
EXAMEN PARTIEL de MÉCANIQUE QUANTIQUE-I

DURÉE 2 HEURES (3 novembre 2009)

Sans document.

1. Vrai ou faux ?. (2 pts)

Attention : $-1/2$ point par réponse fausse. Donc en cas de doute, mieux vaut ne rien répondre.

1. Étant donné deux particules distinctes, on peut mesurer simultanément l'impulsion de l'une et la position de l'autre.
2. L'effet Bohm-Aharonov montre que la mécanique quantique n'est pas invariante de jauge.
3. L'état d'un spin $1/2$ n'est pas invariant sous une rotation d'angle 2π .
4. Deux opérateurs hermitiens qui commutent entre eux admettent une base d'états propres communs.

2. Évolution d'une superposition d'états de l'oscillateur harmonique. (6 points)

Dans un système d'unités approprié ($\hbar = 1$, $m = 1$), on rappelle que l'état fondamental et le premier état excité de l'oscillateur harmonique de pulsation ω sont respectivement donnés par

$$f_0(x) = \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-x^2/2}, \quad \text{et} \quad f_1(x) = \frac{\sqrt{2}}{\pi^{1/4}} x e^{-x^2/2}$$

d'énergies respectives $\omega_0 = \omega/2$ et $\omega_1 = 3\omega/2$ de l'Hamiltonien H avec $H f_n = \omega_n f_n$, $n = 0, 1$.

Une particule (sans spin) dans le potentiel harmonique se trouve dans l'état initial

$$\psi_0(x) = A (f_0(x) + f_1(x)).$$

1. Déterminer le scalaire A (à une phase près) de telle sorte que $\|\psi_0\| = 1$.
2. Calculer l'évolution $\psi_t(x) = (e^{-itH}\psi_0)(x)$ et $|\psi_t(x)|^2$.
3. Calculer l'oscillation de la valeur moyenne $\langle x \rangle = \langle \psi_t | x | \psi_t \rangle$ de la position comme fonction du temps. Préciser son amplitude et sa pulsation.

3. Spin $\frac{1}{2}$ dans un champ magnétique.

(6 pts)

Une particule de spin $\frac{1}{2}$ est plongée dans un champ magnétique $\vec{B}$ constant et uniforme. L'énergie d'interaction (aimantation) est donnée par l'hamiltonien

$$H = -\vec{M} \cdot \vec{B}, \quad \vec{M} = \gamma \vec{S}$$

où $\vec{M}$ désigne le moment magnétique et $\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$ le spin de la particule. On supposera que $\vec{B} = B_0\vec{e}_z + B_1\vec{e}_x$.

1) Trouver les états propres $|\psi_{\pm}\rangle$ de H ainsi que leur énergie $E_{\pm}$ en fonction de $\omega = -\gamma B$ où $B = \|\vec{B}\|$ désigne l'intensité du champ magnétique.

2) A l'instant $t = 0$ la particule est dans l'état $|\psi(0)\rangle = |+\rangle$. Exprimer $|\psi(t)\rangle$ en fonction des $|\psi_{\pm}\rangle$. En déduire $|\psi(t)\rangle$ par intégration de l'équation de Pauli.

3) Montrer que la probabilité $\mathcal{P}_{++}(t)$ de mesurer le spin dans l'état $|+\rangle$ à l'instant t est donnée par (formule de Rabi)

$$\mathcal{P}_{++}(t) = 1 - \frac{\omega_1^2}{\omega_0^2 + \omega_1^2} \sin^2\left(\frac{t}{2} \sqrt{\omega_0^2 + \omega_1^2}\right)$$

avec $\omega_0 = -\gamma B_0$ et $\omega_1 = -\gamma B_1$.

4) En déduire la probabilité $\mathcal{P}_{+-}(t)$ de mesurer le spin dans l'état $|-\rangle$ à l'instant t .

Tourner SVP ... / ...

4. Interaction entre trois spins 1/2.

(6 pts)

On cherche à déterminer, par addition des moments angulaires, le spectre d'énergie d'un système de trois spins $\frac{1}{2}$ de vecteurs de spin respectifs, $\vec{S}_1$, $\vec{S}_2$ et $\vec{S}_3$ situés sur les sommets d'un triangle équilatéral, configuration qui assure une constante de couplage spin-spin identique pour tous.

Remarque : On ne calculera pas explicitement les états propres du moment angulaire total, et on pourra s'aider de la table des Clebsh-Gordan, ci-après.

