Particule sur un fil circulaire

1) Particule libre, donc

$$\hat{H} = \frac{p^2}{2m} \qquad \text{avec} \quad \hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$$

or $x = r\varphi$ avec $\varphi \in [0, 2\pi[$

et $\hat{L}_z = -i\hbar \frac{d}{d\varphi}$: moment angulaire

donc
$$\hat{H} = \frac{1}{2m}(-\hbar^2)\frac{d^2\cdot}{dx^2} = \frac{1}{2mr^2}(-\hbar^2)\frac{d^2\cdot}{d\varphi^2}$$
$$= \frac{L_z^2}{2I}$$

avec $I = mr^2$: moment d'inertie

2) Si $\psi_n(\varphi) = e^{in\varphi}$, $n \in \mathbb{Z}$, est un mode de Fourier (fonction 2π périodique)

alors
$$\hat{H}\psi_n = +\frac{\hbar^2}{2I} n^2 \psi_n = E_n \psi_n$$

avec
$$E_n = \frac{\hbar^2}{2I} n^2$$
: niveau d'énergie de multiplicité 2 si $n \neq 0$ (car $\pm n$ donnent le m̂ E_n)

3) Soit $E \in \mathbb{R}$.

On considère l'espace de phase avec les coordonnées canoniques $\varphi \in [0, 2\pi[$, $L_z \in \mathbb{R}$ et le Hamiltonien classique $H(\varphi, L) = \frac{L_z^2}{2I}$

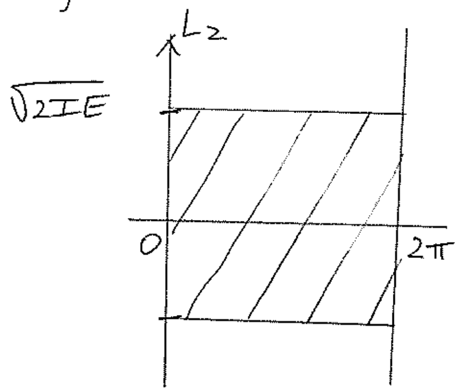
On a $\quad H(\varphi, L_z) \leq E$

$$\iff \frac{L_z^2}{2I} \leq E \text{ et } \varphi \in [0, 2\pi[$$

$$\iff |L_z| \leq \sqrt{2IE} \text{ et } \varphi \in [0, 2\pi[$$

donc $S =$ Surface $\{$ états (φ, L_z) d'énergie $\leq E\} = 2\pi \times 2\sqrt{2IE}$

et d'après la loi de Weyl,



$$N \approx \frac{S}{2\pi\hbar} = \frac{2\sqrt{2IE}}{\hbar}$$

Inversement cela donne :

$$E_N \approx \left(\frac{N\hbar}{2}\right)^2 \frac{1}{2I} = \frac{\hbar^2}{2I}\left(\frac{N}{2}\right)^2$$

on retrouve le résultat exact obtenu en 1), en tenant compte du fait que nombre d'états $N \approx 2n$ à cause de la multiplicité 2.

Atome à deux niveaux et perturbation Harmonique

1) On pose $\psi(t) = c_a(t)\, e^{-iE_a t/\hbar}\, \psi_a + c_b(t)\, e^{-iE_b t/\hbar}\, \psi_b$

qui vérifie l'équ. de Schrödinger :

(*) $$\frac{d\psi}{dt} = \frac{-i}{\hbar}\, \hat{H}\psi$$

avec $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_p(t)$

$\hat{H}_0 \equiv \begin{pmatrix} E_a & 0 \\ 0 & E_b \end{pmatrix}$ dans base ψ_a, ψ_b

