Université Joseph Fourier. Grenoble. Master 1, Physique, 2012-13
Examen Mécanique Quantique, janvier 2013.

Durée 3h00. Documents interdits. Calculatrice autorisée. 1 feuille manuscrite autorisée. Le barème est indiqué entre parenthèses. L'examen est noté sur 20, mais il y a 26 points dans ce sujet, cela vous permet de choisir les questions. Le signe ($\star$) signifie que le problème peut être traité à cet endroit sans avoir nécessairement résolu les questions qui précèdent. **Encadrer les résultats demandés.**

1 Polarisation de la lumière

(Ref: Blum, p.29, Born-Wolf p.31) En mécanique classique, une onde plane électromagnétique se déplaçant selon l'axe z est caractérisée par le champ électrique dans le plan (x, y) qui s'écrit:

$$E_x(z,t) = \mathrm{Re}\left(A.e^{i(kz-\omega t)}\right), \quad E_y(z,t) = \mathrm{Re}\left(B.e^{i(kz-\omega t)}\right), \qquad k,\omega > 0 \tag{1.1}$$

avec des amplitudes fixées $A, B \in \mathbb{C}$ que l'on appelle "amplitude de polarisation". On rappelle que $\lambda = \frac{2\pi}{k}$ est la longueur d'onde et $c = \frac{\omega}{k}$ est la "vitesse de la lumière".

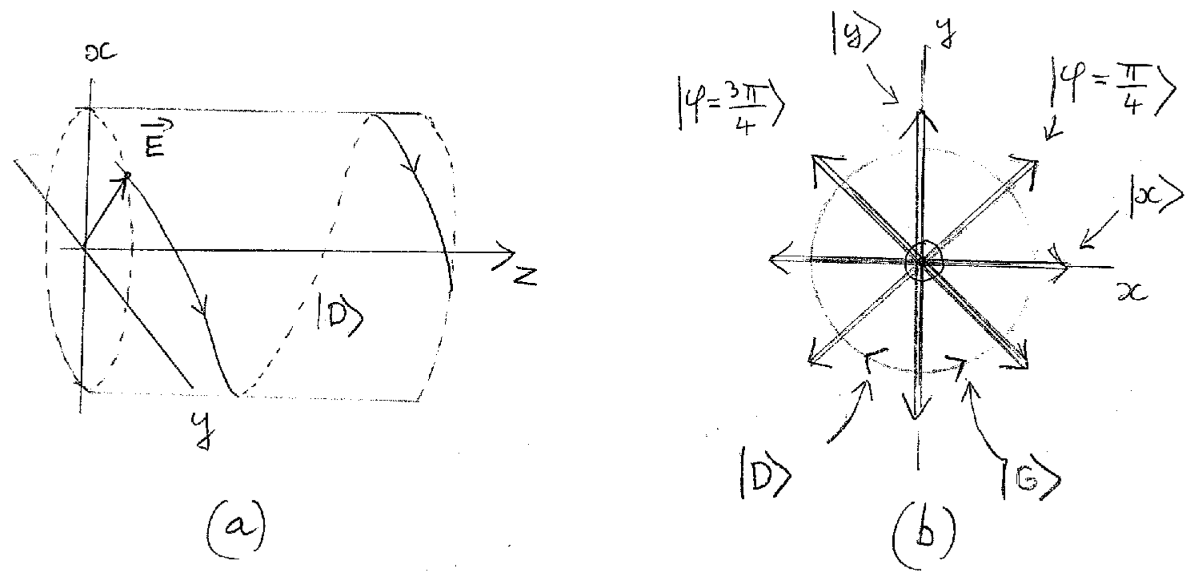

Figure 1.1: (a) Schéma de $\vec{E}(z,t)$ à t fixé, z croissant, pour l'état de polarisation $|D\rangle$. (b): les flèches montrent le mouvement de $\vec{E}(z,t)$ à z fixé et t croissant pour différents états de polarisation.

1. **(1)** La figure 1.1(b) montre 6 états de polarisation particuliers notés:
   $|D\rangle$ (:polarisation droite), $|G\rangle$ (:polar. gauche),$|x\rangle$,$|y\rangle$,$|\varphi = \frac{\pi}{4}\rangle$, $|\varphi = \frac{3\pi}{4}\rangle$ (:polar. rectilignes).
   Associer à chacun d'eux les amplitudes de polarisation (A, B) parmi la liste suivante
   $(1,0), (0,1), (\cos\varphi, \sin\varphi), \frac{1}{\sqrt{2}}(1,i), \frac{1}{\sqrt{2}}(1,-i)$.

