$ et du potentiel harmonique $\frac{1}{2}m\omega^2 x^2$.



Page de titre

Sommaire



Page 813 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

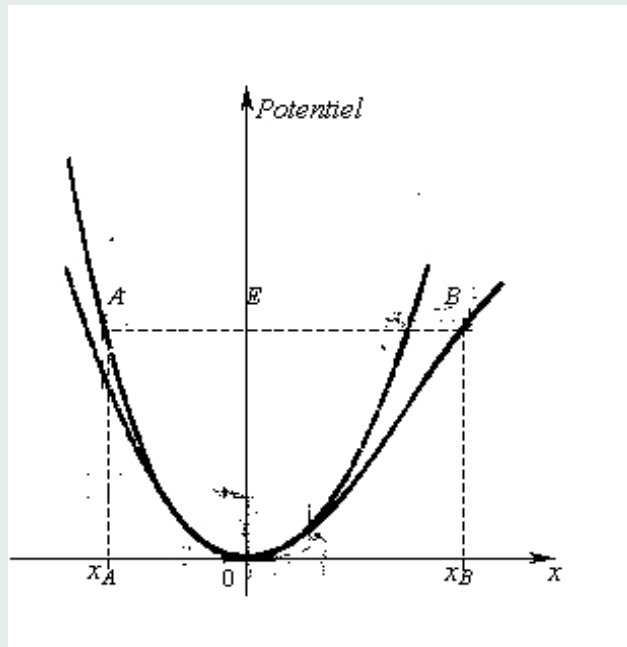


Figure 11.2 : Variation en fonction de x du potentiel anharmonique (trait plein) et du potentiel harmonique (pointillés).

Comme σ est très inférieur à l'unité, on considérera W comme une perturbation stationnaire dans le calcul des énergies propres et valeurs


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 814 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

propres du hamiltonien perturbé H .

Pour conduire ces calculs nous allons d'abord déterminer les éléments de matrice de W dans la représentation $\{| \varphi_n \rangle\}$.

Comme :

$$\hat{X} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a^+ + a)$$

on a :

$$W = \frac{\sigma \hbar \omega}{2^{3/2}}(a^+ + a)^3 = \frac{\sigma \hbar \omega}{2^{3/2}}(a^{+3} + a^3 + 3a^+aa^+ + 3a^+a^2 + 3a) \quad (11.57)$$

Ce qui donne, après introduction de l'opérateur $N = a^+a$ défini au chapitre 6.

$$W = \frac{\sigma \hbar \omega}{2^{3/2}} \left[a^{+3} + a^3 + 3Na^+ + 3(N+1)a \right] \quad (11.58)$$

Les seuls éléments de matrice non nuls sont ceux qui sont pris entre $| \varphi_n \rangle$ et



Page de titre

Sommaire



Page 815 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

les états $|\varphi_{n\pm 3}\rangle$, soit après calcul :

$$\begin{aligned}\langle\phi_{n+3}|W|\phi_n\rangle &= \left[\frac{(n+3)(n+2)(n+1)}{8}\right]^{1/2} \sigma\hbar\omega \\ \langle\phi_{n-3}|W|\phi_n\rangle &= \left[\frac{n(n-1)(n-2)}{8}\right]^{1/2} \sigma\hbar\omega \\ \langle\phi_{n+1}|W|\phi_n\rangle &= 3\left[\frac{n+1}{2}\right]^{3/2} \sigma\hbar\omega \\ \langle\phi_{n-1}|W|\phi_n\rangle &= 3\left(\frac{n}{2}\right)^{3/2} \sigma\hbar\omega\end{aligned}\tag{11.59}$$

(i) Energies propres :

La correction au premier ordre est nulle car l'élément de matrice diagonal $\langle\phi_n|W|\phi_n\rangle$ est toujours égal à zéro.

La correction au second ordre s'obtient en utilisant la relation (11.34) et les relations (11.59). On aboutit après un calcul relativement long mais non difficile à l'énergie propre E_n qui s'écrit :

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega - \frac{15}{4}\sigma^2\left(n + \frac{1}{2}\right)^2\hbar\omega - \frac{7}{16}\sigma^2\hbar\omega + \dots\tag{11.60}$$



Page de titre

Sommaire



Page 816 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

L'écart entre deux niveaux consécutifs E_{n-1} et E_n est :

$$E_n - E_{n-1} = \left(1 - \frac{15}{2}\sigma^2 n\right)\hbar\omega \quad (11.61)$$

A la différence de l'oscillateur harmonique cet écart dépend de n . Les niveaux ne sont plus équidistants et se resserrent lorsque n augmente.

L'effet de la perturbation est donc de déplacer les niveaux vers le bas, quelque soit le signe du réel σ (fig. 11.3)

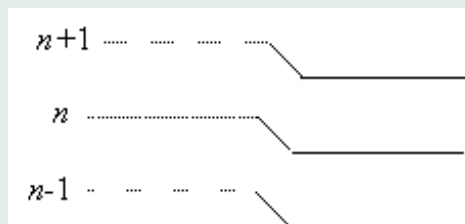


Figure 11.3 : Niveaux d'énergie de H_0 (pointillés) et de H (trait plein).

(ii) Etats propres

En utilisant la relation (11.42) et les relations (11.59) on obtient au premier


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 817 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

ordre de perturbation :

$$\begin{aligned}
 |\Psi_n\rangle = & |\phi_n\rangle - 3\sigma\left(\frac{n+1}{2}\right)^{3/2} |\phi_{n+1}\rangle + 3\sigma\left(\frac{n}{2}\right)^{3/2} |\phi_{n-1}\rangle \\
 & - \frac{\sigma}{3} \left[\frac{(n+3)(n+2)(n+1)}{8} \right]^{1/2} |\phi_{n+3}\rangle \\
 & + \frac{\sigma}{3} \left[\frac{n(n-1)(n-2)}{8} \right]^{1/2} |\phi_{n-3}\rangle + \dots
 \end{aligned}
 \tag{11.62}$$

On remarque que l'état $|\phi_n\rangle$ est contaminé par les états $|\phi_{n+1}\rangle$, $|\phi_{n-1}\rangle$, $|\phi_{n+3}\rangle$ et $|\phi_{n-3}\rangle$.

1.4. Perturbation d'un niveau dégénéré

Lorsque la valeur propre E_n de l'hamiltonien non perturbé H_0 est g_n fois dégénérée, les équations de perturbations (11.11-11.14) établis dans 1-2 demeurent toujours valables, mais la relation $\varepsilon_0 = E_n$ ne suffit plus à déterminer le vecteur $|0\rangle$ car l'équation :

$$H_0 |0\rangle = \varepsilon_0 |0\rangle \tag{11.63}$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 818 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

peut être vérifiée par n'importe quelle combinaison linéaire des g_n vecteurs $|\phi_n^\alpha\rangle$ sous-tendant le sous-espace de dégénérescence ξ_n de la valeur propre E_n . On sait donc seulement que le vecteur $|0\rangle$ appartient au sous-espace ξ_n .

On va se limiter, pour calculer les valeurs propres et les états propres de l'hamiltonien total H au premier ordre en λ pour les énergies et à l'ordre zéro pour les vecteurs propres.

1.4.1. Equation de perturbation à l'ordre 1

Soit P_n l'opérateur projection sur le sous-espace ξ_n , P_n est donc défini par :

$$P_n = \sum_{\alpha=1}^{g_n} |\phi_n^\alpha\rangle \langle \phi_n^\alpha| \quad (11.64)$$

et comme le vecteur $|0\rangle$ appartient à ξ_n on a bien sur :

$$P_n |0\rangle = |0\rangle \quad (11.65)$$

Considérons l'équation de perturbation (11.12) :

$$(H_0 - \varepsilon_0) |1\rangle + (W - \varepsilon_1) |0\rangle = 0 \quad (11.66)$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)


Page 819 de 978

[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

La projection de cette équation sur ξ_n donne :

$$P_n(H_0 - \varepsilon_0) |1\rangle + P_n(W - \varepsilon_1) |0\rangle = 0 \quad (11.67)$$

or

$$P_n H_0 = \sum_{\alpha=1}^{g_n} |\phi_n^\alpha\rangle \langle \phi_n^\alpha| H_0 = E_n \sum_{\alpha=1}^{g_n} |\phi_n^\alpha\rangle \langle \phi_n^\alpha| \quad (11.68)$$

$$= E_n P_n \quad (11.69)$$

donc

$$P_n(H_0 - \varepsilon_0) = P_n(E_n - \varepsilon_0) = 0. \quad \text{car } (E_n = \varepsilon_0) \quad (11.70)$$

L'équation (11.67) devient alors :

$$P_n(W - \varepsilon_1) |0\rangle = 0 \quad (11.71)$$

Soit :

$$P_n W |0\rangle = \varepsilon_1 |0\rangle \quad (11.72)$$

comme

$$P_n |0\rangle = |0\rangle \quad (11.73)$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 820 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

il vient alors :

$$P_n W P_n |0\rangle = \varepsilon_1 |0\rangle \quad (11.74)$$

$P_n W P_n$ est appelé restriction de W au sous-espace ξ_n et on le note :

$$\tilde{W} = P_n W P_n \quad (11.75)$$

1.4.2. Opérateur restriction $\tilde{W}$

Les éléments de matrice de $\tilde{W}$ sont tels que :

$$\langle \phi_\ell^\beta | \tilde{W} | \phi_m^\gamma \rangle = \langle \phi_\ell^\beta | P_n W P_n | \phi_m^\gamma \rangle \quad (11.76)$$

Or :

$$P_n | \phi_m^\gamma \rangle = \sum_{\alpha} | \phi_n^\alpha \rangle \langle \phi_n^\alpha | \phi_m^\gamma \rangle = \delta_{nm} | \phi_n^\gamma \rangle \quad (11.77)$$

de même :

$$\langle \phi_\ell^\beta | P_n = \sum_{\alpha} \langle \phi_\ell^\beta | \phi_n^\alpha \rangle \langle \phi_n^\alpha | = \delta_{n\ell} \langle \phi_n^\beta | \quad (11.78)$$



Page de titre

Sommaire

◀

▶

◀

▶

Page 821 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

de sorte que :

$$\langle \phi_\ell^\beta | \bar{W} | \phi_m^\gamma \rangle = \delta_{n\ell} \delta_{nm} \langle \phi_n^\beta | W | \phi_n^\gamma \rangle \quad (11.79)$$

$\bar{W}$ n'a donc d'éléments de matrice non nuls qu'à l'intérieur du sous-espace de dégénérescence ξ_n . Ils sont alors identiques à ceux de W . $\bar{W}$ se réduit alors à une matrice carrée $g_n \times g_n$ obtenue en ignorant tous les états autres que les états $|\phi_n^\alpha\rangle$:

$$\bar{W} = \begin{pmatrix} 0 & \vdots & 0 & \vdots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ & \vdots & & \vdots & \\ & \vdots & \xi_n & \vdots & \\ & \vdots & & \vdots & \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \vdots & 0 & \vdots & 0 \end{pmatrix} \quad (11.80)$$

1.4.3. Détermination de ε_1 et de $|0\rangle$

L'équation (11.74) s'écrit alors :

$$\bar{W} |0\rangle = \varepsilon_1 |0\rangle \quad (11.81)$$



Page de titre

Sommaire



Page 822 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Cette équation peut s'interpréter comme une équation aux valeurs propres écrite à l'intérieur de ξ_n , donc pour calculer les valeurs propres à l'ordre 1 et les états propres à l'ordre 0 de l'hamiltonien H qui correspondent à une énergie non perturbée et dégénérée E_n , on diagonalise la matrice $\tilde{W}$ qui représente la perturbation W à l'intérieur du sous-espace de dégénérescence ξ_n associé à E_n .

En d'autres termes, les états propres de $\tilde{W}$ sont les états propres de H à l'ordre 0 et les valeurs propres de $\tilde{W}$ sont les corrections à l'ordre 1 des valeurs propres de H correspondantes.

1.4.4. Discussion

Soient ε_1^ℓ ($\ell = 1, 2, \dots, f_n$) les diverses racines distinctes de l'équation caractéristique de $\tilde{W}$:

$$\det |W - \varepsilon_1 I| = 0 \quad (11.82)$$

Chacune de ces racines donne une correction différente à l'énergie, le niveau dégénéré se scinde donc sous l'effet de la perturbation en f_n sous-niveaux distincts dont les énergies sont :

$$E_n^\ell(\lambda) = E_n + \lambda \varepsilon_1^\ell \quad (11.83)$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 823 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

Si $f_n = g_n$ on dit que la perturbation W a levé complètement la dégénérescence du niveau E_n .

Si au contraire $f_n < g_n$ on dit que la dégénérescence n'est que partiellement levée au premier ordre ou même pas du tout dans le cas où $f_n = 1$: il faut alors pousser le calcul de perturbation aux ordres supérieures en λ .

Enfin comme la matrice $\tilde{W}$ s'écrit dans une base $\{|\phi_n^\alpha\rangle\}$ rapportée sous-espace ξ_n , il y a intérêt à choisir une base qui simplifie la forme de $\tilde{W}$ avant d'entreprendre le calcul de perturbation. Cette base sera dans tous les cas formée des vecteurs propres communs à H_0 , à W et à des observables commutant avec H_0 et W .

1.4.5. Application : Structure fine et hyperfine de l'hydrogène

Nous avons vu au chapitre 10 que lorsque qu'on tient compte des effets relativistes et de l'interaction spin-orbite, l'hamiltonien de l'atome d'hydrogène s'écrit :

$$H = H_0 + W_1 + W_{so} + W_2 \quad (11.84)$$



Page de titre

Sommaire



Page 824 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

avec :

$$W_1 = \frac{-P^4}{8m^3c^2} \quad (11.85)$$

$$W_{SO} = \frac{1}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \vec{L} \cdot \vec{S} \quad (11.86)$$

$$W_2 = \frac{\pi\hbar^2}{2m^2c^3} \left(\frac{e^2}{4n\varepsilon_0} \right) \delta(r) \quad (11.87)$$

On peut montrer que les trois termes W_1 , W_{SO} et W_2 conduisent à des corrections relatives aux niveaux d'énergie non perturbés de l'ordre de $\alpha^4 \simeq 10^{-4}$ où $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \simeq \frac{1}{137}$ est la constante de structure fine de l'interaction électromagnétique. On peut donc considérer ces termes comme des perturbations de l'hamiltonien non perturbé H_0 et utiliser la méthode des perturbations stationnaires pour calculer les corrections apportées par ces termes. Le calcul explicite de ces corrections fait l'objet du problème EP 11.9. Nous allons dans ce qui suit exposer la méthode de calcul et donner les résultats.

On rappelle que chaque niveau non perturbé de l'atome d'hydrogène ne dépend que du nombre quantique principal n et sa dégénérescence est de $2n^2$:

(i) Le terme W_1 n'agit pas sur la variable de spin et commute avec $\vec{L}^2$ et L_z . Les éléments non diagonaux de la perturbation sont nuls et les corrections sont données par (11.28)



Page de titre

Sommaire



Page 825 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

soit :

$$\varepsilon^1 = -\alpha^2 \frac{E_n}{n^2} \left(\frac{3}{4} - \frac{n}{\ell + 1/2} \right) \quad (11.88)$$

où E_n est l'énergie non perturbée donnée par le modèle de Bohr.

(ii) Le terme W_{so} commute avec $\vec{L}^2$ mais ne commute ni avec L_z ni avec S_z . Pour une valeur de n et de ℓ fixée on a une dégénérescence de $(2s + 1)(2\ell + 1)$ soit $2(2\ell + 1)$. La perturbation n'est pas diagonale dans la base associée à l'E.C.O.C. $\{\vec{L}^2, L_z, \vec{S}^2, S_z\}$ mais elle l'est dans la base associée à l'E.C.O.C. $\{\vec{L}^2, \vec{S}^2, \vec{J}^2, J_z\}$ où $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$. Le calcul effectué dans cette dernière base conduit à :

$$\varepsilon^{(2)} = \begin{cases} -\alpha^2 E_n \frac{1}{2n(\ell + 1/2)(\ell + 1)} & \text{pour } j = \ell + 1/2, \ell \neq 0 \\ -\alpha^2 E_n \frac{1}{2n\ell(\ell + 1/2)} & \text{pour } j = \ell - 1/2, \ell \neq 0 \\ 0 & \text{pour } \ell = 0 \end{cases} \quad (11.89)$$

(iii) Le terme W_3 n'agit pas sur les variables de spin et commute avec $\vec{L}^2$ et L_z . La perturbation est alors diagonale dans la base $\{|n, \ell, m, m_s\rangle\}$ et n'agit


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 826 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

qu'à l'origine à cause de la fonction de Dirac $\delta(r)$. Seules donc les fonctions d'onde associées à $\ell = 0$ (fonctions s) seront impliquées dans le calcul de la corrections qui conduit à :

$$\varepsilon^{(3)} = \begin{cases} -\alpha^2 \frac{E_n}{n} & \text{pour } \ell = 0 \\ 0 & \text{pour } \ell \neq 0 \end{cases} \quad (11.90)$$

Au total les énergies des niveaux de l'atome d'hydrogène corrigés par les termes de structure fine et hyperfine sont :

$$E_{n,j} = E_n \left[1 + \frac{\alpha^2}{n^2} \left(\frac{n}{j + 1/2} - \frac{3}{4} \right) \right] \quad (11.91)$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 827 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

2. Méthode variationnelle

La méthode de perturbations stationnaires exposée précédemment nécessite la connaissance des valeurs propres et des vecteurs propres de l'hamiltonien non perturbé H_0 . Il arrive souvent qu'on ne peut pas décomposer l'hamiltonien total H du système en une partie principale H_0 et une perturbation W . Il arrive également que la résolution de l'équation aux valeurs propres de H_0 soit très difficile. Dans ces cas, il est indispensable de connaître l'énergie de l'état fondamental pour comprendre au moins quelques propriétés du système. On a alors recours à la méthode variationnelle qui est un outil d'approximation simple pour résoudre ce type de problème.

2.1. Niveau fondamental

Considérons un système physique décrit par un hamiltonien H indépendant du temps et supposons que nous connaissons ses vecteurs propres $|\phi_n\rangle$ et ses valeurs propres E_n qui sont discrètes et non dégénérées :

On a donc :

$$H |\phi_n\rangle = E_n |\phi_n\rangle \quad (11.92)$$

Tout vecteur $|\Psi\rangle$ de l'espace des états peut alors être développé sur la base



Page de titre

Sommaire



Page 828 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

des vecteurs propres de H :

$$|\Psi\rangle = \sum_n c_n |\phi_n\rangle \quad (11.93)$$

où c_n représente les coefficients du développement.

La valeur moyenne de l'énergie du système dans l'état $|\Psi\rangle$ est donnée par :

$$\langle H \rangle = \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \quad (11.94)$$

En remplaçant $|\Psi\rangle$ par son expression du chapitre 5, on obtient :

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \sum_n \sum_m c_m^* c_n \langle \phi_m | \phi_n \rangle = \sum_n \sum_m c_m^* c_n \delta_{mn} = \sum_n |c_n|^2 \quad (11.95)$$

et

$$\begin{aligned} \langle \Psi | H | \Psi \rangle &= \sum_n \sum_m c_m^* c_n \langle \phi_m | H | \phi_n \rangle \\ &= \sum_n \sum_m c_m^* c_n E_n \delta_{mn} = \sum_n |c_n|^2 E_n \\ &\geq E_0 \sum_n |c_n|^2 = E_0 \langle \Psi | \Psi \rangle \end{aligned}$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 829 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

où E_0 est la plus petite des valeurs propres de H .

On arrive donc au résultat important suivant :

$$\langle H \rangle = \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \geq E_0 \quad (11.96)$$

qui signifie que quelque soit le choix de l'état $|\Psi\rangle$, la valeur moyenne de l'énergie est toujours supérieure ou égale à l'énergie de l'état fondamental. L'égalité n'est obtenue que si tous les coefficients c_n sont nuls sauf c_0 . Dans ce cas l'état $|\Psi\rangle$ s'identifie à $|\phi_0\rangle$ et le vecteur d'état du système n'est autre que celui de l'état fondamental, ce qui implique que $|\Psi\rangle$ est vecteur propre de H avec la valeur propre E_0 .

Cette propriété constitue donc une méthode de détermination approchée de E_0 . On choisit une famille de vecteurs $|\Psi(\alpha)\rangle$ dépendant d'un certain nombre de paramètres que nous symbolisons par α ; on calcule la valeur moyenne $\langle H \rangle(\alpha)$ de H dans ces états et on minimise cette valeur par rapport aux paramètres α . La valeur minimale ainsi obtenue est une approximation de l'énergie E_0 du niveau fondamental du système.

Les vecteurs $|\Psi(\alpha)\rangle$ sont appelés vecteurs d'essais et les fonctions qui leur correspondent fonctions d'essais. La méthode ainsi établie se généralise lorsque le spectre de H est dégénéré ou continu.


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 830 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

2.2. Théorème de Ritz

Considérons la valeur moyenne de H dans l'état $|\Psi\rangle$ comme une fonctionnelle de $|\Psi\rangle$ et calculons son accroissement $d\langle H\rangle$ lorsque $|\Psi\rangle$ subit l'accroissement infiniment petit $|d\Psi\rangle$.

On a d'après (11.94)

$$\langle H\rangle \langle \Psi | \Psi\rangle = \langle \Psi | H | \Psi\rangle \quad (11.97)$$

Par différentiation on obtient :

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \Psi\rangle d\langle H | + \langle H\rangle [\langle \Psi | d\Psi\rangle + \langle d\Psi | \Psi\rangle] = \\ \langle \Psi | H | d\Psi\rangle + \langle d\Psi | H | \Psi\rangle \end{aligned} \quad (11.98)$$

Soit :

$$\langle \Psi | \Psi\rangle d\langle H | = \langle \Psi | [H - \langle H\rangle] | d\Psi\rangle + \langle d\Psi | H - \langle H\rangle | \Psi\rangle \quad (11.99)$$

La valeur moyenne $\langle H\rangle$ est stationnaire si :

$$d\langle H\rangle = 0 \quad (11.100)$$

Ce qui signifie que :

$$\langle \Psi | [H - \langle H\rangle] | d\Psi\rangle + \langle d\Psi | H - \langle H\rangle | \Psi\rangle = 0 \quad (11.101)$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 831 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

En posant :

$$|\phi\rangle = [H - \langle H \rangle] |\Psi\rangle \quad (11.102)$$

L'équation s'écrit :

$$\langle \Psi | d\phi \rangle + \langle d\Psi | \phi \rangle = 0 \quad (11.103)$$

Cette relation doit être vérifiée pour tout vecteur infinitésimal $|d\Psi\rangle$, en particulier pour :

$$d|\Psi\rangle = \varepsilon |\phi\rangle \quad (11.104)$$

où ε est un réel infiniment petit.

La relation (11.102) s'écrit alors :

$$2\varepsilon \langle \phi | \phi \rangle = 0 \quad (11.105)$$

La norme au carrée de $|\phi\rangle$ est donc nulle et il en est de même pour $|\phi\rangle$ lui-même, ce qui entraîne à partir de (11.103) que :

$$H|\Psi\rangle = \langle H \rangle |\Psi\rangle \quad (11.106)$$

d'où le théorème de Ritz :



Page de titre

Sommaire



Page 832 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

La valeur moyenne $\langle H \rangle$ est stationnaire si le vecteur d'état $|\Psi\rangle$ qui lui est associé est vecteur propre de H et les valeurs stationnaires de $\langle H \rangle$ sont les valeurs propres de l'hamiltonien.

On peut ainsi appliquer la méthode variationnelle à la détermination approchée des valeurs propres de H : si la fonction $\langle H \rangle(\alpha)$ obtenue à partir des vecteurs d'essais $|\Psi(\alpha)\rangle$ présente des extrema, ces extrema fournissent des valeurs approchées de certaines des énergies propres E_n de H .

2.3. Application : L'oscillateur harmonique

Il s'agit de déterminer l'énergie de l'état fondamental d'une particule placée dans un potentiel harmonique :

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad (11.107)$$

Choisissons comme fonction d'essai la fonction $\Psi(x, \alpha) = \langle x | \Psi(\alpha) \rangle$ telle que :

$$\Psi(x, \alpha) = e^{-\alpha x^2} \quad (11.108)$$

α étant un paramètre réel positif

On a :

$$\langle \Psi(\alpha) | \Psi(\alpha) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, \alpha)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2\alpha x^2} dx \quad (11.109)$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 833 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

et :

$$\begin{aligned}
 \langle \Psi(\alpha) | H | \Psi(\alpha) \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha x^2} \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right) e^{-\alpha x^2} dx \\
 &= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha x^2} \left(\frac{\hbar^2}{m} \alpha - \frac{2\hbar^2}{m} \alpha^2 x^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right) e^{-\alpha x^2} dx \\
 &= \frac{\hbar^2}{m} \alpha \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2\alpha x^2} dx + \left(\frac{1}{2} m \omega^2 - \frac{2\hbar^2}{m} \alpha^2 \right) \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-2\alpha x^2} dx
 \end{aligned} \tag{11.110}$$

Comme

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\beta}} \tag{11.111}$$

et

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-\beta x^2} dx = \frac{1}{2\beta} \sqrt{\frac{\pi}{\beta}} \tag{11.112}$$

On en déduit que

$$\langle \Psi(\alpha) | \Psi(\alpha) \rangle = \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} \tag{11.113}$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 834 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

et que

$$\langle \Psi(\alpha) | H | \Psi(\alpha) \rangle = \left(\frac{\hbar^2}{2m} \alpha + \frac{1}{8\alpha} m \omega^2 \right) \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} \quad (11.114)$$

Ce qui donne :

$$\langle H \rangle_{(\alpha)} = \frac{\langle \Psi(\alpha) | H | \Psi(\alpha) \rangle}{\langle \Psi(\alpha) | \Psi(\alpha) \rangle} = \frac{\hbar^2}{2m} \alpha + \frac{m \omega^2}{8\alpha} \quad (11.115)$$

Cette valeur moyenne est minimale lorsque $\frac{d \langle H \rangle_{(\alpha)}}{d\alpha} = 0$

$$\text{Soit pour } \alpha = \alpha_0 = \frac{m\omega}{2\hbar}$$

On a alors :

$$\langle H \rangle_{(\alpha_0)} = \frac{1}{2} \hbar \omega = E_0 \quad (11.116)$$

$$\Psi(\mathbf{x}, \alpha_0) = \exp\left(\frac{m\omega}{2\hbar} \mathbf{x}^2\right) = \psi_0(\mathbf{x}) \quad (11.117)$$

Le calcul exact donne aussi ces valeurs pour l'état fondamental de l'oscillateur harmonique. Ce résultat est dû au fait que la fonction d'onde de l'état fondamental de l'oscillateur est précisément l'une des fonctions de la famille d'essai, c'est celle correspondant à la valeur α_0 du paramètre α .


