Exercices

Exercice 1 : Bases orthonormales

1. Soit $\mathcal{H}$ un espace de Hilbert avec une base orthonormale $\{|e_n\rangle\}$. Soit $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ un vecteur dont la décomposition par rapport à cette base est

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n \, |e_n\rangle \,, \qquad c_n \in \mathbb{C}\,.$$

Montrez que les coefficients c_n sont donnés par

$$c_n = \langle e_n|\psi\rangle\,.$$

2. Montrez que $(|\alpha\rangle\langle\beta|)^\dagger = |\beta\rangle\langle\alpha|$ pour tout $|\alpha\rangle, |\beta\rangle \in \mathcal{H}$. Soient maintenant $\{|e_n\rangle\}$ et $\{|e'_n\rangle\}$ deux bases orthonormales pour un espace de Hilbert $\mathcal{H}$. Montrez que l'opérateur $\mathbf{U} = \sum_n |e'_n\rangle\langle e_n|$ est unitaire et vérifie $\mathbf{U}|e_n\rangle = |e'_n\rangle \quad \forall\, n$.

Exercice 2 : Commutateurs

Soient $\mathbf{A}$, $\mathbf{B}$ et $\mathbf{C}$ des opérateurs sur l'espace de Hilbert $\mathcal{H}$.

1. Montrez : $[\mathbf{A}, \mathbf{B}] = -[\mathbf{B}, \mathbf{A}]$.
2. Montrez : $[\mathbf{AB}, \mathbf{C}] = \mathbf{A}[\mathbf{B}, \mathbf{C}] + [\mathbf{A}, \mathbf{C}]\mathbf{B}$.
3. Supposons que $[\mathbf{A}, \mathbf{B}] = \mathbf{C}$ avec $[\mathbf{A}, \mathbf{C}] = 0$. Montrez : $[\mathbf{A}^n, \mathbf{B}] = n\mathbf{A}^{n-1}\,\mathbf{C}$. Puis, montrez que $[f(\mathbf{A}), \mathbf{B}] = f'(\mathbf{A})\,\mathbf{C}$ pour toute fonction f dont l'action sur des opérateurs est définie par sa série de Taylor.
4. Pour $\mathbf{A}$ et $\mathbf{B}$ hermitiens, calculez $(\mathbf{AB})^\dagger$ et $[\mathbf{A}, \mathbf{B}]^\dagger$.
5. Pour $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$, on regarde l'opérateur x qui associe $\psi(x) \mapsto x\psi(x)$ et l'opérateur $\frac{\partial}{\partial x}$ qui associe $\psi(x) \mapsto \frac{\partial \psi}{\partial x}$.[1] Calculez $\left[x, \frac{\partial}{\partial x}\right]$.

Exercice 3 : Valeurs propres et vecteurs propres

1. Montrez : Si $\mathbf{A}$ est hermitien, alors ses valeurs propres sont réelles.
2. Montrez : Si $|\chi\rangle$ et $|\psi\rangle$ sont deux vecteurs propres d'un opérateur hermitien $\mathbf{A}$ avec valeurs propres différentes, alors $\langle\chi|\psi\rangle = 0$.
3. Trouvez les possibles valeurs propres d'un opérateur projecteur $\mathbf{\Pi}$.
4. Pour l'espace de Hilbert $\mathcal{H} = \mathbb{C}^3$, on donne les matrices

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & i & 0 \\ -i & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{B} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & -i \\ 1 & i & 1 \end{pmatrix}.$$

Est-ce que $\mathbf{A}$ et $\mathbf{B}$ sont unitaires ? Hermitiennes ? Simultanément diagonalisables ? Au cas échéant, trouvez une base de vecteurs propres communs à $\mathbf{A}$ et $\mathbf{B}$ et donnez les valeurs propres correspondantes.

1. Plus précisément on se limiterait au sous-ensemble de $L^2(\mathbb{R})$ des fonctions dérivables à support compact — ainsi $x\psi(x)$ sera toujours normalisable et $\frac{\partial\psi}{\partial x}$ sera toujours bien définie.

Exercice 4 : Observables

1. On donne un système quantique dans l'état $|\psi\rangle$, une observable représentée par un opérateur hermitien $\mathbf{A}$ et un état propre $|\psi'\rangle$ de $\mathbf{A}$. Pourquoi l'assertion suivante est fausse en général ? Trouvez un contre-exemple simple. Quelle condition supplémentaire faut-il imposer à $\mathbf{A}$ pour que l'assertion devienne vraie pour tous les $|\psi\rangle$ et $|\psi'\rangle$?
   La probabilité de se trouver dans l'état $|\psi'\rangle$ après une mesure de $\mathbf{A}$ est
   $$P(\textit{système passe à l'état } |\psi'\rangle) = \frac{|\langle\psi|\psi'\rangle|^2}{||\psi||^2\,||\psi'||^2}\,.$$
   .
2. On donne un système quantique et une observable représentée par un opérateur hermitien $\mathbf{A}$ indépendent du temps. Utilisez l'équation de Schrödinger pour démontrer le théorème d'Ehrenfest du cours :
   $$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\mathbf{A}\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle[\mathbf{A},\mathbf{H}]\rangle\,.$$

Exercice 5 : Principe d'incertitude

Le but de cet exercice est de démontrer le principe d'incertitude de Heisenberg :

$$\Delta\mathbf{A}\,\Delta\mathbf{B} \geq \frac{1}{2}\Big|\langle[\mathbf{A},\mathbf{B}]\rangle\Big|\,.$$

Ici $\mathbf{A}$ et $\mathbf{B}$ sont des opérateurs hermitiens sur un espace de Hilbert $\mathcal{H}$, $\Delta\mathbf{A}$ et $\Delta\mathbf{B}$ sont leurs écart types dans un état quelconque, et $\langle[\mathbf{A},\mathbf{B}]\rangle$ est la moyenne quantique de leur commutateur dans le même état.