$\hat{H}_p(t) = A\, e^{i\omega t} + A^+ e^{-i\omega t}$

donc (*)

$$\Longleftrightarrow \quad \dot{c}_a\, e^{-iE_a t/\hbar}\psi_a - \cancel{\frac{iE_a}{\hbar}\, c_a\, e^{-iE_a t/\hbar}\, \psi_a}$$

$$+ \dot{c}_b\, e^{-iE_b t/\hbar}\psi_b - \cancel{i\frac{E_b}{\hbar}\, c_b\, e^{-iE_b t/\hbar}\, \psi_b}$$

$$= \left(\frac{-i}{\hbar}\right)\Big(\cancel{c_a\, e^{-iE_a t/\hbar}\, E_a\psi_a} + \cancel{c_b\, e^{-iE_b t/\hbar}\, E_b\psi_b}$$

$$+ c_a\, e^{-iE_a t/\hbar}\, \hat{H}_p\, \psi_a$$

$$+ c_b\, e^{-iE_b t/\hbar}\, \hat{H}_p\, \psi_b$$

- On multiplie par $\langle \psi_a |$ et on obtient :

$$\dot{c}_a e^{-iE_a t/\hbar} = \frac{-i}{\hbar}\Big(c_a e^{-iE_a t/\hbar} \langle \psi_a | H_p \psi_a \rangle + c_b e^{-iE_b t/\hbar} \langle \psi_a | H_p \psi_b \rangle \Big)$$

$$\Longleftrightarrow i\hbar \dot{c}_a = \Big(c_a \cdot \langle \psi_a | H_p \psi_a \rangle + c_b e^{-i\omega_{ba} t} \langle \psi_a | H_p \psi_b \rangle \Big)$$

et de même,

$$i\hbar \dot{c}_b = \Big(c_a e^{+i\omega_{ba} t} \langle \psi_b | H_p \psi_a \rangle + c_b \langle \psi_b | H_p \psi_b \rangle \Big)$$

2

$$\langle \psi_a | H_p \psi_b \rangle = e^{i\omega t} \langle \psi_a | A \psi_b \rangle + e^{-i\omega t} \langle \psi_a | A^+ \psi_b \rangle$$

$$= e^{i\omega t} A_{ab} + e^{-i\omega t} A^+_{ab}$$

etc.

donc

$$i\hbar \dot{c}_a = c_a \left(e^{i\omega t} A_{aa} + e^{-i\omega t} A^+_{aa} \right) + c_b e^{-i\omega_{ba} t} \left(e^{i\omega t} A_{ab} + e^{-i\omega t} A^+_{ab} \right)$$

$$= c_a \left(e^{i\omega t} A_{aa} + e^{-i\omega t} A^+_{aa} \right) + c_b e^{i\Delta\omega t} A_{ab} + c_b e^{-i(\omega_{ba}+\omega)t} A^+_{ab}$$

Si on néglige les termes haute fréquence, il reste

$$\boxed{i\hbar \dot{c}_a \approx c_b e^{i\Delta\omega t} A_{ab}}$$

avec $\Delta\omega := \omega - \omega_{ba}$

De même

$$i\hbar\,\dot{c}_b = c_a\, e^{i\omega_{ba}t}\left(e^{i\omega t}A_{ba} + e^{-i\omega t}A^+_{ba}\right)$$
$$+\, c_b\left(e^{i\omega t}A_{bb} + e^{-i\omega t}A^+_{bb}\right)$$

donnant

$$i\hbar\,\dot{c}_b \simeq c_a\, e^{-i\Delta\omega t} A^+_{ba}$$

$$\boxed{i\hbar\,\dot{c}_b = c_a\, e^{-i\Delta\omega t}\,\overline{A_{ab}}}$$

car $A^+_{ba} = \langle \psi_b | A^+ \psi_a\rangle = \langle A\psi_b|\psi_a\rangle$
$= \overline{\langle \psi_a | A\psi_b\rangle} = \overline{A_{ab}}$

Pour justifier que l'on néglige les termes très oscillants, on peut dire que en moyenne, leur effet est nul. (théorème de la moyennisation)

Par exemple $\dot{x} = e^{i\omega t}\cdot x$

donne $x(t) = C\cdot\exp\left(\frac{1}{i\omega}e^{i\omega t}\right)$
$$= C\, e^{-i\omega\cos(\omega t)}\,\underbrace{e^{\frac{1}{\omega}\sin(\omega t)}}_{\longrightarrow 0 \text{ si } \omega\to\infty}$$

$\longrightarrow 0$ si $\omega \longrightarrow \infty$.

c'est aussi appelé l'approximation séculaire.

