

TD 1 : Équation de Schrödinger

Exercice 1 : Puits de potentiel

Une particule sans spin se déplace en une dimension dans le potentiel

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < L \\ \infty, & x \leq 0 \text{ ou } x \geq L \end{cases}$$

Ici $L > 0$ est une constante de dimension longueur. On cherche les fonctions d'onde $\psi_n(x)$ des états stationnaires, c.à-d. les solutions normalisées de l'équation de Schrödinger indépendante du temps $H\psi_n(x) = E_n\psi_n(x)$, et les niveaux d'énergie E_n correspondants.

1. Donnez la fonction d'onde pour $x \leq 0$ et pour $x \geq L$. Quelles sont donc les conditions aux limites que la fonction d'onde sur l'intervalle $[0, L]$ doit vérifier ?
2. Sur $[0, L]$, donnez l'expression de l'opérateur différentiel H sur $[0, L]$. Puis, montrez que la fonction d'onde d'un état stationnaire prend la forme

$$\psi_n(x) = N_n \sin(k_n x) \quad (n \in \mathbb{N}_*)$$

avec des constantes N_n et k_n que vous déterminerez. Donnez les énergies E_n correspondantes.

3. Montrez que $\langle \psi_n | \psi_m \rangle = \delta_{nm}$. Les $\{|\psi_n\rangle\}$ forment alors un système de vecteurs ortho-normés, qui est en fait une base de l'espace de Hilbert de toutes les fonctions d'onde. Donnez l'expression de l'opérateur différentiel d'impulsion P et calculez ses éléments de matrice $\langle \psi_n | P | \psi_m \rangle$ dans cette base.

Exercice 2 : Système à deux niveaux

On considère un électron dont on néglige les degrés de liberté de translation. Son état est alors décrit par un vecteur de spin à deux composantes complexes, $|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$ avec $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$.

Dans un champ magnétique homogène $\vec{B} = B\vec{e}_z$, l'opérateur hamiltonien peut s'écrire

$$H = B \mu_B \sigma^3, \quad \sigma^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \mu_B = \text{const.}$$

1. Donnez les valeurs propres et les vecteurs propres normalisés de H .
2. Rappelez-vous qu'une solution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps est $|\psi(t)\rangle = e^{-iHt/\hbar} |\psi(0)\rangle$. Quelle est la forme matricielle de l'opérateur $e^{-iHt/\hbar}$ ici ?
3. On suppose qu'au temps $t = 0$, l'électron est dans l'état $|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$. Donnez son état à tout autre temps t .
4. Au temps t , on mesure l'observable $S_z = \frac{\hbar}{2}\sigma^3$. Donnez la probabilité de trouver $-\hbar/2$ comme valeur mesurée.
5. Trouvez les valeurs propres et les vecteurs propres normalisés de l'opérateur $S_y = \frac{\hbar}{2}\sigma^2$, où $\sigma^2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$. On suppose de nouveau que $|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ et on mesure S_y au temps $t \neq 0$. Quelle est la probabilité que la valeur mesurée sera $\hbar/2$? Dans ce cas, dans quel état l'électron se trouvera-t-il juste après la mesure ?

TD 2 : Moment cinétique

Exercice 3 : Spin- $\frac{1}{2}$

- Vérifiez que les opérateurs $S_x = \frac{\hbar}{2}\sigma^1$, $S_y = \frac{\hbar}{2}\sigma^2$ et $S_z = \frac{\hbar}{2}\sigma^3$ vérifient les relations de commutation du moment cinétique,

$$[S_x, S_y] = i\hbar S_z, \quad [S_z, S_x] = i\hbar S_y, \quad [S_y, S_z] = i\hbar S_x.$$

- Donnez la matrice qui représente l'opérateur $\vec{S}^2 \equiv S_x^2 + S_y^2 + S_z^2$ et ses valeurs propres.

Exercice 4 : Spin-1

On donne les trois opérateurs

$$J_x = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad J_y = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad J_z = \hbar \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

- Montrez que $[J_x, J_y] = i\hbar J_z$.

De la même façon, on pourrait démontrer que les autres relations de commutation du moment cinétique sont vérifiées, mais ici il n'est pas demandé de le détailler.

- Calculez \vec{J}^2 et donnez ses valeurs propres.
- Trouvez les valeurs propres et les vecteurs propres normalisés de J_z . On désigne par $|1, m\rangle$ ces derniers, où $\hbar m$ est la valeur propre correspondante.
- Donnez J_+ et J_- . Vérifiez que $J_+|1, 1\rangle = 0$ et que l'action de J_- fait descendre l'échelle des vecteurs $|1, m\rangle$. Pour rappel, on s'attend que

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

On rappelle que les opérateurs du moment cinétique orbital $L_{x,y,z}$ peuvent être représentés, en coordonnées sphériques, par l'opérateur différentiel

$$\vec{L} = -i\hbar \vec{x} \wedge \vec{\nabla} = i\hbar \left(\left(\cos \phi \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} + \sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \vec{e}_x + \left(\sin \phi \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} - \cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \vec{e}_y - \frac{\partial}{\partial \phi} \vec{e}_z \right).$$

- Donnez L_+ et L_- . Trouvez la solution normalisée des deux équations différentielles $L_z Y_1^1(\theta, \phi) = \hbar Y_1^1(\theta, \phi)$ et $L_+ Y_1^1(\theta, \phi) = 0$, et vérifiez qu'il s'agit bien de la fonction $Y_1^1(\theta, \phi)$ du cours. Construisez les fonctions $Y_1^0(\theta, \phi)$ et $Y_1^{-1}(\theta, \phi)$ par l'action de L_- sur Y_1^1 .