1. Pour commencer, on ne considère que le couplage entre deux spins, disons $\vec{S}_1$ et $\vec{S}_2$ et on pose $\vec{J}' = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$.

Quelles sont les valeurs propres de $\vec{J}'^2$ et de la composante J'_z ?

2. L'Hamiltonien d'interaction entre ces deux spins est donné par

$$H' = \alpha \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2,$$

où α est une constante de couplage positive.

Exprimer H' en fonction des carrés de la norme de moments angulaires en jeu, et en déduire les niveaux d'énergie et leurs dégénérescences éventuelles.

3. On pose $\vec{J} = \vec{J}' + \vec{S}_3$. Quelles sont les valeurs propres de $\vec{J}^2$ et de la composante J_z ?
4. L'Hamiltonien d'interaction entre les trois spins est donné par

$$H = \alpha \left(\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 + \vec{S}_2 \cdot \vec{S}_3 + \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_3 \right).$$

Exprimer H en fonction des carrés de la norme de moments angulaires et en déduire les niveaux d'énergie et leurs dégénérescences éventuelles.

** FIN **

MQ-I – Correction du Partiel du 3/11/2009

1. Vrai ou faux ?.

1. Vrai : Les mesures simultanées ont lieu pour des observables qui commutent car agissant sur des espaces d'Hilbert distincts.
2. Faux : c'est tout le contraire !
3. Faux : En tant qu'état pur, le facteur -1 est une phase, donc c'est le même état : par exemple

$$\sigma_z|+\rangle = |+\rangle \quad \text{et} \quad \sigma_z e^{-\frac{i}{2}2\pi\sigma_z}|+\rangle = e^{-\frac{i}{2}2\pi\sigma_z}|+\rangle$$

montre que $|+\rangle$ et $e^{-\frac{i}{2}2\pi\sigma_z}|+\rangle$ représentent le même état propre de l'observable σ_z . Par contre, cette phase est mesurable dans un phénomène d'interférences, ce qui est différent au niveau de la mesure.

4. Vrai : c'est la base de la diagonalisation.

2. Évolution d'une superposition d'états de l'oscillateur harmonique.

1. Les états propres f_0 et f_1 sont par construction normés et orthogonaux entre eux (pas besoin d'utiliser leur forme explicite, tout comme celle du produit scalaire). Donc

$$||\psi_0||^2 = \langle \psi_0 | \psi_0 \rangle = |A|^2 \langle f_0 + f_1 | f_0 + f_1 \rangle = |A|^2 (\langle f_0 | f_0 \rangle + \langle f_1 | f_1 \rangle) = 2|A|^2$$

d'où $A = 1/\sqrt{2}$ à une phase près. Ainsi $\psi_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}(f_0 + f_1)$.

2. L'évolution est donnée par la superposition des évolutions de chacun des états propres en jeu

$$\psi_t = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-itH} (f_0 + f_1) = \frac{1}{\sqrt{2}} (e^{-it\omega_0} f_0 + e^{-it\omega_1} f_1) = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\omega t/2} (f_0 + e^{-i\omega t} f_1),$$

d'où la fonction d'onde

$$\psi_t(x) = \langle x | \psi_t \rangle = \sqrt{\frac{1}{2\sqrt{\pi}}} e^{-i\omega t/2} e^{-x^2/2} (1 + \sqrt{2} x e^{-i\omega t}).$$

Le calcul de la densité de probabilité est donné par

$$\begin{aligned} |\psi_t(x)|^2 &= \frac{1}{2\sqrt{\pi}} e^{-x^2} |1 + \sqrt{2} x e^{-i\omega t}|^2 = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} e^{-x^2} (1 + \sqrt{2} x e^{-i\omega t})(1 + \sqrt{2} x e^{i\omega t}) \\ &= \frac{1}{2\sqrt{\pi}} e^{-x^2} (1 + 2x^2 + 2\sqrt{2} x \cos(\omega t)). \end{aligned}$$

3. Pour le calcul de la position moyenne, on a

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \int_{\mathbb{R}} x |\psi_t(x)|^2 dx = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \int_{\mathbb{R}} x e^{-x^2} (1 + 2x^2 + 2\sqrt{2} x \cos(\omega t)) dx \\ &\stackrel{\text{parité}}{=} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \cos(\omega t) \int_{\mathbb{R}} x^2 e^{-x^2} dx \stackrel{\text{par parties}}{=} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \cos(\omega t) \frac{\sqrt{\pi}}{2} = \frac{1}{\sqrt{2}} \cos(\omega t), \end{aligned}$$

équation de laquelle on lit l'amplitude $1/\sqrt{2}$ et de pulsation ω , cette dernière étant bien celle de l'oscillateur harmonique de départ !