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 835 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

Si par exemple on prend pour fonction d'essai :

$$\Psi(x, \alpha) = \frac{1}{x^2 + \alpha^2} \quad \text{avec} \quad \alpha \geq 0 \quad (11.118)$$

le même type de calcul conduit à :

$$\alpha_0 = \frac{\hbar}{\sqrt{2}m\omega} \quad (11.119)$$

et

$$\langle H \rangle_{(\alpha_0)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \hbar \omega \quad (11.120)$$

La valeur minimale de $\langle H \rangle_{\alpha}$ est dans ce cas égale $\sqrt{2}$ fois l'énergie fondamentale exacte.



Page de titre

Sommaire



Page 836 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Exercices et Problèmes

EP 11.1 Oscillateur harmonique chargé

On considère un oscillateur harmonique à une dimension constitué par une particule de masse m et de charge q plongée dans un champ électrique $\vec{E}$ parallèle à $\vec{Ox}$. L'hamiltonien de cet oscillateur s'écrit :

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2 - qEX$$

où X et P sont les opérateurs position et impulsion de la particule.

1- Déterminer les valeurs propres E_n et les vecteurs propres $|\phi_n\rangle$ du hamiltonien H . On pensera à écrire H sous la forme :

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 (X - X_0)^2 + \varepsilon_0$$

où X_0 et ε_0 sont des constantes que l'on déterminera.

2- On écrit maintenant H sous la forme suivante :

$$H = H_0 + W$$

avec

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2 \quad \text{et} \quad W = -qEX$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 837 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

et on considère que W est une perturbation stationnaire de l'hamiltonien non perturbé H_0 . On écrit W sous la forme :

$$W = A\hbar\omega\hat{X}$$

avec

$$\hat{X} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a^+ + a)$$

où a^+ et a sont respectivement les opérateurs de création et d'annihilation et A une constante qu'on explicitera.

a- Déterminer les corrections au premier et au deuxième ordre sur l'énergie de l'oscillateur provenant de la perturbation W .

b- Retrouver alors les valeurs propres E_n calculées dans la première question.



Page de titre

Sommaire



Page 838 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

EP 11.2 Oscillateur anharmonique

On considère une particule de masse m plongée dans le potentiel à une dimension $V(x)$ défini par :

$$V(x) = V_0(1 - e^{-\alpha x})^2$$

x étant l'abscisse de la particule sur l'axe $\overrightarrow{Ox}$.

1- Tracer l'allure de $V(x)$.

2- Développer $V(x)$ en série entière de x jusqu'à l'ordre 4 :

$$V(x) = ax^2 + bx^3 + cx^4 + \dots$$

En déduire les expressions des coefficients a , b et c en fonction de V_0 et α .

3- L'hamiltonien de la particule s'écrit en première approximation :

$$H = H_0 + W_1 + W_2$$

où H_0 est l'hamiltonien d'un oscillateur harmonique et W_1 et W_2 des perturbations stationnaires telles que :

$$W_1 = bX^3 \quad \text{et} \quad W_2 = cX^4$$

Donner les énergies propres et les fonctions propres de l'hamiltonien H_0 .


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 839 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

4- En considérant W_1 et W_2 comme des perturbations stationnaires de H_0 , calculer :

a- la correction au second ordre sur l'énergie de l'oscillateur provenant du terme W_1 .

b- la correction au premier ordre sur l'énergie provenant du terme W_2 .

5- Donner une valeur approchée des niveaux d'énergie E_n de la particule.

6- Calculer la valeur moyenne $\langle X \rangle$ de l'opérateur position X quand le système est dans l'état $|\varphi_n\rangle$ correspondant à l'énergie E_n .

EP 11.3 Croisement de niveaux

On considère un système physique dont l'hamiltonien H_0 possède deux états $|\varphi_1^0\rangle$ et $|\varphi_2^0\rangle$ d'énergies E_1^0 et E_2^0 ($E_1^0 \leq E_2^0$) très voisines et très différentes de celles de tous les autres états du système qui en sont éloignés.

On soumet le système à une excitation extérieure qui se traduit par une perturbation W . L'hamiltonien s'écrit alors :

$$H = H_0 + W$$

On suppose que W ne dépend pas explicitement du temps.

1- Montrer que lorsque l'intensité de la perturbation est suffisamment faible, son effet sur les deux niveaux se calcule en première approximation en ignorant tous les autres niveaux d'énergie du système.



Page de titre

Sommaire



Page 840 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Quelles sont les conséquences statistiques et dynamiques de cette perturbation sur le système ?

2- Montrer que lorsque les éléments de matrice de W sont de l'ordre de $\varepsilon = E_2^0 - E_1^0$, le traitement perturbatif perd sa signification. Calculer alors directement les énergies propres E_1 et E_2 en diagonalisant H et montrer qu'elles valent :

$$E_{1,2} = \frac{1}{2}(H_{11} + H_{22}) \pm \frac{1}{2}\sqrt{(H_{11} - H_{22})^2 + 4 |H_{12}|^2}$$

avec $H_{ij} = \langle \varphi_i^0 | H | \varphi_j^0 \rangle$

3- Vérifier que lorsque $|W_{ij}| \ll \varepsilon$ on retrouve les résultats donnés par la théorie des perturbations.

4- Représenter graphiquement E_1 et E_2 en fonction de ε lorsque la correction à l'énergie au premier ordre est nulle ($W_{11} = W_{22} = 0$).

Montrer que l'effet du couplage W est plus important lorsque les deux niveaux non perturbés ont la même énergie ($\varepsilon = 0$).

EP 11.4 Oscillateur harmonique à deux dimensions perturbé

On considère un oscillateur harmonique isotrope à deux dimensions de masse m et de pulsation ω en mouvement dans le plan xoy et d'hamiltonien H_0 tel que :

$$H_0 = \frac{P_x^2 + P_y^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2(X^2 + Y^2)$$



Page de titre

Sommaire



Page 841 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

On se propose d'étudier l'effet sur cet oscillateur d'une perturbation W donnée par :

$$W = \lambda m \omega^2 XY$$

où λ est une constante très inférieure à l'unité.

1- Donner sans démonstration les énergies propres de H_0 , leur degré de dégénérescence et les vecteurs propres correspondants.

2- Déterminer les matrices représentant les restrictions de W aux sous-espaces propres associées aux valeurs propres $2\hbar\omega$ et $3\hbar\omega$ de H_0 correspondant aux deux premiers niveaux excités de l'oscillateur.

3- Calculer par la théorie des perturbations l'effet de W sur :

- a- le niveau fondamental
- b- le premier niveau excité
- c- le deuxième niveau excité

4- Comparer les résultats obtenus dans la troisième question au développement limité de la solution exacte obtenue dans EP9.10, dans le cas de deux oscillateurs couplés.

EP 11.5 Effet Stark sur un rotateur rigide

On considère dans l'espace rapporté à la base sphérique $\{r, \theta, \varphi\}$, une molécule diatomique de moment d'inertie I et pouvant tourner autour de son axe de révolution qui coïncide avec l'axe $\vec{Oz}$ d'un référentiel d'inertie $R(\vec{Ox}, \vec{Oy}, \vec{Oz})$. Cette molécule



Page de titre

Sommaire



Page 842 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

qui constitue un rotateur rigide a pour hamiltonien.

$$H_0 = \frac{1}{2I} \vec{L}^2$$

où $\vec{L}$ est le moment cinétique orbital.

1- Donner les états propres et les valeurs propres de l'hamiltonien H_0 et préciser leurs dégénérescences.

2- A l'hamiltonien H_0 on ajoute le potentiel de perturbation $V(\varphi)$ défini par :

$$V(\varphi) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} c_n e^{in\varphi}$$

où n est entier positif ou négatif et différent de zéro et φ l'angle de rotation dans un plan perpendiculaire à l'axe de révolution.

A quelles conditions doivent satisfaire les c_n pour que $V(\varphi)$ soit physiquement acceptable.

3- Quels sont les coefficients c_n qui donnent des termes non nuls dans les matrices représentant $V(\varphi)$ dans les sous-espaces $\ell = 1$ et $\ell = 2$.

En déduire la forme des $V(\varphi)$ qui lève au moins partiellement la dégénérescence de l'énergie au premier ordre des perturbations pour les deux premiers états excités $\ell = 1$ et $\ell = 2$.

4- On suppose que la molécule a un moment dipolaire électrique $\vec{D}$ de module $\vec{D}_0$ et orienté de façon quelconque dans l'espace. On la place dans un champ

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 843 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

électrique $\vec{E}$ de module E_0 et orienté suivant l'axe $\vec{Oy}$, de sorte que son énergie potentielle s'écrit :

$$W = -\vec{D} \cdot \vec{E} = -D_y \cdot E_y = -D_0 \cdot E_0 \sin \theta \cdot \sin \varphi$$

En considérant W comme une perturbation de l'hamiltonien H_0 ,

a- Montrer que W ne donne aucune modification des niveaux d'énergie du rotateur au premier ordre.

b- Calculer au deuxième ordre le déplacement du niveau $\ell = 0$ dû à W .



Page de titre

Sommaire



Page 844 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

EP 11.6 Interaction dipolaire

On considère deux particules en interaction dont l'hamiltonien s'écrit :

$$H = H_0 + W$$

avec

$$H_0 = A(S_{1z} + S_{2z})$$

$$W = B \left[\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 - \frac{3(\vec{S}_1 \cdot \vec{R})(\vec{S}_2 \cdot \vec{R})}{R^2} \right]$$

où A et B sont des constantes réelles, $\vec{S}_1$ et $\vec{S}_2$ les spins des deux particules ($S_1 = S_2 = \frac{1}{2}$), S_{1z} et S_{2z} les projections de $\vec{S}_1$ et $\vec{S}_2$ sur l'axe $\vec{Oz}$ et $\vec{R}$ l'opérateur caractérisant la position relative des deux particules.

1- Ecrire la matrice représentant H_0 dans la base produit tensoriel des états propres de S_{1z} et S_{2z} $\{|\pm\rangle \otimes |\pm\rangle = |\pm, \pm\rangle\}$.

Donner les valeurs propres de H_0 et discuter leur dégénérescence.

2- On considère W comme une perturbation de H_0 et on introduit l'opérateur $R_{\pm}$ défini par : $R_{\pm} = X \pm iY$.



Page de titre

Sommaire



Page 845 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Montrer que la perturbation W peut s'écrire.

$$W = B \left\{ S_{1z}S_{2z} + \frac{1}{2} (S_{1+}S_{2-} + S_{1-}S_{2+}) - \frac{3}{r^2} \left[S_{1z}Z + \frac{1}{2} (S_{1+}R_- + S_{1-}R_+) \right] \left[S_{2z}Z + \frac{1}{2} (S_{2+}R_- + S_{2-}R_+) \right] \right\}$$

où :

$$S_{\pm} = S_x \pm iS_y$$

3- Calculer les niveaux d'énergie de H en se limitant à un calcul au premier ordre des perturbations. On donnera les résultats en fonction de A et du paramètre ε défini par :

$$\varepsilon = B \frac{1 - 3 \cos^2 \theta}{4}$$

θ étant l'angle que fait $\vec{r}$ avec $\vec{Oz}$.

4- Déterminer les états propres de H à l'ordre zéro.

EP 11.7 Paramagnétisme et diamagnétisme atomique



Page de titre

Sommaire



Page 846 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Soit une particule sans spin, de masse m et de charge q , plongée dans un champ magnétique $\vec{B}$. Cette particule est soumise à l'action simultanée d'un potentiel scalaire $V(\vec{r})$ et d'un potentiel vecteur $\vec{A}(\vec{r})$ de sorte que son hamiltonien s'écrit :

$$H = \frac{1}{2m} \left[\vec{P} - q\vec{A}(\vec{R}) \right]^2 + V(\vec{R})$$

où $\vec{R}$ et $\vec{P}$ sont les opérateurs position et impulsion associées aux vecteurs $\vec{r}$ et $\vec{p}$.

Lorsque le champ magnétique $\vec{B}$ est uniforme, on peut prendre le potentiel vecteur $\vec{A}$ sous la forme :

$$\vec{A}(\vec{R}) = -\frac{1}{2} \vec{R} \wedge \vec{B}$$

1-En reportant cette expression de $\vec{A}$ dans l'hamiltonien H montrer que ce dernier peut s'écrire sous la forme d'une somme de trois termes H_0 , H_1 , H_2 .

$$H = H_0 + H_1 + H_2$$

2- Montrer que H_0 , H_1 et H_2 sont alors définis par :

$$H_0 = \frac{P^2}{2m} + V(\vec{R})$$

$$H_1 = -\frac{\mu}{\hbar} \vec{L} \cdot \vec{B}$$

$$H_2 = \frac{q^2 B^2}{8m} R_{\perp}^2$$



Page de titre

Sommaire



Page 847 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

où $\vec{L}$ est le moment cinétique orbital de la particule, μ le magnéton de Bohr et $R_{\perp}$ l'opérateur projection de $\vec{R}$ sur un plan perpendiculaire au champ $\vec{B}$. Lorsque $\vec{B}$ est porté par l'axe $\vec{Oz}$ d'un référentiel d'inertie $R(Oxyz)$ on a $R_{\perp}^2 = X^2 + Y^2$.

Le terme H_1 décrit le couplage entre le champ magnétique $\vec{B}$ et le moment magnétique que possède l'atome : c'est le terme paramagnétique.

Le terme H_2 décrit le couplage entre le champ $\vec{B}$ et le moment magnétique induit dans l'atome : c'est le terme diamagnétique.

3- Une étude comparative des ordres de grandeur des énergies associées à H_0 , H_1 et H_2 autorise de traiter ces derniers comme des termes perturbatifs de H_0 .

On désigne par $|\varphi_{n\ell m}\rangle$ les états propres communs à H_0 (valeur propre E_n), $\vec{L}^2$ (valeur propre $\ell(\ell+1)\hbar^2$) et L_z (valeur propre $m\hbar$).

a- Montrer que les $|\varphi_{n\ell m}\rangle$ sont aussi des kets propres de $H_0 + H_1$.

b- Calculer jusqu'au second ordre la correction sur l'énergie E_n provoquée par le terme paramagnétique H_1 . On l'écrira sous la forme :

$$\Delta E_n^{Para} = kB + pB^2$$

c- Calculer au premier ordre la correction sur l'énergie E_n provoquée par le terme diamagnétique H_2 . On l'écrira sous la forme :

$$\Delta E_n^{Dia} = DB^2$$



Page de titre

Sommaire



Page 848 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

On mettra alors l'énergie du $n^{\text{ième}}$ niveau corrigée par H_1 et H_2 sous la forme :

$$E_n(B) = E_n + kB + pB^2 + DB^2$$

k , p et D étant des coefficients indépendants de B .

4- On considère maintenant l'atome d'hydrogène et on s'intéresse au niveau fondamental $1s$ ($n = 1$, $\ell = m = 0$).

a- Montrer que si les niveaux excités sont très éloignés du niveau fondamental, alors l'énergie corrigée du fondamental peut se mettre sous la forme :

$$E_0(B) = E_0 + D'B^2$$

b- Calculer la susceptibilité diamagnétique χ du fondamental définie par :

$$\chi = -\frac{1}{B} \frac{dE_0(B)}{dB}$$

EP 11.8 Interaction de Van der Waals

On considère deux atomes d'hydrogène dont les noyaux A_1 et A_2 sont fixes et distants de $R(\overrightarrow{A_1A_2} = \vec{R})$. On repère la position de l'électron M_1 du premier atome par le vecteur $\overrightarrow{A_1M_1} = \vec{r}_1$ et la position de l'électron M_2 du deuxième atome par le vecteur $\overrightarrow{A_2M_2} = \vec{r}_2$.



Page de titre

Sommaire



Page 849 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

L'hamiltonien non perturbé du système est la somme $H_{A_1} + H_{A_2}$ des hamiltoniens des deux atomes et ses énergies propres et valeurs propres sont :

$$E = E_n + E_{n'}$$

$$|\Psi\rangle = \left| \varphi_{n\ell m}^{A_1} \varphi_{n'\ell' m'}^{A_2} \right\rangle$$

En particulier l'état fondamental de $H_{A_1} + H_{A_2} = H_0$ est $\left| \varphi_{100}^{A_1} \varphi_{100}^{A_2} \right\rangle$ et correspond à l'énergie non dégénérée $-2E_I$.

Les interactions électrostatique de type : (noyau A_1 , noyau A_2), (noyau A_1 , électron M_2), (noyau A_2 , électron M_1), (électron M_1 , électron M_2) donnent lieu à une somme d'énergies potentielles qu'on note W et qu'on considère comme une perturbation.

1- Expliciter le terme de perturbation W .

2- On suppose que R est très grand devant r_1 et r_2 . Faire un développement limité de W en puissance de $\frac{r_1}{R}$ et $\frac{r_2}{R}$ et montrer que le premier terme non nul qu'on identifiera en première approximation à W est :

$$W = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 R^3} \left[\vec{r}_1 \cdot \vec{r}_2 - \frac{3(\vec{r}_1 \cdot \vec{R})(\vec{r}_2 \cdot \vec{R})}{R^2} \right]$$

ce terme est appelé communément interaction dipôle-dipôle.

3- Montrer que si on choisit un référentiel $R(Oxyz)$ tel que l'axe $\vec{Oz}$ est parallèle



Page de titre

Sommaire



Page 850 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

à $\vec{R}$, l'interaction dipôle-dipôle W s'écrit sous la forme :

$$W = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 R^3} (X_1 X_2 + Y_1 Y_2 - 2Z_1 Z_2)$$

X_i , Y_i et Z_i étant les opérateurs positions des électrons 1 et 2 associés à leurs coordonnées x_i, y_i, z_i .

4- On s'intéresse à l'état fondamental du système et on rappelle que la fonction d'onde d'un atome d'hydrogène à l'état fondamental est :

$$\varphi_{100}^0(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}}$$

où a_0 est le rayon de Bohr et r la distance entre le noyau et l'électron.

a- Montrer que la correction au premier ordre à l'énergie de l'état fondamental du système est nulle.

b- Ecrire l'expression de la correction au second ordre et en déduire qu'elle est approximativement de la forme :

$$\Delta E_2 = -\frac{C}{R^6}$$

où C est une constante.

c- Montrer en le justifiant que l'expression de C est approximativement donnée par :

$$C \simeq \frac{e^4}{2E_I} \left\langle \varphi_{100}^{A_1} \varphi_{100}^{A_2} \left| (X_1 X_2 + Y_1 Y_2 - 2Z_1 Z_2)^2 \right| \varphi_{100}^{A_1} \varphi_{100}^{A_2} \right\rangle$$



Page de titre

Sommaire



Page 851 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

$$\text{où } e^2 = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0}$$

En effectuant le calcul, en déduire que la valeur de C est :

$$C \simeq 6e^2 a_0^5$$

Calculer numériquement l'énergie potentielle de Van der Waals pour $R = 10^{-9}m$.

5- Donner une interprétation "dynamique" des forces de Van der Waals et préciser si elles peuvent s'exercer entre des atomes quelconques.

EP 11.9 Structure fine de l'hydrogène

Lorsqu'on tient compte des effets relativistes on montre que l'hamiltonien H de l'atome d'hydrogène s'écrit sous la forme :

$$H = m_e c^2 + \frac{P^2}{2m_e} + V(R) - \frac{P^4}{8m_e^3 c^2} \\ + \frac{1}{2m_e^2 c^2} \frac{1}{R} \frac{dV(R)}{dR} \vec{L} \cdot \vec{S} + \frac{\hbar^2}{8m_e^2 c^2} \Delta V(R)$$

où m_e , $\vec{R}$, $\vec{P}$, $\vec{L}$ et $\vec{S}$ sont respectivement la masse, les opérateurs position et impulsion et les moments cinétique orbital et de spin de l'électron.

Le premier terme de H est l'énergie au repos de l'électron, les deuxième et troisième termes forment l'hamiltonien non relativiste H_0 et les termes suivants sont



Page de titre

Sommaire



Page 852 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

appelés termes de structure fine qu'on note :

$$W_1 = \frac{P^4}{8m_e^3 c^2} : \text{terme de variation relativiste de la masse}$$

$$W_{SO} = \frac{1}{2m_e^2 c^2} \frac{1}{R} \frac{dV(R)}{dR} \vec{L} \cdot \vec{S} : \text{terme de couplage spin-orbite}$$

$$W_2 = \frac{\hbar^2}{8m_e^2 c^2} \Delta V(R) : \text{terme de Darwin}$$

L'état de l'atome d'hydrogène étant décrit par le ket $|n\ell m, sm_s\rangle$ qu'on écrira simplement $|n\ell m\rangle$ en sous-entendant le spin, on montre que la valeur du carré du module de la fonction d'onde à l'origine $\Psi_{n\ell m}(0)$ et les valeurs moyennes $\left\langle \frac{1}{R} \right\rangle$, $\left\langle \frac{1}{R^2} \right\rangle$, $\left\langle \frac{1}{R^3} \right\rangle$ (cf EP 8.9) sont données par :

$$|\Psi_{n\ell m}(0)|^2 = \frac{1}{\pi n^3 a_0^3}$$

$$\left\langle \frac{1}{R} \right\rangle_{n\ell m} = \frac{1}{n^2} \frac{1}{a_0}$$

$$\left\langle \frac{1}{R^2} \right\rangle_{n\ell m} = \frac{2}{(2\ell + 1) n^3} \frac{1}{a_0^2}$$

$$\left\langle \frac{1}{R^3} \right\rangle_{n\ell m} = \frac{2}{\ell(\ell + 1)(2\ell + 1) n^3} \frac{1}{a_0^3}$$



Page de titre

Sommaire



Page 853 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

On se propose d'évaluer par un calcul perturbatif les corrections ΔE_1 , ΔE_2 et ΔE_3 dues aux termes de structure fine.

1- Montrer que l'ordre de grandeur de ces termes correctifs par rapport à l'énergie non relativiste H_0 est donné pour chacun d'eux par :

$$\frac{W_1}{H_0} \sim \alpha^2, \quad \frac{W_{SO}}{H_0} \sim \alpha^2, \quad \frac{W_2}{H_0} \sim \alpha^2$$

où α est la constante de structure fine : $\alpha^2 = \frac{e^4}{\hbar^2 c^2}$.

Ce résultat justifie-t-il un calcul perturbatif ?

2- Exprimer le terme W_1 en fonction de H_0 et du potentiel de répulsion coulombienne $V(R)$. En utilisant la valeur de $|\Psi_{n\ell m}(0)|^2$ évaluer la correction en énergie ΔE_1 du niveau E_n .

3- a- Soit $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ le moment cinétique total de l'atome. Vérifier que $\vec{L} \cdot \vec{S}$ ne commute pas avec L_z et S_z mais qu'il commute avec $\vec{L}^2$, $\vec{S}^2$, $\vec{J}^2$ et J_z .

b- Au lieu d'utiliser l'E.C.O.C. $\{H_0, \vec{L}^2, \vec{S}^2, L_z, S_z\}$ dont les vecteurs propres sont $|n\ell m, s, m_s\rangle$ on utilise alors le nouvel E.C.O.C. $\{H_0, \vec{L}^2, \vec{S}^2, \vec{J}^2, J_z\}$ qui est plus commode à l'étude du spin total et dont les vecteurs propres communs $|n, \ell, s, J, M_j\rangle$ constituent aussi une base dans l'espace des états.

Exprimer $\vec{L} \cdot \vec{S}$ en fonction des observables du nouvel E.C.O.C..

c- Calculer la correction ΔE_2 dans la nouvelle base.

4- Evaluer la correction ΔE_3 due au terme de Darwin.

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 854 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

5- En faisant la somme des trois corrections ΔE_1 , ΔE_2 et ΔE_3 , montrer que la correction de structure fine est :

$$\Delta E_{n,J} = \frac{\alpha^2}{n^2} E_n^0 \left(\frac{n}{J + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) \quad \text{où } E_n^0 = -\frac{\alpha^2}{2} \frac{1}{n^2}$$

Tracer sur un diagramme les niveaux d'énergie de l'atome pour $n = 2$.



Page de titre

Sommaire



Page 855 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

EP 11.10 Structure hyperfine du niveau $n=1$ de l'atome d'hydrogène

Lorsqu'on tient compte du moment cinétique de spin du noyau, l'hamiltonien de l'atome d'hydrogène doit être complété par un terme qu'on montre égal à :

$$W = \frac{a}{r^3} \vec{I} \cdot \vec{L} + b \left[\frac{3(\vec{I} \cdot \vec{r})(\vec{S} \cdot \vec{r})}{r^5} - \frac{\vec{I} \cdot \vec{S}}{r^3} \right] + c \vec{I} \cdot \vec{S} \delta(\vec{r})$$

où $\vec{L}$ représente le moment cinétique orbital de l'électron, $\vec{I}$ et $\vec{S}$ les moments cinétiques de spin du noyau et de l'électron, $\vec{r}$ le vecteur position de l'électron par rapport au noyau supposé fixe, $\delta(\vec{r})$ la fonction de Dirac et a , b , c des constantes positives ne dépendants que des unités choisies.

W sera traité comme une perturbation de l'hamiltonien H_0 de l'atome d'hydrogène et on supposera que le système non perturbé se trouve dans l'état $1s$ décrit

par la fonction d'onde $\Psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} 2e^{-\frac{r}{a_0}}$ où a_0 est le rayon de Bohr.

1- En tenant compte des spins électroniques et nucléaires, caractériser les états du système non perturbé au moyen de cinq nombres quantiques. Ecrire les fonctions d'onde correspondantes.

