Michel Le Bellac

Correction d'une sélection des exercices

Physique Quantique

Table des matières

T	Exercices du chapitre 1	5
2	Exercices du chapitre 2	9
3	Exercices du chapitre 3	11
4	Exercices du chapitre 4	15
5	Exercices du chapitre 5	19
6	Exercices du chapitre 6	23
7	Exercices du chapitre 7	31
8	Exercices du chapitre 8	33
9	Exercices du chapitre 9	37
10	Exercices du chapitre 10	45
11	Exercices du chapitre 11	5 3
12	Exercices du chapitre 12	67
13	Exercices du chapitre 13	7 5
14	Exercices du chapitre 14	87
15	Exercices du chapitre 15	91
16	Exercices du chapitre 16	97
17	Exercices du chapitre 17	101

4 TABLE DES MATIÈRES

Exercices du chapitre 1

1.6.1 Ordres de grandeur

1. Il faut utiliser des particules dont la longueur d'onde λ soit de 1 Å ou moins. On utilisera $\lambda = 1$ Å dans les calculs numériques. Pour les photons cela donne une énergie en eV

$$E_{\text{phot}} = \frac{hc}{\lambda} = \frac{6.63 \times 10^{-34} \times 3 \times 10^8}{10^{-10} \times 1.6 \times 10^{-19}} = 1.24 \times 10^4 \,\text{eV} = 12.4 \,\text{keV}$$

Pour les neutrons on utilise $p = h/\lambda$ soit

$$E_{\text{neut}} = \frac{p^2}{2m_n} = \frac{h^2}{2m_n\lambda^2} = 8.2 \times 10^{-2} \,\text{eV} = 82 \,\text{meV}$$

Cette énergie est de l'ordre de celle des neutrons thermiques qui vaut environ 25 meV. Pour les électrons il suffit de multiplier le résultat précédent par le rapport des masses m_n/m_e

$$E_{\rm el} = E_{\rm neut} \frac{m_n}{m_e} = 151 \,\text{eV}$$

- 2. La fréquence d'une onde sonore de vecteur d'onde $k=1\,\mathrm{nm}$ est $\omega=5\times10^{12}\,\mathrm{rad.s}^{-1}$ et l'énergie d'un phonon $\hbar\omega=3.3\,\mathrm{meV}$. Il est beaucoup plus facile de comparer expérimentalement une telle énergie à celle d'un neutron de quelques dizaines de meV qu'à celle d'un photon de 10 keV et de détecter la création d'un phonon. On utilisera donc de préférence des neutrons.
- 3. La masse d'une molécule de fullerène est $M=1.2\times 10^{-24}\,\mathrm{kg}$ et sa longueur d'onde

$$\lambda = \frac{h}{mv} = 2.5 \times 10^{-12} \,\mathrm{m}$$

Cette longueur d'onde est une fraction $\sim 1/300$ du diamètre de la molécule.

4. La distance de la masse M_1 au centre d'inertie de la molécule est

$$r_1 = \frac{M_2}{M_1 + M_2} \, r_0$$

et le moment d'inertie

$$I = M_1 r_1^2 + M_2 r_2^2 = \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2} r_0^2 = \mu r_0^2$$

L'énergie cinétique de rotation est, en fonction du moment angulaire $J=I\omega$

$$E_{\rm rot} = \frac{1}{2}I\omega^2 = \frac{J^2}{2I}$$

et pour $J = \hbar$ cela donne $\varepsilon_{\rm rot} = \hbar^2/(2I)$

$$\varepsilon_{\rm rot} = \frac{\hbar^2}{2\mu r_0^2} = \frac{\hbar^2}{2\mu b^2 a_0^2} = \frac{m}{b^2 \mu} R_{\infty}$$

en utilisant $R_{\infty} = e^2/(2a_0)$ et $a_0 = \hbar^2/(me^2)$.

 $\mathbf{5}$. La constante élastique K vaut

$$K = \frac{2cR_{\infty}}{b^2 a_0^2} = \frac{4cmR_{\infty}^2}{\hbar^2 b^2}$$

soit

$$\hbar\omega_v = 2\sqrt{\frac{c}{b^2}} \sqrt{\frac{m}{\mu}} R_{\infty}$$

Pour la molécule de HCl, on a $\mu = 0.97 m_p$ et $m/\mu = 5.6 \times 10^{-4}$. On en déduit b = 2.4 et c = 1.75: ce sont bien des nombres voisins de l'unité.

6. La dimension de G s'obtient aisément en remarquant que Gm^2/r est une énergie. On trouve pour cette dimension $\mathcal{M}^{-1}\mathcal{L}^3\mathcal{T}^{-2}$. La quantité $\sqrt{\hbar c/G}$ a les dimensions d'une masse ce qui donne pour l'énergie de Planck

$$E_P = \sqrt{\frac{\hbar c}{G}} \ c^2 = 1.9 \times 10^9 \,\text{J} = 1.2 \times 10^{19} \,\text{GeV}$$

et pour la longueur de Planck

$$l_P = \frac{\hbar}{c} \sqrt{\frac{G}{\hbar c}} = 1.6 \times 10^{-35} \,\mathrm{m}$$

L'énergie de Planck est considérable par rapport aux énergies maximales atteintes en physique des particules élémentaires (environ 2000 GeV aujourd'hui), et par voie de conséquence la longueur de Planck est très petite par rapport aux distances actuellement explorées qui sont $\sim 10^{-18}\,\mathrm{m}$.

1.6.4 Diffraction de neutrons par un cristal

- 1. L'onde incidente arrivant en \vec{r}_i est déphasée de $\delta_{\text{inc}} = \vec{k} \cdot \vec{r}_i$ par rapport à celle arrivant en $\vec{r} = 0$, et l'onde diffractée de $\delta_{\text{diff}} = -\vec{k}' \cdot \vec{r}_i$.
- **2.** Le produit scalaire $\vec{q} \cdot \vec{r_i}$ vaut

$$\vec{q} \cdot \vec{r}_i = naq_x + mbq_y$$

En utilisant la sommation d'une série géométrique

$$\sum_{n=0}^{N-1} x^n = \frac{1 - x^N}{1 - x}$$

on évalue par exemple la somme

$$\Sigma_x = \sum_{n=0}^{N-1} e^{-iq_x na} = \frac{1 - e^{-iq_x aN}}{1 - e^{-iq_x a}} = e^{-iq_x a(N-1)/2} \frac{\sin q_x aN/2}{\sin q_x a/2}$$

d'où l'on déduit la fonction $F(aq_x, bq_y)$ de l'énoncé.

3. Supposons que q_x diffère très peu de $2\pi n_x/a$, où n_x est un entier : $q_x a = 2\pi n_x + \varepsilon$. Alors

$$\sin \frac{q_x a N}{2} = \sin \left[\pi n_x N + \varepsilon \frac{N}{2} \right] = \pm \sin \frac{\varepsilon N}{2}$$

$$\sin \frac{q_x a}{2} = \sin \left[\pi n_x + \frac{1}{2} \varepsilon \right] = \pm \sin \frac{\varepsilon}{2}$$

La largeur du pic est donc $\varepsilon \sim 1/N$ et sa hauteur est obtenue en prenant la limite $\varepsilon \to 0$

$$\lim_{\varepsilon \to 0} \frac{\sin^2 \varepsilon N/2}{\sin^2 \varepsilon/2} = N^2$$

ce qui donne une intensité dans le pic $\sim N^2 \times 1/N = N$. Le même calcul se répète dans la direction y.

4. La condition de diffusion élastique est

$$\vec{k}^2 = \vec{k}'^2 = (\vec{k} + \vec{q})^2 = k^2 + 2\vec{q} \cdot \vec{k} + q^2$$

soit $q^2+2\vec{q}\cdot\vec{k}=0.$ Supposons que $n_x=0$ (ou $q_x=0)$ et donc $k_x'=k_x$

$$k_x' = k_x \qquad k_y' = k_y - \frac{2\pi n_y}{b}$$

La condition de diffusion élastique est $|k'_y| = |k_y|$ ce qui implique

$$k_y = \frac{\pi n_y}{b} \qquad k_y' = -\frac{\pi n_y}{b}$$

Comme $k_y = k \sin \theta_B$, où θ_B est l'angle d'incidence, on devra avoir

$$\sin \theta_B = \frac{\pi n_y}{bk}$$

Il n'y a de solution que si n_y est suffisamment petit ou k suffisamment grand.

S'il n'y avait que la première rangée d'atomes, il n'y aurait pas de condition sur k_x , car k'_x ne serait pas lié à k_x par $k'_x = k_x + q_x$. On obtiendrait alors des maxima de diffraction pour tout angle d'incidence.

5. La somme sur les mailles donne un facteur

$$\sum_{n=0}^{N-1} \sum_{m=0}^{M-1} e^{-i(2aq_x n + 2bq_y m)} = F(2aq_x, 2bq_y)$$

tandis que l'amplitude de diffusion par la première maille est

$$f_1 \left(1 + e^{-i(aq_x + bq_y)} \right) + f_2 \left(e^{-iaq_x} + e^{-ibq_y} \right)$$

En raison de l'argument de la fonction F, la condition pour un pic de diffraction est

$$q_x = \frac{\pi n_x}{a} \qquad q_y = \frac{\pi n_y}{b}$$

et on en déduit

$$f = f_1 \left[1 + (-1)^{n_x + n_y} \right] + f_2 \left[(-1)^{n_x} + (-1)^{n_y} \right]$$

Le résultat final est

- n_x et n_y pairs : $f = 2(f_1 + f_2)$ n_x et n_y impairs : $f = 2(f_1 f_2)$
- $-n_x$ pair et n_y impair ou l'inverse : f=0

6. Lorsque les sites sont occupés de façon indifférenciée par chaque type d'atome, la maille du réseau est (a,b) et non (2a,2b) comme dans la question précédente. On a en fait $f_1=f_2$ et on perd la moitié des pics de diffraction.

1.6.6 Interféromètre à neutrons et gravité

1. et 2. Calculons les amplitudes de détection par D_1 et D_2

$$a_1 = a_0 r^2 t \left(e^{i\delta} + 1 \right)$$

$$a_2 = a_0 r \left(t^2 e^{i\delta} + r^2 \right)$$

et en prenant les modules au carré

$$\begin{array}{lll} {\bf p}_1 & = & A(1+\cos\delta) & & A = 2|r^2t|^2 \\ {\bf p}_2 & = & B + A'\cos\delta & & A' = 2|r^2|{\rm Re}\,\left(t^2(r^*)^2{\rm e}^{{\rm i}\delta}\right) \end{array}$$

La somme $\mathsf{p}_1+\mathsf{p}_2$ doit être indépendante de $\chi,$ soit A+A'=0, ou

$$\cos 2(\alpha - \beta)\cos \delta - \sin 2(\alpha - \beta)\sin \delta = -\cos \delta$$

et donc

$$\alpha - \beta = \frac{\pi}{2} \mod n\pi$$

3. À l'altitude z l'énergie du neutron est $K=K_0+mgz$ si son énergie est K_0 pour z=0. Son impulsion vaut

$$p = \sqrt{2mK} = \sqrt{2m(K_0 + mgz)} \simeq \sqrt{2mK_0} \left(1 + \frac{mgz}{2K_0} \right)$$

L'approximation est justifiée car, pour $z=1\,\mathrm{m}$

$$mgz \simeq 10^{-7} \,\mathrm{eV} \ll K_0 \sim 0.1 \,\mathrm{eV}$$

La variation Δk du vecteur d'onde vaut

$$\Delta k = k \frac{mgz}{2K_0} \qquad \frac{\Delta k}{k} = \frac{mgz}{2K_0}$$

Sur un trajet de longueur L, le déphasage accumulé entre les deux bras, l'un à l'altitude z et l'autre à l'altitude 0 est

$$\Delta \phi = \Delta k L = \frac{mgzLk}{2K_0} = \frac{mgkS}{2K_0} = \frac{m^2gS}{\hbar^2k}$$

car zL est l'aire du losange et $2K_0 = \hbar^2 k^2/m$. Numériquement $\Delta \phi = 0.59 \, \text{rad}$.

4. Il suffit de remplacer z par $z\cos\theta$ dans les résultats précédents. Le déphasage devient

$$\chi = \Delta \phi = \frac{m^2 g \mathcal{S}}{\hbar^2 k} \cos \theta$$

et on observera donc des oscillations dans le taux de détection des neutrons en faisant varier θ .

1.6.7 Diffusion cohérente et diffusion incohérente de neutrons par un cristal

1. On remarque que $\alpha_i^2 = \alpha_i$. Si i = j, $\langle \alpha_i^2 \rangle = \langle \alpha_i \rangle = p_1$, tandis que si $i \neq j$

$$\langle \alpha_i \alpha_i \rangle = \langle \alpha_i \rangle \langle \alpha_i \rangle = p_1^2$$

les deux résultats se résumant en

$$\langle \alpha_i \alpha_j \rangle = \delta_{ij} p_1 + (1 - \delta_{ij}) p_1^2 = p_1^2 + p_1 p_2 \delta_{ij}$$

2. La probabilité de diffusion par le cristal est

$$\langle |f_{\text{tot}}|^{2} \rangle = \sum_{i,j} \left\langle \left[\alpha_{i} f_{1} + (1 - \alpha_{i}) f_{2} \right] \left[\alpha_{j} f_{1} + (1 - \alpha_{j}) f_{2} \right] \right\rangle e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r}_{i} - \vec{r}_{j})}$$

$$= \sum_{i,j} \left[(p_{1}^{2} + p_{1} p_{2} \delta_{ij}) f_{1}^{2} + 2 p_{1} p_{2} (1 - \delta_{ij}) f_{1} f_{2} + (p_{2}^{2} + p_{1} p_{2} \delta_{ij}) f_{2}^{2} \right] e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r}_{i} - \vec{r}_{j})}$$

$$= \sum_{i,j} (p_{1} f_{1} + p_{2} f_{2})^{2} e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r}_{i} - \vec{r}_{j})} + \mathcal{N} p_{1} p_{2} (f_{1} - f_{2})^{2}$$

Le premier terme donne lieu à des pics de diffraction, mais le second est un fond continu.

Exercices du chapitre 2

2.4.3 Déterminant et trace

1. Soit $A(t) = A(0) \exp(Bt)$. Calculons la dérivée

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}A(0)\mathrm{e}^{Bt} = A(0)\mathrm{e}^{Bt}B = A(t)B$$

La solution de

$$\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t} = BA(t)$$

est

$$A(t) = e^{Bt} A(0)$$

2. On remarque que pour δt infinitésimal

$$\det e^{A\delta t} \simeq \det(I + A\delta t) = 1 + \delta t \operatorname{Tr} A + O(\delta t)^2$$

Par exemple pour une matrice 2×2

$$\det \begin{pmatrix} 1 + A_{11}\delta t & A_{12}\delta t \\ A_{21}\delta t & 1 + A_{22}\delta t \end{pmatrix} = 1 + (A_{11} + A_{22})\delta t + (A_{11}A_{22} - A_{12}A_{21})(\delta t)^2$$

Soit $g(t) = \det[\exp(At)]$

$$g'(t) = \lim_{\delta t \to 0} \frac{1}{\delta t} \left(\det e^{A(t+\delta t)} - \det e^{At} \right)$$
$$= \frac{1}{\delta t} \left(\det e^{A\delta t} - 1 \right) \det e^{At} = \frac{1}{\delta t} \left[\delta t \operatorname{Tr} A \right] \det e^{At} = \operatorname{Tr} A g(t)$$

et on obtient pour g(t) l'équation différentielle

$$g'(t) = [\operatorname{Tr} A]g(t) \Longrightarrow g(t) = e^{t\operatorname{Tr} A}$$

en utilisant la condition aux limites g(0) = 1. En posant t = 1

$$g(1) = e^{\operatorname{Tr} A} = \det \left[e^A \right]$$

2.4.10 Matrices positives

1. Décomposons A en une partie hermitienne et une partie antihermitienne

$$A=B+C \hspace{1cm} B=B^{\dagger} \hspace{1cm} C=-C^{\dagger}$$

On note que (x, Cx) est imaginaire pur

$$(x, Cx) = (C^{\dagger}x, x) = (x, C^{\dagger}x)^* = -(x, Cx)$$

alors que (x, Bx) est réel. Si l'on veut que (x, Ax) soit réel et ≥ 0 , il est nécessaire que C = 0. Donnons une démonstration plus explicite. Soit par exemple

$$x = (x_1, x_2, 0, \dots, 0)$$

Alors

$$(x, Cx) = x_1^* C_{12} x_2 + x_2^* C_{21} x_1 = 2i \operatorname{Im}(x_1^* C_{12} x_2) = 0 \Longrightarrow C_{12} = 0$$

Comme A est hermitienne, elle est diagonalisable. Soit φ un vecteur propre de A, $A\varphi = a\varphi$. La condition de positivité implique $(\varphi, A\varphi) = a||\varphi||^2 \ge 0$ et donc $a \ge 0$.

2. Pour une matrice réelle antisymétrique $C^T = -C$

$$(x, Cx) = x_1C_{12}x_2 + x_2C_{21}x_1 = x_1(C_{12} + C_{21})x_2 = 0$$

On peut donc avoir une matrice positive de la forme

$$A = B + C \qquad B^T = B \qquad C^T = -C \neq 0$$

2.4.11 Identités opératorielles

1. Calculons df/dt

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}t} = e^{tA}ABe^{-tA} - e^{tA}BAe^{-tA} = e^{tA}[A, B]e^{-tA}$$

La dérivée seconde se calcule de la même façon est le cas général s'obtient par récurrence.

2. Calculons dg/dt

$$\frac{\mathrm{d}g}{\mathrm{d}t} = \mathrm{e}^{tA}(A+B)\mathrm{e}^{tB}$$

et utilisons le résultat de la question précédente

$$e^{tA}B = e^{tA}Be^{-tA}e^{tA} = (B + t[A, B])e^{tA}$$

En effet, compte tenu des relations de commutation de [A, B] avec A et B, le développement en série s'arrête au deuxième terme. Nous obtenons donc l'équation différentielle

$$\frac{\mathrm{d}g}{\mathrm{d}t} = \left(A + B + t[A, B]\right)g(t)$$

Compte tenu des relations de commutation, cette équation s'intègre en

$$q(t) = e^{(A+B)t + \frac{1}{2}[A,B]t^2}$$

Notons que l'intégration n'est possible que parce que [A, B], A + B = 0. Posant t = 1

$$g(1) = e^A e^B = e^{A+B+[A,B]/2} = e^{A+B} e^{[A,B]/2}$$

Exercices du chapitre 3

3.3.1 Polarisation elliptique et détermination de la polarisation

1. Nous pouvons choisir $\delta_x=0,\,\delta_y=\delta.$ L'équation de l'ellipse

$$x = \cos\theta \cos\omega t$$
 $y = \sin\theta \cos(\omega t - \delta)$

s'écrit en coordonnées cartesiennes

$$\frac{x^2}{\cos^2 \theta} - 2xy \frac{\cos \delta}{\sin \theta \cos \theta} + \frac{y^2}{\sin^2 \theta} = \sin^2 \delta$$

La direction des axes est obtenue en recherchant les vecteurs propres de la matrice

$$A = \begin{pmatrix} \frac{1}{\cos^2 \theta} & -\frac{\cos \delta}{\sin \theta \cos \theta} \\ -\frac{\cos \delta}{\sin \theta \cos \theta} & \frac{1}{\sin^2 \theta} \end{pmatrix}$$

qui font des angles α et $\alpha + \pi/2$ avec l'axe des x, où α est donné par

$$\tan\alpha=\cos\delta\tan2\theta$$

Le produit vectoriel de la position \vec{r} et de la vitesse \vec{v} , $\vec{r} \times \vec{v}$, se calcule immédiatement

$$\vec{r} \times \vec{v} = \frac{1}{2} \,\omega \hat{z} \sin 2\theta \sin \delta$$

et le sens de la rotation est donné par le signe du produit $\sin 2\theta \sin \delta$.

2. L'intensité à l'entrée du polariseur est

$$I_0 = k \left(E_0^2 \cos^2 \theta + E_0^2 \sin^2 \theta \right) = k E_0^2$$

où k est un facteur de proportionnalité. À la sortie du polariseur cette intensité vaut

$$I = kE_0^2 \cos^2 \theta = I_0 \cos^2 \theta$$

La mesure de la réduction de l'intensité permet de déterminer $|\cos\theta|$.

3. La projection du champ électrique sur l'axe du polariseur est

$$\frac{E_0}{\sqrt{2}} \left[\cos \theta \cos \omega t + \sin \theta \cos(\omega t - \delta) \right]$$

et l'intensité est donnée par la moyenne temporelle

$$I' = kE_0^2 \left\langle \cos^2 \theta \cos^2 \omega t + \sin^2 \theta \cos^2(\omega t - \delta) + 2\sin \theta \cos \theta \cos \omega t \cos(\omega t - \delta) \right\rangle$$
$$= \frac{1}{2} kE_0^2 (1 + \sin 2\theta \cos \delta) = \frac{1}{2} I_0 (1 + \sin 2\theta \cos \delta)$$

De la mesure de I' nous déduisons $\cos \delta$, ce qui permet de déterminer δ au signe près. Les ambiguïtés restantes sont levées si l'on remarque que l'ellipse est invariante sous les transformations

$$\theta \to \theta + \pi$$
 $\delta \to \delta$

et

$$\theta \to -\theta$$
 $\delta \to \delta + \pi$

٠

3.3.2 Une stratégie optimale pour Ève.

1. Si Alice utilise la base $|x\rangle$, la probabilité pour que Eve devine correctement est $p_x = \cos^2 \phi$. Si Alice utilise la base $|\pm \pi/4\rangle$, cette probabilité est

$$p_{\pi/4} = |\langle \phi | \pm \pi/4 \rangle|^2 = \frac{1}{2} (\cos \phi + \sin \phi)^2$$

La probabilité globale pour que Eve devine correctement est donc

$$\begin{aligned} \mathsf{p}(\phi) &=& \frac{1}{2} \left(\mathsf{p}_x + \mathsf{p}_{\pi/4} \right) = \frac{1}{4} \left[2 \cos^2 \phi + (\cos \phi + \sin \phi)^2 \right] \\ &=& \frac{1}{4} \left[2 + \cos 2\phi + \sin 2\phi \right] \end{aligned}$$

Le maximum de $p(\phi)$ est atteint pour $\phi = \phi_0 = \pi/8$, ce qui est évident par symétrie : le maximum doit être atteint pour la bissectrice des axes Ox et $\pi/4$. La valeur maximale est

$$p_{\text{max}} = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{\sqrt{2}} \right) \simeq 0.854$$

2. Si Alice envoie un photon $|\theta\rangle$ ($|\theta_{\perp}\rangle$), Eve obtient la réponse correcte avec une probabilité $\cos^2\theta$ ($\sin^2\theta$), et la probabilité pour que Bob reçoive la polarisation correcte est $\cos^4\theta$ ($\sin^4\theta$). La probabilité de succès pour Eve est

$$p_{s} = \frac{1}{2} \left(1 + \cos^{4} \theta + \sin^{4} \theta \right)$$

et sa probailité d'erreur

$$p_e = 1 - p_s = \sin^2\theta \cos^2\theta = \frac{1}{4}\sin^2 2\theta$$

Les erreurs d'Eve sont maximisées pour $\theta = \pi/4$.

3.3.4 Autres solutions de (3.45)

1. L'action de U sur σ_x et σ_y est

$$U^{\dagger} \sigma_x U = \begin{pmatrix} 0 & e^{i\psi} \\ e^{-i\psi} & 0 \end{pmatrix} \qquad U^{\dagger} \sigma_y U = \begin{pmatrix} 0 & -ie^{i\psi} \\ ie^{-i\psi} & 0 \end{pmatrix}$$

 σ_z est évidemment inchangé.

2. Les solutions possibles de (3.45) sont

$$\cos(\alpha - \alpha_x) = \cos \phi \qquad \alpha - \alpha_x = \phi \text{ ou } \alpha - \alpha_x = -\phi$$

$$\cos(\alpha - \alpha_y) = \sin \phi \qquad \alpha - \alpha_y = \frac{\pi}{2} - \phi \text{ ou } \alpha - \alpha_y = \phi - \frac{\pi}{2}$$

La différence

$$(\alpha - \alpha_x) - (\alpha - \alpha_y) = -(\alpha_x - \alpha_y)$$

doit être indépendante de ϕ car α_x et α_y sont des données indépendantes de α . On a donc deux solutions possibles

• Solution 1

$$\alpha - \alpha_x = \phi$$
 $\alpha - \alpha_y = \phi - \frac{\pi}{2}$

soit

$$\alpha_x = \alpha_y - \frac{\pi}{2}$$

et

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\alpha_x} \\ e^{i\alpha_x} & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -ie^{-i\alpha_x} \\ ie^{-i\alpha_x} & 0 \end{pmatrix}$$

D'après la question 1, cette nouvelle forme correspond à une rotation des axes d'un angle α_x autour de Oz.

• Solution 2

$$\alpha - \alpha_x = -\phi$$
 $\alpha - \alpha_y = \frac{\pi}{2} - \phi$

Choisissant pour la solution de base $\alpha_x = 0$ et $\alpha_y = -\pi/2$

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix}$$

Le changement de signe de σ_y correspond à une inversion de l'axe Oy: on passe d'un triède droit à un triède gauche. Les autres solutions s'obtiennent à partir de la solution de base par une rotation autour de Oz.

3.3.6 Exponentielles de matrices de Pauli

1. Compte tenu de (3.50)

$$(\vec{\sigma} \cdot \hat{n})^2 = I$$
 $(\vec{\sigma} \cdot \hat{n})^3 = (\vec{\sigma} \cdot \hat{n}) \dots$

le développement de l'exponentielle est

$$\exp\left(-\mathrm{i}\frac{\theta}{2}\vec{\sigma}\cdot\hat{n}\right) = I - \mathrm{i}\frac{\theta}{2}\vec{\sigma}\cdot\hat{n} + \frac{1}{2!}\left(-\mathrm{i}\frac{\theta}{2}\right)^2I + \frac{1}{3!}\left(-\mathrm{i}\frac{\theta}{2}\right)^3\vec{\sigma}\cdot\hat{n}\cdots$$
$$= I\cos\frac{\theta}{2} - \mathrm{i}(\vec{\sigma}\cdot\hat{n})\sin\frac{\theta}{2}$$

2. On doit avoir

$$U = a_1 I + ia_2 \sigma_z + ib_2 \sigma_x + ib_1 \sigma_y$$
$$= I \cos \frac{\theta}{2} - i \sin \frac{\theta}{2} \begin{pmatrix} n_z & n_x - in_y \\ n_x + in_y & -n_z \end{pmatrix}$$

et on en déduit

$$a_1 = \cos\frac{\theta}{2}$$
 $a_2 = -n_z \sin\frac{\theta}{2}$ $b_2 = -n_x \sin\frac{\theta}{2}$ $b_1 = -n_y \sin\frac{\theta}{2}$

ce qui est possible car

$$a_1^2 + a_2^2 + b_1^2 + b_2^2 = 1$$

3. Le produit de deux exponentielles de matrices de Pauli vaut

$$e^{-i\alpha(\vec{\sigma}\cdot\hat{a})}e^{-i\beta(\vec{\sigma}\cdot\hat{b})} = \cos\alpha\cos\beta - i\sin\alpha\cos\beta(\vec{\sigma}\cdot\hat{a}) - i\sin\beta\cos\alpha(\vec{\sigma}\cdot\hat{b}) - \sin\alpha\sin\beta[\hat{a}\cdot\hat{b} + i\vec{\sigma}\cdot(\hat{a}\times\hat{b})]$$

Par ailleurs

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}[\alpha(\vec{\sigma}\cdot\hat{a})+\beta(\vec{\sigma}\cdot\hat{b})]} = I\cos||\alpha\hat{a}+\beta\hat{b}||-\mathrm{i}\frac{\sin||\alpha\hat{a}+\beta\hat{b}||}{||\alpha\hat{a}+\beta\hat{b}||}[\alpha(\vec{\sigma}\cdot\hat{a})+\beta(\vec{\sigma}\cdot\hat{b})]$$

Pour avoir l'égalité des deux facteurs. il faut

- Se débarrasser des sinus
- Avoir $\cos \alpha \cos \beta = \cos \sqrt{\alpha^2 + \beta^2}$

On peut par exemple choisir

$$\alpha = 3\pi \qquad \beta = 4\pi \qquad \sqrt{\alpha^2 + \beta^2} = 5\pi$$

avec

$$e^{-3i\pi\sigma_x} = -I$$
 $e^{-4i\pi\sigma_y} = I$ $e^{-i(3\pi\sigma_x + 4\pi\sigma_y)} = -I$

3.3.9 Diffusion de neutrons par un cristal : noyaux de spin 1/2

1. Lorsqu'il n'y a pas de changement de l'état de spin, il n'est pas possible de savoir quel noyau a diffusé le neutron, et il faut donc ajouter les amplitudes

$$f = f_a \sum_{i} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_i}$$
 $\mathcal{I} = f_a^2 \sum_{i,j} e^{i\vec{q}\cdot(\vec{r}_i - \vec{r}_j)}$

2. Si la diffusion se fait avec renversement du spin, la diffusion laisse le noyau dans un état de spin différent de l'état de spin initial. Si tous les noyaux avaient initialement spin down, le noyau qui a diffusé le neutron a spin up après la diffusion et il est en principe identifiable (même si cette identification est impossible en pratique). La diffusion d'un neutron par un noyau plutôt qu'un autre correspond donc à des états finaux différents, et il faut ajouter les probabilités

$$\mathcal{I} = \sum_{i} f_b^2 = \mathcal{N} f_b^2$$

3. Soit $\{\alpha_i\}$ la configuration des spins dans le cristal. Si un neutron est diffusé par le cristal dans la configuration $\{\alpha_i\}$, l'amplitude de diffusion est

$$f = \sum_{i} (\alpha_i f_a + (1 - \alpha_i) f_c) e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_i} + \sum_{i} \alpha_i f_b e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_i}$$

Si la configuration $\{\alpha_i\}$ était fixée, l'intensité serait

$$\mathcal{I}_{\alpha_i} = \sum_{i,j} \left(\alpha_i f_a + (1 - \alpha_i) f_c \right)^2 e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j)} + \sum_i \alpha_i^2 f_b^2$$

En remarquant que $\alpha_i = \alpha_i^2$, les valeurs moyennes sont $\langle \alpha_i \rangle = \langle \alpha_i^2 \rangle = 1/2$ et $\langle \alpha_i \alpha_j \rangle = 1/4$ si $i \neq j$, d'où

$$\mathcal{I} = \sum_{i,j} \left\langle \left(\alpha_i \alpha_j f_a^2 + 2\alpha_i (1 - \alpha_j) f_a f_c + (1 - \alpha_i) (1 - \alpha_j) f_c^2 \right) \right\rangle e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j)} + \sum_i \left\langle \alpha_i \right\rangle f_b^2$$

d'où le résultat de l'énoncé

$$\mathcal{I} = \frac{1}{4} (f_a + f_c)^2 \sum_{i,j} e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j)} + \frac{\mathcal{N}}{4} [(f_a - f_c)^2 + 2f_b^2]$$

4. Par invariance par rotation, on a par exemple

$$f_a$$
: neutron \downarrow + noyau \uparrow \rightarrow neutron \downarrow + noyau \uparrow

et un résultat analogue pour les deux autres amplitudes. On retrouve le résultat de la question précédente si les neutrons sont polarisés avec un spin down. Le résultat avec des neutrons non polarisés s'obtient en prenant la moyenne du résultat spin en haut et spin en bas, et on retrouve à nouveau le résultat de la question 3.

Exercices du chapitre 4

4.4.4 Évolution temporelle d'un système à deux niveaux

1. Le système d'équations différentielles vérifié par $c_{\pm}(t)$ est

$$i\dot{c}_{+} = Ac_{+} + Bc_{-}$$

 $i\dot{c}_{-} = Bc_{+} - Ac_{-}$

2. Si $|\varphi(t=0)\rangle$ se décompose sur les vecteurs propres $|\chi_{\pm}\rangle$ suivant

$$|\varphi(t=0)\rangle = \lambda |\chi_{+}\rangle + \mu |\chi_{-}\rangle$$

alors

$$|\varphi(t)\rangle = \lambda \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\Omega t/2}|\chi_{+}\rangle + \mu \mathrm{e}^{\mathrm{i}\Omega t/2}|\chi_{-}\rangle$$

Compte tenu de $\langle +|\chi_+\rangle = \cos\theta/2$ et $\langle +|\chi_-\rangle = -\sin\theta/2$, on trouve pour $c_+(t)$

$$c_{+}(t) = \langle +|\varphi(t)\rangle = \lambda e^{-i\Omega t/2} \cos\frac{\theta}{2} - \mu e^{i\Omega t/2} \sin\frac{\theta}{2}$$

3. Si $c_+(0) = 0$

$$\lambda\cos\frac{\theta}{2} - \mu\sin\frac{\theta}{2} = 0$$

et une solution possible est

$$\lambda = \sin\frac{\theta}{2} \qquad \quad \mu = \cos\frac{\theta}{2}$$

ce qui donne pour $c_+(t)$

$$c_{+}(t) = -\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}\left(e^{-i\Omega t/2} - e^{i\Omega t/2}\right) = i\sin\theta\sin\frac{\Omega t}{2}$$

La probabilité $p_+(t)$ est

$$p_{+}(t) = |c_{+}(t)|^{2} = \sin^{2}\theta \sin^{2}\frac{\Omega t}{2} = \frac{B^{2}}{A^{2} + B^{2}} \sin^{2}\frac{\Omega t}{2}$$

4. Si $c_{+}(0) = 1$, une solution possible est

$$\lambda = \cos\frac{\theta}{2} \qquad \quad \mu = -\sin\frac{\theta}{2}$$

et on obtient pour $c_+(t)$

$$c_{+}(t) = \cos^{2} \frac{\theta}{2} e^{-i\Omega t/2} + \sin^{2} \frac{\theta}{2} e^{i\Omega t/2}$$
$$= \cos \frac{\Omega t}{2} - i \cos \theta \sin \frac{\Omega t}{2}$$

La probabilité $\mathsf{p}_+(t)$ vaut

$$p_{+}(t) = |c_{+}(t)|^{2} = \cos^{2}\frac{\Omega t}{2} + \cos^{2}\theta \sin^{2}\frac{\Omega t}{2} = 1 - \sin^{2}\theta \cos^{2}\frac{\Omega t}{2}$$

4.4.5 Inégalités de Heisenberg temporelles

1. En utilisant (2.53) et $[H, T] = i\hbar I$ on obtient

$$e^{-i\alpha T} H e^{i\alpha T} = H + i\alpha$$

soit

$$H\left(e^{i\alpha T}H|\Psi\rangle\right) = (E + \alpha\hbar)\left(e^{i\alpha T}H|\Psi\rangle\right)$$

L'état $\exp(i\alpha T)|\Psi\rangle$ est un état d'énergie $(E+\alpha\hbar)$; $\exp(i\alpha T)$ effectue une translation d'énergie de même que $\exp(iaP/\hbar)$ effectue une translation de a (voir(9.4)). Comme α est arbitraire, des états d'énergie arbitrairement grande et négative seraient possibles.

2. Utilisons le développement en série de $\exp(-iHt/\hbar)$ pour des petites valeurs de t

$$c(t) = 1 - \frac{\mathrm{i}}{\hbar} \langle H \rangle t - \frac{1}{2\hbar^2} \langle H^2 \rangle t^2 + O(t^3)$$

de sorte que

$$|c(t)|^2 = 1 - \frac{\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2}{\hbar^2} t^2 + O(t^3)$$

= $1 - \frac{(\Delta H)^2}{\hbar^2} t^2 + O(t^3)$

où $\langle \bullet \rangle$ est une moyenne calculée avec $|\varphi\rangle$: $\langle \bullet \rangle = \langle \varphi | \bullet | \varphi \rangle$

3. Nous déduisons de (4.27), avec la substitution $A \to \mathcal{P}$

$$\Delta \mathcal{P} \Delta H \leq \frac{1}{2} \hbar \left| \frac{\mathrm{d} \mathcal{P}}{\mathrm{d} t} \right| \qquad \mathsf{p}(t) = \langle \mathcal{P} \rangle(t)$$

tandis que

$$\Delta \mathcal{P} = (\langle \mathcal{P}^2 \rangle - \langle \mathcal{P} \rangle^2)^{1/2} = (\langle \mathcal{P} \rangle - \langle \mathcal{P} \rangle^2)^{1/2} = \sqrt{\mathsf{p}(1-\mathsf{p})}$$

Nous obtenons ainsi l'inégalité différentielle

$$\frac{\mathrm{d}\mathsf{p}}{\sqrt{\mathsf{p}(1-\mathsf{p})}} \ge 2\,\frac{\Delta H}{\hbar}\,\mathrm{d}t$$

qu s'intègre en

$$\cos^{-1}[1 - 2\mathsf{p}(t)] \ge 2\frac{\Delta H}{\hbar}t$$

et par conséquent

$$p(t) \ge \cos^2\left(\frac{t\Delta H}{\hbar}\right)$$
 $0 \le t \le \frac{\pi\hbar}{2\Delta H}$

4.4.6 L'énigme des neutrinos solaires

1. Dans le référentiel au repos, le hamiltonien s'écrit

$$\frac{1}{c^2}H = \frac{m_e + m_{\mu}}{2}I + \begin{pmatrix} \frac{m_e - m_{\mu}}{2} & m\\ m & -\frac{m_e - m_{\mu}}{2} \end{pmatrix}$$

La comparaison avec l'exercice 4.4.4 conduit à la corespondance

$$A \to \frac{m_e - m_\mu}{2}$$
 $B \to m$ $\tan \theta = \frac{B}{A} \to \frac{2m}{m_e - m_\mu}$

2. Les états $|\nu_1\rangle$ et $|\nu_2\rangle$ étant vecteurs propres de H, l'évolution de $|\varphi(t)\rangle$ est

$$|\varphi(t)\rangle = \cos\frac{\theta}{2}e^{-iE_1t/\hbar}|\nu_1\rangle - \sin\frac{\theta}{2}e^{-iE_2t/\hbar}|\nu_2\rangle$$

Compte tenu de

$$\langle \nu_e | \nu_1 \rangle = \cos \frac{\theta}{2}$$
 $\langle \nu_e | \nu_2 \rangle = -\sin \frac{\theta}{2}$

on trouve pour l'amplitude $c_e(t)$

$$c_e(t) = \langle \nu_e | \varphi(t) \rangle = e^{-iE_1 t/\hbar} \left(\cos^2 \frac{\theta}{2} + \sin^2 \frac{\theta}{2} e^{-i(E_2 - E_1)t/\hbar} \right)$$

et pour la probabilité $|c_e(t)|^2$

$$|c_e(t)|^2 = \cos^4 \frac{\theta}{2} + \sin^4 \frac{\theta}{2} + 2\cos^2 \frac{\theta}{2}\sin^2 \frac{\theta}{2}\cos \frac{\Delta Et}{\hbar}$$
$$= 1 - \frac{1}{2}\sin^2 \theta \left(1 - \cos \frac{\Delta Et}{\hbar}\right) = 1 - \sin^2 \theta \sin^2 \frac{\Delta Et}{2\hbar}$$

3. Lorsque $p \gg mc$ on obtient une expression approchée de E

$$E = (m^2c^4 + p^2c^2)^{1/2} = cp\left(1 + \frac{m^2c^2}{p^2}\right)^{1/2} \simeq cp + \frac{m^2c^3}{2p}$$

et

$$\Delta E = E_2 - E_1 = \frac{(m_2^2 - m_1^2)c^3}{2p} = \frac{\Delta m^2 c^3}{2p}$$

En remplaçant ct par la distance parcourue L, l'oscillation est en

$$\sin^2\left(\frac{\Delta m^2 c^2 L}{2p\hbar}\right)$$

Si l'on observe une demi-oscillation sur la distance Soleil-Terre

$$\frac{\Delta m^2 c^2 L}{2p\hbar} = \pi \qquad \Delta m^2 c^4 = \frac{2\pi\hbar c}{L} cp \simeq 7 \times 10^{-11} \,\text{eV}^2$$

et donc $\Delta mc^2 \sim 10^{-5} \, \mathrm{eV}$.