Ref : Cohen Tan. Complément C_{XIII}

(3) On va résoudre les équations linéaires mais dépendant de t

$$\begin{cases} \dot{c}_a = c_b \; C \; e^{i\Delta\omega t} \\ \dot{c}_b = -c_a \; \overline{C} \; e^{-i\Delta\omega t} \end{cases}$$ avec $C := -\dfrac{iA_{ab}}{\hbar}$

Posons le changement de variable :

$$\begin{cases} x := c_a \, e^{-i\Delta\omega t/2} \\ y := c_b \, e^{i\Delta\omega t/2} \end{cases}$$

alors $$\dot{x} = \dot{c}_a \, e^{-i\Delta\omega t/2} - i\frac{\Delta\omega}{2} \, c_a \, e^{-i\Delta\omega t/2}$$

$$= C \, y - i\frac{\Delta\omega}{2} \, x$$

$$\dot{y} = \dot{c}_b \, e^{i\Delta\omega t/2} + i\frac{\Delta\omega}{2} \, c_b \, e^{i\Delta\omega t/2}$$

$$= -\overline{C} \, x + i\frac{\Delta\omega}{2} \, y$$

qui sont linéaires et indép^t de t.

Posons $X = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$

alors $\dot{X} = M X$

avec la matrice $M = \begin{pmatrix} -i\dfrac{\Delta\omega}{2} & C \\ -\overline{C} & i\dfrac{\Delta\omega}{2} \end{pmatrix}$

On diagonalise $M = P\ D\ P^{-1}$ (logiciel xcas)

avec $$D = \begin{pmatrix} \frac{i}{2}\Omega & 0 \\ 0 & -\frac{i}{2}\Omega \end{pmatrix},$$

$$P = \begin{pmatrix} -i\Delta\omega + i\Omega & -i\Delta\omega - i\Omega \\ -2\,\overline{C} & -2\,\overline{C} \end{pmatrix}$$

$$P^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2i\Omega} & \frac{-i\Delta\omega - i\Omega}{4\,\overline{C}\,i\Omega} \\ -\frac{1}{2i\Omega} & \frac{i\Delta\omega - i\Omega}{4\,\overline{C}\,i\Omega} \end{pmatrix}$$

avec $$\Omega = \left(4|C|^2 + (\Delta\omega)^2\right)^{1/2}$$

On pose $Y := P^{-1}X = \begin{pmatrix} Y_1 \\ Y_2 \end{pmatrix}$

alors $\dot{Y} = D\,Y$

qui se résoud : $$\begin{cases} Y_1(t) = Y_1(0) \cdot e^{\frac{i}{2}\Omega t} \\ Y_2(t) = Y_2(0)\, e^{-\frac{i}{2}\Omega t} \end{cases}$$

donc $X(t) = P \cdot Y(t)$ donne

$$\begin{cases} x = i \cdot (\Omega - \Delta\omega)\, Y_1 - i(\Omega + \Delta\omega)\, Y_2 \\ y = -2\overline{C}\,(Y_1 + Y_2) \end{cases}$$

et donc

$$\begin{cases} c_a = x\, e^{i\Delta\omega\, t/2} = e^{i\Delta\omega \frac{t}{2}}\, i\left((\Omega-\Delta\omega)e^{\frac{i}{2}\Omega t}\, Y_1(0) - (\Omega+\Delta\omega)e^{-\frac{i}{2}\Omega t}\, Y_2(0)\right) \\ c_b = y\, e^{-i\Delta\omega\, t/2} = e^{-i\Delta\omega \frac{t}{2}} \left(\frac{-2i\bar{A}_{ab}}{\hbar}\right)\left(e^{\frac{i}{2}\Omega t}\, Y_1(0) + e^{-\frac{i}{2}\Omega t}\, Y_2(0)\right) \end{cases}$$

<u>La condition initiale</u> $c_a(0) = 1$, $c_b(0) = 0$

donne :

$$\begin{cases} c_a(0) = 1 = i\left((\Omega-\Delta\omega)\,Y_1(0) - (\Omega+\Delta\omega)\,Y_2(0)\right) \\ c_b(0) = 0 = \left(\frac{-2i\bar{A}_{ab}}{\hbar}\right)\left(Y_1(0) + Y_2(0)\right) \end{cases}$$