1. Prouvez l'*inégalité de Cauchy-Schwarz* :
   $$||\zeta||^2\,||\chi||^2 \geq |\langle\zeta|\chi\rangle|^2 \qquad \forall\,|\zeta\rangle,|\chi\rangle \in \mathcal{H}\,.$$
   Indication : Regardez la norme du vecteur $|\zeta\rangle - \lambda|\chi\rangle$ avec $\lambda = \frac{\langle\chi|\zeta\rangle}{||\chi||^2}$.
2. Montrez : Les moyennes quantiques d'un opérateur hermitien sont réelles. Les moyennes quantiques d'un opérateur anti-hermitien $\mathbf{C}$ (vérifiant $\mathbf{C}^\dagger = -\mathbf{C}$) sont imaginaires.
3. Calculez $(\mathbf{AB}+\mathbf{BA})^\dagger$ et rappelez-vous du calcul du $[\mathbf{A},\mathbf{B}]^\dagger$ de l'exercice 2. Puis, avec ces deux résultats et le résultat de 2., montrez que
   $$\mathrm{Im}\langle\mathbf{AB}\rangle = \frac{1}{2i}\langle[\mathbf{A},\mathbf{B}]\rangle\,.$$
4. On rappelle que, selon le cours,
   $$(\Delta\mathbf{A})^2 = \langle(\mathbf{A}-\langle\mathbf{A}\rangle)^2\rangle\,.$$
   Appliquez l'inégalité de Cauchy-Schwarz aux états $(\mathbf{A}-\langle\mathbf{A}\rangle)|\psi\rangle$ et $(\mathbf{B}-\langle\mathbf{B}\rangle)|\psi\rangle$. Avec le résultat de 3., montrez enfin que
   $$(\Delta\mathbf{A})^2\,(\Delta\mathbf{B})^2 \geq \frac{1}{4}\Big|\langle[\mathbf{A},\mathbf{B}]\rangle\Big|^2\,.$$

Exercice 6 : Le système à deux états

On regarde le système à deux états du cours. L'espace de Hilbert est $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$ et les opérateurs sont les matrices 2×2 complexes. Rappellons la définition des matrices de Pauli :

$$\sigma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} , \quad \sigma^2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} , \quad \sigma^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

1. Trouvez les valeurs propres des opérateurs $\mathbf{S}_x = \frac{\hbar}{2}\sigma^1$, $\mathbf{S}_y = \frac{\hbar}{2}\sigma^2$ et $\mathbf{S}_z = \frac{\hbar}{2}\sigma^3$, ainsi que les projecteurs $\mathbf{\Pi}$ sur les espaces propres de $\mathbf{S}_z$ et de $\mathbf{S}_y$.
2. Supposons que l'état du système soit $|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$.
   - On mesure $\mathbf{S}_z$; qu'est-ce qu'on trouve ? Donnez $\langle \mathbf{S}_z \rangle$. Quel est l'état du système après la mesure ?
   - Ensuite on mesure $\mathbf{S}_y$; qu'est-ce qu'on peut trouver et avec quelle probabilité ? Donnez $\langle \mathbf{S}_y \rangle$. En fonction du résultat de la mesure, quel est le nouvel état du système ?
   - Mêmes questions si enfin on mesure de nouveau $\mathbf{S}_z$.
3. Calculez $\langle [\mathbf{S}_x, \mathbf{S}_z] \rangle$, $\Delta \mathbf{S}_x$ et $\Delta \mathbf{S}_z$ pour un état général $\begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2} e^{i\phi} \end{pmatrix}$ avec $0 \leq \theta \leq \pi$ et $0 \leq \phi < 2\pi$. Ainsi, vérifiez le principe d'incertitude pour les opérateurs $\mathbf{S}_x$ et $\mathbf{S}_z$.
4. On ajoute un champ magnétique externe constant en direction des z. Le hamiltonien est
$$\mathbf{H} = \mu \, B \, \sigma^3$$
où μ et B sont des constantes réelles. Calculez $e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{H}t}$. Pour un système qui est dans un des états propres de $\mathbf{S}_x$ à $t = 0$, trouvez l'état à un t quelconque. Pour quels t le système retourne-t-il à son état original ? Pour quels t est-il dans l'autre état propre de $\mathbf{S}_x$? Qu'est-ce que la probabilité de trouver l'une ou l'autre valeur propre lors d'une mesure de $\mathbf{S}_x$, en fonction du temps ?

Exercice 7 : Paquet d'onde gaussien

On donne la fonction d'onde d'une particule de masse m qui se déplace en une dimension sans potentiel, $V(x) = 0$, à $t = 0$:

$$\psi(t, x)|_{t=0} = N_0 \, \exp\left(-\frac{(x - \bar{x}_0)^2}{2\,\sigma_0^2} + ikx \right) .$$

Ici σ_0, $\bar{x}_0$ et k sont des constantes réelles.

1. Donnez la densité de probabilité $|\psi(0, x)|^2$. Calculez la normalisation N_0 en fonction de σ_0.
2. Calculez la fonction d'onde $\widetilde{\psi}(p)$ dans la représentation d'impulsion.
3. Donnez l'expression de l'hamiltonien dans la représentation de position et dans la représentation d'impulsion.
4. Calculez $\psi(t, x)$ pour un t quelconque, en posant $\psi(t, x) = N(t) \exp\left(-\frac{(x - \bar{x}(t))^2}{2\sigma(t)^2} + ikx \right)$ et en déterminant les fonctions $N(t)$, $\bar{x}(t)$ et $\sigma(t)$ avec l'aide de l'équation de Schrödinger.

5. Calculez la densité de probabilité $|\psi(x,t)|^2$ et montrez qu'il s'agît d'une fonction gaussienne de x pour tout t fixe. Comment sa largeur se comporte-t-elle pour $t \to \infty$? Qu'est-ce que cela signifie pour une particule qui était initialement localisée très précisément (σ_0 petit) ?

