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 $\mathsf{H}\psi_n(x) = E_n\psi_n(x)$, et les énergies E_n associées.

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. Puis, montrez que la fonction d'onde d'un état stationnaire prend la forme

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

   avec des constantes N_n et k_n que vous déterminerez. Donnez son énergie E_n.
3. Montrez que $\langle\psi_n|\psi_m\rangle = \delta_{nm}$. Les $\{|\psi_n\rangle\}$ sont alors orthonormés.
4. *Facultatif* : En fait, les $\{|\psi_n\rangle\}$ constituent une base orthonormée de l'espace de Hilbert. Donnez l'expression de l'opérateur différentiel d'impulsion P et calculez ses éléments de matrice $\langle\psi_n|\mathsf{P}|\psi_m\rangle$ dans cette base.

Exercice 2 : Système à deux niveaux

1. Avec l'aide de l'équation de Schrödinger dépendante du temps, montrez : si l'état d'un système physique au temps $t = 0$ est $|\psi_0\rangle$, alors son état à tout autre temps t peut s'écrire $|\psi_t\rangle = e^{-i\mathsf{H}t/\hbar}|\psi_0\rangle$, pourvu que l'opérateur hamiltonien H soit indépendant du temps.

On considère maintenant 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, $|\psi\rangle = \binom{\alpha}{\beta}$, avec $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$. Dans un champ magnétique uniforme $\vec{B}$, le hamiltonien est

$$\mathsf{H} = -\mu_B\, \vec{B}\cdot\vec{\sigma} = -\mu_B \left(B_x\sigma^1 + B_y\sigma^2 + B_z\sigma^3\right)\,, \qquad \mu_B = \text{const.}$$

2. Écrivez H explicitement sous forme d'une matrice et trouvez ses valeurs propres.

On choisit les coordonnées de façon que $\vec{B}$ est orienté en direction des z, $B_x = B_y = 0$.

3. Donnez la forme matricielle de l'opérateur $e^{-i\mathsf{H}t/\hbar}$. (Il convient de définir $\omega \equiv B_z\mu_B/\hbar$.)
4. On pose $|\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|+\rangle + |-\rangle\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\binom{1}{1}$. Donnez l'état $|\psi_t\rangle$ de l'électron au temps t.
5. Montrez que $|\psi_0\rangle$ est vecteur propre de l'observable $\mathsf{S}_x = \frac{\hbar}{2}\sigma^1$ et trouvez la valeur propre λ correspondante. Au temps t, on mesure S_x. Quelle est la probabilité que la valeur de mesure obtenue sera λ ?

TD 2 : Moment cinétique

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

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

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

2. Donnez la matrice qui représente l'opérateur $\vec{\mathsf{S}}^2 \equiv \mathsf{S}_x^2 + \mathsf{S}_y^2 + \mathsf{S}_z^2$ et ses valeurs propres.
3. Donnez les matrices S_+ et S_-. Vérifiez que $\mathsf{S}_-|+\rangle = \hbar|-\rangle$ et que $\mathsf{S}_-|-\rangle = 0$.

Exercice 4 : Spin-1

On donne les trois opérateurs

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

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

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 $\vec{\mathsf{J}}^2$ 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 $\mathsf{J}_+|1,1\rangle = 0$ et que l'action de J_- fait descendre l'échelle des vecteurs $|1, m\rangle$. Pour rappel, on s'attend que

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

5. *Facultatif* : Calculez $(\mathsf{J}_x/\hbar)^2$, puis $(\mathsf{J}_x/\hbar)^{2n}$ et $(\mathsf{J}_x/\hbar)^{2n+1}$ pour tout $n \in \mathbb{N}$. Soit α_x un nombre réel ; quelle est la transformation qui correspond à la matrice $\exp(i\alpha_x\,\mathsf{J}_x/\hbar)$? De même pour $\mathsf{J}_y/\hbar$ et $\mathsf{J}_z/\hbar$. Toutes ensemble, les matrices $\exp(i\alpha_x\,\mathsf{J}_x/\hbar)$, $\exp(i\alpha_y\,\mathsf{J}_y/\hbar)$ et $\exp(i\alpha_z\,\mathsf{J}_z/\hbar)$ engendrent quelles transformations ?