4.4.8 Le système des mésons K neutres : évolution non unitaire

1. Calculons le produit $\mathcal{C}^{-1}M\mathcal{C}$ pour une matrice M quelconque

$$C = C^{-1} = \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_x \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \sigma_x = \begin{pmatrix} d & c \\ b & a \end{pmatrix}$$

et la condition de commutation implique a=d et b=c.

2. Les valeurs propres et vecteurs propres de M sont

$$\lambda_{+} = A + B \qquad |K_{1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|K^{0}\rangle + |\overline{K}^{0}\rangle \right)$$

$$\lambda_{-} = A - B \qquad |K_{1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|K^{0}\rangle - |\overline{K}^{0}\rangle \right)$$

L'évolution des états $|K_1\rangle$ et $|K_2\rangle$ est donnée par

$$|K_1(t)\rangle = e^{-i(A+B)t}|K_1\rangle = \exp\left(-i\frac{E_1t}{\hbar} - \frac{\Gamma_1t}{2}\right)|K_1\rangle$$

 $|K_2(t)\rangle = e^{-i(A-B)t}|K_1\rangle = \exp\left(-i\frac{E_2t}{\hbar} - \frac{\Gamma_2t}{2}\right)|K_1\rangle$

Partons de

$$\left|\varphi(t=0)\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(c(0) + \overline{c}(0)\right) \left|K_1\right\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} \left(c(0) - \overline{c}(0)\right) \left|K_2\right\rangle$$

On obtient au temps t

$$|\varphi(t)\rangle = \frac{1}{2} (c(0) + \overline{c}(0)) \left(|K^{0}\rangle + |\overline{K^{0}}\rangle \right) e^{-i(E_{1}/\hbar - i\Gamma_{1}/2)t}$$

$$+ \frac{1}{2} (c(0) - \overline{c}(0)) \left(|K^{0}\rangle - |\overline{K^{0}}\rangle \right) e^{-i(E_{2}/\hbar - i\Gamma_{2}/2)t}$$

ce qui donne pour les coefficients c(t) et $\overline{c}(t)$

$$c(t) = \langle K^{0} | \varphi(t) \rangle = \frac{1}{2} \left(c(0) + \overline{c}(0) \right) e^{-i(E_{1}/\hbar - i\Gamma_{1}/2)t} + \frac{1}{2} \left(c(0) - \overline{c}(0) \right) e^{-i(E_{2}/\hbar - i\Gamma_{2}/2)t}$$

$$\overline{c}(t) = \langle \overline{K^{0}} | \varphi(t) \rangle = \frac{1}{2} \left(c(0) + \overline{c}(0) \right) e^{-i(E_{1}/\hbar - i\Gamma_{1}/2)t} - \frac{1}{2} \left(c(0) - \overline{c}(0) \right) e^{-i(E_{2}/\hbar - i\Gamma_{2}/2)t}$$

3. Dans le cas de figure considéré dans l'énoncé $c(0)=1, \overline{c}(0)=0$ et

$$\overline{c}(t) = \frac{1}{2} \left[e^{-i(E_1/\hbar - i\Gamma_1/2)t} - e^{-i(E_2/\hbar - \Gamma_2/2)t} \right]$$

La probabilité d'observer un méson $\overline{K^0}$ au temps t est

$$\overline{\mathbf{p}}(t) = |\overline{c}(t)|^2 = \frac{1}{4} \left[e^{-\Gamma_1 t} + e^{-\Gamma_2 t} - 2e^{-(\Gamma_1 + \Gamma_2)t/2} \cos \frac{\Delta E t}{\hbar} \right]$$

avec $\Delta E = E_1 - E_2$. On obtient le résultat de l'énoncé si $\Gamma_1 \gg \Gamma_2$.

Exercices du chapitre 5

5.5.3 Le butadiène

1. Forme matricielle de H

$$H = \left(\begin{array}{cccc} E_0 & -A & 0 & 0\\ -A & E_0 & -A & 0\\ 0 & -A & E_0 & -A\\ 0 & 0 & -A & E_0 \end{array}\right)$$

2. Écrivons l'action de H sur le vecteur $|\chi\rangle$

$$H|\chi\rangle = E_0|\chi\rangle - A\Big(c_1|\varphi_2\rangle + \dots + c_{N-1}\varphi_N\rangle\Big) + c_0|\varphi_0\rangle$$

$$- A\Big(c_2|\varphi_1\rangle + \dots + c_N|\varphi_{N-1}\rangle\Big) + c_{N+1}|\varphi_N\rangle$$

$$= E_0|\chi\rangle - A\sum_{n=1}^N \Big(c_{n-1} + c_{n+1}\Big)|\varphi_n\rangle$$

3. Compte tenu de la forme de postulée pour les coefficients c_n

$$c_{n-1} + c_{n+1} = \frac{c}{2i} \left[e^{i(n-1)\delta} + e^{i(n+1)\delta} - e^{-i(n-1)\delta} - e^{-i(n+1)\delta} \right]$$
$$= \frac{c}{2i} 2\cos\delta \left[e^{in\delta} - e^{-in\delta} \right] = 2c_n\cos\delta$$

La condition $c_0=0$ est vérifiée par construction. La condition $c_{N+1}=0$ entraı̂ne

$$\delta_s = \frac{\pi s}{N+1} \qquad s = 0, 1, \cdots, N$$

4. D'après les résultats de la question 1

$$H|\chi_s\rangle = E_0|\chi_s\rangle - 2A\cos\frac{\pi s}{N+1}|\chi\rangle$$

d'où les valeurs de l'énergie

$$E_s = E_0 - 2A\cos\frac{\pi s}{N+1}$$

Calculons la normalisation de $|\chi_s\rangle$

$$X = \sum_{n=1}^{N} \sin^2 \frac{\pi sn}{N+1} = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N} \left(1 - \cos \frac{2\pi sn}{N+1} \right)$$

Mais

$$\sum_{n=1}^{N} \cos \frac{2\pi sn}{N+1} = \operatorname{Re} \sum_{n=1}^{N} \exp \left(\frac{2i\pi sn}{N+1} \right) = \operatorname{Re} \frac{1 - e^{2i\pi s}}{1 - e^{2i\pi s/(N+1)}} - 1 = -1$$

et X = (N+1)/2. Le vecteurs $|\chi_s\rangle$ normalisé est donc

$$|\chi_s\rangle = \sqrt{\frac{2}{N+1}} \sum_{n=1}^{N} \sin(n\delta_s) |\varphi_n\rangle$$

5. Dans le cas du butadiène N=4

$$\cos\frac{\pi}{5} = 0.809 \qquad \qquad \cos\frac{2\pi}{5} = 0.309$$

ce qui donne pour les deux premiers niveaux d'énergie

$$E_{s=1} = E_0 - 1.62A$$
 $E_{s=2} = E_0 - 0.62A$

L'énergie des quatre électrons π est donc

$$E = 4E_0 - 2(1.62A + 0.62A) = 4(E_0 - A) - 0.48A$$

L'énergie de délocalisation est de -0.48A.

7. Les coefficients du vecteur propre $|\chi_1\rangle$ normalisé sont

tandis que ceux de $|\chi_2\rangle$ sont

$$(0.601, 0.372, -0.372, -0.601)$$

L'ordre de la liaison 1-2 est

$$1 + 2 \left[\langle \varphi_1 | \chi_1 \rangle \langle \chi_1 | \varphi_2 \rangle + \langle \varphi_1 | \chi_2 \rangle \langle \chi_2 | \varphi_2 \rangle \right] = 1.89$$

très proche d'une double liaison, tandis que pour la liaison 2-3

$$1 + 2 \left[\langle \varphi_2 | \chi_1 \rangle \langle \chi_1 | \varphi_3 \rangle + \langle \varphi_2 | \chi_2 \rangle \langle \chi_2 | \varphi_3 \rangle \right] = 1.45$$

Cette liaison est moins forte que la précédente, ce qui explique qu'elle soit plus proche d'une liaison simple et donc plus longue.

5.5.5 L'ion moléculaire H_2^+

1. Le potentiel V(x) vaut

$$V(x) = -e^{2} \left(\frac{1}{|x + r/2|} + \frac{1}{|x - r/2|} \right)$$

Il est égal à $-\infty$ si $x=\pm r/2$ et passe par un maximum de $-4e^2/r$ pour x=0.

- **2.** $l \simeq a_0$, dimension caractéristique de l'atome d'hydrogène.
- 3. Valeurs propres et vecteurs propres

$$E_{+} = E_{0} - A \qquad |\chi_{+}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\varphi_{1}\rangle + |\varphi_{2}\rangle)$$

$$E_{-} = E_{0} + A \qquad |\chi_{-}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\varphi_{1}\rangle - |\varphi_{2}\rangle)$$

4. A est un coefficient de transmission par effet tunnel. La barrière de potentiel voit sa largeur diminuer quand r décroît : le coefficient de transmission augmente quand r diminue.

5. e^2/r est l'énergie potentielle (répulsive) entre les deux protons

$$E'_{\pm}(r) = E_{\pm}(r) + \frac{e^2}{r} = E_0 \mp A(r) + \frac{e^2}{r}$$

6. L'expression approchée de $E'_{+}(r)$ est

$$E'_{+}(r) = E_0 + e^2 \left(\frac{1}{r} - c e^{-b/r}\right) = E_0 + \Delta E(r)$$

Cherchons le minimum de $\Delta E(r)$

$$\frac{\mathrm{d}\Delta E(r)}{\mathrm{d}r} = e^2 \left(-\frac{1}{r^2} + \frac{c}{b} \mathrm{e}^{-r/b} \right) \Longrightarrow \frac{1}{r_0^2} = \frac{c}{b} \, \mathrm{e}^{-r_0/b}$$

et l'on obtient

$$\Delta E(r_0) = e^2 \left(\frac{1}{r_0} - c e^{-r_0/b} \right) = e^2 \left(\frac{1}{r_0} - \frac{b}{r_0^2} \right)$$

On en déduit

$$b = \frac{6}{5}r_0 = \frac{12}{5}a_0$$
 $c = \frac{3}{5a_0}e^{5/6} \simeq \frac{1.38}{a_0}$

Il faut que $b > r_0$ pour que l'ion H_2^+ soit un état lié.

5.5.6 Compléments sur la RMN

2. Récrivons H_1 en termes de σ_+ et σ_-

$$\sigma_x = \sigma_+ + \sigma_-$$

$$H_1 = -\frac{\hbar}{2} \omega_1 (\sigma_+ + \sigma_-) \left(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t} \right)$$

d'où

$$\hat{H}_1(t) = -\frac{\hbar}{2} \omega_1 \sigma_+ \left(1 + e^{-2i\omega t} \right) - \frac{\hbar}{2} \omega_1 \sigma_- \left(e^{2i\omega t} + 1 \right)$$

Dans la cadre de l'approximation séculaire où l'on néglige les termes rapidement oscillants $\exp(\pm 2i\omega t)$

$$\hat{H}_1 = -\frac{\hbar}{2} \,\omega_1 \left(\sigma_+ + \sigma_-\right) = -\frac{\hbar}{2} \,\omega_1 \sigma_x$$

La composante $B_1(\hat{x}\cos\omega t - \hat{y}\sin\omega t)$ du champ de radiofréquences est fixe dans le référentiel tournant : à la résonance, elle suit la précession de Larmor, alors que la composante $B_1(\hat{x}\cos\omega t + \hat{y}\sin\omega t)$ tourne en sens inverse. Elle oscille rapidement dans le référentiel tournant et son influence est négligable.

Exercices du chapitre 6

6.6.3 Propriétés des opérateurs statistiques

1. Prenons un vecteur $|\varphi\rangle$ de la forme

$$|\varphi\rangle = (0, \cdots, a_i, 0, \cdots, 0, a_i, 0, \cdots, 0)$$

On doit avoir $\langle \varphi | \rho | \varphi \rangle \geq 0$, ce qui implique que la sous-matrice 2×2 A

$$A = \left(\begin{array}{cc} \rho_{ii} & \rho_{ij} \\ \rho_{ji} & \rho_{jj} \end{array}\right)$$

doit être positive. D'autre part $(\rho_{ii} + \rho_{jj})$, qui est la somme des valeurs propres de A, vérifie $(\rho_{ii} + \rho_{jj}) \le 1$. On en déduit que le produit des valeurs propres de A est $\le 1/4$

$$0 \le \rho_{ii}\rho_{jj} - |\rho_{ij}|^2 \le \frac{1}{4}$$

Si $\rho_{ii} = 0$, ceci implique que $\rho_{ij} = 0$.

2. La condition d'un test maximal avec 100% de succès implique qu'il existe un vecteur $|\varphi\rangle$ tel que Tr $\rho \mathcal{P}_{\varphi} = 1$, avec $\mathcal{P}_{\varphi} = |\varphi\rangle\langle\varphi|$, et donc $\langle\varphi|\rho|\varphi\rangle = 1$. On choisit une base orthonormée où $|\varphi\rangle$ est par exemple le premier vecteur de la base, $|\varphi\rangle = |1\rangle$. Dans ces conditions les éléments diagonaux de ρ vérifient

$$\rho_{11} = 1, \, \rho_{ii} = 0, \, i \neq 1$$

car le test $|i\rangle, |i\rangle \neq |1\rangle$ a une probabilité nulle. D'après la question précédente tous les éléments non diagonaux sont nuls, $\rho_{ij}=0, i\neq j$ et $\rho=|\varphi\rangle\langle\varphi|=|1\rangle\langle1|$.

Montrons d'abord l'inégalité pour deux opérateurs statistiques ρ' et ρ''

$$\operatorname{Tr}(\rho'\rho'') \leq 1$$

Soit

$$\rho' = \sum_{i} \mathsf{p}_{i} |i\rangle\langle i| \qquad \quad \rho'' = \sum_{\alpha} \mathsf{p}_{\alpha} |\alpha\rangle\langle \alpha|$$

les décompositions de ρ' et ρ'' sur deux bases orthonormées. Nous avons

$$\operatorname{Tr}\left(\rho'\rho''\right) = \sum_{n,i,\alpha} \mathsf{p}_i \mathsf{p}_\alpha \langle n|i\rangle \langle i|\alpha\rangle \langle \alpha|n\rangle = \sum_{i,\alpha} \mathsf{p}_i \mathsf{p}_\alpha |\langle i|\alpha\rangle|^2$$

et l'inégalité découle immédiatement de $|\langle i|\alpha\rangle|^2 \leq 1$. Si $\rho' = \rho'' = \rho$, alors $\langle i|\alpha\rangle = \delta_{i\alpha}$ et

$$\operatorname{Tr} \rho^2 = \sum_i \mathsf{p}_i^2$$

3. La condition nécessaire et suffisante pour que Tr $\rho^2=1$ est qu'un seul des p_i soit non nul, et donc égal à un : ρ représente alos le cas pur $|i\rangle$. Si

$$\rho = \lambda \rho' + (1 - \lambda)\rho''$$

alors

$$\operatorname{Tr} \rho^{2} = \lambda^{2} \operatorname{Tr} (\rho')^{2} + (1 - \lambda)^{2} \operatorname{Tr} (\rho'')^{2} + 2\lambda (1 - \lambda) \operatorname{Tr} (\rho' \rho'')$$

On ne peut avoir $\operatorname{Tr} \rho^2 = 1$ que si $\operatorname{Tr} (\rho' \rho'') = 1$, et donc $\rho' = \rho'' = 1$.

4. On a manifestement $\rho_{ij} = \rho_{ji}^*$ et

$$\operatorname{Tr} \rho = \sum_{i} \rho_{ii} = \sum_{i,m} |c_{im}|^2 = 1$$

d'après (6.24). La positivité se montre en remarquant que, si $|\varphi\rangle = \sum_i \lambda_i |i\rangle$

$$\langle \varphi | \rho | \varphi \rangle = \sum_{i,j} \lambda_i^* \rho_{ij} \lambda_i = \sum_{i,j,m} \lambda_i^* c_{im} c_{jm}^* \lambda_i = \sum_m \left| \sum_i \lambda_i^* c_{im} \right|^2 \ge 0$$

6.6.4 Structure fine et effet Zeeman du positronium

1. La masse réduite est la moitié de celle de l'électron et les niveaux d'énergie se déduisent de (1.36)

$$E_n = -\frac{R_\infty}{2n^2}$$

2. Écrivons explicitement l'action de σ_x et σ_y sur les vecteurs $|\varepsilon_1\varepsilon_2\rangle$

$$\begin{aligned}
\sigma_{1x}\sigma_{2x}|++\rangle &= |--\rangle & \sigma_{1y}\sigma_{2y}|++\rangle &= -|--\rangle \\
\sigma_{1x}\sigma_{2x}|+-\rangle &= |-+\rangle & \sigma_{1y}\sigma_{2y}|+-\rangle &= |-+\rangle \\
\sigma_{1x}\sigma_{2x}|-+\rangle &= |+-\rangle & \sigma_{1y}\sigma_{2y}|-+\rangle &= |+-\rangle \\
\sigma_{1x}\sigma_{2x}|--\rangle &= |++\rangle & \sigma_{1y}\sigma_{2y}|--\rangle &= -|++\rangle
\end{aligned}$$

et $\sigma_{1z}\sigma_{2z}|\varepsilon_1\varepsilon_2\rangle = \varepsilon_1\varepsilon_2|\varepsilon_1\varepsilon_2\rangle$, d'où l'action de $\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2$

$$\begin{array}{lcl} \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 | + + \rangle & = & | + + \rangle \\ \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 | + - \rangle & = & 2| - + \rangle - | + - \rangle \\ \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 | - + \rangle & = & 2| + - \rangle - | - + \rangle \\ \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 | - - \rangle & = & | - - \rangle \end{array}$$

3. Les résultats de la question précédente impliquent

$$\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 |I\rangle = |I\rangle$$
 $\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 |III\rangle = |III\rangle$

ainsi que

$$\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 | II \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+-\rangle + |-+\rangle) = |II\rangle$$

$$\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 | IV \rangle = -3 \frac{1}{\sqrt{2}} (|+-\rangle - |-+\rangle) = -3 |IV\rangle$$

4. Dans la base $\{|I\rangle, |II\rangle, |III\rangle, |IV\rangle\}$, les projecteurs \mathcal{P}_1 et \mathcal{P}_{-3} ainsi que $\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2$ sont diagonaux

Si $\mathcal{P}_1 = \lambda I + \mu \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2$, on doit avoir

$$\lambda + \mu = 1$$
 et $\lambda - 3\mu = 0$

soit $\lambda = 3/4$ et $\mu = 1/4$. On déduit $\mathcal{P}_3 = I - \mathcal{P}_1$

$$\mathcal{P}_1 = \frac{1}{4} (3I + \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2)$$
 $\qquad \mathcal{P}_{-3} = \frac{1}{4} (I - \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2)$

5. On a immédiatement $\mathcal{P}_{12}|++\rangle=|++\rangle$ et $\mathcal{P}_{12}|--\rangle=|--\rangle$, tandis que

$$\mathcal{P}_{12}|+-\rangle = \frac{1}{2}(|+-\rangle + 2|-+\rangle - |+-\rangle) = |-+\rangle$$

et en général $\mathcal{P}_{12}|\varepsilon_1\varepsilon_2\rangle = |\varepsilon_2\varepsilon_1\rangle$.

- 6. On connaît les valeurs propres et les vecteurs propres de $\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2$, et donc ceux de H
 - $-|I\rangle, |II\rangle, |III\rangle$ sont vecteurs propres de H avec la valeur propre $E_0 + A$
 - $|IV\rangle$ est vecteur propre de H avec la valeurs propre E_0-3A
- 7. Le facteur gyromagnétique du positron est l'opposé de celui de l'électron : $\gamma_{e^+} = -\gamma_{e^-} = -q_e/m$. Le hamiltonien total s'écrit

$$H = H_0 - (\vec{\mu}_{e^-} + \vec{\mu}_{e^+}) \cdot \vec{B} = H_0 - \frac{q_e \hbar}{2m} (\sigma_{1z} - \sigma_{2z})$$

Examinons l'action de l'opérateur $(\sigma_{1z}-\sigma_{2z})$ sur les vecteurs de base de H_0

$$(\sigma_{1z} - \sigma_{2z})|++\rangle = 0$$
 $(\sigma_{1z} - \sigma_{2z})|--\rangle = 0$ $(\sigma_{1z} - \sigma_{2z})|II\rangle = 2|IV\rangle$

et

$$\langle II|H_1|IV\rangle = \langle IV|H_1|II\rangle = 2\left(-\frac{q_e\hbar}{2m}\right) = 2Ax$$

La forme matricielle de H est, dans la base $\{|I\rangle, |II\rangle, |III\rangle, |IV\rangle\}$

$$H = \left(\begin{array}{cccc} E_0 + A & 0 & 0 & 0\\ 0 & E_0 + A & 0 & 2Ax\\ 0 & 0 & E_0 + A & 0\\ 0 & 2Ax & 0 & E_0 - 3A \end{array}\right)$$

Il y a donc deux vecteurs propres évidents $|I\rangle$ et $|III\rangle$ avec les valeurs propres E_0+A . Les deux autres valeurs propres sont obtenues en diagonalisant la matrice 2×2

$$H' = E_0 I + A \begin{pmatrix} 1 & 2x \\ 2x & -3 \end{pmatrix} = E_0 I + AM$$

L'équation aux valeurs propres de M est

$$\lambda^2 + 2\lambda - (3 + 4x^2) = 0$$

ce qui donne les valeurs de l'énergie

$$E_{\pm} = E_0 - A \pm 2A\sqrt{1 + x^2}$$

Pour x=0 on retrouve les valeurs E_0+A et E_0-3A , tandis que pour $|x|\to\infty$, les vecteurs propres tendent vers ceux de $(\sigma_{1z}-\sigma_{2z})$ avec les valeurs propres $\pm 2Ax$.

6.6.5 Ondes de spin et magnons

1. Comme les valeurs propres de $(\vec{\sigma}_n \cdot \vec{\sigma}_{n+1})$ sont comprises entre -3 et +1

$$E \ge \frac{1}{2}NA - \frac{1}{2}NA = 0$$

Si le vecteur d'état est tel que $(\vec{\sigma}_n \cdot \vec{\sigma}_{n+1}) = 1$, on obtient le fondamental $E_0 = 0$. Ce vecteur d'état est

$$\Phi_0 = |++++\cdots++\rangle$$

car

$$(\vec{\sigma}_n \cdot \vec{\sigma}_{n+1})|\Phi_0\rangle = |\Phi_0\rangle$$

2. L'opérateur $\mathcal{P}_{n,n+1}$ échange les spins n et n+1: nous avons vu dans la question **5** de l'exercice précédent que pour deux spins

$$\mathcal{P}_{12}|++\rangle = |++\rangle$$
 $\mathcal{P}_{12}|--\rangle = |--\rangle$ $\mathcal{P}_{12}|+-\rangle = |-+\rangle$ $\mathcal{P}_{12}|-+\rangle = |+-\rangle$

et le nombre de spins up moins le nombre de spins down est inchangé. Les vecteurs propres de H sont donc des vecteurs où le nombre de spins up moins le nombre de spins down est une constante. En particulier pour l'état $|\Psi_n\rangle$, cette constante est N-1. L'opérateur $I-\mathcal{P}_{n,n+1}$ appliqué à $|\Psi_n\rangle$ donne zéro sur toute paire de spins up, et seules les paires (n-1,n) et (n,n+1) vont donner un résultat non nul. Comme $\mathcal{P}_{n-1,n}$ par exemple échange les spins n-1 et n

$$\mathcal{P}_{n-1,n}|++++-+++\rangle = |+++-++++\rangle$$

soit

$$\mathcal{P}_{n-1,n}|\Psi_n\rangle = |\Psi_{n-1}\rangle$$
 $\mathcal{P}_{n-1,n}|\Psi_{n-1}\rangle = |\Psi_n\rangle$

on obtient

$$(I - \mathcal{P}_{n-1,n})|\Psi_n\rangle = |\Psi_n\rangle - |\Psi_{n-1}\rangle$$

 $(I - \mathcal{P}_{n,n+1})|\Psi_n\rangle = |\Psi_n\rangle - |\Psi_{n+1}\rangle$

Ceci donne l'action de H sur $|\Psi_n\rangle$

$$H|\Psi_n\rangle = -A(|\Psi_{n-1}\rangle + |\Psi_{n+1}\rangle - 2|\Psi_n\rangle)$$

3. Examinons l'action de H sur $|k_s\rangle$

$$H|k_s\rangle = \sum_{n=0}^{N-1} e^{ik_s nl} H|\Psi_n\rangle = -A \sum_{n=0}^{N-1} e^{ik_s nl} \left(|\Psi_{n-1}\rangle + |\Psi_{n+1}\rangle - 2|\Psi_n\rangle \right)$$

mais

$$\sum_n \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_s n l} |\Psi_{n-1}\rangle = \sum_n \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_s (n-1) l} \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_s l} |\Psi_{n-1}\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_s l} \sum_n \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_s n l} |\Psi_n\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_s l} |k_s\rangle$$

On a donc

$$H|k_s\rangle = 2A(1-\cos k_s l)|k_s\rangle$$

Les fréquences propres sont

$$\omega_k = 2A(1 - \cos k_s l)$$
 $|k_s| \to 0$ $\omega_k \simeq (Al^2)k_s^2$

Il est également intéressant d'adapter la méthode du \S 5.1.2 en remarquant que que H peut s'écrire sous la forme

$$H = -A \left(U_P + U_P^{-1} - 2 \right)$$

où U_P effectue une permutation circulaire des spins $n \to n+1$ et chercher les vecteurs propres $|\Psi_s\rangle$ de U_P . Écrivant

$$|\Psi_s\rangle = \sum_n c_n^s |\Psi_n\rangle$$
 $U_P |\Psi_s\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_s} |\Psi_s\rangle$

avec

$$\delta_s = \frac{2\pi s}{N} = k_s l$$

On doit avoir

$$c_{n+1} = e^{i\delta_s} c_n$$

6.6.6 Echo de spin et décomposition des niveaux en RMN

1. Le calcul de $\tilde{a}(\omega)$ donne

$$\tilde{a}(\omega) = \frac{2}{1/T_2 - \mathrm{i}\delta}$$

En utilisant (3.59) et $\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} + i \sum_k \varepsilon_{ijk} \sigma_k$, on montre

$$e^{-i\alpha\sigma_z} \sigma_y e^{-i\alpha\sigma_z} = (I\cos\alpha - i\sigma_z\sin\alpha)\sigma_y (I\cos\alpha - i\sigma_z\sin\alpha) = \sigma_y$$

ce qui donne

$$U(t) = -i\sigma_y$$

Partant de

$$\rho(t=0) = \frac{1}{2} \left(I + \frac{1}{2} \, \delta \mathbf{p} \, \sigma_y \right)$$

on obtient en l'absence de relaxation

$$U(t) \left[\frac{1}{2} \left(I + \frac{1}{2} \, \delta \mathsf{p} \, \sigma_y \right) \right] U^\dagger(t) = \frac{1}{2} \left(I + \frac{1}{2} \, \delta \mathsf{p} \, \sigma_y \right)$$

En présence de relaxation,

$$\delta p = \delta p(t=0)e^{-t/T_2}$$

puisque T_2 est le temps de relaxation transverse, et donc

$$U(t)\rho(t=0)U^{\dagger}(t) = \frac{1}{2}\left(I + \frac{1}{2}\,\delta\mathbf{p}\,\sigma_y\,\mathrm{e}^{-t/T_2}\right)$$

indépendamment de δ . L'opération de rotation du spin d'un angle π permet de réaligner les spins dans une même direction : dans l'intervalle [0,t/2] les spins s'alignent de façon aléatoire, car chaque spin voit un désaccord δ différent, mais après renversement des spins, l'évolution dans l'intervalle [t/2,t] réaligne tous les spins dans une même direction.

2. Par définition du produit tensoriel de deux opérateurs

$$(A \otimes B)|\varphi \otimes \psi\rangle = |A\varphi \otimes B\psi\rangle$$

d'où l'on déduit

$$(A \otimes B)^2 = A^2 \otimes B^2$$

et

$$\left(\sigma_z^{(1)} \otimes \sigma_z^{(2)}\right)^2 = I$$

Ceci donne l'expression de $U_{12}(t)$ en développant l'exponentielle. L'opérateur de rotation de π est

$$U[\mathcal{R}_x^{(1)}(\pi)] = -\mathrm{i}\sigma_x$$

Afin de simplifier les notations, posons $\sigma_x^{(i)} = X_i$, $\sigma_y^{(i)} = Y_i$ et $\sigma_z^{(i)} = Z_i$, d'où

$$U_{12}(t)(X_1)U_{12}(t) = [X_1 \cos \omega_{12}t + (Y_1 \otimes Z_2) \sin \omega_{12}t]U_{12}(t) = X_1$$

Comme le temps caractéristique de l'évolution due au couplage des spins est très grand par rapport à la durée d'une rotation de Rabi, on peut négliger cette évolution propre pendant la durée de la rotation, qui est essentiellement instantanée à l'échelle de l'évolution libre.

3. Les valeurs propres de $\sigma_z^{(1)} \otimes \sigma_z^{(2)}$ sont +1 et -1. En l'absence de champ de radiofréquences, on aura donc 4 niveaux d'énergie

$$\hbar(\delta^{(1)} + \delta^{(2)} + \omega_{12}), \qquad \hbar(\delta^{(1)} - \delta^{(2)} - \omega_{12}), \qquad \hbar(-\delta^{(1)} + \delta^{(2)} + \omega_{12}), \qquad \hbar(-\delta^{(1)} - \delta^{(2)} + \omega_{12})$$

Ces niveaux sont représentés sur la figure, avec les 4 transitions permises, qui ont donc pour fréquences

$$2|\delta^{(1)} \pm \omega_{12}|$$
 $2|\delta^{(2)} \pm \omega_{12}|$

6.6.8 Photons intriqués en polarisation

1. Évaluons le vecteur $|\theta\theta_{\perp}\rangle$

$$|\theta\theta_{\perp}\rangle = (\cos\theta|x\rangle + \sin\theta|y\rangle) (-\sin\theta|x\rangle + \cos\theta|y\rangle)$$
$$= -\sin\theta\cos\theta|xx\rangle + \cos^2\theta|xy\rangle - \sin^2\theta|yx\rangle + \sin\theta\cos\theta|yy\rangle$$

Pour obtenir $|\theta_{\perp}\theta\rangle$, il suffit d'échanger $x \leftrightarrow y$

$$|\theta_{\perp}\theta\rangle = -\sin\theta\cos\theta|xx\rangle + \cos^2\theta|yx\rangle - \sin^2\theta|xy\rangle + \sin\theta\cos\theta|yy\rangle$$

et on obtient en soustrayant la seconde équation de la première

$$|\theta\theta_{\perp}\rangle - |\theta_{\perp}\theta\rangle = |xy\rangle - |yx\rangle$$

2. Pour le photon 1

$$|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(-|D\rangle + |G\rangle \right) \qquad |y\rangle = \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}} \left(|D\rangle + |G\rangle \right)$$

et pour le photon 2 il faut changer $|y\rangle$ en $-|y\rangle$

$$|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(-|D\rangle + |G\rangle \right) \qquad |y\rangle = -\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}} \left(|D\rangle + |G\rangle \right)$$

et on trouve pour des photons ayant une direction de propagation opposée

$$|\Phi\rangle = \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}} (|DD\rangle - |GG\rangle)$$

Remarque : si les deux photons ont la même direction de propagation, comme c'est le cas des paires obtenues par conversion paramétrique

$$|\Phi\rangle = -\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}} (|DG\rangle - |GD\rangle)$$

Dans les deux cas on vérifie que la composante Oz du moment angulaire est nulle : $(\Sigma_{1z} + \Sigma_{2z})|\Phi\rangle = 0$, où Σ_z est donné par (3.26).

3. On trouve

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\theta\theta\rangle + |\theta_{\perp}\theta_{\perp}\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} (|DD\rangle + |GG\rangle)$$

L'application de Σ_z montre à nouveau que cet état est de moment angulaire zéro.

6.6.9 États GHZ

1. Examinons par exemple l'action de Σ_a sur $|\Psi\rangle$. Compte tenu de

$$\sigma_x |+\rangle = |-\rangle$$
 $\sigma_x |-\rangle = |+\rangle$ $\sigma_y |+\rangle = \mathrm{i} |-\rangle$ $\sigma_y |-\rangle = -\mathrm{i} |-\rangle$

nous avons

$$\Sigma_a |\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[(\mathrm{i})^2 |---\rangle - (-\mathrm{i})^2 |+++\rangle \right] = |\Psi\rangle$$

Comme $|\Psi\rangle$ est vecteur propre de Σ_a avec la valeur propre +1, le produit $A_xB_yC_y$ du résultat des mesures de σ_{xa} , σ_{yb} et σ_{yc} sera $A_xB_yC_y=1$.

2. Nous avons cette fois

$$\Sigma |\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|---\rangle - |+++\rangle] = -|\Psi\rangle$$

et donc $A_x B_x C_x = -1$. Or, compte tenu de $A_y^2 = B_y^2 = C_y^2 = 1$

$$A_x B_x C_x = (A_x B_y C_y)(A_y B_x C_y)(A_y B_y C_x) = +1$$

et il y a donc contradiction avec le réalisme local : après avoir interagi initialement, les spins ne peuvent pas transporter l'information sur les valeurs de $A_x \cdots C_y$.

6.6.11 Interférences des temps d'émission

- 1. Comme la longueur de cohérence des photons convertis est petite par rapport à la différence de marche entre les deux bras, on ne peut certainement pas observer d'interférences dans un interféromètre individuel. Mais il existe une raison plus fondamentale, qui sera expliquée à la fin de la question suivante.
- 2. On peut écrire quatre amplitudes de probabilité différentes pour la détection jointe des photons en D_1 et D_2

$$\begin{array}{rcl} A & = & a_C^1 a_C^2 & & B = a_C^1 a_L^2 \\ A' & = & \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta} \, a_L^1 a_L^2 & & B' = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta} \, a_L^1 a_C^2 \end{array}$$

L'amplitude a_C^i correspond au trajet du photon (i) passant par le bras court de l'interféromètre, a_L^i au trajet passant par le bras long. La mesure du temps d'arrivée des photons permet de distinguer entre les trajets (CL) et(LC); même si le temps d'émission de la paire est inconnu, le photon passant par le bras long arrive plus tard que celui passant par le bras court. Par exemple dans le cas (CL), le photon 1 arrive en D_1 0.7 ns avant le second photon en D_2 , ce qui est très largement supérieur au temps de résolution de 0.1 ns des détecteurs. En revanche, le dispositif expérimental ne permet pas de distinguer, même en principe, entre les trajets (CC) et (LL). Il faut donc ajouter les amplitudes de ces trajets pour obtenir la probabilité de détection en coïncidence

$$p(D_1, D_2) = |A + A'|^2 = |a_C^1 a_C^2 + e^{i\delta} a_L^1 a_L^2|^2$$

ce qui montre à l'évidence une dépendance par rapport à δ .

Dans l'expérience de l'énoncé, la fenêtre de coïncidence est inférieure aux différences de temps de parcours, ce qui permet de distinguer les trajets (LC) et (CL) des trajets (LL) et (CC). Mais cette condition n'est pas essentielle pour observer les interférences; si elle n'était pas réalisée, on ajouterait simplement un bruit de fond

$$p(D_1, D_2) = |B|^2 + |B'|^2 + |A + A'|^2$$

correspondant aux deux premiers termes sans interférences de l'équation précédente. Une autre observation importante est que si l'on supprime les miroirs semi-transparents de l'interféromètre de gauche, on conserve une information sur les temps de parcours : si le photon de gauche arrive avant celui de droite, on sait que le photon de droite a emprunté le bras long. Il n'y a donc pas de dépendance par rapport à δ et pas d'interférences. L'information disponible sur le chemin suivi par le photon dans l'interféromètre de droite efface toute possibilité d'interférences, même lorsque la longueur de cohérence est plus petite que Δl . En fait il n'est même pas nécessaire que le détecteur D_2 soit présent! Il suffit que l'information sur les temps d'arrivée soit disponible en principe, et comme nous l'avons souvent souligné, il n'est pas nécessaire que l'observation des temps d'arrivée soit effectivement réalisée! Tant que l'information sur les temps d'arrivée est disponible en principe, et elle l'est en raison de la seule présence de l'état intriqué, en aucun cas on ne peut avoir d'interférences dans un seul des deux interféromètres.

Exercices du chapitre 7

7.4.3 Relations de commutation canoniques

1. Supposant B borné, on peut définir B' = B/||B||, ||B'|| = 1, et A' = A||B|| sans modifier les relations de commutation : [A', B'] = iI. On supposera donc ||B|| = 1. Utilisons un raisonnement par récurrence en supposant

$$[B, A^n] = \mathrm{i} n A^{n-1}$$

On a alors

$$[B, A^{n+1}] = [B, AA^n] = A[B, A^n] + [B, A]A^n = i(n+1)A^n$$

ce qui prouve l'hypothèse de départ. Supposons A borné et soit ||A|| sa norme. On obtient, en utilisant l'inégalité valable pour deux opérateurs C et D

$$||C||\,||D|| \ge ||CD||$$

la relation

$$2||A^n||\,||B|| \ge ||BA^n - A^nB|| = n||A^{n-1}||$$

d'où

$$||A^n|| \ge \frac{n}{2} ||A^{n-1}||$$

On en déduit l'encadrement suivant pour $||A^n||$

$$\frac{n}{2}\,||A^{n-1}|| \leq ||A^n|| \leq ||A||\,||A^{n-1}|| \ \ {\rm car} \ \ ||A^n|| \leq ||A||\,||A^{n-1}||$$

et donc $||A|| \ge n/2$. Il est impossible que A soit borné.

2. Le problème est que si A est non borné, le vecteur $B|\varphi\rangle$ n'appartient pas au domaine de A et $AB|\varphi\rangle$ n'est pas défini : on ne peut pas prendre la conjugaison hermitique et écrire

$$\langle \varphi | AB | \varphi \rangle = \langle A\varphi | B\varphi \rangle$$

Par exemple si l'espace de Hilbert est $L^{(2)}[0,1]$ et B=X, qui est borné sur cet espace, tandis que $A=A_C$ défini au § 7.2.2, $(X\varphi)(x)=x\varphi(x)=\psi(x)$ n'appartient pas au domaine de A_C qui est tel que $\varphi(1)=C\varphi(0), |C|=1$: les conditions aux limites de ψ sont

$$\psi(1) = \varphi(1) = C\varphi(0)$$
 alors que $\psi(0) = 0$

et $\psi(1) \neq C\psi(0)$. La difficulté se voit immédiatement en représentation x

$$\int_0^1 \mathrm{d}x \, \varphi^*(x) \left(\mathrm{i} \frac{\partial}{\partial x} \, x \varphi(x) \right) \neq \int_0^1 \left(\mathrm{i} \frac{\partial \varphi(x)}{\partial x} \right)^* x \varphi(x)$$

la différence étant $|\varphi(1)|^2$.

3. La fonction

$$\varphi(x) = e^{i(2\pi n + \alpha)x}$$
 $C = e^{i\alpha}$

vérifie

$$A_C \varphi(x) = (2\pi n + \alpha)\varphi(x)$$
 $\qquad \varphi(1) = C\varphi(0)$

C'est donc un vecteur propre normalisable de valeur propre $(2\pi n + \alpha)$ de A_C , qui appartient au domaine de A_C . Le théorème de von Neumann ne s'applique pas car $AB|\varphi\rangle$ n'est défini pour aucun vecteur $|\varphi\rangle$ de \mathcal{H} , alors que le domaine où AB est défini devrait être dense dans \mathcal{H} .