3. Spin $\frac{1}{2}$ dans un champ magnétique.

1) L'hamiltonien d'interaction (aimantation) est donc

$$H = -\gamma \vec{S} \cdot \vec{B} = -\frac{\gamma \hbar}{2} (B_1 \sigma_x + B_0 \sigma_z) = -\frac{\gamma \hbar}{2} \begin{pmatrix} B_0 & B_1 \\ B_1 & -B_0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \omega_0 & \omega_1 \\ \omega_1 & -\omega_0 \end{pmatrix}.$$

Mais puisque $\vec{B} = B (\sin \theta \vec{e}_x + \cos \theta \vec{e}_z)$ avec $B \equiv ||\vec{B}||$, on a en posant, $\cos \theta = B_0/B$ et $\sin \theta = B_1/B$, l'Hamiltonien est donné par l'observable de spin dans la direction $\hat{n}$ s'écrit

$$H = \omega S_{\hat{n}} = \frac{\hbar \omega}{2} \vec{\sigma} \cdot \hat{n}(\theta, \varphi = 0) = \frac{\hbar \omega}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix}, \quad \text{où } \omega \equiv -\gamma B = \sqrt{\omega_0^2 + \omega_1^2}.$$

Les deux vecteurs propres de $S_{\hat{n}}$ sont donnés par $|\pm \hat{n}\rangle \in \{|\theta, 0\rangle, |\pi - \theta, \pi\rangle\}$. Ainsi l'équation aux valeurs propres $H|\psi_{\pm}\rangle = E_{\pm}|\psi_{\pm}\rangle$ se résout avec

$$E_{\pm} = \pm \frac{\hbar \omega}{2} \quad \text{et} \quad |\psi_{+}\rangle = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) \\ \sin(\theta/2) \end{pmatrix}, \quad |\psi_{-}\rangle = \begin{pmatrix} -\sin(\theta/2) \\ \cos(\theta/2) \end{pmatrix}.$$

2) L'état de spin initial de notre particule est $|\psi(0)\rangle = |+\rangle$, superposition suivante d'états stationnaires : $|\psi(0)\rangle = \cos(\theta/2)|\psi_{+}\rangle - \sin(\theta/2)|\psi_{-}\rangle$. En intégrant l'équation de Schrödinger-Pauli $i\hbar (d/dt)|\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle$ dans la base $\{|\psi_{+}\rangle, |\psi_{-}\rangle\}$ qui diagonalise H , alors par évolution $|\psi(t)\rangle = \exp(-\frac{i}{\hbar}tH)|\psi(0)\rangle$, et on trouve qu'à tout instant

$$|\psi(t)\rangle = \cos(\theta/2)|\psi_{+}\rangle e^{-itE_{+}/\hbar} - \sin(\theta/2)|\psi_{-}\rangle e^{-itE_{-}/\hbar} = e^{-it\omega/2} \cos(\theta/2)|\psi_{+}\rangle - e^{it\omega/2} \sin(\theta/2)|\psi_{-}\rangle.$$

3) La probabilité qu'a le système d'être à l'instant t dans l'état $|\psi(0)\rangle = |+\rangle$ est donc $\mathcal{P}_{++}(t) = \text{Prob}(|\psi(t)\rangle = |+\rangle) = ||P_{+}\psi(t)||^2 = |\langle +|\psi(t)\rangle|^2$. Un calcul élémentaire donne

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{++}(t) &= |\cos(\theta/2) \langle +|\psi_{+}\rangle e^{-i\omega t/2} - \sin(\theta/2) \langle +|\psi_{-}\rangle e^{i\omega t/2}|^2 \\ &= |\cos^2(\theta/2) e^{-i\omega t/2} - \sin^2(\theta/2) e^{i\omega t/2}|^2 \\ &= |(\cos^2(\theta/2) + \sin^2(\theta/2)) \cos \frac{\omega t}{2} - i(\cos^2(\theta/2) - \sin^2(\theta/2)) \sin \frac{\omega t}{2}|^2 \\ &= |\cos(\omega t/2) - i \cos \theta \sin(\omega t/2)|^2 = 1 - \sin^2 \theta \sin^2(\omega t/2). \end{aligned}$$

Finalement, puisque $\sin \theta = \omega_1/\omega = \omega_1/\sqrt{\omega_0^2 + \omega_1^2}$, on obtient la *formule de Rabi* :

$$\mathcal{P}_{++}(t) = 1 - \frac{\omega_1^2}{\omega_0^2 + \omega_1^2} \sin^2 \left(\frac{t}{2} \sqrt{\omega_0^2 + \omega_1^2} \right).$$

$$4) \mathcal{P}_{+-}(t) = 1 - \mathcal{P}_{++}(t).$$

4. Interaction entre trois spins 1/2.

Remarque : les question 1 & 2 sont des questions qui ont été traitées explicitement en cours.