Indication : Vous pouvez utiliser l'identité

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \, \exp\left(-ax^2 + bx\right) = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \exp\left(\frac{b^2}{4a}\right) \qquad (\mathrm{Re}\, a > 0) \, .$$

Exercice 8 : Neutron dans un champ gravitationnel

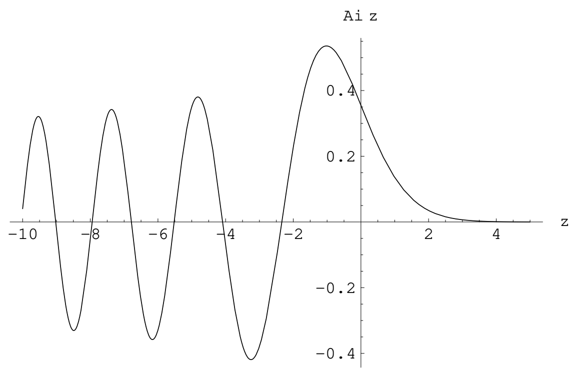
Dans le champ gravitationnel à la surface de la terre, un neutron froid est reflété par un miroir parfait horizontal à $x = 0$. [2] Le potentiel est $V(x) = mgx$ pour $x \geq 0$ et ∞ pour $x < 0$, alors l'équation de Schrödinger indépendente du temps dans la représentation de position est

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + (mgx - E)\,\psi(x) = 0 \, , \qquad x \geq 0 \, .$$

Cette équation différentielle est équivalente à l'*équation d'Airy* dont les solutions n'ont pas d'expression simple en termes de fonctions élémentaires. On peut pourtant obtenir une expression intégrale.

1. Donnez l'équation de Schrödinger dans la représentation d'impulsion.
2. En trouvez la solution générale $\widetilde{\psi}(p)$. Ecrivez $\psi(x)$ pour $x \geq 0$ comme une intégrale en inversant la transformation de Fourier (sans spécifier la normalisation et l'énergie pour l'instant).
3. Quelle condition la fonction d'onde $\psi(x)$ doit-elle remplir à $x = 0$? Rendez-vous compte que cette condition déterminera les énergies E_n des états liés. Obtenez les E_n en fonction des zéros de la *fonction d'Airy* qui est définie par

$$\mathrm{Ai}\,(z) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt \, \cos\left(\frac{t^3}{3} + tz\right) .$$



Les zéros de la fonction d'Airy sont des nombres réels négatifs qui sont faciles à calculer numériquement à une précision quelconque. Le premier zéro est $z_0 \approx -2.34$.

4. Calculez l'énergie de l'état fondamental en eV, sachant que $mc^2 = m_{\mathrm{neutron}}c^2 = 940$ MeV et que $g\hbar/c = 2.15 \times 10^{-23}$ eV.

2. Une expérience correspondante a été conduite à l'institut Laue-Langevin à Grenoble, voir Nesvizhevsky, Börner, Petukhov et al., *Quantum states of neutrons in the Earth's gravitational field*, Nature 415, 297–299 (2002).

Exercice 9 : Oscillateur harmonique

Soient $\{|n\rangle\}$ les états propres normalisés de l'hamiltonien $\mathbf{H} = \hbar\omega(\mathbf{a}^\dagger\mathbf{a} + \frac{1}{2})$ de l'oscillateur harmonique 1-dimensionnel, tel que $\mathbf{H}|n\rangle = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})|n\rangle$. Avec les expressions de $\mathbf{X}$ et $\mathbf{P}$ en fonction de $\mathbf{a}$ et $\mathbf{a}^\dagger$:

1. Calculez $\langle\mathbf{X}\rangle$, $\langle\mathbf{P}\rangle$, $\langle\mathbf{X}^2\rangle$ et $\langle\mathbf{P}^2\rangle$ dans l'état $|n\rangle$. Puis,
   — calculez $\Delta\mathbf{X}$ et $\Delta\mathbf{P}$ et vérifiez que la relation d'incertitude est satisfaite,
   — vérifiez le *théorème du viriel* qui affirme que, pour un oscillateur harmonique,
   $$\langle\mathbf{T}\rangle = \langle\mathbf{V}\rangle$$
   où $\mathbf{T}$ est l'opérateur d'énergie cinétique et $\mathbf{V}$ celui du potentiel.
2. Calculez $\langle n|\mathbf{X}|m\rangle$ et $\langle n|\mathbf{P}|m\rangle$.

Indication : Il convient d'écrire $\mathbf{X}$ et $\mathbf{P}$ en fonction de $\mathbf{a}$ et $\mathbf{a}^\dagger$.

Exercice 10 : États cohérents

1. Calculez les moyennes $\langle\mathbf{X}\rangle$, $\langle\mathbf{P}\rangle$, $\langle\mathbf{X}^2\rangle$ et $\langle\mathbf{P}^2\rangle$ dans un état cohérent. Puis, calculez $\Delta\mathbf{X}$ et $\Delta\mathbf{P}$ et comparez avec le principe d'incertitude.
   Indication : On rappelle que $\mathbf{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$; qu'est-ce que le conjugué de cette équation ?
2. Pour un oscillateur harmonique qui se trouve dans un état cohérent $|\alpha\rangle$ avec $\alpha \in \mathbb{R}$ à $t = 0$, calculez l'evolution temporelle $\langle\mathbf{X}\rangle(t)$.
3. Démontrez l'identité
   $$\mathbf{1} = \frac{1}{\pi}\int |\alpha\rangle\langle\alpha| \;\mathrm{d}^2\alpha\,.$$
   Ici $|\alpha\rangle$ est un état cohérent vérifiant $\mathbf{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$ et l'intégrale est sur le plan complexe avec $\mathrm{d}^2\alpha = \mathrm{d}\,\mathrm{Re}\,\alpha\;\mathrm{d}\,\mathrm{Im}\,\alpha$.
   Indications : Il suffit de montrer que $\frac{1}{\pi}\int |\alpha\rangle\langle\alpha|n\rangle\;\mathrm{d}^2\alpha = |n\rangle$ pour tout $n \in \mathbb{N}$ (rendez-vous compte pourquoi). Utilisez la décomposition du cours des états cohérents selon la base $\{|n\rangle\}$ et transformez l'intégrale en coordonnées polaires. On rappelle que la fonction Gamma, définie par $\Gamma(x) = \int_0^\infty e^{-t}t^{x-1}\;\mathrm{d}t$, vérifie $\Gamma(n+1) = n!\quad (n \in \mathbb{N})$.