2- Que représentent les deux premiers termes de W ? Montrer qu'ils ne conduisent à aucune correction de l'énergie au premier ordre. On écrira ces deux termes en faisant apparaître les opérateurs $I_{\pm}$ et $S_{\pm}$ et les variables angulaires θ et φ .



Page de titre

Sommaire



Page 856 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

3- Effectuer un calcul de perturbation au premier ordre pour le troisième terme de W appelé “terme de contact”. Montrer que les fonctions d'onde à l'ordre zéro sont fonctions propres de l'opérateur $\vec{F}^2$ tel que $\vec{F} = \vec{I} + \vec{S}$ et que chacun des niveaux d'énergie peut être caractérisé par une valeur F correspondant aux valeurs propres $F(F+1)\hbar^2$ de F^2 .

4- Montrer la possibilité de transitions magnétiques entre les niveaux ainsi obtenus sans qu'il soit nécessaire d'appliquer un champ magnétique statique. Ces transitions peuvent être induites par un champ oscillant $\vec{B}_1(t)$ auquel correspond un opérateur de perturbation $V = -\vec{M} \cdot \vec{B}_1(t)$ où $\vec{M} = \gamma_I \vec{I} + \gamma_S \vec{S}$, γ_I et γ_S étant les rapports gyromagnétiques du proton et de l'électron respectivement.

EP 11.11 Effet Stark

On considère deux niveaux d'énergie d'un système atomique comptant un seul électron en dehors de couches fermées. On néglige le spin de l'électron. Le niveau inférieur, d'énergie E_0 , est un état $S(\ell = 0)$; la fonction d'onde de l'électron dans cet état est $R_0(r)Y_0^0(\theta, \varphi)$.

Le niveau supérieur, d'énergie E_1 , est un état $P(\ell = 1)$; c'est un état triplement dégénéré, auquel correspondent pour l'électron les trois fonctions d'onde $R_1(r)Y_1^m(\theta, \varphi)$ avec $m = -1, 0, +1$.

On appelle H_0 l'hamiltonien du système, l'état propre correspondant à E_0 , $|1, m\rangle$ ($m = -1, 0, +1$) les trois états propres correspondant à E_1 .

On pose : $\hbar\omega_0 = E_1 - E_0$



Page de titre

Sommaire



Page 857 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

1- On plonge l'atome dans un champ électrique uniforme parallèle à $\vec{Oz}$ et d'intensité ξ_0 ; l'énergie d'interaction entre l'électron et ce champ étant

$$W = -e\vec{\xi}_0 \cdot \vec{r} = -e\xi_0 r \cos \theta$$

a- Calculer les éléments de matrice de W entre les quatre états $|0, 0\rangle$; $|1, 0\rangle$; $|1, +1\rangle$; $|1, -1\rangle$.

On posera :

$$\gamma = -\frac{e}{\sqrt{3}} \int R_0^*(r) R_1(r) r^3 dr$$

et on supposera pour simplifier que γ est réel.

b- Quels sont les seuls éléments de matrice non nuls ?

Pouvait-on prévoir simplement ce résultat ?

2- On suppose les autres états propres de H_0 suffisamment éloignés de E_0 et E_1 pour que l'on puisse négliger l'effet des éléments de matrice de W entre ces états et l'un quelconque des quatre états $|0, 0\rangle$; $|1, m\rangle$.

a- Ecrire la matrice représentant $H = H_0 + W$

b- Diagonaliser cette matrice à l'intérieur des quatre états précédents et trouver les énergies propres et les états propres de H .

On posera pour faciliter l'écriture des états propres :

$$A = \frac{\hbar\omega_0}{2\xi_0\gamma} + \frac{1}{2}\sqrt{4 + \frac{\hbar^2\omega_0^2}{\xi_0^2\gamma^2}} \text{ et } B = \frac{\hbar\omega_0}{2\xi_0\gamma} - \frac{1}{2}\sqrt{4 + \frac{\hbar^2\omega_0^2}{\xi_0^2\gamma^2}}$$



Page de titre

Sommaire



Page 858 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

c- Comment varient les énergies propres de H avec ξ_0 dans les deux cas limites : $\gamma\xi_0 \ll \hbar\omega_0$ et $\gamma\xi_0 \gg \hbar\omega_0$. que se passe-t-il si $\hbar\omega_0 = 0$?

3- Dans le cas $\gamma\xi_0 \ll \hbar\omega_0$, développer les états propres au premier ordre en $\gamma\xi_0$ et les énergies propres au deuxième ordre en $\gamma\xi_0$.

Retrouver ces résultats par la théorie des perturbations stationnaires, aussi simplement que possible.

4- Soit $|\Psi_0\rangle$ l'état propre de H qui tend vers $|0,0\rangle$ quand $\xi_0 \rightarrow 0$ (on utilisera le développement limité au premier ordre en $\gamma\xi_0$ obtenu précédemment) et soit $\vec{D} = e\vec{r}$ l'opérateur dipôle électrique.

Calculer la valeur moyenne de $\vec{D}$ dans l'état $|\Psi_0\rangle$. Montrer que $\langle \vec{D} \rangle = \alpha \vec{\xi}_0$, α étant une constante que l'on calculera.

On rappelle que :

$$Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$$

$$Y_1^{\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi}$$

EP 11.12 L'atome d'hélium



Page de titre

Sommaire



Page 859 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

L'atome d'hélium ${}^2_4\text{He}$ existe sous deux formes stables :

- Le para-hélium, diamagnétique, dont tous les niveaux sont singulets.
- L'ortho-hélium, paramagnétique, dont tous les niveaux sont triplets.

L'énergie du niveau fondamental de l'ortho-hélium est supérieure d'environ 22 eV à celle du niveau fondamental du para-hélium. L'objectif de ce problème est de savoir pourquoi l'ortho-hélium ne se transforme pas spontanément en para-hélium et de calculer approximativement l'énergie des premiers niveaux.

I. Hamiltonien ultra-simplifié de l'atome d'hélium

L'atome d'hélium est constitué d'un noyau - 2 protons et 2 neutrons- et de deux électrons périphériques, a et b . On désigne par $\vec{r}_a$ et $\vec{r}_b$ les rayons vecteurs des deux électrons rapportés au système d'axes ayant le noyau fixe à l'origine des coordonnées.

En premier lieu, quand on néglige le terme de répulsion coulombienne :

$$W = \frac{e^2}{|\vec{r}_a - \vec{r}_b|} = \frac{e^2}{R} \text{ avec } \vec{R} = \vec{r}_a - \vec{r}_b$$

l'hamiltonien du système s'écrit :

$$H_0 = H_a + H_b$$



Page de titre

Sommaire



Page 860 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

avec

$$H_i = \frac{P_i^2}{2m} - \frac{2e^2}{r_i} \quad (i = a \text{ ou } b)$$

Les énergies propres de l'hamiltonien H_i , dit hydrogéoïde, sont données par :

$$E_n = -\frac{Z^2 E_I}{n^2}$$

où

$$E_I = \frac{me^4}{2\hbar^2} = 13,6 \text{ eV} \text{ et } Z \text{ est la charge du noyau.}$$

Soient $\Psi_a(\vec{r}_a)$ et $\Psi_b(\vec{r}_b)$ deux fonctions propres orthonormées de l'hamiltonien hydrogéoïde H_i , d'énergies propres E_a et E_b que l'on calculera numériquement.

1) Montrer que $\Psi_a(\vec{r}_a, \vec{r}_b) = \Psi_a(\vec{r}_a) \Psi_b(\vec{r}_b)$ est fonction propre de $H_0 = H_a + H_b$ avec l'énergie propre $E_{a,b}^0$ que l'on calculera numériquement.

2) Les électrons a et b étant indiscernables, on est contraint d'introduire les fonctions :

$$\Psi_{\pm}(\vec{r}_a, \vec{r}_b) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_a(\vec{r}_a) \Psi_b(\vec{r}_b) \pm \Psi_a(\vec{r}_b) \Psi_b(\vec{r}_a))$$

respectivement symétrique Ψ_+ et antisymétrique Ψ_- par rapport à la permutation des deux électrons. On définit la parité par permutation d'une fonction de deux variables $\Psi(\vec{r}_a, \vec{r}_b)$ par l'effet sur cette fonction de la permutation $\vec{r}_a \rightarrow \vec{r}_b$.


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 861 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

Par exemple, $\Psi(\vec{r}_a, \vec{r}_b)$ est dite paire si

$$\Psi(\vec{r}_a, \vec{r}_b) = \Psi(\vec{r}_b, \vec{r}_a)$$

Elle est dite impaire si :

$$\Psi(\vec{r}_a, \vec{r}_b) = -\Psi(\vec{r}_b, \vec{r}_a)$$

En déduire la parité par permutation des fonctions $\Psi_+(\vec{r}_a, \vec{r}_b)$ et $\Psi_-(\vec{r}_a, \vec{r}_b)$.

Les propriétés connues des intégrales sur tout l'espace d'une fonction paire ou impaire sont alors parfaitement valables.

II. Introduction du terme répulsif

Même dans une approximation grossière, on ne peut pas négliger l'effet du terme répulsif $W = \frac{e^2}{R}$.

A l'aide d'un calcul de perturbation au premier ordre en énergie, on va donc chercher à évaluer l'influence de ce terme W sur les deux seuls états $|1, s\rangle$ ($n = 1, \ell = 0, m = 0$) et $|2, s\rangle$ ($n = 2, \ell = 0, m = 0$) auxquels on s'intéresse dans toute la suite du problème.

A cet effet, on envisagera successivement les deux cas suivants :

(i) $\Psi_a = \Psi_b = \Psi_{1s}$



Page de titre

Sommaire



Page 862 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

$$(ii) \Psi_a = \Psi_{1s} \quad , \quad \Psi_b = \Psi_{2s}$$

1) Cas (i)

a) Quelle est la seule fonction d'onde Ψ_+ ou Ψ_- qui subsiste pour décrire le système ?

b) Calculer la correction au premier ordre en énergie apportée par le terme $W = \frac{e^2}{R}$, qu'on écrira sous la forme d'une intégrale C_{aa} qu'on ne cherchera pas à calculer.

2) Cas (ii)

a) Quelles sont les fonctions d'onde correspondant à l'énergie $E_{a,b}^0$?

b) Calculer au premier ordre en perturbation, l'influence de W sur le niveau d'énergie $E_{a,b}^0$?

c) Montrer qu'en présence de la perturbation W l'énergie peut se mettre sous forme :

$$E_{a,b} = E_{a,b}^0 + C_{a,b} \pm A_{a,b}$$

où $C_{a,b}$ et $A_{a,b}$ sont deux intégrales qu'on écrira sans chercher à les calculer explicitement.

d) Faire un diagramme des niveaux d'énergie pour les cas (i) et (ii) en précisant les valeurs numériques de l'énergie.



Page de titre

Sommaire



Page 863 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

On donne :

$$I_1 = \int |\Psi_{1s}(\vec{r}_a)|^2 |\Psi_{1s}(\vec{r}_b)|^2 \frac{e^2}{R} d^3r_a d^3r_b = 34 \text{ eV}$$

$$I_2 = \int |\Psi_{1s}(\vec{r}_a)|^2 |\Psi_{2s}(\vec{r}_b)|^2 \frac{e^2}{R} d^3r_a d^3r_b = 15 \text{ eV}$$

$$I_3 = \int \Psi_{1s}^*(\vec{r}_a) \Psi_{2s}^*(\vec{r}_b) \Psi_{1s}(\vec{r}_b) \Psi_{2s}(\vec{r}_a) \frac{e^2}{R} d^3r_a d^3r_b = 0,4 \text{ eV}$$

III. Introduction du spin des électrons

Pour chacun des deux électrons a et b, nous introduisons les deux états de spin. Nous adoptons la notation $|m_{s1}, m_{s2}\rangle$ ($|+-\rangle$) est par exemple un vecteur propre de S_{1z} avec la valeur propre $+\frac{\hbar}{2}$ et un vecteur propre de S_{2z} avec la valeur propre $-\frac{\hbar}{2}$.

Soit $\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$ le spin total des deux électrons.

1) Déterminer les vecteurs propres communs à $\vec{S}^2$ et S_z qu'on notera $|\Sigma^+\rangle$, $|\Sigma^0\rangle$, $|\Sigma^-\rangle$ pour $S = 1$, et $|\sigma\rangle$ pour $S = 0$.

2) On applique un champ magnétique $\vec{B}$ parallèle à l'axe $\vec{Oz}$, sur le système des deux électrons. Ecrire l'hamiltonien Zeeman et en déduire l'action du champ magnétique sur l'énergie des différents niveaux.

Justifier l'appellation d'état singulet et d'état triplet.

IV. Fonction d'onde totale



Page de titre

Sommaire



Page 864 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

En notant désormais les états orbitaux $|1s, 1s\rangle$ pour le cas (i) et $|1s, 2s^\pm\rangle$ pour le cas (ii), les signes $\pm$ référant respectivement aux fonctions d'onde $\Psi_+(\vec{r}_a, \vec{r}_b)$ et $\Psi_-(\vec{r}_a, \vec{r}_b)$, on associe, par un produit tensoriel, les états orbitaux aux états de spin.

On notera ainsi par exemple $|1s, 2s^+, \Sigma^+\rangle$ l'état de l'atome où les électrons sont dans l'état orbital $|1s, 2s^+\rangle$ correspondant à la fonction d'onde $\Psi_+(\vec{r}_a, \vec{r}_b)$ du cas (ii) et dans l'état de spin $|\Sigma^+\rangle$.

1) Etablir la liste des états a priori possibles (états non soumis à aucun principe d'exclusion) pour l'atome d'hélium dans les cas (i) et (ii).

2) Indiquer, pour chacun de ces états s'il est pair ou impair par permutation des deux électrons.

V. Transitions permises ou interdites

La probabilité de transition dipolaire électrique entre deux états $|i\rangle$ et $|f\rangle$ est proportionnelle à

$$|\langle i | \vec{D} | f \rangle|^2 \quad \text{où} \quad \vec{D} = e(\vec{r}_a + \vec{r}_b) \text{ est l'opérateur moment dipolaire électrique.}$$

1) Quelle est la parité de $\vec{D}$ par permutation des deux électrons ?

2) En se servant de considération de parité, préciser quelles sont les transitions permises entre les états a priori possibles définis ci-dessus.

VI. Confrontation avec l'expérience



Page de titre

Sommaire



Page 865 de 978

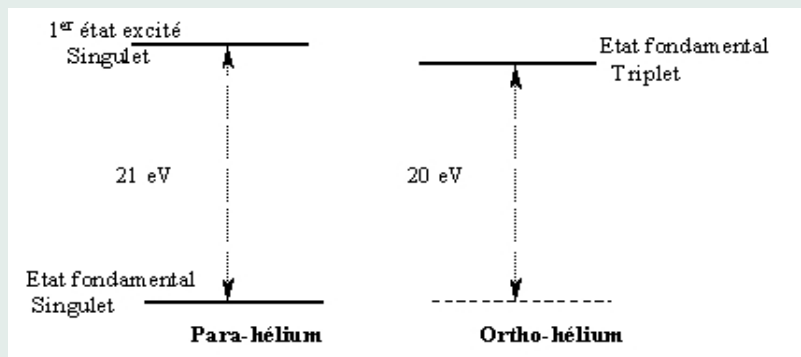
Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

La disposition des niveaux de plus basse énergie observée expérimentalement pour l'atome d'hélium (1925) est la suivante :



La transition entre le niveau fondamental et le premier niveau excité du para-hélium est observée et correspond à une différence d'énergie de 22,2 eV.

Les flèches en pointillés indiquent que des transitions sont permises vers les niveaux ainsi repérés.

A l'aide des résultats, établis ci-dessus et en s'aidant des résultats expérimentaux :

- 1) Déterminer quel est l'état fondamental de l'atome d'hélium.
- 2) Quel est le premier niveau excité du para-hélium ?
- 3) Quel est le premier niveau de l'ortho-hélium ?



Page de titre

Sommaire



Page 866 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

4) Quelle est la parité par permutation des deux électrons pour les deux premiers niveaux du para-hélium, et le premier niveau de l'ortho-hélium ?

Généraliser à tous les états possibles (Principe de Pauli).

EP 11.13 Potentiel gaussien

On considère une particule de masse m en mouvement dans le potentiel gaussien défini par :

$$V(x) = -V_0 e^{-\alpha^2 x^2}$$

où V_0 et α sont des constantes positives.

1- Trouver par la méthode des variations l'énergie E_0 de l'état fondamental et l'énergie E_1 du premier état excité en choisissant pour fonctions d'essai :

$$\Psi_{0\lambda}(x) = A e^{-\lambda x^2}$$

$$\Psi_{1\lambda}(x) = B x e^{-\lambda x^2}$$

2- Calculer numériquement ces énergies lorsque la particule est un électron et que :

$$V_0 = 1 \text{ Rydberg} \quad \text{et} \quad \alpha = \frac{1}{10a_0^2}$$

$$a_0 \text{ étant le rayon de Bohr et le Rydberg est défini par : } R = \frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2}.$$



Page de titre

Sommaire



Page 867 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

EP 11.14 Potentiel hyperbolique

On considère une particule de masse m en mouvement dans le potentiel $V(x)$ tel que :

$$V(x) = -\frac{V_0}{ch^2\left(\frac{x}{a}\right)}$$

où V_0 et a sont des constantes positives.

1- Déterminer par la méthode des variations l'énergie E_0 du niveau fondamental en prenant comme fonction d'essai :

$$\Psi_\lambda(x) = A \left[ch\left(\frac{x}{a}\right) \right]^{-\lambda}$$

Exprimer le résultat en fonction de V_0 et de $\varepsilon = \frac{\hbar^2}{2ma^2}$.

On donne :

$$\int_0^\infty ch^\alpha x sh^\beta x dx = \frac{\left(\frac{\beta-1}{2}\right)! \left(-\frac{\alpha+\beta+2}{2}\right)!}{\left(-\frac{\alpha+1}{2}\right)!}$$

2- En effectuant un développement limité de $V(x)$ pour x petit, le système apparaît alors comme un oscillateur harmonique perturbé. Trouver une valeur approchée



Page de titre

Sommaire



Page 868 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

de l'énergie de l'état fondamental et la comparer au résultat trouvé dans la première question.

EP 11.15 Potentiel de Yukawa

Une particule de masse m se déplace dans le potentiel attractif de Yukawa défini par :

$$V(r) = -V_0 \frac{e^{-ar}}{ar}$$

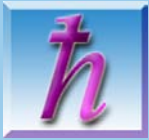
où V_0 et a sont des constantes positives.

1- Déterminer par la méthode des variations l'énergie E_0 du niveau fondamental en utilisant comme fonction d'essai

$$\Psi_\lambda(r) = Ae^{-\lambda r}$$

Calculer numériquement E_0 lorsque $\frac{\hbar^2 \alpha^2}{2mV_0} = 0,37$.

2- Montrer que dans la limite du potentiel coulombien ($a_0 \rightarrow 0$ et $\frac{V_0}{a} \rightarrow Ze^2$) nous obtenons pour le fondamental les expressions exactes de l'énergie propre et de la fonction propre d'un atome hydrogénoïde.



Page de titre

Sommaire



Page 869 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Chapitre 12

Perturbation dépendant du temps

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 870 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

Nous avons vu dans le chapitre précédent que lorsque la perturbation W est indépendante du temps, elle modifie légèrement les niveaux d'énergie de H_0 en levant éventuellement leur dégénérescence. Les états propres de H peuvent alors être décrits comme des combinaisons linéaires à coefficients constants des états propres de H_0 et le système reste dans un état stationnaire.

Lorsque W dépend du temps on ne peut plus parler de niveaux d'énergie modifiés puisque le système n'est plus conservatif et qu'il n'y a plus d'états stationnaires. L'effet de la perturbation consiste alors à induire des transitions entre différents états d'énergie.



Page de titre

Sommaire



Page 871 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

1. Position du problème

Pour simplifier, considérons un système physique dont l'hamiltonien H_0 ne dépend pas explicitement du temps et a un spectre d'énergie discret et non dégénéré de sorte que l'équation aux valeurs propres s'écrit :

$$H |\phi_n\rangle = E_n |\phi_n\rangle \quad (12.1)$$

avec :

$$\langle \phi_n | \phi_m \rangle = \delta_{nm} \quad \text{et} \quad \sum_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n| = 1 \quad (12.2)$$

Dans ce cas l'état du système est décrit à tout instant par le ket $|\Psi(t)\rangle$:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |\phi_n\rangle = \sum_n b_n e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}} |\phi_n\rangle \quad (12.3)$$

où les coefficients b_n du développement sont indépendants du temps.

À l'instant $t = 0$, on applique une perturbation $W(t)$ dépendant du temps, l'hamiltonien du système devient alors :

$$H(t) = H_0 + W(t) \quad (12.4)$$

On suppose que le système est initialement dans l'état stationnaire $|\phi_i\rangle$ qui est un état propre de H_0 associé à la valeur propre E_i et on se propose de



Page de titre

Sommaire



Page 872 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

calculer la probabilité $P_{if}(t)$ de le trouver à un instant ultérieur t dans un autre état propre $|\phi_f\rangle$ de H_0 .

Il s'agit donc d'étudier les transitions qui peuvent être induites par la perturbation $W(t)$ entre les états stationnaires du système non perturbé.

Pour déterminer $P_{if}(t)$ il faut résoudre l'équation de Schrödinger :

$$H(t) |\Psi(t)\rangle = i\hbar \frac{d|\Psi(t)\rangle}{dt} \quad (12.5)$$

Cette équation différentielle étant du premier ordre, sa solution $|\Psi(t)\rangle$ répondant à la condition initiale :

$$|\Psi(0)\rangle = |\phi_i\rangle \quad (12.6)$$

est unique. La probabilité cherchée s'écrit alors :

$$P_{if}(t) = |\langle \phi_f | \Psi(t) \rangle|^2 \quad (12.7)$$

Pour résoudre l'équation de Schrödinger et déterminer la solution $|\Psi(t)\rangle$ on suivra une démarche analogue à celle effectuée dans le cas stationnaire en écrivant :

$$H(t) = H_0 + \lambda W(t) \quad (12.8)$$

où le paramètre de perturbation λ est suffisamment petit pour qu'on puisse développer $|\Psi(t)\rangle$ en puissance de λ .



Page de titre

Sommaire



Page 873 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

2. Résolution approchée de l'équation de Schrödinger

Nous allons effectuer cette résolution dans la représentation $\{|\phi_n\rangle\}$ où l'hamiltonien non perturbé H_0 est diagonal. On a alors :

$$i\hbar \frac{d|\Psi(t)\rangle}{dt} = (H_0 + \lambda W(t)) |\Psi(t)\rangle \quad (12.9)$$

avec

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |\phi_n\rangle \quad (12.10)$$

et

$$c_n(t) = \langle \phi_n | \Psi(t) \rangle \quad (12.11)$$

2.1. Equations d'évolution des composantes $c_n(t)$

D'après (12.9) et (12.10) on a :

$$i\hbar \sum_m \frac{dc_m(t)}{dt} |\phi_m\rangle = \sum_m c_m(t) H_0 |\phi_m\rangle + \lambda \sum_m c_m(t) W(t) |\phi_m\rangle \quad (12.12)$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 874 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

En projetant cette équation sur $|\phi_n\rangle$ et en se rappelant que :

$$\langle \phi_n | \phi_m \rangle = \delta_{nm} \quad (12.13)$$

et que :

$$\langle \phi_n | H_0 | \phi_m \rangle = E_n \delta_{nm} \quad (12.14)$$

on obtient :

$$i\hbar \frac{dc_n(t)}{dt} = E_n c_n(t) + \lambda \sum_m c_m(t) \langle \phi_n | W(t) | \phi_m \rangle \quad (12.15)$$

Comme les $\langle \phi_n | W(t) | \phi_m \rangle$ ne sont autres que les éléments de matrice de l'observable $W(t)$ dans la base $\{|\phi_n\rangle\}$:

$$\langle \phi_n | W(t) | \phi_m \rangle = W_{nm}(t) \quad (12.16)$$

L'équation (12.15) s'écrit alors :

$$i\hbar \frac{dc_n(t)}{dt} = E_n c_n(t) + \lambda \sum_m c_m(t) W_{nm}(t) \quad (12.17)$$

L'ensemble de ces équations constitue un système d'équations différentielles linéaires du premier ordre en t , couplées par la perturbation $W(t)$.



Page de titre

Sommaire



Page 875 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

2.2. Nouvelles composantes $b_n(t)$

Lorsque $\lambda = 0$, c'est à dire en l'absence de couplage les solutions $c_n(t)$ des équations (12.17) sont simples et s'écrivent :

$$c_n(t) = b_n(t)e^{\frac{-iE_nt}{\hbar}} \quad (12.18)$$

où b_n est une constante dépendant des conditions initiales.

En présence de couplage ($\lambda \neq 0$), comme $\lambda \ll 1$ et que les éléments de matrices W_{nm} sont petits devant les énergies propres E_n , les solutions $c_n(t)$ restent voisines des solutions (12.18) et on peut effectuer le changement de fonctions :

$$c_n(t) = b_n(t)e^{\frac{-iE_nt}{\hbar}} \quad (12.19)$$

où les $b_n(t)$ ne sont plus constantes mais sont des fonctions lentement variables du temps.