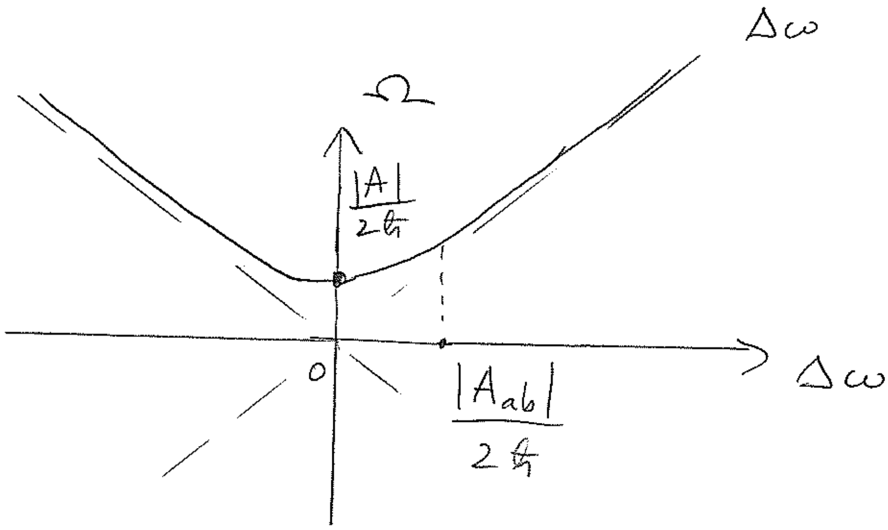
donc $Y_2(0) = -Y_1(0) = \dfrac{i}{2\Omega}$

donc

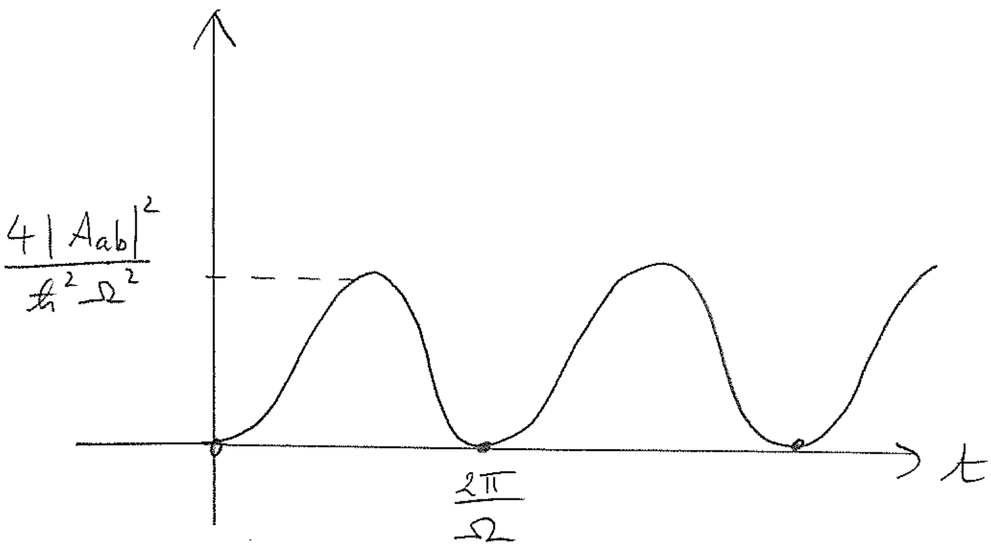
$$(*)\begin{cases} c_a(t) = \frac{1}{2\Omega}\, e^{i\Delta\omega\frac{t}{2}}\left[(\Omega-\Delta\omega)e^{\frac{i}{2}\Omega t} + (\Omega+\Delta\omega)e^{-\frac{i}{2}\Omega t}\right] \\ \quad = e^{i\Delta\omega\frac{t}{2}}\left[\cos\left(\frac{\Omega}{2}t\right) - i\,\frac{\Delta\omega}{\Omega}\sin\left(\frac{\Omega}{2}t\right)\right] \\ c_b(t) = \frac{-2i\bar{A}_{ab}}{\hbar}\, e^{-i\Delta\omega\frac{t}{2}}\left(e^{\frac{i}{2}\Omega t} - e^{-\frac{i}{2}\Omega t}\right)\left(\frac{-i}{2\Omega}\right) \\ \quad = \frac{-2i\bar{A}_{ab}}{\hbar\,\Omega}\, e^{-i\Delta\omega\frac{t}{2}}\sin\left(\frac{\Omega t}{2}\right) \end{cases}$$

et $\Omega = \left(4|C|^2 + (\Delta\omega)^2\right)^{1/2} = \left(\dfrac{4|A_{ab}|^2}{\hbar^2} + (\Delta\omega)^2\right)^{1/2}$