TD 3 : Addition de moments cinétiques

Exercice 5 : Spin- l + spin- $\frac{1}{2}$

On considère un électron dans un potentiel central. Son moment cinétique intrinsèque, ou *spin*, est associé aux opérateurs $S_{x,y,z}$ formant une représentation de spin- $\frac{1}{2}$. Les vecteurs et valeurs propres correspondants vérifient alors

$$\vec{S}^2|+\rangle = \hbar^2 \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) |+\rangle, \quad \vec{S}^2|-\rangle = \hbar^2 \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) |-\rangle, \quad S_z|+\rangle = \frac{\hbar}{2}|+\rangle, \quad S_z|-\rangle = -\frac{\hbar}{2}|-\rangle.$$

Les opérateurs du moment cinétique orbital sont $L_{x,y,z}$. On suppose que l'électron est dans un état de nombre quantique du moment cinétique orbital $l \geq 1$, alors les vecteurs et valeurs propres vérifient

$$\vec{L}^2|l, m_l\rangle = \hbar^2 l(l+1) |l, m_l\rangle, \quad L_z|l, m_l\rangle = \hbar m_l |l, m_l\rangle.$$

On cherche les coefficients de Clebsch-Gordan pour passer de la base des états propres de S_z et L_z à la base des états propres de \vec{J}^2 et J_z , où $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ est l'opérateur du moment cinétique total :

$$|l \frac{1}{2}; j, m_j\rangle = \sum_{m_s = \pm \frac{1}{2}} \sum_{m_l = -l}^l |l \frac{1}{2}; m_l, m_s\rangle \underbrace{\langle l \frac{1}{2}; m_l, m_s | l \frac{1}{2}; j, m_j\rangle}_{\text{coeff. de C-G}} \quad \text{avec } |l \frac{1}{2}; m_l, m_s = \pm \frac{1}{2}\rangle \equiv |l, m_l\rangle \otimes |\pm\rangle.$$

1. Avec l'aide des valeurs propres connues de \vec{J}^2 et de J_z , donnez les expressions de $\vec{J}^2|l \frac{1}{2}; j, m_j\rangle$ et de $J_z|l \frac{1}{2}; j, m_j\rangle$.
2. Trouvez la dimension de l'espace de Hilbert de tous les états. Quels sont les spins j qui figurent dans la décomposition ? Vérifiez que

$$(\dim(\text{spin-}\frac{1}{2})) \times (\dim(\text{spin-}l)) = \sum_j (\dim(\text{spin-}j)).$$

3. Montrez que $\vec{J}^2 = \vec{L}^2 + \vec{S}^2 + L_+ S_- + L_- S_+ + 2L_z S_z$.
4. Vérifiez que $|l \frac{1}{2}; m_l = l, m_s = \frac{1}{2}\rangle = |l, l\rangle \otimes |+\rangle$ est un premier vecteur propre de \vec{J}^2 et de J_z et donnez ses valeurs propres. Deduisez-en la valeur d'un premier coefficient de Clebsch-Gordan.
5. Donnez l'expression de J_- . Rappelez-vous de l'action de L_- sur $|l, m_l\rangle$ et de S_- sur $|\pm\rangle$, afin de construire un deuxième vecteur propre de \vec{J}^2 et de J_z . Donnez ses valeurs propres. (En itérant cette procédure, on pourrait ainsi construire toute l'échelle.)
6. Identifiez un vecteur qui est orthogonal à ce deuxième vecteur propre et qui est également vecteur propre de \vec{J}^2 et de J_z . Donnez ses valeurs propres.

Par application répétée de J_- , il est possible de construire une deuxième échelle de vecteurs propres, et d'ainsi déduire les valeurs de tous les coefficients de Clebsch-Gordan.

Indications : On rappelle encore que $J_\pm|j, m\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} |j, m \pm 1\rangle$ (et similaire pour l'action de L_\pm et S_\pm sur les vecteurs propres respectifs). Vous pouvez comparer vos résultats avec la formule explicite de la décomposition de Clebsch-Gordan,

$$|l \frac{1}{2}; j = l \pm \frac{1}{2}, m_j\rangle = \pm \sqrt{\frac{l \pm m_j + \frac{1}{2}}{2l + 1}} |l \frac{1}{2}; m_l = m_j - \frac{1}{2}, m_s = \frac{1}{2}\rangle \\ + \sqrt{\frac{l \mp m_j + \frac{1}{2}}{2l + 1}} |l \frac{1}{2}; m_l = m_j + \frac{1}{2}, m_s = -\frac{1}{2}\rangle.$$