LA MÉCANIQUE QUANTIQUE

PROBLÈMES RÉSOLUS

TOME 1

Victor Mikhailovich GALITSKY
Boris Mikhailovich KARNAKOV
Vladimir Il'yich KOGAN

EDP
SCIENCES

17, avenue du Hoggar
Parc d'Activité de Courtabœuf, BP 112
91944 Les Ulis Cedex A, France

Ouvrages Grenoble Sciences édités par EDP Sciences

Collection Grenoble Sciences

Chimie. Le minimum vital à savoir *(J. Le Coarer)* - Electrochimie des solides *(C. Déportes et al.)* - Thermodynamique chimique *(M. Oturan & M. Robert)* - Chimie organométallique *(D. Astruc)*

Introduction à la mécanique statistique *(E. Belorizky & W. Gorecki)* - Mécanique statistique. Exercices et problèmes corrigés *(E. Belorizky & W. Gorecki)* - La symétrie en mathématiques, physique et chimie *(J. Sivardière)* - La cavitation. Mécanismes physiques et aspects industriels *(J.P. Franc et al.)* - La turbulence *(M. Lesieur)* - Magnétisme : I Fondements, II Matériaux et applications *(sous la direction d'E. du Trémolet de Lacheisserie)* - Du Soleil à la Terre. Aéronomie et météorologie de l'espace *(J. Lilensten & P.L. Blelly)* - Sous les feux du Soleil. Vers une météorologie de l'espace *(J. Lilensten & J. Bornarel)* - Mécanique. De la formulation lagrangienne au chaos hamiltonien *(C. Gignoux & B. Silvestre-Brac)* – Analyse statistique des données expérimentales *(K. Protassov)*

Exercices corrigés d'analyse, Tomes 1 et 2 *(D. Alibert)* - Introduction aux variétés différentielles *(J. Lafontaine)* - Analyse numérique et équations différentielles *(J.P. Demailly)* - Mathématiques pour les sciences de la vie, de la nature et de la santé *(F. & J.P. Bertrandias)* - Approximation hilbertienne. Splines, ondelettes, fractales *(M. Attéia & J. Gaches)* - Mathématiques pour l'étudiant scientifique, Tomes 1 et 2 *(Ph.J. Haug)*

Bactéries et environnement. Adaptations physiologiques *(J. Pelmont)* - Enzymes. Catalyseurs du monde vivant *(J. Pelmont)* - La plongée sous-marine à l'air. L'adaptation de l'organisme et ses limites *(Ph. Foster)* - L'ergomotricité. Le corps, le travail et la santé *(M. Gendrier)* - Endocrinologie et communications cellulaires *(S. Idelman & J. Verdetti)*

L'Asie, source de sciences et de techniques *(M. Soutif)* - La biologie, des origines à nos jours *(P. Vignais)* - Naissance de la physique. De la Sicile à la Chine *(M. Soutif)*

Minimum Competence in Scientific English *(J. Upjohn, S. Blattes & V. Jans)* - Listening Comprehension for Scientific English *(J. Upjohn)* - Speaking Skills in Scientific English *(J. Upjohn, M.H. Fries & D. Amadis)*

Grenoble Sciences - Rencontres Scientifiques

Radiopharmaceutiques. Chimie des radiotraceurs et applications biologiques *(sous la direction de M. Comet & M. Vidal)* - Turbulence et déterminisme *(sous la direction de M. Lesieur)* - Méthodes et techniques de la chimie organique *(sous la direction de D. Astruc)*

AVANT-PROPOS

Ce recueil propose plus de 800 problèmes de divers niveaux se rapportant pour l'essentiel à la mécanique quantique non relativiste. Il est destiné aux physiciens, étudiants et thésards, expérimentateurs et théoriciens.

Les problèmes illustrent suivant les cas, les principes de la mécanique quantique, les instruments mathématiques ou les exemples d'application concrètes, essentiellement en physique atomique, en physique nucléaire et en physique des particules. Outres les problèmes traditionnels de la mécanique quantique, le recueil comprend un grand nombre de problèmes nouveaux inspirés par les derniers développements de la mécanique quantique et par ses multiples applications physiques. Une tel ouvrage est en fait un complément naturel des manuels de mécanique quantique tels que ceux de L.D. Laundau et E.M. Lifchitz, de Cl. Cohen-Tannoudji, B. Diu et F. Lalöe ou de A. Messiah.

Tous les problèmes proposés sont corrigés souvent de façon détaillée. Les solutions permettent une acquisition pratique des connaissances théoriques.

Ce livre est une traduction améliorée du " Recueil de problèmes de mécanique quantique " de V.M. Galitsky, B.M. Karnakov et V.I. Kogan (publié par Nauka en russe), problèmes qui furent proposés aux étudiants de l'Institut des ingénieurs et des physiciens de Moscou.

Le lecteur dispose pour optimiser son travail la liste des notations les plus courantes et des valeurs numériques des constantes nécessaires à la résolution de problèmes de physique de l'atome et du noyau. Notons que, dans ce livre, on utilise le système d'unités CGS qui est mieux adapté à ce type de problèmes. Une annexe fournit les résultats des problèmes de mécanique quantique de l'oscillateur linéaire, de l'atome d'hydrogène et un complément sur certaines fonctions spéciales (les harmoniques sphériques, les fonctions de Bessel, etc).

L'ouvrage sera particulièrement utile aux étudiants de physique de second et troisème cycle (les exercices correspondant au niveau du troisème cycle sont marqués par une étoile) mais également à tous ceux qui sont concernés par la mécanique quantique.

SYMBOLES ET CONSTANTES

SYMBOLES

La signification des symboles utilisés est expliquée soit dans les énoncés soit dans la solution de chaque problème. Il existe, toutefois, un certain nombre de grandeurs pour lesquelles on a utilisé des notations standards. *Les notations de ces grandeurs dans tous les cas où cela ne conduit pas à des ambiguïtés n'ont pas été expliquées dans le texte.*

$\hat{}$	symbole d'opérateur ou de matrice
$\tilde{\hat{f}}$	l'opérateur transposé de l'opérateur $\hat{f}$
$\hat{f}^*$	l'opérateur complexe conjugué de l'opérateur $\hat{f}$
$\hat{f}^\dagger$	l'opérateur conjugué hermitien de l'opérateur $\hat{f}$
$\langle m\|\hat{f}\|n\rangle \equiv f_{mn} \equiv f_n^m$ $\equiv \int \Psi_m^* \hat{f} \Psi_n d\tau$	élément matriciel de l'opérateur $\hat{f}$
$\propto$	symbole de proportionnalité
$\sim$	symbole d'ordre de grandeur
$\Psi_f(q)$	dans la notation de la fonction d'onde, q désigne en général l'ensemble des variables de la représentation utilisée, tandis que f représente les valeurs propres des grandeurs physiques ou bien les nombres quantiques de l'état considéré
Ψ_n^{osc}	fonction propre de l'oscillateur harmonique
e	charge de la particule[1]
c	vitesse de la lumière
$\hat{H}$	hamiltonien
E	énergie
$\mathbf{E}$, $\mathbf{B}$	intensité des champs électrique et magnétique
$\mathbf{A}$	potentiel vecteur
U	énergie potentielle (potentiel)
$\hat{V}$	opérateur perturbation

1 Mais s'il s'agit d'une particule réelle (électron, proton, noyau atomique, etc.), e désigne la charge élémentaire $e \approx 4,80 \times 10^{-10}$ CGS (de sorte que la charge de l'électron vaut $-e$, celle du proton $+e$, celle du noyau atomique Ze, etc.).

$\mathbf{d}$	moment dipolaire
a_0	rayon de Bohr
δ_l	déphasage
$\vec{\sigma}$	matrices de Pauli
w, W	probabilité de transition, probabilité de transition par unité de temps
Z, Ze	charge du noyau
R	rayon du potentiel
m, M	masse, nombre quantique magnétique
μ	masse, moment magnétique
A	nombre atomique du noyau
$\mathbf{p}$, $\mathbf{P}$	impulsion
$\mathbf{k}$	vecteur d'onde
ω	fréquence (pulsation)
l, L, j, J	moment (orbital, total)
s, S	spin
$J_\nu(z)$	fonction de Bessel
$H_n(x)$	polynôme d'Hermite
$Y_{lm}(\theta, \varphi)$	harmonique sphérique

CONSTANTES

La résolution des nombreux problèmes de physique atomique, de physique moléculaire et de physique nucléaire nécessite des calcul numériques destinés à comparer les solutions aux données expérimentales (figurant dans les énoncés). Pour faciliter les calculs, on donne ici les valeurs numériques des principales constantes physiques[2].

Constante de Planck $\hbar = 1,054 \times 10^{-27}$ erg $\times$ s
Charge élémentaire $e = 4,80 \times 10^{-10}$ unités CGS
Masse de l'électron $m_e = 9,11 \times 10^{-28}$ g
Vitesse de la lumière $c = 3,00 \times 10^{-10}$ cm/s
Rayon de Bohr (unité de longueur atomique) $a_0 = 0,53 \times 10^{-8}$ cm
Unité atomique d'énergie $m_e e^4/\hbar^2 = 4,36 \times 10^{-11}$ erg $\approx$ 27,2 eV
Unité atomique de fréquence $m_e e^4/\hbar^3 = 4,13 \times 10^{16}$ s^{-1}
Unité atomique d'intensité du champ électrique $e/a_0^2 = 5,14 \times 10^9$ V/cm
Constante de structure fine $\alpha = e^2/\hbar c = 1/137$
Masse du proton $m_p = 1836 m_e = 1,67 \times 10^{-24}$ g
Différence de masses entre neutron et proton $m_n - m_p \approx 2,5 m_e$
Energie au repos de l'électron $m_e c^2 = 0,51$ MeV
Rayon du noyau $R \approx 1,2 \times 10^{-13} A^{1/3}$ cm
1 eV $= 1,60 \times 10^{-12}$ erg

2 Ces valeurs sont approchées ; pour plus de précision voir les ouvrages spécialisés.

CHAPITRE 1

OPÉRATEURS EN MÉCANIQUE QUANTIQUE

1.1 NOTIONS GÉNÉRALES DE LA THÉORIE DES OPÉRATEURS LINÉAIRES

1.1. Soit les opérateurs suivants $(-\infty < x < +\infty)$:

a) réflexion $\widehat{R}$: $\widehat{R}\Psi(x) \equiv \Psi(-x)$;
b) translation $\widehat{T}_a$: $\widehat{T}_a\Psi(x) \equiv \Psi(x+a)$;
c) changement d'échelle $\widehat{M}_c$: $\widehat{M}_c\Psi(x) \equiv \sqrt{c}\Psi(cx)$, $c > 0$;
d) conjugaison complexe $\widehat{K}$: $\widehat{K}\Psi(x) \equiv \Psi^*(x)$.

Ces opérateurs sont-ils linéaires ?

Chercher la forme des opérateurs, qui par rapport à ceux mentionnés, sont : transposés, complexes conjugués, conjugués hermitiens, inverses.

1.2. Chercher les opérateurs qui sont transposés, complexes conjugués et conjugués hermitiens des opérateurs suivants :

a) id/dx, $(-\infty < x < +\infty)$;
b) $i\partial/\partial r$, où r est la variable radiale du système de coordonnées sphériques (le domaine de variation de r est $0 \leq r < \infty$).

1.3. Pour un opérateur linéaire[1] arbitraire $\widehat{L}$ montrer que :

a) $(\widehat{L}^\dagger)^\dagger = \widehat{L}$;
b) les opérateurs $\widehat{L}^\dagger\widehat{L}$ et $\widehat{L}\widehat{L}^\dagger$ sont hermitiens ;
c) les opérateurs $\widehat{L} + \widehat{L}^\dagger$ et $i(\widehat{L} - \widehat{L}^\dagger)$ sont hermitiens.

1.4. Montrer que si l'opérateur $\widehat{C}$ est hermitien, l'opérateur $\widehat{G} = \widehat{A}\widehat{C}\widehat{A}^\dagger$ l'est également.

---

1 Dans la suite tous les opérateurs sont supposés "linéaires" et le terme linéaire sera omis pour abréger.

1.5. Montrer qu'un opérateur arbitraire $\widehat{F}$ peut être mis sous la forme $\widehat{F} = \widehat{A} + i\widehat{B}$, où $\widehat{A}$ et $\widehat{B}$ sont des opérateurs hermitiens.

1.6. Montrer que si les opérateurs $\widehat{A}$ et $\widehat{B}$ sont hermitiens, les opérateurs $\widehat{A}\widehat{B} + \widehat{B}\widehat{A}$ et $i(\widehat{A}\widehat{B} - \widehat{B}\widehat{A})$ le sont également.

1.7. Soit un opérateur $\widehat{F}$ non hermitien, dans quel cas l'opérateur $\widehat{F}^2$ est-il hermitien ?

1.8. Montrer que les opérations algébriques sur les commutateurs possèdent la propriété de distributivité, autrement dit que le commutateur de la somme est égale à la somme des commutateurs :

$$\left[\sum_i \widehat{A}_i, \sum_k \widehat{B}_k\right] = \sum_{i,k} \left[\widehat{A}_i, \widehat{B}_k\right].$$

1.9. Soit trois opérateurs $\widehat{A}$, $\widehat{B}$ et $\widehat{C}$. Exprimer le commutateur du produit $\widehat{A}\widehat{B}$ et $\widehat{C}$ au moyen des commutateurs $[\widehat{A}, \widehat{C}]$ et $[\widehat{B}, \widehat{C}]$.

1.10. Démontrer l'identité de Jacobi pour les commutateurs des opérateurs $\widehat{A}$, $\widehat{B}$ et $\widehat{C}$:

$$[\widehat{A}, [\widehat{B}, \widehat{C}]] + [\widehat{B}, [\widehat{C}, \widehat{A}]] + [\widehat{C}, [\widehat{A}, \widehat{B}]] = 0.$$

1.11. Est-ce que deux matrices $\widehat{P}$, $\widehat{Q}$ de rang fini N peuvent satisfaire à la relation de commutation $[\widehat{P}, \widehat{Q}] = -i\widehat{I}$?

1.12. Soit $F(z)$ une fonction de la variable z qu'on développe sous forme de série

$$F(z) = \sum_n c_n z^n,$$

et un opérateur $\widehat{f}$. On définit l'opérateur $\widehat{F}$, par :

$$\widehat{F} \equiv \sum_n c_n \widehat{f}^n.$$

En utilisant cette définition, donner l'expression des opérateurs suivants :
a) $\exp\,(i\pi\widehat{R})$;
b) $\widehat{T}_a = \exp\,(a\frac{d}{dx})$
(l'opérateur $\widehat{R}$ est défini dans 1.1). En rapport avec ce problème, voir aussi le problème 1.51.

1.13. En supposant λ petit, trouver le développement de l'opérateur $(\widehat{A} - \lambda\widehat{B})^{-1}$ suivant les puissances de λ.

1.14. Démontrer la relation suivante :

$$e^{\widehat{A}}\widehat{B}e^{-\widehat{A}} = \widehat{B} + [\widehat{A}, \widehat{B}] + \frac{1}{2!}\,[\widehat{A}, [\widehat{A}, \widehat{B}]] + \ldots$$

1.15. Dans le cas général, l'opérateur linéaire $\widehat{L}$ peut être associé à un opérateur intégral linéaire, c'est-à-dire

$$\Phi(\xi) \equiv \widehat{L}\Psi(\xi) = \int L(\xi, \xi')\Psi(\xi')d\xi',$$

où $L(\xi, \xi')$ est appelé le noyau de l'opérateur $\widehat{L}$ (ξ étant l'ensemble des variables de la représentation utilisée).

Comment les noyaux des opérateurs $\widehat{L}^*$, $\widetilde{\widehat{L}}$, $\widehat{L}^\dagger$ sont-ils reliés au noyau $L(\xi, \xi')$ de l'opérateur $\widehat{L}$? Chercher les noyaux des opérateurs $\widehat{R}$, $\widehat{M_c}$, $\widehat{T_a}$, $\widehat{x} \equiv x$, $\widehat{p} \equiv -i\hbar d/dx$. Les opérateurs $\widehat{R}$, $\widehat{M_c}$, $\widehat{T_a}$ sont définis dans 1.1.

1.16. Si le noyau $L(x, x')$ de l'opérateur hermitien $\widehat{L}$ est une fonction de la forme :
a) $L = f(x + x')$;
b) $L = f(x - x')$;
c) $L = f(x)g(x')$,
quelles restrictions sont imposées aux fonctions $f(x)$ et $g(x)$ du fait de l'hermiticité de l'opérateur $\widehat{L}$?

1.17. Quelle forme prend le noyau $L(x, x')$ de l'opérateur $\widehat{L}$ si ce dernier commute avec l'opérateur
a) coordonnée $\widehat{x} \equiv x$;
b) impulsion $\widehat{p} \equiv -i\hbar d/dx$?

1.18. Montrer que l'opérateur $\widehat{F}$ qui commute avec les opérateurs $\widehat{x}$ et $\widehat{p}$ (cas unidimensionnel) est multiple de l'opérateur unitaire, c'est-à-dire $\widehat{F} \equiv F_0\widehat{I}$.

1.2 FONCTIONS PROPRES, VALEURS PROPRES, MOYENNES

1.19. Dans l'état décrit par la fonction d'onde de la forme

$$\Psi(x) = C \exp\left[\frac{ip_0 x}{\hbar} - \frac{(x - x_0)^2}{2a^2}\right],$$

où p_0 et x_0 sont des paramètres réels, chercher la distribution de probabilité de la coordonnée x. Déterminer les valeurs moyennes et les fluctuations (écarts quadratiques moyens) de la coordonnée et de l'impulsion de la particule.

1.20. La fonction d'onde d'une particule est donnée par la forme

$$\Psi(x) = C \exp\,(ip_0 x/\hbar)\varphi(x),$$

$\varphi(x)$ étant une fonction réelle. Montrer que p_0 est l'impulsion moyenne de la particule dans l'état considéré.

1.21. Montrer que la valeur moyenne du moment dipolaire d'un système de particules chargées dans un état ayant une parité déterminée vaut zéro.

1.22. Montrer que les valeurs moyennes des opérateurs hermitiens $\widehat{L}^\dagger\widehat{L}$ et $\widehat{L}\widehat{L}^\dagger$ ($\widehat{L}$ étant un opérateur linéaire) sont positives ou nulles.

1.23. Montrer que les valeurs propres de l'opérateur carré de toute grandeur physique sont positives ou nulles.

1.24. Soit un opérateur hermitien $\widehat{f}$ satisfaisant à la relation $\widehat{f}^2 = c\widehat{f}$, où c est un nombre réel. Quelles sont les valeurs propres de cet opérateur ?

1.25. Déterminer les fonctions propres et les valeurs propres d'une grandeur physique formée par une combinaison linéaire des composantes d'impulsion et de coordonnée dans une même direction :

$$\widehat{f} = \alpha\widehat{p} + \beta\widehat{x}.$$

Montrer que les fonctions propres obtenues sont orthogonales et les normaliser. Etudier les deux cas limites : $\alpha \to 0$ et $\beta \to 0$.

1.26. Déterminer les fonctions propres et les valeurs propres de l'opérateur hermitien $\widehat{F}$ dont le noyau est de la forme $F(x, x') = f(x)f^*(x')$. Quelle est la multiplicité des valeurs propres de cet opérateur ?

1.27. L'opérateur hermitien (la matrice) $\widehat{f}$ possède N valeurs propres différentes. Montrer que l'opérateur $\widehat{f}^N$ s'exprime linéairement en fonction des opérateurs suivants : $\widehat{I}, \widehat{f}, \ldots, \widehat{f}^{N-1}$. En guise d'exemple étudier l'opérateur réflexion $\widehat{R}$.

1.28. Soit un opérateur hermitien $\widehat{f}(\lambda)$ dépendant d'un paramètre λ et possèdant un spectre discret de valeurs propres. Montrer la relation :

$$\frac{\partial f_n(\lambda)}{\partial\lambda} = \overline{\frac{\partial\widehat{f}(\lambda)}{\partial\lambda}},$$

où l'indice n numérote les valeurs propres de $\widehat{f}$ et où la moyenne dans le second membre de l'égalité est prise dans l'état propre $\Psi_n(\lambda; q)$.[2]

2 Généralement, quand le spectre des valeurs propres $\widehat{f}(\lambda)$ est composé de parties discrète et continue, l'assertion du problème reste valable pour la partie discrète du spectre.

1.29. Les opérateurs hermitiens $\widehat{A}, \widehat{B}, \widehat{L}$ ont les commutateurs suivants :

$$[\widehat{A}, \widehat{L}] = 0, \qquad [\widehat{B}, \widehat{L}] = 0 \quad \text{mais} \quad [\widehat{A}, \widehat{B}] \neq 0.$$

Montrer que parmi les valeurs propres de l'opérateur $\widehat{L}$ il y a obligatoirement des valeurs propres dégénérées.

1.30. Soit deux opérateurs de deux grandeurs physiques $\widehat{A}$ et $\widehat{B}$ dont le commutateur est de la forme $[\widehat{A}, \widehat{B}] = i\widehat{C}$ ($\widehat{C}$ étant un opérateur hermitien). Justifier la relation d'incertitude

$$\overline{(\widehat{A} - \overline{A})^2}\ \overline{(\widehat{B} - \overline{B})^2} \geq \overline{C}^2/4,$$

où toutes les valeurs moyennes dans l'expression correspondent à un même état du système.

Etudier, en particulier, les opérateurs $\widehat{x}$ et $\widehat{p}$ et chercher pour ce cas la forme explicite des fonctions d'onde de la particule pour laquelle le produit des incertitudes prend une valeur minimale.

Etudier également la relation d'incertitude pour les opérateurs $\widehat{l}_z = -i\partial/\partial\varphi$ et $\widehat{\varphi} = \varphi$.

1.31. Soit un système dans un état décrit par la fonction d'onde Ψ_A où la grandeur physique A a une valeur déterminée. Est-ce que dans cet état la grandeur B prend aussi une valeur déterminée dans le cas où les opérateurs $\widehat{A}$ et $\widehat{B}$:
a) ne commutent pas ;
b) commutent ?

1.32. Montrer que les opérateurs des composantes du rayon vecteur $\widehat{\mathbf{r}}$ et de l'impulsion $\widehat{\mathbf{p}}$ d'une particule anticommutent avec l'opérateur réflexion $\widehat{R}$ tandis que les opérateurs des composantes du moment cinétique $\widehat{\mathbf{L}}$ commutent avec $\widehat{R}$.

1.33. Dans l'état décrit par la fonction d'onde Ψ_{ab}, les grandeurs physiques A et B possèdent des valeurs déterminées. Que peut-on dire des valeurs propres a, b de ces grandeurs dans le cas où les opérateurs $\widehat{A}$ et $\widehat{B}$ anticommutent ? En guise d'illustration, étudier les opérateurs $\widehat{x}$ et $\widehat{R}$.

1.34. Comme on le sait, les opérateurs hermitiens (plus précisément, auto-adjoints) possèdent les propriétés suivantes : les valeurs propres de ces opérateurs sont des nombres réels ; les fonctions propres correspondant aux différentes valeurs propres sont orthogonales et constituent un système complet. Mais si l'opérateur linéaire n'est pas hermitien, ses valeurs propres et ses fonctions propres peuvent avoir des propriétés différentes. Pour illustrer ceci, rechercher les valeurs propres et les fonctions propres des opérateurs suivants, puis établir leurs propriétés :
a) $x - d/dx$;
b) $x + d/dx$;

c) $\widehat{a} = \begin{pmatrix} 1 & i \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$;

d) $\widehat{b} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$.

1.35. L'opérateur $\widehat{P}(f_i)$ projetant sur les états à valeur déterminée f_i de la grandeur physique f est appelée *projecteur*. Son action sur la fonction Ψ_{f_k} est la suivante :

$$\widehat{P}(f_i)\Psi_{f_k} = \delta_{f_i,f_k}\Psi_{f_i} = \begin{cases} \Psi_{f_i}, & f_i = f_k, \\ 0, & f_i \neq f_k. \end{cases}$$

Montrer que l'opérateur $\widehat{P}(f_i)$ possède les propriétés suivantes :

a) $\widehat{P}(f_i)$ est un opérateur hermitien ;

b) $\widehat{P}^2(f_i) = \widehat{P}(f_i)$.

On peut également parler de projecteurs $\widehat{P}(\{f\})$ projetant sur des états où la grandeur physique f possède non pas une valeur déterminée f_i mais prend une des valeurs d'un certain ensemble $\{f\} = \{f_{i_1} f_{i_2}, \ldots\}$. Dans ce cas, les propriétés des projecteurs mentionnées plus haut se conservent. En particulier, l'opérateur $\widehat{P} = \widehat{I} - \widehat{P}(f_i)$ est aussi un projecteur. Sur quels états cet opérateur projette-t-il ?

Notons que la notion de projecteur peut évidemment être généralisée dans le cas où le rôle de f_i est tenu par certaines grandeurs physiques constituant une partie de l'ensemble complet.

1.36. Quel est le sens physique de la valeur moyenne du projecteur $\overline{\widehat{P}(f_i)}$ dans l'état décrit par la fonction d'onde Ψ ?

1.37. Chercher l'opérateur projetant sur les états dans lesquels la coordonnée de la particule vérifie $x \geq 0$.

1.38. Chercher les projecteurs $\widehat{P}_+$ et $\widehat{P}_-$ projetant sur les états représentés par des fonctions respectivement paires et impaires par rapport à l'inversion des coordonnées de la particule.

1.39. Montrer que l'opérateur hermitien $\widehat{F}$ étudié dans le problème 1.26 peut, une fois multiplié par une grandeur constante c, se transformer en projecteur : $\widehat{P} = c\widehat{F}$. Sur quel état l'opérateur $\widehat{P}$ projette-t-il ?

1.40. L'opérateur hermitien $\widehat{f}$ prend N valeurs propres différentes. Trouver la forme du projecteur $\widehat{P}(f_i)$ sur les états ayant des valeurs f_i fixées de la grandeur f.

1.3 ELÉMENTS DE THÉORIE DES REPRÉSENTATIONS. TRANSFORMATIONS UNITAIRES

1.41. Ecrire les fonctions propres du rayon vecteur Ψ_{r_0} et de l'impulsion Ψ_{p_0} normées de façon adéquate en représentation $\mathbf{r}$ et $\mathbf{p}$.

1.42. Chercher en représentation $\mathbf{p}$ la fonction d'onde de l'état de la particule étudié dans 1.19.

1.43. A partir de la fonction d'onde $\Psi(x, y, z)$, calculer la probabilité de présence de la particule telle que z et p_y vérifient $z_1 < z < z_2$ et $p_1 < p_y < p_2$.