Exercice 11 : Oscillateur harmonique isotrope en deux dimensions

On donne le hamiltonien de l'oscillateur 2-dimensionnel
$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_1 + \mathbf{H}_2 = \left(\frac{1}{2m}\mathbf{P}_1^2 + \frac{m\omega^2}{2}\mathbf{X}_1^2\right) + \left(\frac{1}{2m}\mathbf{P}_2^2 + \frac{m\omega^2}{2}\mathbf{X}_2^2\right)\,.$$
Une base d'états propres de $\mathbf{H}$ est donnée par $\{|n_1\;n_2\rangle\}$, où $|n_1\;n_2\rangle = |n_1\rangle \otimes |n_2\rangle$ est un produit d'états propres $|n_i\rangle$ des deux $\mathbf{H}_i$ (voir le cours).

1. Vérifiez que, pour tout $n \in \mathbb{N}$ fixe, les états
   $$|(n-k)\;\;k\rangle \qquad\qquad (k = 0, \ldots, n)$$
   forment une base de l'espace propre de $\mathbf{H}$ d'énergie $\hbar\omega(n+1)$.

2. On définit l'opérateur du *moment cinétique* $\mathbf{L}$ par
$$\mathbf{L} = \mathbf{X}_1\mathbf{P}_2 - \mathbf{X}_2\mathbf{P}_1 \,.$$
Montrez que $\mathbf{L}$ est hermitien et exprimez-le en fonction des opérateurs d'échelle $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$, $\mathbf{a}_1^\dagger$ et $\mathbf{a}_2^\dagger$.
3. Montrez que $[\mathbf{L},\mathbf{H}] = 0$. Les opérateurs $\mathbf{L}$ et $\mathbf{H}$ sont alors simultanément diagonalisables. Est-ce aussi le cas pour $\mathbf{L}$ et $\mathbf{H}_1$ ou pour $\mathbf{L}$ et $\mathbf{H}_2$?
4. On cherche les vecteurs propres communs à $\mathbf{L}$ et $\mathbf{H}$ en fonction de la base $\{|n_1\ n_2\rangle\}$ de vecteurs propres communs à $\mathbf{H}$, $\mathbf{H}_1$ et $\mathbf{H}_2$. C'est-à-dire, pour n fixe on cherche les coefficients α_k et les valeurs propres λ possibles dans la relation
$$\mathbf{L}\sum_{k=0}^{n} \alpha_k \,|(n-k)\ \ k\rangle = \lambda \sum_{k=0}^{n} \alpha_k \,|(n-k)\ \ k\rangle \,.$$
Utilisez les propriétés connues des opérateurs d'échelle afin de trouver $n+1$ équations algébriques pour les $n+2$ inconnues $(\lambda, \alpha_0, \dots, \alpha_n)$. Ensemble avec la condition de normalisation $\sum_{k=0}^{n} |\alpha_k|^2 = 1$ ces équations peuvent être résolues. Calculez les solutions pour $n = 1$ et pour $n = 2$.

Remarque : Il est possible d'approfondir cette approche afin d'explicitement construire toutes les possibles valeurs propres et vecteurs propres de $\mathbf{L}$, mais pour cela on aurait besoin de la théorie du moment cinétique que l'on traitera plus tard dans le cours. En bref, il faudrait montrer que les opérateurs
$$\mathbf{K}_1 = \frac{\mathbf{P}_1^2 - \mathbf{P}_2^2}{4m\omega} + \frac{m\omega}{4}\left(\mathbf{X}_1^2 - \mathbf{X}_2^2\right) \,, \quad \mathbf{K}_2 = \frac{\mathbf{P}_1\mathbf{P}_2}{2m\omega} + \frac{m\omega}{2}\mathbf{X}_1\mathbf{X}_2 \,, \quad \mathbf{K}_3 = \frac{1}{2}\mathbf{L}$$
commutent avec $\mathbf{H}$ et forment une représentation de l'algèbre $\mathfrak{su}(2)$ du moment cinétique, et enfin exploiter les propriétés de cette dernière.

Exercice 12 : Théorie des perturbations sans dégénérescence

On considère le hamiltonien 1-dimensionnel (voir le cas $p = 2$ du deuxième exemple du chapitre 4.2 du cours)
$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \lambda\,\mathbf{W} \,, \qquad \mathbf{H}_0 = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + \frac{m\,\omega^2}{2}\mathbf{X}^2 \,, \qquad \mathbf{W} = \frac{m\,f^2}{2}\mathbf{X}^2 \,.$$
1. Donnez le spectre exact de $\mathbf{H}$ et la fonction d'onde exacte de l'état fondamental.
2. Qu'est-ce qu'on obtient pour le spectre en théorie des perturbations à l'ordre λ et à l'ordre λ^2 ? Comparez avec la série de Taylor en λ du résultat exact.
Indication : Il convient d'écrire $\mathbf{W}$ en fonction de $\mathbf{a}$ et $\mathbf{a}^\dagger$.
3. Sachant que $\langle x|\psi_2^{(0)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\left(2\frac{m\omega}{\hbar}x^2 - 1\right)\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)$, qu'est-ce qu'on obtient pour la fonction d'onde de l'état fondamental en théorie des perturbations à l'ordre λ ? Comparez avec la série de Taylor en λ du résultat exact.