Exercices du chapitre 8

8.5.2 Rotations et SU(2)

1. Partons de la forme générale d'une matrice 2×2

$$U = \left(\begin{array}{cc} a & b \\ c & d \end{array}\right)$$

et calculons $U^{\dagger}U$ qui doit être égal à I

$$U^{\dagger}U = \begin{pmatrix} |a|^2 + |b|^2 & ac^* + bd^* \\ ca^* + db^* & |c|^2 + |d|^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

ce qui donne

$$|a|^2 + |b|^2 = |c|^2 + |d|^2 = 1$$

De $c = -b^*d/a^*$ et de $\det U = ad - bc = 1$ on tire $d = a^*$.

2. À l'ordre τ

$$U^{\dagger}U = (I + i\tau^{\dagger})(I - i\tau) \simeq I - i(\tau - \tau^{\dagger})$$

et la condition $U^{\dagger}U=I$ implique $\tau=\tau^{\dagger}$. De plus la condition $\det U=1$ entraı̂ne $\operatorname{Tr}\tau=0$. La décomposition (3.54) jointe à la condition $\operatorname{Tr}\tau=0$ permet d'écrire

$$\tau = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{3} \theta_i \sigma_i$$

les angles θ_i étant infinitésima
ux puisque τ est infinitésimal.

3. Comme θ/N est infinitésimal on peut écrire

$$U_{\hat{n}}\left(\frac{\theta}{N}\right) = I - \frac{\mathrm{i}\theta}{2N} \left(\vec{\sigma} \cdot \hat{n}\right)$$

et utilisant

$$\lim_{N \to \infty} \left(1 - \frac{x}{N} \right)^N = e^{-x}$$

on déduit

$$U_{\hat{n}}(\theta) = \exp\left[-i\frac{\theta}{2} \left(\vec{\sigma} \cdot \hat{n}\right)\right]$$

4. Le déterminant de $\mathcal V$ vaut moins la longueur du vecteur $\vec V$: $\det \mathcal V = -\vec V^2$ et comme

$$\det(U\mathcal{V}U^{-1}) = \det\mathcal{V}$$

on obtient $\vec{W}^2 = \det \mathcal{W} = \vec{V}^2$, ce qui montre que la transformation conserve la longueur des vecteurs. C'est donc une rotation, ou une rotation fois une opération parité.

5. Comme W est hermitique et de trace nulle, car

$$\operatorname{Tr}(U\mathcal{V}U^{-1}) = \operatorname{Tr}\mathcal{V}$$

on peut écrire $W = \vec{\sigma} \cdot \vec{W} = \vec{\sigma} \cdot \vec{V}(\theta)$.

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta} \vec{\sigma} \cdot \vec{V}(\theta) = -\frac{\mathrm{i}}{2} [\vec{\sigma} \cdot \hat{n}, \vec{\sigma} \cdot \vec{V}(\theta)] = \vec{\sigma} \cdot (\hat{n} \times \vec{V}(\theta))$$

où nous avons utilisé (3.52), ce qui montre que $\vec{V}(\theta)$ se déduit de \vec{V} par une rotation d'angle θ autour de \hat{n}

$$\frac{\mathrm{d}\vec{V}}{\mathrm{d}\theta} = \hat{n} \times \vec{V}(\theta)$$

À toute rotation $\mathcal{R}_{\hat{n}}(\theta)$ correspondent deux matrices $U_{\hat{n}}:U_{\hat{n}}(\theta)$ et $U_{\hat{n}}(\theta+2\pi)=-U_{\hat{n}}(\theta)$.

8.5.4 Algèbre de Lie d'un groupe continu

1 Comme $g(\theta = 0) = I$, la loi de composition s'écrit

$$g(\overline{\theta})I = g(\overline{\theta}) = g(f(\overline{\theta}, 0)) \Longrightarrow f_a(\overline{\theta}, 0) = \overline{\theta}_a$$

On écrit a priori un développement à l'ordre θ^2 de $f_a(\overline{\theta}, \theta)$

$$f_a(\overline{\theta}, \theta) = \overline{\theta}_a + \theta_a + \lambda_{abc}\theta_b\theta_c + \overline{\lambda}_{abc}\overline{\theta}_b\overline{\theta}_c + f_{abc}\overline{\theta}_b\theta_c + O(\theta^3, \theta^2\overline{\theta}, \theta\overline{\theta}^2, \overline{\theta}^3)$$

la condition $f_a(\overline{\theta}, \theta = 0) = \overline{\theta}_a$ entraı̂ne $\overline{\lambda}_{abc} = 0$ et de même $\lambda_{abc} = 0$.

3. On a d'une part en négligeant les termes d'ordre $(\theta^3, \theta^2 \overline{\theta}, \theta \overline{\theta}^2, \overline{\theta}^3)$

$$U(\overline{\theta})U(\theta) = I - i\overline{\theta}_a T_a - i\theta_a T_a - \frac{1}{2}(\overline{\theta}_b \overline{\theta}_c + \theta_b \theta_c) T_{bc} - \overline{\theta}_a \theta_b T_a T_b$$

et d'autre part

$$U(f(\theta, \overline{\theta})) = I - iT_a(\theta_a + \overline{\theta}_a + f_{abc}\overline{\theta}_b\theta_c) - \frac{1}{2}(\theta_b + \overline{\theta}_b)(\theta_c + \overline{\theta}_c)T_{bc}$$

En réétique tant les indices de sommation et compte tenu de la propriété de symétrie $T_{bc}=T_{cb},$ car

$$T_{bc} = -\frac{\partial^2 U}{\partial \theta_a \partial \theta_b}\Big|_{\theta = \theta_b = 0}$$

la comparaison des deux expressions donne

$$\overline{\theta}_b \theta_c T_b T_c = i f_{abc} T_a \overline{\theta}_b \theta_c + \overline{\theta}_b \theta_c T_{bc}$$

On en déduit

$$T_b T_c = T_{bc} + i f_{abc} T_a$$

$$T_c T_b = T_{bc} + i f_{acb} T_a$$

et en retranchant les deux équations

$$[T_b, T_c] = i[f_{abc} - f_{acb}]T_a$$

La constante de structure C_{abc} vaut

$$C_{abc} = [f_{abc} - f_{acb}] = -C_{acb}$$

8.5.5 Règle de somme de Thomas-Reiche-Kuhn

1. De la relation générale (voir(8.41))

$$[X, f(P)] = i\hbar \frac{\partial f}{\partial P}$$

on tire

$$[P^2, X] = -2i\hbar P$$
 et $[[P^2, X], X] = -2i[P, X] = -2\hbar^2$

d'où

$$\left\lceil \frac{P^2}{2m} + V(X), X \right\rceil = [H, X] = -\frac{\mathrm{i}\hbar}{m} \, P \qquad \quad [[H, X], X] = -\frac{\hbar^2}{m} \, P \, \qquad \quad [[H, X], X] = -\frac{\hbar^2}{m}$$

2. Par ailleurs le commutateur s'exprime aussi comme

$$[[H, X], X] = HX^2 - 2XHX + X^2H$$

et en utilisant $\langle \varphi_n | H | \varphi_m \rangle = E_n \delta_{nm}$

$$\langle \varphi_0 | HX^2 | \varphi_0 \rangle = \sum_{n,m} \langle \varphi_0 | H | \varphi_n \rangle \langle \varphi_n | X | \varphi_m \rangle \langle \varphi_m | X | \varphi_0 \rangle = E_0 \sum_n |X_{n0}|^2$$

$$\langle \varphi_0 | X HX | \varphi_0 \rangle = \sum_n \langle \varphi_0 | X | \varphi_n \rangle \langle \varphi_n | H | \varphi_m \rangle \langle \varphi_m | X | \varphi_0 \rangle = \sum_n E_n |X_{n0}|^2$$

d'où le résultat

$$\sum_{n} \frac{2m|X_{n0}|^2}{\hbar^2} (E_n - E_0) = 1$$

8.5.8 Hamiltonien dans un champ magnétique

1. Ecrivons \mathcal{L} sous la forme

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} m \sum_{i=1}^{3} \dot{x}_{i}^{2} - q \overline{V}(\vec{r}, t) + q \sum_{i=1}^{3} A_{i}(\vec{r}, t) \dot{x}_{i}$$

où i, k = x, y, z. Ceci donne pour les dérivées partielles

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}_{k}} = p_{k} = m\dot{x}_{k} + qA_{k}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}_{k}} = m\ddot{x}_{k} + q\sum_{i=1}^{3} (\partial_{i}A_{k})\dot{x}_{i}$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x_{k}} = -q\partial_{k}\overline{V} - q(\partial_{t}A_{k}) + q\sum_{i=1}^{3} (\partial_{k}A_{i})\dot{x}_{i}$$

d'où les équations du mouvement

$$m\ddot{x}_k = -q\partial_k \overline{V} - q(\partial_t A_k + q \sum_{i=1}^3 (\partial_k A_i - \partial_i A_k) \dot{x}_i$$

Transformons le dernier terme de cette équation en utilisant l'expression du champ magnétique¹

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$$
 ou $B_l = \sum_{m,n} \varepsilon_{lmn} \partial_m A_n$

$$(\partial_x A_y - \partial_y A_x \, \dot{x} = B_z \dot{x}$$

 $^{^{1}\}mathrm{On}$ peut aussi utiliser une composante particulière, par exemple la composante x

où ε_{ijk} est le tenseur complètement antisymétrique, soit (exercice 3.3.7)

$$\sum_{l} \varepsilon_{lki} B_l = \partial_k A_i - \partial_i A_k$$

On en déduit

$$\sum_{i} (\partial_k A_i - \partial_i A_k) \dot{x}_i = \sum_{i,l} \varepsilon_{lki} B_l \dot{x}_i = (\vec{v} \times \vec{B})_k$$

En remarquant que le champ électrique a pour composante k

$$E_k = -\partial_k \overline{V} - \partial_t A_k$$

nous obtenons la loi de Lorentz

$$m\frac{\mathrm{d}^2\vec{r}}{\mathrm{d}t^2} = q(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B})$$

Chapitre 9

Exercices du chapitre 9

9.6.2 Étalement du paquet d'ondes

1.

$$[P^2, X] = P[P, X] + [P, X]P = -2i\hbar P$$

On peut aussi utiliser

$$[f(P), X] = -i\hbar f'(P)$$

2. D'après le théorème d'Ehrenfest (4.26) en choisissant ${\cal A}=X^2$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle X^2\rangle(t) = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\langle [H, X^2]\rangle = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\Big\langle \Big[\frac{P^2}{2m} + V(X), X^2\Big]\Big\rangle$$
$$= \frac{\mathrm{i}}{2\hbar m}\langle [P^2, X^2]\rangle$$

Mais

$$[P^2, X^2] = -2i\hbar(XP + PX)$$

ce qui donne finalement

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle X^2\rangle(t) = \frac{1}{m}\langle XP + PX\rangle$$

En passant en représentation x

$$\langle PX \rangle = \int dx \, \varphi^*(x) \left[-i \frac{\partial}{\partial x} (x \varphi(x)) \right] = i \int dx x \varphi(x) \frac{\partial \varphi^*(x)}{\partial x}$$

où la seconde expression est obtenue par une intégration par parties. En combinant avec

$$\langle XP \rangle = \int dx \, \varphi^*(x) x \left[-i \frac{\partial \varphi(x)}{\partial x} \right]$$

on aboutit à

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle X^2\rangle(t) = \frac{\mathrm{i}\hbar}{m} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \, x \left[\varphi \frac{\partial \varphi^*}{\partial x} - \varphi^* \frac{\partial \varphi}{\partial x}\right]$$

Ces résultats sont valables pour une particule dans un potentiel, et pas seulement pour une particule libre

3. En revanche, les résultats qui suivent ne sont valables que pour une particule libre, V(X)=0. Le hamiltonien est alors le hamiltonien cinétique $H=K=P^2/(2m)$. On calcule la dérivée seconde de $\langle X^2 \rangle (t)$

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\langle X^2(t)\rangle = \frac{\mathrm{i}}{\hbar} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \langle [K, X^2]\rangle = -\frac{1}{\hbar^2} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \langle [K, [K, X^2]]\rangle$$

où nous avons utilisé deux fois le théorème d'Ehrenfest. Compte tenu de

$$[P^2, XP + PX] = -4i\hbar P^2$$

on trouve

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2} \langle X^2 \rangle (t) = \frac{2}{m} \langle P^2 \rangle$$

La dérivée troisième de $\langle X^2 \rangle(t)$ et les dérivées d'ordre supérieur sont nulles

$$\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}t^n} \langle X^2 \rangle(t) = 0 \qquad n \ge 3$$

car $[K,[K,X^2]] \propto P^2$ et $[K,P^2] = 0.$ $\langle X^2 \rangle (t)$ est donc un polynôme du second degré en t

$$\langle X^2 \rangle(t) = \langle X^2 \rangle(t=0) + t \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \langle X^2 \rangle(t) \Big|_{t=0} + \frac{1}{2} t^2 \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2} \langle X^2 \rangle(t) \Big|_{t=0}$$

Pour calculer la dispersion on utilise pour une particule libre

$$\Delta x^{2}(t) = \langle X^{2} \rangle(t) - [\langle X \rangle(t)]^{2}$$

et

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle X\rangle(t) = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}[K,X] = \left\langle\frac{P}{m}\right\rangle$$

ce qui donne

$$\langle X \rangle(t) = \langle X \rangle(t=0) + t \left\langle \frac{P}{m} \right\rangle$$

car les dérivées d'ordre ≥ 2 sont nulles.

9.6.3 Paquet d'ondes gaussien

On rapplle deux résultats sur les intégrales gaussiennes

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x \, \mathrm{e}^{-\alpha^2 x^2} = \frac{\sqrt{\pi}}{\alpha} \qquad \Delta x = \frac{1}{\sqrt{2} \, \alpha}$$

1. Posant $k' = k - \overline{k}$

$$\int dk |A(k)|^2 = \left(\frac{1}{\pi\sigma^2}\right)^{1/2} \int dk' \exp\left(-\frac{k'^2}{\sigma^2}\right) = 1$$

et $\Delta k = \sigma/\sqrt{2}$. Calculons la fonction d'onde au temps t=0

$$\varphi(x,0) = \left(\frac{1}{\pi\sigma^2}\right)^{1/4} e^{i\overline{k}x} \int \frac{dk'}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(ik'x - \frac{{k'}^2}{2\sigma^2}\right)$$
$$= \frac{\sigma^{1/2}}{\pi^{1/4}} \exp\left[i\overline{k}x - \frac{1}{2}\sigma^2 x^2\right]$$

Le module carré de la fonction d'onde est

$$|\varphi(x,t)|^2 = \frac{\sigma}{\sqrt{\pi}} e^{-\sigma^2 x^2}$$

qui est bien normalisé à l'unité avec $\Delta x = 1/(\sqrt{2}\,\sigma)$, et donc

$$\Delta x \, \Delta k = \frac{1}{2}$$

2. On part de l'expression de $\varphi(x,t)$

$$\varphi(x,t) = \left(\frac{1}{\pi\sigma^2}\right)^{1/4} \int \frac{\mathrm{d}k}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(\mathrm{i}kx - \mathrm{i}\frac{\hbar k^2}{2m}t - \frac{\left(k - \overline{k}\right)^2}{2\sigma^2}\right)$$

et on récrit l'exposant, à un facteur i près avec $k'=k-\overline{k}$

$$kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t - \frac{\left(k - \overline{k}\right)^2}{2\sigma^2} = \overline{k}x + k'x - \frac{\hbar \overline{k}^2}{2m}t - \frac{\hbar \overline{k}k'}{m}t - \frac{\hbar k'^2}{2m}t - \frac{k'^2}{\sigma^2}$$

 $\varphi(x,t)$ s'écrit

$$\varphi(x,t) = \left(\frac{1}{\pi\sigma^2}\right)^{1/4} \exp\left(i\overline{k}x - i\frac{\hbar\overline{k}^2}{2m}t\right) \int \frac{\mathrm{d}k'}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[ik'\left(x - \frac{\hbar\overline{k}}{2m}t\right)\right] \exp\left[-\frac{k'^2}{2}\left(\frac{1}{\sigma^2} + \frac{i\hbar t}{2m}\right)\right]$$

Si l'on peut négliger le terme $i\hbar t/m$ dans la seconde exponentielle, on obtient simplement

$$\varphi(x,t) = \left(\frac{1}{\pi\sigma^2}\right)^{1/4} \exp\left(i\overline{k}x - i\frac{\hbar\overline{k}^2}{2m}t\right) \exp\left[-\frac{\sigma^2}{2}\left(x - \frac{\hbar\overline{k}}{m}t\right)^2\right]$$
$$= \exp\left(i\frac{\hbar\overline{k}^2}{2m}t\right) \varphi(x - v_g t, 0) = e^{i\omega(\overline{k})t}\varphi(x - v_g t, 0)$$

3. Pour le calcul général, on pose

$$\frac{1}{{\sigma'}^2} = \frac{1}{\sigma^2} + \frac{\mathrm{i}\hbar t}{m}$$

et on trouve, en effectuant l'intégrale

$$\varphi(x,t) = \left(\frac{1}{\pi\sigma^2}\right)^{1/4} \sigma' \exp\left(-\frac{1}{2}{\sigma'}^2(x - v_g t)^2\right) \exp\left[\mathrm{i}(\overline{k}x - \omega(\overline{k})t)\right]$$

Prenant le module carré

$$|\varphi(x,t)|^2 = \left(\frac{1}{\pi\sigma^2}\right)^{1/2} |\sigma'|^2 \exp\left(-\operatorname{Re}\sigma'^2(x-v_g t)^2\right)$$

Le pic de $|\varphi(x,t)|^2$ est centré à $x=v_gt$ avec une largeur

$$\Delta x^2(t) = \frac{1}{2 \operatorname{Re} {\sigma'}^2}$$

soit

$$\Delta x^2(t) = \frac{1}{2\sigma^2} \left(1 + \frac{\hbar^2 \sigma^4 t^2}{m^2} \right)$$

La largeur du paquet d'ondes augmente avec le temps, en raison du terme $\hbar^2\sigma^4t^2/m^2$ dans la parenthèse.

4. $\Delta x^2(t)$ double pour

$$t = \frac{m}{\hbar\sigma^2} = \frac{2m\Delta x^2(t=0)}{\hbar} = 3.2 \times 10^{-11} \,\mathrm{s}$$

9.6.7 Potentiel en fonction δ

1. La dimension de $\delta(x)$ est \mathcal{L}^{-1} et si g a pour dimension l'inverse d'une longueur, la dimension de V(x) est

$$M^2 \mathcal{L}^4 \mathcal{T}^{-2} M^{-1} \mathcal{L}^{-1} \mathcal{L}^{-1} = M \mathcal{L}^2 \mathcal{T}^{-2}$$

ce qui est bien la dimension d'une énergie.

2. On intègre l'équation de Schrödinger écrite sous la forme

$$\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\right]\varphi(x) = g\,\delta(x)\,\varphi(x)$$

entre $x = -\varepsilon$ et $x = +\varepsilon$

$$\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} \varphi''(x) dx = \varphi'(-\varepsilon) - \varphi'(-\varepsilon) = g\varphi(0)$$

La fonction $\varphi(x)$ est continue à x=0 mais sa dérivée $\varphi'(x)$ ne l'est pas. Dans le cas d'un état lié, on doit avoir

$$\varphi(x) = Ae^{-\kappa|x|} \text{ pour } x \neq 0$$

On a donc

$$\varphi'(0^+) - \varphi'(0^-) = -2\kappa A = -|g|\varphi(0) = -|g|A$$

d'où $2\kappa = |g|$ et la valeur de E

$$E = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} = -\frac{\hbar^2 g^2}{8m}$$

Il n'y a pas de solution impaire car $\varphi(0) = 0$ pour une solution impaire. Retrouvons le résultat en prenant la limite $a \to 0$, $V_0 a \to \hbar^2 g/(2m)$ du puits carré dont les niveaux dénergie correspondant à une fonction d'onde paire sont donnés par (9.82)

$$\kappa = k \tan \frac{ka}{2}$$

ce qui donne

$$k\simeq rac{\sqrt{2m|V_0|}}{\hbar} \qquad anrac{ka}{2}\simeq anrac{\sqrt{2m|V_0|}a}{2\hbar} o 0$$

et

$$\kappa \simeq \frac{\sqrt{2m|V_0|}}{\hbar} \, \frac{\sqrt{2m|V_0|} \, a}{2\hbar} = \frac{m|V_0|a}{\hbar^2} = \frac{m}{\hbar^2} \, \frac{\hbar^2|g|}{2m} = \frac{1}{2} \, |g|$$

3. Comme le potentiel de la molécule diatomique est pair, on cherche des solutions paires et des solutions impaires. Pour les solutions paires

$$x < -l : \varphi(x) = e^{\kappa x}$$
 $-l < x < l : \varphi(x) = A \cosh \kappa x$ $x > l : \varphi(x) = e^{-\kappa x}$

La continuité de φ au point x=l donne

$$A \cosh \kappa l = e^{-\kappa l}$$

et la continuité de la dérivée au même point

$$-\kappa e^{-\kappa l} - A\kappa \sinh \kappa l = -|q|e^{-\kappa l}$$

On remarque que

$$A \sinh \kappa l = A \cosh \kappa l \tanh \kappa l = e^{-\kappa l} \tanh \kappa l$$

d'où l'équation donnant la valeur propre de l'énergie

$$(1 + \tanh \kappa l) = \frac{|g|}{\kappa}$$

La solution est unique et donné par l'intersection des courbes $(1 + \tanh \kappa l)$ et g/κ tracées en fonction de κ . On peut récrire la valeur de κ

$$\kappa = \frac{|g|}{2} \left(1 + e^{-2\kappa l} \right)$$

Cherchons maintenant les solutions impaires, qui sont de la forme

$$x < -l : \varphi(x) = -e^{\kappa x}$$
 $-l < x < l : \varphi(x) = A \sinh \kappa x$ $x > l : \varphi(x) = e^{-\kappa x}$

La condition de continuité de $\varphi(x)$ et la condition sur sa dérivée à x=l sont maintenant

$$A \sinh \kappa l = e^{-\kappa l}$$
$$-\kappa e^{-\kappa l} - A\kappa \cosh \kappa l = -|g|e^{-\kappa l}$$

ce qui donne

$$\kappa = \frac{|g|}{2} \left(1 - e^{-2\kappa l} \right)$$

Cette équation a une solution et une seule si la dérivée de $|g|[1 - \exp(-2\kappa l)]/2 > \kappa$ à $\kappa = 0$, c'est-à-dire si |g|l > 1. Il n'y pas de solution impaire si |g|l < 1.

4. On considère deux puits de potentiel profonds et étroits de largeur a distants de l, avec $a \ll l$. On approxime donc les deux puits par des fonctions delta, ce qui ramène au potentiel de la question précédente, et on suppose $\kappa l \gg 1$. Dans ces conditions, il existe deux états liés, l'un pair d'énergie correspondant à

$$\kappa_{+} = \frac{|g|}{2} (1 + e^{-2\kappa l})$$

et l'autre impair d'énergie correspondant à

$$\kappa_{-} = \frac{|g|}{2} (1 - e^{-2\kappa l})$$

La différence d'énergie entre les deux états est donc

$$E_{-} - E_{+} = -\frac{\hbar^{2}}{2m} (\kappa_{-}^{2} - \kappa_{+}^{2}) = \frac{\hbar^{2}}{2m} g^{2} e^{-2\kappa l}$$

l'énergie moyenne E_0 étant

$$E_0 = \frac{1}{2}(E_+ + E_-) \simeq -\frac{\hbar^2 g^2}{8m}$$

On peut donc écrire

$$E_{+} \simeq -\frac{\hbar^{2}g^{2}}{8m} \left(1 + 2e^{-2\kappa l}\right)$$

$$E_{-} \simeq -\frac{\hbar^{2}g^{2}}{8m} \left(1 - 2e^{-2\kappa l}\right)$$

Ce sont les valeurs propres d'un hamiltonien à deux niveaux

$$H = -\frac{\hbar^2 g^2}{8m} \begin{pmatrix} 1 & -2e^{-2\kappa l} \\ -2e^{-2\kappa l} & 1 \end{pmatrix}$$

D'après (12.109), le coefficent de transmission par effet tunnel d'une particule d'énergie $\simeq 0$ par une barrière de hauteur V_0 et de largeur 2l est

$$T \simeq e^{-4\kappa l}$$

et les éléments non diagonaux du hamiltonien sont $\simeq \sqrt{T}$.

5. On écrit la fonctions d'onde

$$\begin{aligned} x &< 0 & : & \varphi(x) = A \mathrm{e}^{\mathrm{i} k x} + B \mathrm{e}^{-\mathrm{i} k x} \\ x &> 0 & : & \varphi(x) = F \mathrm{e}^{\mathrm{i} k x} + G \mathrm{e}^{-\mathrm{i} k x} \end{aligned}$$

en choisissant le cas F=1, G=0. La condition de continuité à x=0 donne

$$A + B = 1$$

tandis que la condition sur la dérivée est

$$ik - ik(A - B) = g$$

On en tire

$$A = 1 + \frac{\mathrm{i}g}{2k} \qquad B = -\frac{\mathrm{i}g}{2k}$$

d'où les éléments de la matrice de passage

$$M_{11} = 1 + \frac{ig}{2k}$$
 $M_{12} = \frac{ig}{2k}$

6. La condition

$$\varphi_q(x) = e^{iql}\varphi_q(x-l)$$

donne

$$Fe^{ikx} + Ge^{-ikx} = e^{iql} \left(Ae^{ik(x-l)} + Be^{ik(x+l)} \right)$$

soit

$$F = A e^{i(q-k)} \qquad G = B e^{i(q+l)}$$

Les conditions de continuité de $\varphi_q(x)$ et la condition sur sa dérivée s'écrivent

$$A\left[1 - e^{i(q-k)l}\right] + B\left[1 - e^{i(q+k)l}\right] = 0$$

$$A\left[g + ik\left(1 - e^{i(q-k)l}\right)\right] + B\left[g - ik\left(1 - e^{i(q+k)l}\right)\right] = 0$$

On obtient donc un système de deux équations à deux inconnues A et B dont le discriminant Δ doit être nul si l'on veut une solution non triviale. Posant $\alpha = (q - k)l$ et $\beta = (q + k)l$

$$\Delta = \det \left(\begin{array}{cc} 1 - \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha} & 1 - \mathrm{e}^{\mathrm{i}\beta} \\ g + \mathrm{i}k \left(1 - \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha} \right) & g - \mathrm{i}k \left(1 - \mathrm{e}^{\mathrm{i}\beta} \right) \end{array} \right) = 0$$

Le calcul de Δ donne

$$\Delta = g \left(e^{i\beta} - e^{i\alpha} \right) - 2ik \left(1 - e^{i\alpha} - e^{i\beta} + e^{i(\alpha + \beta)} \right) = 0$$

et en multipliant par $\exp(-iql)$

$$2ig\sin kl - 4ik(\cos ql - \cos kl) = 0$$

On retrouve bien (9.108)

$$\cos ql = \cos kl + \frac{g}{2k}\sin kl$$

9.6.12 Étude de l'expérience de Stern-Gerlach

1. Comme le plan yOz est un plan de symétrie, B_z doit être une fonction paire de x et on doit avoir

$$\left. \frac{\partial B_z}{\partial x} \right|_{x=0} = 0$$

Par invariance par translation le long de Oy

$$\left. \frac{\partial B_z}{\partial y} \right|_{x=0} = 0$$

Les deux composantes non nulles du champ magnétique sont, au voisinage de x=0

$$B_x = -bx B_z = B_0 + bz$$

Ce champ vérifie bien les deux équations de Maxwell (1.8) et (1.9) dans le vide $\vec{\nabla} \times \vec{B} = 0$ et

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = \frac{\partial B_x}{\partial x} + \frac{\partial B_z}{\partial z} = -b + b = 0$$

L'énergie potentielle est

$$-\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\mu_x B_x - \mu_z B_z = b\mu_x x - b\mu_z z$$

d'où la force \vec{F} de composantes

$$F_x = \frac{\partial(-\vec{\mu}\cdot\vec{B})}{\partial x} = b\mu_x$$
 $F_z = \frac{\partial(-\vec{\mu}\cdot\vec{B})}{\partial z} = -b\mu_z$

Le terme $B_0\hat{z}$ du champ magnétique entraı̂ne une précession de Larmor du spin autour de l'axe Oz (§ 3.2.5) où μ_z reste constant. En revanche, en raison de cette précession, la valeur moyenne de μ_x est nulle : $\langle \mu_x \rangle = 0$, et la force suivant Ox se moyenne à zéro si le temps de transit est $\gg 1/\omega$, car le spin effectue un grand nombre de révolutions autour de Oz.

2. La force sur le moment magnétique est verticale et constante; elle vaut $F=\pm \mu b$ pour un spin orienté suivant $\pm \hat{z}$. L'écart entre les trajectoires d'un spin orienté vers le haut et d'un spin orienté vers le bas à la sortie de l'entrefer est donc

$$\delta = 2\frac{1}{2}\frac{F}{m}t^2 = \frac{F}{m}\left(\frac{L}{v}\right)^2 = \frac{\mu b}{m}\left(\frac{L}{v}\right)^2$$

Évaluons aussi le produit $\Delta z \Delta p_z$

$$\Delta z \Delta p_z \sim (10^{-4}) (1.8 \times 10^{-25}) (10) = 1.8 \times 10^{-28} \,\text{MKSA} \sim 10^6 \,\hbar$$

La description par des trajectoires classiques est bien légitime.

3. L'énergie potentielle effective d'un spin orienté vers le haut (vers le bas) est $-\mu bz$, et les équations de Schrödinger pour φ_{\pm} sont

$$i\hbar \frac{\partial \varphi_{\pm}}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \mp \mu bz\right) \varphi_{\pm} = H_{\omega} \varphi_{\pm}$$

En utilisant le théorème d'Ehrenfest (4.26)

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \langle \vec{R}_{\pm} \rangle (t) = \frac{\mathrm{i}}{\hbar} [H, \vec{R}_{\pm}] = \frac{1}{m} \langle \vec{P}_{\pm} \rangle$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \langle P_{x,y,\pm} \rangle (t) = \frac{\mathrm{i}}{\hbar} [H, P_{x,y,\pm}] = 0$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \langle P_{z,\pm} \rangle (t) = \frac{\mathrm{i}}{\hbar} [H, P_{z,\pm}] = \pm \mu b$$

Ce dernier résultat se déduit de

$$\mp [\mu b Z, P_z] = \mp i\hbar \mu b$$

On en déduit

$$\langle Z_{\pm} \rangle = \pm \frac{\mu b}{2m} t^2$$

et le centre du paquet d'ondes suit donc le mouvement classique.

4. Effectuons une réflexion par rapport au plan xOy. Dans cette réflexion, $\vec{\mu}$ ne change pas, car l'orientation d'une boucle de courant située dans le plan xOy est inchangée. Dans cette même opération, \vec{B} change de sens, mais pas le gradient, et donc ∇B est dirigé suivant $-\hat{x}$. Mais l'image de la trajectoire dans le miroir part toujours dans la direction $+\hat{x}$, et donc l'image de l'expérience dans le miroir n'est pas physiquement possible, sauf si la trajectoire n'est pas déviée.

9.6.13 Modèle de mesure de von Neumann

1. L'opérateur d'évolution $U(t, t_0)$ vérifie d'après (4.17)

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} U(t, t_0) = [g(t)AP] U(t, t_0)$$

qui s'intègre en

$$U(t, t_0) = \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}AP \int_{t_0}^t g(t')\mathrm{d}t'\right)$$

Entre les instants t_i et t_f on a donc

$$U(t_f, t_i) \simeq \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}AP \int_{-\infty}^{+\infty} g(t')\mathrm{d}t'\right) = \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}gAP\right)$$

2. L'action de $U(t_f, t_i)$ sur le vecteur $|n \otimes \varphi\rangle$ est

$$U(t_f, t_i)|n \otimes \varphi\rangle = e^{-iga_n P/\hbar}|n \otimes \varphi\rangle$$

Mais $\exp(-iga_n P/\hbar)$ est un opérateur de translation de ga_n et d'après (9.13)

$$\left(e^{-iga_n P/\hbar}\varphi\right)(x) = \varphi(x - ga_n)$$

3. D'après la linéarité de la mécanique quantique, le vecteur d'état final est

$$|\chi_f\rangle = \sum_n c_n |n \otimes \varphi_n\rangle$$

L'opérateur statistique réduit de S est d'après (6.33)

$$\rho^{(1)} = \sum_{n,m} c_n c_m^* |m\rangle \langle n| \langle \varphi_m | \varphi_n \rangle = \sum_n |c_n|^2 |n\rangle \langle n|$$

parce que $\langle \varphi_m | \varphi_n \rangle = \delta_{nm}$. Le système S est donc un mélange statistique d'états $|n\rangle$ avec un poids $|c_n|^2$, et la probabilité d'observer S dans l'état $|n\rangle$ est $|c_n|^2$.

Chapitre 10

Exercices du chapitre 10

On rappelle que l'on utilise dans ce chapitre un système d'unités où $\hbar=1$

10.7.5 Moment angulaire orbital

1. D'après l'expression de l'opérateur moment angulaire orbital en fonction des opérateurs impulsion et position \vec{R} et \vec{P}

$$[L_x, L_y] = [YP_z - ZP_y, ZP_x - XP_z]$$
$$= [YP_z, ZP_x] + [ZP_y, XP_z]$$
$$= i[-YP_x + XP_y] = iL_z$$

2. Partons de l'équation (*cf.* (10.40))

$$\left(e^{-i\alpha L_x}f\right)(\vec{r}) = f\left(\mathcal{R}_{\hat{x}}^{-1}[\alpha](\vec{r})\right) = f\left(\mathcal{R}_{\hat{x}}[-\alpha](\vec{r})\right)$$

où $\mathcal{R}_{\hat{x}}[\alpha]$ est une rotation d'angle α autour de Ox. On prend α infinitésimal, $\alpha \to \alpha + d\alpha$; dans une rotation d'angle $-\alpha$ autour de Ox

$$y' = z \sin \alpha + y \cos \alpha$$
 $dy = z d\alpha$
 $z' = z \cos \alpha - y \sin \alpha$ $dz = -y d\alpha$

Dans cette rotation, $\theta \to \theta + \mathrm{d}\theta$ et $\phi \to \phi + \mathrm{d}\phi$, que l'on détermine par

$$dy = r \cos \theta \sin \phi d\theta + r \sin \theta \cos \phi d\phi$$
$$dz = -r \sin \theta d\theta$$

ce qui donne

$$d\theta = \sin \phi \, d\alpha$$
 $d\phi = \frac{\cos \phi}{\tan \theta} \, d\alpha$

Ceci permet d'identifier L_x

$$[-\mathrm{id}\alpha L_x f](\vec{r}) = \mathrm{d}\alpha \left(\sin\phi \frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos\phi}{\tan\theta} \frac{\partial}{\partial\phi}\right) f(\vec{r})$$

soit

$$L_x = i \left(\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos \phi}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right)$$

Pour calculer L_y on peut utiliser la même méthode, ou bien se servir de la relation de commutation

$$L_y = -i[L_z, L_x] = -\left[\frac{\partial}{\partial \phi}, L_x\right]$$

En tenant compte de

$$\left[\frac{\partial}{\partial \phi}, f(\phi)\right] = f'(\phi)$$

$$\left[\frac{\partial}{\partial \phi}, f(\phi) \frac{\partial}{\partial \phi}\right] = f'(\phi) \frac{\partial}{\partial \phi}$$

on obtient

$$L_y = i \left(-\cos\phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\sin\phi}{\tan\theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right)$$

3. L'opérateur $L_z = -\mathrm{i}\partial/\partial\phi$ est défini sur les fonctions périodiques $f(\phi) = f(\phi + 2\pi)$ et il est autoadjoint sur ce domaine (voir § 7.2.2). En revanche la fonction $\phi f(\phi)$ n'est pas périodique et elle n'appartient pas au domaine de L_z . On ne peut donc pas définir ϕL_z et écrire une relation de commutation entre ϕ et L_z . On ne peut pas non plus utiliser la méthode de l'exercice 9.7.1 car les bornes d'intégration contribuent aux intégrations par parties.

10.7.6 Relation entre les matrices de rotation et les harmoniques sphériques

1. La fonction f(0,0,z) est invariante par rotation autour de Oz. L'action de $\exp(-i\alpha L_z)$ sur f(0,0,z) est équivalente à l'identité et donc $L_z f(0,0,z) = 0$. En physique classique

$$l_z = xp_y - yp_x$$

et $l_z = 0$ si x = y = 0, c'est-à-dire si la trajectoire de la particule suit l'axe des z.

Par définition

$$\langle lm|\theta,\phi\rangle = Y_l^{m*}(\theta,\phi)$$

mais on a aussi

$$\langle lm|\theta,\phi\rangle = \langle lm|e^{-i\phi L_z} e^{-i\theta L_y}|\theta=0,\phi=0\rangle$$
$$= \sum_{l',m'} \langle lm|e^{-i\phi L_z} e^{-i\theta L_y}|l'm'\rangle\langle l'm'|\theta=0,\phi=0\rangle$$

en introduisant un système complet d'états

$$\sum_{l',m'} |l'm'\rangle\langle l'm'| = I$$

D'après le résultat de la question 1

$$\langle l'm'|\theta=0, \phi=0\rangle \propto \delta_{m'0}$$

et d'après (10.32)

$$\langle lm|e^{-i\phi L_z}e^{-i\theta L_y}|l',0\rangle = \delta_{l'l}D_{m0}^{(l)}(\theta,\phi)$$

En fait on peut facilement obtenir le coefficient de proportionnalité car

$$\langle l'm'|\theta = 0, \phi = 0 \rangle = \delta_{m'0}Y_l^0(\theta = 0, \phi = 0) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}$$

en utilisant (10.61) et la propriété $P_l(1) = 1$.

10.7.8 Puits sphérique

1. Posant E=-B et $(\hbar=1)$

$$k = \sqrt{2m(V_0 - B)} \qquad \qquad \kappa = \sqrt{2mB}$$

on écrit la fonction d'onde radiale dans l'onde s

$$r < R$$
: $u(r) = A\sin kr$ $r > R$: $u(r) = Be^{-\kappa r}$

La continuité de la dérivée logarithmique donne la relation

$$k \cot kR = -\kappa$$

Comme dans § 9.3.3, on définit $U = 2mV_0$ et $\kappa^2 = U - k^2$. L'équation aux valeurs propres devient

$$\cot kR = -\frac{\sqrt{U - k^2}}{k}$$

et ses solutions sont données par la figure 9.12 (traits pointillés) pour les solutions impaires du puits carré à une dimension. Il n'y a de solution que si $kR > \pi/2$.

2. Supposant l'énergie de liaison du deutéron $B \ll V_0$, prenant pour masse réduite la moitié de la masse du proton $m_p/2$ et rétablissant \hbar

$$\frac{m_p V_0 R^2}{\hbar^2} = \frac{\pi^2}{4}$$

On trouve numériquement $V_0 \simeq 100 \,\mathrm{MeV} \gg B$

3. L'équation d'onde radiale est

$$\left[-\frac{1}{2m} \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + \frac{A}{r^2} - \frac{B}{r} \right] u(r) = Eu(r)$$

qui est analogue à celle de l'atome d'hydrogène (10.86) avec $l(l+1)/(2m) \to A$ et $B \to e^2$.