1.44. Chercher la forme explicite des opérateurs réflexion $\widehat{R}$ et translation $\widehat{T}_a$ en représentation $\mathbf{p}$.

1.45. Montrer que lorsque l'on passe de la représentation $\mathbf{r}$ à la représentation $\mathbf{p}$, la parité de la fonction d'onde par rapport à son argument ne change pas.

1.46. Un opérateur linéaire quelconque est, en général, un opérateur intégral. Etablir la relation entre $L(x, x')$ et $L(p, p')$ qui sont les noyaux d'un même opérateur $\widehat{L}$ en représentation respectivement x et p.

1.47. Chercher la forme des opérateurs $\widehat{r^{-1}}$ et $\widehat{r^{-2}}$ en représentation $\mathbf{p}$. Vérifier l'égalité

$$\widehat{r^{-2}} = \widehat{r^{-1}}\,\widehat{r^{-1}}.$$

1.48. Soit deux opérateurs hermitiens $\widehat{A}$ et $\widehat{B}$. Indiquer la relation liant les fonctions propres de l'opérateur $\widehat{A}$ en représentation B et les fonctions propres de l'opérateur $\widehat{B}$ en représentation A. Pour illustrer ce résultat, étudier les opérateurs $\widehat{x}$ et $\widehat{p}$.

1.49. Notons $\Psi_i \equiv \Psi_{\lambda_i}$ l'ensemble complet des fonctions d'onde supposées normées. Exprimer en fonction des éléments matriciels

$$f_{ik} = \int \Psi_i^* \widehat{f} \Psi_k d\tau$$

d'un opérateur arbitraire $\widehat{f}$:

a) le résultat de l'action de l'opérateur $\widehat{f}$ sur la fonction Ψ_i ;

b) le résultat de l'action de l'opérateur $\widehat{f}$ sur la fonction d'onde d'un état arbitraire en représentation λ.

Comparer les résultats obtenus.

1.50. Quelle est la forme du projecteur $\widehat{P}(f_i)$ sur l'état de valeur déterminée f_i de la grandeur physique f en représentation f ?

1.51. Quel sens peut-on attribuer à l'opérateur $\widehat{F}$ de la la forme $\widehat{F} = F(\widehat{f})$, où $F(z)$ est une fonction arbitraire de la variable z, $\widehat{f}$ étant un opérateur hermitien ? Quelle est l'importance de l'hypothèse d'hermiticité de $\widehat{f}$? En guise d'exemple, étudier l'opérateur $1/\sqrt{-\Delta}$, où Δ est un laplacien.

Montrer que si la fonction $F(z)$ est représentée sous la forme d'une série

$$F(z) = \sum_n c_n z^n,$$

l'opérateur $\widehat{F}$, introduit dans ce problème, est identique à celui du problème 1.12.

1.52. Chercher la forme de l'opérateur $\widehat{F} = F(\widehat{f})$, où $\widehat{f}$ est un opérateur hermitien et $F(z)$ une fonction quelconque, dans le cas où l'opérateur $\widehat{f}$ possède N valeurs propres distinctes. Etudier, en particulier, les cas $N = 2$ et $N = 3$; dans ce dernier cas, on suppose que le spectre des valeurs propres est composé des valeurs $0, \pm f_0$.

1.53. Chercher la valeur explicite de l'opérateur $\widehat{F} = F(\widehat{P})$, où $F(z)$ est une fonction donnée, $\widehat{P}$ un projecteur.

1.54. Parmi les opérateurs étudiés dans 1.1 et 1.2, lesquels peuvent être considérés comme unitaires ?

1.55. Un opérateur unitaire satisfait à l'équation $\widehat{U}^2 = \widehat{U}$. Trouver la forme explicite de cet opérateur.

1.56. Soit $\widehat{U}$ un opérateur unitaire. Dans quel cas l'opérateur $\widehat{U}' = c\widehat{U}$, c étant un nombre quelconque, est aussi un opérateur unitaire ?

1.57. Montrer que le produit $\widehat{U}_1\widehat{U}_2$ de deux opérateurs unitaires est un opérateur unitaire.

1.58. Est-ce qu'un opérateur (matrice) unitaire peut être aussi hermitien ? En guise d'exemple, étudier l'opérateur réflexion $\widehat{R}$.

1.59. Montrer que l'opérateur de la forme $\widehat{U} = \exp(i\widehat{F})$ est unitaire si $\widehat{F}$ est un opérateur hermitien.

1.60. Montrer que si $\widehat{A}$ et $\widehat{B}$ commutent et sont hermitiens, l'opérateur

$$\widehat{U} = (\widehat{A} + i\widehat{B})(\widehat{A} - i\widehat{B})^{-1}$$

est unitaire. Représenter sous la forme indiquée l'opérateur unitaire $\widehat{U} = \exp\,(i\widehat{F})$ (voir 1.59).

1.61. Montrer que dans les transformations unitaires d'opérateurs $\widehat{A}' = \widehat{U}\widehat{A}\widehat{U}^\dagger$, les relations algébriques entre les opérateurs de la forme

$$F(\widehat{A}_i) \equiv c_0 + \sum_i c_i \widehat{A}_i + \sum_{i,k} c_{ik} \widehat{A}_i \widehat{A}_k + \ldots = 0$$

conservent leur forme, c'est-à-dire que $F(\widehat{A}'_i) = 0$.

1.62. Les matrices carrées $\widehat{A}$ et $\widehat{A}'$ de même rang sont liées par la transformation unitaire $\widehat{A}' = \widehat{U}\widehat{A}\widehat{U}^\dagger$. Montrer que les traces et les déterminants de ces matrices sont identiques.

1.63. Quelle est la propriété du déterminant d'une matrice unitaire ? Montrer que si $\widehat{U}' = c\widehat{U}$, il existe une valeur de c telle que $\det \widehat{U}' = 1$.

1.64. Chercher le déterminant de la matrice unitaire de la forme $\widehat{U} = \exp(i\widehat{F})$, où $\widehat{F}$ est une matrice hermitienne.

1.65. Combien y a-t-il de matrices carrées indépendantes de rang N qui soient :
a) hermitiennes ;
b) unitaires ?

Quel est le nombre de matrices unitaires de rang N et de déterminant égal à 1.

1.66. Le passage d'une représentation à une autre peut être assimilé à une transformation unitaire. Le montrer pour le passage de la représentation x à la représentation p.

1.67. Trouver la loi de transformation des opérateurs $\widehat{x}$ et $\widehat{p}$ dans le cas où les transformations unitaires sont réalisées par :
a) l'opérateur réflexion $\widehat{R}$;
b) l'opérateur translation $\widehat{T}_a$;
c) l'opérateur changement d'échelle $\widehat{M}_c$.

Les opérateurs $\widehat{R}$, $\widehat{T}_a$, $\widehat{M}_c$ ont été introduits dans 1.1.

CHAPITRE 2

MOUVEMENT UNIDIMENSIONNEL

2.1 ETATS STATIONNAIRES DU SPECTRE DISCRET

2.1. Chercher les niveaux d'énergie et les fonctions d'onde normées des états stationnaires d'une particule dans un puits de potentiel infiniment profond de largeur a :

$$U(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < a, \\ \infty, & x < 0,\ x > a. \end{cases}$$

Discuter les propriétés de symétrie des fonctions obtenues par l'inversion des coordonnées par rapport au centre du puits de potentiel (transformation de la forme $x \to x' = -x + a$).

2.2. Dans les états stationnaires de la particule du problème précédent, déterminer la fonction de distribution de la coordonnée et de l'impulsion de la particule, les valeurs moyennes de ces grandeurs et leurs fluctuations (écarts quadratiques moyens).

2.3. Chercher l'énergie cinétique moyenne et ses fluctuations dans les états stationnaires du problème 2.1.

2.4. L'état d'une particule soumise à un puits de potentiel infiniment profond et de largeur a $(0 < x < a)$ est décrit par la fonction d'onde de la forme :
a) $\Psi(x) = Ax(x - a)$;
b) $\Psi(x) = B\sin^2(\pi x/a)$.

Chercher la distribution de probabilités de l'énergie de la particule, la valeur moyenne et la fluctuation quadratique moyenne de l'énergie.

2.5. Déterminer, pour la particule du problème 2.1, la forme des opérateurs coordonnée et impulsion en représentation énergie.

2.6. Chercher les variations des niveaux d'énergie et des fonctions d'onde des états stationnaires d'un oscillateur linéaire chargé lorsqu'il est soumis à un champ électrique homogène orienté suivant l'axe des oscillations.

2.7. Chercher les niveaux d'énergie pairs et impairs du spectre discret d'une particule dans un puits de potentiel symétrique de la forme (fig. 1)

$$U(x) = \begin{cases} -U_0, & |x| < a, \\ 0, & |x| > a. \end{cases}$$

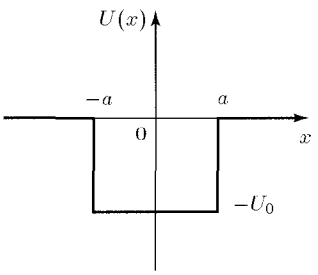

Figure 1

Quel est le nombre d'états du spectre discret (nombre d'états liés) en fonction de la profondeur du puits ? Quelle est la condition d'apparition de nouveaux états liés lorsque la profondeur du puits augmente ?

Chercher les premiers niveaux d'énergie dans le cas d'un puits profond $U_0 \gg \hbar^2/ma^2$ et déterminer le décalage de ces niveaux par rapport aux niveaux d'énergie de la particule dans un puits de potentiel infiniment profond (voir problème 2.1).

2.8. Etudier un puits de potentiel symétrique (voir problème précédent) de faible profondeur $U_0 \ll \hbar^2/ma^2$. Montrer que ce puits possède un état lié et obtenir une expression approchée de l'énergie et de la fonction d'onde normée de cet état. Chercher les valeurs moyennes $\overline{U(x)}$ et $\overline{T} = \overline{p^2/2m}$.

2.9. En se servant du résultat obtenu dans le problème précédent, chercher les fonctions de distribution de la coordonnée et de l'impulsion d'une particule dans l'état fondamental dans un puits de potentiel peu profond. Trouver la probabilité de présence de la particule dans le puits et. Calculer le produit des incertitudes sur la coordonnée et sur l'impulsion.

2.10. Soit un potentiel de la forme $U(x) = \tilde{U}(x) + \alpha\delta(x - x_0)$, où $\tilde{U}(x)$ est une fonction bornée et $\delta(x)$ est la distribution δ de Dirac. Comment se comportent la solution $\Psi(x)$ de l'équation de Schrödinger et sa dérivée au voisinage du point x_0 ?

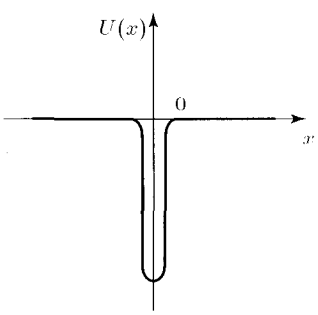

Figure 2

2.11. Chercher les niveaux d'énergie et les fonctions d'onde normées des états liés d'une particule dans le champ

$$U(x) = -\alpha\delta(x)$$

avec $\alpha > 0$ (fig. 2).

Chercher les valeurs moyennes de l'énergie cinétique et de l'énergie potentielle de ces états. Comparer au résultat du problème 2.8.

2.12. Chercher la correspondance entre les niveaux d'énergie et les fonctions d'onde normées des états liés stationnaires d'une particule dans les champs $U(x)$ et $\tilde{U}(x)$ où :

$$\tilde{U}(x) = \begin{cases} U(x), & x > 0, \\ \infty, & x < 0. \end{cases}$$

Le potentiel $U(x)$ est symétrique, c'est-à-dire que $U(x) = U(-x)$ (fig. 3).

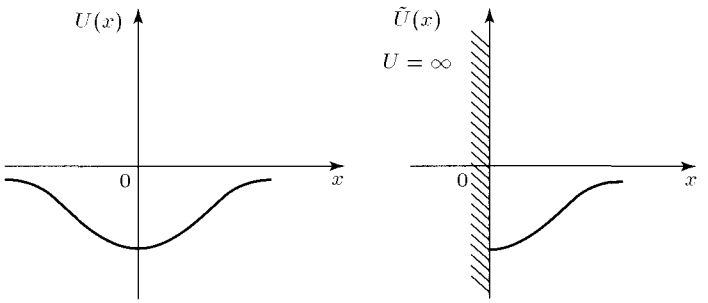

Figure 3

2.13. En utilisant le principe variationnel, montrer que dans tout champ $U(x)$ satisfaisant aux conditions : $U(x) \to 0$ pour $x \to \pm\infty$ et

$$\int_{-\infty}^{+\infty} U(x)dx < 0,$$

il y a toujours au moins un état lié.

2.14. Une particule se trouve dans le champ de la forme $U(x) = U_0 f(x/a)$ où U_0 et a sont liés par $ma^2U_0/\hbar^2 = \text{cte}$. Chercher la dépendance des niveaux d'énergie E_n et des valeurs moyennes x et $\overline{(\Delta x)^2}$ des états liés par rapport au paramètre U_0 (ou a).

2.15. Chercher les fonctions d'onde des états stationnaires et les niveaux d'énergie d'une particule dans un champ de pesanteur homogène g dans le cas où le mouvement de la particule est limité inférieurement par un miroir parfait.

2.16. Chercher l'énergie E_0 et la fonction d'onde de l'état fondamental d'une particule dans un champ $U(x) = -U_0 \exp(-|x|/a)$. Etudier en particulier le cas d'un puits peu profond $ma^2U_0/\hbar^2 \ll 1$; comparer au résultat du problème 2.11.

2.17. Chercher les niveaux d'énergie d'une particule dans le potentiel $U(x)$:

$$U(x) = \begin{cases} \alpha\delta(x), & \alpha > 0, \quad |x| < a, \\ \infty, & \qquad\qquad |x| > a. \end{cases}$$

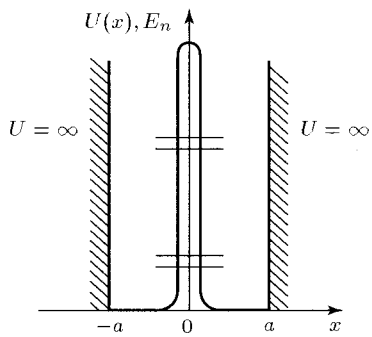

Figure 4

En se limitant au cas $m\alpha a/\hbar^2 \gg 1$, chercher les premiers niveaux d'énergie.

Montrer que le spectre d'énergie est composé de séquences de paires de niveaux très rapprochés et chercher la distance qui sépare ces niveaux très rapprochés (fig. 4).

Quel est le spectre des états fortement excités de la particule ?

Quelle est la forme du spectre d'énergie pour $\alpha < 0$?

2.18. Une particule se trouve dans un puits de potentiel $U(x)$ satisfaisant à la condition : $U(x) \to 0$ pour $x \to \pm\infty$. Etudier le comportement de la solution de l'équation de Schrödinger pour $x \to \pm\infty$ dans le cas où $E = 0$.

Montrer que l'existence de la solution $\Psi_{E=0}$ de l'équation de Schrödinger, qui est constante pour $x \to \pm\infty$, correspond à l'apparition de nouveaux états liés lorsque la profondeur du puits augmente.

Appliquer le résultat obtenu au potentiel de la forme

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \quad x > 2a, \\ -U_0, & 0 < x < 2a. \end{cases}$$

Comparer au résultat obtenu dans 2.7.

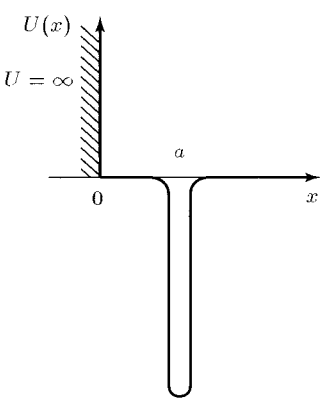

Figure 5

2.19. Pour une particule dans le potentiel $U(x)$ de la forme (fig. 5)

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0, \\ -\alpha\delta(x-a), & x > 0, \end{cases}$$

($\alpha > 0$) déterminer le nombre d'états liés en fonction du paramètre $\xi = m\alpha a/\hbar^2$.

2.20. Pour une particule dans le potentiel $U(x)$ de la forme (fig. 6)

$$U(x) = \begin{cases} U_1, & x < 0, \\ 0, & 0 < x < a, \\ U_2, & x > a, \end{cases}$$

chercher la condition d'existence d'états liés. Etudier les deux cas limites :
a) $U_1 = \infty$;
b) $U_1 = U_2$.

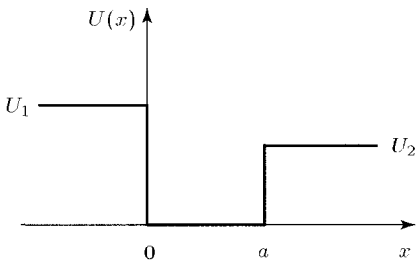

Figure 6

2.21. Montrer que la valeur moyenne d'une force appliquée à une particule dans un état lié vaut zéro.

2.22. Une particule se trouve dans un puits de potentiel de profondeur infinie. Calculer la force moyenne avec laquelle la particule agit sur chacune des parois du puits. Comparer au résultat de la mécanique classique.

2.23. Même question que dans le problème précédent, mais pour une particule dans l'état fondamental d'un puits de potentiel peu profond (voir problème 2.8).

Le problème se résout de deux manières :
a) en se servant de la méthode de résolution employée dans le problème précédent ;
b) en cherchant directement la moyenne de l'opérateur force.

2.24. Une particule se trouve dans un potentiel $U(x)$ de la forme

$$U(x) = \begin{cases} \tilde{U}(x), & x > 0, \\ \infty, & x < 0, \end{cases}$$

Exprimer, en fonction de la valeur $\Psi'_n(0)$ de la fonction d'onde normée, la force moyenne avec laquelle la particule agit sur la paroi en $x = 0$, lorsque cette particule est dans un état lié caractérisé par $\Psi_n(x)$.

Appliquer le résultat obtenu à une particule se trouvant dans un puits de potentiel de profondeur infinie et comparer au problème 2.22.

2.25. Une particule se déplace dans le champ créé par deux puits de potentiel identiques disposés à une certaine distance l'un de l'autre (voir fig. 7, $U(0) = 0$).

Montrer que la force moyenne avec laquelle la particule dans des états liés agit sur les puits conduit à une attraction mutuelle effective des puits dans des états pairs et à une répulsion mutuelle dans des états impairs.

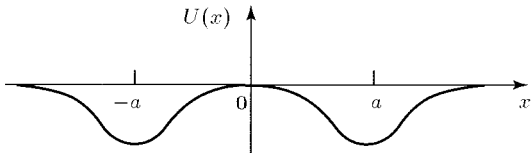

Figure 7

2.26. Donner la valeur approchée de l'énergie de l'état fondamental d'une particule se trouvant dans un puits de potentiel de profondeur infinie de largeur a $(0 < x < a)$, par la méthode variationnelle, en utilisant les fonctions d'essai de la forme :
a) $\Psi(x) = Ax(x-a)$;
b) $\Psi(x) = B\sin^2(\pi x/a)$;
c) $\Psi(x) = C(a/2 - |x - a/2|)$.

Comparer à la valeur exacte. Expliquer pourquoi la fonction d'essai de la forme a) fournit le résultat le plus proche de la valeur exacte.

2.27. Chercher la valeur approchée de l'énergie de l'état fondamental d'un oscillateur harmonique par la méthode variationnelle en utilisant des fonctions d'essai de la forme :
a) $\Psi(x) = A(1 + x^2/a^2)^{-1}$;
b) $\Psi(x) = B(1 + x^2/a^2)^{-2}$,
où a est le paramètre variationnel. Comparer à la valeur exacte (voir 2.1).

Si l'on choisit une fonction d'essai de la forme $\Psi(x) = A(1 + x^2/a^2)^{-\nu}$ (a et ν étant les paramètres variationnels), pour quel choix de ces paramètres le calcul variationnel permettra-t-il d'obtenir la meilleure approximation ?

2.28. En utilisant les fonctions d'essai mentionnées dans le problème précédent, chercher par la méthode variationnelle l'énergie de l'état fondamental d'une particule dans un potentiel $U(x) = -\alpha\delta(x)$. Comparer à la solution exacte (voir 2.11).

2.29. Pour une particule se trouvant dans un potentiel $U(x)$ de la forme

$$U(x) = \begin{cases} kx, & x > 0, \quad (k > 0), \\ \infty, & x < 0, \end{cases}$$

chercher l'énergie de l'état fondamental par la méthode variationnelle en se servant des fonctions d'essai de la forme $(x > 0)$:
a) $\Psi(x) = Ax \exp(-\alpha x)$;
b) $\Psi(x) = Bx \exp(-\alpha x^2/2)$.
(α étant le paramètre variationnel). Comparer à la valeur exacte (voir 2.15).

2.30. Obtenir la valeur approchée de l'énergie du premier état excité d'une particule dans un puits de potentiel de profondeur infinie et de largeur a $(0 < x < a)$, en approximant la fonction d'onde de cet état par un polynôme du troisième degré satisfaisant aux conditions limites exigées. Comparer à la valeur exacte.

2.31. En se servant d'une fonction d'essai de la forme $\Psi(x) = Ax \exp(-\alpha|x|)$ (α étant le paramètre variationnel), chercher l'énergie du premier état excité d'un oscillateur harmonique. Comparer à la valeur exacte.

2.32. Pour une particule se trouvant dans un potentiel $U(x)$ de la forme mentionnée dans 2.19, chercher par la méthode variationnelle les valeurs des paramètres du potentiel pour lesquelles on a un état lié. Pour les calculs, utiliser les fonctions d'essai de la forme ($x > 0$) :
a) $\Psi(x) = Ax \exp(-\kappa x)$;
b) $\Psi(x) = Bx \exp(-\kappa x^2/2)$.

Comparer les résultats obtenus à la solution exacte.

2.33. Quelle est, en représentation $\mathbf{p}$, la forme de l'équation de Schrödinger stationnaire pour une particule se trouvant dans le potentiel $U(x)$.

2.34. Chercher le niveau d'énergie et la fonction d'onde normée de l'état lié dans le champ $U(x) = -\alpha\delta(x)$ à partir de la solution de l'équation de Schrödinger en représentation $\mathbf{p}$.

Comparer au résultat du problème 2.11.

2.35. Chercher le spectre d'énergie et les fonctions d'onde normées des états stationnaires d'un oscillateur harmonique en représentation $\mathbf{p}$ à partir de la solution de l'équation de Schrödinger dans la même représentation.

2.36. Chercher la fonction de Green $G_E(x, x')$ de l'équation de Schrödinger pour une particule libre avec $E < 0$, décroissant pour $|x - x'| \to \infty$. La fonction de Green satisfait à l'équation :

$$(\widehat{H} - E)G_E \equiv -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}G_E - EG_E = \delta(x - x').$$

A l'aide de la fonction de Green, écrire l'équation de Schrödinger pour les états du spectre discret (états liés) dans le potentiel $U(x)$ ($U(x) \to 0$ pour $x \to \pm\infty$) sous forme d'une équation intégrale.

2.37. Chercher le niveau d'énergie E_0 et la fonction d'onde normée $\Psi_0(x)$ de l'état fondamental d'une particule dans le potentiel $U(x) = -\alpha\delta(x)$ à partir de la solution de l'équation de Schrödinger donnée sous forme intégrale (voir problème précédent). Comparer à 2.11.

2.38. En se servant du résultat obtenu dans 2.36, montrer que les valeurs des niveaux d'énergie E_n du spectre discret d'une particule soumise à un potentiel $U(x) \leq 0$ ($U(x) \to 0$ pour $x \to \pm\infty$) satisfont à la condition

$$|E_n| \leq \frac{m}{2\hbar^2}\left[\int_{-\infty}^{\infty} U(x)dx\right]^2.$$

Dans quels cas obtient-on l'égalité (ou l'égalité approchée) dans cette relation ? Pour illustrer le résultat obtenu, voir les problèmes 2.8 et 2.16.

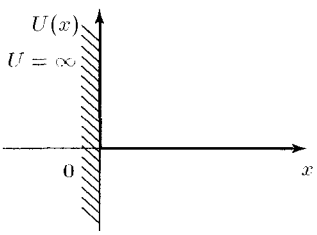

Figure 8

2.39. Chercher la fonction de Green de l'équation de Schrödinger d'une particule libre avec une énergie négative $E < 0$ dont le mouvement est limité par une barrière potentielle infranchissable (fig. 8), c'est-à-dire

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x > 0, \\ \infty, & x < 0. \end{cases}$$

Rappelons que la fonction de Green satisfait à la condition aux limites $G_E(x = 0, x') = 0$ et décroît pour $|x - x'| \to \infty$.

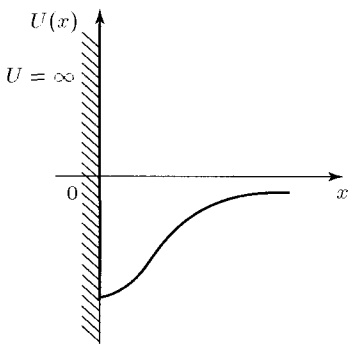

Figure 9

2.40. En utilisant la forme intégrale de l'équation de Schrödinger, montrer que la condition

$$\int_0^{\infty} x|\tilde{U}(x)|dx \geq \frac{\hbar^2}{2m}$$

est une condition *nécessaire* à l'existence d'états liés dans un potentiel $U(x)$ de la forme (fig. 9).

$$U(x) = \begin{cases} \tilde{U}(x), & x > 0, \\ \infty, & x < 0, \end{cases}$$

$(\tilde{U}(x) \leq 0, \tilde{U}(x) \to 0$ pour $x \to \infty)$.

Appliquer ce résultat au cas où

$$\tilde{U}(x) = \begin{cases} -U_0, & 0 < x < a, \\ 0, & x > a, \end{cases}$$

Comparer à la condition exacte.

2.41. Chercher la fonction de Green d'une particule se trouvant dans un puits de potentiel de profondeur infinie et de largeur a $(0 < x < a)$.

Discuter les propriétés analytiques de la fonction de Green G_E considérée comme une fonction de la variable E. Montrer, en particulier, qu'elle possède des pôles et établir la correspondance entre les positions de ces pôles dans le plan de la variable complexe E et les niveaux d'énergie E_n de la particule dans un puits.

2.42. Etudier les différents puits de potentiel où $U(x)$ satisfait aux conditions :

$$U(x) \leq 0 \; ; \quad U(x) \to 0 \text{ pour } x \to \pm\infty \; ; \quad \int_{-\infty}^{\infty} U(x)dx = \alpha = \text{cte}.$$

Pour quelle forme du puits :
a) la profondeur du niveau fondamental $|E_0|$ a une valeur maximale ;
b) le nombre d'états liés est maximal ?