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

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

6. *Facultatif* : Donnez L_+ et L_-. Trouvez la solution générale des deux équations différentielles $\mathsf{L}_z Y_1^1(\theta,\phi) = \hbar Y_1^1(\theta,\phi)$ et $\mathsf{L}_+ Y_1^1(\theta,\phi) = 0$ et vérifiez ainsi que, si on choisit la bonne normalisation, 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 spin est associé aux opérateurs $\mathsf{S}_{x,y,z}$ formant une représentation de spin-$\frac{1}{2}$, tant que son moment cinétique orbital est associé aux opérateurs $\mathsf{L}_{x,y,z}$ formant une représentation de spin-l avec $l \in \mathbb{N}$. On supposera que $l \geq 1$.

1. Rappelez les valeurs propres de $\vec{\mathsf{L}}^2$ et de $\vec{\mathsf{L}}_z$, ainsi que celles de $\vec{\mathsf{S}}^2$ et de S_z.

On désigne par $|l, m_l\rangle$ et $|\pm\rangle$ les états propres correspondants.

2. Soient $\mathsf{J}_{x,y,z}$ les opérateurs du moment cinétique total, $\vec{\mathsf{J}} = \vec{\mathsf{L}} + \vec{\mathsf{S}}$. Les $\vec{\mathsf{J}}$ contiennent deux représentations irréductibles de spins différents ; quels sont les nombres quantiques j correspondants ? Donnez les valeurs propres possibles de $\vec{\mathsf{J}}^2$ et de J_z.
3. On rappelle que $\mathsf{L}_\pm = \mathsf{L}_x \pm i\mathsf{L}_y$ et que $\mathsf{S}_\pm = \mathsf{S}_x \pm i\mathsf{S}_y$. Montrez que $\vec{\mathsf{J}}^2 = \vec{\mathsf{L}}^2 + \vec{\mathsf{S}}^2 + \mathsf{L}_+\mathsf{S}_- + \mathsf{L}_-\mathsf{S}_+ + 2\,\mathsf{L}_z\mathsf{S}_z$.
4. Avec le résultat de question 3, donnez les actions de $\vec{\mathsf{J}}^2$ et de J_3 sur l'état produit $|l, m_l = l\rangle \otimes |+\rangle$. Deduisez-en les coefficients de Clebsch-Gordan $\langle l\,\frac{1}{2};\, m_l, m_s | l\,\frac{1}{2};\, j = l + \frac{1}{2}, m_j = l + \frac{1}{2}\rangle$ pour tous les m_l et m_s.

   Indications : Pour rappel, ici $|l\,\frac{1}{2};\, m_l, m_s\rangle$ est un état produit, plus précisément $|l\,\frac{1}{2};\, m_l, m_s = \pm\frac{1}{2}\rangle \equiv |l, m_l\rangle \otimes |\pm\rangle$. En revanche, $|l\,\frac{1}{2};\, j, m_j\rangle$ est un état propre de $\vec{\mathsf{J}}^2$ et de J_z. La définition des coefficients de Clebsch-Gordan est

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

   Utilisez les propriétés connues des opérateurs d'échelle ; par exemple, rappelez-vous comment l'opérateur S_+ agit sur l'état $|+\rangle$.

Exercice 6 : Spin-2 + spin-$\frac{1}{2}$ + spin-$\frac{1}{2}$

On cosidère un atome ou ion avec un seul électron de moment cinétique orbital $l = 2$.

1. Quels sont les possibles nombres quantiques j du moment cinétique total de l'électron ? Quelles sont les possibles valeurs de m_j associées ?
2. Supposons que le noyau possède le spin $\frac{1}{2}$. On définit le moment cinétique total du système comme

$$\vec{\mathsf{K}} = \vec{\mathsf{J}} + \vec{\mathsf{I}}$$

   où $\vec{\mathsf{J}}$ est le moment cinétique total de l'électron et $\vec{\mathsf{I}}$ est le spin du noyau. Quelles sont les possibles valeurs des nombres quantiques k et m_k correspondants ?
3. Vérifiez que le nombre de vecteurs de base est la même, qu'on regarde la base des états produit ou celle des vecteurs propres de $\vec{\mathsf{K}}^2$ et de K_z.