10.7.13 Diffusion de la lumière

1. Si le photon est émis suivant l'axe Oz avec une polarisation circulaire droite (D) ou gauche (G), par conservation du moment angulaire, les deux amplitudes non nulles sont

$$a = \langle D, \theta = 0 | T | j = 1, m = 1 \rangle$$
 $a' = \langle G, \theta = 0 | T | j = 1, m = -1 \rangle$

Si la transition est dipolaire électrique, nous avons vu au § 10.5.2 que a=a' (avec nos conventions de phase). On en déduit, en utilisant l'invariance par rotation de la transition, $[U(\mathcal{R}), T] = 0$

$$\begin{array}{lll} a_{D}^{m=1}(\theta) & = & \langle D, \theta | T | j = 1, m = 1 \rangle = \langle D, \theta = 0 | T \, U^{\dagger}[\mathcal{R}_{\hat{y}}(\theta)] | j = 1, m = 1 \rangle \\ & = & \langle D, \theta = 0 | T | j = 1, m = 1 \rangle \langle j = 1, m = 1 | U^{\dagger}[\mathcal{R}_{\hat{y}}(\theta)] | j = 1, m = 1 \rangle \\ & = & ad_{11}^{(1)}(\theta) = \frac{1}{2} \, a(1 + \cos \theta) \end{array}$$

On trouve de même

$$a_G^{m=1}(\theta) = ad_{1,-1}^{(1)}(\theta) = \frac{1}{2}a(1-\cos\theta)$$

Si le photon est émis dans la direction $\hat{n} = (\theta, \phi)$, il faut utiliser l'opérateur de rotation $U[\mathcal{R}(\theta, \phi)]$ et l'on obtient

$$a_D^{m=1}(\theta, \phi) = \frac{1}{2} a(1 + \cos \theta) e^{i\phi}$$
$$a_G^{m=1}(\theta, \phi) = \frac{1}{2} a(1 - \cos \theta) e^{i\phi}$$

2. Si l'atome absorbe le photon les deux amplitudes non nulles sont, par conservation du moment angulaire

$$b = \langle j = 1, m = 1 | T' | D \rangle \qquad b' = \langle j = 1, m = -1 | T' | G \rangle$$

Si la transition est dipolaire électrique, b'=b d'après les résultats du \S 10.5.2. En introduisant une somme d'états intermédiaires

$$c_{P \to P'}(\theta) = c_{P \to (jm)} c_{(jm) \to P'}(\theta) = \langle P', \theta | S | P \rangle = \sum_{m} \langle P', \theta | T | 1m \rangle \langle 1m | T' | P \rangle$$

$$\begin{split} \langle D,\theta|S|D\rangle &= \langle D,\theta|T|j=1, m=1\rangle\langle j=1, m=1|T'|D\rangle = \frac{1}{2}\,ab(1+\cos\theta) \\ \langle D,\theta|S|G\rangle &= \langle D,\theta|T|j=1, m=-1\rangle\langle j=1, m=-1|T'|G\rangle = \frac{1}{2}\,ab(1-\cos\theta) \\ \langle G,\theta|S|D\rangle &= \langle G,\theta|T|j=1, m=1\rangle\langle j=1, m=1|T'|D\rangle = \frac{1}{2}\,ab(1-\cos\theta) \\ \langle G,\theta|S|G\rangle &= \langle G,\theta|T|j=1, m=-1\rangle\langle j=1, m=-1|T'|G\rangle = \frac{1}{2}\,ab(1+\cos\theta) \end{split}$$

Dans les deux cas la distribution angulaire est

$$W(\theta) = \frac{1}{2} |a|^2 |b|^2 (1 + \cos^2 \theta)$$

Si le photon est initialement polarisé suivant Ox on trouve

$$\langle x, \theta | S | x \rangle = ab \cos \theta$$

 $\langle y, \theta | S | x \rangle = 0$

Dans un modèle classique de diffusion d'un photon par une charge, un photon de polarisation linéaire suivant Ox met la charge en mouvement suivant cet axe, et la charge rayonne une onde électromagnétique polarisée suivant Ox avec une distribution angulaire $\propto \cos^2 \theta$.

Si le photon est émis dans la direction $\hat{n} = (\theta, \phi)$, on trouve

$$\langle D; \theta, \phi | S | D \rangle = \frac{1}{2} ab(1 + \cos \theta) e^{i\phi}$$

$$\langle D; \theta, \phi | S | G \rangle = \frac{1}{2} ab(1 - \cos \theta) e^{-i\phi}$$

$$\langle G; \theta, \phi | S | D \rangle = \frac{1}{2} ab(1 - \cos \theta) e^{i\phi}$$

$$\langle G; \theta, \phi | S | G \rangle = \frac{1}{2} ab(1 + \cos \theta) e^{-i\phi}$$

Si le photon est initialement polarisé suivant Ox, on obtient les amplitudes suivantes

$$\langle x; \theta, \phi | S | x \rangle = ab \cos \theta \cos \phi$$

 $\langle y; \theta, \phi | S | x \rangle = ab \sin \phi$

Ces résultats se comprennent en remarquant que le cosinus de l'angle entre la polarisation initiale et la polarisation finale est $\cos\theta\cos\phi$ pour une polarisation finale x et $\sin\phi$ pour une polarisation finale y.

10.7.14 Mesure du moment magnétique du Λ^0

1. La conservation du moment angulaire suivant Oz implique m'=m, car la composante z du moment angulaire orbital est nulle

$$\langle \theta = 0, m' | T | m \rangle \propto \delta_{mm'}$$

L'amplitude b s'obtient à partir de a par une réflexion par rapport au plan xOz: |a| = |b| si la parité est conservée.

2. Si le proton est émis suivant une direction faisant un angle θ avec l'axe Oz dans le plan xOz, on peut calculer l'amplitude désintégration en utilisant l'opérateur $U[\mathcal{R}_{\hat{y}}(\theta)]$ de rotation d'un angle θ autour de Oy

$$\langle \theta, m' | T | m \rangle = \langle \theta = 0, m' | U^{\dagger}[\mathcal{R}_{\hat{y}}(\theta)] T | m \rangle$$

$$= \sum_{m''} \langle \theta = 0, m' | T | m'' \rangle \langle m'' | e^{i\theta J_y} | m \rangle$$

$$= a_{m',m'}(\theta = 0) d_{m'm}^{(1/2)}(\theta)$$

Avec les définitions de la question 1

$$a_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}} = a$$
 $a_{-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} = b$

et compte tenu de (10.38)

$$a_{++}(\theta) = ad_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}}^{(1/2)}(\theta) = a\cos\frac{\theta}{2}$$
 $a_{-+}(\theta) = ad_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}^{(1/2)}(\theta) = -b\sin\frac{\theta}{2}$

3. Si le Λ^0 est produit dans un état m=1/2, la distribution angulaire $w(\theta)$ est (car les états finaux m'-1/2 et m'=-1/2 sont discernables)

$$w(\theta) = |a|^2 \cos^2 \frac{\theta}{2} + |b|^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}$$
$$= \frac{1}{2} (|a|^2 + |b|^2) + \frac{1}{2} (|a|^2 - |b|^2) \cos \theta$$

et par conséquent

$$w_0 = \frac{1}{2}(|a|^2 + |b|^2)$$
 $\alpha = \frac{|a|^2 - |b|^2}{|a|^2 + |b|^2}$

Si la parité était conservée, on aurait $|a|^2 = |b|^2$ et $\alpha = 0$. L'observation d'un terme en $\cos \theta$ dans la distribution angulaire de la désintégration est donc une preuve de la violation de la parité.

- **4.** $\vec{p} \times \vec{p}_{\Lambda^0}$ est le seul pseudovecteur disponible, et $\langle \vec{S} \rangle$, qui est un pseudovecteur, doit nécessairement être orienté dans cette direction : $\langle S_x \rangle = \langle S_y \rangle = 0$.
- 5. Le hamiltonien du spin dans le champ magnétique est

$$H = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\gamma \vec{S} \cdot \vec{B}$$

Le spin du proton précesse donc autour de \vec{B} avec une vitesse angulaire $\omega = \gamma B$ dans le plan xOz. Au temps $t = \tau$, il aura donc tourné d'un angle

$$\lambda = \omega \tau = \gamma B \tau$$

L'angle de la désintégration doit être mesuré à partir de la direction \hat{n} du plan xOz

$$\hat{n} = \hat{x}\sin\lambda + \hat{z}\cos\lambda$$

La direction d'émission du proton est

$$\hat{p} = \hat{x}\sin\theta\cos\phi + \hat{y}\sin\theta\sin\phi + \hat{z}\cos\theta$$

et

$$\cos\Theta = \hat{p} \cdot \hat{n} = \cos\theta\cos\lambda + \sin\theta\sin\lambda\cos\phi$$

La mesure de la distribution angulaire permet de remonter à la direction de \hat{n} (ou à l'angle λ) et d'en déduire γ par $\lambda = \gamma B \tau$.

10.7.15 Production et désintégration du méson ρ^+

1. Calcul de $a_m(\theta, \phi)$: $\mathcal{R}(\theta, \phi)$ est la rotation (10.30) qui amène l'axe Oz sur la direction d'émission du méson π^+

$$a_{m}(\theta,\phi) = \langle \theta, \phi | T | m \rangle = \langle \theta = 0, \phi = 0 | U^{\dagger}[\mathcal{R}(\theta,\phi)]T | m \rangle$$
$$= \sum_{m'} \langle \theta = 0, \phi = 0 | T | m' \rangle \langle m' | U^{\dagger}[\mathcal{R}(\theta,\phi)] | m \rangle$$

où nous avons utilisé l'invariance par rotation [U,T]=0. Par conservation du moment angulaire

$$\langle \theta = 0, \phi = 0 | T | m' \rangle \propto \delta_{m' \, 0} = a \delta_{m' \, 0}$$

car si le méson π^+ part dans la direction Oz, son moment angulaire suivant cette direction est nul. D'autre part

$$\langle m' = 0|U^{\dagger}[\mathcal{R}(\theta,\phi)]|m\rangle = \langle m|U[\mathcal{R}(\theta,\phi)]|m' = 0\rangle^* = \left[D_{m0}^{(1)}(\theta,\phi)\right]^*$$
$$= e^{im\phi} d_{m0}^{(1)}(\theta)$$

On obtient les différentes amplitudes de désintégration en utilisant (10.39)

$$a_{1}(\theta,\phi) = a e^{i\phi} d_{10}^{(1)}(\theta) = -\frac{a}{\sqrt{2}} e^{i\phi} \sin \theta$$

$$a_{0}(\theta,\phi) = a d_{00}^{(1)}(\theta) = a \cos \theta$$

$$a_{-1}(\theta,\phi) = a e^{-i\phi} d_{-10}^{(1)}(\theta) = \frac{a}{\sqrt{2}} e^{-i\phi} \sin \theta$$

d'où les distributions angulaires

$$W_1 = W_{-1} = \frac{|a|^2}{2} \sin^2 \theta$$
 $W_0 = |a|^2 \sin^2 \theta$

On note que $W_1 + W_0 + W_{-1} = |a|^2$: en conséquence, si le méson ρ n'est pas polarisé, la distribution angulaire est isotrope, ce qui est nécessaire car il n'y a pas de direction privilégiée. Par la suite on normalisera W par

$$W_1 + W_0 + W_{-1} = |a|^2 = 1$$

2. Si le vecteur d'état initial est donné par

$$|\lambda\rangle = \sum_{m=-1,0,1} c_m |1m\rangle$$
 $\sum_{m=-1,0,1} |c_m|^2 = 1$

l'amplitude de désintégration a_{λ} sera

$$a_{\lambda}(\theta,\phi) = \langle \theta, \phi | T | \lambda \rangle = \sum_{m} \langle \theta, \phi | T | 1m \rangle \langle 1m | \lambda \rangle = \sum_{m} c_{m} a_{m}(\theta,\phi)$$

et la distribution angulaire

$$W_{\lambda}(\theta,\phi) = \sum_{m,m'} c_m c_{m'}^* a_m(\theta,\phi) a_{m'}^*(\theta,\phi)$$

L'expression explicite de W_{λ} est donnée à la question suivante.

3. Pour chaque composante du mélange statistique de poids p_{λ} , la distribution angulaire est

$$W_{\lambda} = \sum_{m,m'} c_m^{(\lambda)} c_{m'}^{*(\lambda)} a_m(\theta,\phi) a_{m'}^*(\theta,\phi)$$

et la distribution angulaire correspondant à l'opérateur statistique ρ

$$W_{\rho}(\theta) = \sum_{\lambda} \mathsf{p}_{\lambda} W_{\lambda} = \sum_{\lambda,m,m'} \mathsf{p}_{\lambda} c_{m}^{(\lambda)} c_{m'}^{*(\lambda)} a_{m}(\theta,\phi) a_{m'}^{*}(\theta,\phi) = \sum_{m,m'} \rho_{mm'} a_{m}(\theta,\phi) a_{m'}^{*}(\theta,\phi)$$

On simplifie le calcul en remarquant que $\rho_{mm'} = \rho_{m'm}^*$

$$m \neq m'$$
 $\rho_{mm'} a_m a_{m'}^* + \rho_{m'm} a_{m'} a_m^* = 2 \operatorname{Re} \left(\rho_{mm'} a_m a_{m'}^* \right)$

Par exemple

$$\operatorname{Re}\left(\rho_{10}a_{1}a_{0}^{*}\right) = -\operatorname{Re}\left(\frac{\rho_{10}}{\sqrt{2}}e^{\mathrm{i}\phi}\sin\theta\cos\theta\right)$$

Le résultat final est

$$W_{\rho}(\theta,\phi) = \rho_{00} \cos^{2} \theta + \frac{1}{2} \sin^{2} \theta (\rho_{11} + \rho_{-1,-1}) + \frac{1}{\sqrt{2}} \sin 2\theta \operatorname{Re} \left(e^{-i\phi} \rho_{-10} - e^{i\phi} \rho_{10} \right) - \sin^{2} \theta \operatorname{Re} \left(e^{2i\phi} \rho_{1,-1} \right)$$

Pour obtenir la distribution angulaire de la question 2, il suffit de remplacer $\rho_{11} \to |c_1|^2$, $\rho_{10} \to c_1 c_0^*$ etc.

4. Le seul pseudovecteur à notre disposition est \hat{n} , et $\langle \vec{J} \rangle$, qui est un pseudovecteur, est nécessairement dirigé suivant \hat{n} . En utilisant l'expression (10.24) de J_x et J_y pour j=1 on trouve

Tr
$$\rho J_x = 2(\operatorname{Re} \rho_{10} + \operatorname{Re} \rho_{0,-1}) = 0$$

Tr $\rho J_y = 2(\operatorname{Im} \rho_{10} + \operatorname{Im} \rho_{0,-1}) = 0$

soit $\rho_{10} + \rho_{0,-1} = 0$. Dans l'opération \mathcal{Z} , qui est une réflexion par rapport au plan xOy, la cinématique de la réaction est inchangée, et comme la cible n'est pas polarisée et comme la parité est conservée, la réaction est identique à son image dans le plan xOz. On doit donc avoir

$$[\rho, \mathcal{Z}] = 0$$
 ou $\mathcal{Z}^{-1} \rho \mathcal{Z} = \rho$

On utilise ensuite

$$\Pi|1m\rangle = \eta|1m\rangle$$

où η est la parité du méson ρ ($\eta=-1$ car le méson ρ est, comme le photon, un méson vectoriel). On en déduit

$$\langle 1m|\Pi \mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi J_z}\,\rho\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi J_z}\Pi|1m'\rangle = |\eta|^2\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi(m'-m)}\rho_{mm'}$$

soit

$$\rho_{mm'} = (-1)^{m-m'} \rho_{mm'}$$

10.7.17 Désintégration du Σ^0

- 1. Si le photon est émis suivant l'axe Oz, la composante suivant cet axe du moment angulaire orbital est nulle, et la conservation du moment angulaire est assurée pour les amplitudes a et b, mais non pour c et d, qui sont donc nulles.
- 2. Les amplitudes a et b se déduisent l'une de l'autre par une réflexion par rapport au plan xOz, et si la parité est conservée dans la désintégration, alors |a| = |b|. L'opération de réflexion \mathcal{Y} (10.100) agit de la façon suivante sur les état du photon dont la parité est impaire, $\eta_{\gamma} = -1$ (voir (10.104))

$$\mathcal{Y}|D\rangle = -|G\rangle$$
 $\mathcal{Y}|G\rangle = -|D\rangle$

tandis que pour le Σ^0 et Λ^0 (voir (10.102))

$$\mathcal{Y}|jm\rangle = \eta_{\Sigma}(-1)^{1/2-m}|j,-m\rangle$$

 $\mathcal{Y}|jm'\rangle = \eta_{\Lambda}(-1)^{1/2-m'}|j,-m'\rangle$

et comme m' = -m, on obtient un facteur global

$$\eta_{\Sigma}\eta_{\Lambda}\eta_{\gamma}(-1)^{1-m-m'} = \eta_{\Sigma}\eta_{\Lambda} = \eta$$

On peut aussi utiliser directement (10.119)

$$\eta_{\sigma}\eta_{\lambda}\eta_{\gamma}(-1)^{j_{\Sigma}-j_{\Lambda}-j_{\gamma}}=\eta$$

La transition est dipolaire magnétique car les parités de l'état initial et de l'état final sont les mêmes.

3. Si \vec{p} est l'impulsion du photon, l'amplitude d'émission du Λ^0 dans la direction $-\hat{p}$ avec une projection du spin m' sur \hat{p} lorsque le photon est polarisé circulairement à droite est

$$a_D^{m'}(\theta) = \langle D, m'; \theta | T | m = 1/2 \rangle$$

$$= \langle D, m'; \theta = 0 | U^{\dagger}[\mathcal{R}_{\hat{y}}(\theta)] | m = 1/2 \rangle = \sum_{m''} \langle D, m'; \theta = 0 | T | m'' \rangle \langle m'' | U^{\dagger}[\mathcal{R}_{\hat{y}}(\theta)] | 1/2 \rangle$$

$$= a d_{\frac{1}{2} \frac{1}{2}}^{(1/2)}(\theta) = a \cos \frac{\theta}{2}$$

car seule la valeur m'' = 1/2 donne une contribution non nulle. On a donc m' = -1/2. Un calcul analogue donne pour la polarisation circulaire gauche du photon

$$a_G^{m'}(\theta) = b d_{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}}^{(1/2)}(\theta) = -a \sin \frac{\theta}{2}$$

Seules les amplitudes $a_D^{m'=-1/2}(\theta)$ et $a_G^{m'=1/2}(\theta)$ sont non nulles.

Chapitre 11

Exercices du chapitre 11

11.6.2 Propriétés mathématiques

1. On procède par récurrence en supposant $[N, a^p] = -pa^p$

$$[N, a^{p+1}] = [N, aa^p] = [N, a]a^p + a[N, a^p] = -(p+1)a^{p+1}$$

Considérons un monôme¹ en a et a^{\dagger} , $P=(a^{\dagger})^q a^p$ et calculons son commutateur avec N

$$[N, (a^{\dagger})^q a^p] = [N, (a^{\dagger})^q] a^p + (a^{\dagger})^q [N, a^p] = (q - p)(a^{\dagger})^q a^p$$

qui s'annule seulement si p=q. Comme toute fonction de a et a^{\dagger} peut s'écrire comme une somme de tels monômes, en utilisant si nécessaire la relation de commutation $[a,a^{\dagger}]=I$ pour mettre les opérateurs de création et d'annihilation dans un ordre adéquat, on voit que la seule possibilité d'avoir un commutateur nul est que cette fonction soit une somme de termes de la forme $(a^{\dagger})^p a^p$. Tout monôme de la forme $(a^{\dagger})^p a^p$ peut s'écrire comme une fonction de $a^{\dagger}a$ en utilisant les relations de commutation (11.8). Si un opérateur A commute avec N, c'est obligatoirement une fonction de N:A=f(N). Il n'existe pas d'opérateur indépendant de N et commutant avec N et

$$\langle n'|A|n\rangle = \langle n'|f(N)|n\rangle = f(n)\delta_{nn'}$$

2. Soit un vecteur $|\varphi\rangle$ orthogonal à tous les vecteurs $|n\rangle$, $\langle\varphi|n\rangle=0$ $\forall n$

$$\mathcal{P}'|n\rangle = |n\rangle$$
 $\mathcal{P}'|\varphi\rangle = 0$

Montrons que $[\mathcal{P}', a] = 0$. Il est évident que

$$\langle n|[\mathcal{P}',a]|n\rangle = 0$$
 $\langle \varphi|[\mathcal{P}',a]|\varphi\rangle = 0$

Examinons $\langle \varphi | [\mathcal{P}', a] | n \rangle$ et $\langle \varphi | [\mathcal{P}', a^{\dagger}] | n \rangle$

$$\begin{split} \langle \varphi | \mathcal{P}' a | n \rangle &= \langle \varphi | \mathcal{P}' a^{\dagger} | n \rangle = 0 \\ \langle \varphi | a \mathcal{P}' | n \rangle &= \langle \varphi | a | n \rangle = \sqrt{n} \langle \varphi | n - 1 \rangle = 0 \\ \langle n | a^{\dagger} \mathcal{P}' | n \rangle &= \langle n | a^{\dagger} | \varphi \rangle = \sqrt{n+1} \langle \varphi | n + 1 \rangle = 0 \end{split}$$

et donc $[\mathcal{P}', a] = 0$ et $[\mathcal{P}', a^{\dagger}] = 0$. Le projecteur \mathcal{P}' commute donc avec a et a^{\dagger} , et d'après le théorème de von Neumann, c'est un multiple de l'identité, soit $\mathcal{P}' = I$, soit $\mathcal{P}' = 0$. La seconde éventualité étant exclue, reste $\mathcal{P}' = I$.

11.6.3 États cohérents

¹Lorsque l'on écrit une combinaison de a et a^{\dagger} avec tous les a à droite et tous les a^{\dagger} à gauche, on dit que l'on a écrit cette combinaison sous forme normale (section 15.4).

2. En utilisant le théorème d'Ehrenfest (4.26)

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \langle a \rangle(t) = \langle [a, H] \rangle = \hbar \omega \langle a \rangle(t)$$

 $\operatorname{car}\left[a,H\right]=\hbar\omega a.$ Si la condition initiale est

$$\langle a \rangle (t=0) = \langle \varphi(0) | a | \varphi(0) \rangle = z_0$$

la solution de l'équation différentielle ci-dessus est

$$\langle a \rangle(t) = z_0 e^{-i\omega t}$$

3. On veut en outre que $\langle \varphi(0)|a^{\dagger}a|\varphi(0)\rangle = |z_0|^2$, ce qui implique, avec $b(z_0) = a - z_0$

$$\langle \varphi(0)|b^{\dagger}(z_0)b(z_0)|\varphi(0)\rangle = \langle \varphi(0)|a^{\dagger}a|\varphi(0)\rangle - z_0\langle \varphi(0)|a^{\dagger}|\varphi(0)\rangle - z_0^*\langle \varphi(0)|a|\varphi(0)\rangle + |z_0|^2$$

$$= \langle \varphi(0)|(a^{\dagger}a - |z_0|^2)|\varphi(0)\rangle = ||b(z_0)\varphi(0)||^2 = 0$$

ce qui n'est possible que si $b(z_0)|\varphi(0)\rangle=0:|\varphi(0)\rangle$ est vecteur propre de $b(z_0)$ avec la valeur propre 0

$$b(z_0)|\varphi(0)\rangle = 0$$
 soit $a|\varphi(0)\rangle = z_0|\varphi(0)\rangle$

4. On utilise (2.55)

$$e^A e^B = e^{A+B} e^{\frac{1}{2}[A,B]}$$

avec

$$A = \frac{c}{\sqrt{2}}(z - z^*)(a + a^{\dagger})$$
 $B = \frac{c'}{\sqrt{2}}(z + z^*)(a - a^{\dagger})$

et

$$c = -c' = \frac{1}{\sqrt{2}}$$
 $A + B = -z^*a + za^{\dagger}$

L'égalité (2.55) est valable parce que [A, B] est un multiple de l'identité qui commute avec A et B. On utilise un système d'unités tel que

$$\hbar=m\omega=1$$

ou de façon équivalente on utilise les opérateurs \hat{Q} et \hat{P} de (11.4) au lieu de Q et P

$$[A, B] = -\frac{i}{2}(z - z^*)(z + z^*)[Q, P] = \frac{1}{2}(z^2 - z^{*2})$$

On doit donc choisir

$$f(z, z^*) = \exp\left(-\frac{1}{4}\left[z^2 - z^{*2}\right]\right)$$

Dans ces conditions la fonction d'onde de l'état cohérent $\varphi_z(q)$ en représentation q est

$$\begin{split} \varphi_z(q) &= \langle q|D(z)|0\rangle &= \exp\left(-\frac{1}{4}\left[z^2-z^{*2}\right]\right) \exp\left(\frac{1}{\sqrt{2}}[z-z^*]q\right) \langle Q| \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}[z+z^*]P\right) |0\rangle \\ &= \exp\left(-\frac{1}{2}\left[z^2-z^{*2}\right]\right) \exp\left(\frac{1}{\sqrt{2}}[z-z^*]q\right) \varphi_0\left(q-\frac{1}{\sqrt{2}}[z+z^*]\right) \end{split}$$

où $\varphi_0(q)$ est la fonction d'onde (11.23) de l'état fondamental de l'oscillateur harmonique. D'après (11.37), les valeurs moyennes de Q et de P sont

$$\langle Q \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(z+z^*)$$
 $\langle P \rangle = \frac{1}{i\sqrt{2}}(z-z^*)$

et on peut récrire le résultat précédent

$$\varphi_z(q) = \frac{1}{\pi^{1/4}} \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{2}\langle Q \rangle \langle P \rangle\right) \exp\left(\mathrm{i}\langle P \rangle q\right) \exp\left(-\frac{1}{2}(q - \langle Q \rangle)^2\right)$$

En rétablissantles facteurs dimensionnés

$$\varphi_z(q) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{2\hbar}\langle Q\rangle\langle P\rangle\right) \exp\left(\mathrm{i}\frac{\langle P\rangle q}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}\left(q - \langle Q\rangle\right)^2\right)$$

Le facteur de phase global

$$\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{2\hbar}\langle Q\rangle\langle P\rangle\right)$$

est physiquement non pertinent et peut être omis.

5. On écrit, avec $z = \rho \exp(i\theta)$ et $A_{nm} = \langle n|A|m\rangle$

$$\begin{split} \langle z|A|z\rangle &=& \sum_{n,m} \langle z|n\rangle\langle n|A|m\rangle\langle m|z\rangle \\ &=& \mathrm{e}^{-|z|^2} \sum_{n,m} \frac{A_{nm} z^m z^{*n}}{\sqrt{n!m!}} \\ &=& \mathrm{e}^{-\rho^2} \sum_{n,m} \frac{A_{nm}}{\sqrt{n!m!}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}(m-n)\theta} \, \rho^{n+m} \end{split}$$

où nous avons utilisé (11.31)

$$\langle m|z\rangle = e^{-|z|^2/2} \frac{z^m}{\sqrt{m!}}$$

Écrivant le développement de $\langle z|A|z\rangle$ sous une forme générale

$$\langle z|A|z\rangle = e^{-\rho^2} \sum_{q=0}^{\infty} \sum_{p=-\infty}^{\infty} c_{pq} e^{ip\theta} \rho^q$$

on déduit

$$c_{pq} = \frac{1}{q!} \int \frac{\mathrm{dRe}\,z\mathrm{Im}\,z}{\pi} \,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}p\theta} \,\langle z|A|z\rangle$$

et on peut faire l'identification

$$A_{nm} = \sqrt{n!m!} \, c_{m-n,m+n}$$

avec (m-n) et (m+n) entiers, $(m+n) \ge 0$. On peut donc à partir de $\langle z|A|z\rangle$ obtenir tous les éléments de matrice A_{mn} .

11.6.4 Couplage à une force classique

1. D'après (11.68)

$$\tilde{a}(t) = e^{iH_0t/\hbar} a e^{-iH_0t/\hbar} = a e^{-i\omega t}$$
 $\tilde{a}(t=0) = a$

d'où

$$\tilde{a}(t) = a e^{-i\omega t}$$
 $\tilde{a}^{\dagger}(t) = a^{\dagger} e^{i\omega t}$

la formule pour \tilde{a}^{\dagger} s'obtenant par conjugaison hermitienne. L'équation différentielle (4.44) pour $\tilde{U}(t)$ devient

$$i\hbar \frac{d\tilde{U}}{dt} = -\left(a e^{-i\omega t} + a^{\dagger} e^{i\omega t}\right) f(t)\tilde{U}(t) = \tilde{W}(t)\tilde{U}(t)$$

avec la condition aux limites $\tilde{U}(t=0) = I$.

2. Divisons l'intervalle [0,t] en $n\gg 1$ intervalles infinitésimaux Δt ; pour un temps Δt infinitésimal, l'opérateur d'évolution $\tilde{U}(t_j+\Delta t,t_j)$ est donné par

$$\tilde{U}(t_j + \Delta t, t_j) \simeq e^{-i\Delta t \tilde{W}(t_j)/\hbar}$$

avec

$$-\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \Delta t \tilde{W}(t_j) = \left[\mathrm{i} f(t_j) a^{\dagger} \, \mathrm{e}^{\mathrm{i} \omega t_j} + \mathrm{i} f(t_j) a \, \mathrm{e}^{-\mathrm{i} \omega t_j} \right] = \zeta_j a^{\dagger} - \zeta_j^* a$$

où

$$\zeta_i = i\Delta t f(t_i) e^{i\omega t_j}$$

L'opérateur d'évolution $\tilde{U}(t)$ est

$$\tilde{U}(t) = \prod_{j=0}^{n-1} \exp\left(\zeta_j a^{\dagger} - \zeta_j^* a\right) = \prod_{j=0}^{n-1} D(\zeta_j)$$

où $D(\zeta)$ est l'opérateur de déplacement (11.40). D'après (11.42)

$$D(\zeta_1)D(\zeta_0) = \exp[i \operatorname{Im} \zeta_1 \zeta_0^*)] D(\zeta_1 + \zeta_0) D(\zeta_2)D(\zeta_1)D(\zeta_0) = \exp[i \operatorname{Im} (\zeta_2(\zeta_1^* + \zeta_0^*) + \zeta_1 \zeta_0^*)] D(\zeta_2 + \zeta_1 + \zeta_0)$$

d'où le cas géneéral

$$D(\zeta_{n-1})\cdots D(\zeta_1)D(\zeta_0) = \exp\left[\frac{1}{2\mathrm{i}}\sum_{j>i}(\zeta_j\zeta_i^* - \zeta_j^*\zeta_i)\right]D(\zeta_{n-1} + \cdots + \zeta_1 + \zeta_0)$$

À la limite $\Delta t \to 0$, avec $\zeta(t) = i f(t) \exp(i\omega t)$

$$\sum_{j>i} (\zeta_j \zeta_i^* - \zeta_j^* \zeta_i) = \int dt' dt'' \varepsilon(t' - t'') \zeta(t') \zeta^*(t'')$$

ce qui donne la phase Φ . Par ailleurs (11.42) donne

$$D(\zeta_{n-1} + \dots + \zeta_1 + \zeta_0) = \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_{i,j} \zeta_i \zeta_j^*\right) \exp\left[(\zeta_{n_1} + \dots + \zeta_1 + \zeta_0) a^{\dagger}\right] \exp\left[(\zeta_{n-1} + \dots + \zeta_1 + \zeta_0)^* a\right]$$

et à la limite où $t \to 0$

$$D = \exp\left[-\frac{1}{2}\int dt' dt'' \zeta(t') \zeta^*(t'')\right] \exp[z(t)a^{\dagger}] \exp[z^*(t)a] = \exp\left[-\frac{1}{2}|z(t)|^2 \exp[z(t)a^{\dagger}] \exp[z^*(t)a]\right]$$

3. Calculons l'intégrale dans le second terme de D pour $t > t_2$

$$z(t) = i \int_{t_1}^{t_2} f(t') e^{i\omega t'} dt' = i \int_{-\infty}^{+\infty} f(t') e^{i\omega t'} dt' = i\tilde{f}(\omega)$$

z(t) est indépendant de t. Nous obtenons finalement un opérateur $\tilde{U}(t)$ indépendant de t pour $t>t_2$

$$\tilde{U}(t) = \exp\left(\mathrm{i}a^{\dagger}\tilde{f}(\omega)\right) \exp\left(\mathrm{i}a\tilde{f}^{*}(\omega)\right) \exp\left(-\mathrm{i}\Phi\right) \exp\left(-\frac{1}{2}|\tilde{f}(\omega)|^{2}\right)$$

Ceci nous permet de calculer l'amplitude de transition $n \to m$

$$A_{mn}(t) = \langle m|U(t)|n\rangle = \langle m|U_0(t)\tilde{U}(t)|n\rangle$$
$$= e^{-iE_mt/\hbar} \langle m|\tilde{U}(t)|n\rangle$$

Le résultat est particulièrement simple si l'oscillateur est dans son état fondamental au temps t=0 car $\tilde{U}(t)|0\rangle$ est alors un état cohérent $|z=\mathrm{i}\tilde{f}(\omega)\rangle$

$$\tilde{U}(t)|0\rangle = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\Phi}\,\mathrm{e}^{-|\tilde{f}(\omega)|^2/2}\,\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}a^\dagger\tilde{f}(\omega)}|0\rangle = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\Phi}\,|\mathrm{i}\tilde{f}(\omega)\rangle$$

La probabilité d'observer un état final $|m\rangle$ est donnée par une loi de Poisson (11.34)

$$\mathsf{p}(m) = \frac{\left(|\tilde{f}(\omega)|^2\right)^m \, \exp\left(-|\tilde{f}(\omega)|^2\right)}{m!}$$

11.6.5 Opérateur de phase

1. Écrivons $a=Ae^{i\Phi}$. Nous en déduisons $aa^{\dagger}=A^2$ et, compte tenu de $[a,a^{\dagger}]=I$

$$a^{\dagger}a + I = N + I = A^2$$

Il en résulte

$$A = \sqrt{N+I} = \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle \sqrt{n+1} \langle n|$$

$$A^{-1} = (N+I)^{-1/2} = \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle \frac{1}{\sqrt{n+1}} \langle n|$$

Comme A^{-1} est défini, on peut écrire

$$e^{i\Phi} = A^{-1} a$$

Montrons que $\exp(i\Phi)$ est précisément $E=\sum_n |n\rangle\langle n+1|$. Pour ce faire, comparons les éléments de matrice de E et de $\exp(i\Phi)$

$$\langle m|E|p\rangle = \sum_{n} \langle m|n\rangle \langle n+1|p\rangle = \delta_{p,m+1}$$
$$\langle m|A^{-1}a|p\rangle = \sum_{n} \langle m|n\rangle \frac{1}{\sqrt{n+1}} \langle n|a|p\rangle = \delta_{p,m+1}$$

en utilisant (11.17).

2. Compte tenu de $[E, E^{\dagger}] = |0\rangle\langle 0|$, le commutateur [C, S] vaut

$$[C,S] = -\frac{\mathrm{i}}{2}|0\rangle\langle 0|$$

et si l'état de l'oscillateur est $|\varphi\rangle$

$$\Delta_{\varphi}C\,\Delta_{\varphi}S \ge \frac{1}{4}\,|\langle\varphi|0\rangle|^2$$

Si la projection de $|\varphi\rangle$ sur le vide est nulle, alors $\Delta_{\varphi}C$ et $\Delta_{\varphi}S$ peuvent être simultanément nuls

$$C^2 + S^2 = I - |0\rangle\langle 0|$$

et si $\langle \varphi | 0 \rangle = 0$, alors les valeurs moyennes de C^2 et S^2 vérifient

$$\langle C^2 \rangle_{\alpha} + \langle S^2 \rangle_{\alpha} = 1$$

3. En suivant la méthode conduisant à (11.50), il est facile de calculer la valeur moyenne de E dans l'état cohérent $|z\rangle$, $z=|z|\exp(\mathrm{i}\theta)$

$$\langle z|E|z\rangle = e^{-|z|^2} \sum_n \frac{z^{2n+1}}{\sqrt{n!(n+1)!}} \simeq e^{i\theta}$$

11.6.9 Détection homodyne et lame séparatrice déséquilibrée

1. On part de l'action d'une lame séparatrice donnée par (11.117) pour $\cos \lambda = \sin \lambda = 1/\sqrt{2}$

$$U a^{\dagger} U^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(a^{\dagger} + i b^{\dagger} \right)$$
$$U b^{\dagger} U^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(i a^{\dagger} + b^{\dagger} \right)$$

Examinons l'action de la première lame en partant de l'état initial

$$|\Psi_0\rangle = |1_a 0_b\rangle = a^{\dagger} |0_a 0_b\rangle$$

Dans le point de vue de Schrödinger, l'action de la lame sur le vecteur d'état est donnée par

$$|\Psi_1\rangle = U|\Psi_0\rangle = Ua^{\dagger}|0_a0_b\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1_a0_b\rangle + i|0_a1_b\rangle)$$

Le trajet supérieur de l'interféromètre ajoute un facteur de phase $\exp(i\delta)$

$$|\Psi_1'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (e^{i\delta} |1_a 0_b\rangle + i |0_a 1_b\rangle)$$

tandis que l'action de la seconde lame se traduit par

$$|\Psi_2\rangle = U|\Psi_1'\rangle = \frac{1}{2} \left[\left(e^{i\delta} - 1 \right) |1_a 0_b\rangle + i \left(e^{i\delta} + 1 \right) |0_a 1_b\rangle \right]$$

Ceci donne immédiatement

$$\langle \Psi_2 | a^{\dagger} a | \Psi_2 \rangle = \frac{1}{2} (1 - \cos \delta)$$

Pour un état de Fock à n photons, on part de

$$|\Psi_0\rangle = |n_a 0_b\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^{\dagger})^n |0_a 0_b\rangle$$

Nous avons la suite des transformations

$$a^{\dagger} \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} \left(a^{\dagger} + ib^{\dagger} \right) \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} \left(e^{i\delta} a^{\dagger} + ib^{\dagger} \right)$$
$$\rightarrow \frac{1}{2} \left[e^{i\delta} (a^{\dagger} + ib^{\dagger}) + i(ia^{\dagger} + b^{\dagger}) \right]$$
$$= \frac{1}{2} \left(e^{i\delta} - 1 \right) a^{\dagger} + \frac{i}{2} \left(e^{i\delta} + 1 \right) b^{\dagger}$$

et l'état final est donc

$$|\Psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left[\frac{1}{2} \left(e^{i\delta} - 1 \right) a^{\dagger} + \frac{i}{2} \left(e^{i\delta} + 1 \right) b^{\dagger} \right]^n |0_a 0_b\rangle$$

L'interféromètre envoie les photons suivant une loi binômiale dans chacun des deux bras avec une probabilité $(1-\cos\delta)/2$ et $(1+\cos\delta)/2$ respectivement, et les taux de comptage sont proportionnels à $n(1-\cos\delta)/2$ et $n(1+\cos\delta)/2$: le résultat est le même que pour n photons individuels successifs.

Pour un état cohérent, d'après (11.119)

$$|\Psi_1'\rangle = D_a \left(e^{i\delta}z/\sqrt{2}\right) D_b \left(iz/\sqrt{2}\right) |0_a 0_b\rangle = D_a(z_a) D_b(z_b) |0_a 0_b\rangle$$

Toujours d'après (11.119)

$$UD_a(z_a)U^{\dagger} = D_a\left(z_a/\sqrt{2}\right)D_b\left(iz_a/\sqrt{2}\right)$$
$$UD_b(z_b)U^{\dagger} = D_a\left(iz_b/\sqrt{2}\right)D_b\left(z_b/\sqrt{2}\right)$$

On obtient pour $|\Psi_2\rangle$ en utilisant (11.42)

$$|\Psi_2\rangle = e^{i\Phi} D_a \left(\frac{z_a + iz_b}{\sqrt{2}}\right) D_b \left(\frac{iz_a + z_b}{\sqrt{2}}\right) |0_a 0_b\rangle$$
$$= e^{i\Phi} \left|\frac{1}{2} \left(e^{i\delta} - 1\right) z \otimes \frac{i}{2} \left(e^{i\delta} + 1\right) z\right\rangle$$

d'où l'on déduit

$$\langle \Psi_2 | a^{\dagger} a | \Psi \rangle = \frac{1}{2} (1 - \cos \delta)$$

soit le même résultat que pour un photon unique.