2.2 ETATS DU SPECTRE CONTINU. PÉNÉTRATION À TRAVERS DES BARRIÈRES DE POTENTIEL

2.43. Pour une particule libre dont le mouvement est limité par une barrière impénétrable, c'est-à-dire soumise à un potentiel de la forme

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0, \\ 0, & x > 0, \end{cases}$$

chercher les fonctions d'onde des états stationnaires. Normez-les avec la fonction δ en énergie. Montrer que le système de fonctions obtenu sur l'intervalle $x > 0$ constitue un système complet.

2.44. Chercher les fonctions d'onde des états stationnaires d'une particule dans le potentiel (fig. 10)

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ U_0, & x > 0 \; (U_0 > 0), \end{cases}$$

dans le cas où l'énergie de la particule E est inférieure à la hauteur de la barrière de potentiel U_0. Montrer que les fonctions obtenues sont orthogonales et les normer avec la fonction δ en énergie. Les fonctions obtenues forment-elles un système complet ?

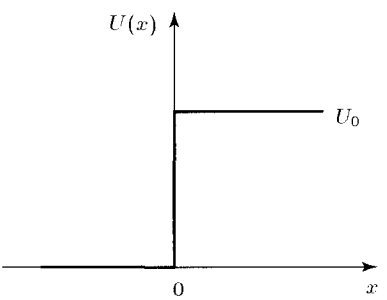

Figure 10

2.45. A partir de la solution de l'équation de Schrödinger en représentation **p**, chercher les fonctions d'onde des états stationnaires d'une particule dans le potentiel homogène $U(x) = -F_0 x$. Normer ces fonctions avec la fonction δ en énergie et montrer que le système de fonctions obtenu est complet.

2.46. Déterminer le coefficient de réflexion des particules sur la barrière de potentiel du problème 2.44 pour des particules d'énergie $E > U_0$.

Etudier les cas limites $E \to \infty$ et $E \to U_0$.

2.47. Déterminer les coefficients de transmission et de réflexion des particules pour un potentiel de la forme $U(x) = \alpha\delta(x)$ (fig. 11). Etudier les cas limites $E \to \infty$ et $E \to 0$. Discuter les propriétés analytiques des amplitudes (assimilées à des fonctions de la variable complexe E) de réflexion $A(E)$ et de transmission $B(E)$ des particules.

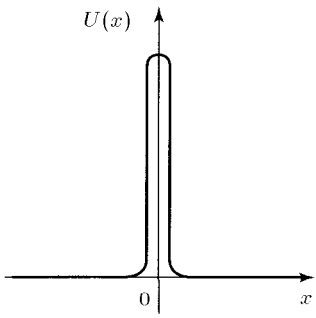

Figure 11

Montrer que les points $E = 0$ et $E = \infty$ sont des points de branchement de ces fonctions. En faisant dans le plan de la variable complexe E une coupure à partir du point $E = 0$ suivant le demi-axe réel $E > 0$, chercher les singularités des fonctions $A(E)$ et $B(E)$ sur le premier feuillet, dit physique, ainsi que sur les autres feuillets de leur surface de Riemann (le feuillet physique est fixé par la condition que la partie imaginaire de l'énergie E sur le demi-axe réel $E > 0$ tend vers zéro en restant toujours positive). Montrer que ces singularités correspondent aux pôles et établir le lien entre la position des pôles et les niveaux du spectre discret.

2.48. Chercher le coefficient de transmission des particules à travers une barrière ($U_0 > 0$) de potentiel rectangulaire (fig. 12)

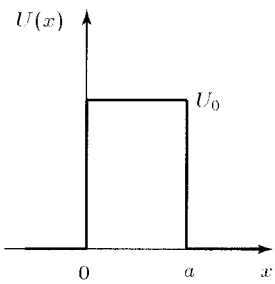

Figure 12

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \text{ et } x > a, \\ U_0, & 0 < x < a \end{cases}$$

Discuter les cas particuliers suivants :
a) $E \to \infty$ (de fait $E \gg U_0$) ;
b) barrière de faible transparence $(U_0 - E)ma^2/\hbar^2 \gg 1$;
c) $E \to 0$ (de fait $E \ll ma^2U_0^2/\hbar^2$ et $E \ll U_0$) ;
d) $ma^2U_0/\hbar^2 \ll 1$ et $ma^2E/\hbar^2 \ll 1$.

Pour ce dernier cas, comparer au résultat du problème précédent.

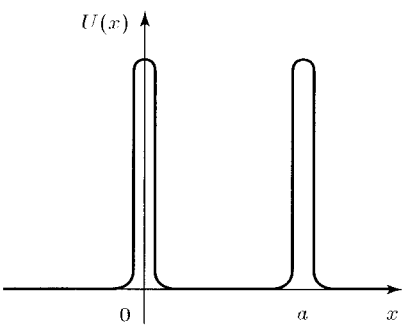

Figure 13

2.49. Même question que dans le problème précédent, mais pour un puits de potentiel.

2.50. Chercher les énergies pour lesquelles les particules ne se réfléchissent pas sur la barrière de potentiel de la forme (fig. 13)

$$U(x) = \alpha[\delta(x) + \delta(x - a)].$$

2.51*. Chercher les coefficients de transmission et de réflexion des particules dans le cas d'un potentiel de la forme (seuil de potentiel, voir fig. 14)

$$U(x) = \frac{U_0}{1 + \exp(-x/a)},$$

$(U_0 > 0,\ a > 0)$.

Etudier les cas limites $E \to \infty$ et $E \to U_0$.

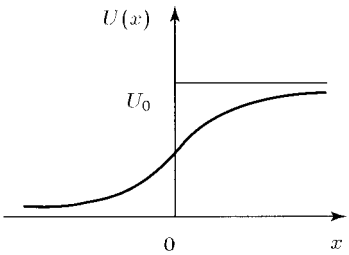

Figure 14

2.52*. Déterminer le coefficient de transmission des particules à travers une barrière de potentiel de la forme

$$U(x) = U_0/\mathrm{ch}^2(x/a) \qquad U_0 > 0.$$

Discuter en particulier les cas limites suivants :
a) un potentiel faible $\xi \equiv ma^2U_0/\hbar^2 \ll 1$ et des particules lentes $ka \ll 1$;
b) un potentiel faible et des particules pas trop lentes $ka \gtrsim 1$;
c) une barrière de faible transparence $\xi \gg 1$ et des particules rapides $ka \gg 1$;
d) une barrière de faible transparence et $|E - U_0| \ll U_0$;
e) une barrière de faible transparence et $E \to 0$;
f) une barrière (ou un puits) de dimension quelconque et $E \to \infty$.

Cette analyse détaillée des différents cas limites est proposée pour illustrer l'application des méthodes approchées (calcul des perturbations et méthode quasi classique) et des résultats généraux de la théorie de la transmission des particules à travers une barrière de potentiel.

2.53*. Chercher le coefficient de transmission des particules à travers une barrière de potentiel de la forme (fig. 15)

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ U_0(1 - x/a), & x > 0, \end{cases}$$

$(U_0 > 0,\ a > 0)$. Discuter, en particulier, le cas d'une barrière de faible transparence :

$$\xi \equiv (2ma^2U_0/\hbar^2)^{1/3} \gg 1$$

pour des énergies des particules remplissant la condition $\xi|E - U_0|/U_0 \gg 1$.

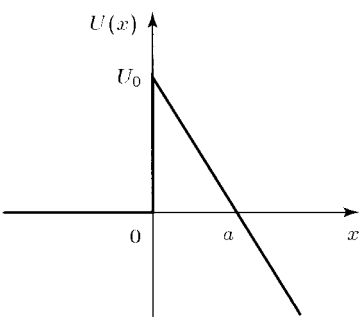

Figure 15

2.54*. Montrer que la relation $R(E) + D(E) = 1$, où R est le coefficient de réflexion, D le coefficient de transmission des particules est satisfaite quelle que soit la forme de la barrière de potentiel.

2.55*. Montrer que pour une barrière de forme quelconque le coefficient de transmission (et de réflexion) des particules d'énergie E donnée est indépendant du sens de parcours des particules.

2.56*. Le potentiel $U(x)$ a la forme d'un seuil de potentiel, c'est-à-dire que $U(x) \to 0$ pour $x \to -\infty$ et $U(x) \to U_0 > 0$ pour $x \to \infty$. Chercher la dépendance en énergie du coefficient de transmission des particules pour $E \to U_0$ (le résultat peut être illustré par les problèmes 2.46, 2.51, 2.53).

2.57*. Chercher les fonctions de Green $G_E^{(\pm)}(x, x')$ de l'équation de Schrödinger pour une particule libre d'énergie $E > 0$. Les indices $(\pm)$ des fonctions de Green signifient qu'elle se comportent comme

$$G_E^{(\pm)} \sim \exp\left(\pm i\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}|x - x'|\right)$$

pour $|x - x'| \to \infty$.

En se servant du résultat obtenu, représenter l'équation de Schrödinger sous forme d'une équation intégrale dont les solutions décrivent le processus de réflexion et de transmission de particules, d'impulsion p, dans le potentiel $U(x)$ satisfaisant aux conditions : $U(x) \to 0$ pour $x \to \pm\infty$.

2.58*. En utilisant le résultat du problème précédent, chercher les coefficients de transmission et de réflexion des particules dans le potentiel $U(x) = \alpha\delta(x)$. Comparer à la solution de 2.47.

2.59*. Sur la base du résultat du problème 2.57, trouver les expressions des coefficients de transmission et de réflexion des particules dans le potentiel $U(x)$ s'annulant pour $x \to \pm\infty$, en fonction de la fonction d'onde réfléchie $\Psi_p(x)$ des particules d'impulsion p dans le domaine d'action du potentiel.

CHAPITRE 3

MOMENT CINÉTIQUE[1]

3.1 PROPRIÉTÉS GÉNÉRALES DU MOMENT CINÉTIQUE

3.1. L'opérateur rotation $\widehat{R}(\varphi_0)$ décrit la transformation de la fonction d'onde d'un système de N particules par la rotation du système de coordonnées d'un angle φ_0 par rapport à l'axe dont la direction dans l'espace est définie par le vecteur unitaire $\mathbf{n}_0$. Exprimer cet opérateur en utilisant l'opérateur moment cinétique du système. L'opérateur $\widehat{R}(\varphi_0)$ est-il :
a) hermitien ?
b) unitaire ?

3.2. Donner une interprétation simple de la commutativité des opérateurs des composantes de l'impulsion et de la non-commutativité des opérateurs des composantes du moment cinétique, grâce aux relations de ces opérateurs avec les translations et les rotations infinitésimales.

3.3. Montrer que l'égalité $\mathbf{L}^2 = l(l+1)$ s'obtient par des formules élémentaires de la théorie des probabilités, en s'appuyant sur le fait que les projections du moment cinétique sur un axe arbitraire sont égales à m ($m = -l, -l+1, \ldots, l$), que toutes ces valeurs sont équiprobables et qu'il n'y a pas d'axe privilégié.

3.4. Chercher les commutateurs suivants :
a) $[\widehat{L}_i, \widehat{\mathbf{r}}^2]$, $[\widehat{L}_i, \widehat{\mathbf{p}}^2]$, $[\widehat{L}_i, (\widehat{\mathbf{p}} \cdot \widehat{\mathbf{r}})]$, $[\widehat{L}_i, (\widehat{\mathbf{p}} \cdot \widehat{\mathbf{r}})^2]$;
b) $[\widehat{L}_i, (\widehat{\mathbf{p}} \cdot \widehat{\mathbf{r}})\widehat{\mathbf{p}}]$, $[\widehat{L}_i, (\widehat{\mathbf{p}} \cdot \widehat{\mathbf{r}})\widehat{\mathbf{r}}]$, $[\widehat{L}_i, (a\widehat{\mathbf{r}} + b\widehat{\mathbf{p}})]$;
c) $[\widehat{L}_i, \widehat{x_k}\widehat{x_l}]$, $[\widehat{L}_i, \widehat{p_k}\widehat{p_l}]$, $[\widehat{L}_i, \widehat{x_k}\widehat{p_l}]$,
où $\widehat{\mathbf{r}}$, $\widehat{\mathbf{p}}$, $\widehat{\mathbf{L}}$ sont les opérateurs rayon vecteur, impulsion et moment cinétique d'une particule et où a et b sont des constantes.

---

1 Les phases des harmoniques sphériques sont arbitraires. La définition adoptée pour les $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ est donnée dans l'appendice et peut être différente de celle adoptée dans d'autres ouvrages.

3.5. Chercher le commutateur $[\widehat{L}_i, \widehat{L}'_k]$, où $\widehat{\mathbf{L}}$ et $\widehat{\mathbf{L}}'$ sont les opérateurs moment cinétique d'une particule par rapport à deux centres se trouvant à une distance $\mathbf{a}$ l'un de l'autre.

3.6. En utilisant les relations de commutation de l'opérateur moment cinétique, chercher Tr $\widehat{L}_i$, où $\widehat{L}_i$ est la matrice de composante i du moment $\mathbf{L}$.

3.7. Représenter l'opérateur moment cinétique du système de deux particules sous forme d'une somme de deux termes, décrivant le moment de la particule dans le système du centre d'inertie (moment du mouvement relatif) et le moment du centre d'inertie du système.

3.8. Montrer que le moment cinétique $\mathbf{L}$ d'un système de deux particules par rapport à leur centre d'inertie est tel que $\widehat{\mathbf{L}}\cdot\mathbf{r} = 0$, $\mathbf{r}$ étant le vecteur joignant les deux particules.

3.9. Chercher les fonctions d'onde Ψ_{r_0lm}, normées de façon convenable, qui décrivent l'état de la particule se trouvant à la distance r_0 de l'origine des coordonnées et ayant un moment l dont la projection sur l'axe z est m.

3.10. Chercher les fonctions propres de l'opérateur carré du moment de la particule et de la composante de ce dernier sur l'axe z en représentation $\mathbf{p}$ par les deux méthodes suivantes :

a) directement à partir de la solution du problème aux fonctions propres et aux valeurs propres des opérateurs $\widehat{\mathbf{l}}^2$ et $\widehat{l}_z$ en représentation $\mathbf{p}$;

b) en utilisant la relation liant les fonctions d'onde en représentations $\mathbf{r}$ et $\mathbf{p}$.

La forme des fonctions propres $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ en représentation $\mathbf{r}$ est supposée connue (voir Appendice).

3.11. Montrer que les fonctions obtenues par l'action des opérateurs $\widehat{l}_\pm = \widehat{l}_x \pm i\widehat{l}_y$ sur les fonctions propres Ψ_m de l'opérateur composante du moment sur l'axe z ($\widehat{l}_z\Psi_m = m\Psi_m$) sont également fonctions propres de l'opérateur $\widehat{l}_z$ correspondant aux valeurs propres $m+1$ dans le cas de $\widehat{l}_+$ et $m-1$ dans le cas $\widehat{l}_-$.

3.12. Montrer que dans l'état Ψ_m propre de $\widehat{l}_z$ ($\widehat{l}_z\Psi_m = m\Psi_m$) on a :

a) $\overline{\widehat{l}_x} = \overline{\widehat{l}_y} = 0$;

b) $\overline{\widehat{l}_x\widehat{l}_y} = -\overline{\widehat{l}_y\widehat{l}_x} = im/2$;

c) $\overline{\widehat{l}_x^2} = \overline{\widehat{l}_y^2}$.

3.13. Dans l'état Ψ_{lm} où le système a une valeur donnée du moment l et de sa projection m sur l'axe z, chercher les valeurs moyennes $\overline{\widehat{l}_x^2}$, $\overline{\widehat{l}_y^2}$.

3.14. Dans l'état Ψ_{lm} où le système a une valeur donnée du moment l et de sa projection m sur l'axe z, chercher la valeur moyenne et la fluctuation quadratique moyenne de la projection du moment sur l'axe $\tilde{z}$ formant l'angle α avec l'axe z.

3.15. Dans l'état d'une particule défini par une fonction d'onde dont la partie angulaire est de la forme $\Psi = A\cos^n\varphi$ (φ étant l'angle de rotation autour d'un axe z et n un entier), chercher les probabilités des différentes valeurs m de la projection du moment sur l'axe z.

3.16. Dans l'état d'une particule dont la partie angulaire de la fonction d'onde a la forme $\Psi = A\exp(2i\varphi)$ (φ étant l'angle de rotation autour d'un axe z), chercher les probabilités des différentes valeurs l du moment de la particule.

3.17. Pour les harmoniques sphériques $Y_{lm}(\theta,\varphi)$, démontrer la relation

$$\sum_{m=-l}^{l} |Y_{lm}(\theta,\varphi)|^2 = \frac{2l+1}{4\pi}.$$

3.18. Chercher l'expression du projecteur $\widehat{P}(M)$, projetant les états ayant un moment L donné sur le sous-espace des états ayant une composante donnée du moment M sur l'axe z.

3.19. En représentation l_z, chercher la loi de transformation par une rotation du système de coordonnées d'un angle φ_0 (voir 3.1) de la fonction d'onde de l'état d'une particule ayant une valeur déterminée du moment l.

3.20. Soit $\widehat{f}$ un opérateur qui commute avec les composantes $\widehat{L}_i$ du moment cinétique du système : $[\widehat{L}_i, \widehat{f}] = 0$. Montrer que les éléments matriciels

$$\langle n, L, M'|\widehat{f}|n, L, M\rangle$$

(où n est l'ensemble des nombres quantiques qui, avec L et M, forment un système complet) ne sont différents de zéro que pour $M = M'$ et ne dépendent pas de M.

3.21. Chercher la loi de transformation de la fonction d'onde d'une particule en représentation ll_z dans le cas d'une réflexion, c'est-à-dire dans la transformation de la forme : $\widehat{R}\,\mathbf{r} = -\mathbf{r}$.

3.2 MOMENT $L = 1$

3.22. Soit une particule de moment $l = 1$. On désigne par $\Psi_{m=0}(\theta,\varphi)$ la fonction d'onde de l'état pour lequel $\widehat{l}_z$ a la valeur bien déterminée $m = 0$ (z est l'axe de quantification d'un système de coordonées $Oxyz$; θ,φ sont les coordonnées sphériques d'une direction quelconque). Exprimer la fonction d'onde $\Psi_{\tilde{m}=0}(\theta,\varphi)$ de l'état de la

particule, pour lequel la projection sur l'axe $\tilde{z}$, dont la direction est définie par les angles polaire α et azimutal β, a la même valeur $\tilde{m} = 0$.

3.23. Chercher la dépendance angulaire des fonctions d'onde $\Psi_{l_x}(\theta, \varphi)$ et $\Psi_{l_y}(\theta, \varphi)$ des états de la particule de moment $l = 1$ et ayant une valeur déterminée de la composante du moment sur les axes x et y. Utiliser la forme connue des harmoniques sphériques $Y_{1,m}(\theta, \varphi)$.

3.24. Une particule se trouve dans un état ayant un moment $l = 1$ et une projection m ($m = 0, \pm 1$) sur l'axe z. Chercher les probabilités $w(m', m)$ d'avoir une projection m' du moment sur l'axe z' formant un angle α avec l'axe z.

Il est recommandé de résoudre ce problème par l'une des méthodes suivantes :

a) en utilisant le résultat du problème 3.14 ;

b) en cherchant les coefficients du développement $c(m', m)$ de la fonction d'onde sur les fonctions propres de l'opérateur $\widehat{l}_{z'}$ (dans ce procédé de résolution, se limiter à une valeur particulière de m, par exemple $m = 0$).

Etudier notamment le cas où l'axe z' est perpendiculaire à l'axe z.

3.25. Montrer que dans le cas où le moment de la particule est $l = 1$, les trois fonctions $\Psi_{l_x}(\theta, \varphi)$, $\Psi_{l_y}(\theta, \varphi)$, $\Psi_{l_z}(\theta, \varphi)$ décrivant l'état d'une particule ayant une projection nulle du moment sur les axes x, y, z, constituent un système complet de fonctions (dans l'espace des variables angulaires θ, φ).

A quoi correspondent les coefficients du développement de la fonction d'onde d'un état arbitraire de la particule ayant un moment $l = 1$ dans ce système ?

3.26. Indiquer, en représentation l_z, la forme explicite des opérateurs des composantes du moment et des opérateurs $\widehat{l}_+$ et $\widehat{l}_-$ ($\widehat{l}_\pm = \widehat{l}_x \pm i\widehat{l}_y$) dans le cas où $l = 1$.

Quelle est la forme des opérateurs $\widehat{l}_\pm^3$?

3.27. Chercher la fonction d'onde de l'état d'une particule ayant un moment $l = 1$ et une projection de ce moment $l_x = 0$ en représentation l_z.

3.28. Dans l'état d'une particule dont le moment est $l = 1$ et dont la projection sur l'axe z est m, chercher les moyennes suivantes : $\overline{l_x^n}$, $\overline{l_y^n}$ (n étant un entier).

3.29. Chercher la forme explicite de l'opérateur $\widehat{F} = F(\mathbf{a}\cdot\widehat{\mathbf{l}})$, où $\mathbf{a}$ est un vecteur, $F(x)$ une fonction de la variable x et $\widehat{\mathbf{l}}$ l'opérateur moment de la particule. L'opérateur $\widehat{F}$ agit dans l'espace des états d'une particule de moment $l = 1$.

3.30. Chercher la forme explicite de l'opérateur $\widehat{R}(\boldsymbol{\varphi}_0)$, rotation du système de coordonnées d'un angle $\boldsymbol{\varphi}_0$ (voir 3.1 et 3.19), agissant dans l'espace des états d'une particule de moment $l = 1$.

3.31. En utilisant le résultat du problème précédent, chercher la partie angulaire de la fonction d'onde $\Psi_{\widetilde{m}=0}(\theta,\varphi)$ d'une particule de moment $l = 1$ et de projection $\widetilde{m} = 0$ sur l'axe $\widetilde{z}$ dont la direction est définie par les angles α, β. Comparer avec le problème 3.22.

3.32. Dans l'espace des états d'une particule de moment $l = 1$, chercher les projecteurs $\widehat{P}(m)$ $(m = 0, \pm 1)$ sur les états ayant une valeur déterminée du moment m sur l'axe z.

3.33. Généraliser le résultat obtenu dans le problème précédent pour un axe $\widetilde{z}$ de direction quelconque.

En utilisant la forme obtenue pour les opérateurs $\widehat{P}(\widetilde{m})$, chercher (en représentation l_z) la fonction d'onde dont la projection du moment sur l'axe $\widetilde{z}$ est $\widetilde{m} = 0$.

Chercher, par le même procédé, la fonction d'onde $\Psi_{\widetilde{m}=0}(\theta,\varphi)$ de la particule de moment $l = 1$. Comparer aux résultats des problèmes 3.22 et 3.31.

3.3 ADDITION DES MOMENTS

3.34. Les moments l_1 et l_2 de deux systèmes sans interaction s'additionnent en un moment total L. Montrer que dans de tels états (avec une valeur déterminée de L) les produits scalaires $\widehat{\mathbf{l}}_1 \cdot \widehat{\mathbf{l}}_2$, $\widehat{\mathbf{l}}_1 \cdot \widehat{\mathbf{L}}$, $\widehat{\mathbf{l}}_2 \cdot \widehat{\mathbf{L}}$, possèdent également des valeurs déterminées.

3.35. Quel est le spectre d'une grandeur physique formée à partir du carré du produit vectoriel de deux moments l_1 et l_2 ?

3.36. Chercher les commutateurs suivants :
a) $[\widehat{L}_i, (\widehat{\mathbf{l}}_1 \cdot \widehat{\mathbf{l}}_2)]$, $[\widehat{L}_i, (\widehat{\mathbf{r}_1} \cdot \widehat{\mathbf{p}_2})]$, $[\widehat{L}_i, (\widehat{\mathbf{r}_1} \cdot \widehat{\mathbf{r}_2})]$;
b) $[\widehat{L}_i, \widehat{x}_{1k}]$, $[\widehat{L}_i, \widehat{g}_k]$, où $\widehat{\mathbf{g}} = \widehat{\mathbf{l}}_1 \wedge \widehat{\mathbf{l}}_2$;
c) $[\widehat{L}_i, \widehat{x}_{1k}\widehat{x}_{2l}]$, $[\widehat{L}_i, \widehat{x}_{1k}\widehat{p}_{2l}]$,
où $\widehat{\mathbf{l}}_1$ et $\widehat{\mathbf{l}}_2$ sont les opérateurs moments de deux particules, $\widehat{\mathbf{L}} = \widehat{\mathbf{l}}_1 + \widehat{\mathbf{l}}_2$ l'opérateur moment total.

3.37. On a deux systèmes 1 et 2 sans interaction dont les états sont caractérisés par les nombres quantiques (l_1, m_1) et (l_2, m_2) du moment et de sa projection sur l'axe z.

Indiquer les valeurs possibles du moment total L du système total $(1 + 2)$ et calculer les valeurs moyennes $\overline{\widehat{\mathbf{L}}}$, $\overline{\widehat{\mathbf{L}}^2}$ dans l'état considéré.

Chercher la valeur moyenne de $\overline{\widehat{\mathbf{L}}^2}$ dans le cas où les différentes valeurs de m_1 et m_2 sont équiprobables et comparer le résultat à la valeur moyenne correspondante obtenue après une étude classique.

3.38. Dans les conditions du problème précédent, calculer les probabilités des différentes valeurs du moment total L dans le cas particulier où les projections m_1 et m_2 sont égales à $m_1 = l_1$, $m_2 = l_2 - 1$.

3.39. Les moments de deux systèmes sans interaction et de grandeurs égales ($l_1 = l_2 = l$) sont additionnés en un moment total L. Montrer que la fonction d'onde $\Psi_L(m_1, m_2)$ d'état du système ayant une valeur déterminée de la grandeur L en représentation $l_{1z} l_{2z}$ est douée d'une symétrie déterminée par rapport à la permutation des variables[2] m_1 et m_2. Quelle relation lie la symétrie de la fonction d'onde à la valeur de la grandeur L ?

3.40. En utilisant le résultat du problème précédent, déterminer les probabilités des différentes valeurs du moment total L dans un état composé de deux systèmes ayant des moments l identiques et des projections déterminées des composantes des moments sur l'axe z égales à $m_1 = l$ et $m_2 = l - 1$. Comparer avec le résultat du problème 3.38.

3.41. Deux systèmes de moments l identiques sont dans un état ayant une valeur déterminée L du moment total égal à :
a) $L = 2l$;
b) $L = 2l - 1$
et une projection du moment total sur l'axe z égale à $M = 2l - 1$ (dans les deux cas).