Exercice 13 : Oscillateur harmonique 2d et théorie des perturbations

On révisite le potentiel de l'oscillateur harmonique 2-dimensionnel d'exercice 11 :
$$\mathbf{H}_0 = \frac{1}{2m}\left((\mathbf{P}_1)^2 + (\mathbf{P}_2)^2\right) + \frac{m\omega^2}{2}\left((\mathbf{X}_1)^2 + (\mathbf{X}_2)^2\right) \,.$$
On rappelle que l'état fondamental est non dégénéré, tant que le premier niveau excité est deux fois dégénéré.

1. On ajoute un terme anisotrope $\lambda\mathbf{W} = \lambda\frac{mf^2}{2}(\mathbf{X}_2)^2$ avec $0 < \lambda f^2 \ll \omega^2$. Quel est le spectre d'énergies du hamiltonien $\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \lambda\mathbf{W}$? Quels sont les degrés de dégénérescence de l'état fondamental et du premier niveau excité ?
2. Maintenant on regarde le hamiltonien
$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \lambda\mathbf{W}\,, \qquad \mathbf{W} = \hbar f\left(\mathbf{a}_1\mathbf{a}_2^\dagger + \mathbf{a}_2\mathbf{a}_1^\dagger\right)\,.$$
Montrez explicitement que $\mathbf{W}$ est hermitien. Au premier ordre en théorie des perturbations, calculez l'effet de $\mathbf{W}$ sur les énergies de l'état fondamental et du premier niveau excité de $\mathbf{H}_0$. Quels sont les degrés de dégénérescence ?

Exercice 14 : Harmoniques sphériques

Pour rappel : Les *harmoniques sphériques* Y_l^m sont un système orthonormal de fonctions propres du laplacien sur la 2-sphère. En coordonnées sphériques elles sont données par
$$Y_l^m(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\; e^{im\phi}\, P_l^m(\cos\theta)\,.$$
Ici $l \in \mathbb{N}$, m est entier avec $-l \le m \le l$ et les *fonctions associées de Legendre* P_l^m sont donnés par
$$P_l^m(x) = \frac{(-1)^m}{2^l\, l!}\left(1-x^2\right)^{m/2}\frac{\mathrm{d}^{l+m}}{\mathrm{d}x^{l+m}}(x^2-1)^l\,.$$

1. Donnez Y_0^0, Y_1^0, Y_1^1, Y_1^{-1} et Y_2^0 explicitement.
2. Vérifiez que vos expressions sont bien orthonormales.
3. Développez $f(\theta,\phi) = \sin\theta\sin\phi$ en harmoniques sphériques.

Exercice 15 : Addition de moments cinétiques

On regarde un électron de spin $\frac{1}{2}$ dans un état avec moment cinétique orbital $l = 1$. Soient $\{|\phi_{1\,m_l}\rangle\}$ ($m_l = \pm 1, 0$) les vecteurs propres normalisés de $\vec{\mathbf{L}}^2$ et de $\mathbf{L}_3$ avec valeurs propres respectives $2\hbar^2$ et $\hbar m_l$. Soient $\{|\chi_{m_s}\rangle\}$ ($m_s = \pm\frac{1}{2}$) les vecteurs propres normalisés de $\vec{\mathbf{S}}^2$ et de $\mathbf{S}_3$ avec valeurs propres respectives $\frac{3}{4}\hbar^2$ et $\hbar m_s$. Le but de cet exercice est de trouver les coefficients de Clebsch-Gordan $C_{1\,m_l\,m_s}^{j\,m_j}$ dans la décomposition
$$|\psi_{j\,m_j}\rangle = \sum_{m_l\,m_s} C_{1\,m_l\,m_s}^{j\,m_j}\,|\phi_{1\,m_l}\rangle \otimes |\chi_{m_s}\rangle\,.$$
Ici $|\psi_{j\,m_j}\rangle$ est vecteur propre normalisé de $\vec{\mathbf{J}}^2$ et de $\mathbf{J}_3$ avec valeurs propres $\hbar^2 j(j+1)$ et $\hbar m_j$, $\vec{\mathbf{J}}$ étant l'opérateur du moment cinétique total
$$\vec{\mathbf{J}} = \vec{\mathbf{L}} + \vec{\mathbf{S}}\,.$$

1. Montrez qu'on peut poser $|\psi_{\frac{3}{2},\frac{3}{2}}\rangle = |\phi_{11}\rangle \otimes |\chi_{\frac{1}{2}}\rangle$. C'est-à-dire, vérifiez que $|\phi_{11}\rangle \otimes |\chi_{\frac{1}{2}}\rangle$ est vecteur propre normalisé de $\vec{\mathbf{J}}^2$ et de $\mathbf{J}_3$ avec les valeurs propres correctes.
Indication : Il convient d'écrire $\vec{\mathbf{L}}\cdot\vec{\mathbf{S}} \equiv \sum_{i=1}^3 \mathbf{L}_i \otimes \mathbf{S}_i$ en fonction de $\mathbf{L}_3$, $\mathbf{S}_3$ et des opérateurs d'échelle $\mathbf{L}_\pm$ et $\mathbf{S}_\pm$.

2. Construisez les trois autres vecteurs propres normalisés de $j = \frac{3}{2}$ en agissant sur $|\psi_{\frac{3}{2},\frac{3}{2}}\rangle$ avec $\hat{\mathbf{J}}_-$ plusieurs fois.
Rappel : $\hat{\mathbf{J}}_-$ était défini par $\hat{\mathbf{J}}_- = \hat{\mathbf{L}}_- + \hat{\mathbf{S}}_-$ et l'action de l'opérateur $\hat{\mathbf{L}}_-$ est
$$\hat{\mathbf{L}}_-|\phi_{l\,m_l}\rangle = \sqrt{l(l+1) - m_l(m_l-1)}\,|\phi_{l,m_l-1}\rangle$$
(et similaire pour $\hat{\mathbf{S}}_-$).
3. Trouvez un vecteur normalisé $\alpha\,|\phi_{11}\rangle \otimes |\chi_{-\frac{1}{2}}\rangle + \beta|\phi_{10}\rangle \otimes |\chi_{\frac{1}{2}}\rangle$ qui est orthogonal à $|\psi_{\frac{3}{2},\frac{1}{2}}\rangle$. Montrez qu'on peut poser $|\psi_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}}\rangle =$ ce vecteur.
4. Construisez l'autre vecteur propre normalisé de $j = \frac{1}{2}$ en agissant sur $|\psi_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}}\rangle$ avec $\hat{\mathbf{J}}_-$.