③



$$P_{ba}(t) = |c_b(t)|^2 = \frac{4\,|A_{ab}|^2}{\hbar^2\,\Omega^2}\sin^2\left(\Omega\frac{t}{2}\right)$$



(4) En théorie des perturbations, on a à l'ordre 1

$$P^{(1)}_{ba}(t) = \frac{1}{\hbar^2}\left|\int_0^t e^{i\omega_{ba}t'} H_{b,a}(t')\,dt'\right|$$

avec

$$H_{b,a}(t') = e^{i\omega t} A_{ba} + e^{-i\omega t} A^{+}_{ba}$$
$$= e^{i\omega t} A_{ba} + e^{-i\omega t} \overline{A_{ba}}$$
$$= e^{i\omega t} A_{ab} + e^{-i\omega t} \overline{A_{ab}}$$

(car $H_{b,a} = H_{a,b}$).

donne (voir cours) avec $\Omega_{\pm} := \omega_{ba} \pm \omega$,

$$P^{(1)}_{ba}(t) = \frac{1}{\hbar^2}\left| A_{ab}\,\frac{e^{i\Omega_+ t-1}}{\Omega_+} + \overline{A_{ab}}\,\frac{e^{i\Omega_- t}-1}{\Omega_-}\right|^2$$

si $\omega_{ab}\cdot t \gg 1$ (t assez grand)

et si $|\Delta\omega = \omega - \omega_{ba}| \ll \omega$ alors

$$P^{(1)}_{ba}(t) \simeq \frac{|A_{ab}|^2}{\hbar^2}\left|\frac{e^{i\Omega_- t}-1}{\Omega_-}\right|^2 = \frac{|A_{ab}|^2}{\hbar^2}\left|\frac{e^{-i\Delta\omega t}-1}{(-\Delta\omega)}\right|^2$$

$$= \frac{|A_{ab}|^2}{\hbar^2}\,\frac{4\sin^2\left(\frac{\Delta\omega t}{2}\right)}{\Delta\omega^2} \quad (\text{si } \Delta\omega \neq 0)$$

c'est semblable à (3) sauf que il y a $\Delta\omega$ au lieu de Ω. Mais en théorie des perturbations, on suppose $|A_{ab}| \ll \hbar\,\Delta\omega$ donc $\Omega \simeq \Delta\omega$, en effet.

Addition de Moments cinétiques

1. Il faut coupler le spin $\frac{1}{2}$ de l'électron à l'état $l=1$ orbital.

- L'espace de spin $\frac{1}{2}$ est $D_{1/2}$ de dim 2,

  de base : $|+\rangle, |-\rangle$,

  Opérateurs:

$$S_+|+\rangle = 0, \quad S_+|-\rangle = |+\rangle$$
$$S_-|+\rangle = |-\rangle, \quad S_-|-\rangle = 0$$
$$S_z|+\rangle = \frac{1}{2}|+\rangle, \quad S_-|-\rangle = -\frac{1}{2}|-\rangle$$

- L'espace de spin 1 est D_1 de dim 3,

  de base $|-1\rangle, |0\rangle, |1\rangle$

  opérateurs :

$$L_+|-1\rangle = \sqrt{2}\,|0\rangle \qquad L_-|-1\rangle = 0$$
$$L_+|0\rangle = \sqrt{2}\,|1\rangle \qquad L_-|0\rangle = \sqrt{2}\,|-1\rangle$$
$$L_+|1\rangle = 0 \qquad L_-|1\rangle = \sqrt{2}\,|0\rangle$$

$$L_z|-1\rangle = -|-1\rangle, \quad L_z|0\rangle = 0 \quad L_z|1\rangle = |1\rangle$$