1. On additionne deux spins $j_1 = j_2 = 1/2$, donc $\frac{1}{2} \times \frac{1}{2}$ et le spin total obtenu peut prendre les valeurs $j' = 0, 1$ (la table des C-G est là pour aider, et, cf le cours!) d'où

$$J'^2 : \hbar^2 j'(j' + 1) = \begin{cases} 0 \\ 2\hbar^2 \end{cases} \quad \text{et} \quad J'_z : \hbar m' = \begin{cases} 0 \\ \hbar m', \quad m' = 0, \pm 1 \end{cases}$$

2. Les opérateurs de spin $\vec{S}_1$ et $\vec{S}_2$ commutent entre eux car n'agissent pas sur le même espace d'Hilbert, même-ci ces derniers sont isomorphes à $\mathbb{C}^2$. Ainsi,

$$J'^2 = (\vec{S}_1 + \vec{S}_2)^2 = S_1^2 + S_2^2 + 2\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$$

d'où on tire l'expression

$$H' = \frac{\alpha}{2} (J'^2 - S_1^2 - S_2^2).$$

Les niveaux d'énergie de H' sont labellés comme

$$\begin{aligned} E_{j'} &= \frac{\alpha\hbar^2}{2} (j'(j' + 1) - 2 \times \frac{1}{2}(1 + \frac{1}{2})) = \frac{\alpha\hbar^2}{2} (j'(j' + 1) - \frac{3}{2}) \\ &= \begin{cases} E'_0 = -\frac{3\alpha\hbar^2}{4} & \text{non dégénérée} \\ E'_1 = \frac{\alpha\hbar^2}{4} & \text{dégénérée 3 fois en } m' = 0, \pm 1 \end{cases} \end{aligned}$$

3. L'addition $\vec{J}' + \vec{S}_3$ correspond à deux compositions de spins :

- 1) soit $0 \times \frac{1}{2}$ ce qui donne un spin total $j = \frac{1}{2}$
- 2) soit $1 \times \frac{1}{2}$ ce qui donne un spin total $j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$ comme on peut le vérifier dans la table C-G.

On constate que deux types de spin $\frac{1}{2}$ sont ainsi obtenus. Ainsi pour

$$J^2 : \hbar^2 j(j+1) = \begin{cases} 3\hbar^2/4 & (\text{deux fois doublement dégénérée}) \\ 15\hbar^2/4 & \end{cases}$$

avec respectivement

$$J_z : \hbar m = \begin{cases} \hbar m, & m = \pm \frac{1}{2} \\ \hbar m, & m = \pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2} \end{cases}$$

4. Puisque les opérateurs de spin $1/2$ $\vec{S}_k$ $k = 1, 2, 3$ commutent entre eux, on calcule

$$J^2 = (\vec{S}_1 + \vec{S}_2 + \vec{S}_3)^2 = S_1^2 + S_2^2 + S_3^2 + 2(\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 + \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_3 + \vec{S}_2 \cdot \vec{S}_3)$$

d'où l'expression de

$$H = \frac{\alpha}{2} (J^2 - S_1^2 - S_2^2 - S_3^2).$$

Les niveaux d'énergie de H sont labellés comme

$$\begin{aligned} E_j &= \frac{\alpha\hbar^2}{2} (j(j+1) - 3 \times \frac{1}{2}(1 + \frac{1}{2})) = \frac{\alpha\hbar^2}{2} (j(j+1) - \frac{9}{4}) \\ &= \begin{cases} E_{1/2} = -\frac{3\alpha\hbar^2}{4} & \text{dégénérée 4 fois (deux fois } m = \pm \frac{1}{2}) \\ E_{3/2} = \frac{3\alpha\hbar^2}{4} & \text{dégénérée 4 fois en } m = \pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2} \end{cases} \end{aligned}$$

Notons que $2 \times 2 \times 2 = 4 + 4$.