2. Dans cette question, il est commode de choisir le point de vue de Heisenberg, où les vecteurs d'état et les opérateurs statistiques sont indépendants du temps, et où les opérateurs subissent la tranformation (11.116). Le taux de détection est donné par la valeur moyenne de $c^{\dagger}c$, où c est l'opérateur transformé de a

$$w_a \propto \operatorname{Tr}\left[\rho_s|z\rangle\langle z|c^{\dagger}c\right] = \operatorname{Tr}\left[\rho_s|z\rangle\langle z|\left(a^{\dagger}\cos\lambda - ib^{\dagger}\sin\lambda\right)\left(a\cos\lambda + ib\sin\lambda\right)\right]$$
$$= \operatorname{Tr}\left[\rho_s a^{\dagger}a\right]\cos^2\lambda + \langle z|b^{\dagger}b|z\rangle\sin^2\lambda + i\operatorname{Tr}\left[\rho_s|z\rangle\langle z|\left(a^{\dagger}b - b^{\dagger}a\right)\right]\sin\lambda\cos\lambda$$

Le terme $\text{Tr}[\rho_s a^\dagger a]$ donne le nombre moyen de photons du signal, $\langle z|b^\dagger b|z\rangle=|z|^2$ le nombre moyen de photons de l'oscillateur local et le dernier terme mélange le signal et l'oscillateur local. Compte tenu de $\langle z|b|z\rangle=z$

$$i \operatorname{Tr} \left[\rho_s | z \rangle \langle z | \left(a^{\dagger} b - b^{\dagger} a \right) \right] = i z \operatorname{Tr} (\rho_s a^{\dagger}) - i z^* \operatorname{Tr} (\rho_s a)$$

$$= i | z | \operatorname{Tr} \left[\rho_s \left(a^{\dagger} e^{i\theta} - a e^{-i\theta} \right) \right]$$

$$= 2 | z | \operatorname{Tr} \left[\rho_s X_{[\theta + \pi/2]} \right] = 2 | z | \langle X_{[\theta + \pi/2]} \rangle$$

en utilisant (11.122). On retrouve la formule de l'énoncé en remarquant que

$$\sin \lambda \cos \lambda = \sqrt{t(1-t)}$$

En faisant varier la phase θ de l'oscillateur local, on peut donc mesurer n'importe quel opérateur de quadrature.

11.6.10 Oscillations de Rabi dans une cavité

1. Compte tenu de (11.143), le vecteur d'état au temps t=0 pour n photons dans la cavité est

$$|\psi_n(0)\rangle = |\varphi_n^e\rangle = \cos\theta_n|\chi_n^-\rangle + \sin\theta_n|\chi_n^+\rangle$$

et donc

$$\langle \varphi_n^e | \psi_n(t) \rangle = \cos^2 \theta_n e^{i\Omega_n t/2} + \sin^2 \theta_n e^{-i\Omega_n t/2}$$

avec

$$\Omega_n = \sqrt{\delta^2 + (n+1)\Omega_R^2}$$

Compte tenu de $\tan \theta_n = \Omega_R \sqrt{n+1}/\delta$, on trouve

$$p(t) = 1 - \frac{(n+1)\Omega_R^2}{\delta^2 + (n+1)\Omega_R^2} \sin^2 \frac{\Omega_n^2 t}{2}$$

ce que l'on aurait pu déduire directement de (5.43), car Ω_n est la fréquence des oscillations de Rabi. La figure 5.8 montre la réduction des oscillations hors résonance.

 $\mathbf{2}$. A la résonance, et pour n photons dans la cavité

$$|\psi_n(t)\rangle = \cos\frac{\Omega_n t}{2} |\varphi_n^e\rangle - i \sin\frac{\Omega_n t}{2} |\varphi_n^g\rangle$$

et pour un état cohérent initial $|z\rangle$

$$|\psi_z(t)\rangle = e^{-|z|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} |\psi_n(t)\rangle$$

L'amplitude $a_n(t)$ pour observer un état final $|e \otimes n\rangle$ est donc

$$a_n(t) = e^{-|z|^2/2} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} \cos \frac{\Omega_n t}{2}$$

Lorsque l'on a détecté l'atome dans l'état $|e\rangle$ on observe que les états $|e\otimes n\rangle$ sont des états finaux différents, qui pourraient, au moins en théorie, être distingués. Il faut donc sommer les probabilités de trouver l'atome dans l'état $|e\otimes n\rangle$

$$p_n(t) = |a_n(t)|^2 = e^{-|z|^2} \frac{|z|^{2n}}{n!} \cos^2 \frac{\Omega_n t}{2}$$

et la probabilité de trouver l'atome dans l'état excité est

$$\mathbf{p}(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \mathbf{p}_n(t) = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} e^{-|z|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|z|^{2n}}{n!} \cos(\Omega_n t)$$

La transformée de Fourier de p(t) doit exhiber des pics à $\Omega_0 = \Omega_R$, $\Omega_1 = \sqrt{2}\Omega_R$, $\Omega_3 = \sqrt{3}\Omega_R \cdots$. $|z|^2 \simeq 0.9$ est le nombre moyen de photons.

3. Pour $|z| \gg 1$, la fonction

$$p_n = e^{-|z|^2} \frac{|z|^{2n}}{n!}$$

passe par un maximum pour $n \simeq n_0 = |z|^2$ et elle est approchée par une gaussienne

$$\mathsf{p}_n \simeq \frac{1}{\sqrt{2\pi n_0}} \exp\left(-\frac{(n-n_0)^2}{2n_0}\right)$$

Posons $u = n - n_0 \ll n_0$

$$\Omega_n = \Omega_{n_0+u} \simeq \Omega_R \sqrt{n_0} \left(1 + \frac{u}{n_0} \right)$$

de sorte que, en remplaçant la somme discrète par une intégrale

$$p(t) \simeq \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{2\pi n_0}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-u^2/2n_0} \cos \left[\left(\Omega_{n_0} + \frac{\Omega_R u}{2\sqrt{n_0}} \right) t \right]$$

Compte tenu de

$$\cos\left[\left(\Omega_{n_0} + \frac{\Omega_R u}{2\sqrt{n_0}}\right)t\right] = \cos(\Omega_{n_0} t)\cos\frac{\Omega_R ut}{2\sqrt{n_0}} - \sin(\Omega_{n_0} t)\sin\frac{\Omega_R ut}{2\sqrt{n_0}}$$

et de ce que le deuxième terme ne contribue pas à l'intégrale, on obtient

$$p(t) \simeq \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \cos(\Omega_{n_0} t) \exp\left(-\frac{\Omega_R^2 t^2}{8}\right)$$
$$\simeq \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \cos(\Omega_{n_0} t) \exp\left(-\frac{t^2}{\tau^2}\right)$$

avec $\tau = 2\sqrt{2}/\Omega_R$. L'approximation de n par une variable continue reproduit bien la décroissance initiale des oscillations. Cependant, si l'on écrit

$$\Omega_n \simeq \Omega_{n_0} + \frac{\Omega_R(n-n_0)}{2\sqrt{n_0}}$$

on voit que toutes les oscillations sont en phase pour un temps t tel que

$$t = \frac{4\pi\sqrt{n_0}}{\Omega_P} = \left(\pi\sqrt{2n_0}\right)\,\tau \gg \tau$$

On aura donc une résurgence de oscillations pour cette valeur de t.

11.6.12 Transformations de jauge non abéliennes

1 L'expression de $\vec{\jmath}'$ est

$$\vec{\jmath}' = \Phi^{\dagger} \Omega^{-1} \left(-i \vec{\nabla} - q \vec{\mathbf{A}}' \right) \Omega \Phi$$

Remarquons tout d'abord que

$$\nabla(\Omega\Phi) = (\vec{\nabla}\Omega)\Phi + \Omega\vec{\nabla}\Phi$$

On souhaite avoir $\vec{\jmath} = \vec{\jmath}^{\,\prime}$

$$\vec{\jmath}' = \Phi^{\dagger} \left(-i \vec{\nabla} - i \Omega^{-1} (\vec{\nabla} \Omega) - q \Omega^{-1} \vec{\mathbf{A}}' \Omega \right) \Phi$$

d'où la condition

$$-i\vec{\nabla} - q\vec{\mathbf{A}} = -i\vec{\nabla} - i\Omega^{-1}(\vec{\nabla}\Omega) - q\Omega^{-1}\vec{\mathbf{A}}'\Omega$$

soit

$$\vec{\mathbf{A}}' = \Omega \vec{\mathbf{A}} \Omega^{-1} - \frac{\mathrm{i}}{q} (\vec{\nabla} \Omega) \Omega^{-1}$$

Dans le cas abélien, le champ \vec{A} est un nombre, et non une matrice

$$\Omega \vec{A} \Omega^{-1} = \vec{A}$$

et on retrouve

$$\vec{A}' = \vec{A} - \vec{\nabla} \Lambda$$

2. Choisissons une transformation de jauge infinitésimale

$$\Omega = I - iq \sum_{a} \Lambda_a(\vec{r}) \left(\frac{1}{2}\sigma_a\right) = I - iq\mathbf{T}$$

Alors

$$\Omega \vec{\mathbf{A}} \Omega^{-1} \simeq \vec{\mathbf{A}} - iq[\mathbf{T}, \vec{\mathbf{A}}]$$

et

$$(\vec{\nabla}\Omega)\Omega^{-1} \simeq -iq\sum_{a}\vec{\nabla}\Lambda_{a}\left(\frac{1}{2}\sigma_{a}\right)$$

Les relations de commutation(3.52) donnent

$$[\mathbf{T}, \vec{\mathbf{A}}] = \left[\sum_{b} \Lambda_{b} \left(\frac{1}{2} \sigma_{b} \right), \sum_{c} \vec{A}_{c} \left(\frac{1}{2} \sigma_{c} \right) \right] = i \sum_{b,c} \varepsilon_{abc} \Lambda_{b} \vec{A}_{c} \left(\frac{1}{2} \sigma_{a} \right)$$

d'où, par identification du coefficient de $\sigma_a/2$

$$\delta \vec{A}_a = \vec{A}_a' - \vec{A}_a = -\vec{\nabla} \Lambda_a + q \sum_{b,c} \varepsilon_{abc} \Lambda_b \vec{A}_c$$

3. Nous avons établi la forme de la dérivée covariante en exigeant $\vec{\jmath}' = \vec{\jmath}$, et par construction

$$\Omega \vec{\mathbf{D}} \Omega^{-1} = \vec{\mathbf{D}}'$$

On peut écrire l'équation de Schrödinger indépendante du temps $(\hbar = m = 1)$

$$\frac{1}{2} \left(-i \vec{\mathbf{D}} \right)^2 \Phi = E \Phi \qquad \Phi = \Omega^{-1} \Phi'$$

sous la forme

$$\frac{1}{2}\Omega^{-1}\Omega\left(-\mathrm{i}\vec{\mathbf{D}}\right)^{2}\Omega^{-1}\Phi' = E\Omega^{-1}\Phi'$$

En multipliant les deux membres de l'équation par Ω on obtient

$$\frac{1}{2} \left(-i\vec{\mathbf{D}'} \right)^2 \Phi' = E\Phi'$$

11.6.13 Effet Casimir

- 1. Les seuls paramètres physiques à notre disposition sont L, \hbar (il s'agit d'un problème quantique) et c (la vitesse de propagation des ondes électromagnétiques). Avec ces trois paramètres, on peut former une seule quantité ayant les dimensions d'une pression, à savoir $\hbar c/L^4$.
- 2. Les modes stationnaires du champ électrique sont de la forme

$$\vec{E}(\vec{r},t) = \left[e^{i(xk_x + yk_y)} \sin \frac{\pi nz}{L} \right] \vec{e}_s(\hat{K}) e^{\pm i\omega_K t}$$

où n est un entier ≥ 0 et $\omega_K = c|\vec{K}|$. Lorsque $n \neq 0$, le vecteur d'onde tridimensionnel \vec{K} est de la forme

$$\vec{K} = \left(k_x, k_y, \pm \frac{\pi n}{L}\right)$$

et il y a deux directions orthogonales indépendantes pour $\vec{e_s}(\hat{K})$. L'annulation de de la composante tranverse du champ électrique \vec{E} pour z=0 et z=L est alors garantie par le facteur $\sin(\pi nz/L)$. Lorsque n=0, $\vec{e_s}(\hat{K})$ doit être parallèle à Oz en raison de la condition d'annulation de la composante transverse de \vec{E} et comme de plus $\vec{e_s}(\hat{K})$ doit être orthogonal à \vec{k} , il existe une seule direction de polarisation.

3. À chaque vecteur \vec{k} correspondent deux états de polarisation (sauf si n=0) et l'énergie de point zéro est

$$E_0(L) = \frac{\hbar}{2} \left(2 \sum_{n,\vec{k}}' \omega_n(\vec{k}) \right)$$

4. À la limite continue, (cf. exercice 9.7.11), lorsque les dimensions $L_x, L_y \to \infty$

$$\sum_{\vec{k}} \to \frac{\mathcal{S}}{(2\pi)^2} \int d^2k$$

mais comme L est fini, la somme sur n reste discrète, et

$$E_0(L) = \frac{\hbar \mathcal{S}}{(2\pi)^2} \sum_{n \vec{k}}' \int d^2k \,\omega_n(\vec{k})$$

Cette intégrale diverge aux grande fréquences (divergence dite ultraviolette). On introduit un facteur de coupure χ , qui représente physiquement le fait qu'un métal réel ne reste pas parfait aux grandes fréquences

$$E_0(L) = \frac{\hbar \mathcal{S}}{(2\pi)^2} \sum_{n=0}^{\infty} \int d^2k \, \omega_n(\vec{k}) \chi \left(\frac{\omega_n(\vec{k})}{\omega_c} \right)$$

Posant

$$\omega^{2} = \frac{c^{2}\pi^{2}n^{2}}{L^{2}} + c^{2}k^{2} = \omega_{n}^{2} + c^{2}k^{2} \qquad \omega \ge \omega_{n}$$

et effectuant le changement de variables

$$\mathrm{d}^2 k = 2\pi k \mathrm{d} k = \frac{2\pi}{c^2} \omega \mathrm{d} \omega$$

on obtient

$$E_0(L) = \frac{\hbar \mathcal{S}}{2\pi c^2} \sum_{n=0}^{\infty} \int_{\omega_n}^{\infty} d\omega \, \omega^2 \chi \left(\frac{\omega}{\omega_c}\right) \qquad \omega_n = \frac{\pi cn}{L}$$

5. $E_0(L)$ dépend de L uniquement par l'intermédiaire de $\omega_n = \pi nc/L$ et

$$\frac{\mathrm{d}E_0(L)}{\mathrm{d}L} = -\frac{\mathrm{d}\omega_n}{\mathrm{d}L} \frac{\hbar \mathcal{S}}{2\pi c^2} \omega_n^2 \chi \left(\frac{\omega}{\omega_c}\right) = \frac{\pi nc}{L^2} \frac{\hbar \mathcal{S}}{2\pi c^2} \omega_n^2 \chi \left(\frac{\omega}{\omega_c}\right)$$

On en déduit la pression interne

$$P_{\rm int} = -\frac{1}{\mathcal{S}} \frac{\mathrm{d}E_0(L)}{\mathrm{d}L} = -\frac{\pi^2 \hbar c}{2L^4} \sum_{n=0}^{\infty} ' n^3 \chi \left(\frac{\omega}{\omega_c}\right) = -\frac{\pi^2 \hbar c}{2L^4} \sum_{n=0}^{\infty} ' g(n)$$

Le calcul de la pression extérieure s'obtient en prenant la limite $L \to \infty$, puisqu'à l'extérieur le champ n'est pas confiné entre deux plaques. On peut donc remplacer la somme discrète sur n par une intégrale

$$P_{\rm ext} = -\frac{\pi^2 \hbar c}{2L^4} \int_0^\infty g(n)$$

le pression totale vaut

$$P_{\text{tot}} = P_{\text{int}} - P_{\text{ext}} = -\frac{\pi^2 \hbar c}{2L^4} \left(\sum_{n=0}^{\infty} g(n) - \int_0^{\infty} g(n) dn \right)$$

D'après la formule d'Euler-Mac Laurin

$$\sum_{n=0}^{\infty} g(n) - \int_0^{\infty} g(n) = \frac{1}{5!} + O\left(\frac{\pi c}{L\omega_c^2}\right)$$

ce qui donne

$$P_{\text{tot}} = -\frac{\pi^2}{240} \, \frac{\hbar c}{L^4}$$

On obtient l'énergie de point zéro par intégration

$$E_0(L) = -\frac{\pi^2}{720} \, \frac{\hbar c}{L^3}$$

11.6.14 Calcul quantique avec des ions piégés

1. Nous écrivons le hamiltonien d'interaction en terme de σ_+ et σ_-

$$H_{\rm int} = -\frac{1}{2} \hbar \omega_1 [\sigma_+ + \sigma_-] \left[e^{i(\omega t - kz - \phi)} + e^{-i(\omega t - kz - \phi)} \right]$$

et nous passons dans le point de vue de l'interaction interaction en utilisant (5.32)

$$e^{iH_0t/\hbar} \sigma_+ e^{-iH_0t/\hbar} = e^{\mp i\omega_0 t} \sigma_+$$

A l'approximation séculaire, nous pouvons négliger les termes qui se comportent comme $\exp[\pm i(\omega_0 + \omega)t]$ et il reste

$$\tilde{H}_{\rm int} \simeq -\frac{\hbar}{2} \omega_1 \left[\sigma_+ \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\delta t - \phi)} \, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k\tilde{z}} + \sigma_- \, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\delta t - \phi)} \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}k\tilde{z}} \right]$$

2. $\Delta z = \sqrt{\hbar/(2M\omega_z)}$ est l'étalement de la fonction d'onde dans le puits harmonique. Par conséquent, $\eta = k\Delta z$ est le rapport de cet étalement à la longueur d'onde de la lumière laser. Nous pouvons écrire

$$k\tilde{z} = k\sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_z}} \left(\tilde{a} + \tilde{a}^{\dagger} \right) = \eta \left(a e^{-i\omega_z t} + a^{\dagger} e^{i\omega_z t} \right)$$

L'élément de matrice de \tilde{H}_{int} entre les états $|1, m + m'\rangle$ et $|0, m\rangle$ est

$$\langle 1, m + m' | \tilde{H}_{\rm int} | m \rangle = -\frac{1}{2} \hbar \omega_1 e^{i(\delta t - \phi)} \langle m + m' | e^{-i\eta(\tilde{a} + \tilde{a}^{\dagger})} | m \rangle$$

La fréquence de Rabi pour les oscillations entre les deux niveaux est

$$\omega_1^{m \to m + m'} = \omega_1 |\langle m + m' | e^{-i\eta(a + a^{\dagger})} | m \rangle|$$

3. Ecrivant

$$e^{\pm i\eta(\tilde{a}+\tilde{a}^{\dagger})} \simeq I \pm i\eta(\tilde{a}+\tilde{a}^{\dagger})$$

et en conservant uniquement les termes du premier ordre en η nous obtenons

$$\tilde{H}_{\text{int}} = \frac{\mathrm{i}}{2} \eta \hbar \omega_1 \left[\sigma_+ \ a \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\delta - \omega_z)t} \, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi} - \sigma_- \ a^{\dagger} \, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\delta - \omega_z)t} \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi} \right. \\
+ \sigma_+ \ a^{\dagger} \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\delta + \omega_z)t} \, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi} - \sigma_- \ a \, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\delta + \omega_z)t} \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi} \right]$$

La première ligne de $\tilde{H}_{\rm int}$ correspond à une résonance à $\delta = \omega - \omega_0 = \omega_z$, c'est-à-dire, $\omega = \omega_0 + \omega_z$, une bande latérale bleue, et la seconde ligne à une résonance à $\omega = \omega_0 - \omega_z$, une bande latérale rouge. Le terme en $\sigma_+ a$ de la bande latérale rouge induit des transitions de $|0, m+1\rangle$ vers $|1, m\rangle$, et le terme $\sigma_- a^\dagger$ des transitions de $|1, m\rangle$ vers $|0, m+1\rangle$. De plus

$$\langle m|a|m+1\rangle = \langle m+1|a^{\dagger}|m\rangle = \sqrt{m+1}$$

de sorte que nous obtenons l'expression de l'énoncé pour $\tilde{H}^+_{\rm int},$ avec

$$a_b = \frac{a}{\sqrt{m+1}}$$
 $a_b^{\dagger} = \frac{a^{\dagger}}{\sqrt{m+1}}$

La fréquence de Rabi est donc $\omega_1\sqrt{m+1}$. Le même raisonnement s'applique à la bande latérale rouge. Le schéma des niveaux est donné sur la figure 1.

4. Les opérateurs de rotation $R(\theta, \phi)$ sont donnés par

$$R(\theta, \phi = 0) = I \cos \frac{\theta}{2} - i\sigma_x \sin \frac{\theta}{2}$$

$$R(\theta, \phi = \frac{\pi}{2}) = I \cos \frac{\theta}{2} - i\sigma_y \sin \frac{\theta}{2}$$

de sorte que

$$R(\pi, 0) = -i\sigma_x$$
 $R\left(\pi, \frac{\pi}{2}\right) = -i\sigma_y$

Nous avons par exemple

$$R\left(\pi, \frac{\pi}{2}\right) R(\beta, 0) R\left(\pi, \frac{\pi}{2}\right) = (-i\sigma_y) (I\cos\frac{\beta}{2} + i\sigma_x \sin\frac{\beta}{2}) (-i\sigma_y)$$
$$= -(I\cos\frac{\beta}{2} + i\sigma_x \sin\frac{\beta}{2}) = -R(-\beta, 0)$$

Appelons A la transition $|0,0\rangle \leftrightarrow |1,1\rangle$ et B la transition $|0,1\rangle \leftrightarrow |1,2\rangle$. Les fréquences de Rabi sont liées par $\omega_B = \sqrt{2}\,\omega_A$. Par conséquent, si l'angle de rotation est θ_A pour la transition A, cet angle sera $\theta_B = \sqrt{2}\,\theta_A$ pour la transition B. Pour la transition A, nous choisissons $\alpha = \pi/\sqrt{2}$ et $\beta = \pi$

$$R\left(\frac{\pi}{\sqrt{2}}, \frac{\pi}{2}\right) R(\pi, 0) R\left(\frac{\pi}{\sqrt{2}}, \frac{\pi}{2}\right) R(\pi, 0) = -I$$

Pour la transition B nous aurons alors $\alpha = \pi$ et $\beta = \pi \sqrt{2}$

$$R\left(\pi, \frac{\pi}{2}\right) R(\pi\sqrt{2}, 0) R\left(\pi, \frac{\pi}{2}\right) R(\pi\sqrt{2}, 0) = -I$$

L'état $|1,0\rangle$ n'est pas affecté parce que la transition $|0,0\rangle \leftrightarrow |1,0\rangle$ ne résonne pas à la fréquence de la bande latérale bleue. Nous avons donc

$$|00\rangle \leftrightarrow -|0,0\rangle$$
 $|0,1\rangle \leftrightarrow -|0,1\rangle$ $|1,0\rangle \leftrightarrow +|1,0\rangle$ $|1,1\rangle \leftrightarrow -|1,1\rangle$

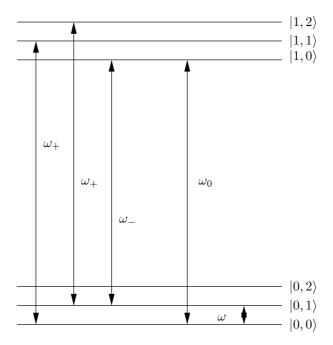


FIG. 11.1 – The level scheme. The transitions which are used are $(0,0) \leftrightarrow (0,1)$ and $(0,1) \leftrightarrow (1.2)$: bluesideband, $\omega_+ = \omega_0 + \omega_z$ and $(0,1) \leftrightarrow (1,1)$: red sideband, $\omega_- = \omega_0 - \omega_z$.

5. $R(\pm \pi, \pi/2) = \mp i\sigma_y$ de sorte que

$$R\left(\pm\pi,\frac{\pi}{2}\right)|0,1\rangle = \mp|1,0\rangle$$
 $R\left(\pm\pi,\frac{\pi}{2}\right)|1,0\rangle = \pm|0,1\rangle$

Partons de l'état à deux ions le plus général, les deux ions étant dans l'état fondamental de vibration

$$|\Psi\rangle = (a|00\rangle + b|01\rangle + c|10\rangle + d|11\rangle) \otimes |0\rangle$$

= $a|00,0\rangle + b|01,0\rangle + c|10,0\rangle + d|11,0\rangle$

L'action de $R^{-(2)}(-\pi,\pi/2)$ sur l'ion 2 donne

$$|\Psi'\rangle = R^{-(2)}(-\pi, \pi/2)|\Psi\rangle = a|00, 0\rangle + b|00, 1\rangle + c|10, 0\rangle + d|10, 1\rangle$$

Nous appliquons ensuite $R_{\alpha\beta}^{+(1)}$ sur l'ion 1

$$|\Psi''\rangle=R_{\alpha\beta}^{+(1)}|\Psi'\rangle=-a|00,0\rangle-b|00,1\rangle+c|10,0\rangle-d|10,1\rangle$$

et finalement $R^{-(2)}(\pi,\pi/2)$ sur l'ion 2

$$\begin{split} |\Psi'''\rangle &= R^{-(2)}(\pi,\pi/2) |\Psi''\rangle &= -a|00,0\rangle - b|01,0\rangle + c|10,0\rangle - d|11,0\rangle \\ &= (-a|00\rangle - b|01\rangle + c|10\rangle - d|11\rangle) \otimes |0\rangle \end{split}$$

Ceci donne précisément l'action d'une porte cZ à un facteur de phase trivial près.

11.6.15 L'expérience de Badurek et al.

Partons du vecteur d'état initial

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_1 + |\uparrow\rangle_2) \otimes |z(t=0)\rangle$$

La valeur moyenne du champ $\vec{\mathsf{B}}_1$ au temps t est

$$\langle \vec{\mathsf{B}}_1 \rangle (t) = \langle z(t) | \vec{\mathsf{B}}_1 | z(t) \rangle = 2\alpha |z| \cos(\omega t - \phi) \hat{x}$$

ce qui montre, par comparaison avec l'expression classique

$$\vec{B}_1 = B_1 \hat{x} \cos(\omega t - \phi)$$

que $2\alpha|z|=B_1$. Dans le point de vue de l'interaction, avec pour hamiltonien H_0

$$H_0 = \hbar \omega a^{\dagger} a - \frac{1}{2} \, \hbar \omega_0 \sigma_z$$

nous avons

$$\tilde{H}_{\rm int} = -\frac{1}{2} \alpha \hbar \gamma \left[\sigma_{+} e^{i\omega_{0}t} + \sigma_{-} e^{-i\omega_{0}t} \right] \left[a e^{-i\omega t} + a e^{i\omega t} \right]$$

et à l'approximation séculaire

$$\tilde{H}_{\rm int} = -\frac{1}{2}\alpha\gamma\hbar \left[\sigma_{+} a e^{-i\delta t} + \sigma_{-} a^{\dagger} e^{i\delta t}\right]$$

où $\delta = \omega - \omega_0$ est le désaccord et γ le facteur gyromagnétique. L'action de l'opérateur a sur un état cohérent $|z\rangle$ est simple : $a|z\rangle = z|z\rangle$, mais non celle de a^{\dagger} . On définit le vecteur $|\varepsilon\rangle$ comme la différence entre $a^{\dagger}|z\rangle$ et $z^*|z\rangle$

$$a^{\dagger}|z\rangle = z^*|z\rangle + |\varepsilon\rangle$$

Il est facile de montrer que $\langle z|\varepsilon\rangle=0$ et que $\|\varepsilon\|^2=\langle\varepsilon|\varepsilon\rangle=1$. En effet, en multipliant l'équation

$$a^{\dagger}|z\rangle = z^*|z\rangle + |\varepsilon\rangle$$

par le bra $\langle z|$, on trouve

$$\langle z|a^{\dagger}|z\rangle = z^* = z^* + \langle z|\varepsilon\rangle$$

et donc $\langle z|\varepsilon\rangle=0$. D'autre part

$$\|\varepsilon\|^2 = (\langle z|a - z\langle z|)(a^{\dagger}|z\rangle - z^*|z\rangle) = 1$$

Ajouter un photon à un état cohérent le modifie de façon négligeable si $|z|\gg 1$. L'action de $\tilde{H}_{\rm int}$ sur un état cohérent peut donc s'écrire grâce à la substitution

$$a^{\dagger}|z\rangle \rightarrow z^*|z\rangle + |\varepsilon\rangle$$

de la façon suivante

$$\tilde{H}_{\rm int} \simeq -\frac{1}{2}\hbar\omega_1 \left[\sigma_+ e^{i\phi} e^{-i\delta t} + \sigma_- e^{-i\phi} e^{i\delta t} \right] |z\rangle\langle z| - \frac{1}{2}\frac{\hbar\omega_1}{|z|} \sigma_- e^{i\delta t} |\varepsilon\rangle\langle z|$$

Le premier terme de $\tilde{H}_{\rm int}$ reproduit exactement le hamiltonien d'interaction avec un champ classique, le deuxième terme, responsable de l'intrication spin-champ, est négligeable lorsque $|z| \gg 1$, ce qui est le cas pour un champ classique. L'interaction avec le champ classique maintient la cohérence entre les états de spin $|\uparrow\rangle_1$ et $|\uparrow\rangle_2$, et les interférences ne sont pas détruites.

Chapitre 12

Exercices du chapitre 12

12.7.2 Longueur de corrélation et niveau excité

1. En introduisant $I = \sum_{n} |n\rangle\langle n| = \sum_{m} |m\rangle\langle m|$

$$F(x_b, \tau_b; \tau, \tau'; x_a, \tau_a) = \sum_{n,m} e^{-E_n(\tau_b - \tau)/\hbar} \langle x_b | n \rangle \langle n | X e^{-H(\tau - \tau')/\hbar} X e^{E_m(\tau_a - \tau')/\hbar} | x_a \rangle$$

Lorsque $\tau_b \to \infty$, seul le terme n=0 subsiste, et de même seul le terme m=0 subsiste pour $\tau_a \to -\infty$. Comme

$$\langle x_b | 0 \rangle = \varphi_0(x_b)$$
 $\langle 0 | x_a \rangle = \varphi_0^*(x_a)$

on obtient

$$\lim_{\tau_a \to -\infty} \lim_{\tau_b \to +\infty} F = \varphi_0(x_b) \varphi_0^*(x_a) \langle 0 | X e^{-H(\tau - \tau')/\hbar} X | 0 \rangle$$

2. De

$$F(x_b, \tau_b | x_a.\tau_a) = \langle x_b | e^{-H(\tau - \tau')/\hbar} x_a \rangle$$

on en déduit par la même méthode qu'à la question 1

$$\langle 0|T(X_{\rm H}(\tau)X_{\rm H}(\tau'))|0\rangle = \lim_{\tau_a \to -\infty} \lim_{\tau_b \to +\infty} \frac{F(x_b, \tau_b; \tau, \tau'; x_a, \tau_a)}{F(x_b, \tau_b|x_a, \tau_a)}$$

Introduisons la fonctionnelle génératrice

$$Z(j) = \int_{x(\tau_a)=x_a}^{x(\tau_b)=x_b} \mathcal{D}x(\tau) \exp\left[-\frac{1}{\hbar} \int_{\tau_a}^{\tau_b} \left(\frac{1}{2} m \left(\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}\tau}\right)^2 + V(x(\tau)) - \hbar j(\tau) x(\tau)\right) \mathrm{d}\tau\right]$$

Par différentiation fonctionnelle

$$F(x_b, \tau_b; \tau, \tau'; x_a, \tau_a) = \frac{1}{Z(j=0)} \frac{\delta^2 Z(j)}{\delta j(\tau) \delta j(\tau')}$$

Introduisons la fonctionelle génératrice

$$\overline{Z}(j) = \int_{x_a}^{x_b} \mathcal{D}x(\tau) \exp\left[-\frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{1}{2} m \left(\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}\tau}\right)^2 + V(x(\tau)) - \hbar j(\tau) x(\tau)\right) \mathrm{d}\tau\right]$$

en prenant la dérivée fonctionnelle, et compte tenu des résultats précédents

$$\langle 0|T(X_{\rm H}(\tau)X_{\rm H}(\tau'))|0\rangle = \frac{1}{\overline{Z}(j=0)} \frac{\delta^2 \overline{Z}(j)}{\delta j(\tau)\delta j(\tau')}$$

Pour $\tau > \tau'$

$$\langle 0|T(X_{\mathrm{H}}(\tau)X_{\mathrm{H}}(\tau'))|0\rangle = \langle 0|X_{\mathrm{H}}(\tau)X_{\mathrm{H}}(\tau')|0\rangle = \sum_{n} |\langle 0|X|n\rangle|^{2} e^{-E_{n}(\tau-\tau')/\hbar}$$

et

$$\langle 0|X_{\rm H}(\tau)|0\rangle = \langle 0|X|0\rangle$$

Le terme n=0 disparaît quand on prend la partie connexe, et lorsque $(\tau-\tau')\to\infty$

$$\langle 0|T(X_{\rm H}(\tau)X_{\rm H}(\tau'))|0\rangle = \simeq |\langle 0|X|1\rangle|^2 e^{-E_1|\tau-\tau'|/\hbar}$$

Le comportement asymptotique est contrôlé par l'énergie du premier niveau excité.

3. Pour obtenir la fonction de partition, on doit poser $x_a = x_b = x$ et intégrer sur x. La partie connexe $\langle x(\tau)x(\tau')\rangle_c$ est donnée par la même intégrale de chemin que $\langle 0|T(X_{\rm H}(\tau)X_{\rm H}(\tau'))|0\rangle$ et donc

$$\langle x(\tau)x(\tau')\rangle_c \simeq e^{-E_1|\tau-\tau'|/\hbar}$$
 $\xi = \hbar/E_1$

12.7.4 Propagateur de Feynman et propagateur euclidien

1. Soit

$$X(t) = \theta(t)e^{-i\omega t} + \theta(-t)e^{i\omega t}$$

Calculons sa dérivée première

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}X(t) = -\mathrm{i}\omega \left[\theta(t)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} - \theta(-t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\right]$$

et sa dérivée seconde

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}X(t) = -2\mathrm{i}\omega\delta(t) - \omega^2X(t)$$

soit

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}D_F(t) + \omega^2 D_F = -\mathrm{i}\delta(t)$$

2. Les pôles de l'intégrand sont à $k_0=-\omega+\mathrm{i}\eta$ et à $k_0=\omega-\mathrm{i}\eta$. Pour t>0 (t<0) on referme le contour par un grand demi-cercle dans le demi-plan supérieur (inférieur) et on encercle donc le pôle à $k_0=-\omega+\mathrm{i}\eta$ $(k_0=\omega-\mathrm{i}\eta)$. En prenant le résidu du pôle

$$t > 0$$
 : $D_F(t) = \frac{1}{2\omega} e^{-i\omega t}$ $t < 0$: $D_F(t) = \frac{1}{2\omega} e^{i\omega t}$

3.