- Espace total : $\mathcal{H} = D_{1/2} \otimes D_1$ de dim : $2 \times 3 = 6$

  base : $|\pm\rangle \otimes |m\rangle$, $m = 1,2,3$, noté $|\pm, m\rangle$

Moment cinétique total :

$$\vec{J} = \vec{S} + \vec{L}$$

$$\vec{J}^2 = (\vec{S} + \vec{L})^2 = \vec{S}^2 + \vec{L}^2 + (S_+ L_- + S_- L_+ + 2 S_z L_z)$$

$$= \frac{3}{4} + 2 + S_+ L_- + S_- L_+ + 2 S_z L_z$$

L'état $|+, 1\rangle$ est maximal car :

$$J_z |+,1\rangle = S_z |+,1\rangle + L_z |+,1\rangle$$

$$= \left(\frac{1}{2} + 1\right) |+,1\rangle = \frac{3}{2} |+,1\rangle$$

et $$\vec{J}^2 |+,1\rangle = \left(\frac{3}{4} + 2 + 2 \cdot \frac{1}{2} \cdot 1\right) |+,1\rangle$$

$$= \frac{3}{2}\left(\frac{3}{2} + 1\right) |+,1\rangle$$

c'est un état de spin $J = \frac{3}{2}, M = \frac{3}{2}$

$$\left|\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right\rangle = |+,1\rangle$$

(2) On applique l'opérateur $J_- = S_- + L_-$ à l'état de poids maximal $|+,1\rangle$ et on normalise le résultat.

$$\left|\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle \propto J_- \left|\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right\rangle = S_- |+,1\rangle + L_- |+,1\rangle$$

$$= |-,1\rangle + \sqrt{2}\, |+,0\rangle \propto \frac{1}{\sqrt{3}} |-,1\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}\, |+,0\rangle \text{ : normalisé}$$

$$\left|\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle \propto J_- \left|\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle \propto \sqrt{2}\, |-,0\rangle + \sqrt{2}\, |-,0\rangle + 2\, |+,-1\rangle$$

$$= 2\sqrt{2}\, |-,0\rangle + 2\, |+,-1\rangle \propto \sqrt{\frac{2}{3}}\, |-,0\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} |+,-1\rangle$$

$$\left|\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\right\rangle \propto J_- \left|\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle \propto 2\, |-,-1\rangle + 4\, |-,-1\rangle = 6\, |-,-1\rangle$$

$$\propto |-,-1\rangle$$

. Ensuite on cherche les états de spin total $J = \frac{1}{2}$.
$(= 1 - \frac{1}{2})$

Pour cela on considère un vecteur orthogonal aux précédents :

$$\psi = \sqrt{2}\,|-,1\rangle - |+,0\rangle \qquad \text{(non normalisé)}$$

on a $J_z \psi = \frac{1}{2}\psi$ donc $M = \frac{1}{2}$

$$\vec{J}^2 \psi = \left(\frac{3}{4} + 2\right)\psi + 2\,|+,0\rangle - \sqrt{2}\,|-,1\rangle$$

$$+ 2\sqrt{2}\left(-\frac{1}{2}\right)|-,1\rangle$$

$$= \left(\frac{3}{4} + 2\right)\psi + 2\left(|+,0\rangle - \sqrt{2}\,|-,1\rangle\right)$$

$$= \left(\frac{3}{4} + 2 - 2\right)\psi = \frac{3}{4}\psi = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2} + 1\right)\psi$$

donc $J = \frac{1}{2}$.

donc $\left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}\,|-,1\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}\,|+,0\rangle$ (normalisé)

on applique J_- :

$$\left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle \propto J_-\left(\sqrt{2}\,|-,1\rangle - |+,0\rangle\right)$$

$$= -|-,0\rangle + 2\,|-,0\rangle - \sqrt{2}\,|+,-1\rangle$$

$$= |-,0\rangle - \sqrt{2}\,|+,-1\rangle$$

$$\propto \frac{1}{\sqrt{3}}\,|-,0\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}}\,|+,-1\rangle \quad : \text{normalisé.}$$

On a obtenu les 6 états de la forme $|J, M\rangle$.

avec $J = \frac{3}{2}, \frac{1}{2}$, $M = -J \to +J$.