TD 1 : Équation de Schrödinger

Exercice 1 : Puits de potentiel

Une particule sans spin se déplace dans une dimension, avec le potentiel donné par

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

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 $\mathrm{H}\psi_n(x) = E_n\psi_n(x)$, et les niveaux d'énergie E_n correspondants.

1. Rendez-vous compte que la fonction d'onde doit s'annuler pour $x \leq 0$ et pour $x \geq L$. Puis, montrez que sur l'intervalle $[0, L]$, l'expression de la fonction d'onde des états stationnaires prend la forme

   $$\psi_n(x) = N_n \sin(k_n x)$$

   avec des constantes N_n et k_n que vous déterminerez. Donnez les énergies E_n correspondantes.
2. Montrez que $\langle\psi_n|\psi_m\rangle = \delta_{nm}$. Les $\{|\psi_n\rangle\}$ forment alors un système de vecteurs orthonormés, qui est en fait une base de l'espace de Hilbert de toutes les fonctions d'onde. Calculez les éléments de matrice $\langle\psi_n|\mathrm{P}|\psi_m\rangle$ de l'opérateur d'impulsion P 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 à deux composantes $|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$ avec $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$. On applique un champ magnétique homogène $\vec{B} = B\vec{e}_z$; ainsi l'opérateur hamiltonien est

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

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

TD 2 : Moment cinétique

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

1. Vérifiez que les opérateurs $\mathrm{S}_x = \frac{\hbar}{2}\sigma^1$, $\mathrm{S}_y = \frac{\hbar}{2}\sigma^2$ et $\mathrm{S}_z = \frac{\hbar}{2}\sigma^3$ vérifient les relations de commutation du moment cinétique,

$$[\mathrm{S}_x, \mathrm{S}_y] = i\hbar \mathrm{S}_z\,, \quad [\mathrm{S}_z, \mathrm{S}_x] = i\hbar \mathrm{S}_y\,, \quad [\mathrm{S}_y, \mathrm{S}_z] = i\hbar \mathrm{S}_x\,.$$

2. Donnez la matrice qui représente l'opérateur $\vec{\mathrm{S}}^2 \equiv \mathrm{S}_x^2 + \mathrm{S}_y^2 + \mathrm{S}_z^2$ et ses valeurs propres.

Exercice 4 : Spin-1

On donne les trois opérateurs

$$\mathrm{J}_x = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathrm{J}_y = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathrm{J}_z = \hbar \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

1. Montrez que $[\mathrm{J}_x, \mathrm{J}_y] = i\hbar \mathrm{J}_z$.

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.

2. Calculez $\vec{\mathrm{J}}^2$ et donnez ses valeurs propres.
3. 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.
4. Donnez J_+ et J_-. Vérifiez que $\mathrm{J}_+|1,1\rangle = 0$ et que l'action de J_- fait descendre l'échelle des vecteurs $|1, m\rangle$. Pour rappel :

$$\mathrm{J}_\pm |j, m\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)}\; |j, m \pm 1\rangle\,.$$

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

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

5. Donnez L_+ et L_-. Trouvez la solution normalisée des deux équations différentielles $\mathrm{L}_z Y_1^1(\theta, \phi) = \hbar Y_1^1(\theta, \phi)$ et $\mathrm{L}_+ Y_1^1(\theta, \phi) = 0$, 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 intinsèque, ou *spin*, est associé aux opérateurs $\mathrm{S}_{x,y,z}$ formant une représentation de spin-$\frac{1}{2}$. Les vecteurs et valeurs propres correspondants vérifient alors

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

Les opérateurs du moment cinétique orbital sont $\mathrm{L}_{x,y,z}$. 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

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

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 $\vec{\mathrm{J}}^2$ et J_z, où $\vec{\mathrm{J}} = \vec{\mathrm{L}} + \vec{\mathrm{S}}$ est l'opérateur du moment cinétique total :

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

1. Donnez les valeurs propres de $\vec{\mathrm{J}}^2$ et de J_z ; quelles sont donc les expressions de $\vec{\mathrm{J}}^2|l\,\frac{1}{2};\,j,m_j\rangle$ et de $\mathrm{J}_z|l\,\frac{1}{2};\,j,m_j\rangle$?
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
$$\big(\text{dim (spin-}\tfrac{1}{2})\big)\times(\text{dim (spin-}l)) = \sum_j (\text{dim (spin-}j))\,.$$
3. Montrez que $\vec{\mathrm{J}}^2 = \vec{\mathrm{L}}^2 + \vec{\mathrm{S}}^2 + \mathrm{L}_+\mathrm{S}_- + \mathrm{L}_-\mathrm{S}_+ + 2\mathrm{L}_z\mathrm{S}_z$.
4. Vérifiez que $|l\,\frac{1}{2};\,m_l=l,m_s=\frac{1}{2}\rangle = |l,l\rangle\otimes|+\rangle$ est vecteur propre de $\vec{\mathrm{J}}^2$ 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_-. Utilisez l'action connue de L_- sur $|l,m_l\rangle$ et de S_- sur $|\pm\rangle$ pour construire un deuxième vecteur propre de $\vec{\mathrm{J}}^2$ et de J_z et 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. Montrez qu'il est également vecteur propre de $\vec{\mathrm{J}}^2$ et de J_z et 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 $\mathrm{J}_\pm|j,m\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1)-m(m\pm1)}\,|j,m\pm1\rangle$ (et similaire pour l'action de $\mathrm{L}_\pm$ et $\mathrm{S}_\pm$ sur les vecteurs propres respectifs). Vous pouvez comparer vos résultats avec la formule explicite de la décomposition de Clebsch-Gordan,

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