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tau} \mathrm{e}^{-\omega|\tau|} = -\varepsilon(\tau)\omega \mathrm{e}^{-\omega|\tau|}$$

où $\varepsilon(\tau)$ est la fonction signe de τ . On en déduit

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\tau^2} \mathrm{e}^{-\omega|\tau|} = -2\omega\delta(\tau) + \omega^2 \,\mathrm{e}^{-\omega|\tau|}$$

12.7.6 Calcul de la fonctionnelle génératrice pour l'oscillateur harmonique

1. Vérifions que la fonction de Green $G(\tau)$ est

$$G(\tau) = \theta(\tau)u(\tau)v(0) + \theta(-\tau)v(\tau)u(0)$$

Calculons sa dérivée première

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tau}G(\tau) = \theta(\tau)\dot{u}(\tau)v(0) + \theta(-\tau)u(0)\dot{v}(\tau)$$

puis sa dérivée seconde

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\tau^2} G(\tau) = \delta(\tau) [\dot{u}(0)v(0) - u(0)\dot{v}(0)] + \theta(\tau)\ddot{u}(\tau)v(0) + \theta(-\tau)u(0)\ddot{v}(\tau)$$

soit, en utilisant les équations du mouvement pour $u(\tau)$ et $v(\tau)$

$$\frac{d^2}{d\tau^2}G(\tau) = \delta(\tau)[\dot{u}(0)v(0) - u(0)\dot{v}(0)] + \omega^2 G(\tau)$$

Compte tenu de

$$\dot{u}(0) = -\lambda\omega \cosh(\omega\tau_b)$$
 $\dot{u}(0) = \lambda'\omega \sinh(\omega\tau_a)$

on obtient pour le coefficient de $\delta(\tau)$

$$\dot{u}(0)v(0) - u(0)\dot{v}(0) = \lambda\lambda'\omega^2 \sinh\omega(\tau_b - \tau_a) = 1$$

2. Partons de l'action euclidienne

$$S_E[y] = \int_{\tau_a}^{\tau_b} \left[\frac{1}{2} \dot{y}^2 + \frac{1}{2} \omega^2 y^2 - jy \right] d\tau$$

Comme $y(\tau)$ vérifie les équations du mouvement, $\delta S_E/\delta y=0$; de plus S_E est quadratique en y et par conséquent

$$S_E(y+h) = S_E(y) + S_E(h)$$

En utilisant

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tau}(y\dot{y}) = \dot{y}^2 + y\dot{y} = \dot{y}^2 + y(\omega^2 y - j)$$

on obtient

$$\dot{y}^2 = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tau}(y\dot{y}) - \omega^2 y^2 + jy$$

d'où

$$S_E(y) = \frac{1}{2} \left[y \dot{y} \right]_{\tau_a}^{\tau_b} - \frac{1}{2} \int_{\tau_a}^{\tau_b} j y \mathrm{d}\tau$$

3. La fonction $y_0(\tau)$ est une combinaison linéaire de deux solutions $u(\tau)$ et $v(\tau)$. Pour que $y_0(\tau_a) = x_a$ et $y_0(\tau_b) = x_b$, il suffit de choisir

$$y_0(\tau) = \frac{1}{\sinh \omega T} \left[x_b \sinh \omega (\tau - \tau_a) + x_a \sinh \omega (\tau_b - \tau) \right]$$

Ceci permet de calculer

$$y_0(\tau_b)\dot{y}_0(\tau_b) - y_0(\tau_a)\dot{y}_0(\tau_a) = \frac{\omega \cosh \omega T}{\sinh \omega T} \left(x_a^2 + x_b^2\right) - \frac{2\omega x_a x_b}{\sinh \omega T}$$

On doit ensuite calculer

$$\int_{\tau_a}^{\tau_b} j(\tau) y(\tau) d\tau = \int_{\tau_a}^{\tau_b} j(\tau) \left[y_0(\tau) + \int_{\tau_a}^{\tau_b} j(\tau) d\tau' G(\tau, \tau') j(\tau') d\tau' \right]$$

Il existe une autre contribution à $x_b \dot{x}_b - x_a \dot{x}_a$ venant, par exemple pour x_b , de

$$x_b \int_{\tau_a}^{\tau_b} \dot{G}(\tau_b, \tau) j(\tau) d\tau = -\frac{x_b}{\sinh \omega T} \int_{\tau_a}^{\tau_b} \sinh \omega (\tau - \tau_a) j(\tau) d\tau$$

Par ailleurs, on obtient de

$$-\frac{1}{2}\int_{\tau_a}^{\tau_b} y_0(\tau)j(\tau)\mathrm{d}\tau$$

la contribution

$$-\frac{x_b}{2\sinh\omega T}\int_{\tau_a}^{\tau_b}\sinh\omega(\tau-\tau_a)j(\tau)\mathrm{d}\tau$$

et en ajoutant les deux contributions, un total

$$-\frac{x_b}{\sinh \omega T} \int_{\tau_a}^{\tau_b} \sinh \omega (\tau - \tau_a) j(\tau) d\tau$$

En résumé

$$\begin{aligned} y\dot{y}\Big|_{\tau_a}^{\tau_b} &=& \frac{\omega\cosh\omega T}{\sinh\omega T}\left(x_a^2+x_b^2\right) - \frac{2\omega x_a x_b}{\sinh\omega T} \\ &-& \frac{x_b}{\sinh\omega T}\int_{\tau_a}^{\tau_b}\sinh\omega (\tau-\tau_a)j(\tau)\mathrm{d}\tau - \frac{x_a}{\sinh\omega T}\int_{\tau_a}^{\tau_b}\sinh\omega (\tau_b-\tau)j(\tau)\mathrm{d}\tau \end{aligned}$$

Intégration sur x_a et x_b . Définissons

$$I_{a} = \int_{\tau_{a}}^{\tau_{b}} \sinh \omega (\tau_{b} - \tau) j(\tau) d\tau \qquad y_{a} = \frac{x_{a}}{\sinh \omega T} I_{a}$$

$$I_{b} = \int_{\tau_{a}}^{\tau_{b}} \sinh \omega (\tau - \tau_{a}) j(\tau) d\tau \qquad y_{b} = \frac{x_{b}}{\sinh \omega T} I_{b}$$

L'intégrale à calculer est une gaussienne (i = a, b)

$$\int dx_a dx_b \exp\left[-\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^2 x_i A_{ij} x_j + \sum_{i=1}^2 x_i y_i\right] = \frac{2\pi}{(\det A)^{1/2}} \exp\left[-\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^2 y_i A_{ij}^{-1} y_j\right]$$

La matrice A^{-1} est donnée par

$$A^{-1} = \frac{1}{2\omega} \begin{pmatrix} 1 & e^{-\omega T} \\ e^{-\omega T} & 1 \end{pmatrix}$$

Comme l'origine des temps est arbitraire, il sera commode de choisir $\tau_a=0,\,\tau_b=T$

$$I_{a} = \int_{\tau_{a}}^{\tau_{b}} \sinh \omega (T - \tau) j(\tau) d\tau \qquad y_{a} = \frac{x_{a}}{\sinh \omega T} I_{a}$$

$$I_{b} = \int_{\tau_{a}}^{\tau_{b}} \sinh \omega \tau j(\tau) d\tau \qquad y_{b} = \frac{x_{b}}{\sinh \omega T} I_{b}$$

L'expression provenant de l'intégrale gaussienne que nous devons évaluer est

$$X = I_a^2 + I_b^2 + 2e^{-\omega T} I_a I_b$$

On montre d'abord la première identité

$$\left(e^{-\omega T}I_a + I_b\right)\left(e^{\omega T}I_a + I_b\right)
= I_a^2 + I_b^2 + 2I_aI_b \cosh \omega t = \sinh^2 \omega T \int d\tau d\tau' e^{\omega(\tau - \tau')}j(\tau)j(\tau')$$

d'où

$$X = \sinh^2 \omega t \int d\tau d\tau' e^{\omega(\tau - \tau')} j(\tau) j(\tau') - 2I_a I_b \sinh \omega T$$

Le terme en $-2I_aI_b\sinh\omega T$ se combine avec l'intégrale double

$$Y = -\frac{1}{2\omega \sinh \omega T} \int d\tau d\tau' \sinh \omega (T - \tau) \sinh \omega \tau' j(\tau) j(\tau') [\theta(\tau - \tau') + \theta(\tau' - \tau)]$$

$$+ \frac{1}{\omega \sinh \omega T} \int d\tau d\tau' \sinh \omega (T - \tau) \sinh \omega \tau' j(\tau) j(\tau') \theta(\tau - \tau')$$

On utilise

$$\theta(\tau - \tau') + \theta(\tau' - \tau) - 2\theta(\tau - \tau') = -\varepsilon(\tau - \tau')$$

où $\varepsilon(x)$ est la fonction signe de x, pour écrire

$$Y = -\frac{1}{2\omega \sinh \omega T} \int d\tau d\tau' \sinh \omega (T - \tau) \sinh \omega \tau' j(\tau) j(\tau') \varepsilon(\tau - \tau')$$

$$= -\frac{1}{2\omega \sinh \omega T} \int d\tau d\tau' (\sinh \omega T \cosh \omega \tau - \cosh \omega T \sinh \omega \tau) \sinh \omega \tau' j(\tau) j(\tau') \varepsilon(\tau - \tau')$$

$$= -\frac{1}{2\omega \sinh \omega T} \int d\tau d\tau' \sinh \omega T \cosh \omega \tau \sinh \omega \tau' j(\tau) j(\tau') \varepsilon(\tau - \tau')$$

$$= \frac{1}{8\omega} \int d\tau d\tau' \left[e^{\omega(\tau - \tau')} - e^{-\omega(\tau - \tau')} \right] j(\tau) j(\tau') \varepsilon(\tau - \tau')$$

En combinant avec le premier terme de X on voir apparaître la combinaison

$$e^{\omega(\tau-\tau')} \quad \left[\theta(\tau-\tau') + \theta(\tau'-\tau) + \varepsilon(\tau-\tau') \right] + e^{-\omega(\tau-\tau')} \left[\theta(\tau-\tau') + \theta(\tau'-\tau) - \varepsilon(\tau-\tau') \right]$$

$$= 2 \left[e^{-\omega(\tau-\tau')} \theta(\tau-\tau') + e^{-\omega(\tau'-\tau)} \theta(\tau'-\tau) \right] = 2e^{-\omega|\tau-\tau'|}$$

Le propagateur euclidien est donc bien

$$D_E(\tau) = \frac{1}{2\omega} e^{-\omega|\tau|}$$

6. Le terme qui projette sur l'état fondamental pour $t_a \to \infty$ est

$$e^{iHt_a} \rightarrow e^{iE_nt_a}$$

pour un état n. Pour que ce facteur tende vers zéro si $E_n \neq 0$ pour $t_a \to -\infty$, il faut que t_a ait une partie imaginaire positive. De même, pour

$$\circ$$
-i $Ht_b \longrightarrow \circ$ -i $E_n t_a b$

il faut que t_b ait une partie imaginaire négative. Dans ces conditions, $\theta(\tau - \tau')$ se prolonge analytiquement en $\theta(t - t')$, et le propagateur euclidien devient le propagateur de Feynman

$$D_F(t) = \frac{1}{2\omega} \left[e^{-i\omega t} \theta(t) + e^{i\omega t} \theta(-t) \right]$$

12.7.10 Probabilités de transition à l'approximation adiabatique

1. Afin de simplifier les notations, nous noterons par convention $\mathcal{P} = \mathcal{P}(t)$, et nous expliciterons $\mathcal{P}(0)$ quand t = 0. De $\sum_i \mathcal{P}_i^2 = I$ on déduit

$$\sum_{j} \frac{\mathrm{d}\mathcal{P}}{\mathrm{d}t} \, \mathcal{P}_{j} = -\sum_{j} \mathcal{P}_{j} \, \frac{\mathrm{d}\mathcal{P}_{j}}{\mathrm{d}t}$$

Ecrivons l'équation d'évolution de $\mathcal{P}_i(t) = A(t)\mathcal{P}_i(0)A^{\dagger}(t)$

$$i\frac{\mathrm{d}\mathcal{P}_j}{\mathrm{d}t} = i\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t}\,\mathcal{P}(0)A^{\dagger}(t) + A(t)\mathcal{P}_j(0)\,i\frac{\mathrm{d}A^{\dagger}}{\mathrm{d}t}$$

et reportant idA/dt = K(t)A(t) on trouve l'équation d'évolution pour \mathcal{P}_j

$$i\frac{\mathrm{d}\mathcal{P}_j}{\mathrm{d}t} = K(t)A(t)\mathcal{P}_j(0)A^{\dagger}(t) - A(t)\mathcal{P}_j(0)A^{\dagger}(t)K(t) = [K(t), \mathcal{P}_j(t)]$$

Calculons le commutateur [K(t), A(t)], en remarquant que $\mathcal{P}_j(t)\mathcal{P}_l(t) = \delta_{jl}\mathcal{P}_l(t)$

$$[K(t), \mathcal{P}_{l}(t)] = i \left[\sum_{j} \frac{d\mathcal{P}_{j}}{dt} \, \mathcal{P}_{j}(t), \mathcal{P}(t) \right] = i \sum_{j} \frac{d\mathcal{P}_{j}}{dt} \, \mathcal{P}_{j}(t) \mathcal{P}_{l}(t) + i \sum_{j} \mathcal{P}_{l}(t) \mathcal{P}_{j}(t) \, \frac{d\mathcal{P}_{j}}{dt}$$
$$= i \frac{d\mathcal{P}_{l}}{dt} \, \mathcal{P}_{l}(t) + i \mathcal{P}_{l}(t) \, \frac{d\mathcal{P}_{l}}{dt} = i \frac{d}{dt} \left(\mathcal{P}_{l}^{2} \right) = i \frac{d\mathcal{P}_{l}}{dt}$$

ce qui donne le résultat recherché pour $id\mathcal{P}_l/dt$. D'autre part

$$\mathcal{P}_l K \mathcal{P}_l = i \sum_j \mathcal{P}_l \frac{\mathrm{d} \mathcal{P}_j}{\mathrm{d}t} \mathcal{P}_j \mathcal{P}_l = i \mathcal{P}_l \frac{\mathrm{d} \mathcal{P}_l}{\mathrm{d}t} \mathcal{P}_l = 0$$

En effet, de $\mathcal{P}^2 = \mathcal{P}$ on obtient

$$\frac{\mathrm{d}\mathcal{P}}{\mathrm{d}t} = \mathcal{P}\frac{\mathrm{d}\mathcal{P}}{\mathrm{d}t} + \frac{\mathrm{d}\mathcal{P}}{\mathrm{d}t}\mathcal{P}$$

soit, en multipliant à droite par \mathcal{P}

$$\frac{\mathrm{d}\mathcal{P}}{\mathrm{d}t}\mathcal{P} = \mathcal{P}\frac{\mathrm{d}\mathcal{P}}{\mathrm{d}t}\mathcal{P} + \frac{\mathrm{d}\mathcal{P}}{\mathrm{d}t}\mathcal{P}^2 \Longrightarrow \mathcal{P}\frac{\mathrm{d}\mathcal{P}}{\mathrm{d}t}\mathcal{P} = 0$$

2. L'équation d'évolution de $\Phi(t)$ est

$$i\frac{\mathrm{d}\Phi}{\mathrm{d}t} = \sum_{j} E_{j}(t) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha_{j}(t)} \,\mathcal{P}_{j}(0) = H^{(A)}(t)\Phi(t)$$

D'autre part

$$A(t)\Phi(t)|\varphi_l(0)\rangle = e^{-i\alpha_l(t)} A(t)|\varphi_l(0)\rangle = e^{-i\alpha_l(t)} |\varphi_l(t)\rangle$$

et donc $U_A(t,0) = A(t)\Phi(t)$ transforme $|\varphi_l(0)\rangle$ en $|\varphi_l(t)\rangle$, au facteur de phase dynamique $\exp[-i\alpha_l(t)]$ près. Le calcul qui suit est calqué sur celui menant du point de vue de Schrödinger à celui de l'interaction si l'on définit

$$\hat{U}(t,0) = \Phi^{\dagger}(t)A^{\dagger}(t)U(t,0)$$

On remarque que

$$A(t)H^{(A)}(t)A^{\dagger}(t) = \sum_{j} E_{j}(t)\mathcal{P}_{j}(t) = H(t)$$

On obtient ensuite

$$i\frac{\mathrm{d}\hat{U}}{\mathrm{d}t} = -\Phi^{\dagger}(t)H^{(A)}(t)A^{\dagger}(t)U(t,0) - \Phi^{\dagger}(t)A^{\dagger}(t)K(t)U(t,0) + \Phi^{\dagger}(t)A^{\dagger}(t)H(t)U(t,0)$$

Mais on a également

$$\Phi^{\dagger} H^{(A)} A^{\dagger} U = \Phi^{\dagger} A^{\dagger} A H^{(A)} A^{\dagger} U = \Phi^{\dagger} A^{\dagger} H(t) U$$

et par conséquent

$$i\frac{\mathrm{d}\hat{U}}{\mathrm{d}t} = -\Phi^{\dagger}A^{\dagger}KA\Phi\hat{U}$$

3. À l'ordre zéro de la théorie des perturbations $\hat{U}(t,0) = I$, et au premier ordre on peut écrire

$$\hat{U}(t,0) = I - i \int_0^t W(t') dt'$$

Le deuxième terme de cette équation va donner des transitions entre des états de j différent. Si le système est à t=0 dans l'état $|\varphi_m(0)\rangle$, l'amplitude de probabilité de le trouver au temps t dans $|\varphi_k(t)\rangle$ est

$$a_{km}(t) = \langle \varphi_k(t) | U(t,0) | \varphi_m(0) \rangle = \langle \varphi_k(t) | A(t) \Phi(t) \hat{U}(t,0) | \varphi_m(0) \rangle$$

$$\simeq \delta_{km} - i \langle \varphi_k(t) | A(t) \Phi(t) \left[\int_0^t W(t') dt' \right] | \varphi_m(0) \rangle$$

d'où

$$\mathsf{p}_{m\to k}(t) \simeq |\langle \varphi_k(t)|A(t)\Phi(t)F(t)|\varphi_m(0)\rangle|^2$$

avec

$$F = \int_0^t W(t') dt' = \int_0^t \Phi^{\dagger}(t') A^{\dagger}(t') K(t') A(t') \Phi(t') dt'$$

Prenant en compte

$$|\varphi_l(t)\rangle = A(t)|\varphi_l(0)\rangle$$

la probabilité $\mathsf{p}_{m \to k}(t)$ se simplifie

$$\mathsf{p}_{m\to k}(t) = \langle \varphi_k(0) | F | \varphi_m(0) \rangle |^2$$

Évaluons l'élément de matrice

$$\begin{split} \langle \varphi_k(0) | \Phi^{\dagger}(t') A^{\dagger}(t') K(t') A(t') \Phi(t') | \varphi_m(0) \rangle &= \mathrm{e}^{\mathrm{i} [\alpha_k(t') - \alpha_m(t')]} \langle \varphi_k(0) | A^{\dagger}(t') K(t') A(t') | \varphi_m(0) \rangle \\ &= \mathrm{e}^{\mathrm{i} [\alpha_k(t') - \alpha_m(t')]} \langle \varphi_k(t') | \frac{\mathrm{d} \mathcal{P}_m}{\mathrm{d} t} | \varphi_m(t') \rangle \end{split}$$

où nous avons utilisé l'expression de K en fonction des projecteurs. Nous pouvons simplifier le résultat en remarquant que

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\varphi_m(t)\rangle = \frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t}|\varphi_m(0)\rangle = \sum_l \frac{\mathrm{d}\mathcal{P}_l}{\mathrm{d}t}\,\mathcal{P}_l A(t)|\varphi_m(0)\rangle = \frac{\mathrm{d}\mathcal{P}_m}{\mathrm{d}t}\,|\varphi_m(t)\rangle$$

et nous obtenons donc (12.53)

$$\mathsf{p}_{m\to k}(t) \simeq \Big| \int_0^t \mathrm{e}^{\mathrm{i}[\alpha_k(t') - \alpha_m(t')]} \langle \varphi_k(t') | \dot{\varphi}_m(t') \rangle \, \mathrm{d}t' \Big|^2$$

Nous pouvons simplifier le résultat en observant que

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\varphi_m(t)\rangle = \frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t}|\varphi_m(0)\rangle = \sum_l \frac{\mathrm{d}\mathcal{P}_l}{\mathrm{d}t}\,\mathcal{P}_l A(t)|\varphi_m(0)\rangle = \frac{\mathrm{d}\mathcal{P}_m}{\mathrm{d}t}|\varphi_m(t)\rangle$$

et par conséquent

$$\mathsf{p}_{m\to k}(t) \simeq \Big| \int_0^t \mathrm{e}^{\mathrm{i}[\alpha_k(t') - \alpha_m(t')]} \langle \varphi_k(t') | \dot{\varphi}_m(t') \rangle \Big|^2$$

4. De l'équation

$$|\dot{\varphi}_m(t)\rangle = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \Big[\mathcal{P}_m(t) |\varphi_m(t)\rangle \Big] = \frac{\mathrm{d}\mathcal{P}_m}{\mathrm{d}t} |\varphi_m(t)\rangle + \mathcal{P}_m(t) |\dot{\varphi}_m(t)\rangle$$

on déduit par comparaison avec les résultats de la question 3

$$\mathcal{P}_m(t)|\dot{\varphi}_m(t)\rangle = 0$$

et donc

$$\langle \varphi_m(t)|\dot{\varphi}_m(t)\rangle = \langle \varphi_m(t)|\mathcal{P}_m|\dot{\varphi}_m(t)\rangle = 0$$

5. Si \hat{n} est le vecteur de Bloch du spin, les projecteurs \mathcal{P}_1 et \mathcal{P}_2 sur $|\varphi_1\rangle$ et $|\varphi_2\rangle$ sont

$$\mathcal{P}_1 = \frac{1}{2} (I + \vec{\sigma} \cdot \hat{n})$$
 $\mathcal{P}_2 = \frac{1}{2} (I - \vec{\sigma} \cdot \hat{n})$

et on trouve

$$\mathcal{P}_1 \frac{\mathrm{d} \mathcal{P}_1}{\mathrm{d} t} + \mathcal{P}_2 \frac{\mathrm{d} \mathcal{P}_2}{\mathrm{d} t} = \frac{\mathrm{i}}{2} \, \vec{\sigma} \cdot \left(\hat{n} \times \frac{\mathrm{d} \hat{n}}{\mathrm{d} t} \right) = \frac{\mathrm{i}}{2} \, \dot{\phi} \, \vec{\sigma} \cdot \vec{a}$$

où le vecteur \vec{a} est donné par

$$\vec{a} = (-\sin\theta\cos\theta\cos\phi, -\sin\theta\cos\theta\sin\phi, \sin^2\theta)$$

et l'opérateur K(t) vaut

$$K(t) = \frac{1}{2} \dot{\phi}(\vec{\sigma} \cdot \vec{a})$$

On en déduit A(t) pour t infinitésimal $(\dot{\phi}=\omega)$

$$A(t) = I - \frac{i\omega t}{2} \sin \theta \begin{pmatrix} \sin \theta & -\cos \theta \\ -\cos \theta & \sin \theta \end{pmatrix} + O(t^2)$$

A partir de cette expression on montre facilement que

$$\langle \varphi_1 | \dot{\varphi}_1 \rangle \Big|_{t=0} = 0$$

Chapitre 13

Exercices du chapitre 13

13.5.1 Pic de Gamow

1. Calculons l'énergie coulombienne pour $R=1\,\mathrm{fm}$

$$E_0 = \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right) \left(\frac{\hbar c}{R}\right) = \frac{1}{137} \times 200 \,\text{MeV} \simeq 1.5 \,\text{MeV}$$

La température au centre du Soleil est de l'ordre de $1.5 \times 10^7 \, \text{K}$, correspondant à une énergie cinétique E de $1.5 \, \text{keV}$ environ. On a donc bien $E \ll e^2/R$.

2. On définit la distance R_N comme la distance où le potentiel coulombien est égal à l'énergie cinétique : $e^2/R_N = E$. L'intégrale à évaluer pour l'effet tunnel est

$$I = \int_{R}^{R_N} \mathrm{d}r \, \left(\frac{e^2}{r} - E\right)^{1/2}$$

On effectue le changement de variables

$$u^{2} = \frac{e^{2}}{r} - E$$
 $dr = -\frac{2e^{2}udu}{(u^{2} + E)^{2}}$

Les limites d'intégration sont

$$u = 0 \text{ et } u^2 = \frac{e^2}{R} - E \simeq \frac{e^2}{R}$$

ce qui donne

$$I = 2e^2 \left[\frac{1}{2\sqrt{E}} \tan^{-1} \sqrt{\frac{e^2}{RE}} - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{R}{e^2}} \right] \simeq \frac{\pi e^2}{2\sqrt{E}}$$

La probabilité de l'effet tunnel est

$$\ln \mathsf{p}_T(E) = -\frac{\sqrt{2\mu} \ \pi e^2}{\hbar \sqrt{E}}$$

Définissant

$$E_B = \frac{2\mu\pi^2 e^4}{\hbar^2}$$

on met la probabilité de l'effet tunnel sous la forme

$$\mathsf{p}_T(E) \simeq \exp\left(-\sqrt{\frac{E_B}{E}}\right)$$

Numériquement, avec $\mu = 6m_p/5$

$$E_B = 2\pi^2 \alpha^2 \mu c^2 = 1.18 \,\text{MeV}$$

3. Le facteur $\sim 4\pi/k^2$ est un facteur géométrique qui doit apparaître dans la section efficace totale : cf. (12.52). Il donne un ordre de grandeur de la section efficace totale en l'absence d'autre information. Ici nous devons tenir compte en plus de l'effet tunnel : la barrière de potentiel doit être franchie, sinon la réaction n'a pas lieu. Un ordre de grandeur de la section efficace est obtenu en multipliant le facteur géométrique par la probabilité de l'effet tunnel

$$\sigma(E) \sim \frac{4\pi}{k^2} \, \mathsf{p}_T(E)$$

3. L'intégrale angulaire donne un facteur $4\pi v^2$ et la valeur moyenne de $v\sigma$ est donnée par

$$\langle v\sigma \rangle = 4\pi \left(\frac{\mu}{2\pi k_B T}\right)^{3/2} \int_0^\infty \mathrm{d}v \, v^3 \sigma(v) \exp\left(-\frac{\mu v^2}{2k_B T}\right)$$

On effectue le changement de variables $v \to E$

$$E = \frac{1}{2} \mu v^2 \qquad \qquad \sigma(E) = \frac{2\pi\hbar^2}{\mu E} \, \mathsf{p}_T(E) = \frac{2\pi\hbar^2}{\mu E} \, \exp\left(-\sqrt{\frac{E_B}{E}}\right)$$

ce qui donne

$$\langle v\sigma \rangle = \frac{16\pi^2\hbar^2}{\mu^3} \left(\frac{\mu}{2\pi k_B T}\right)^{3/2} \int_0^\infty dE \, e^{-E/(k_B T)} e^{-\sqrt{E_B/E}}$$

On doit étudier l'intégrale

$$J = \int_0^\infty dE \, e^{-E/(k_B T)} \, e^{-\sqrt{E_B/E}}$$

Définissons la fonction f(E) par $(\beta = 1/(k_B T))$

$$f(E) = \beta E - \sqrt{\frac{E_B}{E}}$$
 $f'(E) = \beta - \frac{\sqrt{E_B}}{2E^{3/2}}$

Le maximum de $\exp[-f(E)]$ est atteint pour $E=E_0$, où E_0 vérifie $f'(E_0)=0$

$$E_0 = \left[\frac{1}{2} k_B T \sqrt{E_B}\right]^{2/3}$$

et l'on trouve

$$f(E_0) = -\frac{1}{2} \left(\frac{2E_B}{k_B T}\right)^{1/3} \simeq -5.8$$

La largeur du pic de $\exp(-f(E))$ s'obtient en étudiant la dérivée seconde

$$f''(E_0) = \frac{3}{4}\sqrt{E_B} E_0^{-5/2} = \frac{3}{4} \left(\frac{1}{2}\right)^{-5/3} E_B^{-1/3} (k_B T)^{-5/3}$$

et la largeur du pic est

$$\Delta E \sim E_B^{1/6} (k_B T)^{5/6} = 4.5 \,\mathrm{keV}$$

13.5.2 Diffusion de neutrons de basse énergie par une molécule d'hydrogène

1. Soit r_1 la distance entre le noyau 1 et le détecteur

$$\vec{r}_1 = \vec{r} - \frac{1}{2}\vec{R}$$
 $r_1 \simeq r - \frac{1}{2}\vec{R} \cdot \hat{r}$

L'amplitude pour trouver l'onde au détecteur après une diffusion par le noyau 1 est proportionnelle à

$$\frac{1}{r_1} e^{ikr_1} \simeq \frac{1}{r} e^{ikr} \left(1 + \frac{\vec{R} \cdot \hat{r}}{2r} \right) e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{R}/2}$$

avec $\vec{k}' = k\hat{r}$. Il faut multiplier ce résultat par l'amplitude pour trouver l'onde plane incidente en \vec{r}_1 qui vaut $\exp(i\vec{k}\cdot\vec{R}/2)$ et par a_1 . L'amplitude de diffusion par le noyau 1 est finalement

$$\frac{a_1}{r} e^{\mathrm{i}kr} \left(1 + \frac{\vec{R} \cdot \hat{r}}{r} \right) \exp \left(\frac{\mathrm{i}}{2} (\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{R} \right) = \frac{a_1}{r} e^{\mathrm{i}kr} \left(1 + \frac{\vec{R} \cdot \hat{r}}{2r} \right) \exp \left(-\frac{\mathrm{i}}{2} \vec{q} \cdot \vec{R} \right)$$

En ajoutant les amplitudes provenant des noyaux 1 et 2, on obtient l'amplitude de diffusion a comme le coefficient de $(\exp ikr)/r$

$$a = a_1 + a_2 - \frac{i}{2} (a_1 - a_2) \vec{q} \cdot \vec{R}$$

Les termes en R/r sont négligeables car $r \to \infty$.

2. La distance entre les deux protons est voisine de 1 Å. Si $q = 10^{10} \, \mathrm{m}^{-1}$, l'énergie du neutron est

$$E = \frac{\hbar^2 q^2}{2m_n} = 2 \,\text{meV}$$

ce qui correspond à une température de 1 K. En négligeant le terme en $(\vec{q} \cdot \vec{R})$

$$\hat{a} = \frac{1}{4}(a_s + 3a_t)I + \frac{1}{4}(a_t - a_s)(\vec{\sigma}_n \cdot \vec{\sigma}_1) + \frac{1}{4}(a_s + 3a_t)I + \frac{1}{4}(a_t - a_s)(\vec{\sigma}_n \cdot \vec{\sigma}_2)$$

$$= \frac{1}{2}(a_s + 3a_t)I + \frac{1}{2}(a_t - a_s)(\vec{\sigma}_n \cdot \vec{\Sigma})$$

3. La masse réduite est $(m_p \simeq m_n = m)$

$$\mu_{H_2} = \frac{2m^2}{m + 2m} = \frac{2m}{3}$$

alors que la masse réduite neutron-proton est $\mu_p = m/2$. Le potentiel effectif est de la forme (12.41) avec une constante g donnée par

$$g = \frac{2\pi\hbar^2}{\mu} a$$

Pour une valeur identique de g on a donc des longueurs de diffusion dans le rapport

$$\frac{a_{H_2}}{a_n} = \frac{\mu_{H_2}}{\mu_n} = \frac{4}{3}$$

4. La section efficace totale s'obtient en calculant \hat{a}^2

$$\hat{a}^2 = \frac{1}{4}(a_s + 3a_t)^2 I + \frac{1}{2}(a_s + a_t)(a_t - a_s)(\vec{\sigma}_n \cdot \vec{\Sigma}) + \frac{1}{4}(a_t - a_s)^2(\vec{\sigma}_n \cdot \vec{\Sigma})^2$$

et, pour une diffusion de neutrons sur des molécules non polarisées

$$\sigma_{\rm tot} = 4\pi {\rm Tr}\,\hat{a}^2$$

Dans le parahydrogène la valeur moyenne de $\vec{\Sigma}$ est nulle et

$$\sigma_{\rm tot}^{\rm para} = \pi (a_s + 3a_t)^2$$

Pour l'orthohydrogène, on remarque que

$$\operatorname{Tr}(A \otimes B)^2 = \operatorname{Tr}(A^2 \otimes B^2) = \operatorname{Tr}A^2 \operatorname{Tr}B^2$$

Comme

$$\operatorname{Tr} \sigma_{ni} \sigma_{nj} \Sigma_i \Sigma_j \propto \delta_{ij}$$

on obtient

$$\operatorname{Tr} (\vec{\sigma}_n \cdot \vec{\Sigma})^2 = \operatorname{Tr} \left[\sigma_{nx}^2 \Sigma_x^2 + \sigma_{ny}^2 \Sigma_y^2 + \sigma_{nz}^2 \Sigma_z^2 \right]$$
$$= 2\operatorname{Tr} \left[\Sigma_x^2 + \Sigma_y^2 + \Sigma_z^2 \right] = 2\operatorname{Tr} \vec{\Sigma}^2 = 12$$

La section efficace non polarisée comprend un facteur 1/6 dû à la moyenne sur les spins initiaux (1/2 pour le neutron et 1/3 pour l'orthohydrogène) et

$$\sigma_{\text{tot}}^{\text{ortho}} = \frac{4\pi}{6} \left[\frac{1}{4} (a_s + 3a_t)^2 \times 6 + \frac{1}{4} (a_t - a_s)^2 \times 12 \right]$$
$$= \sigma_{\text{tot}}^{\text{para}} + 2\pi (a_t - a_s)^2$$

13.5.3 Propriétés analytiques de l'amplitude de diffusion neutron-proton

1. La fonction d'onde radiale est

$$r < R$$
 : $u(r) = A \sin k' R$ $r > R$: $u(r) = N e^{-\kappa r}$

La condition de continuité de la fonction d'onde à r=R donne

$$A\sin k'R = Ne^{-\kappa R}$$

et celle de la dérivée logarithmique

$$\cot \kappa R = -\frac{\kappa}{k'} \qquad \sin k' R = \frac{k'}{\sqrt{\kappa^2 + k'^2}} \qquad \cos k' R = -\frac{\kappa}{\sqrt{\kappa^2 + k'^2}}$$

soit

$$A = Ne^{-\kappa R} \frac{\sqrt{\kappa^2 + {k'}^2}}{k'}$$

La normalisation est donnée par les deux intégrales

$$J_{<} = A^{2} \int_{0}^{R} dr \sin^{2} k' r = \frac{N^{2} e^{-2\kappa R}}{2k'} \left[\kappa + R(k'^{2} + \kappa^{2}) \right]$$
$$J_{>} = N^{2} \int_{R}^{\infty} dr e^{-2\kappa r} = \frac{N^{2}}{2\kappa} e^{-2\kappa R}$$

et la somme $J_{<} + J_{>}$ vaut

$$J_{<} + J_{>} = \frac{N^{2} e^{-2\kappa R}}{2k'^{2} \kappa} (k'^{2} + \kappa^{2}) (1 + \kappa R)$$

d'où N^2

$$N^{2} = \frac{2\kappa k'^{2} e^{2\kappa R}}{(\kappa^{2} + k'^{2})(1 + \kappa R)}$$

2. La fonction g(-k,r) est linéairement indépendante de g(k,r) car elle se comporte à l'infini comme $\exp(-\mathrm{i}kr)$. La solution la plus générale de l'équation de Schrödinger est une combinaison linéaire de ces deux solutions, et comme u(k,r) doit de plus s'annuler à r=0 on a

$$u(k,r) = g(-k,r)g(k) - g(k,-r)g(-k)$$
 $g(k) = g(k,r = 0)$

Le comportement $r \to \infty$ de u(k,r) est alors

$$r \to \infty$$
 : $u(k,r) \propto e^{ikr} g(k) - e^{-ikr} g(-k)$

La comparaison avec (12.22) pour l = 0 montre alors que

$$S(k) = e^{2i\delta(k)} = \frac{g(k)}{g(-k)}$$

3. Prolongeons g(k,r) à des valeurs complexes de k:g(k,r) et $g(-k^*,r)$ vérifient les équations différentielles

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} g^*(k,r) + \left[k^{*2} - 2mV(r)\right] g^*(k,r) = 0$$

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} g(-k^*,r) + \left[k^{*2} - 2mV(r)\right] g(-k^*,r) = 0$$

Écrivant $k = k_1 + ik_2$, nous avons les comportements asymptotiques suivants

$$g^*(k,r) \propto (e^{ikr})^* = e^{-ik_1r} e^{-k_2r}$$

 $g(-k^*,r) \propto e^{-ik^*r} = e^{-ik_1r} e^{-k_2r}$

Les deux fonctions vérifient la même équation différentielle et ont même comportement à l'infini, et elle sont donc égales. On en déduit $g^*(k^*) = g(-k)$, d'où

$$S^*(k^*) = \frac{g^*(k^*)}{g^*(-k^*)} = \frac{g(-k)}{g(k)} = \frac{1}{S(k)}$$

et

$$S(-k) = \frac{g(-k)}{g(k)} = \frac{1}{S(k)} = S^*(k^*)$$

4. Le comportement de la fonction g(k,r) est donné pour r < R et r > R par

$$r < R$$
 $g(k,r) = Ae^{-ik'r} + Ce^{ik'r}$
 $r > R$ $g(k,r) = e^{-ikr}$

Les conditions de continuité de g(k,r) et de sa dérivée donnent

$$Ae^{-ik'R} + Ce^{ik'R} = e^{-ikR}$$
$$k' \left(Ae^{-ik'R} - Ce^{ik'R} \right) = ke^{-ikR}$$

avec $k' = \sqrt{M(V_0 + E)}$. On en déduit

$$g(k) = A + C = e^{-ikR} \left(\cos k'R + i\frac{k}{k'} \sin k'R \right)$$

On constate que g(k) est bien une fonction entière de k. Le seul point délicat pourrait être le point k' = 0 en raison de la racine carré dans la définition de k', mais $\cos k'R$ et $(1/k')\sin k'R$ sont des fonctions analytiques de k'^2 .

5. Supposons que S(k) possède un pôle sur l'axe imaginaire positif à $k = i\kappa$, $\kappa > 0$. On a alors $g(-k) = g(-i\kappa) = 0$ et le comportement asymptotique de u(k,r) est

$$r \to \infty$$
 : $u(k,r) \sim e^{ikr} g(k) + e^{-ikr} g(-k)$
 $\sim e^{-\kappa r} g(k) + e^{\kappa r} g(-k)$

u(k,r) explose si $r\to\infty$, sauf si g(-k)=0, et alors u(k,r) est la fonction d'onde d'un état lié

$$u(k,r) = g(k)g(-k,r)$$

qui s'annule automatiquement à r=0. Les pôles de S(k) sur l'axe imaginaire tels que $0 < \operatorname{Im} k < \mu/2$ donnent donc l'énergie des états liés. Supposons maintenant un pôle de S(k) à $k=h-\mathrm{i}b$. En raison des propriétés démontrées à la question $\mathbf{3}$, S(k) a aussi un pôle à $k=-h-\mathrm{i}b$. Si b<0, $g(h+\mathrm{i}b,r)$ et $g(-h+\mathrm{i}b,r)$ sont des fonctions de carré sommable (elles se comportent comme $\exp(-|b|r)$ à l'infini) et comme elles sont solutions de l'équation de Schrödinger, elles sont orthogonales

$$\int_{0}^{\infty} dr \, g(h+ib,r)g(-h+ib,r) = \int_{0}^{\infty} dr \, |g(h+ib,r)|^{2} = 0$$

et nous avons une contradiction si b<0. Si $h\neq 0$, la seule possibilité est d'avoir des pôles tels que ${\rm Im}\, k<0$.

6. Le choix de S(k)

$$S(k) = \frac{(k-h-\mathrm{i}b)(k+h-\mathrm{i}b)}{(k-h+\mathrm{i}b)(k+h+\mathrm{i}b)} \simeq \frac{k-h-\mathrm{i}b}{k-h+\mathrm{i}b} \text{ pour } k \sim h$$

obéit aux propriétés de la question 3. La relation entre $\cot \delta$ et S est

$$\cot \delta = \mathrm{i}\,\frac{\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\delta} + 1}{\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\delta} - 1} = \mathrm{i}\,\frac{S+1}{S_1} = \frac{h-k}{b}$$

soit

$$\delta(k) = \tan^{-1} \frac{-b}{k - h}$$

Le déphasage δ croît de $\delta(k) = \tan^{-1} b/h$ pour k = 0 à π pour $k \to \infty$, en passant par $\pi/2$ pour k = h. La section efficace totale vaut

$$\sigma_{\text{tot}} = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta = \frac{4\pi}{k^2 (1 + \cot^2 \delta)} = \frac{4\pi b^2}{k^2 [(k-h)^2 + b^2]}$$

Posons

$$k^{2} = \frac{2mE}{\hbar^{2}} \qquad h^{2} = \frac{2mE_{0}}{\hbar^{2}}$$
$$k - h = \frac{k^{2} - h^{2}}{k + h} \simeq \frac{k^{2} - h^{2}}{2h} = \frac{m(E^{2} - E_{0}^{2})}{\hbar\sqrt{2mE_{0}}}$$

On trouve

$$\sigma(E) = \frac{2\pi\hbar^2}{ME} \frac{\hbar^2\Gamma^2/4}{(E - E_0)^2 + \hbar^2\Gamma^2/4}$$

à condition de poser

$$\frac{\hbar^2 \Gamma^2}{4} = \frac{2E_0 \hbar^2 b^2}{m}$$

7. Partons de l'équation de Schrödinger radiale

$$u'' - 2mVu + k^2u = 0$$

et différentions cette équation par rapport à k

$$\frac{\partial u''}{\partial k} - 2mV \frac{\partial u}{\partial k} + k^2 \frac{\partial u}{\partial k} = -2uk$$

Multiplions la première équation par $\partial u/\partial k$ et la seconde par u et retranchons

$$u''\frac{\partial u}{\partial k} - u\frac{\partial u''}{\partial k} = 2ku^2$$

soit

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(u' \frac{\partial u}{\partial k} - u \frac{\partial u'}{\partial k} \right) = 2ku^2$$

et en intégrant sur r

$$u'\frac{\partial u}{\partial k} - u\frac{\partial u'}{\partial k} = 2k \int_0^r u^2(r')dr'$$

Pour $r \to 0$

$$\left. \frac{\partial u}{\partial k} \right|_{r=0} = \left[A'(k) \sin k' r + A(k) r \frac{\partial k'}{\partial k} \cos k' r \right]_{r=0} = 0$$

En outre

$$\frac{\partial u}{\partial k} = g(k, r)g'(-k) + O\left(e^{-\kappa r}\right)$$

et pour un état lié

$$u(k,r) = g(-k,r)g(k) \Longrightarrow \text{ si } r \to \infty \ u'(k,r) = \mathrm{i} k u(k,r)$$

Par conséquent, pour $r \to \infty$

$$u'\frac{\partial u}{\partial k} - u\frac{\partial u'}{\partial k} \to 2 \mathrm{i} k g(\mathrm{i}\kappa)[g'(-\mathrm{i}\kappa)]$$

Au voisinage du pôle $k = i\kappa$, g(-k) est proportionnel à $(k - i\kappa)$

$$q(-k) \simeq D(k - i\kappa)$$

et donc g'(-k) = -D. Posons $g(i\kappa) = F$, on obtient

$$-2ikDF = 2k \int_0^\infty u^2(k,r) dr$$

Le comportement $r \to \infty$ de u(k,r) est

$$r \to \infty$$
: $u(k,r) \simeq q(i\kappa)e^{-\kappa r} = Fe^{-\kappa r}$

Soit $\overline{u}(k,r) = Gu(k,r)$ la fonction d'onde normalisée de l'état lié, qui se comporte à l'infini comme $N \exp(-\kappa r)$, où N est la constante définie à la question $\mathbf{1}, N = FG$. Nous avons d'une part

$$\int_0^\infty \mathrm{d}r \, u^2(k,r) = -\mathrm{i}DF$$

et d'autre part

$$1 = \int_0^\infty dr \, \overline{u}^2(k,r) = G^2 \int_0^\infty dr \, u^2(k,r) = -iFG^2 = -i(FG)^2 \frac{D}{F} = -iN^2 \frac{D}{F}$$

Au voisinage du pôle à $k=\mathrm{i}\kappa$

$$S(k) \simeq \frac{F}{D(k-\mathrm{i}\kappa)} = \frac{-\mathrm{i}N^2}{k-\mathrm{i}\kappa}$$

8. Exprimons $k \cot \delta$ en fonction de g(k)

$$k \cot \delta(k) = \frac{ik[g(k) + g(-k)]}{g(k) - g(-k)]}$$

Cette fonction est analytique pour $k \sim 0$, tend vers une constante pour $k \to 0$ et c'est une fonction paire de k. On peut donc écrire son développement de Taylor

$$k \cot \delta(k) = -\frac{1}{a} + \frac{1}{2} r_0 k^2 + O(k^4)$$

Compte tenu de

$$S(k) = \frac{k \cot \delta(k) + ik}{k \cot \delta(k) - ik}$$

l'existence d'un pôle de S(k) à $k_0 = i\kappa$ entraı̂ne

soit

$$r_0 = \frac{2}{\kappa} \left(1 - \frac{1}{\kappa a} \right)$$

Calculons le résidu au pôle

$$k \cot \delta - ik = k_0 \cot \delta_0 + (k - k_0) \frac{\partial}{\partial k} k \cot \delta \Big|_{k=k_0} - ik + ik_0 - ik_0$$
$$= -i(k - k_0) + (k - k_0)i\kappa r_0 = -i(k - k_0)(1 - \kappa r_0)$$

soit

$$S(k) = \frac{-2\kappa}{-i(k - k_0)(1 - \kappa r_0)} \implies N^2 = \frac{2\kappa}{1 - \kappa r_0}$$

13.5.5 Optique neutronique

1. La distance entre le noyau et le point d'observation est $r = \sqrt{s^2 + z^2}$. L'amplitude de probabilité totale au point d'observation s'obtient en sommant de façon cohérente les amplitudes de chaque noyau

$$\varphi_d = -a\rho\delta \int_0^\infty \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r} 2\pi s \mathrm{d}s = -2\pi a\rho\delta \int_z^\infty \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r} r \mathrm{d}r$$

car rdr = sds. La borne supérieure de l'intégale est une fonction oscillante, mais cette oscillation n'est pas physique et on obtient l'amplitude totale

$$\varphi(z) = \left(1 - 2\mathrm{i}\pi \, \frac{a\rho \, \delta}{k}\right) \mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}$$

2. Si les neutrons traversent un milieu d'indice n et d'épaisseur δ avec k'=nk

$$\begin{split} \varphi(z) &= & \mathrm{e}^{\mathrm{i}k(z-\delta)} \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}k'\delta} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}kz} \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}(k'-k)\delta)} \\ &= & \mathrm{e}^{\mathrm{i}kz} \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}(n-1)k\delta} \simeq \mathrm{e}^{\mathrm{i}kz} \, \left[1 + \mathrm{i}(n-1)k\delta\right] \end{split}$$

et par identification avec le résultat de la question ${\bf 1}$

$$n = 1 - \frac{2\pi a\rho}{k^2} = 1 - \frac{a\rho\lambda^2}{2\pi}$$

Comme l'indice de réfraction est très proche de un, l'angle de réflexion critique est proche de $\pi/2$

$$\sin(\pi/2 - \theta_c) = \cos\theta_c \simeq 1 - \frac{1}{2}\theta_c^2 = n$$

soit

$$\frac{1}{2}\theta_c^2 = 1 - n = \frac{a\rho\lambda^2}{2\pi} \qquad \theta_c = \lambda \left(\frac{\rho a}{\pi}\right)^{1/2}$$

3. La matrice de diffusion neutron-proton dans l'espace des spins est

$$\hat{f} = -\frac{1}{4}(a_s + 3a_t)I - \frac{1}{4}(a_t - a_s)(\vec{\sigma}_n \cdot \vec{\sigma}_p) = -a_s \mathcal{P}_s - a_t \mathcal{P}_t$$

Comme $|++\rangle$ est un état triplet

$$f_c = \langle + + |\hat{f}| + + \rangle = -a_t$$

Si $|\chi_s\rangle$ et $\chi_t\rangle$ sont les états singulet et triplet avec m=0, la relation inverse de (10.125) et (10.126) est

$$|+-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\chi_t\rangle + |\chi_s\rangle)$$
$$|-+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\chi_t\rangle - |\chi_s\rangle)$$

et

$$f_a = \langle + - |\hat{f}| + - \rangle = -\frac{1}{2}(a_t + a_s)$$

 $f_b = \langle + - |\hat{f}| - + \rangle = -\frac{1}{2}(a_t - a_s)$

Les poids 3/4 et 1/4 sont déterminés par la dégénérescence des états triplet (3) et singulet (1). La longueur de diffusion cohérente

 $a_{\text{eff}} = \frac{3}{4} a_t + \frac{1}{4} a_s$

vaut -1.9 fm, et l'indice de réfraction est plus grand que un : il ne peut pas y avoir de réflexion totale.