2. **(1)** Changement de base: un état de polarisation (A, B) peut s'exprimer dans la base $|D\rangle, |G\rangle$ comme combinaison linéaire $a|D\rangle + b|G\rangle$ avec des amplitudes $(a,b) \in \mathbb{C}^2$ obtenues par $\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}$ où M est une matrice 2×2. Donner l'expression de M et de M^{-1}. Déduire les amplitudes (a,b) des 6 états de polarisation de la question 1.

3. ($\star$)**(2)** En mécanique quantique, un état quantique élémentaire de l'onde plane (1.1) est appelé "photon". Comme pour une onde plane, l'état de polarisation du photon est caractérisé par ses amplitudes $(a,b) \in \mathbb{C}^2$ relativement à la base $|D\rangle, |G\rangle$ et peut se noter

$$|\psi\rangle = a|D\rangle + b|G\rangle \equiv (a,b)$$

On note

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

les matrices de Pauli. Calculer les valeurs moyennes

$$p_1 = \frac{\langle\psi|\sigma_1|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}, \quad p_2 = \frac{\langle\psi|\sigma_2|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}, \quad p_3 = \frac{\langle\psi|\sigma_3|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle},$$

et les exprimer en fonction des nombres complexe $z = a/b$ et $\overline{z}$ seulement. Note: en optique, le vecteur $\vec{p} := (p_1, p_2, p_3) \in \mathbb{R}^3$ s'appelle **"paramètres de Stokes de la polarisation"**.

4. **(1)** Montrer que le vecteur $\vec{p}$ est sur une sphère S^2 de rayon 1, appelée **sphère de Poincaré**[1] (ou sphère de Riemann[2]).

5. **(1)** Calculer $\vec{p}$ pour les 6 états particuliers de la question 1 et les représenter sur la sphère de Poincaré.

6. **(1)** Sur la sphère, on effectue la transformation exprimée en coordonnées sphériques par

$$\vec{p} \equiv (\theta, \varphi) \to \vec{P} \equiv \left(\theta, \frac{1}{2}\varphi\right)$$

et on appelle $\vec{P}$ la **représentation de Penrose de l'état de polarisation**[3]. Dessiner la représentation de Penrose $\vec{P}$ des 6 états particuliers de la question 1. Pour un état $\vec{P}$ quelconque, l'intersection du plan orthogonal au vecteur $\vec{P}$ avec la sphère S^2 est un cercle orienté. Sa projection sur le plan $(P_1, P_2, P_3 = 0)$ est une ellipse orientée. Représenter cette ellipse pour les 6 états de la question 1 et comparer à la figure 1.1. Conclusion?

7. $(\star)$**(2)** Pour un mélange statistique d'états quantique de polarisation, on note $\hat{\rho}$ la matrice densité 2×2. Montrer que $\hat{\rho}$ peut s'écrire

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2}\left(\mathrm{Id} + \vec{p}.\hat{\vec{\sigma}}\right)$$

et est caractérisé par le vecteur $\vec{p} \in \mathbb{R}^3$ appelé vecteur de polarisation de Stokes et $\hat{\vec{\sigma}} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ les matrices de Pauli. Montrer que $\vec{p}$ coincide avec le vecteur $\vec{p}$ (paramètres de Stokes) de la question 3 qui correspondait au cas particulier d'un état pur $\hat{\rho} = \frac{|\psi\rangle\langle\psi|}{\langle\psi|\psi\rangle}$. Aide: $\sigma_1^2 = 1$,$\sigma_1\sigma_2 = i\sigma_3$,$\sigma_2\sigma_1 = -i\sigma_3$.

8. $(\star)$**(2)** On considère un faisceau lumineux, pas forcément polarisé, d'intensité I. On note $I(\varphi)$ l'intensité du faisceau mesuré après un filtre polarisant rectiligne disposé selon l'angle φ. De même on note I_D, I_G l'intensité du faisceau mesuré respectivement après des filtres droite/gauche. Exprimer le vecteur polarisation $\vec{p}$ à partir de $I, I(0), I\left(\frac{\pi}{2}\right), I\left(\frac{\pi}{4}\right), I\left(\frac{3\pi}{4}\right), I_D, I_G$.

---

[1] Poincaré "Théorie mathématique de la lumière" chap.12, 1892. Il s'agit de l'espace projectif $\mathbb{P}\left(\mathbb{C}^2\right) \equiv S^2$.

[2] Si M est un point sur la sphère, On place le plan complexe $\mathbb{C}$, sous la sphère, tangent au pôle sud. On considère la droite passant par le pôle nord et M. Elle intersecte $\mathbb{C}$ au point z. On dit alors que $z \in \mathbb{C}$ est **la coordonnée stéréographique** du point M.