En reportant (12.19) dans les équations (12.17) on obtient :

$$i\hbar e^{\frac{-iE_nt}{\hbar}} \frac{db_n(t)}{dt} + E_n b_n(t) e^{\frac{-iE_nt}{\hbar}} =$$

$$E_n b_n(t) e^{\frac{-iE_nt}{\hbar}} + \lambda \sum_m b_m(t) e^{\frac{-iE_mt}{\hbar}} W_{nm}(t) \quad (12.20)$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 876 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

soit encore en simplifiant et en multipliant les deux membres de ces équations par $e^{\frac{iE_n t}{\hbar}}$, il vient :

$$i\hbar \frac{db_n(t)}{dt} = \lambda \sum_m b_m(t) e^{\frac{i(E_n - E_m)t}{\hbar}} W_{nm}(t) \quad (12.21)$$

En introduisant la pulsation de Bohr :

$$w_{nm} = \frac{E_n - E_m}{\hbar} \quad (12.22)$$

Ces équations prennent la forme suivante :

$$i\hbar \frac{db_n(t)}{dt} = \lambda \sum_m b_m(t) e^{i\omega_{nm}t} W_{nm}(t) \quad (12.23)$$



Page de titre

Sommaire



Page 877 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

3. Equations de perturbation

On va chercher une solution approchée du système d'équations (12.23) sous forme d'un développement en série de puissance de λ , soit :

$$b_m(t) = b_m^{(0)}(t) + \lambda b_m^{(1)}(t) + \lambda b_m^{(2)}(t) + \dots = \sum_{p=0} \lambda^{(p)} b_m^{(p)}(t) \quad (12.24)$$

En portant ce développement dans (12.23) et en égalant les coefficients de λ^p dans les deux membres on obtient :

$$i\hbar \frac{db_n^{(p)}(t)}{dt} = \sum_m e^{i\omega_{nm}t} W_{nm}(t) b_m^{(p-1)}(t) \quad (12.25)$$

Pour $p = 0$, on a :

$$i\hbar \frac{db_n^{(0)}(t)}{dt} = 0 \quad (12.26)$$

ce qui implique que $b_n^{(0)}$ ne dépend pas du temps et nous retrouvons le résultats (12.18) trouvé pour $\lambda = 0$ où b_n se réduit à une constante :

$$b_n^{(0)}(t) = c_n(0) = \langle \phi_n | \Psi(0) \rangle = \langle \phi_n | \phi_i \rangle = \delta_{ni} \quad (12.27)$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 878 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

Ce résultat permet d'écrire l'évolution du terme de premier ordre $b_n^{(1)}(t)$ à partir de (12.25) :

$$i\hbar \frac{db_n^{(1)}(t)}{dt} = \sum_m e^{i\omega_{nm}t} W_{nm}(t) b_m^{(0)}(t) = \sum_m e^{i\omega_{nm}t} W_{nm}(t) \delta_{mi} \quad (12.28)$$

soit :

$$i\hbar \frac{db_n^{(1)}(t)}{dt} = e^{i\omega_{ni}t} W_{ni}(t) \quad (12.29)$$

En intégrant cette équation et en tenant compte de la condition initiale :

$$b_n^{(p)}(0) = 0 \quad \text{pour} \quad p \geq 1 \quad (12.30)$$

on obtient :

$$b_n^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t e^{i\omega_{ni}t'} W_{ni}(t') dt' \quad (12.31)$$

En reportant (12.27) et (12.31) dans (12.19) et dans (12.10) on obtient le vecteur d'état $|\Psi(t)\rangle$ du système à l'instant t à l'ordre 1 en λ .

On peut calculer suivant le même principe les corrections d'ordre supérieur, mais l'approximation à l'ordre 1 suffit en général amplement dans la majorité des cas.

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 879 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

Il faut remarquer cependant, que dans cette approximation, on admet que l'on fait une erreur négligeable en écrivant (12.23) sous la forme (12.29), c'est à dire en remplaçant les coefficients $b_m(t)$ par leur valeur $b_m(0)$, à l'instant $t = 0$. Ceci n'est valable que si les $b_m(t)$ ont des valeurs voisines de $b_m(0)$, c'est à dire tant que t reste suffisamment petit. Pour t grand il faut pousser les calculs aux ordres supérieurs ou trouver un autre type d'approximation.



Page de titre

Sommaire



Page 880 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

4. Probabilité de transition

Sous l'effet de la perturbation $W(t)$ appliquée à l'instant $t = 0$, le système évolue et peut se retrouver à un instant ultérieur $t \geq 0$ dans un état stationnaire $|\phi_f\rangle$ de H_0 . On dit alors que le système a effectué une transition de l'état initial $|\phi_i\rangle$ à l'état final $|\phi_f\rangle$. La probabilité de transition $P_{i \rightarrow f}(t)$ induite par la perturbation est donné au premier ordre par :

$$P_{i \rightarrow f}(t) = \left| \langle \phi_f | \Psi^{(1)}(t) \rangle \right|^2 = |b_f(t)|^2 \quad (12.32)$$

soit :

$$P_{i \rightarrow f}(t) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t W_{fi}(t') e^{i\omega_{fi}t'} dt' \right|^2 \quad (12.33)$$

Introduisons la fonction $W'_{fi}(t')$ définie par :

$$\begin{cases} W'_{fi}(t') = W_{fi}(t') & \text{pour } 0 \leq t' \leq t \\ 0 & \text{ailleurs} \end{cases} \quad (12.34)$$

La transformée de Fourier de $W'_{fi}(t')$ est :

$$\tilde{W}'_{fi}(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} W'_{fi}(t') e^{-i\omega t'} dt' \quad (12.35)$$



Page de titre

Sommaire



Page 881 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

ce qui permet d'écrire la probabilité de transition sous la forme :

$$P_{i \rightarrow f}(t) = \frac{2\pi}{\hbar^2} \left| \tilde{W}'_{fi}(\omega_{if}) \right|^2 \quad (12.36)$$

Ce résultat exprime que la probabilité de transition est proportionnelle au carré du module de la transformation de Fourier de la perturbation.

On remarque d'après (12.33) que la probabilité de transition est nulle au premier ordre si l'élément de matrice $W_{fi}(t)$ est nul quelque soit t . Dans ce cas un calcul poussé au second ordre pourrait faire apparaître la possibilité d'une transition de $|\phi_i\rangle$ à $|\phi_f\rangle$ à travers un état intermédiaire $|\phi_d\rangle$. On parle alors d'un processus à deux étapes.

On remarque aussi, qu' à cause de l'hermité de $W(t)$ on a au premier ordre :

$$P_{i \rightarrow f}(t) = P_{f \rightarrow i}(t) \quad (12.37)$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 882 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

5. Perturbation sinusoïdale

Une perturbation sinusoïdale $W(t)$ peut prendre l'une des deux formes simples :

$$\begin{aligned} W(t) &= W \sin \omega t \\ W(t) &= W \cos \omega t \end{aligned} \quad (12.38)$$

ou la forme la plus générale :

$$W(t) = W_1 e^{i\omega t} + W_2 e^{-i\omega t} \quad (12.39)$$

W , W_1 et W_2 étant des observables indépendantes du temps et ω une pulsation constante.

Une telle perturbation est fréquente en physique. Par exemple la perturbation d'un système par un champ électromagnétique sinusoïdal, par un champ électrique sinusoïdal, par un champ magnétique sinusoïdal, Dans tous les cas la réponse du système à cette perturbation se traduit par des transitions entre état initial et autres états avec des probabilités de transitions $P_{i \rightarrow f}(t)$ qu'il est utile de déterminer.



Page de titre

Sommaire



Page 883 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

5.1. Calcul de $P_{i \rightarrow f}(t)$

Ecrivons la perturbation sous la forme :

$$W(t) = W \sin \omega t = \frac{W}{2i} (e^{i\omega t} - e^{-i\omega t}) \quad (12.40)$$

Dans ces conditions, l'état initial du système à $t = 0$ étant $|\phi_i\rangle$, la théorie des perturbations dépendant du temps nous permet d'écrire au premier ordre en λ et quelque soit n :

$$i\hbar b_n^{(1)}(t) = \int_0^t W_{ni}(t') e^{i\omega_{ni}t'} dt' \quad (12.41)$$

soit :

$$b_n^{(1)}(t) = -\frac{W_{ni}}{2\hbar} \left[\int_0^t e^{i(\omega + \omega_{ni})t'} dt' - \int_0^t e^{i(\omega_{ni} - \omega)t'} dt' \right] \quad (12.42)$$

il vient alors :

$$b_n^{(1)}(t) = \frac{W_{ni}}{2i\hbar} \left[\frac{1 - e^{i(\omega_{ni} + \omega)t}}{\omega_{ni} + \omega} - \frac{1 - e^{i(\omega_{ni} - \omega)t}}{\omega_{ni} - \omega} \right] \quad (12.43)$$

La probabilité de transition de l'état initial $|\phi_i\rangle$ à l'état final $|\phi_f\rangle$ entre 0 et t est donc :

$$P_{i \rightarrow f}(t) = \frac{|W_{fi}|^2}{4\hbar^2} \left| \frac{1 - e^{i(\omega_{fi} + \omega)t}}{\omega_{fi} + \omega} - \frac{1 - e^{i(\omega_{fi} - \omega)t}}{\omega_{fi} - \omega} \right|^2 \quad (12.44)$$



Page de titre

Sommaire



Page 884 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

En remarquant que :

$$e^{ix} - 1 = 2i e^{ix/2} \sin x/2 \quad (12.45)$$

on peut écrire $P_{i \rightarrow f}(t)$ sous la forme :

$$P_{i \rightarrow f}(t) = \frac{|W_{fi}|^2}{4\hbar^2} |A_+ - A_-|^2 \quad (12.46)$$

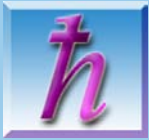
avec :

$$A_{\pm} = \frac{1 - e^{i(\omega_{fi} \pm \omega)t}}{\omega_{fi} \pm \omega} = -ie^{i(\omega_{fi} \pm \omega)t/2} \frac{\sin((\omega_{fi} \pm \omega)t/2)}{(\omega_{fi} \pm \omega)/2} \quad (12.47)$$

Remarquons que le changement de ω en $-\omega$ a pour seul effet de permuter A_+ en A_- et n'altère pas la probabilité de transition. On peut donc sans réduire la généralité du raisonnement considérer que par définition : $\omega \geq 0$

Avant d'effectuer le calcul de $P_{i \rightarrow f}(t)$, rappelons quelques propriétés mathématiques de la fonction $f(\omega_{fi} \pm \omega, t)$ définie par :

$$f(\omega_{fi} \pm \omega, t) = \left[\frac{\sin((\omega_{fi} \pm \omega)t/2)}{(\omega_{fi} \pm \omega)t/2} \right]^2 t^2 \quad (12.48)$$



Page de titre

Sommaire



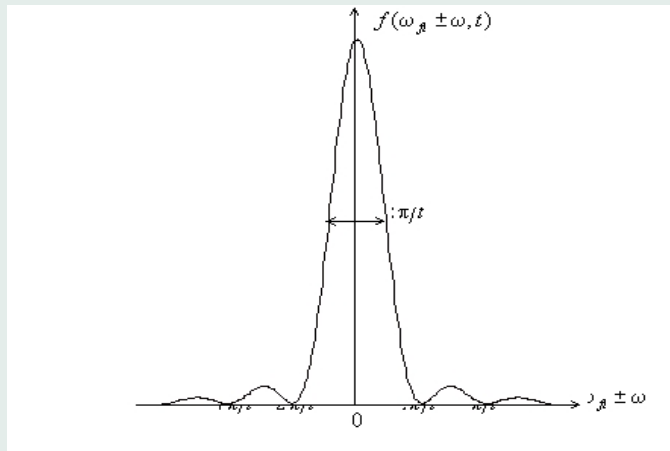
Page 885 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Figure 12.1 : Variation de $f(\omega_{fi} \pm \omega, t)$ en fonction de $\omega_{fi} \pm \omega$

Nous avons représenté la fonction $f(\omega_{fi} \pm \omega, t)$ sur la figure 12.1.

* On remarque que $f(\omega_{fi} \pm \omega, t)$ n'a de valeurs notables que dans le premier lobe, c'est à dire pour : $|\omega_{fi} \pm \omega| \leq \frac{2\pi}{t}$

* Pour $(\omega_{fi} \pm \omega)$ fixée cette fonction croît comme t^2 au centre et sa largeur décroît en $1/t$.

* L'aire du lobe central est $t^2 \frac{2\pi}{t} = 2\pi t$

* Enfin d'après ce qui précède et des propriétés de la fonction de


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 886 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

distribution de Dirac on a :

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \left[\frac{\sin((\omega_{fi} \pm \omega)t/2)}{(\omega_{fi} \pm \omega)/2} \right] = 2\pi t \delta(\omega_{fi} \pm \omega) \quad (12.49)$$

Pour calculer la probabilité de transition nous allons envisager successivement le cas où $|\phi_i\rangle$ et $|\phi_f\rangle$ sont deux niveaux discrets puis celui où $|\phi_f\rangle$ appartient à un continuum d'états.

5.2. Caractère résonnant de $P_{i \rightarrow f}(t, \omega)$

Lorsque le temps est fixé, la probabilité de transition devient une fonction de la seule variable ω . D'après les expressions (12.44) et (12.46) on remarque que $P_{i \rightarrow f}(t, \omega)$ présente un maximum pour $\omega \simeq \omega_{fi}$ ou pour $\omega \simeq -\omega_{fi}$.

Le système est donc le siège d'un phénomène de résonance lorsque la pulsation de la perturbation sinusoïdale coïncide avec la pulsation de Bohr associée aux états $|\phi_i\rangle$ et $|\phi_f\rangle$. Si comme on l'a signalé dans le paragraphe 5.1 on prend $\omega \geq 0$, les deux conditions de résonance correspondent respectivement aux cas $\omega_{fi} > 0$ et $\omega_{fi} < 0$.

Dans le premier cas le système absorbe de façon résonnante un quantum $\hbar\omega$ pour passer du niveau d'énergie inférieur E_i au niveau supérieur E_f . Dans le deuxième cas le système passe du niveau supérieur E_i au niveau inférieur E_f avec émission induite d'un quantum $\hbar\omega$.



Page de titre

Sommaire



Page 887 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Nous allons, pour mettre en évidence ce phénomène de résonance supposer que ω_{fi} est positif, le cas où ω_{fi} est négatif se traitera de façon analogue. En reprenant les expressions (12.44) et (12.46) :

$$P_{i \rightarrow f}(t, \omega) = \frac{|W_{if}|^2}{\hbar^2} |A_+ - A_-|^2 \quad (12.50)$$

avec :

$$A_+ = \frac{1 - e^{i(\omega_{fi} + \omega)t}}{\omega_{fi} + \omega} = -ie^{i(\omega_{fi} + \omega)t/2} \frac{\sin((\omega_{fi} + \omega)t/2)}{(\omega_{fi} + \omega)/2} \quad (12.51)$$

$$A_- = \frac{1 - e^{i(\omega_{fi} - \omega)t}}{\omega_{fi} - \omega} = -ie^{i(\omega_{fi} - \omega)t/2} \frac{\sin((\omega_{fi} - \omega)t/2)}{(\omega_{fi} - \omega)/2} \quad (12.52)$$

Le dénominateur de A_+ s'annule pour $\omega = -\omega_{fi}$ et celui de A_- pour $\omega = +\omega_{fi}$. Pour ω voisin de ω_{fi} le terme A_- devient très grand comparé au terme A_+ , pour cette raison A_- est appelé “**terme résonnant**” et A_+ “**terme antirésonnant**”.

Plaçons nous dans le cas de l'approximation résonnante qui consiste à négliger A_+ devant A_- et supposons que $|\omega - \omega_{fi}| \ll |\omega_{fi}|$, la probabilité de transition s'écrit alors :

$$P_{i \rightarrow f}(t, \omega) = \frac{|W_{fi}|^2}{4\hbar^2} f(\omega_{fi} - \omega, t) \quad (12.53)$$



Page de titre

Sommaire



Page 888 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

La figure 12.2 montre les variations de $P_{i \rightarrow f}(t, \omega)$ en fonction de ω . Pour une valeur de t donnée, on voit que la probabilité de transition présente un maximum pour $\omega = \omega_{fi}$ qui vaut $\frac{|W_{fi}|^2}{4\hbar^2}t^2$ et qui montre clairement son caractère résonnant. $P_{i \rightarrow f}(t, \omega)$ décroît ensuite lorsqu'on s'éloigne de ω_{fi} et s'annule lorsque $|\omega - \omega_{fi}| = \frac{2\pi}{t}$. Lorsque $|\omega - \omega_{fi}|$ continue à augmenter $P_{i \rightarrow f}$ oscille entre $\frac{|W_{fi}|^2}{\hbar^2}(\omega - \omega_{fi})^2$ et zéro.



Page de titre

Sommaire

◀

▶

◀

▶

Page 889 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

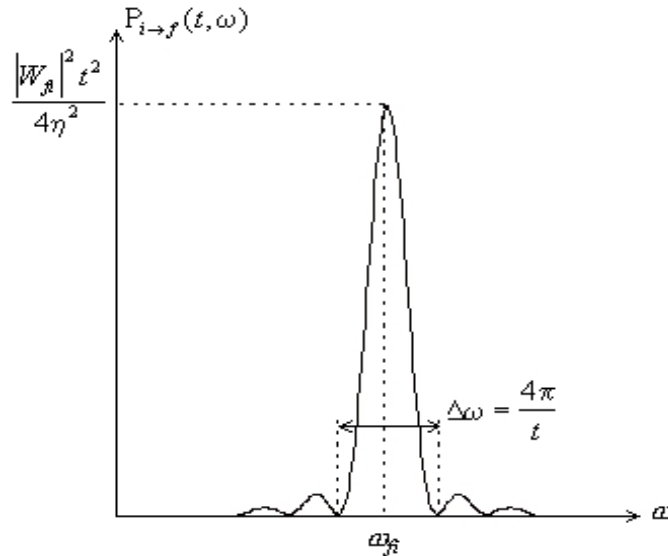


Figure 12.2 : Variation en fonction de ω de la probabilité de transition au premier ordre

La largeur $\Delta\omega$ de la courbe de résonance est définie en première approximation comme la distance séparant les deux premiers zéros de $P_{i \to f}(t, \omega)$



Page de titre

Sommaire



Page 890 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

autour de $\omega = \omega_{fi}$. On a donc :

$$\Delta\omega \sim \frac{4\pi}{t} \quad (12.54)$$

$\Delta\omega$ est d'autant plus faible que t est grand. Ce résultat est à rapprocher de la quatrième relation d'incertitude de Heisenberg. En effet si la perturbation agit pendant un temps Δt , l'incertitude ΔE sur la valeur $E_f - E_i$ est telle que $\Delta E t \geq \hbar$ soit $\hbar \Delta\omega t \geq \hbar$ et $\Delta\omega \geq \frac{1}{t}$

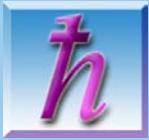
Ce qui est en accord avec (12.54) bien que t n'est pas un temps caractéristique de l'évolution du système mais un temps imposé de l'extérieur.

5.3. Validité de l'approximation résonnante

En considérant que $\omega \simeq \omega_{fi}$, nous avons négligé le terme A_+ devant A_- . En fait le calcul exact au premier ordre de perturbation de $P_{i \rightarrow f}(t)$ fait intervenir la quantité :

$$|A_+ - A_-|^2 = |A_+|^2 + |A_-|^2 + \text{termes croisés} \quad (12.55)$$

$|A_+|^2$ et $|A_-|^2$ correspondent comme l'indique la figure 12.3 à des pics prononcés centrés respectivement en $\omega = -\omega_{fi}$ et $\omega = +\omega_{fi}$ avec des amplitudes centrales qui croissent en t^2 , alors que les termes croisés oscillent rapidement et leur amplitude est au mieux de l'ordre de $\sqrt{t}$.



Page de titre

Sommaire



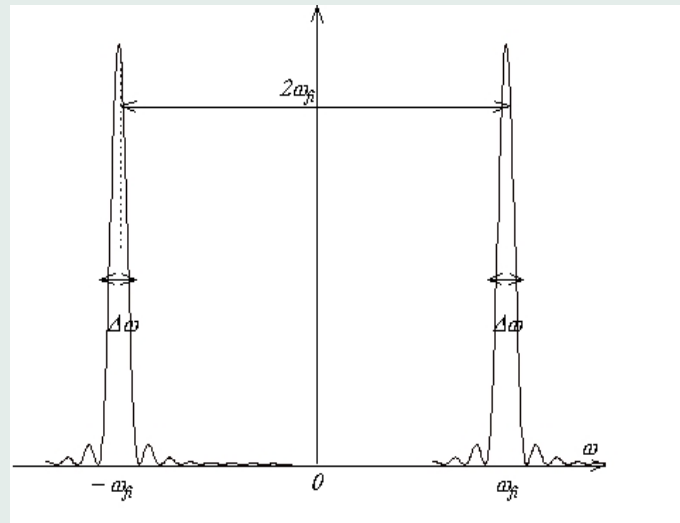
Page 891 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Figure 12.3 : Variation des termes résonnant et antirésonnant en fonction de ω

On remarque sur la figure 12.3 que $|A_+(\omega)|^2 = |A_-(-\omega)|^2$ et que les deux courbes ont la même largeur $\Delta\omega$. Lorsque ces deux courbes sont centrées en des points dont la distance $2\omega_{fi}$ est grande devant $\Delta\omega$, il est clair qu'au voisinage de $\omega = \omega_{fi}$ le module de A_+ est négligeable devant celui de A_- .

L'approximation résonnante n'est donc valable qu'à la condition :

$$2\omega_{fi} \gg \Delta\omega \quad (12.56)$$



Page de titre

Sommaire



Page 892 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

et comme : $\Delta\omega \simeq \frac{4\pi}{t}$, on doit donc avoir :

$$t \gg \frac{2\pi}{\omega_{fi}} \sim \frac{2\pi}{\omega} \quad (12.57)$$

Ce résultat signifie que la perturbation doit agir pendant un temps grand devant la période d'oscillation. Elle doit effectuer pendant ce temps de nombreuses oscillations pour qu'elle puisse être reconnue par le système comme une perturbation sinusoïdale. Si au contraire t est petit devant la période d'oscillation, la perturbation n'aurait pas le temps d'osciller et serait équivalente à une perturbation qui est constante ou qui varie linéairement avec le temps.

5.4. Validité du calcul au premier ordre

Le calcul au premier ordre de perturbation n'est valable que s'il conduit à une probabilité de transition inférieure à l'unité. Or à la résonance on a :

$$P_{i \rightarrow f}(t, \omega = \omega_{fi}) = \frac{|W_{fi}|^2}{4\hbar^2} t^2 \quad (12.58)$$

Cette quantité peut devenir infinie lorsque le temps augmente indéfiniment. Pour que l'approximation au premier ordre soit valable à la résonance, il faut



Page de titre

Sommaire



Page 893 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

que l'expression (12.58) soit très petite devant l'unité, c'est à dire :

$$\frac{|W_{fi}|^2}{4\hbar^2} t^2 \ll 1 \quad (12.59)$$

ou encore :

$$t \ll \frac{2\hbar}{|W_{fi}|} \quad (12.60)$$

En tenant compte de la condition (12.57) On a aussi :

$$t \gg \frac{2\pi}{\omega_{fi}} = \frac{2\pi\hbar}{E_f - E_i} = \frac{h}{E_f - E_i} \quad (12.61)$$

En combinant les conditions (12.60) et (12.61) on obtient alors :

$$|W_{fi}| \ll |E_f - E_i| \quad (12.62)$$

Cette inégalité exprime que le traitement perturbatif n'est valable que si la différence entre l'énergie associée à l'état final $|\phi_f\rangle$ et celle à l'état initial $|\phi_i\rangle$ est très grande devant l'élément de matrice de $W(t)$ entre ces états.



Page de titre

Sommaire



Page 894 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

6. Perturbation constante

Supposons que la perturbation est nulle pour $t < 0$ et qu'elle est introduite de manière abrupte à $t = 0$ et constante pour $t > 0$:

$$W(t) = \begin{cases} 0 & \text{pour } t < 0 \\ W & \text{pour } t > 0 \end{cases} \quad (12.63)$$

où W est un opérateur constant.

La probabilité de transition au premier ordre est alors :

$$P_{i \rightarrow f}(t) = \left| b_f^{(1)}(t) \right|^2 = \frac{1}{\hbar^2} |W_{fi}|^2 \left| \int_0^t e^{i\omega_{fi}t'} dt' \right|^2 = \frac{|W_{fi}|^2}{\hbar^2} f(t, \omega_{fi}) \quad (12.64)$$

où

$$f(t, \omega) = \left| \int_0^t e^{i\omega t'} dt' \right|^2 = \frac{1}{\omega^2} |e^{i\omega t} - 1|^2 = \frac{4}{\omega^2} \sin^2\left(\frac{\omega t}{2}\right) = \left(\frac{\sin(\omega t/2)}{\omega/2} \right)^2 \quad (12.65)$$

ce qui donne pour $P_{i \rightarrow f}(t)$:

$$P_{i \rightarrow f}(t) = \frac{1}{\hbar^2} |W_{fi}|^2 \left| \frac{\sin(\omega_{fi}t/2)}{\omega_{fi}t/2} \right|^2 t^2 \quad (12.66)$$



Page de titre

Sommaire



Page 895 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Résultat qu'on aurait pu d'ailleurs obtenir directement à partir de la forme $W \cos \omega t$ d'une perturbation sinusoïdale (12.38) en prenant $\omega = 0$.

Pour une valeur de t donnée, la probabilité de transition est proportionnelle à la fonction $f(t, \omega_{fi})$ qui présente un pic de largeur $\frac{2\pi}{t}$ centré sur $\omega_{fi} = 0$ (Fig12.4) et qui devient plus prononcé et pointu lorsque t augmente.

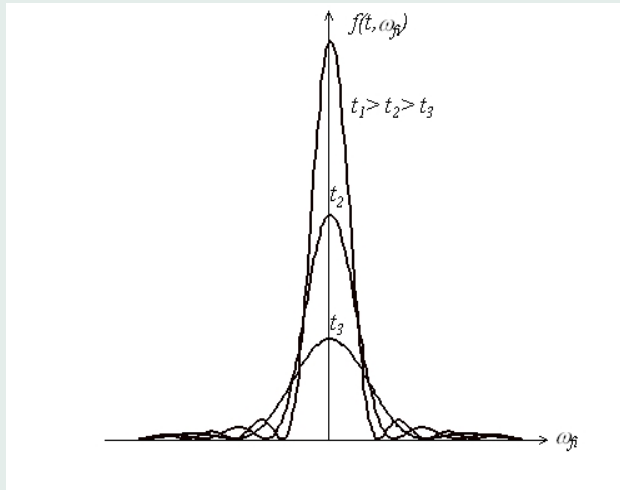


Figure 12.4 : Variation de $f(t, \omega_{f_0})$ en fonction de ω_{f_i} ($t_1 \gg t_2$)

Ceci signifie que les transitions se font préférentiellement vers les états dont l'énergie est située dans une bande de largeur $\delta E = \frac{2\pi\hbar}{t}$ autour de


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 896 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

l'énergie E_i de l'état initial. Autrement dit les transitions conservent l'énergie jusqu'à une valeur de l'ordre de δE .