Comparez votre résultat avec l'expression du cours pour les coefficients de Clebsch-Gordan (éq. 5.61).

Exercice 16 : Potentiel central

Montrez explicitement : En coordonnées sphériques (r, θ, ϕ) dans la représentation de position,
$$\vec{\mathbf{X}}^2 = r^2\,, \qquad \vec{\mathbf{X}} \cdot \vec{\mathbf{P}} = -i\hbar\, r\frac{\partial}{\partial r}\,,$$
la relation
$$\vec{\mathbf{P}}^2 = \left(\vec{\mathbf{X}}^2\right)^{-1}\left(\vec{\mathbf{L}}^2 + (\vec{\mathbf{X}} \cdot \vec{\mathbf{P}})^2 - i\hbar\,\vec{\mathbf{X}} \cdot \vec{\mathbf{P}}\right)$$
s'écrit
$$\vec{\mathbf{P}}^2 = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\vec{\mathbf{L}}^2\,.$$
Cf. section 6.1 du cours.

Exercice 17 : Fonction d'onde radiale de l'atome d'hydrogène

Vérifiez éqs. (6.32) et (6.33) du cours. C'est-à-dire, vérifiez explicitement que
$$\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}\left(e^{-\rho}\rho^{l+1}\,v(\rho)\right) = e^{-\rho}\rho^{l+1}\left(\left(1 - \frac{2(l+1)}{\rho} + \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right)v(\rho) + 2\left(\frac{l+1}{\rho} - 1\right)\frac{\partial v}{\partial\rho} + \frac{\partial^2 v}{\partial\rho^2}\right).$$
Ensuite, en utilisant l'équation pour $u(\rho) = e^{-\rho}\rho^{l+1}v(\rho)$
$$\left(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{\rho_0}{\rho} - 1\right)u(\rho) = 0\,,$$
montrez que $v(\rho)$ satisfait
$$\left(\rho_0 - 2\,(l+1) + 2\,((l+1) - \rho)\,\frac{\partial}{\partial\rho} + \rho\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}\right)v(\rho) = 0\,.$$

Exercice 18 : État fondamental de l'atome d'hydrogène

1. Montrez :
$$\int_0^\infty r^n\,e^{-\alpha r}\,\mathrm{d}r = \frac{n!}{\alpha^{n+1}} \qquad \forall\,n \in \mathbb{N}\,,\ \alpha \in \mathbb{R}_+^*\,.$$

2. Vérifiez que la fonction d'onde de l'état fondamental du cours est bien normalisée :

$$\langle \psi_{0,0,0} | \psi_{0,0,0} \rangle = 1 \qquad \text{avec} \quad \psi_{0,0,0}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} a_0^{-3/2} \, e^{-r/a_0} \, .$$

3. Dans l'état fondamental, calculez la moyenne quantique de la distance de l'électron du noyau

$$\bar{r} = \left\langle |\vec{\mathbf{X}}| \right\rangle$$

ainsi que la variance

$$(\Delta r)^2 = \left\langle \vec{\mathbf{X}}^2 \right\rangle - \left\langle |\vec{\mathbf{X}}| \right\rangle^2 \, .$$

4. Calculez la fonction d'onde de l'état fondamental dans la représentation d'impulsion, $\widetilde{\psi}_{0,0,0}(\vec{p})$.
Indication : Choisissez des coordonnées telles que $\vec{x} \cdot \vec{p} = r \, |\vec{p}| \, \cos\theta$.

Exercice 19 : Spectre d'énergies de l'atome d'hydrogène

Dans cet exercice vous redécouvrirez le spectre de l'atome d'hydrogène, maintenant avec l'aide des opérateurs d'échelle.

Soit $\psi_{Elm}(r, \theta, \phi) = R_{El}(r) \, Y_l^m(\theta, \phi)$ la fonction d'onde d'un état lié avec énergie $E < 0$, valeur propre $\hbar^2 l(l+1)$ de $\vec{\mathbf{L}}^2$ et valeur propre $\hbar m$ de $\mathbf{L}_3$. On prétendra que l'on ne connaît pas encore les expressions de R_{El} et de E. Définissons

$$\epsilon = -\frac{2 m_e E}{\hbar^2} \, , \qquad a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} \, , \qquad u_{\epsilon l}(r) = r \, R_{El}(r) \, .$$

1. En partant de l'équation de Schrödinger de l'atome d'hydrogène,

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial r^2} \right) + \frac{\vec{\mathbf{L}}^2}{2 m_e r^2} - \frac{e^2}{r} \right) \psi_{Elm} = E \, \psi_{Elm} \, ,$$

montrez explicitement que

$$\mathbf{h}_l \, u_{\epsilon l}(r) = \epsilon \, u_{\epsilon l}(r) \qquad \text{avec} \quad \mathbf{h}_l = \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2}{a_0 r} \right) .$$

2. On considère l'espace de fonctions sur $\mathbb{R}_+$ de carré intégrable qui s'annulent en 0 :

$$\int_0^\infty |f(r)|^2 \, \mathrm{d}r < \infty \, , \qquad f(0) = 0 \, .$$

Montrez que l'opérateur adjoint de $\mathbf{a}_l = \frac{\partial}{\partial r} + \frac{l}{r} - \frac{1}{a_0 l}$ est $\mathbf{a}_l^\dagger = -\frac{\partial}{\partial r} + \frac{l}{r} - \frac{1}{a_0 l}$, c.à.d.

$$\int_0^\infty \left(\mathbf{a}_l^\dagger \, f \right)(r)^* g(r) \, \mathrm{d}r = \int_0^\infty f(r)^* \left(\mathbf{a}_l \, g \right)(r) \, \mathrm{d}r \qquad \text{pour toutes fonctions } f, g \, .$$

Calculez le commutateur $[\mathbf{a}_l, \, \mathbf{a}_l^\dagger]$.