Déterminer les probabilités des différentes valeurs des projections des moments des deux systèmes sur l'axe z.

3.42. En utilisant les résultats des problèmes 3.37 et 3.39, chercher les probabilités des différentes valeurs du moment total dans un état composé de deux systèmes ayant des moments égaux à l'unité dont les projections sur l'axe z sont égales à zéro.

Généraliser le résultat obtenu pour des valeurs des moments l quelconques (mais identiques) de chacun des systèmes et des projections des moments des deux systèmes sur l'axe z égales à $m_1 = m_2 = l - 1$.

3.43. Même question que dans le problème précédent, mais pour le cas $l_1 = l_2 = 1$ et $m_1 = 1$, $m_2 = -1$.

Généraliser ce résultat pour des valeurs quelconques des moments $l_1 = l_2 = l$ et des projections des moments sur l'axe z égales à $m_1 = l, m_2 = l - 2$.

---

2 Pour éviter des malentendus, soulignons le double sens de la lettre m à savoir : m représentant la valeur propre de l'opérateur $\widehat{l}_z$ et m, variable en représentation l_z (d'ailleurs cette remarque concerne également toute grandeur physique f).

Rappelons, à ce propos, que l'on utilise l'écriture de la fonction propre $\Psi_f(q)$ dans laquelle q est la variable de la représentation utilisée, tandis que f indique la valeur propre correspondante.

3.44. En utilisant le résultat obtenu dans le problème 3.39, montrer que, pour deux systèmes sans interaction dans les états ayant des moments l identiques et ayant une valeur déterminée L du moment total et de sa projection M sur l'axe z, les probabilités des valeurs des projections sur l'axe z, $m_{1(2)} = m$ et $m_{1(2)} = M - m$ sont identiques.

3.45. En se basant sur les résultats obtenus dans les problèmes 3.37 et 3.39, chercher les valeurs minimale et maximale des probabilités des valeurs possibles L du moment total de deux systèmes sans interaction possédant des moment égaux $l_1 = l_2 = 2$ et dont les projections sur l'axe z sont égales à $m_1 = m_2 = 0$.

3.46. Les moments de deux systèmes sont égaux ($l_1 = l_2 = l$) ; une fois additionnés, ils donnent un moment total L nul : $L = 0$.

Chercher la fonction d'onde de cet état en représentation $l_{1z}l_{2z}$, ainsi que la probabilité des différentes valeurs des projections des moments des deux systèmes sur un axe.

Pour résoudre le problème, utiliser les opérateurs $\widehat{L}_{\pm}$.

3.47. Les moments de deux particules valent $l_1 = l_2 = 1$. Construire les fonctions d'onde Ψ_{LM} des états ayant des valeurs déterminées L du moment total et de sa projection M sur l'axe z.

Discuter en particulier la dépendance angulaire de l'état $L = 0$.

Chercher, pour les états considérés Ψ_{LM}, la probabilité des différentes valeurs des projections des moments de chacun des deux systèmes sur l'axe z.

On invite le lecteur à résoudre le problème en s'inspirant des résultats obtenus dans les problèmes 3.39 et 3.46.

3.48. Classer les états possibles d'un système composé de trois sous-systèmes sans interaction possédant des moments $l_1 = l_2 = 1$ et $l_3 = l$ suivant les valeurs du moment total L du système.

3.49. Dans l'espace des états des moments l_1 et l_2 de deux systèmes sans interaction, chercher les projecteurs $\widehat{P}(L)$ sur les états ayant une valeur L du moment total.

3.50. Dans l'espace des états des moments l_1 et l_2 de deux systèmes sans interaction, chercher les projecteurs $\widehat{P}(L, M)$ sur les états ayant une valeur L du moment total et M de sa projection sur l'axe z.

3.51. Les moments de deux systèmes sans interaction valent $l_1 = l_2 = 1$. En utilisant les projecteurs, chercher (en représentation $l_{1z}l_{2z}$) la fonction d'onde $\Psi_{L=0}$ de l'état ayant une valeur $L = 0$ du moment total. Comparer au résultat obtenu dans le problème 3.47.

3.52. A partir des relations de commutation $[\widehat{L}_i, \widehat{f}_k] = i\varepsilon_{ikl}\widehat{f}_l$, liant les opérateurs des composantes du moment $\widehat{L}_i$ et une grandeur vectorielle arbitraire $\widehat{f}_k$, qui caractérise un certain système, montrer que :

a) les éléments matriciels non diagonaux de l'opérateur $\widehat{f}_z$ sont nuls :

$$\langle n, L, M|\widehat{f}_z|n, L, M'\rangle = 0, \ M \neq M',$$

ici n représente l'ensemble des nombres quantiques, qui avec L et M constituent un système complet ;

b) les éléments matriciels diagonaux $\widehat{f}_z$ sont de la forme

$$\langle n, L, M|\widehat{f}_z|n, L, M\rangle = a(n, L)M,$$

où $a(n, L)$ est un nombre ne dépendant que des nombres quantiques n et L (mais pas de M).
Ainsi de a) et b) on a " l'égalité "

$$\widehat{f}_z \doteq a(n, L)\widehat{L_z},$$

où le symbole d'égalité $\doteq$ signifie que les éléments matriciels des deux membres de l'équation entre des états ayant les mêmes valeurs de n et L (et pour des valeurs de M, M' quelconques) sont égaux.

c) Généraliser les résultats de a) et b) pour les composantes x et y de l'opérateur $\widehat{f}$ et établir l'" égalité "

$$\widehat{\mathbf{f}} \doteq a(n, L)\widehat{\mathbf{L}},$$

d) Montrer que la grandeur $a(n, L)$ vaut

$$a(n, L) = \frac{\langle n, L, M|\widehat{\mathbf{f}} \cdot \widehat{\mathbf{L}}|n, L, M\rangle}{L(L+1)},$$

Comme l'opérateur $(\widehat{\mathbf{f}} \cdot \widehat{\mathbf{L}})$ est un opérateur scalaire qui commute avec $\widehat{\mathbf{L}}$, les éléments matriciels diagonaux de cet opérateur sont indépendants de M (voir 3.20).

3.53. En utilisant le résultat obtenu dans le problème précédent, chercher les éléments matriciels de l'opérateur de la grandeur physique $\widehat{\mathbf{f}} = \widehat{\mathbf{l}}_1 \wedge \widehat{\mathbf{l}}_2$ entre des états ayant une valeur déterminée L du moment total $(\widehat{\mathbf{L}} = \widehat{\mathbf{l}}_1 + \widehat{\mathbf{l}}_2)$.

3.54. Chercher les valeurs moyennes des composantes d'une grandeur physique vectorielle $\widehat{\boldsymbol{\mu}} = g_1\mathbf{l}_1 + g_2\mathbf{l}_2$ pour des états ayant une valeur déterminée du moment total $(\widehat{\mathbf{L}} = \widehat{\mathbf{l}}_1 + \widehat{\mathbf{l}}_2)$ et de sa projection M sur l'axe z.

Déterminer $\overline{\mathbf{l}}_1$ et $\overline{\mathbf{l}}_2$ dans ces états.

3.55*. Il est connu que le problème d'addition des moments de deux systèmes l_1 et l_2 en un moment total L se résout au moyen de la relation suivante :

$$\Psi_{LM} = \sum_{m_1 m_2} C^{LM}_{l_1 m_1 l_2 m_2} \Psi^{(1)}_{l_1 m_1} \Psi^{(2)}_{l_2 m_2}, \qquad M = m_1 + m_2,$$

où $C^{LM}_{l_1 m_1 l_2 m_2}$ sont les coefficients de Clebsch-Gordan (pour lesquels il existe une forme explicite), les $\Psi^{(1,2)}_{lm}$ sont les fonctions d'onde normées des deux systèmes dont les moments sont additionnés en un moment total L et où Ψ_{LM} est la fonction d'onde normée du système total.

En utilisant les opérateurs $\widehat{L}_{\pm}$, chercher les coefficients de Clebsch-Gordan dans le cas particulier où $L = l_1 + l_2$.

3.56. Même question que dans le problème précédent, mais pour le cas particulier : $l_1 = l_2$ et $L = 0$.

3.4 FORMALISME TENSORIEL EN THÉORIE DU MOMENT CINÉTIQUE

3.57*. Montrer que la fonction de la forme $\Psi_l(\mathbf{r}) = t_{ik\ldots n} x_i x_k \ldots x_n f(r)$, où $f(r)$ est une fonction arbitraire, $t_{ik\ldots n}$ un tenseur de rang l symétrique pour tout couple d'indices et de trace nulle ($t_{iip\ldots n} = 0$), est une fonction propre de l'opérateur carré du moment de la particule associée à une valeur du moment égale à l.

3.58. Montrer que le nombre de composantes indépendantes d'un tenseur symétrique de rang l de trace nulle (voir problème précédent) vaut $2l + 1$, comme le nombre d'harmoniques sphériques Y_{lm}. On démontre ainsi que la dépendance angulaire de la fonction d'onde étudiée dans le problème précédent est la plus générale pour les états d'une particule de moment l.

3.59. Selon le problème 3.57, la relation la plus générale donnant la dépendance angulaire de la fonction d'onde d'état d'une particule ayant un moment $l = 1$ est de la forme $\Psi_{l=1} = (\mathbf{t} \cdot \mathbf{n})$, $\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$. Quelle condition doit remplir le vecteur $\mathbf{t}$ si la fonction d'onde est normée à l'unité :

$$\int |\Psi_{l=1}|^2 d\Omega = 1 \ ?$$

3.60. Pour des valeurs du moment d'une particule égales à $l = 1$ et $l = 2$, chercher les composantes des tenseurs correspondants ($t_i(m)$, $t_{ik}(m)$) pour lesquels la fonction Ψ_l, introduite dans 3.57, décrit un état de la particule ayant une valeur déterminée du moment et de sa projection sur l'axe z ; autrement dit Ψ_l est une harmonique sphérique Y_{lm}.

3.61. En utilisant les valeurs des composantes des vecteurs $\mathbf{t}(m)$ obtenues dans le problème précédent, chercher les composantes du tenseur de la forme

$$\sum_{m=-1}^{1} t_i^*(m) t_k(m).$$

3.62. En accord avec le résultat obtenu dans le problème 3.57, la relation la plus générale donnant la dépendance angulaire de la fonction d'onde d'une particule de moment $l = 1$ est de la forme $\Psi_{l=1} = (\mathbf{t} \cdot \mathbf{n})$, où $\mathbf{t}$ est un vecteur complexe arbitraire. Quelles conditions doit satisfaire ce vecteur pour qu'on puisse déterminer dans l'espace un axe sur lequel la projection du moment a une valeur déterminée égale à
a) $\widetilde{m} = 0$;
b) $\widetilde{m} = \pm 1$?

3.63. Montrer que pour un état arbitraire d'une particule de moment $l = 1$ on peut trouver dans l'espace un axe $\tilde{z}$ sur lequel la probabilité de la projection du moment $\widetilde{m} = 0$ est nulle.

3.64. La dépendance angulaire de la fonction d'onde d'une particule de moment $l = 1$ est de la forme $\Psi_{l=1} = (\mathbf{t} \cdot \mathbf{n})$, où $\mathbf{t}$ un vecteur complexe arbitraire. Chercher les probabilités des différentes valeurs de la projection du moment sur un axe $\tilde{z}$ dont la direction est définie par le vecteur unitaire $\mathbf{n}_0$.

3.65. Chercher les valeurs moyennes des composantes du tenseur $\overline{n_i n_k}$ pour une particule de moment $l = 1$ dans l'état le plus général. La dépendance angulaire de la fonction d'onde d'un tel état est, selon le problème 3.57, de la forme $\Psi_{l=1} = (\mathbf{t} \cdot \mathbf{n})$.

3.66*. Chercher les valeurs moyennes des composantes du moment $\mathbf{l}$ pour une particule de moment $l = 1$ dans l'état le plus général (la forme de la fonction d'onde de cet état est donnée dans le problème précédent).

3.67. Selon le problème 3.57, la dépendance angulaire de la fonction d'onde d'une particule de moment $l = 1$ est de la forme $\Psi_{l=1} = (\mathbf{a} \cdot \mathbf{n})$, autrement dit, elle est complètement définie par le vecteur complexe $\mathbf{a}$. Aussi, pour les états de moment $l = 1$, peut-on passer à la représentation (dite vectorielle) dans laquelle la fonction d'onde est représentée par l'ensemble des composantes du vecteur a_k, c'est-à-dire que $\Psi_k \equiv a_k$ $(k = 1, 2, 3)$.

Chercher la forme explicite des opérateurs composantes du moment en représentation vectorielle. Etablir la correspondance entre la représentation vectorielle et la représentation l_z.

3.68. Pour un système composé de deux particules ayant des moments $l_1 = l_2 = 1$, chercher :
a) la forme la plus générale de la dépendance angulaire de la fonction d'onde ;
b) la forme la plus générale de la dépendance angulaire des fonctions d'onde Ψ_L décrivant les états du système à valeur déterminée L $(L = 0, 1, 2)$ du moment total ;
c) la dépendance angulaire des fonctions d'onde Ψ_{LM} décrivant les états du système à valeur déterminée L du moment total et de sa projection M sur l'axe z.

Utiliser les résultats obtenus dans les problèmes 3.57 et 3.60.

CHAPITRE 4

MOUVEMENT DANS UN CHAMP CENTRAL

4.1 SYSTÈMES À SYMÉTRIE AXIALE

4.1. Chercher les fonctions d'onde des états stationnaires et les niveaux d'énergie d'un rotateur[1] plan de moment d'inertie I.

Quelle est la multiplicité des niveaux ?

4.2. L'état d'un rotateur plan est décrit par une fonction d'onde $\Psi = C\cos^n\varphi$ (n étant un entier). Chercher les fonctions de distribution du rotateur en énergie et en projection du moment, ainsi que les valeurs moyennes de ces grandeurs dans l'état considéré.

4.3. Chercher les fonctions d'onde des états stationnaires et les niveaux d'énergie d'un rotateur spatial de moment d'inertie I.

Quelle est la multiplicité des niveaux ?

4.4. L'état d'un rotateur spatial est décrit par une fonction d'onde de la forme :
a) $\Psi = C\cos^2\theta$;
b) $\Psi = Ce^{2i\varphi}$.

Pour ces états, chercher les fonctions de distribution de l'énergie, du carré du moment et de sa projection sur l'axe z, ainsi que les valeurs moyennes de ces grandeurs.

4.5. Chercher les niveaux d'énergie et les fonctions d'onde des états stationnaires d'un oscillateur harmonique plan.

Déterminer la multiplicité des niveaux d'énergie.

---

1 On appelle *rotateur* ou *rotateur rigide* un système en rotation (dans un plan ou dans l'espace) de deux particules rigidement liées l'une à l'autre. Le moment d'inertie du rotateur vaut $I = \mu a^2$, où μ est la masse réduite des particule, a la distance qui les sépare.

4.6. Dans l'état stationnaire Ψ_{11} d'un oscillateur plan (voir solution du problème 4.5), chercher les probabilités des différentes valeurs de la projection du moment sur l'axe perpendiculaire au plan des oscillations.

4.7. Une particule se trouve dans un potentiel à symétrie axiale $U(\rho)$.

Dans le cas général (c'est-à-dire en l'absence de dégénérescence accidentelle), quelle est la multiplicité des niveaux d'énergie du spectre discret du mouvement "transversal" de la particule (c'est-à-dire du mouvement s'effectuant dans le plan perpendiculaire à l'axe de symétrie du potentiel) ?

La multiplicité de dégénérescence du premier niveau excité du mouvement "transversal" peut-elle être égale à 3, 4 ?

4.8. Chercher les niveaux d'énergie et les fonctions d'onde des états stationnaires d'une particule dans un puits de potentiel bidimensionnel de profondeur infinie

$$U(\rho) = \begin{cases} 0, & \rho \leq a, \\ \infty, & \rho > a. \end{cases}$$

4.9*. Chercher les niveaux d'énergie du spectre discret (des états liés) d'une particule dans un puits de potentiel bidimensionnel de $U(\rho)$ de la forme

$$U(\rho) = \begin{cases} -U_0, & \rho < a, \\ 0, & \rho \geq a, \end{cases}$$

qui correspondent à la valeur $m = 0$ de la projection du moment de la particule sur la direction perpendiculaire au plan du mouvement.

Discuter en particulier le cas d'un puits peu profond $\mu a^2 U_0/\hbar^2 \ll 1$; comparer au cas d'un mouvement unidimensionnel.

4.10*. Même question que dans le problème précédent, mais pour le cas $m \neq 0$.

Obtenir la condition d'existence des états liés ayant une projection non nulle m du moment.

4.11*. Pour une particule se trouvant dans un potentiel bidimensionnel de la forme $U(\rho) = -\alpha\delta(\rho - a)$, chercher les niveaux d'énergie du spectre discret à projection nulle du moment : $m = 0$.

Discuter en particulier les cas limites des puits peu profond $\mu\alpha a/\hbar^2 \ll 1$ et profond $\mu\alpha a/\hbar^2 \gg 1$. Comparer au cas d'un mouvement unidimensionnel.

4.12*. Même question que dans le problème précédent, mais pour le cas $m \neq 0$.

Obtenir la condition d'existence des états liés ayant une valeur non nulle de la projection du moment m.

4.13. Chercher les niveaux d'énergie du spectre discret d'une particule dans un potentiel bidimensionnel $U(\rho) = -\alpha/\rho$.

Déterminer la multiplicité des niveaux. Comparer avec le cas d'un champ coulombien (à trois dimensions) $U(r) = -\alpha/r$.

4.14. Pour une particule se trouvant dans un puits de potentiel bidimensionnel de profondeur infinie et dont la forme est donnée dans le problème 4.8, chercher de façon approchée l'énergie de l'état fondamental par la méthode variationnelle en approximant la fonction d'onde par des expressions de la forme ($\rho < a$) :
a) $\Psi_0(\rho) = A(a - \rho)$;
b) $\Psi_0(\rho) = B\cos(\pi\rho/2a)$.

Comparer les résultats obtenus à la valeur exacte.

4.15. Même question que dans le problème précédent, mais pour une énergie notée $E_{n_\rho=0,|m|=1}$ du premier état excité d'une particule dont la projection du moment est $|m| = 1$. Approximer la fonction d'onde radiale par un polynôme du second degré satisfaisant les conditions limites nécessaires aux points $\rho = 0$ et $\rho = a$.

4.16. Donner une valeur approchée de l'énergie de l'état fondamental d'un oscillateur plan par la méthode variationnelle en utilisant une fonction d'essai de la forme

$$\Psi_0(\rho) = C\exp(-\alpha\rho),$$

α étant un paramètre variationnel. Comparer à la valeur exacte (voir problème 4.5).

4.17*. Dans le cas bidimensionnel, chercher la fonction de Green de l'équation de Schrödinger pour une particule libre d'énergie $E < 0$ et qui décroît pour $\rho \to \infty$.

4.18*. Dans le cas bidimensionnel, chercher la fonction de Green $G_E^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}')$ de l'équation de Schrödinger pour une particule libre d'énergie $E > 0$. Les indices ($\pm$) indiquent la nature de son comportement asymptotique pour $\rho \to \infty$:

$$G_E^{(\pm)} \sim \exp\left[\pm i\sqrt{2\mu E/\hbar^2}\rho\right].$$

4.19*. Chercher la fonction de Green $G_E(\varphi, \varphi')$ d'un rotateur plan (voir problème 4.1). En assimilant la fonction de Green G_E à une fonction analytique de la variable complexe E, montrer qu'elle possède des points singuliers, des pôles et établir la correspondance entre les positions de ces pôles dans le plan E et les niveaux d'énergie du rotateur.

4.2 ETATS DU SPECTRE DISCRET DANS DES CHAMPS CENTRAUX

4.20. Comment varient les valeurs $E_{n_r l}$ des niveaux d'énergie du spectre discret d'une particule :

a) pour une valeur fixée de l et lorsque n_r augmente ;
b) pour une valeur fixée de n_r et lorsque l augmente ?

4.21. Pour une particule se trouvant dans un champ central

a) existe-t-il des niveaux doublement dégénérés ?
b) quelle multiplicité peut acquérir le premier niveau d'excitation ?
c) que peut-on dire des nombres quantiques d'un niveau si sa multiplicité de dégénérescence vaut 7 ? 9 ?

4.22. Notons E_N l'énergie du $N^{\text{ème}}$ niveau du spectre discret d'une particule dans un champ central (les niveaux sont numérotés par ordre croissant de l'énergie ; l'état fondamental correspond à $N = 1$). Indiquer les limites imposées aux valeurs maximales possibles :

a) du moment de la particule dans les états d'énergie E_N ;
b) de la multiplicité de ce niveau.

4.23. Chercher les niveaux d'énergie et les fonctions d'onde normées des états stationnaires d'un oscillateur sphérique $U(r) = kr^2/2$ en utilisant la méthode de séparation des variables dans l'équation de Schrödinger en coordonnées cartésiennes. Déterminer la multiplicité des niveaux.

4.24. Pour un oscillateur sphérique, trouver les valeurs des nombres quantiques n_r, l correspondant aux quatre niveaux d'énergie les plus bas en utilisant uniquement la multiplicité des niveaux (voir problème précédent).

Quelle combinaison des fonctions d'onde $\Psi_{n_1 n_2 n_3}$ correspond à l'état d'un oscillateur de moment $l = 0$ pour $N = n_1 + n_2 + n_3 = 2$?

4.25*. Chercher les niveaux d'énergie et les fonctions propres $\Psi_{n_r lm}(r, \theta, \varphi)$ de l'hamiltonien d'un oscillateur sphérique à partir de la solution de l'équation de Schrödinger en coordonnées sphériques. Classer les états de l'oscillateur correspondant au $N^{\text{ème}}$ niveau d'énergie suivant les nombres quantiques n_r, l et donner leur parité. Quelle est la multiplicité de ces niveaux ?

4.26*. Montrer que pour un oscillateur à trois dimensions les opérateurs

$$\widehat{T}_{ik} = \widehat{p}_i \widehat{p}_k / \mu + k \widehat{x}_i \widehat{x}_k$$

commutent avec l'hamiltonien

$$\widehat{H} = \widehat{\mathbf{p}}^2 / 2\mu + k\mathbf{r}^2/2.$$

En montrant que le commutateur des opérateurs $\widehat{\mathbf{l}}^2$ et $\widehat{T}_{11}$ est différent de zéro, expliquer la dégénérescence "accidentelle" des niveaux d'énergie de l'oscillateur.

4.27*. En mécanique classique, dans un potentiel coulombien $U(r) = -\alpha/r$, le vecteur $\mathbf{A} = \mathbf{p} \wedge \mathbf{M}/\mu - \alpha\mathbf{r}/r$ est une intégrale du mouvement. Donner la forme de l'opérateur hermitien $\widehat{\mathbf{A}}$ qui peut être assimilé à la grandeur vectorielle classique $\mathbf{A}$.

Calculer les commutateurs $[\widehat{H}, \widehat{A}_i]$ et $[\widehat{\mathbf{l}}^2, \widehat{A}_i]$ et expliquer la nature "accidentelle" de la dégénérescence des niveaux d'énergie d'une particule qui se trouve dans un champ coulombien.

4.28. Pour l'électron, dans l'état fondamental d'un atome (d'un ion) hydrogénoïde, déterminer $\overline{r^n}$.

4.29. Déterminer le potentiel effectif (moyen) $\varphi(r)$ agissant sur une particule chargée qui passe à proximité d'un atome d'hydrogène non excité (en négligeant la polarisation de ce dernier). Obtenir les valeurs limites $\varphi(r)$ pour les grandes et petites distances de l'atome.

4.30*. Déterminer le champ électrique moyen crée par un atome d'hydrogène dans l'état $2p$ avec une valeur déterminée $m = 0$ de la projection du moment de l'électron sur l'axe z, à de grandes distances de l'atome.

4.31. Déterminer le champ électrique moyen ainsi que sa fluctuation (fluctuation des composantes du champ) à grande distance d'un atome d'hydrogène se trouvant dans l'état fondamental. Noter la nature de la décroissance des grandeurs obtenues lorsque la distance augmente.

4.32*. L'état stationnaire d'un électron dans l'atome d'hydrogène est caractérisé par les nombres quantiques "paraboliques" $n_1 = 1, n_2 = 0$ et le nombre quantique magnétique $m = 0$.

Calculer la distribution des probabilités de la coordonnée de l'électron z et de son moment l dans cet état (z est l'axe de la quantification parabolique). Déterminer le moment dipolaire moyen de l'atome dans l'état mentionné.

4.33. Déterminer les niveaux d'énergie $E_{n_r l}$ et les fonctions d'onde $\Psi_{n_r lm}$ des états stationnaires d'une particule dans un puits sphérique de profondeur infinie

$$U(r) = \begin{cases} 0, & r \leq a, \\ \infty, & r > a. \end{cases}$$

4.34*. Déterminer les niveaux d'énergie d'une particule dans le potentiel

$$U(r) = -\alpha\delta(r - a).$$

Quelle est la condition d'existence d'états liés de moment l ?

4.35. Déterminer les niveaux d'énergie des états liés associés aux fonctions d'onde s d'une particule dans le potentiel $U(r) = -U_0 \exp(-r/a)$.

Obtenir la condition d'existence de ces états.

Quelle est la condition d'apparition de nouveaux états s liés lorsque la profondeur du puits augmente ? Discuter, en particulier, le cas d'un puits profond $\mu a^2 U_0/\hbar^2 \gg 1$.

4.36. Chercher la correspondance entre d'une part les niveaux d'énergie $E_{n_r 0}$ et les fonctions d'onde normées $\Psi_{n_r 00}(r)$ des états s stationnaires ($l = 0$) du spectre discret d'une particule dans un champ central $U(r)$ et, d'autre part, les niveaux E_n et les fonctions normées $\Psi_n(x)$ dans un champ unidimensionnel $\tilde{U}(x)$ de la forme

$$\tilde{U}(x) = \begin{cases} U(x), & x \geq 0, \\ \infty, & x < 0. \end{cases}$$

Grâce à la correspondance établie, chercher la condition d'existence d'états liés dans le potentiel

$$U(r) = \begin{cases} -U_0, & r < a, \\ 0, & r \geq a. \end{cases}$$

4.37. Généraliser le résultat obtenu dans le problème 2.18 pour le cas des états s d'une particule dans un champ central $U(r)$.