Pour $t \rightarrow \infty$, il n'y a plus de transitions. Une perturbation constante en permanence, ne peut pas "ébranler" le système et donc ne peut induire de transitions.

Pour un état final donné, la probabilité de transition $P_{if}(t)$ oscille avec la période $\frac{2\pi}{\omega_{fi}}$ autour de la valeur moyenne $\frac{2|W_{fi}|^2}{(\hbar\omega_{fi})^2}$. Pour des temps $t \ll \frac{2\pi}{\omega_{fi}}$, $P_{if}(t)$ a un comportement en t^2 .



Page de titre

Sommaire



Page 897 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

7. Règle d'or de Fermi

Jusqu'à présent nous avons considéré un hamiltonien non perturbé H_0 qui possède seulement un spectre discret, mais il peut arriver que H_0 admet un spectre mixte formé de valeurs propres aussi bien discrètes que continues. Cette situation se rencontre dans de nombreuses situation et l'état final $|\phi_f\rangle$ peut appartenir à un continuum d'états d'énergies voisines (fig 12.5). C'est le cas par exemple de l'ionisation d'un atome qui correspond à une transition d'un état discret lié vers un état du continuum suite au champ de perturbation créée par une particule chargée qui passe près de l'atome.

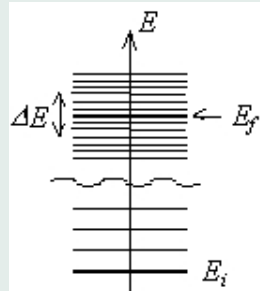


Figure 12.5 : Transition d'un état d'énergie E_i vers les états du continuum

Dans ce cas le spectre quasi-continu de H_0 est décrit à l'aide d'une densité d'état $\rho(E)$, telle que $\rho(E)dE$ soit le nombre d'états compris dans un intervalle



Page de titre

Sommaire



Page 898 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

d'énergie dE .

En supposant que le système subit une perturbation abrupte comme celle décrite au paragraphe précédent, la probabilité pour qu'il puisse effectuer une transition de l'état $|\phi_i\rangle$ vers un état $|\phi_f\rangle$ situé dans un intervalle d'énergie ΔE centré autour de E_f est :

$$P_{if}(t) = \frac{1}{\hbar^2} \int_{E_f - \frac{\Delta E}{2}}^{E_f + \frac{\Delta E}{2}} \rho(E) |W_{fi}|^2 \left| \frac{\sin(E - E_i)t/2\hbar}{(E - E_i)/2\hbar} \right|^2 dE \quad (12.67)$$

Lorsque ΔE est suffisamment petit, il est légitime de supposer que la densité d'états $\rho(E)$ et l'élément de matrice W_{fi} peuvent être évalués à $E = E_f$ et considérés donc comme constants. La probabilité de transition s'écrit alors :

$$P_{if}(t) = \frac{1}{\hbar^2} \rho(E_f) |W_{fi}|^2 \int_{E_f - \frac{\Delta E}{2}}^{E_f + \frac{\Delta E}{2}} \left| \frac{\sin(E - E_i)t/2\hbar}{(E - E_i)/2\hbar} \right|^2 dE \quad (12.68)$$

Si t est suffisamment grand ($t \gg \frac{2\pi\hbar}{\Delta E}$), la plus grande partie de l'intégrant (c'est à dire le pic central de $f(t, \omega_{fi})$) est incluse dans l'intervalle d'intégration et on peut remplacer les bornes d'intégration par $\pm\infty$.

Etant donné qu'on peut montrer que :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{\sin x}{x} \right)^2 dx = \pi \quad (12.69)$$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 899 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

La probabilité de transition devient alors :

$$P_{if}(t) = \frac{2\pi t}{\hbar} \rho(E_f) |W_{fi}|^2 \quad (12.70)$$

qu'on peut écrire :

$$P_{if}(t) = \Gamma_{if} t$$

où $\Gamma_{if} = dP_{if}/dt$ est par définition, la probabilité de transition par unité de temps, soit :

$$\Gamma_{if} = \frac{2\pi}{\hbar} \rho(E_f) |W_{fi}|^2 \quad (12.71)$$

Cette relation constitue La règle d'or de Fermi.

Une façon plus formelle d'obtenir cette règle consiste à utiliser la relation (12.68) et à écrire dans la limite de t grand que :

$$\left| \frac{\sin(E_f - E_i)t/2\hbar}{(E_f - E_i)/2\hbar} \right|^2 \rightarrow 2\pi\hbar t \delta(E_f - E_i) \quad (12.72)$$

La probabilité de transition par unité de temps est alors :

$$\Gamma_{if} = \frac{2\pi}{\hbar} |W_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i) \quad (12.73)$$

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 900 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

La densité d'états ρ est simplement remplacée par la fonction de Dirac. Cette relation n'est applicable en pratique que si on somme la probabilité de transition par unité de temps sur un ensemble d'états finaux proches les uns des autres. *C'est cependant sous cette forme qu'on retiendra la règle d'or en raison de sa plus grande simplicité.*

Remarquons que la conservation de l'énergie s'exprime d'une façon particulière dans la règle d'or (12.73) par une fonction de Dirac. Les autres lois de conservation du système (quantité de mouvement, moment cinétique,) se manifestent dans l'élément de matrice ω_{fi} , par des règles de sélection. Une transition peut par exemple être compatible avec la conservation de l'énergie, mais interdite par les règles de sélection et réciproquement.



Page de titre

Sommaire



Page 901 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

8. Perturbation adiabatique

Dans l'établissement de la règle d'or de Fermi, nous avons supposé que la perturbation était nulle pour $t < 0$ et constante pour $t > 0$. La perturbation du système apparaît donc de manière abrupte. En réalité toute perturbation n'est ressentie par le système que sur une certaine échelle de temps. Pour démontrer la validité de la règle d'or même dans ce cas, nous allons supposer que la perturbation a la forme suivante :

$$W(t) = e^{\beta t} W \quad (12.74)$$

où W est un opérateur constant et β un nombre infinitésimal positif.

La perturbation est alors introduite de façon **adiabatique**, c'est à dire lentement.

L'amplitude de transition au premier ordre est alors au temps t :

$$\begin{aligned} b_f(t) &= \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t W_{fi}(t') e^{i\omega_{fi}t'} dt' \\ &= \frac{1}{i\hbar} W_{fi} \int_{t_0}^t \exp i(\omega_{fi} - i\beta)t' dt' \end{aligned} \quad (12.75)$$

En supposant $t_0 \rightarrow -\infty$, on a :

$$b_f(t) = \frac{1}{i\hbar} W_{fi} \frac{\exp -[i(\omega_{if} + i\beta)t]}{\omega_{if} + i\beta} \quad (12.76)$$



Page de titre

Sommaire



Page 902 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

La probabilité de transition de l'état $|\phi_i\rangle$ à l'état $|\phi_f\rangle$ est donc :

$$P_{if}(t) = |b_f(t)|^2 = \frac{1}{\hbar^2} |W_{fi}|^2 \frac{e^{2\beta t}}{\omega_{if}^2 + \beta^2} \quad (12.77)$$

La probabilité de transition par unité de temps est alors :

$$\Gamma_{if} = \frac{dP_{if}}{dt} = \frac{2}{\hbar^2} |W_{fi}|^2 e^{2\beta t} \frac{\beta}{\omega_{if}^2 + \beta^2} \quad (12.78)$$

à la limite $\beta \rightarrow 0$, on a d'après E.P.4.17 :

$$\lim_{\beta \rightarrow 0} \frac{\beta}{\omega_{if}^2 + \beta^2} = \pi \delta(\omega_{if}) \quad (12.79)$$

soit :

$$\Gamma_{if} = \frac{2\pi}{\hbar} |W_{fi}|^2 \delta(E_i - E_f) \quad (12.80)$$

qui est **la règle d'or de Fermi**.

Ce résultat coïncide donc avec celui obtenu pour une perturbation abrupte, ce qui montre que la façon dont la perturbation est introduite n'affecte pas la probabilité de transition par unité de temps Γ_{if} .



Page de titre

Sommaire



Page 903 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

9. Application : Interaction d'une onde électromagnétique avec un atome

On considère l'interaction entre un atome et une onde électromagnétique plane de vecteur d'onde $\vec{k}$, de pulsation ω et polarisée suivant la direction de vecteur unitaire $\vec{u}$. On suppose que le potentiel vecteur de l'onde est de la forme :

$$\vec{A} = 2A_0\vec{u}\cos(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t) = A_0\vec{u}[e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)} - e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}] \quad (12.81)$$

$\vec{A}$ étant relié aux champ électrique $\vec{E}$ et magnétique $\vec{B}$ de l'onde par :

$$\vec{E} = -\frac{\partial\vec{A}}{\partial t} \quad (12.82)$$

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \wedge \vec{A}$$

9.1. Hamiltonien d'interaction

Pour simplifier, on considère un atome à un seul électron de masse m , de charge q , situé à la distance r du noyau supposé immobile en un point O et soumis à un potentiel central $V(r)$ créée par ce noyau. L'hamiltonien de


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 904 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

l'électron s'écrit alors :

$$H = \frac{1}{2m} [\vec{P} - q\vec{A}(\vec{R}, t)]^2 + V(\vec{R}) - \frac{q}{m} \vec{S} \cdot \vec{B}(\vec{R}, t) \quad (12.83)$$

où $\vec{R}$ et $\vec{P}$ sont respectivement les opérateurs position et impulsion de l'électron et le dernier terme décrit l'interaction du moment magnétique de spin $\vec{S}$ de l'électron avec le champ magnétique de l'onde.

En développant H , on peut le mettre sous la forme :

$$H = H_0 + W(t) \quad (12.84)$$

où H_0 est l'hamiltonien atomique et $W(t)$ décrit l'interaction de l'atome avec l'onde incidente :

$$H_0 = \frac{P^2}{2m} + V(\vec{R}) \quad (12.85)$$

$$W(t) = -\frac{q}{m} \vec{A} \cdot \vec{P} - \frac{q}{m} \vec{S} \cdot \vec{B} - \frac{q^2}{2m} \vec{A}^2 \quad (12.86)$$

Les deux premiers termes de $W(t)$ dépendent linéairement de l'amplitude A_0 et le troisième en dépend quadratiquement. Ce dernier est en général négligeable en raison de la faiblesse des intensités des sources lumineuses usuelles.



Page de titre

Sommaire



Page 905 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

$W(t)$ peut s'écrire alors sous la forme :

$$W(t) = W_1(t) + W_2(t) \quad (12.87)$$

avec :

$$W_1(t) = -\frac{q}{m} \vec{A} \cdot \vec{P} \quad (12.88)$$

$$W_2(t) = -\frac{q}{m} \vec{S} \cdot \vec{B}$$

L'ordre de grandeur du rapport des éléments de matrice relatifs à ces termes est d'après (12.82) :

$$\frac{W_2}{W_1} \sim \frac{\frac{q}{m} \hbar k A_0}{\frac{q}{m} P A_0} \sim \frac{\hbar k}{P} \sim \frac{\frac{h}{p}}{\lambda} = \frac{\lambda_0}{\lambda} \quad (12.89)$$

λ_0 est relatif à l'électron et est en raison du principe d'incertitude de Heisenberg de l'ordre de grandeur des dimensions atomiques, c'est à dire du rayon de Bohr (0.53 Å) et λ est la longueur d'onde qui, pour les sources lumineuse utilisés ($\simeq 5000\text{Å}$) est très supérieure à λ_0 de sorte qu'on a : $\frac{W_2}{W_1} \ll 1$

L'hamiltonien d'interaction atome-onde se réduit donc à :

$$W(t) = -\frac{q}{m} \vec{A} \cdot \vec{P} \quad (12.90)$$



Page de titre

Sommaire

◀

▶

◀

▶

Page 906 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

et peut être considéré comme une perturbation de l'hamiltonien non perturbé H_0

On peut écrire ce terme d'après (12.81) sous la forme :

$$W(t) = F e^{i\omega t} + F^+ e^{-i\omega t} \quad (12.91)$$

où F est un opérateur indépendant du temps

9.2. Amplitude de transition

Nous sommes donc en présence d'une perturbation périodique et l'amplitude de transition entre deux états discrets $|\varphi_i\rangle$ et $|\varphi_f\rangle$ s'écrit d'après (12.31) :

$$b_f^{(1)} = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t [F_{fi} e^{i(\omega_{fi} + \omega)t'} + F_{fi}^+ e^{i(\omega_{fi} - \omega)t'}] dt' \quad (12.92)$$

où $F_{fi} = \langle \varphi_f | F | \varphi_i \rangle$ et $F_{fi}^+ = \langle \varphi_f | F^+ | \varphi_i \rangle$

Comme ces éléments ne dépendent pas du temps, on peut les sortir de l'intégrale et obtenir :

$$b_f^{(1)} = F_{fi} \frac{1 - e^{i(\omega_{fi} + \omega)t}}{\hbar(\omega_{fi} + \omega)} + F_{fi}^+ \frac{1 - e^{i(\omega_{fi} - \omega)t}}{\hbar(\omega_{fi} - \omega)} \quad (12.93)$$

Chacun des deux termes de cette expression a la forme trouvée pour une perturbation constante, mais ω_{fi} est remplacé par $\omega_{fi} + \omega$ dans le premier terme et par $\omega_{fi} - \omega$ dans le second.



Page de titre

Sommaire



Page 907 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

L'un des termes est maximum lorsque $\omega_{fi} = \pm\omega$ alors que l'autre est négligeable : $b_f^{(1)}$ ne prend donc de valeur notable que si :

$$\omega_{fi} + \omega \simeq 0 \implies \mathbf{E}_f \simeq \mathbf{E}_i - \hbar\omega \quad (12.94)$$

$$\omega_{fi} - \omega \simeq 0 \implies \mathbf{E}_f \simeq \mathbf{E}_i + \hbar\omega \quad (12.95)$$

Lorsque $E_f \simeq E_i + \hbar\omega$, l'atome **absorbe** un photon d'énergie $\hbar\omega$ et l'électron passe du niveau E_i au niveau E_f plus élevé.

Lorsque $E_f \simeq E_i - \hbar\omega$, l'atome **émet** un photon d'énergie $\hbar\omega$ et l'électron passe du niveau E_i au niveau E_f plus bas.

Cette émission résulte de l'interaction d'un photon incident d'énergie $\hbar\omega$ avec l'atome. Après l'interaction il y a donc deux photons en phase de même énergie. Ce phénomène s'appelle **émission stimulée** et ne doit pas être confondu avec la desexcitation d'un atome du niveau E_i au niveau E_f en l'absence d'onde électromagnétique extérieure qui est l'**émission spontanée** (fig. 12.6).



Page de titre

Sommaire



Page 908 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

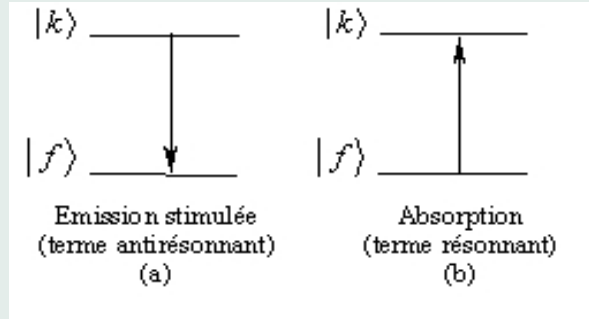


Figure 12.6 : Processus d'absorption et d'émission

Il est important aussi de retenir que le terme $e^{i\omega t}$ est associé à l'émission alors que le terme $e^{-i\omega t}$ correspond à l'absorption.

9.3. Probabilité de transition

Nous avons vu que, pour que l'amplitude de transition $b_f^{(1)}(t)$ ait une valeur appréciable, l'un des termes de (12.93) doit être important alors que l'autre est négligeable, on peut donc pour le calcul de la probabilité de transition $P_{i \rightarrow f}$ négliger les termes croisés.

En considérant la limite $\omega_{fi}t \rightarrow \infty$ et en remarquant que $|F_{fi}|^2 = |F_{fi}^+|^2$


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 909 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

et que $\delta(\omega) = \hbar\delta(E)$, on obtient pour $P_{i \rightarrow f}$:

$$P_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi t}{\hbar} |\mathbf{F}_{fi}|^2 [\delta(\mathbf{E}_f - \mathbf{E}_i + \hbar\omega) + \delta(\mathbf{E}_f - \mathbf{E}_i - \hbar\omega)] \quad (12.96)$$

La probabilité de transition par unité de temps est alors :

$$\Gamma_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} |\mathbf{F}_{fi}|^2 [\delta(\mathbf{E}_f - \mathbf{E}_i + \hbar\omega) + \delta(\mathbf{E}_f - \mathbf{E}_i - \hbar\omega)] \quad (12.97)$$

Si l'état d'énergie E_f appartient à un continuum, l'utilisation de la règle d'or de Fermi (12.70) nous donne :

$$\Gamma_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} |\mathbf{F}_{fi}|^2 [\rho(\mathbf{E}_i + \hbar\omega) + \rho(\mathbf{E}_i - \hbar\omega)] \quad (12.98)$$



Page de titre

Sommaire



Page 910 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Exercices et problèmes

EP12.1 Oscillateur chargé soumis à un champ dépendant du temps

On considère un oscillateur harmonique de masse m et de charge q en mouvement sur l'axe $\vec{Ox}$. On lui applique un champ électrique homogène de faible intensité suivant $\vec{Ox}$ et pouvant varier avec le temps suivant l'une des lois a et b telles que :

$$\text{a- } E(t) = E_0 \exp\left(-\frac{t^2}{\tau^2}\right)$$

$$\text{b- } E(t) = E_0 \exp\left(-\frac{|t|}{\tau}\right)$$

L'hamiltonien du système s'écrit alors :

$$H = H_0 + W(t)$$

avec

$$H_0 = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2$$

$$W = -qXE(t)$$

1- En considérant $W(t)$ comme une perturbation dépendant du temps et en admettant qu'avant la mise en action du champ ($t \rightarrow -\infty$) l'oscillateur se trouve dans le $n^{\text{ième}}$ état stationnaire, trouver au premier ordre du calcul des perturbations les



Page de titre

Sommaire



Page 911 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

probabilités de transition vers d'autres états qu'on spécifiera pour des temps tendant vers l'infini. On envisagera successivement les deux lois a et b.

2- Déterminer au deuxième ordre du calcul des perturbations les probabilités de transitions de l'oscillateur interdites au premier ordre c'est à dire telles que $p^{(1)}(n \rightarrow k) = 0$. Comparer les probabilités $p^{(2)}(n \rightarrow n \pm 2)$ et $p^{(1)}(n \rightarrow n \pm 1)$.

EP12.2 Effet d'une impulsion sur un oscillateur

Un oscillateur harmonique chargé est soumis à une impulsion électrique de forme gaussienne décrite par :

$$E(t) = (E_0 \exp -\frac{t^2}{\tau^2}) \cos \omega t$$

L'hamiltonien du système s'écrit :

$$H = H_0 + W(t)$$

où H_0 est l'hamiltonien non perturbé et $W(t)$ la perturbation dépendant du temps : $W(t) = -qE(t)X$, où q est la charge de l'oscillateur et X son opérateur position.

a- Calculer au premier ordre de perturbation la probabilité pour que l'oscillateur passe de l'état $|m\rangle$ à $t = -\infty$ à l'état $|n\rangle$ à $t = +\infty$. Quelles sont les transitions permises ?

b- Discuter les limites $\tau \ll \omega^{-1}$ et $\tau \gg \omega^{-1}$.



Page de titre

Sommaire



Page 912 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

EP12.3 Niveaux de vibration et oscillateur anharmonique

Une molécule diatomique possède, en plus des degrés de liberté de translation de chacun des deux atomes, des degrés de rotation et de vibration. Dans l'approximation adiabatique, on suppose que les électrons sont si rapides comparés aux noyaux, que le moindre déplacement de ces derniers produit un réarrangement instantané des premiers, ce qui nous permet d'envisager un potentiel $V(r)$ décrivant l'interaction entre les deux atomes distants de r . La distance moyenne r_0 est alors donnée par la moyenne de r dans l'état fondamental associé à ce potentiel. Le potentiel $V(r)$ peut toujours être développé en série de Taylor autour de sa valeur minimale : le premier terme non constant correspond à un oscillateur harmonique, et le second à une correction anharmonique (cubique en r). On peut alors décrire, en première approximation, la vibration de la molécule par l'hamiltonien suivant :

$$H = \frac{P^2}{2\mu} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 X^2 + \sigma\hbar\omega \left(\frac{\mu\omega}{\hbar}\right)^{\frac{3}{2}} X^3$$

La forme du terme anharmonique a été choisie de façon que σ soit un nombre sans unités. La masse μ est la masse réduite des deux atomes et X est l'opérateur associé à l'écart de position $r - r_0$.

a- Trouver une expression explicite pour les niveaux d'énergie E_n et les états stationnaires $|\Psi_n\rangle$ de ce système à l'ordre σ^2 pour E_n et à l'ordre σ pour $|\Psi_n\rangle$.

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 913 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

b- Si la molécule est polaire (atomes différents) elle aura un moment dipolaire électrique D proportionnel à X : $D = \alpha X$. Ecrire l'hamiltonien décrivant l'interaction de la molécule avec une onde électromagnétique incidente de fréquence Ω et d'amplitude E .

c- On suppose que σ est assez petit pour qu'on puisse le négliger en première approximation. Les états vibrationnels de la molécule sont alors ceux de l'oscillateur harmonique non perturbé notés $|n\rangle$. Donner une expression pour la probabilité transition par unité de temps Γ_{mn} de l'état $|m\rangle$ vers l'état $|n\rangle$ due à l'onde électromagnétique, au premier ordre du calcul des perturbations. Quelles sont les seules transitions permises ?

d- Refaire le même calcul, pour la probabilité de transition par unité de temps Γ_{mn} de l'état $|\Psi_m\rangle$ vers $|\Psi_n\rangle$, en utilisant l'expression approximative obtenue pour $|\Psi_n\rangle$. Y a-t-il d'autres transitions permises au premier ordre en E ?



Page de titre

Sommaire



Page 914 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

EP12.4 Rotateur plan perturbé

On peut assimiler une molécule diatomique à un rotateur rigide de moment d'inertie $I = \mu a^2$ où μ est la masse réduite du système formé par les deux atomes et a la distance qui les sépare. On suppose que la molécule est polaire de moment dipolaire $\vec{D}$ et qu'elle effectue un mouvement de rotation dans le plan (xoy). L'hamiltonien H_0 du rotateur est $H_0 = \frac{1}{2I} \vec{L}^2$ où $\vec{L}$ l'opérateur moment cinétique. Les fonctions propres et les valeurs propres de H_0 sont :

$$\phi_m(0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp im\varphi$$

$$E_m(0) = \frac{\hbar^2 m^2}{2I}$$

$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, et φ l'angle polaire repérant la position de la molécule dans le plan (xoy).

On applique à la molécule un champ électrique homogène $\vec{E}$ situé dans le plan de rotation et variant avec le temps selon la loi $\vec{E}(t) = f(t)\vec{E}_0$ où $f(t)$ est une fonction du temps et $\vec{E}$ un champ constant.

On suppose que le potentiel décrivant le couplage de la molécule avec le champ peut être considéré comme une perturbation et s'écrit :

$$W(t) = -\vec{D} \cdot \vec{E}$$



Page de titre

Sommaire



Page 915 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

de sorte que la hamiltonien total H de la molécule est :

$$H = H_0 + W(t)$$

La molécule se trouvant à $t < 0$ dans l'état initial $\phi_m^{(0)}(\varphi)$, on applique différentes formes de perturbations.

1- Perturbation exponentielle

On suppose que $f(t)$ est telle que :

$$f(t) = \begin{cases} 0 & \text{pour } t < 0 \\ \exp(-\frac{t}{\tau}) & \text{pour } t > 0 \end{cases}$$

a- Trouver au premier ordre du calcul de perturbation les probabilités de transition vers les différents états $\phi_k^{(0)}(\varphi)$ avec $k \neq m$, pour t tendant vers l'infini.

b- Chercher au deuxième ordre du calcul de perturbation non stationnaire les probabilités de transition interdites au premier ordre.

2- Perturbation sinusoïdale

On suppose maintenant que le champ électrique est sinusoïdal de sorte que $f(t) = \cos \omega t$.

a- Trouver au premier ordre du calcul de perturbation les probabilités de transition $P_{mk}^{(1)}$ vers les différents états $\phi_k^{(0)}(\varphi)$ en spécifiant les termes résonant et antirésonant.



Page de titre

Sommaire



Page 916 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

b- On se place dans le cas où la pulsation de l'excitation ω est proche d'une des pulsations de transitions

$$\omega_{km}^{(0)} = \frac{E_k^{(0)} - E_m^{(0)}}{\hbar}$$

le $k^{i\text{ème}}$ état appartient également au spectre discontinu de H_0 .

Montrer que pour $|\omega_{km}^{(0)} - \omega| \ll \omega_{km}^{(0)}$ on peut négliger le terme antirésonant.

Donner l'expression de la probabilité de transition $P_{mk}^{(1)}(t, \omega)$ et tracer son allure en fonction de ω .

Donner la condition d'applicabilité de ce résultat.

3- Perturbation soudaine

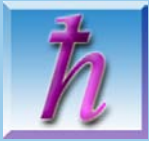
Dans le cas où $f(t)$ est la fonction échelon définie par :

$$f(t) = \begin{cases} 0 & \text{pour } t < 0 \\ 1 & \text{pour } t > 0 \end{cases}$$

Déterminer les expressions des probabilités de transitions et commenter le résultat.

4- Perturbation adiabatique

La fonction $f(t)$ est maintenant une fonction lentement variable avec le temps. En supposant que la molécule se trouve à $t = 0$ dans son $n^{i\text{ème}}$ état stationnaire, chercher la fonction d'onde pour $t > 0$ au premier ordre du calcul de perturbation adiabatique.



Page de titre

Sommaire



Page 917 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Commenter le résultat obtenu.

EP12.5 Effet photoélectrique

On considère une particule de masse m et de charge q plongée dans un puits de Dirac défini par le potentiel :

$$V(x) = -\alpha\delta(x)$$

où α est une constante positive.