3. Montrez :

$$\mathbf{h}_l = -\mathbf{a}_l^\dagger \mathbf{a}_l + \frac{1}{a_0^2 l^2} = -\mathbf{a}_{l+1} \mathbf{a}_{l+1}^\dagger + \frac{1}{a_0^2 (l+1)^2} \, .$$

4. Montrez : $\mathbf{a}_{l+1}^\dagger u_{\epsilon l}$ est soit 0, soit fonction propre de $\mathbf{h}_{l+1}$ avec valeur propre ϵ.

5. Montrez : Pour tout ϵ donné, il y a un l maximal (que l'on appellera $\hat{l}$, alors on a $\mathbf{a}^\dagger_{\hat{l}+1}\, u_{\epsilon\hat{l}} = 0$). Déduisez-en que les énergies de liaison possibles sont de la forme
$$E = -\frac{m_e e^4}{2\hbar^2 n^2} \qquad\qquad n \in \mathbb{N}^* \,.$$
Indications : Utilisez le fait que la norme est positive, $\langle \mathbf{a}^\dagger_{l+1}\, u_{\epsilon l} | \mathbf{a}^\dagger_{l+1}\, u_{\epsilon l}\rangle \geq 0$, et que les énergies de liaison sont négatives, alors $\epsilon > 0$.
6. Résolvez l'équation différentielle $\mathbf{a}^\dagger_{\hat{l}+1}\, u_{\epsilon\hat{l}}(r) = 0$ pour un $\hat{l} \in \mathbb{N}$ quelconque et montrez que la solution est normalisable. On en déduit que tout $n \in \mathbb{N}^*$, en revanche, correspond à une possible énergie de liaison.

Exercice 20 : Effet Stark linéaire

On rappelle les fonctions d'onde des états $n = 2$ de l'atome d'hydrogène :
$$\begin{aligned}
\psi_1^{(0)} &\equiv \psi_{2,0,0} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} a_0^{-3/2}\, e^{-r/(2a_0)} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) \,, \\
\psi_2^{(0)} &\equiv \psi_{2,1,0} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} a_0^{-5/2}\, r\, e^{-r/(2a_0)} \cos\theta \,, \\
\psi_3^{(0)} &\equiv \psi_{2,1,1} = \frac{1}{8\sqrt{\pi}} a_0^{-5/2}\, r\, e^{-r/(2a_0)} \sin\theta\, e^{i\phi} \,, \\
\psi_4^{(0)} &\equiv \psi_{2,1,-1} = \frac{1}{8\sqrt{\pi}} a_0^{-5/2}\, r\, e^{-r/(2a_0)} \sin\theta\, e^{-i\phi} \,.
\end{aligned}$$
Montrez que les éléments de matrice correspondants de l'hamiltonien de perturbation $\mathbf{W} = e\,\mathcal{E}\, r\cos\theta$ sont
$$\langle \mathbf{W}\rangle_{ij} = \begin{cases} -3\, e\,\mathcal{E}\, a_0, & i = 1, j = 2 \text{ ou } i = 2, j = 1 \,, \\ 0, & \text{autrement.} \end{cases}$$
Cf. éq. (6.64) du cours.

Exercice 21 : Corrections relativistes au problème de Coulomb

Vérifiez éq. (6.84) du cours. C'est-à-dire, en regardant l'opérateur
$$\mathbf{H}_{\text{cin}} = -\frac{1}{8} \frac{\left(\vec{\mathbf{P}}^2\right)^2}{m_e^3 c^2}$$
comme une petite perturbation de l'hamiltonien pour le potentiel de Coulomb, calculez le décalage d'énergie au premier ordre et montrez qu'il est donné par
$$\delta E_{\text{cin}} = -\frac{1}{2}\frac{e^2}{a_0}\alpha^2 \left(\frac{1}{n^3(l + \frac{1}{2})} - \frac{3}{4\, n^4}\right) \,.$$

Indications : Il convient d'écrire l'équation de Schrödinger du système sans perturbation comme
$$\vec{\mathbf{P}}^2 |\psi_{n,l,m}\rangle = 2\, m_e \left(E_n - \mathbf{V}\right) |\psi_{n,l,m}\rangle \,, \quad \langle \psi_{n,l,m}| \vec{\mathbf{P}}^2 = \langle \psi_{n,l,m}|\, 2\, m_e \left(E_n - \mathbf{V}\right) \,.$$
Vous pouvez utiliser les moyennes suivantes sans preuve :
$$\langle \psi_{n,l,m}|\ \left|\vec{\mathbf{X}}\right|^{-2} |\psi_{n,l,m}\rangle = \frac{1}{a_0^2} \frac{1}{n^3\,(l + \frac{1}{2})} \,, \qquad \langle \psi_{n,l,m}|\ \left|\vec{\mathbf{X}}\right|^{-1} |\psi_{n,l,m}\rangle = \frac{1}{a_0}\frac{1}{n^2} \,.$$

Exercice 22 : Niveaux de Landau

On regarde un électron (dont on néglige le spin) qui se déplace en trois dimensions dans un champ magnétique constant $\vec{B} = B\vec{e}_3$.