Trouver la condition d'existence d'états liés dans le potentiel

$$U(r) = \begin{cases} \infty, & r < a, \\ -\alpha/r^n, & r \geq a \quad (n > 2). \end{cases}$$

4.38. Soient E_n et $\tilde{E}_n$ les valeurs du $n^{\text{ème}}$ niveau d'énergie du spectre discret dans les potentiels $U(r)$ et $\tilde{U}(r)$ liés par la condition

$$\tilde{U}(r) = U(r) + \delta U(r), \qquad \delta U(r) \geq 0.$$

Montrer que $\tilde{E}_n \geq E_n$.

4.39. Montrer que si les paramètres du potentiel central

$$U(r) = -U_0/\mathrm{sh}^2(r/a)$$

sont tels qu'il n'y ait pas de "chute" de la particule sur le centre du champ, il n'y pas d'état lié.

4.40. Chercher la pression moyenne exercée par une particule se trouvant dans un état stationnaire dans un puits sphérique de profondeur infinie (voir 4.33) sur la "paroi" du puits.

4.41. Déterminer des valeurs approchées de l'énergie de l'état fondamental d'une particule dans le potentiel coulombien $U = -\alpha/r$, par la méthode variationnelle, en utilisant les fonctions d'essai de la forme

a) $\Psi = C\exp(-\kappa^2 r^2)$;

b) $\Psi = \begin{cases} C(a-r), & r < a, \\ 0, & r > a, \end{cases}$

où α, a sont les paramètres variationnels. Comparer à la valeur exacte.

4.42. Même question que dans problème précédent, mais pour un oscillateur harmonique $U = kr^2/2$ et des fonctions d'essai de la forme :

a) $\Psi = C\exp(-\alpha r)$;

b) $\Psi = \begin{cases} C(a-r), & r < a, \\ 0, & r > a. \end{cases}$

4.43. Obtenir la valeur approchée de l'énergie de l'état $2p$ d'une particule dans le potentiel coulombien, par la méthode variationnelle, en utilisant une fonction d'essai de la forme

$$\Psi(\mathbf{r}) = (\mathbf{a}\cdot\mathbf{r})\exp(-\kappa^2 r^2),$$

où $\mathbf{a}$ est un vecteur constant (voir problèmes 3.59 et 3.60) et κ un paramètre variationnel. Comparer à la valeur exacte.

4.44. Même question que dans problème précédent, mais pour le premier état excité d'un oscillateur de moment $l = 1$ et une fonction d'essai

$$\Psi(\mathbf{r}) = (\mathbf{a}\cdot\mathbf{r})\exp(-\alpha r).$$

4.45*. Chercher la fonction de Green $G_E(\mathbf{r},\mathbf{r}')$, décroissante pour $r \to \infty$, d'une particule libre d'énergie $E < 0$. A l'aide de la fonction de Green, écrire l'équation de Schrödinger pour les états liés dans un potentiel $U(r)$, décroissant pour $r \to \infty$, sous forme d'une équation intégrale.

4.46*. Comme on le sait, pour une particule dans un potentiel d'attraction central $U(r) \le 0$, $U(r) \to 0$ pour $r \to \infty$, les états liés n'existent pas toujours. Montrer que l'inégalité

$$\int_0^\infty r|U(r)|dr \ge \hbar^2/2\mu$$

est une condition nécessaire d'existence de ces états.

Comparer la condition nécessaire ainsi établie avec la condition exacte d'existence d'états liés dans les potentiels suivants :

a) puits rectangulaire (voir 4.36) ;

b) puits exponentiel examiné dans le problème 4.35.

4.47*. Montrer que l'inégalité

$$\int_0^\infty r|U(r)|dr \geq (2l+1)\hbar^2/2\mu$$

constitue une condition nécessaire d'existence d'au moins un état lié d'une particule de moment l dans un potentiel central attractif $U(r) \leq 0$ ($U(r) \to 0$ pour $r \to \infty$).

4.48. Sur la base du principe variationnel et en utilisant une fonction d'essai de la forme $\Psi = C\exp(-\kappa r)$ ($\kappa > 0$ étant un paramètre variationnel), obtenir la condition suffisante d'existence dans un potentiel central attractif $U(r) \leq 0$, $U(r) \to 0$ pour $r \to \infty$, d'au moins un état lié.

Appliquer la condition obtenue aux champs suivants :
a) puits δ (voir problème 4.34) ;
b) puits exponentiel (voir problème 4.35) et comparer à la condition exacte.

4.49. Pour les potentiels indiqués ci-dessous, comparer les trois valeurs suivantes du paramètre $\xi = \mu a^2 U_0/\hbar^2$ (caractérisant la profondeur du puits de potentiel correspondant) : ξ_n, valeur du paramètre ξ nécessaire à l'existence dans le champ d'états liés (voir problème 4.46) ; ξ_0, valeur exacte et ξ_s, valeur correspondant à la condition suffisante (voir problème précédent).
a) puits δ (voir problème 4.34): $U(r) = -U_0 a\delta(r-a)$;
b) puits exponentiel (voir problème 4.35) ;
c) potentiel de Yukawa $U(r) = -U_0 a\exp(-r/a)/r$ (la valeur $\xi_0 = 0,84$ est obtenue par calcul numérique).

4.50. Même question que dans le problème 4.48, mais pour une particule se trouvant dans le potentiel

$$U(r) = -U_0\exp(-r^2/a^2).$$

avec une fonction d'essai de la forme

$$\Psi = C\exp(-\kappa^2 r^2).$$

Etablir de même la condition nécessaire d'existence d'états liés à partir de la condition obtenue dans le problème 4.46.

4.51. Même question que dans le problème 4.48, mais pour un état lié ayant le moment $l = 1$. Choisir une fonction d'essai de la forme

$$\Psi = (\mathbf{a}\cdot\mathbf{r})\exp(-\kappa r).$$

Appliquer la condition obtenue au potentiel de Yukawa

$$U = -\alpha\frac{e^{-r/r_0}}{r}$$

et comparer à la condition nécessaire calculée dans le problème 4.47.

4.52. Chercher la distribution des impulsions d'une particule dans l'état fondamental d'un potentiel coulombien $U = -\alpha/r$.

4.53. Pour l'état fondamental d'une particule dans un puits de potentiel sphérique de profondeur infinie (voir 4.33), chercher la fonction de distribution des impulsions de la particule.

4.54. Trouver les états liés de moment $l = 0$ dans le potentiel

$$U(r) = -\alpha\delta(r - a),$$

en utilisant la solution de l'équation de Schrödinger en représentation $\mathbf{p}$.

4.55*. Chercher la solution de l'équation de Schrödinger du problème précédent satisfaisant à la condition $\Phi(p) = 0$ pour $p \leq p_0$ ($p_0 > 0$).

Montrer, qu'en posant ainsi le problème, il existe, dans un puits de profondeur α *arbitraire*, un état lié dans lequel la particule se localise dans un domaine limité de l'espace et chercher l'énergie de liaison de la particule dans le cas d'un puits peu profond $\mu\alpha a/\hbar^2 \ll 1$ (comparer au résultat obtenu dans le problème précédent).

La formation, dans ce cas, d'un état lié, en présence d'une attraction aussi faible soit-elle, constitue ce qu'on appelle l'effet Cooper, phénomène constituant la base du mécanisme microscopique de la supraconductivité.

4.56. Déterminer les niveaux d'énergie quasi discrets (leur position et leur largeur) des états s d'une particule dans le potentiel $U(r) = \alpha\delta(r - a)$.

Discuter en particulier le cas d'une barrière peu transparente $\mu\alpha a/\hbar^2 \gg 1$ et de niveaux quasi discrets pas trop excités.

CHAPITRE 5

SPIN

5.1 FORMALISME DU SPIN $s = 1/2$

5.1. Pour une particule de spin $s = 1/2$ chercher les spineurs Ψ_{s_i} avec $i = 1, 2, 3$ (fonctions propres des opérateurs de spin $\widehat{s}_x$, $\widehat{s}_y$, $\widehat{s}_z$) décrivant les états de la particule avec une projection déterminée du spin sur les axes x, y, z du système de coordonnées.

5.2. Donner la forme de l'opérateur projection du spin $\widehat{s}_{\mathbf{n}}$ sur une direction arbitraire définie par le vecteur unitaire $\mathbf{n}$.

Quelle est la valeur moyenne de la projection du spin $\mathbf{s} \cdot \mathbf{n}$ sur l'axe $\mathbf{n}$ dans un état ayant une projection du spin $s_z = \pm 1/2$ sur l'axe z ?

Quelles sont les probabilités pour avoir une projection du spin $\pm 1/2$, sur la direction $\mathbf{n}$, dans ces états ?

5.3. Chercher les valeurs propres de l'opérateur $\widehat{f} = a + \mathbf{b} \cdot \widehat{\boldsymbol{\sigma}}$ (a étant un nombre, $\mathbf{b}$ un vecteur, $\widehat{\boldsymbol{\sigma}}$ les matrices de Pauli).

5.4. Est-ce que les carrés des projections du spin d'un électron sur les axes x, y, z peuvent prendre simultanément des valeurs déterminées ?

5.5. Un opérateur linéaire $\widehat{L}$ quelconque, agissant dans l'espace des variables de spin d'une particule de spin $s = 1/2$, est une matrice carrée de dimension deux. Quelles restrictions sont imposées aux éléments de la matrice par l'hermiticité de l'opérateur $\widehat{L}$?

Chercher les valeurs propres de cet opérateur hermitien.

5.6. Montrer que le système composé des quatre matrices $\widehat{I}$, $\widehat{\sigma}_x$, $\widehat{\sigma}_y$, $\widehat{\sigma}_z$ de dimension 2 est complet.

Montrer que les coefficients du développement d'une matrice $\widehat{A}$ de dimension 2

$$\widehat{A} = a_0\widehat{I} + a_x\widehat{\sigma}_x + +a_y\widehat{\sigma}_y + a_z\widehat{\sigma}_z \equiv a_0 + \mathbf{a}\cdot\widehat{\boldsymbol{\sigma}}.$$

peuvent être calculés à l'aide des formules

$$a_0 = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}\ \widehat{A}, \qquad \mathbf{a} = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}\ (\widehat{\boldsymbol{\sigma}}\widehat{A}).$$

5.7. Quelle est la forme explicite des opérateurs $|\widehat{\sigma}_z|$, $|\widehat{\boldsymbol{\sigma}}|$, $\widehat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot(\widehat{\boldsymbol{\sigma}}\wedge\widehat{\boldsymbol{\sigma}})$?

5.8. Simplifier l'expression $(\mathbf{a}\cdot\widehat{\boldsymbol{\sigma}})^n$, où $\mathbf{a}$ est un vecteur ordinaire (numérique), $\widehat{\boldsymbol{\sigma}}$ a pour composantes les matrices de Pauli, et où n est un entier.

5.9. Chercher l'expression explicite d'un opérateur de la forme $\widehat{F} = F(a + \mathbf{b}\cdot\widehat{\boldsymbol{\sigma}})$, où $F(x)$ est une fonction arbitraire de la variable x, $a =$ cte et où $\mathbf{b}$ est un vecteur.

Etudier, en particulier, l'opérateur $\widehat{F} = \exp(i\mathbf{a}\cdot\widehat{\boldsymbol{\sigma}})$.

5.10. Indiquer la forme des opérateurs de projection du spin de l'électron $\widehat{s}_x$, $\widehat{s}_y$, $\widehat{s}_z$ en représentation s_x.

Chercher la forme de l'opérateur unitaire $\widehat{U}$ réalisant le passage de la représentation s_z à la représentation s_x.

5.11. Donner, pour un spin $s = 1/2$, la forme des opérateurs $\widehat{s}_\pm = \widehat{s}_x \pm i\widehat{s}_y$ et étudier leur action sur les fonctions propres Ψ_{s_z}. Quelle est la forme des opérateurs $\widehat{s}_\pm^2$?

5.12. Soit un état décrit par la fonction d'onde de spin d'une particule de spin $s = 1/2$

$$\Psi = \mathrm{e}^{i\gamma}\begin{pmatrix}\cos\alpha \\ \sin\alpha\,\mathrm{e}^{i\beta}\end{pmatrix}$$

(c'est la forme la plus générale du spineur normé ; $0 \leq \alpha \leq \pi/2$, $0 \leq \beta < 2\pi$). Montrer qu'il existe dans l'espace un axe sur lequel la projection du spin possède la valeur déterminée $+1/2$. Chercher les angles polaire et azimutal de cet axe (comparer au résultat obtenu dans 3.62 pour le moment $L = 1$).

En se servant du résultat obtenu, résoudre le problème 5.1.

5.13. Chercher les projecteurs $\widehat{P}_{s_z=\pm 1/2}$ sur les états ayant une valeur déterminée de la projection du spin $s_z = \pm 1/2$ sur l'axe z.

5.14. Chercher les projecteurs $\widehat{P}_{s_n=\pm 1/2}$ sur les états ayant une valeur donnée de la projection du spin $\pm 1/2$ sur l'axe dont la direction est définie par le vecteur unitaire $\mathbf{n}$.

En utilisant ces opérateurs, chercher les spineurs $\Psi_{s_n=\pm 1/2}$. Comparer au résultat du problème 5.12.

5.15. Pour une particule de spin $s = 1/2$ indiquer la loi de transformation du spineur

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$$

lors de la rotation du système de coordonnées d'un angle φ_0 par rapport à l'axe dont la direction est définie par le vecteur unitaire $\mathbf{n}_0$.

Montrer que la grandeur $\Phi^*\Psi \equiv \varphi_1^*\psi_1 + \varphi_2^*\psi_2$ ne varie pas dans cette transformation, autrement dit qu'il s'agit d'une grandeur scalaire.

5.16. Montrer que dans la rotation du système de coordonnées les grandeurs

$$\mathbf{V} = \Phi^*\boldsymbol{\sigma}\widehat{\Psi} \qquad \left(V_i = \sum_{\alpha,\beta} \varphi_\alpha^*(\widehat{\sigma}_i)_{\alpha\beta}\psi_\beta \right)$$

se transforment comme les composantes d'un vecteur.

5.17. Pour deux particules de spin $s = 1/2$, chercher les fonctions propres Ψ_{SS_z} des opérateurs de spin total (plus précisément, de son carré) et de sa projection sur l'axe z.

La forme des fonctions Ψ_{10} et Ψ_{00} doit être recherchée, en tenant compte de la forme la plus générale de la fonction correspondant à $S_z = 0$:

$$\Psi_{S_z=0} = C_1\Psi_{1/2}^{(1)}\Psi_{-1/2}^{(2)} + C_2\Psi_{-1/2}^{(1)}\Psi_{1/2}^{(2)},$$

par l'une des méthodes suivantes :

a) directement à partir de l'équation aux fonctions propres de l'opérateur $\widehat{\mathbf{S}}^2$;
b) en utilisant les opérateurs $\widehat{S_\pm}$;
c) en utilisant les propriétés de symétrie des fonctions Ψ_S par rapport à la permutation des variables de spin des deux particules, qui sont analogues à celles établies dans le problème 3.39.

5.18. Montrer que pour un système de deux particules ayant une valeur déterminée du spin total, le système est aussi dans un état propre de l'opérateur $\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \widehat{\boldsymbol{\sigma}}_2$.

5.19. Deux particules de spin $s = 1/2$ se trouvent dans l'état décrit par le spineur $\Psi_{\alpha\beta} = \varphi_\alpha\chi_\beta$ ($\alpha, \beta = 1, 2$ étant les variables de spin de chaque particule), c'est-à-dire que les états de spin des particules ne sont pas corrélés. Les spineurs de chacune des particules sont normés à l'unité ; ainsi, par exemple,

$$\Phi = \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix}, \qquad \text{avec} \quad |\varphi_1|^2 + |\varphi_2|^2 = 1.$$

Quelles sont les probabilités des différentes valeurs de spin total dans cet état ? Que vaut $\overline{\widehat{S^2}}$? Etudier, en particulier, le cas de $\varphi_\alpha = \chi_\alpha$.

5.20. Représenter l'expression $(\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \widehat{\boldsymbol{\sigma}}_2)^2$ sous une forme contenant les matrices de Pauli $\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_{1,2}$ au premier ordre. Les indices 1,2 des matrices signifient que ces dernières sont des opérateurs agissant dans l'espace des variables de spin de la 1ère et de la 2ème particule.

5.21 Chercher la forme explicite de l'opérateur $\widehat{F} = F(a + b\,\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \widehat{\boldsymbol{\sigma}}_2)$, où $F(x)$ est une fonction arbitraire de la variable x, a et b étant des nombres quelconques.

5.22. En utilisant le résultat obtenu dans le problème 5.18, chercher les projecteurs $\widehat{P}_{S=0,1}$ agissant sur les états de deux particules de spin $s = 1/2$ et projetant sur les états correspondant à une valeur déterminée du spin total des particules.

5.23. Pour un système de deux particules de spin $s = 1/2$, chercher l'opérateur d'échange de spin $\widehat{C}$ dont l'action sur la fonction de spin $\Psi_{\alpha,\beta}$ ($\alpha, \beta = 1, 2$ étant les variables de spin de la 1ère et de la 2ème particule) est la suivante : $\tilde{\Psi}_{\alpha\beta} \equiv \widehat{C}\Psi_{\alpha\beta} = \Psi_{\beta\alpha}$. Autrement dit cet opérateur permute les variables de spin des deux particules (le problème consiste à expliciter l'opérateur $\widehat{C}$ au moyen des matrices de Pauli).

5.24. Pour un système de deux particules de spin $s = 1/2$, chercher les projecteurs $\widehat{P}_{SS_z}$ sur les états ayant une valeur déterminée du spin total S et de sa projection S_z sur l'axe z.

5.25. Trouver les fonctions propres et les valeurs propres des opérateurs suivants :
a) $\widehat{V}_1 = a(\widehat{\sigma}_{1z} + \widehat{\sigma}_{2z}) + b\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \widehat{\boldsymbol{\sigma}}_2$,
b) $\widehat{V}_2 = a_1\widehat{\sigma}_{1z} + a_2\widehat{\sigma}_{2z} + b\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \widehat{\boldsymbol{\sigma}}_2$,
où les paramètres a et b sont réels, de sorte que les opérateurs $\widehat{V}_{1,2}$ sont hermitiens.

5.26. Soient N particules de spin s, dans un état de spin total $S = Ns$. Quel est le spin total de $2, 3, \ldots, n$ de ces particules dans cet état ?

5.27. La fonction de spin d'un système de N particules de spin $s = 1/2$ a la forme

$$\Psi = C_1\Psi^{(1)}_{1/2}\Psi^{(2)}_{1/2}\ldots\Psi^{(n)}_{1/2}\Psi^{(n+1)}_{-1/2}\ldots\Psi^{(N)}_{-1/2}.$$

Chercher la valeur moyenne du carré du spin total de ce système de particules.

5.28. Pour les cas particuliers de $n = 1$ et $n = N - 1$ du problème précédent, chercher les probabilités des différentes valeurs du spin total S du système de particules.

5.29. L'état d'une particule de spin $s = 1/2$ est caractérisé par des valeurs déterminées des nombres quantiques l, m, s_z. Chercher dans l'état indiqué les probabilités des différentes valeurs du moment total $\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s}$ de la particule.

5.30. L'état d'un système est caractérisé par des valeurs déterminées des nombres quantiques J (moment du système) et $J_z = J$. Chercher les probabilités des différentes valeurs de la projection du moment $J_{\mathbf{n}}$ sur l'axe dont la direction dans l'espace est définie par le vecteur unitaire $\mathbf{n}$.

5.31. Les moments de deux sous-systèmes sans interaction valant 1 et 1/2 sont sommés en un moment total J. Dans les états suivants du système total :
a) $J = 3/2$, $J_z = \pm 1/2$;
b) $J = 1/2$, $J_z = \pm 1/2$,
chercher les probabilités des différentes valeurs de la projection du moment de chaque sous-système sur l'axe z et leurs valeurs moyennes. Pour résoudre ce problème, utiliser les opérateurs $\widehat{J}_{\pm}$.

5.32. Montrer que la fonction de spin d'un système de N particules de spin $s = 1/2$, correspondant à l'état ayant la valeur maximale possible $S = N/2$ du spin total, est symétrique par rapport à la permutation des variables de spin de l'une ou l'autre des particules. Les fonctions de spin possèdent-elles une symétrie déterminée pour d'autres valeurs du spin total ? Comparer au cas $N = 2$.

5.33. Dans un système de trois particules de spin $s = 1/2$ on a huit états de spin différents. Classer ces états suivant les valeurs du spin total du système. Chercher le système complet des fonctions Ψ_{SS_z} décrivant les états ayant des valeurs déterminées de S et S_z.

5.34. Classer les états de spin d'un système de quatre particules de spin $s = 1/2$ suivant les valeurs du spin total S du système.

5.35. Quelles valeurs moyennes non nulles des moments multipolaires (d_i – dipolaire électrique, μ_i – dipolaire magnétique, D_{ik} – quadrupolaire électrique) peut posséder un système caractérisé par une valeur déterminée J du moment total valant :
a) $J = 0$;
b) $J = 1/2$?

5.2 ETATS ORBITAUX D'UNE PARTICULE AVEC SPIN

5.36. Les états d'une particule ayant une valeur déterminée de la projection du spin sur la direction de l'impulsion sont appelés états *d'hélicité*. Pour une particule de spin $s = 1/2$, chercher les fonctions d'onde $\Psi_{p_0\lambda}$ décrivant les états ayant une impulsion $\mathbf{p}_0$ déterminée et une *hélicité* $\lambda = \pm 1/2$.

5.37. Donner la forme de l'opérateur hélicité et montrer que cet opérateur commute avec l'opérateur moment total $\widehat{\mathbf{j}} = \widehat{\mathbf{l}} + \widehat{\mathbf{s}}$ d'une particule.

5.38. Pour une particule de spin $s = 1/2$, montrer que la dépendance spin-angulaire la plus générale de la fonction d'onde d'un état $p_{1/2}$ (c'est-à-dire, d'un état de moment orbital $l = 1$ et de moment total $j = 1/2$) est de la forme

$$\Psi = (\widehat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{n})\chi, \text{ c'est-à-dire } \Psi_\alpha = (\widehat{\sigma_i})_{\alpha\beta} n_i \chi_\beta$$

où $\chi = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ représente un spineur arbitraire indépendant de la direction du vecteur $\mathbf{n}$ ($\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$ ou $\mathbf{n} = \mathbf{p}/p$ suivant la représentation choisie, $\mathbf{r}$ ou $\mathbf{p}$).

Normer à l'unité la fonction d'onde ci-dessus.

Quelle est la distribution de l'impulsion de la particule, dans cet état, suivant les directions ? Comparer au cas de l'état $s_{1/2}$.

Après avoir calculé la valeur moyenne du vecteur moment total de la particule dans l'état considéré, établir la relation liant $\bar{\mathbf{j}}$ au choix concret du spineur χ. Chercher la forme des fonctions décrivant les états à valeur déterminée $j_z = \pm 1/2$ de la projection du moment total sur l'axe z.

5.39. Analyser les états d'une particule de spin $s = 1/2$, dont les fonctions d'onde en représentation $\mathbf{p}$ ont une dépendance spin-angulaire de la forme

$$\Psi_\pm = (1 \pm \widehat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{n})\chi, \qquad \mathbf{n} = \mathbf{p}/p$$

(le spineur $\chi = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ ne dépend pas du vecteur $\mathbf{n}$), en donnant les valeurs des nombres quantiques suivants : le moment total de la particule j, le moment orbital l, la parité, l'hélicité λ.

5.40. Pour une particule de spin $s = 1/2$, montrer que la dépendance spin-angulaire le plus générale de la fonction d'onde d'un état $p_{3/2}$ est de la forme

$$\Psi = \{2(\mathbf{c} \cdot \mathbf{n}) + i(\mathbf{c} \wedge \mathbf{n}) \cdot \widehat{\boldsymbol{\sigma}}\}\chi$$

(le vecteur arbitraire $\mathbf{c}$ et le spineur $\chi = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ ne dépendent pas du vecteur $\mathbf{n}$).

Pour quel choix des composantes du vecteur $\mathbf{c}$ et du spineur χ la fonction mentionnée plus haut décrit-elle l'état $p_{3/2}$ d'une particule ayant une valeur déterminée $j_z = \pm 1/2, \pm 3/2$ de la projection du moment total sur l'axe z ?

5.41*. Pour une particule de spin $s = 1/2$, chercher la dépendance spin-angulaire des fonctions d'onde Ψ_{jlj_z} des états ayant des valeurs déterminées du moment orbital l, du moment total j et de la projection j_z du moment total sur l'axe z dans le cas où $j = l + 1/2$.

Résoudre le problème proposé par les deux méthodes suivantes :

a) en utilisant les projecteurs $\widehat{P}_j$;

b) en utilisant les opérateurs $\widehat{j}_\pm$.

5.42*. Même question que dans le problème précédent, mais dans le cas où $j = l - 1/2$.

5.43. Montrer que les fonctions Ψ_{jlj_z} étudiées dans les deux problèmes précédents sont liées par la relation

$$\Psi_{jl_1j_z} = (\widehat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{n})\Psi_{jl_2j_z}, \qquad l_{1,2} = j \pm 1/2, \qquad \mathbf{n} = \frac{\mathbf{r}}{r} \qquad \left(\mathbf{n} = \frac{\mathbf{p}}{p}\right).$$

Le corollaire à cette relation est que la forme des distributions angulaires de l'impulsion d'une particule dans les états définis par des valeurs données de j et de j_z mais pour les deux valeurs du moment orbital $l_{1,2} = j \pm 1/2$ sont identiques.

5.44*. Pour une particule de spin $s = 1/2$, chercher la dépendance spin-angulaire des fonctions d'onde $\Psi_{jj_z\lambda}$ (en représentation $\mathbf{p}$) décrivant les états d'une particule ayant des valeurs déterminées j du moment total, de sa projection j_z sur l'axe z et de l'hélicité λ.

5.45. Pour une particule chargée de spin $s = 1/2$, chercher la valeur moyenne du vecteur moment magnétique dans l'état Ψ_{jlj_z}.

L'opérateur moment magnétique $\widehat{\boldsymbol{\mu}}$ est de la forme

$$\widehat{\boldsymbol{\mu}} = \mu_0\widehat{\boldsymbol{\sigma}} + \frac{e\hbar}{2mc}\widehat{\mathbf{l}},$$

où μ_0 est le moment magnétique de spin de la particule ($\mu_e = -e_0\hbar/2m_ec$ pour l'électron, $\mu_p = 2,79e_0\hbar/2m_pc$ pour le proton, etc., $e_0 > 0$ est le module de la charge de l'électron), e sa charge.