On rappelle que dans un tel puits (cf EP3.8) la particule n'a qu'un état lié d'énergie négative $E_0 = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}$ associé à la fonction d'onde $\varphi_0(x) = \sqrt{\rho} \exp(-\rho|x|)$ (avec $\rho = \frac{m\alpha}{\hbar^2}$).

On montre aussi que pour chaque valeur positive de l'énergie $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ il existe deux fonctions d'onde stationnaires correspondant aux processus de pénétration et de réflexion des particules d'impulsion $p = \hbar k$. L'expression de ces fonctions est donnée par :

$$\varphi_k(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left[e^{ikx} - \frac{m\alpha}{m\alpha + i\hbar^2 k} e^{-ikx} \right] & : \text{ pour } x < 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{i\hbar^2 k}{m\alpha + i\hbar^2 k} e^{ikx} & : \text{ pour } x > 0 \end{cases}$$



Page de titre

Sommaire



Page 918 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

1- a- Montrer que les fonctions $\varphi_k(x)$ sont orthonormées et calculer la densité d'états $\rho(E)$ pour une énergie positive E .

b- Calculer l'élément de matrice $\langle \varphi_k | X | \varphi_0 \rangle$ de l'observable position X .

2- On soumet la particule à un champ électrique sinusoidal de pulsation ω parallèle à l'axe $\vec{Ox}$ et d'intensité E_0 faible. Il en résulte une perturbation de l'hamiltonien de la particule qui s'écrit :

$$W(t) = -qE_0X \sin \omega t$$

La particule étant initialement dans l'état lié $|\varphi_0\rangle$ et la pulsation du champ telle que $\omega > -\frac{E_0}{\hbar}$, calculer la probabilité de transition par unité de temps Γ vers un état quelconque du continuum d'énergie positive. Etudier la variation de Γ en fonction de ω et E_0 . Commenter l'effet physique mis en évidence.

EP 12.6 Principe simplifié du Laser

L'appellation LASER est un acronyme pour "Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation", c'est à dire amplification d'un rayonnement lumineux par émission stimulée. Le laser est un dispositif capable de produire une radiation intense, cohérente, directionnelle et monochromatique. Cette radiation a pour origine le phénomène d'émission stimulée évoqué plus haut et qu'on se propose d'étudier.

On considère un système ne possédant que deux états stationnaires $|\varphi_1\rangle$ et $|\varphi_2\rangle$ d'énergie E_1 et E_2 ($E_1 < E_2$). L'émission stimulée dans un tel système implique deux



Page de titre

Sommaire



Page 919 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

conditions :

- Le niveau supérieur E_2 a été totalement peuplé, ce qui est en général réalisé par des méthodes de pompage optique.

- L'émission soit amplifiée et entretenue par une cavité résonante.

Pour réaliser cette émission on soumet le système à une excitation supplémentaire dépendant du temps qui introduit dans l'hamiltonien un terme additionnel $W(t)$ qu'on considère comme une perturbation et qui est tel que :

$$\langle \varphi_1 | W(t) | \varphi_1 \rangle = \langle \varphi_2 | W(t) | \varphi_2 \rangle = 0$$

$$\langle \varphi_1 | W(t) | \varphi_2 \rangle = \langle \varphi_2 | W(t) | \varphi_1 \rangle = -W_0 \cos \omega t$$

Le vecteur d'état $|\Psi(t)\rangle$ décrivant le comportement du système peut se mettre alors sous la forme :

$$|\Psi(t)\rangle = a(t) \exp\left(-\frac{iE_1 t}{\hbar}\right) |\varphi_1\rangle + b(t) \exp\left(-\frac{iE_2 t}{\hbar}\right) |\varphi_2\rangle$$

1- En écrivant l'équation de Schrödinger, établir les équations différentielles gouvernant $a(t)$ et $b(t)$ en fonction des pulsations ω , $\omega_0 = \frac{E_2 - E_1}{\hbar}$ et $\omega_1 = \frac{W_0}{\hbar}$.

On éliminera de ces équations les termes en $(\omega + \omega_0) t$ qui oscillent suffisamment rapidement pour que l'on puisse négliger leur contribution.

2- Afin d'obtenir un système d'équations différentielles à coefficients constants,



Page de titre

Sommaire



Page 920 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

on effectue le changement de variables suivant :

$$A(t) = a(t) \exp \left[-i (\omega - \omega_0) \frac{t}{2} \right]$$

$$B(t) = b(t) \exp \left[i (\omega - \omega_0) \frac{t}{2} \right]$$

Etablir les équations différentielles qui gouvernent $A(t)$ et $B(t)$.

3- Sachant que le système d'équations différentielles de type :

$$\begin{cases} \frac{dA}{dt} = i(-pA + qB) \\ \frac{dB}{dt} = i(qA + pB) \end{cases}$$

a pour solutions

$$A(t) = c_1 e^{i\Omega t} + c_2 e^{-i\Omega t}$$

$$B(t) = d_1 e^{i\Omega t} + d_2 e^{-i\Omega t}$$

avec $\Omega^2 = p^2 + q^2$

a- Etablir l'expression de Ω en fonction de ω , ω_0 et ω_1 .

b- En supposant qu'avant l'application de la perturbation $W(t)$ le système était dans l'état $|\varphi_2\rangle$. Donner l'expression de $A(t)$ et $B(t)$.

4- Calculer la probabilité de la transition de l'état $|\varphi_2\rangle$ à l'état $|\varphi_1\rangle$ (émission stimulée).



Page de titre

Sommaire



Page 921 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Pour quelle valeur de ω et de t le système est-il revenu dans l'état $|\varphi_1\rangle$. Conclure ?

EP12.7 Transitions induites par une perturbation aléatoire

On considère un système stationnaire comportant deux niveaux d'énergie E_1 et E_2 ($E_1 < E_2$) décrit par les kets $|\varphi_1\rangle$ et $|\varphi_2\rangle$. On lui applique une perturbation $W(t)$ telle que :

$$\begin{aligned}\langle \varphi_1 | W(t) | \varphi_1 \rangle &= \langle \varphi_2 | W(t) | \varphi_2 \rangle = 0 \\ \langle \varphi_1 | W(t) | \varphi_2 \rangle &= \langle \varphi_2 | W(t) | \varphi_1 \rangle = u f(t)\end{aligned}$$

La nature de la fonction $f(t)$ (supposée réelle) sera précisée plus loin et u est un nombre complexe.

1- La solution de l'équation de Schrödinger sous la forme la plus générale :

$$H |\Phi\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Phi\rangle$$

peut s'écrire :

$$|\Phi\rangle = c_1(t) |\Psi_1\rangle + c_2(t) |\Psi_2\rangle$$

où $|\Psi_1\rangle$ et $|\Psi_2\rangle$ sont proportionnels à $|\varphi_1\rangle$ et $|\varphi_2\rangle$ respectivement. Déterminer les facteurs de proportionnalité ?

2- Ecrire les équations différentielles régissant c_1 et c_2 en introduisant la pulsation

$$\omega_0 = \frac{(E_2 - E_1)}{\hbar}.$$



Page de titre

Sommaire



Page 922 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

3- On suppose qu'à l'instant initial, le système est dans l'état $|\varphi_1\rangle$. Que valent respectivement $c_1(0)$ et $c_2(0)$?

En considérant que l'on peut toujours écrire

$$c_2(T) = c_2(0) + \int_0^T \left(\frac{dc_2}{dt} \right) dt$$

Expliciter cette dernière relation en faisant l'hypothèse $c_1(t) \simeq c_1(0)$ pour $0 \leq t \leq T$ lorsque $f(t)$ varie rapidement durant ce même laps de temps.

4- Calculer alors, à l'instant T , la probabilité de transition entre l'état $|\varphi_1\rangle$ et l'état $|\varphi_2\rangle$. On notera $P_{1 \rightarrow 2}$ cette probabilité et on formulera le résultat au moyen d'une intégrale double portant sur deux variables d'intégration t_1 et t_2 .

5- En effectuant le changement de variables $t = t_2$ et $\tau = t_1 - t_2$ et en introduisant la fonction de corrélation $G(\tau) = \overline{f(t+\tau)f(t)}$ où la barre indique une moyenne sur l'ensemble des parties constituant le système. Montrer que $P_{1 \rightarrow 2}$ s'écrit :

$$P_{1 \rightarrow 2} = \frac{|u|^2}{\hbar^2} \int_0^T \int_{-t}^{T-t} G(\tau) \exp(i\omega_0\tau) dt d\tau$$

6- La fonction $f(t)$ est de nature aléatoire : $\overline{f(t)} = 0$, $\overline{f^2(t)} = 1$,

et $G(\tau) = \exp\left(-\frac{|\tau|}{\tau_c}\right)$ est une fonction paire qui ne dépend que de l'intervalle τ et non de l'origine t . τ_c est appelé temps de corrélation.

Soit alors :

$$P = \int_0^T h(t) dt$$



Page de titre

Sommaire



Page 923 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

a- Montrer en utilisant comme intermédiaire de calcul la primitive $\tilde{H}$ de h , que $\frac{dP}{dT} = h(T)$.

b- En tenant compte de la décroissance rapide de $G(\tau)$ avec τ , montrer que la partie réelle de $\frac{dP_{12}}{dt}$ peut s'exprimer selon l'intégrale :

$$\int_0^{\infty} G(\tau) \cos(\omega_0 \tau) d\tau$$

7- Calculer l'intégrale $J(\omega_0) = \int_0^{\infty} G(\tau) \cos(\omega_0 \tau) d\tau$ et montrer qu'elle vaut :

$$J(\omega_0) = \frac{\tau_c}{1 + \omega_0^2 \tau_c^2}$$

La quantité $J(\omega_0)$ est appelée densité spectrale, donner son allure dans le domaine $0 \leq \frac{\omega_0}{2\pi} \leq 500 \text{ MHz}$ pour $\tau_c = 1 \text{ ps}$ et $\tau_c = 1 \text{ ns}$.

EP 12.8 Transitions à deux photons

On considère un atome soumis à deux champs électrique et magnétique statiques $\vec{E}_0$ et $\vec{B}_0$ dirigés suivant l'axe $\vec{Oz}$ et on s'intéresse au niveau atomique de moment cinétique $j = 1$.



Page de titre

Sommaire



Page 924 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

1. Montrer que ce niveau donne lieu à trois niveaux d'énergie non équidistants aux quelles correspondent les états propres $|\varphi_M\rangle$ de l'observable J_z et les énergies propres E_M ($M = -1, 0, +1$).

Déterminer $|\varphi_M\rangle$ et E_M .

on pose $E_1 - E_0 = \hbar\omega_1$ et $E_0 - E_{-1} = \hbar\omega_2$

2. On applique en plus à l'atome un champ radiofréquence oscillant dans le plan xy , d'intensité très faible et de pulsation ω . Il en résulte une perturbation décrite par $W(t)$ tel que :

$$W(t) = \frac{\Omega}{2}(J_+e^{-i\omega t} + J_-e^{i\omega t})$$

où J_+ et J_- sont les opérateurs “montée” et “descente” et Ω une constante proportionnelle à l'intensité du champ oscillant.

a- A un instant t , l'état de l'atome est décrit par :

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n=-1}^{+1} b_n(t) \exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right) |\varphi_M\rangle$$

Déterminer le système d'équations différentielles satisfait par les $b_n(t)$.

b- On suppose qu'à l'instant $t = 0$, l'atome est dans l'état $|\varphi_{-1}\rangle$

Montrer que pour $b_1(t)$ il faut pousser le calcul de perturbation jusqu'au second ordre. Calculer alors $b_1(t)$.

c- Calculer la probabilité $P_{-1,+1}(t)$ de trouver l'atome à l'instant t dans l'état $|\varphi_1\rangle$.

d- Etudier la variation de $P_{-1,+1}(t)$ en fonction de ω .

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 925 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

Montrer qu'il apparaît en plus des résonances pour $\omega = \omega_1$ et $\omega = \omega_2$ une résonance pour $\omega = \frac{(\omega_1 + \omega_2)}{2}$. Interpréter cette résonance.



Page de titre

Sommaire



Page 926 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Liste des exercices et problèmes

- EP 1.1 Rayonnement du corps noir
- EP 1.2 Effet photoélectrique
- EP 1.3 Principe du photomultiplicateur
- EP 1.4 Modèle de J.J. Thomson
- EP 1.5 Diffusion de Rutherford
- EP 1.6 Perte d'énergie de l'atome d'hydrogène par rayonnement et modèle de Bohr
- EP 1.7 Energie de liaison du positronium
- EP 1.8 Détermination spectroscopique du rapport $\frac{M(\text{électron})}{m(\text{proton})}$
- EP 1.9 Expérience de Franck et Hertz
- EP 1.10 Modèle de Wilson-Sommerfeld
- EP 1.11 Superfluidité de l'hélium

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 927 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

- EP 2.1 Effet Compton
- EP 2.2 Effet de recul d'un atome
- EP 2.3 Emission continue
- EP 2.4 Equation d'onde du photon
- EP 2.5 Ondes de De Broglie
- EP 2.6 Interférences électroniques
- EP 2.7 Diffraction des neutrons
- EP 2.8 Vitesse de phase et vitesse de groupe
- EP 2.9 Etalement d'un paquet d'ondes Gaussien
- EP 2.10 Largeur spectrale
- EP 2.11 Pression de radiation
- EP 2.12 Microscope de Heisenberg
- EP 2.13 Déflexion dans un champ magnétique
- EP 2.14 Collision photon-particule
- EP 2.15 Transformée de Fourier

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 928 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

EP 3.1 Discussion classique d'une courbe de potentiel

EP 3.2 Effet Tunnel et applications

EP 3.3 Puits infini : Niveau de Fermi

EP 3.4 Puits fini symétrique

EP 3.5 Puits fini dissymétrique

EP 3.6 Etats d'une particule dans un potentiel $V(x) = -V_0/ch^2(\frac{x}{a})$

EP 3.7 Quantification gravitationnelle

EP 3.8 Etats liés d'une particule dans un puits sphérique

EP 3.9 Effet MASER

EP 3.10 Etats liés d'une particule dans un puits delta

EP 3.11 Puits composés de plusieurs fonctions delta

EP 3.12 Potentiel de Kronig-Penney

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 929 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

- EP 4.1 Inégalité de Schwarz
- EP 4.2 Algèbre des commutateurs
- EP 4.3 Dérivation d'un opérateur
- EP 4.4 Formule de Glauber
- EP 4.5 Fonction d'opérateurs
- EP 4.6 Trace d'un opérateur
- EP 4.7 Procédé d'orthogonalisation de Schmidt
- EP 4.8 Identité de Kubo
- EP 4.9 Théorème du Viriel
- EP 4.10 Représentations $\{|\vec{r}\rangle\}$ et $\{|\vec{p}\rangle\}$
- EP 4.11 Equation de Schrödinger en représentation $\{|\vec{p}\rangle\}$
- EP 4.12 Fonction d'onde en représentation $\{|\vec{p}\rangle\}$
- EP 4.13 Hamiltonien perturbé
- EP 4.14 Niveaux d'énergie fonctions d'un paramètre
- EP 4.15 Quantification du champ électromagnétique
- EP 4.16 Ensemble de deux observables qui commutent
- EP 4.17 Distribution de Dirac

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 930 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

- EP 5.1 Particule dans un potentiel coulombien
- EP 5.2 Hamiltonien perturbé
- EP 5.3 Mesure d'observables (1)
- EP 5.4 Mesure d'observables (2)
- EP 5.5 Mesure d'observables (3)
- EP 5.6 Mesure d'observables (4)
- EP 5.7 Mesure d'observables (5)
- EP 5.8 Mesure d'observables (6)
- EP 5.9 Relations d'Heisenberg
- EP 5.10 Matrice densité
- EP 5.11 Molécule diatomique
- EP 5.12 Molécule triatomique
- EP 5.13 Molécule à 6 atomes
- EP 5.14 Densité de courant de probabilité
- EP 5.15 Représentation d'interaction
- EP 5.16 Fonction de Green
- EP 5.17 Mesures portant sur un système de deux particules

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 931 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

- EP 6.1 Méthode polynômiale
- EP 6.2 Relation d'Heisenberg
- EP 6.3 Probabilité de mesure
- EP 6.4 Etats quasi-classiques de l'oscillateur harmonique
- EP 6.5 Oscillateur harmonique chargé dans un champ électrique constant
- EP 6.6 Oscillateur harmonique chargé dans un champ électrique variable
- EP 6.7 Oscillateur harmonique et opérateur de translation
- EP 6.8 Oscillateur harmonique et opérateur d'évolution
- EP 6.9 Modes propres de vibration de deux oscillateurs couplés (1)
- EP 6.10 Modes propres de vibration de deux oscillateurs couplés (2)
- EP 6.11 Modes propres de vibration de deux oscillateurs couplés (3)
- EP 6.12 Modes propres de vibration de deux oscillateurs couplés (4)
- EP 6.13 Méthode WKB

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 932 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

- EP 7.1 Composantes de $\vec{L}$
- EP 7.2 Propriétés des harmoniques sphériques
- EP 7.3 Parité des harmoniques sphériques
- EP 7.4 Propriétés de l'opérateur $\vec{J}$
- EP 7.5 Composantes d'un moment orbital $\ell = 1$
- EP 7.6 Opérateur rotation
- EP 7.7 Opérateur rotation infinitésimale
- EP 7.8 Oscillateur à deux dimensions
- EP 7.9 Particule chargée dans un champ électrique et magnétique
- EP 7.10 Rotateur rigide
- EP 7.11 Piège à électrons
- EP 8.1 Oscillateur harmonique isotrope à deux dimensions
- EP 8.2 Oscillateur harmonique isotrope à trois dimensions
- EP 8.3 Spectre de vibration-rotation d'une molécule diatomique
- EP 8.4 Rotations et vibrations anharmoniques d'une molécule diatomique
- EP 8.5 Atome d'hydrogène
- EP 8.6 Evolution des composantes de $\vec{L}$ dans l'atome d'hydrogène
- EP 8.7 Potentiel coulombien perturbé
- EP 8.8 Effet Zeeman Normal
- EP 8.9 Grandeurs moyennes dans un atome

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 933 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

- EP 9.1 Précession de Larmor
- EP 9.2 Opérateur d'évolution d'un spin $\frac{1}{2}$
- EP 9.3 Mesures de spin- Formule de Rabi
- EP 9.4 Spectre R.M.N d'un système de deux protons
- EP 9.5 Résonance magnétique de deux particules de spin $\frac{1}{2}$
- EP 9.6 Matrices de Pauli
- EP 9.7 Hamiltonien de Spin de l'atome d'hydrogène
- EP 9.8 Résonance magnétique d'un couple de protons
- EP 9.9 Spineur de l'atome d'hydrogène dans un champ magnétique
- EP 9.10 Equation de Pauli et courant de spin
- EP 10.1 Couplage de deux spins $\frac{1}{2}$ de particules identiques
- EP 10.2 Couplage de deux spins $\frac{1}{2}$ de particules différentes
- EP 10.3 Moment cinétique total d'un atome
- EP 10.4 Couplage d'un spin 1 et d'un spin $\frac{1}{2}$
- EP 10.5 Couplage spin-orbite et structure fine de la raie
de résonance de l'hydrogène
- EP 10.6 Addition de trois spins $\frac{1}{2}$
- EP 10.7 RMN de trois protons
- EP 10.8 Composition d'un spin électronique et de deux spins nucléaires
- EP 10.9 Système de deux spins $\frac{1}{2}$ dans le référentiel du centre de masse
- EP 10.10 Théorème de Wigner-Eckart
- EP 10.11 Tenseur de structure fine (Zero-field Splitting)
- EP 10.12 Modèles du noyau

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 934 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

- EP 11.1 Oscillateur harmonique chargé
- EP 11.2 Oscillateur anharmonique
- EP 11.3 Croisement de niveaux
- EP 11.4 Oscillateur harmonique à deux dimensions perturbé
- EP 11.5 Effet Stark sur un rotateur rigide
- EP 11.6 Interaction dipolaire
- EP 11.7 Paramagnétisme et diamagnétisme atomique
- EP 11.8 Interaction de Van der Waals
- EP 11.9 Structure fine de l'hydrogène
- EP 11.10 Structure hyperfine du niveau $n = 1$ de l'atome d'hydrogène
- EP 11.11 Effet Stark
- EP 11.12 L'atome d'hélium
- EP 11.13 Potentiel gaussien
- EP 11.14 Potentiel hyperbolique
- EP 11.15 Potentiel de Yukawa
- EP 12.1 Oscillateur chargé soumis à un champ dépendant du temps
- EP 12.2 Effet d'une impulsion sur un oscillateur
- EP 12.3 Niveaux de vibration et oscillateur anharmonique
- EP 12.4 Rotateur plan perturbé
- EP 12.5 Effet photoélectrique
- EP 12.6 Principe simplifié du Laser
- EP 12.7 Transitions induites par une perturbation aléatoire
- EP 12.8 Transitions à deux photons



Page de titre

Sommaire



Page 935 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Notes biographiques

Derrière les prouesses expérimentales et les visions théoriques, derrière tous les concepts scientifiques qui semblent déshumanisés, il y a des hommes d'intelligence supérieure qui ont effectué les expériences, imaginé les théories et découvert les lois.

Les noms des plus célèbres d'entre eux apparaissent des fois dans certaines appellations : Principe de Newton, Lois de Descartes, Théorème d'Ampère, Loi de Planck, Equation de Schrödinger, ...Mais d'autres dont les contributions ne sont pas moins importantes, restent inconnus même pour ceux qui s'adonnent à la physique.

Pour cette raison, nous allons décrire brièvement l'itinéraire des principaux d'entre-eux, dont les travaux ont eu un impact important dans le développement de la physique quantique. Pour ce faire, nous avons utilisé et adapté les biographies existantes en nous efforçant de donner

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 936 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

de ces hommes une image qui reflète leur passion, leur génie et leur endurance.

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 937 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

BALMER, Johann Jakob

Physicien suisse (1858 / 1898) Il étudia les spectres d'émission des gaz et découvrit en 1884 une relation empirique qui porte son nom et qui décrit une série de raies du spectre de l'atome d'hydrogène (série de Balmer). Cette relation a été démontrée en 1913 à partir du modèle de Bohr

BOHR, Niels Hendrik David

Physicien danois (1885 / 1962). Il fut l'un des principaux acteurs de l'avènement de la physique quantique. En 1913, il avait réussi à appliquer l'hypothèse quantique de Planck (1900) au modèle atomique planétaire de Rutherford. Il a établi également un principe de correspondance qui porte son nom et qui relie les théories classiques et quantiques. En 1927, il développa avec plusieurs physiciens de renom "l'interprétation de Copenhague" de la mécanique quantique qui est basée sur le principe d'incertitude de Heisenberg et la dualité onde-corpuscule.

Plus tard, il travailla sur des problèmes de physique nucléaire et de particules élémentaires. Son interprétation de la fission nucléaire de l'Uranium, fut importante pour les développements techniques futurs. De 1943 à 1945, Bohr participa au développement de la bombe atomique à Los Alamos. Il fut lauréat du Prix Nobel de physique en 1920.

BOLTZMANN, Ludwig

Physicien autrichien (1844 / 1906). Il étudia la physique à l'université de Vienne où il fut l'assistant de Josef Stefan. Boltzmann devint professeur de physique

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 938 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

mathématique à l'université de Graz en 1869. Il enseigna aussi à Vienne, Munich et Leipzig. Parmi ses étudiants il y eut S. Arrhenius et W. Nernst.

Le problème central de ses travaux théoriques fut la relation entre la thermodynamique et la mécanique, qui requiert la levée de la contradiction entre la réversibilité des processus mécaniques et l'irréversibilité des processus thermodynamiques. Il démontra la relation entre l'entropie et la probabilité d'un état ($S = K \log \Omega$). Ce fut le point de départ de la théorie quantique à la fois dans la formulation de Max Planck en 1900 et dans la version d'Albert Einstein (1905). D'autres réussites de Boltzmann sont les relations pour la distribution en énergie d'atomes se déplaçant librement dans un champ de force (distribution de Maxwell-Boltzmann) et l'explication théorique de la loi du rayonnement du corps noir (loi de Stefan-Boltzmann, 1884).

Boltzmann fut un défenseur de la théorie atomique. Le peu d'enthousiasme, et même le rejet de beaucoup de physiciens contemporains, le décourèrent profondément durant toute sa vie. Il ne vécut pas suffisamment longtemps pour assister à la victoire finale de la théorie atomique introduite en 1905 par la théorie du mouvement Brownien d'Einstein. Boltzmann se suicida à l'âge de 62 ans.

BORN, Max

Physicien allemand (1882 /1970). Born fut professeur à Berlin (1915), Francfort (1919) et Göttingen (1921), il émigra à Cambridge en 1933 et devint professeur à Edimbourg en 1936. Born se consacra d'abord à l'étude de la relativité et de la physique des cristaux. A partir de 1922, il travailla à une nouvelle théorie atomique et, avec ses étudiants W.Heisenberg et P.Jordan, réussit en 1925 à créer la mécanique

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 939 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

matricielle. A Göttingen, Born fonda une importante école de physique théorique. En 1926, il interpréta les fonctions d'onde de Schrödinger en terme d'amplitudes de probabilité, introduisant ainsi le point de vue statistique dans la physique moderne. Ces travaux lui valurent l'attribution du prix Nobel de physique en 1954.

BOSE, Satyendra Nath

Physicien indien, (1894 / 1974). Avec Einstein, il a formulé une théorie de statistique quantique (statistique de Bose-Einstein) qui diffère de la statistique classique de Boltzmann et également de la statistique de Fermi. Bose inventa cette statistique pour les photons ; Einstein l'a étendu aux particules massives. Les particules obéissant à cette statistique sont appelées Bosons. Ses travaux sur la condensation. Ses travaux sur la condensation (condensation de Bose) sont aujourd'hui d'actualité. Bose fut professeur à Dacca et à Calcutta de 1926 à 1956.