4. Prenant le carré de

$$\vec{I} = \vec{J} + \frac{\hbar}{2}\,\vec{\sigma}$$

soit

$$\vec{I}^2 = \vec{J}^2 + \frac{\hbar^2}{4} \vec{\sigma}^2 + \hbar \vec{J} \cdot \vec{\sigma}$$

on obtient

$$\begin{array}{rcl} \frac{1}{\hbar} \, \vec{J} \cdot \vec{\sigma} & = & j \quad \mathrm{si} \quad I = j + \frac{1}{2} \\ \frac{1}{\hbar} \, \vec{J} \cdot \vec{\sigma} & = & -(j+1) \quad \mathrm{si} \quad I = j - \frac{1}{2} \end{array}$$

Les longueurs de diffusion sont donc données par

$$a_{+} = a + bj$$
 $a_{-} = a - b(j+1)$

ou inversement

$$a = \frac{1}{2j+1}[(j+1)a_+ + ja_-]$$
 $b = \frac{1}{2j+1}(a_+ - a_-)$

5. L'amplitude a correspond à une diffusion sans renversement du spin, et donc à une diffusion cohérente, et l'amplitude b à une diffusion avec renversement du spin, et donc incohérente. Un autre manière de trouver le résultat est de remarquer que la probabilité de diffusion dans l'état (j+1/2) est (j+1)/(2j+1) et j/(2j+1) dans l'état (j-1/2). En utilisant les résultats de l'exercice 1.6.8

$$\sigma_{\text{coh}} = \frac{4\pi}{(2j+1)^2} \left[(j+1)a_+ + ja_- \right]^2$$

$$\sigma_{\text{inc}} = 4\pi \frac{j(j+1)}{(2j+1)^2} (a_+ - a_-)^2$$

13.0.1 Section efficace d'absorption des neutrinos

1. L'élément de matrice $\langle \varphi_f | \varphi_i \rangle$ est donnné par

$$\langle \varphi_f | \varphi_i \rangle = \frac{1}{\mathcal{V}^2} \int d^3 r \, e^{i(\vec{p}_1 + \vec{p}_2 + \vec{p}_3) \cdot \vec{r}/\hbar} = \frac{1}{\mathcal{V}} \delta_{\vec{p}_1 + \vec{p}_2 + \vec{p}_3, 0}$$

où les $\vec{p_i}$ représentent les impulsions des trois particules finales. Le δ est un δ de Kronecker car nous avons utilisé des ondes planes dans une boîte. Prenant le carré

$$|\langle \varphi_f | \varphi_i \rangle|^2 = \frac{1}{V^2} \, \delta_{\vec{p}_1 + \vec{p}_2 + \vec{p}_3, 0}$$

Montrons que l'énergie cinétique de recul K du proton est négligeable. La relation

$$\vec{P} + \vec{a} + \vec{p} = 0$$

montre que les trois impulsions sont a priori du même ordre de grandeur, $\sim p$. Mais l'énergie cinétique de l'électron k

$$k \sim \frac{p^2}{2m_e} \gg K \sim \frac{p^2}{2m_p}$$

La densité d'états finaux est

$$\mathcal{D}(E) = \mathcal{V}^2 \int \frac{\mathrm{d}^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \frac{\mathrm{d}^3 q}{(2\pi\hbar)^3} \,\delta(K + E + cq - E_0)$$

Intégrons sur les angles

$$\mathcal{V}\frac{\mathrm{d}^{3}p}{(2\pi\hbar)^{3}} \rightarrow \frac{4\pi\mathcal{V}}{(2\pi\hbar)^{3}} p^{2}\mathrm{d}p = \frac{4\pi\mathcal{V}}{(2\pi\hbar)^{3}} \frac{pE\mathrm{d}E}{c^{2}}$$

$$\mathcal{V}\frac{\mathrm{d}^{3}q}{(2\pi\hbar)^{3}} \rightarrow \frac{4\pi\mathcal{V}}{(2\pi\hbar)^{3}} q^{2}\mathrm{d}q$$

La conservation de l'énergie donne $q = (E - E_0)/c$ et en intégrant la densité de niveaux sur q

$$\mathcal{D}(E_0) = \frac{\mathcal{V}^2}{(2\pi^2)^2 \hbar^6} \frac{pE}{c^2} \frac{(E - E_0)^2}{c^3}$$

Ceci donne pour le taux de désintégration par unité d'énergie E

$$\frac{\mathrm{d}\Gamma}{\mathrm{d}E} = 2\pi \frac{G_F^2 \langle |\mathcal{M}_{fi}|^2 \rangle}{4\pi^4 \hbar^7 c^5} pE(E_0 - E)^2$$

et en intégrant sur E en négligeant la masse de l'électron on obtient l'expression de la vie moyenne

$$\frac{1}{\tau} = \Gamma \sim \frac{G_F^2 E_0^5}{60\pi^3 \hbar (\hbar c)^6}$$

De l'expression

$$\frac{G_F^2}{(\hbar c)^6} = \frac{60\pi^3\hbar\Gamma}{E_0^5}$$

on déduit que $G_F^2/(\hbar c)^6$ a les dimensions d'une énergie à la puissance -4 et s'exprime par exemple en MeV $^{-4}$. Pour l'estimation numérique, on convertit la vie moyenne en MeV

$$\frac{\hbar}{\tau} = \hbar\Gamma = 0.73 \times 10^{-24} \,\mathrm{MeV}$$

ce qui donne

$$\frac{G_F}{(\hbar c)^3} = 2.3 \times 10^{-11} \,\mathrm{MeV}^{-2} = 2.3 \times 10^{-5} \,\mathrm{GeV}^{-2}$$

en accord qualitatif avec la valeur exacte.

2. L'élément de matrice de la transition est

$$\langle \varphi_f | \varphi_i \rangle = \frac{1}{(\mathcal{V})^2} \int d^3 r e^{i(\vec{p}_1 + \vec{p}_2 - \vec{p}'_1 - \vec{p}'_2) \cdot \vec{r}/\hbar} = \frac{1}{\mathcal{V}} \, \delta_{\vec{p}_1 + \vec{p}_2, \vec{p}'_1 + \vec{p}'_2}$$

où \vec{p} et \vec{p}' représentent les impulsions des particules initiales et finales. La section efficace différentielle est

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{1}{\mathcal{F}} \frac{2\pi}{\hbar} \langle |\mathcal{M}_{fi}|^2 \rangle \langle \varphi_f | \varphi_i \rangle |^2 \mathcal{D}(E)$$

La densité d'états finaux est pour un électron relativiste d'énergie E émis dans la direction Ω est

$$\mathcal{D}(E) = \frac{\mathcal{V}}{(2\pi\hbar)^3} \frac{E^2}{c^3}$$

tandis que le flux est donné par $\mathcal{F}=c/\mathcal{V}$, puisque les neutrinos ont la vitesse de la lumière et que leur densité est $1/\mathcal{V}$. On trouve pour la section efficace

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{G_F^2}{4\pi^2} \, \frac{\langle |\mathcal{M}_{fi}|^2 \rangle}{(\hbar c)^4} E^2$$

et en intégrant sur les angles on obtient la section efficace totale d'absorption des neutrinos

$$\sigma_{\rm tot} = \frac{G_F^2}{\pi} \, \frac{\langle |\mathcal{M}_{fi}|^2 \rangle}{(\hbar c)^4} E^2$$

En ordre de grandeur, dans un système d'unités où $\hbar=c=1,$ 1 fm = 1/(200 Mev), $\sigma\sim G_F^2E^2,$ $G_F=10^{-5}\,{\rm GeV}^{-2}.$ Pour $E=10\,{\rm MeV},$

$$\sigma \sim 10^{-20} \,\mathrm{MeV}^{-2} = 4 \times 10^{-16} \,\mathrm{fm}^2 = 4 \times 10^{-46} \,\mathrm{m}^2$$

Prenant pour densité celle du Fer, $n \simeq 10^{29} \, \mathrm{atomes/m}^{-3}$, on trouve pour le libre parcous moyen ℓ

$$\ell = \frac{1}{30n\sigma} \sim 10^{15} \, \mathrm{m}$$

en tenant compte qu'un atome de fer contient 30 neutrons. Le libre parcours moyen est donc environ 1/10 d'année lumière : détecter un neutrino est un exploit!

3. La section efficcae inélastique maximale est

$$\sigma_{\rm in,max} = \frac{\pi}{k^2} \simeq \frac{\pi}{E^2}$$

On doit donc avoir

$$E \lesssim \frac{1}{\sqrt{G_F}} \simeq 300 {\rm GeV}$$

La théorie de Fermi est sûrement limitée à des énergies inférieures à 300 GeV.

Chapitre 14

Exercices du chapitre 14

14.5.1 Particule Ω^- et couleur

Si l'on forme un spin 3/2 à partir de trois spins 1/2, le vecteur d'état est symétrique par rapport à l'échange de deux spins : par exemple l'état j = 3/2, $j_z = 3/2$ est

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

Si la fonction d'onde spatiale ne s'annule pas, elle est nécessairement symétrique. En effet, si elle était antisymétrique, par exemple dans l'échange des particules 1 et 2

$$\varphi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3) = -\varphi(\vec{r}_2, \vec{r}_1, \vec{r}_3)$$

elle s'anulerait au point $\vec{r_1} = \vec{r_2}$. Le vecteur d'état espace \otimes spin d'un système de trois quarks identiques doit être antisymétrique, et ceci est impossible si les trois quarks sont identiques. En fait les quarks possèdent un nombre quantique supplémentaire, la couleur, et les trois quarks du Ω^- sont de couleurs différentes, la fonction d'onde de couleur étant antisymétrique.

14.5.2 Parité du méson π

1. Le système méson π^- -deutéron est analogue à un atome d'hydrogène, mis à part la masse réduite qui est différente

$$\mu = \frac{m_D m_\pi}{m_D + m_\pi} = 129 \,\text{MeV/c}^2$$

soit pour les niveaux d'énergie

$$E_n = -\frac{\mu}{m_e} \frac{R_\infty}{n^2} = -253 \frac{R_\infty}{n^2} = -\frac{3.42}{n^2} \text{ keV}$$

Les transitions se placent dans le domaine des rayons X, dont l'énergie varie entre ~ 0.1 et $\sim 100~keV$.

2. Le moment angulaire orbital étant nul, le moment angulaire total est celui du deutéron, j=1. Les états finaux possibles de moment angulaire j=1 sont 3S_1 , 3P_1 , 1P_1 et 3D_1 , mais seul l'état 3P_1 est antisymétrique (espace+spin) dans l'échange des deux neutrons finaux. La parité de l'état final est -1 (moment angulaire orbital $L_{\rm fin}=-1$) et celle de l'état initial est

$$\eta_{\pi}(-1)^{L_{\text{init}}} = \eta_{\pi}$$

L'égalité des parités initiale et finale implique $\eta_{\pi} = -1$.

14.5.4 Désintégration du positronium

1. Comme la masse réduite est $m_e/2$, les niveaux d'énergie sont de la forme

$$E_n = -\frac{1}{4} \frac{m_e^2 e^4}{\hbar^2} \frac{1}{n^2}$$

- **2.** La composition des deux spins 1/2 donne soit j=1 (état triplet), soit j=0 (état singulet).
- $\bf 3.$ Comme la projection suivant z du moment angulaire orbital est nulle, la conservation du moment angulaire suivant cette direction s'écrit

$$m = m_1 + m_2$$

où m est la projection sur Oz du spin du positronium et m_1 et m_2 celles des deux photons. On peut envisager a priori

- deux photons droits : $m_1 = 1$ et $m_2 = -1$, $m_1 + m_2 = 0$
- deux photons gauches : $m_1 = -1$ et $m_2 = 1$, $m_1 + m_2 = 0$
- un photon gauche et un photon droit : $m_1 + m_2 = \pm 2$

Cette dernière éventualité est exclue car m = -1, 0 ou +1.

4. Dans une rotation de π autour de Oy, les deux photons sont échangés. Comme il s'agit de deux bosons, le vecteur d'état global ne doit pas changer de signe dans cet échange. Avec $Y = \exp(-i\pi J_y)$

$$Y|jm\rangle = (-1)^{j-m}|j, -m\rangle$$

d'après (10.102). L'état initial change de signe si j=1, car m=0, et ne change pas de signe si j=0. Seul l'état singulet de spin j=0 peut se désintégrer en deux photons. De façon générale, une particule de spin 1 ne peut pas se désintégrer en deux photons.

5. La parité de l'état fondamental du positronium est

$$\Pi = \eta_{e^+} \eta_{e^-} (-1)^l = \eta_{e^+} \eta_{e^-}$$

où l=0 est le moment angulaire orbital. Dans une réflexion par rappport au plan xOz, le vecteur d'état initial change de signe car l'opérateur \mathcal{Y} qui effectue cette réflexion est $\mathcal{Y}=\Pi \exp(-\mathrm{i}\pi J_z)$. Pour les photons, d'après (10.104) et compte tenu de la parité impaire $\eta_{\gamma}=-1$ du photon

$$\mathcal{Y}|D\rangle = -|G\rangle$$
 $\mathcal{Y}|G\rangle = -|D\rangle$

Ceci montre que $|\Phi_{+}\rangle$ ne change pas de signe, tandis que $|\Phi_{-}\rangle$ change de signe. C'est donc l'état intriqué $|\Phi_{-}\rangle$ de deux photons qui est produit dans la désintégration.

14.5.7 Hiérarchie BBGKY et approximation de Hartree-Fock

1. Afin de simplifier les notations, nous utilisons un système d'unités où $\hbar=1.$ Comme l'opérateur nombre de particules est

$$\mathsf{N} = \int \mathrm{d}^z \, \psi^{\dagger}(\vec{z}) \psi(\vec{z})$$

nous avons, en intégrant sur le volume $\mathcal V$

$$\int_{\mathcal{V}} d^3 z \, \rho^{(1)}(\vec{z}, \vec{z}) = \langle \Phi_N | \mathsf{N} | \Phi_N \rangle = N$$

car $|\Phi_N\rangle$ est un état à N particules. En insérant une relation de fermeture, nous obtenons l'expression de $\rho^{(1)}(\vec{x}, \vec{y})$ en terme de fonctions d'onde

$$\rho^{(1)}(\vec{x}, \vec{y}) = \int d^3x_2 \cdots d^3x_N \langle \Phi_N | \psi^{\dagger}(\vec{y}) | \vec{x}_2, \cdots, \vec{x}_N \rangle \langle \vec{x}_2, \cdots, \vec{x}_N | \psi(\vec{x}) | \Phi_N \rangle$$
$$= N \int d^3x_2 \cdots d^3x_N \, \Phi_N^*(\vec{y}, \vec{x}_2, \cdots, \vec{x}_N) \Phi_N(\vec{x}, \vec{x}_2, \cdots, \vec{x}_N)$$

où nous avons utilisé (14.60) et (14.61). Si $|\Phi_N\rangle$ est un état de N fermions indépendants, $|\Phi_N\rangle=|n_1,\cdots,n_N\rangle$

$$\langle \Phi_N | \psi^{\dagger}(\vec{y}) \psi(\vec{x}) | \Phi_N \rangle = \sum_{i,j} u_j^*(\vec{y}) u_i(\vec{x}) \langle \Phi_N | c_j^{\dagger} c_i | \Phi_N \rangle = \sum_{i=1}^N u_i^*(\vec{y}) u_i(\vec{x})$$

car $c_i^{\dagger}c_j \rightarrow \delta_{ij}$. En utilisant les équations d'évolution des opérateurs

$$i\partial_t \psi(\vec{x}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_x^2 + U(\vec{x}) \right] \psi(\vec{x}, t) = \mathcal{H}_x \psi(\vec{x}, t)$$

$$i\partial_t \psi^{\dagger}(\vec{y}, t) = -\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_y^2 + U(\vec{y}) \right] \psi^{\dagger}(\vec{y}, t) = -\mathcal{H}_x \psi^{\dagger}(\vec{y}, t)$$

on obtient

$$i\partial_t \rho^{(1)}(\vec{x}, \vec{y}; t) = \mathcal{H}_x \rho^{(1)}(\vec{x}, \vec{y}; t) - \mathcal{H}_y \rho^{(1)}(\vec{x}, \vec{y}; t)$$

ou formellement

$$i\partial_t \rho^{(1)}(\vec{x}, \vec{y}; t) = [\mathcal{H}, \rho^{(1)}]$$

2. L'antisymétrie de $\rho^{(2)}$ vient de l'anticommutation des ψ . Calculons Tr₂ $\rho^{(2)}$

$$\operatorname{Tr}_{2} \rho^{(2)} = \int d^{3}z \langle \Phi_{N} | \psi^{\dagger}(\vec{y}_{1}) \psi^{\dagger}(\vec{z}) \psi(\vec{z}) \psi(\vec{x}_{1}) | \Phi_{N} \rangle$$
$$= \langle \Phi_{N} | \psi^{\dagger}(\vec{y}_{1}) \mathsf{N} \psi(\vec{x}_{1}) | \Phi_{N} \rangle = (N-1) \rho^{(1)}(\vec{x}_{1}, \vec{y}_{1})$$

car $\psi(\vec{x}_1)|\Phi_N\rangle$ est un état à (N-1) particules. En répétant le calcul de 1., nous exprimons $\rho^{(2)}$ en terme de fonction d'onde

$$\rho^{(2)}(\vec{x}, \vec{y}; \vec{x}, \vec{y}) = N(N-1) \int d^3x_3 \cdots d^3x_N \, \Phi_N^*(\vec{x}, \vec{y}, \vec{x}_3, \cdots, \vec{x}_N) \Phi_N(\vec{x}, \vec{y}, \vec{x}_3, \cdots, \vec{x}_N)$$

 $\rho^{(2)}(\vec{x}, \vec{y}; \vec{x}, \vec{y})$ est la densité à deux particules; c'est la fonction qui décrit les corrrélations de densité : elle est proportionnelle à la probabilité jointe de trouver un fermion en \vec{x} et un autre en \vec{y} . Dans le cas de fermions indépendants

$$\rho^{(2)}(\vec{x}_1, \vec{x}_2; \vec{y}_1, \vec{y}_2) = \sum_{ijkl} u_i^*(\vec{y}_1) u_j^*(\vec{y}_2) u_k(\vec{x}_1) u_l(\vec{x}_2) \langle \Phi_N | c_i^{\dagger} c_j^{\dagger} c_k c_l | \Phi_N \rangle$$

mais entre états de la forme $|n_1, \dots, n_N\rangle$ (voir (14.83))

$$c_i^{\dagger} c_j^{\dagger} c_k c_l \rightarrow \delta_{il} \delta_{jk} - \delta_{ik} \delta_{kl}$$

et

$$\rho^{(2)}(\vec{x}_1, \vec{x}_2; \vec{y}_1, \vec{y}_2) = \sum_{ij} \left[u_i^*(\vec{y}_1) u_j^*(\vec{y}_2) u_i(\vec{x}_1) u_j(\vec{x}_2) - u_i^*(\vec{y}_1) u_j^*(\vec{y}_2) u_i(\vec{x}_2) u_j(\vec{x}_1) \right]$$

$$= \rho^{(1)}(\vec{x}_1, \vec{y}_1) \rho^{(1)}(\vec{x}_2, \vec{y}_2) - \rho^{(1)}(\vec{x}_2, \vec{y}_1) \rho^{(1)}(\vec{x}_1, \vec{y}_2)$$

3. Nous pouvons écrire la dépendance en t de $\rho^{(1)}$ sous la forme

$$\rho^{(1)}(\vec{x}, \vec{y}; t) = \langle \Phi_N | \psi^{\dagger}(\vec{y}, t) \psi(\vec{x}, t) | \Phi_N \rangle$$

où $\psi(\vec{x},t)$ est l'opérateur de champ dans le point de vue de Heisenberg, qui vérifie

$$i\partial_t \psi = [\psi, H]$$

Nous avons done

$$i\partial_t \rho^{(1)} = \langle \Phi_N | (i\partial_t \psi^{\dagger}(\vec{y})) \psi(\vec{x}, t) | \Phi_N \rangle + \langle \Phi_N | \psi^{\dagger}(\vec{y}, t) (i\partial_t \psi(\vec{x}, t)) | \Phi_N \rangle$$

Mais compte tenu de (14.70) et (14.71)

$$i\partial_t \psi(\vec{x}, t) = \left[-\frac{1}{2m} \nabla_x^2 + U(\vec{x}) \right] \psi(\vec{x}, t) + \int d^3 z \, \psi^{\dagger}(\vec{z}) W(\vec{z}, \vec{x}) \psi(\vec{z}) \psi(\vec{x})$$

on voit apparaître dans l'équation d'évolution de $\rho^{(1)}$ un terme

$$\langle \Phi_N | \psi^{\dagger}(\vec{y}_1) \int d^3z \, \psi^{\dagger}(\vec{z}) W(\vec{z}, \vec{x}) \psi(\vec{z}) \psi(\vec{x}_1) | \Phi_N \rangle = \int d^3z \, W(\vec{z}, \vec{x}_1) \rho^{(2)}(\vec{x}_1, \vec{z}; \vec{y}_1, \vec{z})$$

Ajoutant la contribution venant de $i\partial_t \psi^{\dagger}$ on obtient pour la contribution de \mathcal{W} à l'évolution

$$i\hbar \partial_t^{\mathcal{W}} \rho^{(1)} = \int d^3z \left[W(\vec{z}, \vec{x}_1) - W(\vec{z}, \vec{y}_1) \right] \rho^{(2)}(\vec{x}_1, \vec{z}; \vec{y}_1, \vec{z})$$

Par définition, l'élément de matrice $W_{ij;kl}$ du potentiel est donné par

$$W_{ij;kl} = \int d^3x_1 d^3x_2 d^3y_1 d^3y_2 \langle \vec{y}_1 | u_i \rangle \langle \vec{y}_2 | u_j \rangle \langle \vec{y}_1 \vec{y}_2 | \mathcal{W} | \vec{x}_1 \vec{x}_2 \rangle \langle \vec{x}_1 | u_k \rangle \langle \vec{x}_2 | u_l l \rangle$$

Mais par ailleurs

$$W_{ij;kl} = \int d^3x_1 d^3x_2 u_i^*(\vec{x}_1) u_j(\vec{x}_2) W(\vec{x}_1, \vec{x}_2) u_k(\vec{x}_1) u_l(\vec{x}_2)$$

ce qui implique

$$\langle \vec{y}_1 \vec{y}_2 | \mathcal{W} | \vec{x}_1 \vec{x}_2 \rangle = W(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \delta^{(3)}(\vec{x}_1 - \vec{y}_1) \delta^{(3)}(\vec{x}_2 - \vec{y}_2)$$

Ceci nous permet d'écrire

$$\operatorname{Tr}_{2}[\mathcal{W}\rho^{(2)}] = \int d^{3}z \, d^{3}z_{1} \, d^{3}z_{2} \, \langle \vec{x}_{1}, \vec{z} | \mathcal{W} | \vec{z}_{1}, \vec{z}_{2} \rangle \langle \vec{z}_{1}, \vec{z}_{2} | \rho^{(2)} | \vec{x}_{1}, \vec{z} \rangle$$
$$= \int d^{3}z \, W(\vec{x}_{1}, \vec{z}) \rho^{(2)}(\vec{x}_{1}, \vec{z}; \vec{y}_{1}, \vec{z})$$

Compte tenu du résultat de la question 1, on en déduit l'équation d'évolution complète

$$i\hbar\partial_t \rho^{(1)} = [h_1, \rho^{(1)}] + \text{Tr}_2\left([\mathcal{W}, \rho^{(2)}]\right)$$

- 4. Approximation de Hartree. L'équation(14.134) est un conséquence immédiate de l'approximation (14.132) et de l'équation d'évolution de $\rho^{(1)}$.
- **5.** Approximation de Hartree-Fock. La forme approché de $\rho^{(2)}$ est

$$\rho^{(2)}(\vec{x}_1, \vec{x}_2; \vec{y}_1, \vec{y}_2) = \sum_{ij} \left[u_i^*(\vec{y}_1) u_j^*(\vec{y}_2) u_j(\vec{x}_2) u_i(\vec{x}_1) - u_i^*(\vec{y}_1) u_j^*(\vec{y}_2) u_i(\vec{x}_2) u_j(\vec{x}_1) \right]$$

La trace du premier terme donne $N\rho^{(1)}(\vec{x}_1, \vec{y}_1)$, et celle du second

$$-\sum_{ij} \int d^3x_2 \, u_i^*(\vec{y}_1) u_j^*(\vec{x}_2) u_i(\vec{x}_2) u_j(\vec{x}_1) = -\sum_i u_i^*(\vec{y}_1) u_i(\vec{x}_1) = -\rho^{(1)}(\vec{x}_1, \vec{y}_1)$$

et on a donc bien

$$\operatorname{Tr}_2 \rho^{(2)} = (N-1)\rho^{(1)}$$

Chapitre 15

Exercices du chapitre 15

15.6.1 Perturbation au second ordre et forces de van der Waals

1. Partons de l'équation aux valeurs propres à l'ordre λ^2

$$H(\lambda)|\varphi(\lambda)\rangle = (H_0 + \lambda W)|\varphi(\lambda)\rangle$$

= $(E_0 + \lambda E_1 + \lambda^2 E_2)|\varphi(\lambda)\rangle$

avec

$$|\varphi(\lambda)\rangle = |\varphi_0\rangle + \lambda |\varphi_1\rangle + \lambda^2 |\varphi_2\rangle$$

et la condition auxiliaire $\langle \varphi_0 | \varphi(\lambda) \rangle = 1$ d'où

$$\langle \varphi_0 | \varphi_1 \rangle = -\lambda \langle \varphi_0 | \varphi_2 \rangle$$

De ces équations on déduit à l'ordre λ^2

$$(H_0 - E_0)|\varphi_2\rangle = (E_1 - W)|\varphi_1\rangle + E_2|\varphi_0\rangle$$

En multipliant à gauche par le bra $\langle \varphi_0 |$ et en tenant compte de ce que $\langle \varphi_0 | \varphi_1 \rangle$ est d'ordre λ

$$E_2 = \langle \varphi_0 | W | \varphi_1 \rangle \tag{15.1}$$

De plus l'identification des termes d'ordre λ pour $|\varphi(\lambda)\rangle$ donne

$$(H_0 - E_0)|\varphi_1\rangle = (E_1 - W)|\varphi_0\rangle \tag{15.2}$$

Écrivons l'opérateur identité sous la forme $(|\varphi_0\rangle \equiv |n\rangle)$

$$I = |n\rangle\langle n| + (H_0 - E_0)^{-1} \left(\sum_{k \neq n} |k\rangle\langle k|\right) (H_0 - E_0)$$

et utilisons l'expression (15.1) de E_2

$$E_2 = \langle n|W|n\rangle\langle n|\varphi_1\rangle + \sum_{k\neq n} \langle n|W|\frac{1}{H_0 - E_0}|k\rangle\langle k|(H_0 - E_0)|\varphi_1\rangle$$

Négligeant le premier terme car $\langle n|\varphi_1\rangle=O(\lambda)$ et utilisant (15.2)

$$E_2 = \sum_{k \neq n} \frac{|\langle n|W|k\rangle|^2}{E_0 - E_k}$$

2. Un moment dipolaire $\vec{d}=q_e\vec{r}_1$ situé en $\vec{R}=0$ crée au point \vec{R} un champ électrique

$$\vec{E} = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0 R^3} \left[\vec{d} - 3(\vec{d} \cdot \hat{R}) \hat{R} \right]$$

et l'énergie potentielle de l'ensemble des deux atomes est

$$W = -q_e \vec{r}_2 \cdot \vec{E}$$

3. $\langle \varphi_{01}\varphi_{02}|W|\varphi_{01}\varphi_{02}\rangle=0$ parce que les valeurs moyennes de $X_1,\,Y_1$ et Z_1 sont nulles par parité

$$\langle \varphi_{01}|X_1|\varphi_{01}\rangle = 0$$

et de même pour les valeurs moyennes de X_2 , Y_2 et Z_2 .

3. En utilisant la relation de fermeture

$$\sum_{\alpha} |\varphi_{\alpha}\rangle\langle\varphi_{\alpha}| = I$$

on obtient

$$E_2 \simeq -\frac{1}{2R_{\infty}} \langle \varphi_{01} \varphi_{02} | W^2 | \varphi_{01} \varphi_{02} \rangle$$

Les seuls termes de W^2 dont la valeur moyenne est non nulle sont $X_1^2X_2^2$, $Y_1^2Y_2^2$ et $4Z_1^2Z_2^2$. En utilisant l'invariance par rotation

$$\langle \varphi_{01}|X_1^2|\varphi_{01}\rangle = \frac{1}{3}\langle \varphi_0|\vec{R}^2|\varphi_0\rangle = \frac{1}{3}\langle R^2\rangle = a_0^2$$

Le temps caractéristique d'une fluctuation du moment dipolaire d'un des atomes est $\tau \simeq \hbar/R_{\infty}$. Pour qu'un calcul statique tel que celui exposé ci-dessus soit valable, il faut pouvoir négliger le temps de propagation de la lumière entre les deux atomes, et il faut donc que $R \ll c\tau = \hbar c/R_{\infty}$.

15.0.2Atomes muoniques

1. La masse réduite du problème est

$$m'_{\mu} = \frac{m_{\mu}}{1 + m_{\mu}/m_A} \simeq \frac{m_{\mu}/m_e}{1 + m_{\mu}/(Am_p)}$$

soit

$$m'_{\mu} = \alpha(A)m_e$$

$$\alpha(A) = \frac{m_{\mu}/m_e}{1 + m_{\mu}/(Am_p)}$$

Applications

- Aluminium : $a_{\mu}^{Z=13} = 19.8 \,\text{fm}$ $R = 3.6 \,\text{fm}$ Plomb : $a_{\mu}^{Z=82} = 3.1 \,\text{fm}$ $R = 7.1 \,\text{fm}$
- 2. Effet des électrons des couches internes. La fonction d'onde des électrons les plus internes est

$$\varphi_0^Z(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi (a_e^Z)^3}} e^{-r/a_e^Z} \qquad a_e^Z = \frac{a_0}{Z}$$

La charge électronique dans une orbite de rayon a_{μ}^{Z} est

$$Q \simeq 2q_e \left(\frac{a_\mu^Z}{a_e^Z}\right)^3 \simeq 2q_e \left(\frac{m_e}{m_\mu}\right)^3 \sim q_e \times 10^{-6}$$

L'énergie de la transition $2p \to 1s$ de l'atome d'hydrogène est $\Delta E_H \simeq (3/4)R_{\infty}$. Elle vaut pour un atome muonique dans le cas de l'aluminium

$$\Delta E_{\mu}^{\rm Al} = (13)^2 \alpha (27) \frac{3}{4} R_{\infty} = 354.9 \,\text{keV}$$

et dans le cas du plomb

$$\Delta E_{\mu}^{\text{Pb}} = (82)^2 \alpha (208) \frac{3}{4} R_{\infty} = 14.2 \,\text{MeV}$$

L'approximation d'un noyau ponctuel n'est évidemment pas valable pour le plomb, car le rayon de l'orbite est environ la moitié du rayon nucléaire! Cette approximation ne peut même pas servir d'approximation d'ordre zéro. Il serait préférable de partir d'une approximation d'oscillateur harmonique en utilisant le potentiel de la question suivante.

3. Le potentiel à utiliser dans le calcul perturbatif pour r < R est

$$W(r) = \frac{Ze^2}{2} \left[\frac{1}{R} \left(\frac{r}{R} \right)^2 - 3 + \frac{2}{r} \right]$$

Le potentiel W étant non nul uniquement pour r < R, la contribution d'un état dont la fonction d'onde s'annule à r = 0 (onde p, onde d etc.) est négligeable. Pour une onde ns on utilise

$$\int d^3 r W(r) |\varphi_{ns}(\vec{r})|^2 \simeq |\varphi_{ns}(0)|^2 \int d^3 r W(r)$$

Compte tenu de

$$\int \mathrm{d}^3 r \, W(r) = \frac{2\pi}{5} \, Ze^2 R^2$$

on trouve

$$\delta E_{ns} = \frac{2\pi}{5} Ze^2 R^2 |\varphi_{ns}(0)|^2$$

ce qui donne numériquement pour la transition $2p \to 1s$

$$\delta E_{1s} = \frac{2Ze^2}{5a_{\mu}^Z} \left(\frac{R}{a_{\mu}^Z}\right)^2 = \frac{4}{5} R_{\infty} Z^2 \left(\frac{m_{\mu}}{m_e}\right) \left(\frac{R}{a_{\mu}^Z}\right)^2 = 12.6 \text{ keV}$$

En tenant compte de la polarisation du vide

$$\Delta E_{2p\to 1s} = 354.9 - 12.6 + 2.2 = 344.5 \,\text{keV}$$

en excellent accord avec le résultat expérimental.

4. Le rapport de l'énergie de la structure fine à celle du fondamental est la même pour les atomes ordinaires et muoniques : elle est proportionnelle dans les deux cas à α^2 . En revanche le rapport de l'énergie de structure hyperfine à celle de l'état fondamental est plus grande par un facteur $\sim m_{\mu}/m_e$ pour les atomes muoniques. En effet, si l'on examine (15.32) en tenant compte de ce que l'énergie du fondamental est en 1/a, on doit tenir compte d'un facteur $1/a^3 \sim (m_{\mu}/m_e)^3$ et d'un facteur m_e/m_{μ} venant de la comparaison des moments magnétiques de l'électron et du muon.

15.6.4 Atomes de Rydberg

1. Dans le cas l = n - 1 le développement de $u_{nl}(r)$ se réduit à un seul terme

$$u_{nl}(r)\Big|_{l=n-1} = c_0 \left(\frac{r}{a_0}\right)^n \exp\left(-\frac{r}{na_0}\right)$$

Posons $x = r/a_0$ et étudions la fonction $f(x) = x^n \exp(-x/n)$, ou de façon équivalente son logarithme g(x). La fonction f(x) présente un maximun aigu au voisinage d'un point x_0 que l'on détermine en étudiant g'(x), $g'(x_0) = 0$

$$g'(x) = \frac{n}{x} - \frac{1}{n}$$
 $x_0 = n^2$

Calculons aussi la dérivée seconde

$$g''(x) = -\frac{n}{x^2}$$
 $g''(x_0) = -\frac{1}{n^3}$

et donc

$$f(x) \simeq f(x_0) \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{2n^3}\right)$$

La dispersion autour du maximum à x_0 est $\Delta x = n^{3/2}$. Lorsque l = n - 1, la fonction d'onde radiale est localisée autour d'une valeur $a_0 n^2$ avec une dispersion $a_0 n^{3/2}$. Lorsque $l \neq n - 1$, l'exponentielle dans $u_{nl}(r)$ est multipliée par un polynôme en r, et non un simple monôme, ce qui élargit la courbe.

2. Au voisinage de $\theta = \pi/2$ et en posant $\delta = \pi/2 - \theta$

$$\sin^l \theta = \cos^l \delta \simeq \left(1 - \frac{1}{2} \delta^2\right)^l \simeq \exp\left(-\frac{1}{2} l \delta^2\right)$$

La fonction d'onde est donc concentrée dans une ouverture angulaire $\delta\theta \simeq 1/\sqrt{l} \simeq 1/\sqrt{n}$, ce qui lui donne une dispersion suivant Oz

$$\Delta z \simeq \frac{1}{\sqrt{n}} a_0 n^2 = a_0 n^{3/2}$$

Les dispersions horizontale (question 1) et verticale (question 2) étant toutes deux en $a_0 n^{3/2}$, l'orbite est donc bien un tore de rayon $a_0 n^{3/2}$ autour d'un cercle de rayon a_0 .