[3] Ref: Penrose "les lois de la physique"

2 Corrections fines au spectre de l'atome d'hydrogène

(ref: Parisi p.425, Izitkson-Zuber p.72, Stenberg p.190, Bransden p.370). On note $\vec{x} = (x, y, z) \in \mathbb{R}^3$ la position d'un électron (notant aussi (r, θ, φ) ses coordonnées sphériques), et $\vec{p} = (p_x, p_y, p_z)$ son impulsion. Le modèle non relativiste de l'atome d'hydrogène est l'opérateur Hamiltonien suivant qui décrit la dynamique d'un électron autour d'un proton:

$$\hat{H}_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r} \tag{2.1}$$

On rappelle que son spectre discret est$\hat{H}_0 \psi_{n,l,m} = E_n^{(0)} \psi_{n,l,m}$ avec les indices $n = 1, 2, 3 \ldots$, $l = 0, 1, \ldots, n-1$, $m = -l, \ldots, +l$.
Les fonctions propres sont $\psi_{n,l,m}(\vec{x}) = R_{n,l}(r)\, Y_{l,m}(\theta, \varphi)$ et les niveaux énergies:

$$E_n^{(0)} = -\frac{\varepsilon_1}{n^2}, \qquad \varepsilon_1 = \frac{me^4}{2\hbar^2 (4\pi\varepsilon_0)^2} = 13,6 \text{ eV}. \tag{2.2}$$

Dans cet exercice on s'interesse aux corrections relativistes aux niveaux d'énergie, appelées "structure fine". On utilisera la théorie des perturbations au 1er ordre.

1. **(1)** En relativité restreinte, la relation $\left(\frac{E}{c}\right)^2 - p^2 = (mc)^2$ relie l'énergie E et l'impulsion $\vec{p}$ d'une particule libre de masse m. Dans le régime de basse impulsion $p \ll mc$ déduire que

$$E = mc^2 + \frac{p^2}{2m} + Cp^4 + O\left(p^6\right)$$

avec une constante C que l'on donnera. (Aide: on a la série de Taylor$(1+x)^\alpha = 1 + \alpha x + \frac{1}{2}\alpha(\alpha - 1)x^2 + o(x^2)$). Oubliant la constante mc^2, quelle correction $\hat{H}_{cin.}$ cela suggère t-il à l'énergie cinétique de l'opérateur $\hat{H}_0$?

2. $(\star)$**(1)** Expliquer qualitativement pourquoi les effets relativistes induisent des "fluctuations" sur la position de l'électron à l'échelle $\varepsilon \simeq \frac{\hbar}{mc}$ appelée "**longueur d'onde de Compton**".

3. $(\star)$**(1)** On admet que le potentiel de Coulomb $V(\vec{x}) = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r}$ est moyenné de façon isotrope à l'échelle $\varepsilon \simeq \frac{\hbar}{mc}$ par des effets relativistes. Montrer que en chaque point $\vec{x}_0$ le potentiel moyenné est

$$\langle V \rangle (\vec{x}_0) = V(\vec{x}_0) + C_1 \varepsilon^2 (\Delta V)(\vec{x}_0) + O\left(\varepsilon^3\right)$$

où Δ est le Laplacien et C_1 une constante indépendante de ε.

4. $(\star)$**(1)** Utilisant la formule $\Delta\left(-\frac{1}{r}\right) = 4\pi\delta(\vec{x})$ où δ est la distribution de Dirac, déduire que cela rajoute une correction au Hamiltonien $\hat{H}_0$, appelé **correction de Darwin** et de la forme $\hat{H}_{Darwin} = C_2 \delta(\vec{x})$ avec une constante C_2 que l'on précisera.

5. $(\star)$**(3)** Les termes de perturbation $\hat{H}_{cin.}$ et $\hat{H}_{Darwin}$ ci-dessus induisent une correction

$$E_{n,l,m} = E_n^{(0)} + \Delta E_{n,l,m}$$

pour les niveaux d'énergie de l'atome d'hydrogène. Pour les états $l = 0$, calculer $\frac{1}{E_n^{(0)}}\langle \psi_{n,0,0} | \hat{H}_{cin.} | \psi_{n,0,0} \rangle$ puis $\frac{1}{E_n^{(0)}}\langle \psi_{n,0,0} | \hat{H}_{Darwin} | \psi_{n,0,0} \rangle$ en fonction de n et $\alpha = \frac{e^2}{(4\pi\varepsilon_0)\hbar c} \simeq \frac{1}{137}$ et déduire la correction relative $\frac{1}{E_n^{(0)}}\Delta E_{n,0,0}$. Aide: exprimer p^4 à partir de H_0 et $\frac{1}{r}, \frac{1}{r^2}$ et utiliser

$$\langle \psi_{n,0,0} | \frac{1}{r} | \psi_{n,0,0} \rangle = \frac{1}{a_0 n^2}, \quad \langle \psi_{n,0,0} | \frac{1}{r^2} | \psi_{n,0,0} \rangle = \frac{2}{a_0^2 n^3}, \quad |\psi_{n,0,0}(0)|^2 = \frac{1}{\pi a_0^3 n^3}$$

avec $a_0 = \frac{4\pi\varepsilon_0 \hbar^2}{me^2}$ le rayon de Bohr.