CHAPITRE 6

MOUVEMENT DANS UN CHAMP MAGNÉTIQUE

6.1 PARTICULE CHARGÉE SANS SPIN DANS UN CHAMP MAGNÉTIQUE

6.1. Montrer qu'avec un choix de jauge particulier du potentiel vecteur, l'hamiltonien d'une particule chargée dans un champ magnétique[1]

$$\widehat{H} = \frac{1}{2\mu}\left(\widehat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r})\right)^2$$

peut prendre la forme

$$\widehat{H} = \frac{\widehat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} - \frac{e}{\mu c}\mathbf{A}\cdot\widehat{\mathbf{p}} + \frac{e^2}{2\mu c^2}\mathbf{A}^2.$$

Démontrer l'hermiticité de l'hamiltonien.

6.2. Donner l'expression de l'opérateur vitesse $\widehat{\mathbf{v}}$ d'une particule chargée dans un champ magnétique. Etablir les relations de commutation entre les différentes composantes de cet opérateur $[\widehat{v}_i, \widehat{v}_k]$, ainsi que $[\widehat{v}_i, \widehat{x}_k]$.

6.3. Chercher, pour une particule chargée se trouvant dans un champ magnétique homogène, les opérateurs des coordonnées du centre de l'orbite $\widehat{\boldsymbol{\rho}}_0$ du mouvement transversal (perpendiculaire au champ magnétique), du carré du rayon vecteur de ce centre $\widehat{\boldsymbol{\rho}}_0^2$ et du carré du rayon de l'orbite $\widehat{\boldsymbol{\rho}}_{\text{Lar}}^2$.

Etablir les relations de commutation entre ces opérateurs et l'hamiltonien.

---

1 On utilise dans les problèmes de ce chapitre la représentation $\mathbf{r}$, de sorte que $\widehat{\mathbf{A}}(\mathbf{r},t) \equiv \mathbf{A}(\mathbf{r},t)$.

Rappelons également que, dans ce livre, on utilise les unités CGS. Dans le SI, cet hamiltonien s'écrit comme

$$\widehat{H} = \frac{1}{2\mu}\left(\widehat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}(\mathbf{r})\right)^2$$

6.4. Chercher les fonctions d'onde normées des états stationnaires et les niveaux d'énergie d'une particule chargée sans spin dans un champ magnétique homogène pour les choix de jauge suivants du potentiel vecteur :
a) $A_x = 0, A_y = B_0 x, A_z = 0$;
b) $A_x = -B_0 y, A_y = 0, A_z = 0$.

6.5*. Dans le problème précédent, on a obtenu deux systèmes complets de fonctions $\Psi_{np_yp_z}$ et $\Psi_{np_xp_z}$ décrivant des états stationnaires d'une particule chargée dans un champ magnétique homogène $\mathbf{B}_0$, pour deux choix de jauge différents du potentiel vecteur. Chercher la relation entre ces fonctions d'onde.

6.6*. Chercher les fonctions d'onde des états stationnaires, ainsi que les niveaux d'énergie d'une particule chargée sans spin dans un champ magnétique homogène pour le choix de jauge suivant du potentiel vecteur : $\mathbf{A} = \frac{1}{2}\mathbf{B}_0 \wedge \mathbf{r}$.

Quelle est la multiplicité des niveaux d'énergie du mouvement transversal de la particule ? Peut-on normer à l'unité les fonctions d'onde des états stationnaires du mouvement transversal ?

6.7*. Chercher le spectre des valeurs propres des opérateurs carré du rayon vecteur $\widehat{\boldsymbol{\rho}}_0^2$ du centre de l'orbite du mouvement transversal et du carré du rayon de l'orbite $\widehat{\boldsymbol{\rho}}_{\text{Lar}}^2$ d'une particule dans un champ magnétique homogène (voir problème 6.3).

Montrer que les fonctions d'onde Ψ_{nmp_z} des états stationnaires de la particule dans un champ magnétique homogène, obtenues dans le problème précédent, sont fonctions propres de ces opérateurs.

6.8*. Caractériser la distribution spatiale transversale pour une particule chargée dans un champ magnétique homogène dans un état stationnaire Ψ_{nmp_z} (voir problème 6.6) dans le cas où $m = -\frac{e}{|e|}n$. Discuter en particulier le cas $n \gg 1$ et effectuer le passage à la limite de la mécanique classique.

6.9*. Même question que dans le problème précédent, mais pour $n = 0$. Discuter en particulier le cas $|m| \gg 1$.

6.10*. Dans les problèmes 6.4 et 6.6, on a montré que le spectre d'énergie du mouvement transversal d'une particule chargée dans un champ magnétique homogène est discret. De plus, les fonctions propres de l'hamiltonien, correspondant à ces niveaux ,possèdent une propriété intéressante, qui est, selon 6.4, de ne pas pouvoir être normalisées (donc, elles ne décrivent pas une particule localisée dans un domaine limité de l'espace). Or, selon 6.6, il existe des états stationnaires dans lesquels la particule est localisée dans un domaine limité de l'espace.

Interpréter la propriété suivante des fonctions propres : leur possibilité d'être ou non des fonctions normées à l'unité. Comparer au cas des états stationnaires du spectre discret d'une particule dans un puits de potentiel $U(\mathbf{r})$.

6.11. Chercher les niveaux d'énergie et les fonctions d'onde normées des états stationnaires d'une particule chargée sans spin se trouvant dans des champs magnétique et électrique homogènes et de direction perpendiculaire l'un par rapport à l'autre.

6.12. Chercher les niveaux d'énergie et les fonctions d'onde normées des états stationnaires d'un oscillateur sphérique chargé (particule chargée dans un champ central $U(r) = kr^2/2$), placé dans un champ magnétique homogène.

Dans le cas d'un champ magnétique faible, chercher la susceptibilité magnétique de l'oscillateur dans l'état fondamental.

6.13. Même question que dans le problème précédent, mais pour un rotateur chargé plan (particule chargée effectuant un mouvement dans un plan à une distance donnée a d'un point), placé dans un champ magnétique homogène perpendiculaire au plan de rotation.

6.14*. Montrer que le spectre d'énergie du mouvement transversal d'une particule chargée sans spin et placée dans le champ magnétique d'un solénoïde (le solénoïde est de longueur infinie et de section circulaire, de sorte que le champ magnétique est nul à l'extérieur du solénoïde et homogène et dirigé suivant son axe à l'intérieur) est continu. Montrer que le champ magnétique ne peut "lier" la particule, c'est-à-dire qu'il n'existe pas d'états stationnaires dans lesquels la particule se localise dans un domaine limité de l'espace suivant une direction transversale.

A la limite où le rayon du solénoïde $R = \infty$, un champ magnétique homogène s'établit dans tout l'espace au sein duquel le spectre du mouvement transversal de la particule est discret et il existe des états stationnaires localisés (voir, par exemple, le problème 6.6). Expliquer comment à partir d'un spectre continu pour $R \neq \infty$, on passe à un spectre discret pour $R = \infty$.

6.15*. Montrer qu'un champ magnétique $\mathbf{B}(\mathbf{r})$, non nul dans un domaine limité de l'espace, ne peut pas "lier" une particule chargée sans spin, c'est-à-dire qu'il n'existe pas d'états stationnaires de la particule dans lesquels elle se localise dans un domaine limité de l'espace.

6.16*. On sait que, dans les cas uni et bidimensionnel, et pour tout champ attractif, il existe toujours des états du spectre discret dans lesquels une particule se localise dans un domaine limité de l'espace. Dans le cas tridimensionnel ces états peuvent ne pas exister si le puits de potentiel est de profondeur suffisamment faible.

Montrer qu'en présence d'un champ magnétique homogène, une particule chargée acquiert toujours, dans un potentiel attractif quelconque $U(r)$ satisfaisant aux conditions $U(r) \leq 0$, $U(r) \to 0$ pour $r \to \infty$, des états stationnaires dans lesquels elle se localise dans un domaine limité de l'espace (et non seulement suivant la direction transversale), ce qui signifie, qu'en présence d'un champ magnétique, tout puits peut "lier" une particule.

6.2 PARTICULE AVEC SPIN DANS UN CHAMP MAGNÉTIQUE

6.17. Chercher les fonctions d'onde des états stationnaires et les niveaux d'énergie d'une particule neutre de spin $s = 1/2$ et de moment magnétique de spin μ_0 (tel que $\widehat{\boldsymbol{\mu}} = \mu_0 \widehat{\boldsymbol{\sigma}}$) dans un champ magnétique homogène.

6.18. Chercher les niveaux d'énergie et les fonctions d'onde des états stationnaires du spectre discret du mouvement transversal d'un neutron dans le champ magnétique d'un solénoïde.

6.19. Un neutron se trouve dans un champ magnétique stationnaire ayant la forme : $B_\rho = B_\varphi = 0$, $B_z = B(\rho)$ (système de coordonnées cylindriques). Réduire le problème de la recherche des fonctions d'onde des états stationnaires du neutron et des niveaux d'énergie qui leur correspondent à la solution d'une équation unidimensionnelle.

6.20. Il existe dans un demi-espace $x > 0$ un champ magnétique homogène de la forme $B_x = B_y = 0$, $B_z = B_0$. Dans le domaine de $x < 0$ le champ magnétique est nul. Chercher le coefficient de réflexion de neutrons polarisés (c'est-à-dire de neutrons ayant une valeur déterminée de la projection du spin sur l'axe z) sur la surface de séparation.

Etudier les cas où les neutrons incidents arrivent sur la surface de séparation depuis les domaines $x > 0$ et $x < 0$. Chercher la relation entre les angles d'incidence, de réflexion et de réfraction. Les neutrons incidents possèdent une impulsion donnée $\mathbf{p}$.

6.21. Chercher les fonctions d'onde des états stationnaires et les niveaux d'énergie d'une particule chargée de spin $s = 1/2$ et de moment magnétique de spin μ_0 dans un champ magnétique homogène. Comparer aux résultats obtenus dans les problèmes 6.4 et 6.6.

6.22. Montrer que l'hamiltonien de Pauli d'un électron (de même que celui du muon) dans un champ électromagnétique peut se mettre sous la forme

$$\widehat{H} = \frac{\{\widehat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot (\widehat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}/c)\}^2}{2\mu} + e\varphi(\mathbf{r}).$$

Est-ce que cette représentation de l'hamiltonien est aussi valable pour les autres particules de spin $s = 1/2$ (proton, neutron, etc.) ?

6.23. Montrer que pour un électron dans un champ magnétique stationnaire, la projection du spin sur la direction de la vitesse de l'électron est une intégrale du mouvement.

Est-ce le cas pour une particule quelconque de spin $s = 1/2$?

6.24. Montrer qu'un champ magnétique $\mathbf{B}(\mathbf{r})$, non nul dans un domaine limité de l'espace, ne peut "lier" un électron, c'est-à-dire qu'il n'existe pas d'états stationnaires d'un électron pour lesquels il se localise dans un domaine limité de l'espace (comparer avec 6.15).

Est-ce le cas pour les autres particules de spin $s = 1/2$?

6.3 CHAMP MAGNÉTIQUE CRÉÉ PAR LES MOUVEMENTS ORBITAUX ET PAR LE SPIN DES PARTICULES

6.25. Chercher le champ magnétique moyen $\mathbf{B}(0)$, à l'origine des coordonnées créé par une particule chargée sans spin placée dans le potentiel coulombien du noyau $U = -Ze^2/r$ dans les états $1s$ et $2p$.

6.26. Dans les conditions du problème précédent, chercher les éléments matriciels de l'opérateur moment magnétique de la particule entre les différents états du niveau d'énergie correspondant au nombre quantique principal $n = 2$.

6.27. Etablir la relation entre les valeurs moyennes des vecteurs du moment orbital $\overline{\mathbf{l}}$ et du moment magnétique $\overline{\boldsymbol{\mu}}$ pour une particule chargée sans spin placée dans un champ magnétique.

Montrer que la relation obtenue ne contredit pas l'invariance de jauge.

6.28*. Chercher les composantes de la densité de courant d'une particule chargée sans spin placée dans un champ magnétique homogène dans l'état stationnaire Ψ_{nmp_z} (voir problème 6.6).

6.29*. Chercher les composantes de la densité de courant d'une particule chargée de spin $s = 1/2$ et de moment magnétique μ_0 placée dans un champ magnétique homogène dans l'état stationnaire $\Psi_{nmp_z s_z}$ (voir problème 6.21 et comparer au résultat obtenu dans le problème précédent).

6.30*. Un électron est placé dans le champ coulombien d'un noyau de charge Ze dans l'état fondamental. Chercher le champ magnétique moyen créé par l'électron dans l'espace.

6.31*. Chercher le champ magnétique moyen créé, à l'origine des coordonnées, par une particule de spin $s = 1/2$ et de moment magnétique μ_0 se trouvant dans un état stationnaire s dans un champ central.

CHAPITRE 7

EVOLUTION DES ÉTATS EN FONCTION DU TEMPS

7.1 PARTICULES SANS SPIN

7.1. Trouver la règle de dérivation par rapport au temps du produit de deux opérateurs.

7.2. Chercher la forme de l'opérateur vitesse $\widehat{\mathbf{v}} = \widehat{\dot{\mathbf{r}}}$ d'une particule chargée sans spin placée dans un champ électromagnétique. Comparer au problème 6.2.

7.3. Chercher l'opérateur accélération $\widehat{\mathbf{w}} = \widehat{\dot{\mathbf{v}}}$ d'une particule chargée dans un champ électromagnétique.

7.4. Montrer que la valeur moyenne de la dérivée par rapport au temps d'une grandeur physique qui ne dépend pas explicitement du temps est nulle pour un état stationnaire du spectre discret.

7.5. Montrer que la valeur moyenne de la force s'exerçant sur une particule dans un état stationnaire du spectre discret est nulle.

On peut résoudre le problème de deux manières :
a) en utilisant le résultat obtenu dans le problème précédent ;
b) directement, en cherchant la valeur moyenne de l'opérateur force.

7.6. Démontrer le théorème du viriel pour la mécanique quantique.

On peut résoudre le problème par les trois procédés suivants :
a) en cherchant la valeur moyenne de l'opérateur $d(\widehat{\mathbf{p}} \cdot \widehat{\mathbf{r}})/dt$ (de façon analogue à la démonstration utilisée en mécanique classique) ;

b) en utilisant le fait que les valeurs propres de l'hamiltonien (les niveaux d'énergie du système) sont extrémales et en étudiant la transformation d'échelle des fonctions d'onde des états stationnaires du système ;
c) en utilisant le résultat obtenu dans le problème 1.28.

7.7. Montrer que pour un système de N particules chargées se déplaçant dans un domaine limité de l'espace, on a l'égalité (la " règle des sommes" ; voir de même le problème 14.8 du tome II)

$$\frac{2\mu}{e^2\hbar^2}\sum_m (E_m - E_n)|(d_i)_{nm}|^2 = N \qquad (i = 1, 2, 3),$$

où $(d_i)_{nm}$ sont les éléments matriciels du moment dipolaire du système, la sommation s'effectue sur tous les états stationnaires du système, μ et e sont la masse et la charge des particules.

7.8. Discuter la conservation de la densité de probabilité et de la norme de la fonction d'onde d'une particule dans le cas où son interaction avec le champ extérieur est décrite par un potentiel hermitien non local, autrement dit quand l'opérateur énergie potentielle (en représentation $\mathbf{r}$) est un opérateur intégral à noyau $U(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$:

$$\widehat{U}\Psi(r) \equiv \int U(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\Psi(\mathbf{r}')dV'.$$

Comparer au cas classique où le potentiel est local $\widehat{U} = U(\mathbf{r})$.

7.9*. Etudier l'équation de Schrödinger dans laquelle l'énergie potentielle est une fonction complexe :

$$U(\mathbf{r}) = U_0(\mathbf{r}) + iU_1(\mathbf{r}),$$

U_0, U_1 étant des fonctions réelles (potentiel optique).

Déterminer si la norme de la fonction d'onde dans le temps se conserve au cours de son mouvement dans un tel champ. La variation de la norme de la fonction d'onde peut s'interpréter comme l'absorption (ou la production) de particules dans le champ extérieur. Comment est lié le signe de la partie imaginaire du potentiel à la nature de ce processus ?

7.10. L'état d'une particule dans un puits de potentiel rectangulaire de profondeur infinie et de largeur a $(0 < x < a)$ à $t = 0$ est de la forme

$$\Psi(x, t = 0) = A\sin^3\frac{\pi x}{a}.$$

Chercher la fonction d'onde à un instant t quelconque. Montrer qu'au bout d'un certain temps T la particule revient à l'état initial.

7.11. Comment varie en fonction du temps l'état d'un rotateur plan si, à l'instant initial ($t = 0$), il est décrit par la fonction d'onde

$$\Psi(\varphi, t = 0) = A \sin^2 \varphi \ ?$$

7.12. Un rotateur spatial se trouve à $t = 0$ dans l'état décrit par la fonction d'onde $\Psi = A \cos^2 \theta$. Chercher la fonction d'onde du rotateur à un instant t quelconque.

7.13. L'état d'une particule libre à l'instant $t = 0$ est décrit par la fonction d'onde

$$\Psi(x, t = 0) = A \exp\left(-\frac{x^2}{2a^2} + \frac{imv_0 x}{\hbar}\right).$$

Chercher la fonction d'onde de la particule en fonction du temps, ainsi que les grandeurs moyennes suivantes : $\overline{x(t)}$, $\overline{p(t)}$, $\overline{(\Delta x(t))^2}$, $\overline{(\Delta p(t))^2}$ (voir de même les problèmes 7.18 et 7.36).

7.14. Dans les conditions du problème précédent montrer que la largeur du paquet d'onde $\overline{(\Delta x(t))^2}$ à l'instant t a une valeur minimale qui ne dépend pas des paramètres définissant la fonction d'onde à $t = 0$.

7.15. Etudier pour $t = 0$ le paquet d'ondes normé

$$\Psi(x, t = 0) = \int c(E) \Psi_E(x) dE, \qquad \int |\Psi|^2 dx = 1,$$

où les fonctions $\Psi_E(x)$ sont les fonctions propres de l'hamiltonien d'une particule correspondant aux niveaux d'énergie E du spectre continu.

Montrer que dans l'état considéré la densité de la probabilité de présence de la particule en tout point de l'espace tend vers zéro pour $t \to \infty$ (ceci ne contredit pas la conservation de la normalisation de la fonction d'onde, car avec la diminution de la densité de probabilité, la largeur du paquet augmente).

7.16. L'état d'une particule dans un puits de Dirac δ (voir 2.11) est décrit à l'origine des temps par la fonction d'onde

$$\Psi(x, t = 0) = A \exp(-\beta |x|), \qquad \beta > 0.$$

Quelle est la probabilité de trouver la particule dans l'intervalle $(x, x + dx)$ pour $t \to \infty$? Chercher la valeur de l'intégrale

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t = \infty)|^2 dx$$

et la comparer avec sa valeur initiale. Interpréter le résultat obtenu.

7.17. L'état d'une particule libre à $t = 0$ est décrit par la fonction d'onde normée $\Psi_0(x)$ (de plus, la fonction d'onde $\Phi_0(p)$ en représentation $\mathbf{p}$ est supposée connue). Chercher le comportement asymptotique de la fonction d'onde $\Psi(x,t)$ pour $t \to \infty$. Montrer que la norme de la fonction d'onde se conserve.

Pour illustrer le résultat obtenu, étudier la forme du paquet d'ondes examiné dans 7.13 pour $t \to \infty$.

7.18*. Un oscillateur harmonique se trouve à $t = 0$ dans l'état décrit par une fonction d'onde de la forme

$$\Psi(x, t = 0) = A \exp\left[-\frac{(x - x_0)^2}{2a^2} + \frac{ip_0 x}{\hbar}\right],$$

où $a = (\hbar/m\omega)^{1/2}$. Chercher la fonction d'onde en fonction du temps, ainsi que les grandeurs moyennes suivantes : $\overline{x(t)}$, $\overline{p(t)}$, $\overline{(\Delta x(t))^2}$, $\overline{(\Delta p(t))^2}$ (voir de même 7.36).

7.19*. Chercher la fonction de Green dépendant du temps (aussi appelée propagateur) $G(x, t; x', t')$ pour une particule libre. Cette fonction qui satisfait à l'équation de Schrödinger (en variable x, t) est égale à $\delta(x - x')$ pour $t = t'$.

En utilisant la fonction de Green obtenue, résoudre le problème 7.13.

Généraliser le résultat obtenu au mouvement libre de la particule dans l'espace, c'est-à-dire chercher la fonction de Green $G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t')$.

7.20. Chercher la fonction de Green dépendant du temps $G(\mathbf{p}, t; \mathbf{p}', t')$ d'une particule libre en représentation $\mathbf{p}$.

7.21*. Chercher la fonction de Green dépendant du temps pour le mouvement libre d'une particule sur un demi-axe, c'est-à-dire dans le potentiel

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x > 0, \\ 0, & x < 0. \end{cases}$$

7.22*. Une paroi impénétrable décrite par le potentiel du problème précédent est frappée par un paquet d'ondes ayant à $t = 0$ la forme

$$\Psi(x, t = 0) = A \exp\left[\frac{ip_0 x}{\hbar} - \frac{(x + x_0)^2}{2a^2}\right]$$

($p_0 > 0$, $x_0 > 0$; on suppose que $x_0 \gg a$, de sorte qu'on peut prendre $\Psi(x, t = 0) = 0$ pour $x \geq 0$).

Etudier la réflexion de ce paquet sur la paroi en se servant de la fonction de Green obtenue dans le problème précédent.

7.23. Pour une particule placée dans un champ homogène, décrit par un potentiel $U(x) = -F_0 x$, chercher la fonction de Green temporelle en représentation $\mathbf{p}$.

7.24. Pour une particule placée dans un champ homogène $U(x) = -F_0 x$, chercher la fonction de Green dépendant du temps en représentation $\mathbf{r}$.

En utilisant le résultat obtenu, étudier l'étalement du paquet d'ondes ayant à $t = 0$ la forme

$$\Psi(x, t = 0) = A \exp\left[\frac{ip_0 x}{\hbar} - \frac{(x - x_0)^2}{2a^2}\right].$$

7.25*. Chercher la fonction de Green dépendant du temps d'un oscillateur harmonique.

7.26. Chercher l'opérateur unitaire correspondant à la transformation de Galilée, c'est-à-dire au passage à un nouveau référentiel inertiel. Montrer que l'équation de Schrödinger est invariante par rapport à cette transformation.

Comment varie, lors de cette transformation, la fonction d'onde de la particule en représentation $\mathbf{r}$ et $\mathbf{p}$?

7.27. Chercher l'opérateur unitaire correspondant à la transformation de jauge des potentiels du champ électromagnétique. Montrer que l'équation de Schrödinger est invariante par rapport à cette transformation.

7.28. Comment doit se transformer l'hamiltonien d'un système pour que dans une transformation unitaire dépendant explicitement du temps, l'équation de Schrödinger conserve sa forme ? Comparer à la transformation canonique en mécanique classique.

7.29. Chercher les opérateurs coordonnée et impulsion en représentation d'Heisenberg d'une particule libre.

On peut résoudre le problème des deux manières suivantes :

a) en se servant de la transformation unitaire qui lie les opérateurs des grandeurs physiques en représentations d'Heisenberg et de Schrödinger ;
b) en résolvant les équations du mouvement pour les opérateurs d'Heisenberg.

7.30. Même question que dans le problème précédent, mais pour une particule placée dans le champ homogène décrit par le potentiel $U(x) = -F_0 x$.

7.31. Même question que dans les deux problèmes précédents, mais pour un oscillateur harmonique linéaire.

7.32. Pour une particule chargée placée dans un champ magnétique homogène, chercher les opérateurs rayon vecteur, vitesse et impulsion de la particule en représentation d'Heisenberg. Utiliser la jauge du potentiel vecteur de la forme $\mathbf{A} = (0, B_0 x, 0)$ (le champ magnétique est dirigé suivant l'axe z).

Résoudre ce problème des deux manières proposées dans l'énoncé du problème 7.29.

7.33. A partir des équations du mouvement des opérateurs d'Heisenberg, montrer que

$$[\widehat{p}_i(t), \widehat{x}_k(t)] = \frac{\hbar}{i}\delta_{ik}.$$

7.34. Chercher la valeur du commutateur " hétérotemporel " $[\widehat{p}(t), \widehat{x}(t')]$ pour :
a) une particule libre ;
b) une particule dans un champ homogène ;
c) un oscillateur.

7.35. Pour les systèmes étudiés dans 7.29–7.31, chercher l'hamiltonien $\widehat{H}(t)$ et le comparer à $\widehat{H}(t=0)$.

7.36. En utilisant la forme des opérateurs d'Heisenberg $\widehat{p}(t)$, $\widehat{x}(t)$, donner les valeurs moyennes en fonction du temps des grandeurs : $\overline{x(t)}$, $\overline{p(t)}$, $\overline{(\Delta x(t))^2}$, $\overline{(\Delta p(t))^2}$ pour
a) une particule libre ;
b) une particule dans un champ homogène ;
c) un oscillateur
dans l'état décrit par la fonction d'onde de la forme

$$\Psi(x, t=0) = A \exp\left[\frac{ip_0 x}{\hbar} - \frac{(x-x_0)^2}{2a^2}\right].$$

7.37. L'hamiltonien d'un système est de la forme $\widehat{H} = \widehat{H}_0 + \widehat{V}$, où l'hamiltonien " non perturbé " $\widehat{H}_0$ ne dépend pas explicitement du temps. Etudier la transformation unitaire qui permet de passer de la représentation de Schrödinger à la représentation interaction grâce à l'opérateur unitaire $\widehat{U} = \exp(i\widehat{H}_0 t/\hbar)$ (pour $\widehat{V} \equiv 0$ cette transformation décrit le passage à la représentation d'Heisenberg).

Quel est le lien entre les opérateurs des grandeurs physiques en représentation de Schrödinger et en représentation interaction ? Comment varient dans le temps les opérateurs et la fonction d'onde du système en représentation interaction ?

7.38. Chercher la forme des opérateurs coordonnée et impulsion, ainsi que celle de l'équation d'onde en représentation interaction pour une particule dans un champ homogène. On choisira pour l'hamiltonien non perturbé celui d'une particule libre.

7.39. Même question que dans le problème précédent, mais pour un oscillateur.

7.2 PARTICULES DOUÉES DE SPIN

7.40. Chercher les opérateurs vitesse $\widehat{\mathbf{v}}$ et accélération $\widehat{\mathbf{w}}$ (en représentation de Schrödinger) d'une particule non chargée ayant un moment magnétique de spin non nul (par exemple, un neutron) placée dans un champ magnétique.

7.41. Chercher la fonction d'onde de spin et les valeurs moyennes des composantes du spin d'une particule non chargée de spin $s = 1/2$ et de moment magnétique μ placée dans un champ magnétique homogène.