15.6.7 Forces réactives

1. Les valeurs propres et vecteurs propres sont donnés par (2.35). On trouve

$$|\chi_{1n}(z)\rangle$$
 : $E_{1n} = -\frac{1}{2}\hbar\sqrt{\delta^2 + n\Omega_1^2(z)}$
 $|\chi_{2n}(z)\rangle$: $E_{2n} = \frac{1}{2}\hbar\sqrt{\delta^2 + n\Omega_1^2(z)}$

La force sur l'atome dans l'état $|\chi_{1n}\rangle$ par exemple est

$$F_{1n} = -\frac{\partial E_{1n}}{\partial z} = \frac{1}{4} \hbar n \frac{\partial \Omega_1^2}{\partial z} \frac{1}{\sqrt{\delta^2 + n\Omega_1^2(z)}}$$

et $F_{2n} = -F_{1n}$.

2. Les amplitudes de transition sont données par

$$\begin{array}{lcl} a_{11}^n & = & \langle \chi_{1,n-1} | (b+b^\dagger) | \chi_{1n} \rangle = -\sin \theta_{n-1} \cos \theta_n \\ a_{21}^n & = & \langle \chi_{2,n-1} | (b+b^\dagger) | \chi_{1n} \rangle = \cos \theta_{n-1} \cos \theta_n \\ a_{12}^n & = & \langle \chi_{1,n-1} | (b+b^\dagger) | \chi_{2n} \rangle = -\sin \theta_{n-1} \sin \theta_n \\ a_{22}^n & = & \langle \chi_{2,n-1} | (b+b^\dagger) | \chi_{2n} \rangle = -\cos \theta_{n-1} \sin \theta_n \end{array}$$

En choisissant convenablement la phase ϕ dans (11.93), on obtient pour la valeur moyenne du champ $\mathsf{E}_H(z,t)$ dans l'état cohérent $|z\rangle$, avec $|z|^2=\langle n\rangle$

$$\langle z|\mathsf{E}_{H}(z,t)|z\rangle = 2\langle n\rangle\sqrt{\frac{\hbar\omega}{\varepsilon_{0}\mathcal{V}}}\cos\omega t\,\sin kz$$

ce qui donne

$$\sqrt{\frac{\hbar\omega\langle n\rangle}{\varepsilon_0\mathcal{V}}} = \frac{1}{2}\,\mathcal{E}_0$$

et pour le couplage atome-champ

$$\hbar\Omega_1(z)\sqrt{\langle n\rangle} = d\mathcal{E}_0 \sin kz = \hbar\omega_1(z)$$

où $\omega_1(z)$ est la fréquence de Rabi habituelle (cf. par exemple (14.74)).

3. On trouve immédiatement $(\theta_{\langle n \rangle} = \theta)$

$$\mathsf{p}_1^{\mathrm{st}} = \frac{\sin^4 \theta}{\cos^4 \theta + \sin^4 \theta} \qquad \quad \mathsf{p}_2^{\mathrm{st}} = \frac{\cos^4 \theta}{\cos^4 \theta + \sin^4 \theta}$$

D'après la question 1, la force sur l'atome dans l'état $|\chi_1\rangle$ est

$$F_1 = \frac{1}{4} \, \hbar \, \frac{\partial \omega_1^2(z)}{\partial z} \frac{1}{\Omega_{1\langle n \rangle}(z)}$$

et $F_2 = -F_1$. La force sur un atome est donc

$$F = F_1(\mathsf{p}_1^{\mathrm{st}} - \mathsf{p}_2^{\mathrm{st}}) = \frac{1}{4} \, \hbar \, \frac{\partial \omega_1^2(z)}{\partial z} \frac{1}{\sqrt{\delta^2 + \omega_1^2(z)}} \, \frac{\sin^4 \theta - \cos^4 \theta}{\cos^4 \theta + \sin^4 \theta}$$

avec

$$\frac{\sin^4 \theta - \cos^4 \theta}{\cos^4 \theta + \sin^4 \theta} = -\frac{2\delta\Omega_{1\langle n \rangle}}{\delta^2 + \Omega_{1\langle n \rangle}^2(z)}$$

En rassemblant tous les facteurs

$$F = -\frac{1}{2} \hbar \frac{\partial \omega_1^2(z)}{\partial z} \frac{\delta}{2\delta^2 + \omega_1^2(z)}$$

ou sous forme vectorielle

$$\vec{F} = -\frac{1}{2} \, \hbar \vec{\nabla} \omega_1^2(\vec{r}) \frac{\delta}{2\delta^2 + \omega_1^2(z)}$$

en accord avec (14.98) si $\Gamma \ll \omega_1$, c'est-à-dire si le laser est suffisamment intense.

15.6.8 Capture radiative de neutrons par l'hydrogène

1. Lorsque $r \to 0$

$$\psi(r) \simeq \frac{pr+\delta}{pr} = 1 + \frac{\delta}{pr} = 1 - \frac{a}{r} = -\frac{a}{r} \left(1 - \frac{r}{a}\right)$$

2. Les transitions dipolaires électriques sont supprimées à très basse énergie en raison de la barrière centrifuge : une onde P possède une probabilité de présence qui s'annule rapidement quand on s'approche de l'origine. Partant de l'expression (11.100) du champ magnétique quantifié, nous devons conserver les transitions entre états à zéro photon et à un photon, qui sont donnés par le terme $a_{\vec{k}\lambda}^{\dagger}$

$$\langle 1 \text{ photon} | a_{\vec{k}\lambda}^{\dagger} | 0 \text{ photon} \rangle = 1$$

Il nous reste seulement W', conformément à l'énoncé.

3. Le terme

$$\frac{2\pi}{\hbar} |\langle f|W|i\rangle|^2 \delta(\hbar\omega - (E_i - E_f))$$

vient de la règle d'or de Fermi (9.152), \mathcal{F} est le facteur de flux et

$$\frac{\mathcal{V}\omega^2 d\omega}{(2\pi)^3 c^3}$$

est l'espace de phase des états finaux du photon.

4. Le moment angulaire est $\vec{J} = (\hbar/2)(\vec{\sigma}_p + \vec{\sigma}_n)$ et $\vec{J}|\chi_s\rangle = 0$ car $|\chi_s\rangle$ est un état de moment angulaire nul. De même

$$\langle \chi_s | \vec{\sigma}_p | \chi_s \rangle = 0$$

parce que $\vec{\sigma}_p$ est un opérateur vectoriel dont les éléments de matrice sont nuls en raison du théorème de Wigner-Eckart, si les éléments de matrice sont calculés entre états de moment angulaire zéro. Si $\psi_i(\vec{r})$ est la fonction d'onde spatiale d'un état 3S_1 , le potentiel est le même que celui du deutéron, et comme deux fonctions d'onde correspondant à deux valeurs propres différentes de l'énergie sont orthogonales, nous avons

$$\int d^3r \, \psi_f^*(\vec{r}) \psi_i(\vec{r}) = \int d^3r \, \psi_D^*(\vec{r}) \psi_i(\vec{r}) = 0$$

Si au contraire la fonction d'onde initiale correspond à un état ${}^{1}S_{0}$, l'intégrale ne s'annule pas

$$\int d^3 r \, \psi_D^*(\vec{r}) \psi_i(\vec{r}) = -\frac{N_D}{\sqrt{4\pi}} \int d\Omega \int_0^\infty r^2 dr \, \frac{e^{-\kappa r}}{r} \, \frac{a_s}{r} \left(1 - \frac{a_s}{r} \right)$$
$$= -N_D a_s \sqrt{4\pi} \int_0^\infty dr \, e^{-\kappa r} \left(1 - \frac{a_s}{r} \right) = \frac{N_D \sqrt{4\pi}}{\kappa^2} (1 - \kappa a_s)$$

5. Nous utilisons la relation de fermeture (11.80)

$$\sum_{\lambda} e_{\lambda}^{i}(\vec{k})e_{\lambda}^{j}(\vec{k}) = \delta_{ij} - \hat{k}_{i}\hat{k}_{j}$$

et nous en déduisons

$$\sum_{m} |\langle \chi_{t}^{m} | \vec{\sigma}_{p} | \chi_{s} \rangle|^{2} = \sum_{m} \langle \chi_{s} \vec{\sigma}_{p} | \chi_{t}^{m} \rangle \langle \chi_{t}^{m} | \vec{\sigma}_{p} | \chi_{s} \rangle$$

$$= \sum_{m} \langle \chi_{s} | \vec{\sigma}_{p} | \chi_{t}^{m} \rangle \cdot \langle \chi_{t}^{m} | \vec{\sigma}_{p} | \chi_{s} \rangle + \langle \chi_{s} | \vec{\sigma}_{p} | \chi_{s} \rangle \cdot \langle \chi_{s} | \vec{\sigma}_{p} | \chi_{s} \rangle$$

où nous nous sommes servis de $\langle \chi_s | \vec{\sigma}_p | \chi_s \rangle = 0$. Nous utilisons ensuite la relation de fermeture dans l'espace de Hilbert à quatre dimensions des deux spins

$$\sum_{m} |\chi_t^m\rangle \langle \chi_t^m| + |\chi_s\rangle \langle \chi_s| = I$$

de sorte que

$$|\langle |W'_{\rm spin}|^2 \rangle = \frac{1}{4} \langle \chi_s | \vec{\sigma}_p^2 - (\vec{\sigma}_p \cdot \hat{k})^2 | \chi_s \rangle = \frac{1}{2}$$

parce que $\vec{\sigma}_p^2 = 3$ and $(\vec{\sigma}_p \cdot \hat{k})^2 = 1$.

- **6.** Rassemblons les différents facteurs que nous avons examinés dans les questions précédentes et qui conduisent au résultat de l'énoncé.
 - 1. Un facteur

$$\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 \mathcal{V}}$$

a pour origine l'expression du champ magnétique quantifié.

2. Un facteur

$$\frac{1}{4} \frac{q_p^2 \hbar^2}{4M^2} (g_p - g_n)^2$$

a pour origine le couplage des moments magnétiques avec le champ magnétique quantifié.

- 3. Un facteur 1/2 vient de la sommation sur les spins.
- 4. Un facteur

$$\frac{4\pi N_D^2}{\kappa^4} (1 - \kappa a_s)^2 = \frac{8\pi}{\kappa^3} (1 - \kappa a_s)^2$$

a pour origine l'intégrale de recouvrement des fonctions d'onde.

- 5. Comme $d\sigma/d\Omega$ est isotrope, un facteur 4π vient de l'intégration sur $d\Omega$.
- 6. $\hbar\omega=B$ vient de la conservation de l'énergie.

On trouve finalement l'estimation numérique suivante du résultat théorique

$$\sigma = 7.72 \times 10^{-4} \, (\text{MeV})^2 = 30.9 \, (\text{fm})^2$$

Chapitre 16

Exercices du chapitre 16

16.4.3 Structure hyperfine du deutérium

1. La contribution d'un proton au moment magnétique comprend sa partie orbitale $\gamma_l \vec{L}$ et sa partie de spin $\gamma_s \vec{S}$. Il n'y a pas de partie orbitale pour le neutron qui est de charge nulle.

3. On calcule la valeur moyenne du moment magnétique dans l'état $|++\rangle$

$$\mu_D = \langle + + |\gamma_p S_{pz} + \gamma_n S_{nz}| + + \rangle = \frac{1}{2} \hbar \gamma_p + \frac{1}{2} \hbar \gamma_n$$

$$= (5.59 - 3.83) \frac{q_p \hbar}{4m_p} = \frac{1}{2} (5.59 - 3.83) \mu_N = 0.88 \,\mu_N$$

En utilisant $\vec{S}_n = \vec{S}_D - \vec{S}_p \Longrightarrow \langle \vec{S}_D \cdot \vec{S}_p \rangle = \hbar^2$ et le théorème de Wigner-Eckart, on montre que dans l'état 3S_1

$$\langle \vec{S}_p \rangle = \langle \vec{S}_n \rangle = \frac{1}{2} \langle \vec{S}_D \rangle$$

2. L'interaction effective dans l'état 1s est

$$W_D = -\frac{2\mu_0}{3} \gamma_D \gamma_e |\varphi(0)|^2 \vec{S}_D \cdot \vec{S}_e$$

tandis que pour l'hydrogène (voir (15.32))

$$W_D = -\frac{2\mu_0}{3} \gamma_p \gamma_e |\varphi(0)|^2 \vec{S}_p \cdot \vec{S}_e$$

On a donc

$$A_D = \frac{\gamma_D}{\gamma_p} A_H = \frac{0.88}{5.59} A_H = 0.92 \times 10^{-6} \,\text{eV}$$

5. N.B. F, S_p et S_D sont des nombres, alors que \vec{S} a les dimensions de \hbar .

$$\vec{F} = \vec{S}_D + \vec{S}_e \Longrightarrow F(F+1) = S_D(S_D+1) + S_e(S_e+1) + 2\vec{S}_D \cdot \vec{S}_e/\hbar^2$$

soit

$$\vec{S}_D \cdot \vec{S}_e = \frac{\hbar^2}{2} \left[F(F+1) - S_D(S_D+1) - S_e(S_e+1) \right]$$

ceci donne, pour les deux valeurs possible de F

$$F = \frac{3}{2}$$
 $F(F+1) = \frac{15}{4}$ $\vec{S}_D \cdot \vec{S}_e = \frac{\hbar^2}{2}$ $F = \frac{1}{2}$ $F(F+1) = \frac{3}{4}$ $\vec{S}_D \cdot \vec{S}_e = -\hbar^2$

6. L'interaction Zeeman est

$$W = -\frac{q_e}{2m_e} \, 2\vec{S}_e \cdot \vec{B} = -\frac{q_e B}{m_e} \, S_{ez}$$

tandis que d'après le théorème de Wigner-Eckart

$$\langle Fm'_F|S_{ez}|Fm_F\rangle = \frac{m_F}{\hbar F(F+1)} \langle \vec{S}_e \cdot \vec{F} \rangle \delta_{m_F.m'_F}$$

Mais l'on a également

$$S_D^2 = 2 = (\vec{F} - \vec{S}_e)^2 = F(F+1) + \frac{3}{4} - 2\vec{F} \cdot \vec{S}_e/\hbar^2$$

soit

$$\langle \vec{F} \cdot \vec{S}_e \rangle = \frac{\hbar^2}{2} \left[F(F+1) + \frac{3}{4} - 2 \right] = \frac{\hbar^2}{2} \left[F(F+1) - \frac{5}{4} \right]$$

On en déduit les niveaux Zeeman

$$W_{m'_F m_F} = -\frac{q_e B}{m_e} \frac{m_F \hbar}{F(F+1)} \frac{1}{2} \left[F(F+1) - \frac{5}{4} \right]$$

Les niveaux d'énergie sont donnés correctement par cette formule pourvu que W puisse être traité comme une perturbation : $|W| \ll A_D$.

16.4.4 Modèle en couches du noyau atomique

1. et 2. Voir la figure.

3. Le proton du tritium est dans un état $1s^{1/2}$. Le noyau a donc un spin 1/2 et son moment magnétique

$$\mu = \left\langle \frac{1}{2} \frac{1}{2} | \gamma_p S_{pz} | \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{2} \hbar \gamma_p = \frac{1}{2} 5.59 \mu_N = 2.79 \mu_N$$

Dans le cas de 3 H, c'est le neutron qui est dans un état $1s^{1/2}$. Ce noyau a donc aussi un spin 1/2 et

$$\mu = \frac{1}{2} \hbar \gamma_n = \frac{1}{2} (-3.83) \mu_N = -1.91 \mu_N$$

Ces deux résultats sont en accord avec l'expérience à 10% près.

4. Les nucléons externes sont

- 1. ⁷Li un proton $p_{3/2}: J = \frac{3}{2}$
- 2. ⁹Be un neutron $p_{3/2}:J=\frac{3}{2}$
- $3. \ ^{13}C$
- un neutron $p_{1/2}:J=\frac{1}{2}$ un neutron $d_{5/2}:J=\frac{5}{2}$ un proton $d_{3/2}:J=\frac{3}{2}$ $4. \ ^{17}O$
- $5. {}^{41}K$
- 6. 43 Ca un neutron $f_{7/2}: J = \frac{7}{2}$

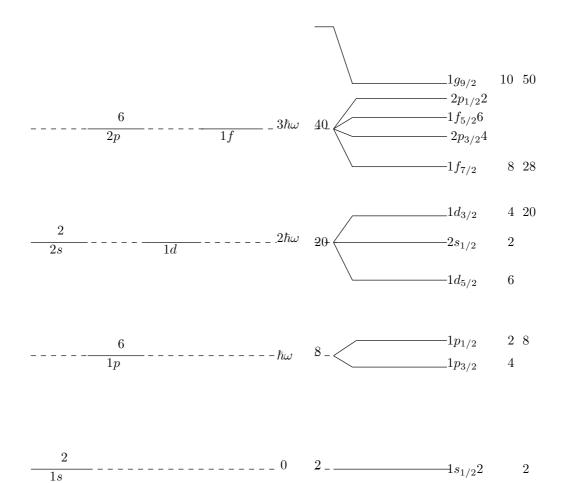
5. On doit distinguer les cas j = l + 1/2 et j = l - 1/2. D'après le théorème de Wigner-Eckart

$$\langle jm|L_z|jm\rangle\Big|_{m=j} = \frac{j}{j(j+1)}\langle \vec{J}\cdot\vec{L}\rangle = \frac{1}{j+1}\langle \vec{J}\cdot\vec{L}\rangle$$

Les valeurs moyennes de $\langle \vec{J} \cdot \vec{L} \rangle$ sont données par

$$j = l + \frac{1}{2} \qquad \langle \vec{J} \cdot \vec{L} \rangle = \frac{1}{2} (j+1)(2j-1)$$

$$j = l - \frac{1}{2} \qquad \langle \vec{J} \cdot \vec{L} \rangle = j \left(j + \frac{3}{2} \right)$$



 ${
m Fig.~16.1-Les}$ premiers niveaux du modèle en couches du noyau. Les remplissages maximum des niveaux sont explicités.

et celles de $\langle \vec{J} \cdot \vec{S} \rangle$ par

$$\begin{array}{lcl} j & = & l+\frac{1}{2} & \qquad \langle \vec{J} \cdot \vec{S} \rangle = \frac{1}{2}(j+1) \\ \\ j & = & l-\frac{1}{2} & \qquad \langle \vec{J} \cdot \vec{S} \rangle = -\frac{1}{2}j \end{array}$$

On en déduit, pour les noyaux j=l+1/2

$$\mu = \frac{\hbar}{2(j+1)} [(j+1)(2j-1)\gamma_l + (j+1)\gamma_p]$$
$$= \gamma_l \hbar \left(j - \frac{1}{2}\right) + \frac{1}{2}\gamma_s \hbar$$

ce qui donne

$$^{7}\mathrm{Li}\,:\,\mu=3.79\mu_{N}\quad \ ^{9}\mathrm{Be}\,:\,\mu=-1.91\mu_{N}\quad \ ^{17}\mathrm{O}\,:\,\mu=-1.91\mu_{N}\quad \ ^{43}\mathrm{Ca}\,:\,\mu=-1.91\mu_{N}$$

Pour les noyaux j = l - 1/2

$$\mu = \frac{j\hbar}{j+1} \left[\left(j + \frac{3}{2} \right) - \frac{1}{2} \gamma_s \right]$$

ce qui donne

¹³C :
$$\mu = 0.64 \mu_N$$
 ⁴¹K : $\mu = 0.12 \mu_N$

L'accord avec l'expérience est seulement qualitatif, même si l'allure générale des résultats, et en particulier le signe de μ . sont corrects.

Chapitre 17

Exercices du chapitre 17

17.4.6 Superposition d'états cohérents

1. Le terme $[H_0, \rho]$ ne contribue pas à l'évolution de ρ_{nn} parce que H_0 est diagonal dans la base $\{|n\rangle\}$. De plus

$$\langle n|a^{\dagger}a\rho + \rho a^{\dagger}a|n\rangle = 2n\rho_{nn}$$

 $\langle n|a\rho a^{\dagger}|n\rangle = (n+1)\rho_{n+1,n+1}$

et l'évolution de ρ_{nn} est donc

$$\frac{\mathrm{d}\rho_{nn}}{\mathrm{d}t} = -n\Gamma\rho_{nn} + (n+1)\Gamma\rho_{n+1,n+1}$$

Si nous choisissons n=0, nous trouvons $\mathrm{d}\rho/\mathrm{d}t=\Gamma\rho_{11}$, ce qui veut dire que la population de l'état fondamental augmente à un taux qui est proportionnel à celle de l'état excité multipliée par Γ . Le processus physique correspondant est l'émission spontanée d'un photon, de sorte que Γ est le taux d'émission spontanée. L'équation d'évolution de $\rho_{n+1,n}$ est obtenue de

$$\langle n+1|[H_0,\rho]|n\rangle = \hbar\omega_0\rho_{n+1,n}$$

$$\langle n+1|a\rho a^\dagger|n\rangle = \sqrt{(n+1)(n+2)}\,\rho_{n+2,n+1}$$

$$\langle n+1|\{a^\dagger a,\rho\}|n\rangle = (2n+1)\rho_{n+1,n}$$

de sorte que

$$\frac{\mathrm{d}\rho_{n+1,n}}{\mathrm{d}t} = -\mathrm{i}\omega_0\rho_{n+1,n} + \Gamma\sqrt{(n+1)(n+2)}\,\rho_{n+2,n+1} - \frac{1}{2}\,\Gamma(2n+1)\rho_{n+1,n}$$

2. Utilisant (2.54) nous obtenons

$$e^{\lambda^* a} a^{\dagger} e^{-\lambda^* a} = a^{\dagger} + \lambda^* [a, a^{\dagger}] = a^{\dagger} + \lambda^*$$

c'est-à-dire

$$a^{\dagger} e^{-\lambda^* a} = e^{-\lambda^* a} \left(a^{\dagger} + \lambda^* \right)$$

Prenant la dérivée de $C(\lambda, \lambda^*; t)$ par rapport à λ nous en déduisons

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} \operatorname{Tr} \left(\rho e^{\lambda a^{\dagger}} e^{-\lambda^* a} \right) = \operatorname{Tr} \left(\rho a^{\dagger} e^{\lambda a^{\dagger}} e^{-\lambda^* a} \right)
= \operatorname{Tr} \left(\rho e^{\lambda a^{\dagger}} e^{-\lambda^* a} (a^{\dagger} + \lambda^*) \right)
= \operatorname{Tr} \left((a^{\dagger} + \lambda^*) \rho e^{\lambda a^{\dagger}} e^{-\lambda^* a} \right)$$

où nous nous sommes servis de l'invariance de la trace par permutation circulaire pour obtenir a dernière ligne. Cette équation s'écrit schématiquement comme

$$\left(\frac{\partial}{\partial \lambda} - \lambda^*\right) \to a^{\dagger} \rho \text{ tandis que } \frac{\partial}{\partial \lambda} \to \rho a^{\dagger}$$

Nous obtenons de même pour $\partial/\partial\lambda^*$

$$\frac{\partial}{\partial \lambda^*} \operatorname{Tr} \left(\rho e^{\lambda a^{\dagger}} e^{-\lambda^* a} \right) = -\operatorname{Tr} \left(\rho e^{\lambda a^{\dagger}} a e^{-\lambda^* a} \right)
= -\operatorname{Tr} \left(\rho (a - \lambda) e^{\lambda a^{\dagger}} a e^{-\lambda^* a} \right)$$

ce qui peut se récrire

$$\left(\lambda - \frac{\partial}{\partial \lambda^*}\right) \to \rho a \ \text{ tandis que } \ -\frac{\partial}{\partial \lambda^*} \to a \, \rho$$

 $\bf 3.$ Examinons les différents termes dans le membre de droite de (17.36). D'après les résultats de la question précédente

$$a^{\dagger}a\rho \rightarrow \left(\frac{\partial}{\partial\lambda} - \lambda^*\right) \left(-\frac{\partial}{\partial\lambda^*}\right) = -\frac{\partial^2}{\partial\lambda\partial\lambda^*} + \lambda^* \frac{\partial}{\partial\lambda^*}$$
$$\rho a^{\dagger}a \rightarrow \left(\lambda - \frac{\partial}{\partial\lambda^*}\right) \left(\frac{\partial}{\partial\lambda}\right) = -\frac{\partial^2}{\partial\lambda\partial\lambda^*} + \lambda \frac{\partial}{\partial\lambda}$$

de sorte que

$$[a^{\dagger}a, \rho] \to \lambda^* \frac{\partial}{\partial \lambda^*} - \lambda \frac{\partial}{\partial \lambda}$$

De même

$$a\rho a^{\dagger} \to \frac{\partial^2}{\partial \lambda \partial \lambda^*}$$

et

$$\{a^{\dagger}a,\rho\} = -\left(\frac{\partial}{\partial\lambda} - \lambda^*\right)\left(-\frac{\partial}{\partial\lambda^*}\right) + \left(\lambda - \frac{\partial}{\partial\lambda^*}\right)\left(\frac{\partial}{\partial\lambda}\right) = -\frac{\partial^2}{\partial\lambda\partial\lambda^*} + \lambda^*\frac{\partial}{\partial\lambda^*} + \lambda\frac{\partial}{\partial\lambda^*}$$

Combinant tous ces résultats, nous en déduisons l'équation aux dérivées partielles

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \left(\frac{\Gamma}{2} - i\omega_0\right)\lambda \frac{\partial}{\partial \lambda} + \left(\frac{\Gamma}{2} + i\omega_0\right)\lambda^* \frac{\partial}{\partial \lambda^*}\right]C(\lambda, \lambda^*; t) = 0$$

ou encore

$$\[\frac{\partial}{\partial t} + \left(\frac{\Gamma}{2} - i\omega_0\right) \frac{\partial}{\partial \ln \lambda} + \left(\frac{\Gamma}{2} + i\omega_0\right) \frac{\partial}{\partial \ln \lambda^*} \] C(\lambda, \lambda^*; t) = 0$$

Afin d'appliquer la méthode des caractéristiques, nous écrivons

$$\frac{\mathrm{d}t}{1} = \frac{\mathrm{d}\ln\lambda}{\Gamma/2 - \mathrm{i}\omega_0} = \frac{\mathrm{d}\ln\lambda}{\Gamma/2 + \mathrm{i}\omega_0}$$

d'où

$$\lambda = \lambda_0 \exp[(\Gamma/2 - i\omega_0)t]$$
 $\lambda^* = \lambda_0^* \exp[(\Gamma/2 + i\omega_0)t]$

ou en résolvant pour λ_0 , λ_0^*

$$\lambda_0 = \lambda \exp[-(\Gamma/2 - i\omega_0)t]$$
 $\lambda_0 = \lambda^* \exp[-(\Gamma/2 + i\omega_0)t]$

 $\lambda \exp[-(\Gamma/2 - i\omega_0)t]$ and $\lambda \exp[-(\Gamma/2 + i\omega_0)t]$ sont constants le long des caractéristiques. L'équation aux dérivées partielles pour $C(\lambda, \lambda^*; t)$ nous dit que cette fonction est constante le long des caractéristiques

$$C(\lambda, \lambda^*; t) = C_0(\lambda, \lambda^*; t = 0) = C_0(\lambda, \lambda^*)$$

4. L'opérateur statistique est au temps t=0

$$C_0(\lambda \cdot \lambda^*) = \operatorname{Tr}\left(|z\rangle\langle z| e^{\lambda a^{\dagger}} e^{-\lambda^* a}\right) = \langle z|e^{\lambda a^{\dagger}} e^{-\lambda^* a}|z\rangle = \exp(\lambda z^* - \lambda^* z)$$

Nous avons donc au temps t

$$C(\lambda, \lambda^*; t) = \exp\left[z^* \lambda e^{-(\Gamma/2 - i\omega_0)t}, \lambda^* z e^{-(\Gamma/2 + i\omega_0)t}\right]$$

ce qui peut se récrire

$$C(\lambda, \lambda^*; t) = \exp \left[\lambda z^*(t) - \lambda^* z(t)\right]$$

avec

$$z(t) = ze^{-(\Gamma/2 + i\omega_0)t}$$

par conséquent $C(\lambda, \lambda^*; t)$ correspond à l'état cohérent

$$|z(t)\rangle = |z e^{-i\omega_0 t} e^{-\Gamma t/2}\rangle$$

5. Lorsque $|\Phi\rangle$ est une superposition d'états cohérents

$$|\Phi\rangle = c_1|z_1\rangle + c_2|z_2\rangle$$

alors

$$C(\lambda, \lambda^*; t = 0) = |c_1|^2 e^{(\lambda z_1^* - \lambda^* z_1)} + |c_2|^2 e^{(\lambda z_2^* - \lambda^* z_2)} + c_1 c_2^* \langle z_2 | z_1 \rangle e^{(\lambda z_2^* - \lambda^* z_1)} + c_1^* c_2 \langle z_1 | z_2 \rangle e^{(\lambda z_1^* - \lambda^* z_2)}$$

Les deux derniers termes ont pour origine le fait que $|\Phi\rangle$ est une superposition cohérente, alors que ces termes seraient absents dans un superposition incohérente des deux états cohérents. Au temps t nous avons

$$C(\lambda, \lambda^*; t) = |c_1|^2 e^{[\lambda z_1^*(t) - \lambda^* z_1(t)]} + |c_2|^2 e^{[\lambda z_2^*(t) - \lambda^* z_2(t)]} + c_1 c_2^* \langle z_2 | z_1 \rangle e^{[\lambda z_2^*(t) - \lambda^* z_1(t)]} + c_1^* c_2 \langle z_1 | z_2 \rangle e^{[\lambda z_1^*(t) - \lambda^* z_2(t)]}$$

On remarque que les produits scalaires dans ces deux derniers termes sont $\langle z_2|z_1\rangle$ et $\langle z_1|z_2\rangle$, et non $\langle z_2(t)|z_1(t)\rangle$ et $\langle z_1(t)|z_2(t)\rangle$. Si l'on veut retrouver la même forme qu'à t=0, on doit écrire par exemple

$$\langle z_2|z_1\rangle = \frac{\langle z_2|z_1\rangle}{\langle z_2(t)|z_1(t)\rangle} \langle z_2(t)|z_1(t)\rangle = \eta(t)\langle z_2(t)|z_1(t)\rangle$$

Nous pouvons alors écrire l'état final comme une superposition de deux états cohérents, mais la cohérence a été réduite par un facteur

$$|\eta(t)| = \exp\left[-\frac{1}{2}|z_1 - z_2|^2 \left(1 - e^{-\Gamma t}\right)\right] \simeq \exp\left[-\frac{\Gamma}{2}|z_1 - z_2|^2\right]$$

La cohérence est donc amortie selon un taux qui est plus grand par un facteur $|z_1 - z_2|^2$ que le taux d'amortissement Γ des états cohérents individuels. Le temps de décohérence est donc

$$\tau_{\rm dec} = \frac{2}{\Gamma |z_1 - z_2|^2}$$

5. Au temps t=0, l'oscillateur est dans un état de superposition

$$|\Phi(t=0)\rangle = c_1|0\rangle + c_2|z\rangle$$

Le vecteur d'état global est à t=0

$$|\Psi(t=0)\rangle = c_1|0\otimes 0_E\rangle + c_2|z\otimes 0_E\rangle$$

où $|0_E\rangle$ est le vecteur d'état (état du vide) du champ de rayonnement, étant donné que à T=0 aucun photon (ou phonon) n'est disponible. La première composante de $|\Psi\rangle$ reste inchangée sous l'évolution temporelle, parce que l'émission spontanée n'est pas possible à partir de $|0\rangle$. Au contraire, un photon sera émis en moyenne au bout d'un temps $\sim \Gamma|z|^2$ en raison de la seconde composante de $|\Psi\rangle$. De fait, l'évolution de ρ_{nn} dans la question 1 nous dit que l'amplitude de désintégration d'un état excité $|n\rangle$ est $n\Gamma$, et le nombre moyen $\langle n\rangle$ est égal à $|z|^2, |z|^2 = \langle n\rangle$ dans l'état cohérent $|z\rangle$. Dès qu'un photon est émis, les deux composantes de $|\Phi\rangle$ s'intriquent à des états orthogonaux de l'environnement, et l'opérateur statistique réduit perd toute cohérence de phase. Le temps de décohérence est donc le temps moyen d'émission d'un seul photon, et $\tau_{\text{dec}} \simeq 1/|z|^2\Gamma$.

17.4.8 Approximation séculaire et équation de Lindblad

1. Nous nous limitons à un seul indice α , le cas général s'en déduisant trivialement. Nous avons donc

$$W = \hbar AR$$

où \hbar a été introduit de façon à compenser le facteur $1/\hbar^2$ de (17.62). Il est clair, d'après sa définition, que $A(\omega)$ diminue l'énergie de $\hbar\omega$. Ceci est confirmé par un calcul direct du commutateur $[H_A, A(\omega)]$

$$[H_A, A(\omega)] = \sum_{\varepsilon_1} \left[\sum_{\varepsilon' - \varepsilon = \hbar\omega} \varepsilon_1 \mathcal{P}(\varepsilon_1) \, \mathcal{P}(\varepsilon) \, A \, \mathcal{P}(\varepsilon') - \mathcal{P}(\varepsilon) \, A \, \mathcal{P}(\varepsilon') \, \mathcal{P}(\varepsilon_1) \varepsilon_1 \right]$$

Utilisant $\mathcal{P}(\varepsilon_1) \mathcal{P}(\varepsilon) = \delta_{\varepsilon, \varepsilon_1} \mathcal{P}(\varepsilon)$ nous en déduisons

$$[H_A, A(\omega)] = \sum_{\varepsilon' - \varepsilon = \hbar \omega} (\varepsilon - \varepsilon') \mathcal{P}(\varepsilon) A \mathcal{P}(\varepsilon') = \hbar \omega A(\omega)$$

Trois autres identités nous seront utiles

(i)

$$A(-\omega) = A^{\dagger}(\omega)$$

(ii)

$$\sum_{\omega} A(\omega) = \sum_{\varepsilon, \varepsilon'} \mathcal{P}(\varepsilon) A \mathcal{P}(\varepsilon') = A$$

(iii)
$$[H_A, A^{\dagger}(\omega)A(\omega)] = A^{\dagger}(\omega)[H_A, A(\omega)] + [H_A, A^{\dagger}(\omega)]A(\omega) = 0$$

2. Il est commode de partir de l'équation pilote pour $\tilde{\rho}$. Examinons un de ses termes

$$\int_0^t dt' g(t') A(t - t') \tilde{\rho}(t) A(t) = \sum_{\omega, \omega'} \int_0^t dt' g(t') A(\omega) e^{-i\omega(t - t')} \tilde{\rho}(t) A(\omega') e^{-i\omega't}$$

$$= \sum_{\omega, \omega'} G_+(\omega) A(\omega) \tilde{\rho}(t) A(\omega') e^{-i(\omega + \omega')t}$$

A l'approximation séculaire, on conserve seulement les termes tels que $\omega + \omega' = 0$. Il est alors facile d'écrire $\mathrm{d}\tilde{\rho}/\mathrm{d}t$

$$\frac{\mathrm{d}\tilde{\rho}}{\mathrm{d}t} = \sum_{\omega} \left\{ \left(G_{+}(\omega) + G_{+}^{*}(\omega) \right) A(\omega) \, \tilde{\rho} \, A(-\omega) - G_{+}(\omega) A(-\omega) \, A(\omega) \, \tilde{\rho} - G_{+}^{*}(\omega) \tilde{\rho} \, A(-\omega) \, A(\omega) \right\}$$

Décomposons $G(\omega)$ en parties réelle et imaginaire

$$G_{\pm}(\omega) = \frac{1}{2} \Gamma_{\pm}(\omega) - \mathrm{i}\Delta_{\pm}(\omega)$$

et définissons le Hamiltonien du déplacement Lamb (Lamb shift) $H_{\rm LS}$ par

$$H_{\rm LS} = \sum_{\omega} \Delta_{\pm}(\omega) A(-\omega) A(\omega)$$

Comme $A(-\omega)A(\omega)$ commute avec H_A , on peut écrire

$$H_{\rm LS} = \sum_{\varepsilon} \Delta_{\varepsilon} \mathcal{P}(\varepsilon)$$

avec un choix des projecteurs $\mathcal{P}(\varepsilon)$ qui n'est pas unique en général. On met alors $\mathrm{d}\rho/\mathrm{d}t$ sous la forme de Lindblad

$$\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t} = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \left[H_A + H_{\mathrm{LS}}, \rho \right] + \sum_{\omega} \Gamma_+(\omega) \left[A(\omega) \rho A(-\omega) - \frac{1}{2} \left\{ A(-\omega) A(\omega), \rho \right\} \right]$$

3. Définissons

$$P(\varepsilon_n, t) = \langle \varepsilon_n | \rho(t) | \varepsilon_n \rangle$$

où les niveaux ε_n de $H_A+H_{\rm LS}$ sont supposés non dégénérés. Nous devons alors calculer l'éément de matrice nn du membre de droite de l'équation de Lindblad. Examinons le premier terme

$$\begin{split} \langle \varepsilon_n | A(\omega) \rho(t) A(-\omega) | \varepsilon_n \rangle &= \langle \varepsilon_n | A(\omega) | \varepsilon_n + \hbar \omega | \rangle \langle \varepsilon_n + \hbar \omega | \rho(t) | \varepsilon_n + \hbar \omega \rangle \langle \varepsilon_n + \hbar \omega | A(-\omega) | \varepsilon_n \rangle \\ &= |\langle \varepsilon_n | A(\omega) | \varepsilon_n + \hbar \omega \rangle|^2 P(\varepsilon_n + \hbar \omega, t) = W(\varepsilon_n | \varepsilon_n + \hbar \omega) P(\varepsilon_n + \hbar \omega, t) \end{split}$$

Nous en déduisons l'équation pilote

$$\frac{\mathrm{d}P(\varepsilon_n,t)}{\mathrm{d}t} = \sum_{\omega} \left\{ W(\varepsilon_n|\varepsilon_n + \hbar\omega)P(\varepsilon_n + \hbar\omega,t) - W(\varepsilon_n + \hbar\omega|\varepsilon_n)P(\varepsilon_n,t) \right\}$$

17.4.11 L'équation de Fokker-Planck-Kramers pour une particule brownienne

1. Nous nous limitons au deuxième terme $[X, [\{P, \rho\}]]$ du membre de gauche de(17.96), car les deux autres termes sont traités par une technique identique. En utilisant la forme (12.116) de w nous obtenons immédiatement

$$w(x, p; t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ipy/\hbar} \langle x + \frac{y}{2} | \{P, \rho\} | x - \frac{y}{2} \rangle y \, dy$$
$$= \frac{i}{2\pi} \frac{\partial}{\partial p} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ipy/\hbar} \langle x + \frac{y}{2} | \{P, \rho\} | x - \frac{y}{2} \rangle \, dy$$

Nous utilisons ensuite la forme (12.117) de w

$$\begin{split} w(x,p;t) &= \frac{1}{2\pi\hbar} \frac{\partial}{\partial p} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}py/\hbar} \langle x + \frac{y}{2} | \{P,\rho\} | p - \frac{y}{2} \rangle \mathrm{d}y \\ &= \frac{\mathrm{i}}{2\pi} \frac{\partial}{\partial p} p \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}xy/\hbar} \langle p + \frac{y}{2} | \{P,\rho\} | x - \frac{y}{2} \rangle \mathrm{d}y \\ &= \mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial p} \left[pw(x,p;t) \right] \end{split}$$

2. Il suffit d'observer que w(x, p; t) doit s'annuler quand $x \to \pm \infty$.