6. **(1)** Application numérique: donner l'ordre de grandeur de $\Delta E_{n,0,0}$.

3 Couplage spin-orbite

On considère un moment angulaire $l \geq 1$ couplé à un système à deux états. Précisément, l'espace quantique du moment angulaire est $\mathcal{H}_l = \mathbb{C}^{2l+1}$, de dimension $2l+1$ et a pour base les vecteurs notés $|m\rangle$ avec $m = -l, \ldots, +l$. L'espace du système à deux états est $\mathcal{H}_2 = \mathbb{C}^2$ et a pour base les vecteurs notés $(1,0) \equiv |+\rangle$ et $(0,1) \equiv |-\rangle$. L'espace total est donc $\mathcal{H}_{tot} = \mathcal{H}_l \otimes \mathcal{H}_2$ de dimension $2\,(2l+1)$. Le couplage entre ces deux degrés de liberté est décrit par le Hamiltonien[4]

$$\hat{H}_\lambda = (1-\lambda)\,\sigma_z + \frac{\lambda}{l}\vec{\sigma}.\vec{L}$$

où $0 \leq \lambda \leq 1$ est un paramètre fixé qui permet de considérer différentes situations,

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$$

sont les matrices de Pauli agissant dans l'espace $\mathcal{H}_2 = \mathbb{C}^2$ et $\vec{L} = (L_x, L_y, L_z)$ sont les opérateurs de moment angulaire agissant dans l'espace $\mathcal{H}_l$ (on pose ici $\hbar = 1$, si bien que $L_z|m\rangle = m|m\rangle$). Ce modèle est utilisé en physique moléculaire pour décrire le couplage entre le mouvement de rotation de la molécule et des états internes de vibration (ici 2 états). Le but de ce problème est de calculer les niveaux d'énergie de $\hat{H}_\lambda$ en fonction du paramètre λ, et d'exhiber une structure particulière de ce spectre (qui s'interprète comme une transition topologique si $l \gg 1$).

1. **(1)** Dans le cas $\lambda = 0$, écrire le Hamiltonien $\hat{H}_0$ et donner ses valeur propres et vecteurs propres en précisant le degré de dégénérescence (multiplicité des valeurs propres).

2. $(\star)$**(3)** Dans le cas $\lambda = 1$, écrire le Hamiltonien $\hat{H}_1$. On pose $\vec{J} := \vec{L} + \frac{1}{2}\vec{\sigma}$. Exprimer $\hat{H}_1$ à partir de $\vec{J}^2, \vec{L}^2, \vec{\sigma}^2$. Donner la valeur de $\vec{L}^2$ et de $\vec{\sigma}^2$. D'après la théorie de Clebsh-Gordan du couplage des moments angulaires l et $1/2$ donner les valeurs possibles pour $\vec{J}^2$et déduire les valeurs propres de $\hat{H}_1$ et leur multiplicité. Comparer au spectre de $\hat{H}_0$ si $l \gg 1$; qui a t-il de surprenant et que peut on attendre du spectre lorsque $\lambda = 0 \to 1$ varie?

3. $(\star)$**(3)** Dans le cas général λ quelconque, montrer que $\hat{H}_\lambda$ commutte avec $J_z = L_z + \frac{1}{2}\sigma_z$. Utiliser cette propriété pour ramener le problème du calcul du spectre $\hat{H}_\lambda$ au problème de diagonalisation d'une matrice 2×2 que l'on écrira (Aide: chercher les espaces propres de J_z). La diagonaliser seulement dans les cas extrèmes $\lambda = 0, 1$. Trace l'allure attendue des valeurs propres $E_n(\lambda)$ de $\hat{H}_\lambda$ en fonction de $\lambda \in [0,1]$.

[4] Dans l'espace $\mathcal{H}_{tot} = \mathcal{H}_l \otimes \mathcal{H}_2$ une écriture plus précise est $\hat{H}_\lambda = (1-\lambda)\left(\mathrm{Id}_{\mathcal{H}_l} \otimes \sigma_z\right) + \frac{\lambda}{l}\left(\mathrm{Id}_{\mathcal{H}_l} \otimes \vec{\sigma}\right).\left(\vec{L} \otimes \mathrm{Id}_{\mathcal{H}_2}\right)$