7.42. Généraliser le résultat obtenu dans le problème précédent au cas d'un champ magnétique homogène non stationnaire de direction constante, c'est-à-dire de la forme $\mathbf{B}(t) = B(t)\mathbf{n}_0$.

7.43. Montrer que pour une particule chargée ayant un spin et un moment magnétique de spin non nuls dans un champ magnétique homogène variable en fonction du temps $\mathbf{B}(t)$ (et un champ électrique arbitraire) il n'y a pas de corrélation entre les variables de spin et d'espace.

7.44. Une particule de spin $s = 1/2$ et de moment magnétique μ est placée dans un champ magnétique homogène $\mathbf{B}(t)$ de la forme

$$B_x = B_1 \cos\omega_0 t, \qquad B_y = B_1 \sin\omega_0 t, \qquad B_z = B_0,$$

où B_0, B_1, ω_0 sont des constantes.

A $t = 0$, la particule se trouve dans l'état ayant une une projection du spin sur l'axe z égale à $s_z = 1/2$. Chercher les probabilités d'avoir les différentes valeurs de la projection du spin sur l'axe z à l'instant t. Discuter, en particulier, le cas où $|B_1/B_0| \ll 1$; noter dans ce cas l'effet de résonance de la probabilité de "renversement" du spin pour la pulsation ω_0.

7.45. Pour une particule de spin $s = 1/2$ et de moment magnétique μ placée dans un champ magnétique homogène stationnaire, chercher les opérateurs vecteur du spin $\widehat{\mathbf{s}}(t)$ en représentation d'Heisenberg.

On peut résoudre ce problème de deux manières :

a) en utilisant la transformation unitaire liant les opérateurs des grandeurs physiques en représentations d'Heisenberg et de Schrödinger ;
b) en résolvant les équations de mouvement pour les opérateurs d'Heisenberg.

Déterminer les valeurs moyennes des composantes du spin en fonction du temps (comparer au problème 7.41).

7.46. Même question que dans le problème précédent, mais pour une particule dans un champ magnétique homogène non stationnaire dont la direction est constante.

7.47. Résoudre le problème 7.44 en utilisant le représentation interaction (voir, par exemple, problème 7.37). On choisit pour l'hamiltonien non perturbé

$$\widehat{H}_0 = -\mu B_1 \widehat{\sigma}_z.$$

7.48. Une particule de spin $s = 1/2$ et de moment magnétique μ est placée dans un champ magnétique homogène stationnaire de la forme

$$B_x = B_1, \qquad B_y = 0, \qquad B_z = B_0.$$

En utilisant la représentation interaction (voir, par exemple, problème 7.37) avec l'hamiltonien de spin non perturbé $\widehat{H}_0 = -\mu B_0 \widehat{\sigma}_z$, chercher les probabilités des différentes valeurs de la projection du spin sur l'axe z à l'instant t si pour $t = 0$ la projection du spin de la particule sur l'axe z est $s_z = 1/2$.

7.49. Dans les conditions du problème 7.41, chercher la fonction de Green dépendant du temps $G_{\alpha,\beta}(t,t')$ d'une particule (les indices $\alpha, \beta = 1, 2$ décrivent la variable de spin, c'est-à-dire que α, β sont des indices de spin).

7.50. Même question que dans le problème précédent, mais dans les conditions du problème 7.42.

7.51. Pour une particule non chargée de spin $s = 1/2$ et de moment magnétique μ placée dans un champ magnétique homogène stationnaire, chercher la fonction de Green dépendant du temps $G_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t')$ (α, β étant les variables de spin).

7.52. Généraliser le résultat obtenu dans le problème précédent dans le cas d'un champ magnétique homogène non stationnaire de direction constante, c'est-à-dire $\mathbf{B}(t) = B(t)\mathbf{n}_0$.

CHAPITRE 8

CALCUL DES PERTURBATIONS. PERTURBATIONS SOUDAINES ET ADIABATIQUES

8.1 CALCUL DES PERTURBATIONS STATIONNAIRES

8.1. Pour une particule placée dans un puits de potentiel de profondeur infinie et de largeur a $(0 < x < a)$, chercher au premier ordre du calcul des perturbations le déplacement des niveaux d'énergie sous l'action d'une perturbation de la forme (voir fig. 16) :

a) $V(x) = \dfrac{V_0}{a}(a - |2x - a|)$;

b) $V(x) = \begin{cases} V_0, & b < x < a - b, \\ 0, & 0 < x < b, \qquad a - b < x < a. \end{cases}$

Indiquer les conditions de validité du résultat obtenu.

8.2. Montrer que, pour n assez grand, la correction au premier ordre $E_n^{(1)}$ apportée aux niveaux d'énergie de la particule du problème précédent, pour une perturbation arbitraire $V(x)$, ne dépend pas de n.

8.3. Un oscillateur linéaire chargé est placé dans un champ électrique homogène $\mathbf{E}$ dirigé suivant l'axe d'oscillation. En assimilant l'action du champ électrique à une perturbation, calculer, aux deux premiers ordres du calcul des perturbations, le déplacement des niveaux d'énergie de l'oscillateur. Comparer le résultat obtenu à la solution exacte (voir problème 2.6).

8.4. Représentons l'hamiltonien de l'oscillateur sous la forme

$$\widehat{H} = \frac{\widehat{p}^2}{2m} + \frac{kx^2}{2} + \frac{\alpha x^2}{2}.$$

En assimilant de façon formelle le terme $\alpha x^2/2$ à une perturbation, calculer le déplacement des niveaux d'énergie de l'oscillateur (on prendra en compte les deux premiers ordres du calcul des perturbations). Comparer la réponse à la solution exacte. Quelle est la condition de convergence de la série obtenue par le calcul des perturbations ?

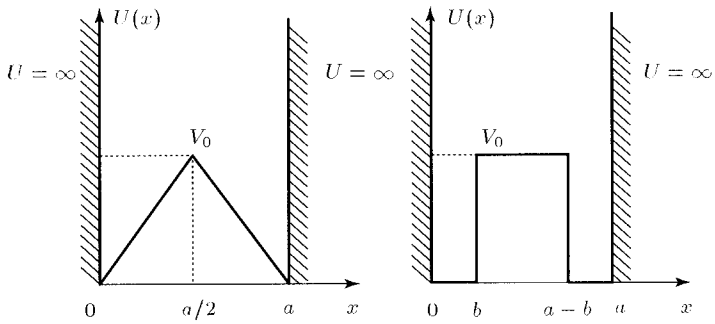

Figure 16

8.5. Une particule se trouvant dans un puits de potentiel de profondeur infinie et de largeur a $(0 < x < a)$ est soumise à une perturbation de la forme

$$V(x) = V_0 \cos^2 \frac{\pi x}{a}.$$

Calculer la variation des niveaux d'énergie de la particule au premier et au deuxième ordre du calcul des perturbations.

8.6. Dans les conditions du problème précédent, chercher la correction au troisième ordre à apporter à l'énergie de l'état fondamental de la particule.

8.7. Chercher aux deux premiers ordres du calcul des perturbations le déplacement des niveaux d'énergie d'une particule dans les conditions du problème 8.1 sous l'effet de la perturbation $V(x) = \alpha\delta(x - a/2)$. Indiquer les conditions de validité du résultat obtenu.

8.8. On sait que les fonctions propres d'un hamiltonien, obtenues par le calcul des perturbations au premier ordre sont de la forme

$$\Psi_n \approx \Psi_n^{(0)} + \sum_k c_{nk}^{(1)} \Psi_k^{(0)} \; ; \qquad c_{nk}^{(1)} = \frac{V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_n^{(0)}}, \qquad k \neq n,$$

La valeur du coefficient $c_{nn}^{(1)}$ est indéterminée (généralement elle est choisie égale à zéro : $c_{nn}^{(1)} = 0$).

Expliquer la nature de l'indétermination de la valeur de $c_{nn}^{(1)}$. Est-ce que cette indétermination demeure pour $c_{nn}^{(p)}$ dans une approximation d'ordre supérieur du calcul des perturbations ?

8.9. Un rotateur plan de moment d'inertie I et de moment électrique dipolaire $\mathbf{d}$ est placé dans un champ électrique homogène $\mathbf{E}_0$ se trouvant dans le plan de rotation. En assimilant l'action du champ à une perturbation, chercher la polarisabilité de l'état fondamental du rotateur.

8.10. Dans les conditions du problème précédent, chercher, aux deux premiers ordres du calcul des perturbations, le déplacement et la séparation des niveaux d'énergie des états excités du rotateur. Donner les fonctions d'onde à l'ordre zéro. Discuter en particulier le cas du premier niveau excité.

8.11. Un rotateur spatial de moment d'inertie I et de moment électrique dipolaire $\mathbf{d}$ parallèle à l'axe du rotateur est placé dans un champ électrique homogène $\mathbf{E}_0$ qui est assimilé à une perturbation. Chercher la polarisabilité de l'état fondamental du rotateur.

8.12. Dans les conditions du problème précédent, chercher au premier ordre du calcul des perturbations le déplacement des niveaux d'énergie des états excités du rotateur. Quelle est dans ce cas la nature de la levée de dégénérescence des niveaux ? Observe-t-on aux ordres supérieurs du calcul des perturbations une nouvelle levée de dégénérescence ?

8.13. Chercher la séparation du premier niveau d'énergie excité d'un oscillateur harmonique plan sous l'effet d'une perturbation de la forme $V = \alpha xy$ (le plan x, y est celui des oscillations) au premier ordre du calcul des perturbations. Trouver les fonctions d'onde perturbées à l'ordre zéro. Comparer à la solution exacte.

8.14. Même question que dans le problème précédent, mais pour le second niveau d'énergie de l'oscillateur.

8.15. Une particule se trouve au sein d'un ellipsoïde de révolution impénétrable, c'est-à-dire

$$V(x,y,z) = \begin{cases} 0, & \dfrac{x^2+y^2}{a^2} + \dfrac{z^2}{b^2} < 1, \\ \infty, & \dfrac{x^2+y^2}{a^2} + \dfrac{z^2}{b^2} > 1, \end{cases}$$

avec $|a-b| \ll a$. Chercher au premier ordre du calcul des perturbations le déplacement du niveau d'énergie de l'état fondamental de la particule par rapport au niveau d'une particule dans un puits sphérique de même volume que celui de l'ellipsoïde.

8.16*. Généraliser le résultat obtenu dans le problème précédent aux états excités de la particule. Discuter la levée de dégénérescence en fonction des projections du moment de la particule dans l'approximation du premier ordre puis aux ordres supérieurs du calcul des perturbations.

8.17. Une particule se trouve dans un potentiel central de la forme

$$U(r) = -\frac{U_0}{\exp(r/a) - 1},$$

avec $ma^2U_0/\hbar^2 \gg 1$.

Chercher au premier ordre du calcul des perturbations la différence entre les premiers niveaux d'énergie et les niveaux d'énergie dans un potentiel coulombien $\tilde{U}(r) = -U_0 a/r$. Noter la levée de dégénérescence coulombienne "accidentelle" des niveaux. Indiquer la condition de validité du résultat obtenu.

8.18. Même question que dans le problème précédent, mais pour le potentiel de Yukawa $U(r) = -\alpha \exp(-r/a)/r$ avec la condition $m\alpha a/\hbar^2 \gg 1$.

8.19. Chercher la forme approchée des fonctions d'onde et les premiers niveaux d'énergie des états stationnaires d'un rotateur plan de moment dipolaire $\mathbf{d}$ dans un champ électrique $\mathbf{E}_0$ pour lequel $Id\mathcal{E}_0/\hbar^2 \gg 1$. Indiquer la condition de validité du résultat obtenu.

8.20. Pour une particule se trouvant dans un champ central de la forme $U(r) = -\frac{\alpha}{r^p}$, $(0 < p < 2)$, chercher les niveaux d'énergie $E_{n_r l}$ du spectre discret pour les grandes valeurs du moment $l \gg 1$ (et pour des valeurs pas trop grandes du nombre quantique principal n_r). Indiquer la condition de validité du résultat obtenu. Dans le cas d'un champ coulombien ($p = 1$), comparer à la solution exacte du problème.

8.21. Chercher les niveaux d'énergie du mouvement "transversal" d'une particule chargée dans le champ d'un fil infini chargé uniformément lorsque la projection du moment de la particule sur la direction du fil prend de grandes valeurs. Indiquer les conditions de validité du résultat obtenu.

8.22. En utilisant les résultats des problèmes 2.57 et 2.59, dans lesquels on a établi la forme intégrale de l'équation de Schrödinger et où l'on a obtenu les coefficients de réflexion et de transmission des particules à l'aide des valeurs de la fonction d'onde dans le domaine d'action du potentiel, discuter la possibilité de calculer ces coefficients par la méthode des perturbations (au premier ordre). Indiquer les conditions de validité de l'approximation. Comparer au résultat obtenu dans 8.37. Appliquer le résultat obtenu au potentiel $U(x)$ admettant une solution exacte du problème (par exemple, problèmes 2.47, 2.48, 2.52).

8.2 CALCUL DES PERTURBATIONS NON STATIONNAIRES. TRANSITIONS DANS LE SPECTRE CONTINU

8.23. Une particule, se trouvant pour $t \to -\infty$ dans l'état fondamental d'un puits de profondeur infinie et de largeur a, est soumise à un potentiel de faible intensité variant avec le temps suivant la loi :

a) $V(x,t) = -xF_0 \exp(-t^2/\tau^2)$;

b) $V(x,t) = -xF_0 \exp(-|t|/\tau)$;

c) $V(x,t) = -xF_0/[1 + (t/\tau)^2]$.

Calculer, au premier ordre du calcul des perturbations, les probabilités d'excitation des différents états de la particule pour $t \to \infty$. Indiquer les conditions de validité des résultats obtenus.

8.24. Un oscillateur linéaire chargé est soumis à l'action d'un champ électrique homogène variant avec le temps suivant la loi :
a) $\mathcal{E}(t) = -\mathcal{E}_0 \exp[-(t/\tau)^2]$;
b) $\mathcal{E}(t) = -\mathcal{E}_0 \exp(-|t|/\tau)$.

En admettant qu'avant la mise en action du champ (pour $t \to -\infty$) l'oscillateur se trouve dans le $n^{\text{ème}}$ état stationnaire, chercher, au premier ordre du calcul des perturbations, les probabilités d'excitations des différents états pour $t \to \infty$.

8.25. Résoudre le problème précédent pour un champ variant suivant la loi :

$$\mathcal{E}(t) \propto [1 + (t/\tau)^2]^{-1}$$

correspondant à une impulsion donnée P_0 de la force. Discuter les cas limites $\omega\tau \ll 1$ et $\omega\tau \gg 1$.

8.26. Un champ électrique homogène variant avec le temps $\mathbf{E}(t) = f(t)\mathbf{E}_0$ agit sur un rotateur plan ayant un moment dipolaire $\mathbf{d}$. Avant la mise en action du champ, le rotateur a une valeur déterminée m de la projection du moment. Calculer au premier ordre du calcul des perturbations les probabilités des différentes valeurs de la projection du moment et de l'énergie du rotateur pour $t \to \infty$. Appliquer les résultats obtenus pour les champs électriques proposés dans le problème 8.24.

8.27. Même question que dans le problème précédent, mais pour un rotateur spatial dont le moment dipolaire est parallèle à son axe. Avant la mise en action du champ, le rotateur se trouve dans l'état ayant les nombres quantiques l et $l_z = m$; le champ électrique est dirigé suivant l'axe z.

8.28. Obtenir l'expression de l'amplitude de transition du $n^{\text{ème}}$ état initial (pour $t \to -\infty$) d'un spectre discret au $k^{\text{ème}}$ état final (pour $t \to +\infty$) au deuxième ordre du calcul des perturbations non stationnaires. On suppose que la perturbation pour $t \to \pm\infty$ est nulle.

8.29. Comme on le sait, le calcul des perturbations non stationnaires permettant de déterminer la probabilité de transition du $n^{\text{ème}}$ état initial au $k^{\text{ème}}$ état final, au premier ordre, conduit aux amplitudes de transition

$$a_{kn} \approx a_{kn}^{(1)} = -\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} V_{kn}(t)\mathrm{e}^{i\omega_{kn}t}dt, \qquad k \neq n\ ; \qquad a_{nn} \approx 1 - \frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} V_{nn}(t)dt.$$

La grandeur $W_n = |a_{nn}|^2$ est la probabilité pour que le système reste dans l'état initial. D'après l'expression donnée plus haut de l'amplitude a_{nn}, on obtient $W_n > 1$,

ce qui est en contradiction avec la conservation de la normalisation de la fonction d'onde. Expliquer ce paradoxe et donner la loi de conservation de la normalisation de la fonction d'onde obtenue au premier ordre du calcul des perturbations.

8.30. Dans les conditions du problème 8.24, chercher, au deuxième ordre du calcul des perturbations, les probabilités des transitions de l'oscillateur interdites au premier ordre[1]. Comparer les probabilités $W(n \to n \pm 2)$ et $W(n \to n \pm 1)$.

8.31. Un rotateur plan de moment dipolaire $\mathbf{d}$ et se trouvant dans l'état fondamental est soumis à un champ électrique homogène de faible intensité $\mathbf{E}(t) = \mathcal{E}(t)\mathbf{n}_0$ situé dans le plan de rotation et variant avec le temps suivant la loi

$$\mathcal{E}(t) = \begin{cases} 0, & t < 0, \\ \mathcal{E}_0 \exp(-t/\tau), & t > 0. \end{cases}$$

Chercher au deuxième ordre du calcul des perturbations non stationnaires les probabilités des transitions du rotateur (pour $t \to \infty$) interdites au premier ordre. Comparer aux valeurs des probabilités des transitions permises au premier ordre.

8.32. Même question que dans le problème précédent, mais pour un rotateur spatial se trouvant avant l'introduction du champ dans l'état fondamental (voir 8.27).

8.33. Soit un système se trouvant, pour $t < 0$, dans le $n^{\text{ème}}$ état stationnaire du spectre discret de l'hamiltonien $\widehat{H}_0$. A $t = 0$, on introduit une perturbation de la forme $\widehat{V}(t) = \widehat{V}_0 \sin \omega t$, où $\widehat{V}_0$ ne dépend pas du temps. Chercher la fonction d'onde du système, pour $t > 0$, au premier ordre du calcul des perturbations. Indiquer les conditions de validité de l'étude. Discuter en particulier le cas où la pulsation d'excitation ω_0 est proche d'une des pulsations de transition $\omega_{kn}^{(0)} = (E_k^{(0)} - E_n^{(0)})/\hbar$ (le $k^{\text{ème}}$ état appartient également au spectre discret de l'hamiltonien $\widehat{H}_0$).

8.34. Soit un système se trouvant pour $t \to -\infty$ dans le $n_1^{\text{ème}}$ état stationnaire du spectre discret de l'hamiltonien $\widehat{H}_0$ qui correspond à l'un des deux états dégénérés d'énergie $E_n^{(0)}$. On introduit une perturbation de la forme $\widehat{V}(t) = \widehat{V}_0 f(t)$, où $\widehat{V}_0$ est indépendant du temps, $|f| \lesssim 1$, $f(t) \to 0$ pour $t \to -\infty$. Chercher la fonction d'onde du système, à l'approximation "zéro", pour un instant quelconque t. Pour simplifier, on peut supposer que les éléments matriciels de la perturbation possèdent les propriétés

$$(V_0)_{n_1 n_1} = (V_0)_{n_2 n_2} = 0, \qquad (V_0)_{n_1 n_2} = (V_0)_{n_2 n_1} \equiv V_0 \ ;$$

n_1, n_2 étant deux états indépendants correspondant au niveau doublement dégénéré $E_n^{(0)}$ de l'hamiltonien non perturbé $\widehat{H}_0$.

A quelle condition pourrait-on appliquer l'approche exposée dans la solution du problème 8.28 pour le calcul de la fonction d'onde $\Psi(t)$ au premier ordre des perturbations ?

---

1 C'est-à-dire des transitions pour lesquels $W^{(1)}(n \to k) = 0$.

8.35. Soit une particule se trouvant pour $t < 0$ dans l'état fondamental d'un potentiel $U(x) = -\alpha\delta(x)$ (voir 2.11), soumise, pour $t > 0$, à un champ homogène de faible intensité dérivant d'un potentiel $\widehat{V}(x,t) = -xF_0 \sin\omega_0 t$. Chercher la probabilité $W_0(t)$ pour qu'à l'instant t, la particule demeure liée au puits. On suppose $\hbar\omega_0 \gg |E_0|$ ($|E_0|$ étant l'énergie de la liaison de la particule ; pour des particules d'énergie $E \gg |E_0|$ l'action du potentiel peut être assimilée à une perturbation, voir 8.22 et 8.37).

8.36. Résoudre le problème précédent pour une pulsation ω_0 d'excitation arbitraire. Est-ce que la particule peut "quitter" le puits si $\hbar\omega_0 < |E_0|$?

8.37. Une particule se trouve dans un potentiel unidimensionnel $U(x)$: $U(x) \to 0$ pour $x \to \pm\infty$. En assimilant l'action du potentiel à une perturbation, chercher les coefficients de réflexion et de transmission des particules d'énergie E en utilisant le calcul des perturbations dans un spectre continu. Indiquer les conditions de validité de cette étude. Comparer au résultat obtenu dans le problème 8.22.

8.3 PERTURBATIONS SOUDAINES

8.38. Dans le cadre du calcul des perturbations non stationnaires, obtenir les probabilités de transition du système sous l'effet des perturbations suivantes :
a) introduction instantanée : $\widehat{V}(t) = \widehat{V}_0\eta(t)$, c'est-à-dire

$$\widehat{V}(t) = \begin{cases} 0, & t < 0, \\ \widehat{V}_0, & t > 0, \end{cases} \qquad (\widehat{V}_0 \text{ est indépendant du temps}) \ ;$$

b) "impulsion" : $\widehat{V}(t) = \widehat{W}_0\delta(t)$.

Quelle est la condition de validité des expressions obtenues si l'introduction (et l'arrêt dans le cas b) de la perturbation n'est pas instantanée mais dure un certain temps fini τ ?

8.39. Un système décrit par l'hamiltonien $\widehat{H}_0$ se trouve dans le $n^{\text{ème}}$ état stationnaire du spectre discret. Pour $t = 0$, l'hamiltonien du système varie brusquement et devient égal (pour $t > 0$) à $\widehat{H}_f = \widehat{H}_0 + \widehat{V}_0$ ($\widehat{H}_0$ et $\widehat{V}_0$ ne dépendent pas du temps). Chercher les probabilités des différents états stationnaires du système pour $t > 0$. Pour une petite perturbation $\widehat{V}_0$, comparer au résultat obtenu dans le problème précédent.

8.40. L'hamiltonien d'un système est de la forme $\widehat{H} = \widehat{H}_0 + \widehat{W}_0\delta(t)$. Pour $t < 0$, le système se trouve dans le $n^{\text{ème}}$ état stationnaire du spectre discret. Chercher les probabilités de transitions vers les différents états stationnaires du système pour $t > 0$. Pour une petite perturbation $\widehat{V} = \widehat{W}_0\delta(t)$, comparer au résultat obtenu dans le problème 8.38.

Dans le cas où $\widehat{W}_0 = -xP_0$, donner une interprétation du résultat obtenu.

8.41. Une particule se trouve dans l'état fondamental d'un puits de potentiel de profondeur infinie et de la largeur a $(0 < x < a)$. A un certain instant, la paroi droite du puits se déplace en un temps bref τ au point b $(b > a)$. Chercher les probabilités d'excitation des différents états stationnaires de la particule après l'arrêt de la paroi. Indiquer les conditions de validité des résultats obtenus. Etudier le cas $b = 2a$.

8.42. Une particule se trouve dans l'état fondamental d'un puits de potentiel rectangulaire de faible profondeur et de la largeur a. Brusquement la largeur du puits varie jusqu'à la valeur $b \sim a$, la profondeur restant la même. Quelle est la probabilité pour que la particule quitte le puits ? Quelle est l'énergie de la particule ayant quité le puits ?

8.43. Résoudre le problème analogue au précédent dans le cas où l'on a une variation brusque d'un facteur n $(n \sim 1)$ de la profondeur du puits, la largeur demeurant inchangée.

8.44. Une particule se trouve dans l'état fondamental d'un puits de potentiel δ : $U(x) = -\alpha\delta(x)$. Brusquement le paramètre α caractérisant la "profondeur" du puits varie et devient égal à $\tilde{\alpha}$. Chercher la distribution en impulsions des particules quittant le puits à la suite de ce processus. On suppose que les fonctions d'onde du spectre continu peuvent être approximées par des ondes planes. Indiquer les conditions de validité du résultat obtenu.

8.45. Une particule se trouve dans l'état fondamental d'un potentiel de la forme $U(x) = -\alpha\delta(x)$. Pour $t = 0$, le puits commence à se déplacer à la vitesse V. Chercher la probabilité d'entraînement de la particule par le puits.

8.46. Sur un oscillateur chargé se trouvant dans l'état fondamental on fait agir brusquement un champ électrique homogène dirigé suivant l'axe des oscillations. Chercher les probabilités d'excitation des différents états de l'oscillateur après l'introduction du champ.

8.47. Le "point de suspension" d'un oscillateur linéaire se trouvant dans l'état fondamental se déplace à partir de l'instant $t = 0$ avec une vitesse constante V. Chercher les probabilités d'excitation des différents états de l'oscillateur pour $t > 0$.

8.4 APPROXIMATION ADIABATIQUE

8.4.1 APPROXIMATION ADIABATIQUE DANS LES PROBLÈMES NON STATIONNAIRES

8.48. L'hamiltonien $\widehat{H}(\widehat{p}, q, \lambda(t))$, d'un système exécutant un mouvement fini unidimensionnel dépend explicitement du temps. Pour chaque instant t on suppose

connus le spectre des valeurs propres $E_n(t)$ de l'hamiltonien "instantané" et le système complet de fonctions propres orthonormées correspondantes $\Psi_n(q,t)$.

Ecrire l'équation d'onde du système dans la représentation dont la base est le système de fonctions $\Psi_n(q,t)$.

La restriction aux systèmes unidimensionnels adoptée dans les problèmes 8.48 et 8.49 n'a rien de catégorique, et l'étude menée dans ces problèmes peut être généralisée aux systèmes à plusieurs degrés de liberté.

8.49. L'hamiltonien du système décrit dans le problème précédent est ici une fonction du temps t variant lentement. En supposant que le système se trouve à $t = 0$ dans le $n^{\text{ème}}$ état quantique, chercher sa fonction d'onde pour $t > 0$ au premier ordre des perturbations adiabatiques et indiquer les conditions de validité du résultat obtenu.