1. Montrez que $\vec{B}$ dérive du potentiel vectoriel $\vec{A} = B\,x_1\vec{e}_2$, et que ce potentiel vectoriel vérifie la condition de jauge de Coulomb.
2. Montrez que le hamiltonien
$$\mathbf{H} = \frac{1}{2m}\left(\vec{\mathbf{P}} - \frac{e}{c}\vec{\mathbf{A}}\right)^2$$
commute avec $\mathbf{P}_2$ et $\mathbf{P}_3$. Les états propres de $\mathbf{H}$ peuvent donc être déterminés en posant $\psi(\vec{x}) = f(x_1)g(x_2)h(x_3)$. Donnez g et h. On va choisir $h(x_3)$ tel que la valeur propre de $\mathbf{P}_3$ est 0.
3. Trouvez une équation à valeurs propres pour $f(x_1)$. Transformez celle-ci à l'équation de l'oscillateur harmonique.
4. Déduisez-en le spectre d'énergies. Les niveaux d'énergie résultants s'appelent *niveaux de Landau*.

Exercice 23 : Oscillations de Rabi

On souhaite résoudre l'équation différentielle (7.13) du cours,
$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \frac{\delta}{i\hbar}\begin{pmatrix} 0 & e^{-i\Omega t} \\ e^{i\Omega t} & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}.$$

Il s'agît d'une équation différentielle linéaire 2-dimensionnelle avec des coefficients non constants ; en générale, un tel problème peut être impossible à résoudre analytiquement, mais ici il se trouve qu'on peut rédéfinir les variables pour absorber la dépendance du temps des coefficients.

1. Posez $b_1(t) = e^{i\frac{\Omega}{2}t}c_1(t)$ et $b_2(t) = e^{-i\frac{\Omega}{2}t}c_2(t)$. Ainsi, trouvez une équation différentielle linéaire pour $\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}$ dont la matrice de coefficients iA est constante, A étant une matrice réelle 2×2.
2. Donnez la solution générale de l'équation différentielle $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\vec{x}(t) = M\vec{x}(t)$, où M est une matrice constante.
3. Pour la matrice A que vous avez trouvé dans 1., calculez A^2, puis A^{2n} et A^{2n+1} ($n \in \mathbb{N}$). Déduisez-en des expressions matricielles pour $\cos(At)$ et $\sin(At)$ en fonction de la fréquence de Rabi $\omega_R = \sqrt{\frac{\Omega^2}{4} + \frac{\delta^2}{\hbar^2}}$.
4. Trouvez la solution générale pour $b_1(t)$ et $b_2(t)$. On pose la condition initiale $c_1(0) = 1$, $c_2(0) = 0$; donnez les expressions de $c_1(t)$ et de $c_2(t)$ et comparez avec éq. (7.14) du cours :
$$c_1 = e^{-i\frac{\Omega}{2}t}\left(\cos\omega_R t + \frac{i\Omega}{2\omega_R}\sin\omega_R t\right), \qquad c_2 = e^{i\frac{\Omega}{2}t}\left(-\frac{i\delta}{\hbar\omega_R}\sin\omega_R t\right).$$
Vérifiez que $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$.

Exercice 24 : Désintégration bêta

Comme application de la règle d'or de Fermi, on va étudier la désintégration d'un noyau atomique en un autre par l'émission d'un électron et un antineutrino,

$$ {}^{A}_{Z}X \;\rightarrow\; {}^{\;\;A}_{Z+1}X' + e^{-} + \bar{\nu}\,. $$

L'approximation de Fermi est de prendre l'élément de matrice comme constant,

$$ \langle \mathbf{W}_0 \rangle_{X,X'e^-\bar{\nu}} \approx \frac{G_F}{V}\,. $$

Ici G_F est la *constante de Fermi*, et on suppose que le processus a lieu dans un volume V (que l'on peut faire tendre $\rightarrow\ \infty$ à la fin du calcul). Le noyau est initialement au repos. Pour les masses on a $m_{\bar{\nu}} \approx 0$ et $m_e \ll m_{X,X'}$, alors l'énergie cinétique que le noyau reçoit par recul est négligeable. La différence des énergies entre X et X' est E_0 ; on veut savoir le spectre énergétique des électrons émis. On cherche alors le taux de désintégration en fonction de l'énergie de l'électron E.

1. Rappelez-vous de la relation relativiste entre la masse m_e, l'impulsion $\vec{p}$ et l'énergie E de l'électron. Pour $p \equiv |\vec{p}|$, montrez que $\mathrm{d}p = \frac{E}{pc^2}\mathrm{d}E$.
2. Quelle est la relation correspondante entre l'impulsion $\vec{q}$ et l'énergie $E_{\bar{\nu}}$ de l'antineutrino, vu que $m_{\bar{\nu}} \approx 0$?
3. Le nombre d'états finaux possibles est donné par le volume d'espace de phases pour l'électron et l'antineutrino,

   $$ N = V^2 \int \frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi\hbar)^3}\frac{\mathrm{d}^3q}{(2\pi\hbar)^3}\delta(E_0 - E - E_{\bar{\nu}})\,, $$

   la quantité de mouvement de X' étant complètement déterminé par $\vec{p}$ et $\vec{q}$. Montrez que, avec les approximations et les résultats ci-dessus, N peut s'écrire

   $$ N = \frac{V^2}{4\pi^4\hbar^6c^6}\int \mathrm{d}E\ \mathrm{d}E_{\bar{\nu}}\ E\,\sqrt{E^2 - m_e^2c^4}\,E_{\bar{\nu}}^2\,\delta(E_0 - E - E_{\bar{\nu}})\,. $$

4. Évaluez l'intégrale sur $E_{\bar{\nu}}$ (le spectre d'énergies de l'antineutrino n'est pas observable en pratique) et déduisez-en l'expression de la densité d'états $\rho(E) = \mathrm{d}N/\,\mathrm{d}E$. Utilisez la règle d'or de Fermi pour enfin obtenir $R_{X\to X'e^-\bar{\nu}}(E)$.