COMPTON, Arthur Holly

Physicien américain, (1892/1962), professeur à l'Université Washington, St. Louis, en 1920 et à l'université de Chicago en 1923. En 1945 il devint doyen de l'université Washington. Au cours de ses études sur les rayons X, il découvrit l'effet Compton en 1922 qui est relatif à la diffusion élastique des photons par les électrons. Il en donna simultanément avec Debye l'explication quantique. Compton fut également le premier à prouver la réflexion des rayons X. Ensemble avec R. L. Doan, il observa la diffraction de rayons X à l'aide d'un réseau. Il reçut le prix Nobel de physique en 1927 conjointement avec C.T.R Wilson. En collaboration avec ses étudiants, Comp-

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 940 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

ton mena des études sur les rayons cosmiques. Durant la seconde guerre mondiale, il participa à l'élaboration de la bombe atomique et du radar, en tant que directeur du projet de recherche du Gouvernement américain sur le Plutonium.

DAVISSON, Clinton Joseph

Physicien américain (1881/1958). De 1917 à 1946, il occupa un poste scientifique aux "Bell Telephone Laboratories" puis jusqu'à 1954, il fut professeur à l'Université de Virginie à Charlottesville. Il effectua des recherches sur l'émission thermoélectronique et sur l'émission par bombardement d'électrons, en remarquant que les théories classiques manifestaient une inadaptation radicale dans l'interprétation des résultats. A Oxford en 1926, il prit connaissance de la toute récente théorie ondulatoire de la matière de Louis de Broglie, deux ans plus tard, il confirma expérimentalement cette théorie avec L.H Germer par l'observation d'électrons diffractés par un cristal de Nickel. Il fut Lauréat du Prix Nobel de physique en 1937 conjointement avec Georges Thomson.

DE BROGLIE, Prince Louis Victor

Physicien français, 1892 / 1987. Il fut professeur de physique théorique à l'institut Henri Poincaré. Avec sa thèse de Doctorat "Recherches sur la Théorie des Quanta" (1924), il fonda la théorie des ondes de matière (ondes de De Broglie) et reçut le prix Nobel de physique en 1929. Il travailla essentiellement aux développements de la théorie quantique des particules élémentaires et proposa une nouvelle méthode pour le traitement des équations d'ondes de spin élevé, appelée la méthode des fusions.

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 941 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

DEBYE, Petrus Josephus Wilhelmus

Physicien hollandais (1884 / 1966). Il était appelé le “Maître de la Molécule”. En 1911 il fut nommé professeur à l'université de Zurich comme successeur de A. Einstein, puis successivement professeur à Utrecht (1912-1914), Göttingen (1914-1920), Zurich (1920-1927), Leipzig (1927-1935), Berlin (1935-1939). En 1940 il émigra aux Etats-Unis et en 1948 devint professeur de chimie à l'université Cornell (Ithaca). Debye était réputé à la fois comme théoricien et expérimentateur. Il formula la loi en T^3 pour la décroissance de la chaleur spécifique des solides à basse température. Il développa en 1917 la méthode de Debye-Scherrer (indépendamment de A. W. Hull) et, en collaboration avec E. Hückel, formula la théorie de la dissociation et de la conductivité des électrolytes forts. Indépendamment de F. W. Glaugue, et presque en même temps, Debye montra la possibilité d'atteindre de très basses températures par la diamagnétisation adiabatique de substances paramagnétiques. Il développa également le concept de moment dipolaire pour les molécules. Ces recherches ainsi que les résultats obtenus sur la diffraction des rayons X et de faisceaux d'électrons par des gaz et des liquides, lui permirent d'établir la structure moléculaire de nombreux composés. Il fut lauréat du prix Nobel de chimie en 1936.

DIRAC, Paul Adrien Maurice

Physicien anglais (1902/1984). Il étudia à Bristol Cambridge et fut nommé professeur de mathématiques en 1932 à Cambridge. Dirac est l'un de fondateurs de la mécanique quantique. L'équivalent mathématique qu'il créa consiste essentiellement

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 942 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

en une algèbre non commutative et un formalisme matriciel. Il formula une nouvelle version de la mécanique quantique relativiste en tenant compte du spin (Equation de Dirac) ce qui lui permit de prévoir l'existence des antiparticules, deux ans avant la découverte expérimentale par Anderson du positron. Il est également auteur de découvertes importantes en mécanique statistique (statistique de Fermi-Dirac), en électrodynamique quantique, en théorie des champs et en cosmologie. Ses principales idées sont présentées dans son livre intitulé "The principles of quantum mechanics". Il fut Lauréat du Prix Nobel de physique en 1933.

EHRENFEST, Paul

Physicien autrichien (1880 / 1933). Ehrenfest fut professeur à Leiden (Pays-Bas) à partir de 1912. Il contribua à la physique atomique avec son hypothèse des invariants adiabatiques et à la mécanique quantique par son théorème sur l'évolution des valeurs moyennes.

EINSTEIN, Albert

Physicien allemand (1879 / 1955). Il grandit à Munich, puis, à l'âge de 15 ans, déménagea en Suisse. Avec le titre "d'expert technique" au bureau des brevets de Berne, il publia en 1905 trois articles de grande importance. Dans le premier article "sur la théorie du mouvement brownien," il donna une preuve directe de la structure atomique de la matière, basée sur une image purement classique. Dans le deuxième "De l'électrodynamique des corps en mouvements", il exposa sa théorie de la relativité restreinte par son analyse profonde des concepts "espace" et "temps". De

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 943 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

ceci il conclut, quelques mois plus tard, à l'équivalence de la masse et de l'énergie, exprimée par sa fameuse relation $E = mc^2$. Dans son troisième article "Sur un point de vue heuristique concernant la production et la transformation de la lumière", Einstein étendit l'approche quantique de M. Planck (1900) et fit le deuxième pas décisif vers le développement de la théorie quantique, menant directement vers l'idée de la dualité des particules et des ondes. Le concept de quanta de lumière était jugé trop radical par la plupart des physiciens et fut reçu avec grand scepticisme. L'opinion des physiciens ne changea que lorsque Niels Bohr proposa sa théorie atomique (1913). Einstein, devint professeur de physique à l'université de Zurich en 1909 et à l'Université de Berlin en 1913. En 1914/1915 il développa sa théorie de la relativité générale, en partant de la proportionnalité stricte des masses gravitationnelles et d'inertie. Par la confirmation de sa théorie, à la suite de l'observation d'une éclipse solaire, Einstein devint bien connu du grand public. Ses opposants scientifiques et politiques tentèrent une campagne de dénigrement de sa personne et de sa théorie de la relativité et de ce fait, en 1921 le Comité Nobel jugea plus opportun de lui attribuer le prix Nobel de physique pour ses contributions à la théorie quantique et non pour sa théorie de la relativité. Au début de 1921, Einstein essaya de formuler sans succès l'unification de la gravitation et de l'électrodynamique.

Si Einstein est respecté et écouté, il n'en est pas moins, qu'à la fin de sa vie, il fut en butte avec la jeune génération de physiciens comme Heisenberg, Pauli et surtout Bohr. En effet, Einstein a posé les fondements de la nouvelle théorie quantique, qu'il n'accepta pas. Cette théorie interdit toute représentation réelle des objets physiques élémentaires comme les électrons, les protons, etc.. Ils ne peuvent être décrits qu'en

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 944 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

termes de probabilité : probabilité qu'ils suivent une certaine trajectoire, qu'ils aient une certaine position, une certaine vitesse. Or Einstein n'adhère pas à cette vision probabiliste de la réalité. Pour lui, "Dieu ne joue pas aux dés". Il refuse que le résultat d'une expérience ne puisse être unique et prédit avec certitude. Pour lui, la mécanique quantique est sinon inexacte, du moins incomplète. Einstein se révèle en cela le dernier des physiciens classiques.

FERMI, Enrico

Physicien italien, (1901 / 1954). Fermi fut professeur à Florence et Rome puis rejoignit l'université Columbia à New York en 1939. IL y resta jusqu'en 1946, puis vint à Chicago. Fermi s'occupa principalement de mécanique quantique. Il découvrit la transmutation de noyaux par bombardement avec des neutrons, et ainsi, dès 1934, fut capable de produire beaucoup de substances radioactives nouvelles qu'il pensait être des transuraniens. Il formula en 1935 la statistique qui porte son nom (statistique de Fermi) et fut lauréat du Prix Nobel de Physique en 1938. Durant la seconde guerre mondiale, Fermi fut profondément engagé dans le projet de l'utilisation militaire de l'énergie atomique. Sous sa direction, la première réaction en chaîne fut réalisée près du réacteur nucléaire de Chicago le 2.12.1942. Le Prix Enrico Fermi fut créé aux Etats- Unis en sa mémoire.

FRANCK, James

Physicien allemand, (1882 / 1964). Il fut à partir de 1920, professeur à Göttingen puis quitta l'Allemagne en 1933. A partir de 1935 il fut professeur de physique à

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 945 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

l'université Johns Hopkins de Baltimore et de 1938 à 1947, professeur de chimie physique à Chicago. Avec Hertz, à l'institut de physique de Berlin, Franck étudia le transfert d'énergie lors de collisions d'électrons avec des atomes de gaz. Leurs résultats supportaient l'hypothèse des quanta de Planck ainsi que la théorie des raies spectrales formulée par Bohr en 1913. Pour ce travail Frank et Hertz reçurent le prix Nobel de physique en 1925. En étendant ces études, Franck mesura pour la première fois l'énergie de dissociation de composés chimiques par des moyens optiques et détermina la durée de vie d'états métastables d'atomes. Par ailleurs, il développa la loi de distribution des intensités atomiques, connue actuellement comme le principe de Franck-Condon. Aux Etats-Unis il se consacra principalement à l'étude de processus photochimiques dans les plantes. Durant la seconde guerre mondiale, Franck travailla à un projet d'utilisation de l'énergie nucléaire. En 1945 il prévint des conséquences politiques et économiques de l'utilisation des bombes atomiques dans une pétition bien connue sous le nom de rapport Franck.

GAUSS, Carl Friedrich,

Mathématicien, astronome et physicien allemand, (1777 / 1855). Il étudia à Göttingen et obtint son doctorat en 1799 à Helmstedt. A partir de 1807 Gauss fut directeur de l'observatoire de Göttingen et professeur à l'Université de Göttingen. Il débuta ses activités scientifiques en 1791 avec ses recherches sur la moyenne harmonique et la distribution des nombres premiers et en 1792 sur les fondements de la géométrie. En 1794, Gauss inventa la méthode des moindres carrés et en 1795, il travailla sur la théorie des nombres. Dans sa thèse de doctorat, Gauss

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 946 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

fournit la démonstration du théorème fondamental de l'algèbre. A partir de 1801, Gauss s'intéressa à l'astronomie, les résultats de ses études concernant le calcul de l'orbite de Cérès (1801), les perturbations séculaires (1809 et 1818) et l'attraction de l'ellipsoïde universel (1813).

Dans ses dernières années, Gauss prit plaisir à certains problèmes physiques. Ses contributions les plus importantes sont l'invention d'un télégraphe électrique, réalisé en 1833/34 avec W.Weber, la découverte de la théorie potentielle en 1839/40 qui devint une nouvelle branche des mathématiques et la détermination du fonctionnement de systèmes optiques sous les faibles incidences (méthode d'approximation de Gauss). Il étudia enfin les distributions statistiques et énonça sa loi de Gauss ou loi de Laplace-Gauss ou loi normale : loi donnant la probabilité d'une variable aléatoire continue et dont la courbe représentative a la forme d'une cloche (courbe de Gauss).

GERLACH, Walter

Physicien allemand (1889/1979). Il fut professeur à Francfort, Tübingen et Munich. Il détermina la valeur de la constante de Stefan-Boltzmann avec précision en 1916. Avec Otto Stern il montra en 1912 la quantification du moment magnétique par la déflexion d'un jet d'atomes dans un champ magnétique inhomogène (expérience de Stern et Gerlach) Il a également travaillé sur l'analyse spectrale quantitative et sur la cohérence entre structure atomique et magnétisme. Gerlach s'intéresse également à l'histoire des sciences et tenta de faire ressortir la "Valeur humaniste de la physique".

GOUDSMIT, Samuel Abraham

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 947 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

Physicien américain, d'origine hollandaise (1902 /1978). De 1928 à 1941 Goudsmit a enseigné à l'université du Michigan à Ann Arbor, et fut membre du “Massachusetts Institute of Technology à Cambridge” de 1941 à 1946. Depuis 1948 il a travaillé au Brookhaven National Laboratory à Upton, N. Y., en particulier sur la structure des spectres atomiques. Pour interpréter de tels spectres, il avait introduit avec G. Uhlenbeck, le spin de l'électron dans la théorie quantique.

GREEN, George

Mathématicien anglais (1793 /1841). Après des études à Cambridge il suivit de près toutes les découvertes concernant l'électricité et lut les travaux de Laplace.. Son principal travail “Essay on the Application of Mathematical Analysis to Theories of Electricity and Magnetism” (1828) représente la première tentative d'une description mathématique des phénomènes électriques, et marque, en même temps que les travaux de Gauss, le début de la théorie potentielle. Il est surtout connu pour son théorème relatif au flux d'un vecteur à travers une surface fermée et pour sa fonction résolvante qui est d'une grande utilité en mécanique quantique (fonction de Green).

HEISENBERG, Werner Karl

Physicien allemand, (1901 / 1976). Elève de Somerfeld à Munich, puis assistant de Max Born à Göttingen, il soutint une thèse de doctorat en 1923 sur l'écoulement des fluides. De 1927 à 1941, il fut professeur de physique théorique à Leipzig et Berlin et entre 1941 et 1955, directeur du “Max Planck Institut” à Berlin, Göttingen et Munich. Dans sa recherche d'une description correcte des phénomènes atomiques.

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 948 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

Heisenberg formula son principe positiviste en juillet 1925 : il affirme que seules les grandeurs qui sont en principe observables doivent être prises en compte. Dans le même temps, Heisenberg posa les bases de la nouvelle mécanique matricielle, qu'il développa avec M. Born et P. Jordan en 1925. En étroite collaboration avec N. Bohr il put montrer la profondeur des bases physiques ou philosophiques du nouveau formalisme. Le principe d'incertitude de Heisenberg devint la base de l'interprétation de Copenhague de la théorie quantique. En 1932, Heisenberg reçut le Prix Nobel de Physique "pour la création de la mécanique quantique". Après la découverte du neutron par J. Chadwick en 1932, Heisenberg réalisa que cette nouvelle particule et le proton, devaient être considérés comme les constituants du noyau atomique. Sur cette base, il développa une théorie de la structure des noyaux et introduisit, en particulier, le concept d'isospin. A partir de 1953, Heisenberg travailla à une théorie d'unification de la matière souvent appelée équation de l'Univers. Le but de cette théorie étant de décrire toutes les particules existantes et leurs processus de conversion, par des lois de conservation qui expriment les propriétés de symétrie des lois de la nature.

HERMITE, Charles

Mathématicien français, (1822 / 1902). Ses résultats scientifiques portent principalement sur les fonctions elliptiques, les fonctions modulaires, la théorie des nombres et la théorie des invariants. Hermite coordina les idées de l'arithmétique gaussienne, les fonctions elliptiques d'Abel et de Jacobi et la théorie des invariants algébriques de Cayley et Sylvester et les développa davantage. Il ne devint profes-

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 949 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

seur à la Sorbonne qu'en 1870. Il établit des correspondances avec de nombreux et réputés contemporains et fut le professeur de H. Poincaré. Il est connu aussi pour le polynôme qui porte son nom.

HERTZ, Heinrich Rudolf

Physicien allemand, (1857/ 1894). Il fut professeur de physique à Karlsruhe et Bonn et confirma les prédictions de la théorie électromagnétique de Maxwell par ses expériences sur la propagation des ondes électromagnétiques (1887/88). Il découvrit les ondes de Hertz, qui sont à la base de la radioélectricité moderne. Il a prouvé l'influence des rayons ultraviolets sur les décharges électriques (1887) qui mena à la découverte de l'effet photoélectrique par W.Hallwachs. En 1892, il observa la transmission de rayons cathodiques à travers des feuilles minces de métal et confia à P. Lenard la tâche d'en expliquer leur nature. Hertz donna également une définition de la dureté.

HERTZ, Gustav

Physicien allemand, neveu de Heinrich Hertz, (1887/1975). Il fut professeur à Halle et Berlin, puis directeur du laboratoire de recherches de l'usine Siemens. A partir de 1911, avec J. Franck, il étudia l'excitation des atomes par des collisions avec des électrons ; ils partagèrent le prix Nobel de physique en 1925. En 1932, Hertz, développa la technique de séparation isotopique par diffusion gazeuse multiple. Il appliqua cette méthode à l'extraction de l'Uranium 235 à l'échelle industrielle en Union Soviétique. De 1945 à 1954, Hertz, avec d'anciens étudiants et collaborateurs,

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 950 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

construisit un institut à Suchumi près de la mer Noire ; en 1954 il dirigea un institut universitaire à Leipzig.

HILBERT, David

Physicien allemand (1862 / 1943). Il étudia à Königsberg et Heidelberg et devint professeur à Königsberg en 1886. A partir de 1895, il contribua à faire de Göttingen un centre mondial de recherches en mathématiques. Hilbert se révéla une autorité mondiale en mathématiques lors de son fameux discours de Paris en 1900, lors duquel il proposa 23 problèmes mathématiques qui intéressent les mathématiciens aujourd'hui encore. Hilbert contribua à de nombreux domaines qui ont profondément influencé la recherche mathématique moderne, par exemple la théorie des invariants, la théorie des groupes et la théorie des nombres. Ses travaux sur la théorie des équations intégrales et le calcul variationnel ont fortement influencé l'analyse moderne. Hilbert a également travaillé avec succès sur des problèmes de physique, notamment la théorie cinétique des gaz et la relativité. Il est connu aussi pour la création de l'espace qui porte son nom.

JEANS, James Hopwood

Mathématicien anglais, physicien et astronome, (1877 / 1946). Il fut professeur d'astronomie à la "Royal Society" de 1912 à 1946. Jeans accomplit une oeuvre de pionnier principalement en thermodynamique et en dynamique stellaire. Il s'intéressa à la théorie cinétique de la matière, au rayonnement du corps noir et à la cosmologie. Il fut un initiateur de la vulgarisation scientifique et publia de nombreux ouvrages

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 951 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

notamment en astronomie.

LAGRANGE, Joseph Louis

Mathématicien français, (1736 / 1813). De famille franco-italienne, il devint professeur à Turin en 1755. En 1766, il vint à Berlin en tant que directeur de la section de physique mathématique de l'Académie. En 1786, après la mort de Frédéric II, il alla à Paris où, professeur dans plusieurs universités, il encouragea fortement la réforme du système des mesures. Ses vastes travaux concernaient le calcul variationnel (1760) et ses applications à la dynamique et au problème à trois corps (1722). En 1788, Lagrange devint l'initiateur de la mécanique analytique perfectionnée ultérieurement par W.R Hamilton (1834). Il est connu pour la fonction qui porte son nom.

LAGUERRE, Edmond Nicolas

Mathématicien français, (1834 / 1886). Il fut l'un de fondateurs de la géométrie moderne. Il devint membre de l'Académie Française en 1885. En dehors des problèmes de géométrie (en particulier l'interprétation de la géométrie réelle et imaginaire), Laguerre fit progresser les théories des équations algébriques et des fractions continues. Il est connu aussi pour le polynôme qui porte son nom.

LANDAU, Lew Dawidowitsch

Physicien soviétique, (1908 / 1968) Il a été directeur de l'Institut de physique théorique de l'Académie soviétique des sciences. Il a apporté une contribution majeure à la physique du XX^e siècle, et c'est notamment sur ses théories que

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 952 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

repose en grande partie la physique de la matière condensée, il a construit les modèles théoriques de la supraconductivité, de la suprafluidité de l'hélium en fondant la théorie des transitions de phase de deuxième ordre. Il a étudié diverses propriétés magnétiques de la matière, notamment le diamagnétisme des électrons dans un métal en mettant, indépendamment de L.Néel, l'hypothèse de l'antiferromagnétisme. Il a également contribué à l'étude de divers aspects de la physique des particules (théorie de la brisure de symétrie) ainsi que de l'astrophysique (évolution des étoiles). Les niveaux de Landau, le diamagnétisme de Landau, le spectre de Landau, la théorie de Landau-Ginzburg demeurent des outils fondamentaux de la physique. Professeur enthousiaste, il est l'auteur, avec son élève Evguenni Lifshitz, d'un cours de physique théorique, qui a servi de manuel à plusieurs générations d'étudiants dans le monde entier. Il fut lauréat du prix Nobel de physique 1962. Il fut un antistalinien et n'obtient jamais l'autorisation d'émigrer.

LARMOR, Sir Joseph

Physicien et mathématicien anglais, (1857 / 1942). A partir de 1903, il fut professeur de mathématiques à l'université de Cambridge. Il travailla sur des problèmes en physique théorique, particulièrement sur la théorie de l'électron et découvrit la "précession de Larmor". Il fit également des contributions importantes à la théorie de la relativité.

LAUE, Max Von

Physicien allemand (1879 / 1960). Il a été un étudiant de Max Planck et fut

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 953 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

professeur à Zurich, Francfort, Berlin et à partir de 1946, directeur de l'institut de chimie physique et d'électrochimie de Berlin-Dahlem. Il fut le premier directeur de l'Institut de physique théorique de Francfort (1914 à 1919). Son projet d'irradier des cristaux avec des rayons X avait été réalisé en 1912 par Walther Friedrich et Paul Knipping. L'explication des figures d'interférences observées lui valut l'attribution du prix Nobel de physique en 1914. Ce fut la preuve de la nature ondulatoire des rayons X ainsi que la structure en mailles des cristaux. Il travailla également sur la relativité, la supraconductivité, l'émission thermoionique et le principe des tubes amplificateurs. Après 1933, il a milité pour contrer l'influence du national socialisme sur la science en Allemagne.

LEGENDRE, Adrien Marie

Mathématicien français (1752/1833). Il participa grandement à la fondation et au développement de la théorie des nombres et à la géodésie. Il fit également d'importantes contributions aux intégrales elliptiques, aux fondements et méthodes de la géométrie euclidienne, au calcul variationnel et à l'astronomie théorique. Il appliqua également les méthodes de moindres carrés et calcula de vastes tables. Il est connu aussi pour le polynôme qui porte son nom. A partir de 1775, Legendre fut professeur à diverses universités parisiennes et publia de remarquables et influents manuels et ouvrages pédagogiques.

LENARD, philipp

Physicien allemand (1862 / 1947). Elève de H.Hertz, il fut professeur à Breslau,

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 954 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

Aix la Chapelle, Kiel et Heidelberg. Lenard fut le premier à considérer les rayons cathodiques comme des électrons libres indépendamment de leur mode de production et fit une contribution majeure à l'explication de leur nature. Par ailleurs, il démontra que la vitesse des électrons arrachés par effet photoélectrique est indépendante de l'intensité de la lumière mais dépend de sa fréquence. Il créa aussi la base expérimentale pour la loi fondamentale de l'effet photoélectrique formulée par Einstein. D'égale importance fut sa vérification du fait que le centre actif d'un atome est concentré dans un noyau de très petite dimension comparée à la taille de l'atome. Ceci fut prouvé plus tard par les expériences de E. Rutherford. Il introduisit également "l'électron-volt" (eV) comme unité de mesure. Lenard était un expérimentateur renommé ainsi que ses contemporains J.J.Thomson et E. Rutherford, mais était sceptique par rapport à la théorie de la relativité restreinte d'Einstein. Il fut lauréat du prix Nobel de physique en 1905.

LYMAN, Théodore

Physicien américain (1874 / 1954). De 1910 à 1947, Lyman fut directeur du "Jefferson Physical Laboratory" de Harvard. Il a été un pionnier dans le domaine de la spectroscopie UV et, il découvrit en 1906 une série spectrale de l'atome d'hydrogène qui porte son nom.

MILLIKAN, Robert Andrews

Physicien américain (1868/1953). Il étudia aux Etats Unis et en Allemagne et fut professeur à l'université de Chicago et à l'Institut de technologie de Californie,

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 955 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

à Pasadena. Il fut un excellent expérimentateur et est connu surtout pour sa détermination de la charge de l'électron et pour ses travaux sur l'effet photoélectrique. Il fut lauréat du prix Nobel de physique en 1923.

PASCHEN, Friedrich

Physicien allemand (1865 / 1947). Il fut professeur à Tübingen, Bonn et à Berlin. Il a construit des galvanomètres très sensibles et des électromètres à quadrants et a travaillé avec C. Runge, principalement sur des expériences de spectroscopie. En 1889, il a découvert une Loi (loi de Paschen) qui stipule que la tension de décharge dans un gaz ne dépend que de la distance des électrodes et de la pression du gaz. En 1908 il a étendu la formule de Balmer aux raies IR du spectre de l'hydrogène (série de Paschen). En 1912 /1913, il découvrit avec Back, l'effet Paschen-Back qui consiste en un dédoublement des raies dans un champ magnétique intense.

PAULI, Wolfgang

Physicien Austro-Germano-Suisse, (1900/1958). Fils d'un professeur de chimie de l'université de Vienne, il choisit la voie de la physique théorique qu'il a étudié à Munich auprès d'Arnold Sommerfeld. En 1921, dans sa thèse de Doctorat, il démontra que la théorie quantique en ce temps était encore incorrecte. Dans ses discussions avec W. Heisenberg, M. Born et N. Bohr, Pauli contribua substantiellement au développement de la mécanique matricielle. Au début de 1926, il appliqua avec succès cette théorie à l'atome d'hydrogène. En 1924, il découvrit le principe d'exclusion (principe de Pauli), qui lui valut l'attribution du prix Nobel de Physique en 1945. La

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 956 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

même année il avait postulé l'existence d'un spin nucléaire pour expliquer la structure hyperfine. En 1927 il établit les équations de champ pour l'électron, qui comportaient le spin dans une forme non relativiste. En 1930, il avança l'hypothèse du neutrino. De 1940 à 1945, en travaillant aux Etats-Unis, il s'occupa principalement de la théorie des mésons. En 1946 il se consacra à la théorie quantique des champs et à la physique des particules. Pauli a beaucoup influencé la physique de son temps. Avec son analyse profonde des hypothèses épistémologiques de la science et sa critique de l'obscurantisme, il était considéré comme la "conscience de la physique".

PLANCK, Max

Physicien allemand, (1858 / 1947). Il étudia à l'université de Munich où il soutint à l'âge de 21 ans une thèse de doctorat sur le second principe de la thermodynamique. En 1885, il fut nommé professeur à Kiel et se consacra à l'étude du rayonnement thermique du corps noir. En utilisant la loi empirique de Wien et en abandonnant le concept classique de continuité de l'énergie au profit d'une hypothèse de discrétisation, il parvint à rendre compte exactement de la distribution spectrale de l'énergie rayonnée par un corps noir. Il établit ainsi par une interpolation ingénieuse sa loi de rayonnement qu'il présenta le 14 Décembre 1900 devant l'Académie des sciences de Berlin. Cette date est considérée depuis, comme la date de naissance de la physique quantique et le quantum d'action h qu'il découvrit est une nouvelle constante de la nature qu'on appelle la constante de Planck. Tout en restant sceptique quant à l'hypothèse des quanta de lumière d'Einstein, il reconnut indirectement l'importance de sa théorie de la relativité restreinte établie en 1905. c'est grâce à lui

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 957 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

que cette théorie fut acceptée rapidement en Allemagne. En 1918, il se vit décerner le Prix Nobel de physique. Grâce à ses travaux scientifiques, son caractère droit et sans compromis, il occupa une position unique parmi les physiciens allemands et fut secrétaire perpétuel de l'Académie des sciences de Berlin de 1912 à 1943. Il présida aussi l'institut Kaiser Wilhelm pendant sept ans qui fut renommé plus tard Institut Max Planck et incarna la science allemande durant l'une des périodes les plus sombres de son histoire.

RABI, Isaac Isidor

Physicien américain, (1898 / 1988). A partir de 1929, Rabi fut professeur à l'université Colombia à New York. En modifiant convenablement la méthode des faisceaux moléculaires imaginée par O. Stern, Rabi put détecter le spin nucléaire du sodium en 1933/34 et déterminer les moments magnétiques nucléaires et la structure hyperfine des raies spectrales. Rabi a développé la méthode des résonances pour déterminer les propriétés électriques et magnétiques des noyaux atomiques qui furent à l'origine du développement des horloges atomiques du maser et du laser. En 1944, il se vit décerner le prix Nobel de Physique. Durant la deuxième guerre mondiale, Rabi participa au développement du Radar à micro-ondes. Représentant les états-unis à l'Unesco (1955/1964), il eut un rôle déterminant dans la création d'un laboratoire international pour la physique des hautes énergies qui fut à l'origine du CERN.

RAYLEIGH, John Williams

Physicien anglais, (1842 / 1919). Il fut professeur au "Cavendish Laboratory" à

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 958 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

Cambridge de 1879 à 1884 et fit partie de la “Royal Society” à Londres de 1884 à 1905. Rayleigh, étudia l'intensité du son en mesurant la pression sonore exercée sur une plaque mobile (disque de Rayleigh). Il montra en 1871 que la couleur bleue du ciel était due à la diffusion de la lumière par les molécules d'air (diffusion de Rayleigh) et postula une loi du rayonnement du corps noir en 1900, connue sous le nom de loi de Rayleigh-Jeans et représentant un cas particulier de la loi de Planck. Des anomalies observées lors de la mesure de la vitesse de propagation du son dans l'azote l'amènèrent avec W. Ramsay à la découverte de l'argon en 1894, qui fut récompensée par l'attribution du prix Nobel de Physique et de Chimie en 1904. Il procéda également à Cambridge à l'élaboration des trois unités électriques : l'ampère, l'ohm et le volt.

RYDBERG, Jeanne (John) Robert

Physicien suédois, (1854 / 1919). Il étudia à Lund et y enseigna durant toute sa carrière scientifique. Après des travaux mathématiques couronnés par un doctorat consacré à la construction des coniques, il s'intéressa à la physique. Ses recherches étaient orientées par l'idée que les propriétés de la classification périodique des éléments devaient avoir leur répondant dans les propriétés des spectres d'émission. Il analysa la structure de ces derniers, introduisit la notion de nombre d'onde et trouva une formule empirique qui traduisait convenablement la composition des séries de raies. La constante figurant dans cette formule est appelée “constante de Rydberg” et est l'une des constantes physiques les plus précises. Il proposa aussi de caractériser chaque élément par un numéro atomique plutôt que par un poids atomique afin

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 959 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

de mieux rendre compte de certaines propriétés. Moseley confirma en 1913 la justesse de ce choix. Récemment on a attribué le nom d'états de Rydberg aux états caractérisés par un nombre quantique principal élevé.

RUTHERFORD, Ernest

Physicien Néo-zélandais (1871/1937). Il fut professeur à l'université McGill de Montréal et à l'université de Manchester en 1917. En 1919, il occupa après J.J Thomson, la chaire Cavendish de l'université de Cambridge. Il fit un travail d'une importance capitale en radioactivité et en physique nucléaire. Son grand apport à la physique quantique fut sans doute son expérience de diffusion des particules (1911) qui montra que l'atome est un édifice vide formé par un noyau central et des électrons gravitant autour. Son modèle planétaire qui a été complété par les hypothèses de Bohr fut un véritable succès et démontre une intuition physique profonde. Il fut lauréat du prix Nobel de chimie en 1908.

SCHRÖDINGER, Erwin

Physicien autrichien (1887 / 1961). Il étudia la physique théorique à l'université de Vienne où il obtint un doctorat en 1910 et un poste d'assistant en 1911. Après de courts séjours à Stuttgart et à Breslan, il devint professeur à Zurich et occupa la chaire de physique qui avait été celle d'Einstein. Il travailla sur la thermodynamique statistique, la théorie de la relativité générale et la théorie de la vision des couleurs. Passionné par les travaux de L.De Broglie sur la dualité

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 960 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

onde-corpuscule et sur les travaux de A.Einstein sur la statistique de Bose, il créa la mécanique ondulatoire. En 1925, il établit l'équation de Klein-Gordan et en 1926, il établit l'équation qui porte son nom "Equation de Schrödinger" et qui décrit dans l'approximation non relativiste, les états quantiques d'une particule. La même année, il démontre l'équivalence mathématique de la mécanique des ondes et de la mécanique matricielle introduite par M.Born, W.Heisenberg et P.Jordan dans le cadre de "l'interprétation de Copenhague". En 1927, il s'installa à Berlin comme successeur de M.Planck. En 1933 en tant que libéral convaincu, il quitta Berlin à cause de l'instauration du régime national socialiste pour s'installer à Oxford. La même année, il reçut avec P.A.M Dirac le Prix Nobel de physique. En 1936, la nostalgie lui fit accepter un poste à Graz en Autriche mais les nazis le destituèrent de ce poste. Il s'installa alors à Dublin comme directeur de "l'institute for advanced studies" qui fut crée pour lui et où il y passa dix sept ans. Durant cette dernière période, il publia beaucoup de travaux sur la mécanique quantique et sur la théorie du champ, et influencé par la pensée indienne, il poursuivit une réflexion sur les rapports de la physique et de la philosophie.

SOMMERFELD, Arnold

Physicien allemand (1868/1951). Il fut pendant de nombreuses années professeur de physique à l'université de Munich. Il apporta d'importantes contributions au développement de la physique quantique en améliorant la théorie de Bohr par l'introduction des orbites elliptiques et la prise en considération de la relativité restreinte. C'est dans sa théorie relativiste de l'atome d'hydrogène que fut introduite

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 961 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

pour la première fois en physique la constante de structure fine.

STARK, Johannes

Physicien allemand (1874 / 1957) Il a été successivement professeur à Hanovre, à Aix-la-Chapelle, à Greifswald et à Würzburg. Il étudia d'abord la conductivité électrique des gaz. Il fut l'un des premiers à défendre l'hypothèse des quanta de Planck et la théorie de la relativité d'Einstein, mais il changea par la suite sa position et les attaqua violemment. En 1905, il découvrit l'effet Doppler optique et en 1913 l'effet qui porte son nom "effet Stark" qui est relatif au dédoublement des raies du spectre d'émission d'un atome placé dans un champ électrique. Il fut lauréat du Prix Nobel de physique en 1919.

STERN, Otto

Physicien allemand (1888 / 1969). Il fut professeur à Rostock en 1921, et à Hambourg en 1923, où il dirigea l'Institut de Chimie Physique. A partir de 1915, il mit au point la méthode des jets moléculaires qui lui permit de mesurer la vitesse des molécules et de vérifier la théorie cinétique des gaz. Il utilisa également cette méthode pour déterminer certaines propriétés atomiques et nucléaires de milieux gazeux. En 1922, il eut un succès particulier avec Gerlach pour la découverte de la quantification du moment magnétique et la mise en évidence du spin (expérience de Stern et Gerlach). En 1929, il réalisa une expérience de diffraction avec des jets moléculaires d'hydrogène et d'hélium et détermina en 1933 le moment magnétique du proton. Il émigra la même année en Amérique pour travailler au "Carnegie Institute

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 962 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

of Technology” de Pittsburg. Il fut lauréat du prix Nobel de physique en 1943.

UHLENBECK, Georg Eugen

Physicien américain d'origine néerlandaise (1900 / 1988). Il a été professeur à Utrecht et à Ann Arbor. En 1925, il avait introduit avec S.A.Goudsmit, l'hypothèse du “spin” qui décrit la rotation intrinsèque de l'électron autour de lui même. En 1964, ils reçurent ensemble la médaille Max Planck de la société allemande de physique.

WIEN, Wilhem

Physicien allemand (1864/1928). Il fut professeur à Aix la Chapelle, Gieen, Würzburg et Munich. En 1893, alors qu'il était encore assistant de H.V. Helmholtz, il découvrit sa loi de déplacement qui porte son nom “loi de Wien”et qui est relative à la répartition spectrale de l'énergie thermique émise par un corps noir. La poursuite de ces travaux par M. Planck conduisit à la naissance de la physique quantique. En 1896, il effectua des travaux sur les faisceaux de particules chargées négativement. A partir de 1906,comme éditeur des “Annalen der physik” il influença beaucoup le développement de la physique allemande. Il fut lauréat du prix Nobel en 1911.

WIGNER, Paul

Physicien allemand (1902/ 1995) il étudia à Berlin et y soutint en 1925, un doctorat de chimie appliquée. Il émigra en Amérique en 1930 et devint plus tard professeur à l'université de Princeton. Il a tout au long de sa carrière scientifique fait d'importantes contributions dans des domaines aussi variés que la physique atomique, la chimie

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 963 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

théorique, la physique du solide et la physique nucléaire. Sa contribution la plus remarquable fut sa profonde analyse du rôle des principes de symétrie en mécanique quantique (théorème de Wigner Eckart).

YUKAWA, Hideki

Physicien japonais (1907/ 1981) il étudia à l'université de Kyoto et y fut professeur en 1939. Après la seconde guerre mondiale il fut nommé membre de "l'Institute for Advanced Studies" à Princeton puis professeur à l'Université de Colombia aux Etats Unis. Il revint au Japon en 1955 et occupa le poste de directeur du "Research Institute for Fundamental physics" qui venait d'être créé à Kyoto. Il travailla surtout dans le domaine de la physique nucléaire et de la théorie des champs et est connu par le potentiel qui porte son nom "Potentiel de Yukawa". Il fut lauréat du Prix Nobel de physique en 1949 pour ses travaux sur les mésons.

ZEEMAN, Pieter

Physicien Neerlandais (1865 / 1943). Il fut professeur à l'université d'Amsterdam. Il s'intéressa à l'émission de la lumière par les atomes excités et à la propagation des signaux lumineux dans les milieux en mouvement. En 1895, il découvrit et étudia l'effet qui porte son nom "Effet Zeeman" et qui consiste en la décomposition des raies d'émission des atomes par un champ magnétique assez intense, effet observé d'ailleurs dix ans plutôt par Charles Jean Baptiste Fievez. En 1902, il fût lauréat du Prix Nobel de physique avec H.A.Lorentz qui donna une explication de l'effet Zeeman sur la base de l'absorption ou de la restitution de l'énergie par les électrons.



[Page de titre](#)

[Sommaire](#)



Page 964 de 978

[Retour](#)

[Plein écran](#)

[Fermer](#)

[Quitter](#)

Bibliographie

1. C. Cohen-Tannoudji , B.Diu et F.Laloë
Mécanique quantique - Tomes 1 et 2
Edition Heramann (1973)
2. A. Messiah
Mécanique quantique - Tomes 1 et 2
Editions Dunod (1965)
3. L. Landau et E. Lifchitz
Mécanique quantique
Editions Mir (1967)
4. J. L. Basdevant
Mécanique quantique
Editions Ellipses (1986)
5. J. M. Levy-Leblond et F. Balibar
Quantique, Rudiments

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 965 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

InterEditions (1984)

6. W. Greiner

Mécanique quantique, une introduction

Editions Springer-Verlag (1999)

7. Ch. Ngô et H. Ngô

Physique quantique, Introduction

Editions Masson (1991)

8. E. Elbaz

Quantique

Editions Ellipses (1995)

9. E. H. Wichmann

Physique quantique : cours de physique de Berkeley - Vol 4

Editions Armand Colin (1974)

10. R. P. Feynman

Mécanique Quantique - Cours de physique de Feynman, Tome III

Interéditions (1979)

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 966 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

11. C. Janot et M. Gerl
Caractère quantique - Matière et Rayonnement
Editions Hachette (1970)
12. J. P. Barrat
Introduction à la physique quantique
Edition Dunod (1985)
13. Y. Ayaut et E. Belorizky
Cours de mécanique quantique
Editions Dunod (1969)
14. G. Zepp
Mécanique quantique - Exercices avec solutions
Editions Vuibert (1975)
15. M. Alonso et E. J. Finn
Quantum and statistical mechanics
Editions Addition-Wesley (1982)
16. A. P. Legrand et A. Heslot
Pratique de la physique et de la chimie quantique
Editions Ellipses (1997)
17. O. Granier et J. Leon
De l'atome à l'univers
Editions Ellipses (1999)
18. J. L. Basdevant

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 967 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

Problèmes de mécanique quantique

Editions Ellipses (1996)

19. A. Abragam

Les principes du magnétisme nucléaire

Editions PUF (1961)

20. C. Cohen - Tannoudji , J. Dupont-Roc, G. Grynberg

Photons et atomes

InterEdition / Editions du CNRS (1987))

21. R. L. Sproull

Eléments de physique moderne

Editions Masson/ Editions Soffradel (1967))



Constantes usuelles de la physique quantique

Constante de Planck	h $\hbar = \frac{h}{2\pi}$	$6.6260755 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$ $1.05457266 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$
Vitesse de la lumière	c	$2.997924562 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1}$
Charge de l'électron	q	$-1.60217733 \cdot 10^{-19} \text{ C}$
Constante gravitationnelle	G	$6.6725 \cdot 10^{-11} \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1} \text{ s}^{-2}$
Constante de structure fine	$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$	$7.29735 \cdot 10^{-3} \simeq \frac{1}{137}$
Nombre d'Avogadro	N_0	$6.0221367 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$
Constante de Boltzmann	k	$1.3806568 \cdot 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$
Constante des gaz parfaits	$R = N_0 k$	$8.314510 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$ $1.986 \text{ cal mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$
Masse de l'électron	m	$9.1093897 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$ $5.485930 \cdot 10^{-4} \text{ uma}$
Masse du proton	M_p	$1.6726231 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$ 1.00727661 uma
Masse du neutron	M_n	$1.6749286 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$ 1.0086652 uma

[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 968 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 969 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

Longueur d'onde de Compton de l'électron	$\lambda_e = \frac{h}{m_e c}$ $\lambda_e = \frac{\hbar}{m_e c}$	$2.42631 \cdot 10^{-12} \text{ m}$ $3.86159 \cdot 10^{-13} \text{ m}$
Rayon de Bohr	$a_0 = \alpha^{-1} \frac{\hbar}{m_e c}$ $= \alpha^{-1} \lambda_e$	$5.29177249 \cdot 10^{-11} \text{ m}$
Rayon classique de l'électron	$r_e = \frac{e^2}{m_e c^2}$ $= \alpha \lambda_e$	$2.81794092 \cdot 10^{-15} \text{ m}$
Rayon nucléaire	$r_n = A r_0^{1/3}$	$(r_0 = 1.2 \cdot 10^{-15} \text{ m})$
Potentiel d'ionisation de l'hydrogène (sans effet d'entraînement du noyau)	$R_\infty = \frac{1}{2} \alpha^2 m_e c^2$	13.60583 eV
Constante de Rydberg pour l'hydrogène	R_H	$109677.576 \text{ cm}^{-1}$
Magnéton nucléaire	$\mu_n = -\frac{q \hbar}{2 M_p}$	$5.0507866 \cdot 10^{-27} \text{ J T}^{-1}$
Facteur de Landé du spin de l'électron	g_e	2×1.00116



Facteurs de conversion

Longueur	$1 \text{ Angström (Å)} = 10^{-10} \text{ m}$ $1 \text{ Fermi (F)} = 10^{-15} \text{ m}$
Masse	$1 \text{ unité de masse atomique (uma)} =$ $1.66053 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$
Energie	$1 \text{ électron-volt (eV)} =$ $1.602192 \cdot 10^{-19} \text{ Joule (J)}$
Fréquence associée à 1eV	$2.417966 \cdot 10^{14} \text{ s}^{-1}$
Longueur d'onde associée à 1eV	$1.239854 \cdot 10^{-4} \text{ cm}$
Nombre d'onde associé à 1eV	$8.06546 \cdot 10^3 \text{ cm}^{-1}$
Température associée à 1eV	11604.9 K
Energie associée à la température ambiante ($T \simeq 300 \text{ K}$)	$\frac{1}{40} = 0.025 \text{ eV}$
Champ magnétique	$1 \text{ Tesla (T)} = 10^4 \text{ gauss (G)}$

Page de titre

Sommaire



Page 970 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter



Page de titre

Sommaire



Page 971 de 978

Retour

Plein écran

Fermer

Quitter

Index

Absorption, 908

Action, 51, 52

Adjoint, 254

Algèbre, 226

Ammoniac, 213

Amplification, 918

Amplitude

de probabilité, 91, 94, 104, 348

de transition, 901

Anharmonique, 610, 811, 838

Anharmonique, 912

Annihilation, 420, 445

Anticommutation, 648

Antilinéaire, 241

Antirésonnant, 887

Antirésonnant, 915

Antisymétrique, 157, 185, 689, 733

Approximation

de la barrière épaisse, 172

Approximation

dipolaire électrique, 609

Atome

d'hydrogène, 40

hydrogène, 574

hydrogène de, 47

stabilité de, 37

Balmer, 937

Bande d'énergie, 221

interdite, 221

permise, 224


[Page de titre](#)
[Sommaire](#)

[Page 972 de 978](#)
[Retour](#)
[Plein écran](#)
[Fermer](#)
[Quitter](#)

Barrière de potentiel, [169](#)

Base

continue, [233](#)

discrète, [230](#)

Bohr

atome de, [40](#)

rayon de, [42](#)

Bohr, [937](#)

Boltzmann, [937](#)

facteur de, [683](#)

Born, [94](#)

Born, [938](#)

Born-Oppenheimer, [605](#)

Bose

statistique de, [690](#)

Bose, [939](#)

Bosons, [690](#)

Bra, [240](#)

Bragg (diffraction de), [101](#)

Brillouin, [478](#)

Canonique, [569](#)

Carbone, [55](#), [682](#)

Catastrophe ultraviolette, [23](#)

Central (potentiel), [556](#)

Central (potentiel), [603](#)

Centre de masse, [567](#)

Centrifuge (potentiel), [562](#)

Champ é lectromagnétique (couplage),
[765](#)

Circulaire

orbite, [48](#)

permutation, [649](#)

Circulaire

permutation, [535](#)

Clebsch-Gordan, [747](#)

Collision, [87](#)

Commutateur, [244](#)

Compatibles (observables), [337](#)

Complet (ensemble), [272](#)

Composantes

cartésiennes, [513](#)

cylindriques, [65](#)

sphériques, [516](#)

Composition, [717](#), [740](#), [741](#)

Compton

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 973 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

effet, 85

longueur d'onde de, 90

Compton, 939

Conjugaison, 255

Conservatif (systèmes), 350

Conservation, 129

de l'énergie, 87

de la probabilité, 341

Constante

de structure fine, 46

du mouvement, 354

Continuum, 886, 897

Continuum, 203

Corps noir, 21, 60

Corrélation

fonction de, 922

temps de, 922

Couche

électronique, 588

sous- couche, 588

Coulombienne (interaction), 38, 42

Couplage, 365

spin-orbite, 766

Couplage

constante de, 700

Courant de probabilité, 342

Création, 420

opérateur de, 421

Cyclotron, 547

Darwin (terme de), 766

Darwin (terme de), 852

Davisson, 940

De Broglie, 78

longueur d'onde de, 97, 103

relation de, 97, 101

De Broglie, 940

Debye, 941

Delta (fonction de), 236

Densité

d'état, 898

de courant, 341

de probabilité, 104, 340

Deutérium, 682

Deutérium, 212

Diagonalisation, 367

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 974 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

Diamagnétique, [845](#), [847](#), [859](#)
Diffraction, [92](#), [100](#)
Diffusion, [86](#)
Dipôle-dipôle (interaction), [686](#), [849](#)
Dirac, [941](#)
Distribution, [689](#)
Dualité, [12](#), [78](#)
Durée de vie, [56](#), [129](#)
Dégénérescence, [49](#)
 d'une valeur, [259](#)
Dégénérescence
 accidentelle, [564](#)
 degré de, [193](#)
 essentielle, [564](#)
 levée de, [49](#)
 sous-espace, [259](#)
Dégénérescence
 levée de, [194](#)
Délocalisation, [111](#)
Déphasage, [655](#)
Déplacement chimique, [685](#)
Déterminant, [261](#)
Déterminisme, [11](#), [318](#)

Ecart quadratique moyen, [333](#), [502](#)
Echange, [25](#), [733](#)
Eckart (théorème de Wigner-), [782](#)
Effet
 d'entraî nement du noyau, [575](#)
 Tunnel, [170](#), [196](#)
Effet
 d'entraînement du noyau, [71](#)
 Stark, [620](#)
Ehrenfest, [942](#)
Einstein, [34](#), [690](#)
Einstein, [942](#)
Elastique, [167](#)
Equation
 de Maxwell, [134](#), [160](#)
 de Schrödinger, [104](#), [153](#), [327](#)
Equations
 de Newton, [326](#)
Espace
 complet, [230](#), [265](#)
 de Hilbert, [227](#)
 vectoriel, [227](#), [240](#)
Etat

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 975 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

du continuum, 159

lié, 159

Evanescence (onde), 168, 171

Evolution

de l'état d'un système, 327

Evolution

des valeurs moyennes, 345

Opérateur d', 357

Fermi

règle d'or de, 899

Fermi, 944

Fermi-Dirac (statistique de), 689

Fermions, 689

Flux

incident, 166

transmis, 203

Flux

réfléchi, 204

Fonction

d'onde, 94, 103, 316

de carré sommable, 112, 228

escalier, 312

paire, impaire, 157

propre, 155, 266, 518

périodique, 81

Fourier

transformée de, 112, 127, 148

Franck, 944

Gauss, 945

Gerlach, 946

Gerlach (expérience de Stern et), 631

Goudsmith, 946

Green, 947

Hamilton-Jacobi, 326

Hamiltonien, 327

Hamiltonien, 155

Heaviside (fonction de), 312

Heisenberg

principe de, 124

représentation de, 361

Heisenberg, 947

Hermite, 431

Hermite, 948

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 976 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

Hertz G., 949

Hertz H. R., 949

Hilbert, 950

Hydrogénoïde (atome), 47

Hydrogène, 574

Hydrogène, 39

Impulsion, 107, 328

Interférence, 81

Intrinsèque, 481

Invariance, 252

Ionisation, 46

Jeans, 950

Kronecker, 229

Lagrange, 325

Lagrange, 951

Laguerre, 951

Landau, 951

Landé (facteur de), 969

Laplacien, 81

Largeur naturelle, 130

Larmor, 952

Larmor (précession de, pulsation), 655

Laue, 952

Legendre, 953

Lenard, 953

Longueur de Planck, 58

Lorentzienne, 680

Lyman, 775, 954

Magnéton de Bohr, 847

Marche de potentiel, 162

Masse réduite, 566

Matrice

adjointe, 254

de Pauli, 646

unité, 648

Matrice

densité, 294

Mesure, 317

Microscope

de Heisenberg, 144

Microscopie

à effet tunnel, 199

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 977 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

Millikan, 954

Moment

angulaire, 652

cinétique, 480

magnétique, 633

Moment

dipolaire, 609

Multiplet, 49

Mécanique

classique, 96

Mécanique

relativiste, 87

Neutron, 639

Niveaux

d'énergie, 183

système à deux, 365

Nombre quantique

principal , 585

nombre quantique

azimutal, 519

magnétique , 519

Observable, 265

Orbitales

atomiques, 592

hybrides, 596

Paquet d'ondes, 109

Parseval-Plancherel (formule de),
150

Paschen, 955

Pauli, 955

Perturbations

adiabatiques , 901

constantes, 894

dépendant du temps, 870

sinusoïdales, 882

Perturbations

stationnaires, 794

Planck

constante de, 27

loi de , 27

Planck, 956

Pression de radiation, 142

Produit

scalaire, 228

[Page de titre](#)[Sommaire](#)[Page 978 de 978](#)[Retour](#)[Plein écran](#)[Fermer](#)[Quitter](#)

tensoriel d'opérateurs, 283

tensoriel d'états, 280

Rabi, 957

Rapport gyromagnétique, 634

Rayleigh, 957

Rayleigh et Jeans, 23

Relation de fermeture, 232

Rutherford, 959

Rydberg

constante de, 969

Rydberg, 958

Résonance

magnétique, 631

Schrödinger, 959

Singulet, 733

Sommerfeld, 960

Spectre

continu, discret, 159

Spin, 630

Stark, 961

Stern, 961

Structure

fine, 686, 772

hyperfine, 823

Trace, 252

Triplet, 733

Uhlenbeck, 962

Valeur moyenne, 331

Valeur propre, 259

Variationnelle

méthode, 827

Vitesse de groupe, 118

Vitesse de phase, 117

Wien, 962

Wigner, 962

Young, 81

Yukawa, 963

potentiel de , 868

Zeeman, 963