8.50. Un oscillateur chargé, se trouvant pour $t \to -\infty$ dans l'état fondamental, est soumis à un champ électrique homogène de la forme :

a) $\mathcal{E}(t) = -\mathcal{E}_0 \exp(-|t|/\tau)$;

b) $\mathcal{E}(t) = \begin{cases} 0, & t < 0, \\ \mathcal{E}_0(1 - \mathrm{e}^{-t/\tau}), & t > 0. \end{cases}$

Chercher les probabilités d'excitation des différents états de l'oscillateur chargé pour $t \to +\infty$ au premier ordre du calcul des perturbations dans l'approximation adiabatique. Indiquer les conditions de validité des résultats obtenus.

8.51. Un rotateur plan ayant un moment dipolaire d et se trouvant dans l'état fondamental est soumis, pour $t > 0$, à un champ électrique homogène de la forme $\mathbf{E}(t) = \mathcal{E}(t)\mathbf{n}_0$, où $\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_0[1 - \exp(-t/\tau)]$. Chercher la fonction de distribution suivant les projections du moment du rotateur pour $t \to +\infty$ dans le cas où $d\mathcal{E}_0 I \gg \hbar^2$, mais $d\mathcal{E}_0 I^2 \ll \tau\hbar^3$ (un champ intense que l'on introduit lentement).

8.52. Une particule se trouve dans le champ de deux puits de potentiel δ

$$U(x,t) = -\alpha[\delta(x - L(t)/2) + \delta(x + L(t)/2)].$$

Pour $t \to -\infty$, les puits se situent à une distance infinie l'un de l'autre et la particule est liée à l'un des puits. La distance entre les puits $L(t)$ diminue lentement et à l'instant T les puits "se confondent" en un seul : $U(x) = -2\alpha\delta(x)$. Quelle est la probabilité pour que la particule demeure dans l'état lié ?

8.4.2 APPROXIMATION ADIABATIQUE DANS LES PROBLÈMES STATIONNAIRES

8.53. L'hamiltonien d'un système composé de deux sous-systèmes est de la forme

$$\widehat{H} = \widehat{H}_1(x) + V(x,\xi) + \widehat{H}_2(\xi),$$

où x, ξ sont les coordonnées du 1er et du $2^{\text{ème}}$ sous-système, $V(x,\xi)$ décrit l'interaction entre les deux sous-systèmes. En supposant que les fréquences caractéristiques du 1er

sous-système ("rapide") sont beaucoup plus grandes que celles caractérisant le 2ème sous-système ("lent"), réduire le problème du calcul approché des niveaux d'énergie et des fonctions d'onde du système complet à la solution des équations de Schrödinger des deux sous-systèmes.

8.54. Une particule se déplace dans un potentiel bidimensionnel $U(x, y)$ de la forme

$$V(x,y) = \begin{cases} 0, & \dfrac{x^2}{a^2} + \dfrac{y^2}{b^2} \leq 1, \\ \infty, & \dfrac{x^2}{a^2} + \dfrac{y^2}{b^2} > 1, \end{cases}$$

avec $b \gg a$. Chercher les premiers niveaux d'énergie et les fonctions d'onde correspondantes.

8.55. Une particule se trouve à l'intérieur d'un ellipsoïde de révolution impénétrable, c'est-à-dire dans un potentiel

$$V(x,y,z) = \begin{cases} 0, & \dfrac{x^2+y^2}{a^2} + \dfrac{z^2}{b^2} \leq 1, \\ \infty, & \dfrac{x^2+y^2}{a^2} + \dfrac{z^2}{b^2} > 1, \end{cases}$$

avec $b \ll a$ (ellipsoïde très applati). Chercher les premiers niveaux d'énergie et les fonctions d'onde correspondantes.

8.56. Même question que dans le problème précédent, mais pour l'ellipsoïde très allongé ($b \gg a$).

8.57. L'hamiltonien d'un système est de la forme

$$\widehat{H} = \frac{\widehat{p}_x^2}{2m} + \frac{\widehat{p}_y^2}{2M} + \frac{k(x^2+y^2)}{2} + \alpha xy, \qquad |\alpha| < k,$$

avec $M \gg m$ (deux oscillateurs de masses très différentes couplés). Chercher les niveaux d'énergie et les fonctions d'onde correspondantes en utilisant l'approximation adiabatique.

8.58. Deux particules de masses très différentes $M \gg m$ se déplacent dans un puits de potentiel de profondeur infinie et de la largeur a. Les particules interagissent entre elles comme des points impénétrables, c'est-à-dire

$$U_{\text{interact}}(x_1, x_2) = \begin{cases} 0, & |x_1 - x_2| > \varepsilon, \\ \infty, & |x_1 - x_2| < \varepsilon \end{cases} \qquad \varepsilon \ll a,$$

(x_1 et x_2 étant des coordonnées des particules). Chercher les premiers niveaux d'énergie et les fonctions d'onde correspondantes.

SOLUTIONS

Chapitre 1

Opérateurs en mécanique quantique

1.1. Les opérateurs $\widehat{R}$, $\widehat{T}_a$ et $\widehat{M}_c$ sont linéaires, $\widehat{K}$ n'est pas linéaire. Tous les opérateurs mentionnés se confondent avec leurs complexes conjugués, autrement dit sont réels : $\widehat{R}^* = \widehat{R}$, etc.

La forme de l'opérateur $\tilde{\widehat{M}}_c$ se déduit de la suite d'égalités

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x)\widehat{M}_c\Phi(x)dx &\equiv \int \Psi^*(x)\sqrt{c}\Phi(cx)dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{c}}\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x/c)\Phi(x)dx \equiv \int (\tilde{\widehat{M}}_c\Psi^*(x))\Phi(x)dx,\end{aligned}$$

c'est-à-dire $\tilde{\widehat{M}}_c\Psi^*(x) \equiv \frac{1}{\sqrt{c}}\Psi^*(x/c) = \widehat{M}_{1/c}\Psi^*(x)$ ou $\tilde{\widehat{M}}_c = \widehat{M}_{1/c}$.

On en déduit que $\widehat{M}_c^\dagger \equiv \tilde{\widehat{M}}_c^{\ *} = \widehat{M}_{1/c}$.

On obtient de façon analogue : $\widehat{R}^\dagger = \tilde{\widehat{R}} = \widehat{R}$, $\tilde{\widehat{T}}_a = \widehat{T}_a^\dagger = \widehat{T}_{-a}$.

L'opérateur $\widehat{K}$ étant non linéaire, les notions d'opérateurs $\tilde{\widehat{K}}$ et $\widehat{K}^\dagger$ ne lui sont pas applicables (ces opérateurs n'existent pas).

Tous les opérateurs mentionnés présentent des inverses : $\widehat{R}^{-1} = \widehat{R}$, $\widehat{K}^{-1} = \widehat{K}$, $\widehat{T}_a^{-1} = \widehat{T}_{-a}$, $\widehat{M}_c^{-1} = \widehat{M}_{1/c}$.

1.2. En recherchant la forme des opérateurs $\tilde{\widehat{f}}$ et $\widehat{f}^\dagger$ à partir des relations

$$\int \Phi^*\widehat{f}\Psi d\tau = \int (\tilde{\widehat{f}}\,\Phi^*)\Psi d\tau = \int (\widehat{f}^\dagger\Phi)^*\Psi d\tau, \tag{1}$$

il faut se rappeler que les fonctions arbitraires Ψ et Φ dans (1) satisfont à certaines restrictions. En particulier,

$$\int |\Psi|^2 d\tau < \infty, \qquad \int |\Phi|^2 d\tau < \infty, \tag{2}$$

ce qui impose, par exemple, des restrictions à leur décroissance pour $r \to \infty$.

a) Des égalités $(id/dx)^* = -id/dx$ et

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Phi^*(x)\left(i\frac{d}{dx}\Psi(x)\right)dx = i\Phi^*\Psi\Big|_{x=-\infty}^{x=+\infty} - i\int\left(\frac{d}{dx}\Phi^*\right)\Psi dx$$

$$= -i\int\left(\frac{d}{dx}\Phi^*\right)\Psi dx \equiv \int\left(\widetilde{i\frac{d}{dx}}\Phi^*\right)\Psi dx,$$

on tire
$$\widetilde{i\frac{d}{dx}} = -i\frac{d}{dx} \text{ et } \left(i\frac{d}{dx}\right)^\dagger = i\frac{d}{dx},$$

c'est-à-dire que l'opérateur id/dx est hermitien.

b) Ici $d\tau \equiv r^2 dr d\Omega \equiv dV$, de sorte que

$$\int \Phi^*\left(\frac{\partial}{\partial r}\Psi\right) r^2 dr d\Omega = \int (\Phi^*\Psi r^2)\Big|_{r=0}^{r=\infty} d\Omega - \int\left\{\left(\frac{2}{r}+\frac{\partial}{\partial r}\right)\Phi^*\right\}\Psi dV =$$

$$= -\int\left\{\left(\frac{2}{r}+\frac{\partial}{\partial r}\right)\Phi^*\right\}\Psi dV \equiv \int\left(\widetilde{\frac{\partial}{\partial r}}\Phi^*\right)\Psi dV, \qquad (3)$$

c'est-à-dire
$$\widetilde{\frac{\partial}{\partial r}} = -\frac{2}{r} - \frac{\partial}{\partial r}.$$

Donc,
$$\left(i\frac{\partial}{\partial r}\right)^* = -i\frac{\partial}{\partial r}, \qquad \left(i\frac{\partial}{\partial r}\right)^\dagger = i\left(\frac{2}{r}+\frac{\partial}{\partial r}\right),$$

l'opérateur $i\partial/\partial r$ n'est pas hermitien. Dans (3) on a posé $\Phi^*\Psi r^2|_0^\infty = 0$, qui vient des conditions d'existence des intégrales (1), (2) pour $\widehat{f} = \partial/\partial r$.

1.3. Dans la démonstration, il faut tenir compte des propriétés $(\widehat{L}^*)^* = \widehat{L}$, $\tilde{\tilde{\widehat{L}}} = \widehat{L}$ et $\widetilde{\widehat{A}\widehat{B}} = \tilde{\widehat{B}}\tilde{\widehat{A}}$ venant de la définition des opérations de conjugaison complexe et de transposition d'opérateurs.

1.4. $\widehat{G} = \widehat{A}\widehat{C}\widehat{A}^\dagger$, alors $\tilde{\widehat{G}} = \widetilde{\widehat{A}\widehat{C}\widehat{A}^\dagger} = \tilde{\widehat{A}}^\dagger\tilde{\widehat{C}}\tilde{\widehat{A}}$ et $\widehat{G}^\dagger \equiv \tilde{\widehat{G}}^* = (\widehat{A}^\dagger)^\dagger\widehat{C}^\dagger\widehat{A}^\dagger = \widehat{A}\widehat{C}\widehat{A}^\dagger = \widehat{G}$.

1.5. $\widehat{A} = \dfrac{\widehat{F}+\widehat{F}^\dagger}{2}$, $\widehat{B} = \dfrac{\widehat{F}-\widehat{F}^\dagger}{2i}$.

1.6. Se vérifie directement par le calcul.

1.7. Représentons $\widehat{F}$ sous la forme $\widehat{F} = \widehat{A} + i\widehat{B}$, où $\widehat{A}$, $\widehat{B}$ sont des opérateurs hermitiens (voir problème 1.5) ; $\widehat{F}^2 = \widehat{A}^2 - \widehat{B}^2 + i(\widehat{A}\widehat{B} + \widehat{B}\widehat{A})$. Si $\widehat{A}\widehat{B} + \widehat{B}\widehat{A} = 0$, c'est-à-dire si $\widehat{A}$ et $i\widehat{B}$ – parties hermitienne et antihermitienne de l'opérateur $\widehat{F}$ – anticommutent, $\widehat{F}^2$ est alors un opérateur hermitien.

1.8. $\left[\sum_i \widehat{A_i}, \sum_k \widehat{B_k}\right] = \sum_i \widehat{A_i}\sum_k \widehat{B_k} - \sum_k \widehat{B_k}\sum_i \widehat{A_i} = \sum_{i,k}[\widehat{A_i}, \widehat{B_k}]$.

1.9. La relation recherchée découle de la suite d'égalités
$[\widehat{A}\widehat{B},\widehat{C}] = \widehat{A}\widehat{B}\widehat{C} - \widehat{C}\widehat{A}\widehat{B} = \widehat{A}\widehat{B}\widehat{C} - \widehat{A}\widehat{C}\widehat{B} + \widehat{A}\widehat{C}\widehat{B} - \widehat{C}\widehat{A}\widehat{B} = \widehat{A}[\widehat{B},\widehat{C}] + [\widehat{A},\widehat{C}]\widehat{B}.$
De façon analogue on peut obtenir $[\widehat{A},\widehat{B}\widehat{C}] = [\widehat{A},\widehat{B}]\widehat{C} + \widehat{B}[\widehat{A},\widehat{C}]$.

1.10. L'identité se vérifie directement par le calcul (en développant les commutateurs).

1.11. Non, elles ne le peuvent pas. La condition $[\widehat{P},\widehat{Q}] = -i\widehat{I}$ s'écrit

$$\sum_{k=1}^{N}(P_{nk}Q_{km} - Q_{nk}P_{km}) = -i\delta_{nm}. \tag{1}$$

Prenons la trace des matrices dans le premier et le second membre de l'égalité (1). En tenant compte de ce que Tr $(\widehat{P}\widehat{Q})$ = Tr $(\widehat{Q}\widehat{P})$, Tr $\widehat{I} = N$, on voit que la relation (1) ne peut pas être valable pour des matrices de rang fini. La matrice formée à partir du commutateur de deux matrices de rang fini possède une trace nulle.

On invite le lecteur à discuter pourquoi ceci n'est plus vrai pour des matrices de rang infini.

1.12.
a) Comme $\widehat{R}^2 = \widehat{I}$, il vient

$$\exp(i\pi\widehat{R}) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}(i\pi\widehat{R})^n = \widehat{I}\cos\pi + i\widehat{R}\sin\pi = -\widehat{I}.$$

b) En développant l'opérateur $\widehat{T_a}$ en série, il vient

$$\widehat{T_a}\Psi(x) = \sum_n \frac{a^n}{n!}\left(\frac{d}{dx}\right)^n \Psi(x) = \sum_n \frac{a^n}{n!}\Psi^{(n)}(x) = \Psi(x+a). \tag{1}$$

La dernière égalité dans (1) est le développement de la fonction en série de Taylor. Donc, l'opérateur $\widehat{T_a} = \exp(ad/dx)$ est l'opérateur translation, identique à celui introduit dans le problème 1.1.

1.13. Explicitons le développement cherché sous la forme

$$(\widehat{A} - \lambda\widehat{B})^{-1} = \sum_{n=0}^{\infty}\lambda^n\widehat{C}_n. \tag{1}$$

Appliquons à gauche l'opérateur $(\widehat{A} - \lambda\widehat{B})$ aux deux membres de (1) :

$$1 = (\widehat{A} - \lambda\widehat{B})\sum_n \lambda^n\widehat{C}_n. \tag{2}$$

En égalant les termes de même puissances de λ dans (2), on obtient

$$\widehat{A}\widehat{C}_{n+1} = \widehat{B}\widehat{C}_n, \qquad \widehat{C}_{n+1} = \widehat{A}^{-1}\widehat{B}\widehat{C}_n, \qquad \widehat{C}_0 = \widehat{A}^{-1}.$$

On a donc

$$[\widehat{A} - \lambda\widehat{B}]^{-1} = \widehat{A}^{-1} + \lambda\widehat{A}^{-1}\widehat{B}\widehat{A}^{-1} + \ldots = \widehat{A}^{-1}\sum_{n=0}^{\infty}\lambda^n(\widehat{B}\widehat{A}^{-1})^n.$$

1.14. Dérivons par rapport à λ l'opérateur de la forme $\widehat{f}(\lambda) = \mathrm{e}^{\lambda\widehat{A}}\widehat{B}\mathrm{e}^{-\lambda\widehat{A}}$:

$$\frac{d\widehat{f}}{d\lambda} = \widehat{A}\mathrm{e}^{\lambda\widehat{A}}\widehat{B}\mathrm{e}^{-\lambda\widehat{A}} - \mathrm{e}^{\lambda\widehat{A}}\widehat{B}\widehat{A}\mathrm{e}^{-\lambda\widehat{A}} = \mathrm{e}^{\lambda\widehat{A}}[\widehat{A}, \widehat{B}]\mathrm{e}^{-\lambda\widehat{A}}.$$

De façon analogue, on obtient les dérivées seconde et d'ordre supérieur :

$$\frac{d^2\widehat{f}}{d\lambda^2} = \mathrm{e}^{\lambda\widehat{A}}[\widehat{A}, [\widehat{A}, \widehat{B}]]\mathrm{e}^{-\lambda\widehat{A}}, \text{ etc.}$$

Finalement :

$$\mathrm{e}^{\widehat{A}}\widehat{B}\mathrm{e}^{-\widehat{A}} = \widehat{f}(\lambda = 1) = \sum_n \frac{1}{n!}\left(\frac{d^n\widehat{f}}{d\lambda^n}\right)_{\lambda=0} = \widehat{B} + \frac{1}{1!}[\widehat{A}, \widehat{B}] + \frac{1}{2!}[\widehat{A}, [\widehat{A}, \widehat{B}]] + \ldots$$

1.15. $L^*(\xi, \xi') = [L(\xi, \xi')]^*$, $\tilde{L}(\xi, \xi') = L(\xi', \xi)]$, $L^\dagger(\xi, \xi') = L^*(\xi', \xi)$. En représentant l'action de $\widehat{M}_c$ sur la fonction $\Psi(x)$ sous la forme

$$\widehat{M}_c\Psi(x) = \sqrt{c}\Psi(cx) = \sqrt{c}\int_{-\infty}^{+\infty}\delta(cx - x')\Psi(x')dx',$$

on obtient $M_c(x, x') = \sqrt{c}\delta(cx - x')$. De façon analogue

$$R(x, x') = \delta(x + x') \ ; \qquad T_a(x, x') = \delta(x - x' + a) \ ;$$

$$X(x, x') = x\delta(x - x'), \qquad \text{noyau de l'opérateur } \widehat{x} \equiv x \ ;$$

$$P(x, x') = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\delta(x - x'), \qquad \text{noyau de l'opérateur } \widehat{p} \equiv \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}.$$

1.16. En tenant compte du fait que les noyaux des opérateurs $\widehat{L}$ et $\widehat{L}^\dagger$ sont liés par la relation $L^\dagger(x, x') = [L(x', x)]^*$, il vient à partir de l'égalité $\widehat{L} = \widehat{L}^\dagger$

a) que $f(x)$ est une fonction réelle de la variable x ;
b) que la partie réelle de $f(x)$ est une fonction paire de x, la partie imaginaire étant une fonction impaire ;
c) que $f(x) = cg^*(x)$, où c est un nombre réel.

1.17. En prenant en compte la forme du noyau de l'opérateur $\widehat{C} = \widehat{A}\widehat{B}$

$$C(x, x') = \int A(x, x'')B(x'', x')dx'' \tag{1}$$

et celle du noyau $X(x,x') = x\delta(x-x')$ de l'opérateur $\widehat{x}$, on tire de la condition $\widehat{F}\widehat{x} - \widehat{x}\widehat{F} = 0$

$$\int \{F(x,x'')x''\delta(x''-x') - x\delta(x-x'')F(x'',x')\}dx'' = (x'-x)F(x,x') = 0. \qquad (2)$$

A partir de (2), on trouve la forme du noyau $F(x,x')$:

$$F(x,x') = f(x)\delta(x-x'), \qquad (3)$$

où $f(x)$ est une fonction arbitraire.

De façon analogue, de la condition $\widehat{G}\widehat{p} - \widehat{p}\widehat{G} = 0$ et de la forme du noyau

$$P(x,x') = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\delta(x-x')$$

on trouve après des transformations simples

$$\left(\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x'}\right) G(x,x') = 0, \qquad (4)$$

c'est-à-dire que $G(x,x')$ est une fonction de la forme $G(x,x') \equiv g(x-x')$.

1.18. De la condition $[\widehat{F},\widehat{x}] = 0$ (voir le problème précédent), il découle

$$F(x,x') = f(x)\delta(x-x'), \qquad (1)$$

de la condition $[\widehat{F},\widehat{p}] = 0$ il s'ensuit

$$F(x,x') \equiv g(x-x'). \qquad (2)$$

Les relations (1) et (2) ne peuvent se vérifier simultanément que si $f(x) = F_0 =$ cte ; alors $F(x,x') = F_0\delta(x-x')$. L'opérateur possédant un tel noyau est de la forme $\widehat{F} \equiv F_0\widehat{I}$.

1.19. La normalisation de la fonction d'onde à l'unité donne $|C| = (\pi a^2)^{-1/4}$. En utilisant la formule de la mécanique quantique pour les valeurs moyennes, il vient

$$\overline{x} = x_0, \quad \overline{x^2} = a^2/2 + x_0^2, \quad \overline{(\Delta x)^2} = \overline{x^2} - \overline{x}^2 = a^2/2,$$
$$\overline{p} = p_0, \quad \overline{p^2} = p_0^2 + \hbar^2/2a^2, \quad \overline{(\Delta p)^2} = \hbar^2/2a^2.$$

1.20. Pour $|C|^{-2} = \int \varphi^2(x)dx$ la fonction d'onde est normée à l'unité et

$$\begin{aligned}\overline{p} = \int \Psi^*\widehat{p}\Psi dx &= -i\hbar|C|^2 \int \left\{\varphi(x)\frac{d\varphi(x)}{dx} + i\frac{p_0}{\hbar}\varphi^2(x)\right\} dx = \\ &= |C|^2 p_0 \int \varphi^2(x)dx = p_0.\end{aligned}$$

1.21. Le moment dipolaire moyen du système vaut

$$\overline{\mathbf{d}} = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_n) \left(\sum_{a=1}^{n} e_a \mathbf{r}_a \right) \Psi(\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_n) \prod_{b=1}^{n} d^3 r_b. \tag{1}$$

Procédons dans (1) au changement de variable $\mathbf{r}_a \to \mathbf{r}'_a = -\mathbf{r}_a$:

$$\overline{\mathbf{d}} = -\int_{-\infty}^{+\infty} \sum_{a=1}^{n} e_a \mathbf{r}'_a |\Psi(-\mathbf{r}'_1, \ldots, -\mathbf{r}'_n)|^2 \prod_b d^3 r'_b. \tag{2}$$

Comme l'état a une parité déterminée, on a

$$\Psi(-\mathbf{r}_1, \ldots, -\mathbf{r}_n) = R\Psi(\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_n),$$

où $R = \pm 1$ est la parité de l'état du système, on obtient de (1) et (2) $\overline{\mathbf{d}} = -\overline{\mathbf{d}}$, c'est-à-dire $\overline{\mathbf{d}} = 0$.

1.22. $\overline{\widehat{L}\widehat{L}^\dagger} = \int \Psi^* \widehat{L}\widehat{L}^\dagger \Psi d\tau = \int (\widehat{L}^\dagger \Psi)^* \widehat{L}^\dagger \Psi d\tau \geq 0.$

De façon analogue $\overline{\widehat{L}^\dagger \widehat{L}} = \int |\widehat{L}\Psi|^2 d\tau \geq 0.$

1.23. Etant donné que $\widehat{f}^\dagger = \widehat{f}$, alors, en accord avec le problème précédent, dans un état quelconque du système on a $\overline{f^2} \geq 0$, y compris pour l'état correspondant à la valeur minimale de la grandeur f^2 ; mais dans ce dernier cas $\overline{f^2} = (f^2)_{\min} \geq 0$.

1.24. $f_i^2 = cf_i$, autrement dit, le spectre de valeurs propres de la grandeur f comprend deux valeurs : $f_1 = 0$, $f_2 = c$.

1.25. L'équation des fonctions propres et des valeurs propres de l'opérateur $\widehat{f}$ et sa solution sont :

$$-i\widetilde{\alpha}\frac{d}{dx}\Psi_f(x) + \beta x \Psi_f(x) = f\Psi_f(x), \tag{1}$$

$$\Psi_f(x) = C \exp\left\{ -\frac{i(\beta x - f)^2}{2\widetilde{\alpha}\beta} \right\} \tag{2}$$

($\widetilde{\alpha} = \alpha\hbar$). Il s'ensuit de (2) que les valeurs propres de f sont des nombres réels quelconques, le spectre étant continu, et les valeurs propres non dégénérées.

Le choix du coefficient C dans (2) à partir de la condition de normalisation

$$\int \Psi^*_{f'} \Psi_f(x) dx = \delta(f - f')$$

donne la valeur $|C| = (2\pi\widetilde{\alpha})^{-1/2}$.

On pourra démontrer que le système de fonctions (2) est complet et étudier les cas limites $\alpha \to 0$, $\beta \to 0$.

1.26. L'équation des fonctions propres et des valeurs propres $f(x)$

$$f(x)\int_{-\infty}^{\infty} f^*(x)\Psi(x)dx = f\Psi(x)$$

possède les solutions suivantes :
a) il y a une fonction propre $\Psi_0 = cf(x)$ correspondant à la valeur propre

$$f_0 = \int |f(x)|^2 dx > 0 \ ;$$

b) toutes les autres valeurs propres de l'opérateur sont nulles.

Il leur correspond les fonctions propres $\Psi_i(x)$ possédant la propriété

$$\int f^*(x)\Psi_i(x)dx = 0.$$

Ces fonctions sont donc orthogonales à la fonction $\Psi_0 = f(x)$. Il est évident que le nombre de ces fonctions est infini, c'est-à-dire que $f_1 = 0$ présente une multiplicité de dégénérescence infinie.

1.27. En agissant avec l'opérateur $\widehat{G}$

$$\widehat{G} = \prod_{i=1}^{N}(\widehat{f} - f_i) = (\widehat{f} - f_1)(\widehat{f} - f_2)\ldots(\widehat{f} - f_N), \tag{1}$$

sur une fonction arbitraire Ψ, on obtient $\widehat{G}\Psi = 0$, car une fonction arbitraire peut être représentée sous forme d'un développement en série sur les fonctions propres Ψ_k (correspondant à la valeur propre f_k) de l'opérateur $\widehat{f}$: $\Psi = \sum c_k\Psi_k$ (les fonctions propres d'un opérateur hermitien constituent un système complet), est que $(f - f_k)\Psi_k = 0$. Bref, $\widehat{G} \equiv 0$ et, compte tenu de (1), on obtient

$$\widehat{f}^N - \sum_{i=1}^{N} f_i\widehat{f}^{N-1} + \frac{1}{2}\sum_{i,k\ ;\ i\neq k} f_i f_k \widehat{f}^{N-2}\ldots + (-1)^N\prod_{i=1}^{N} f_i = 0, \tag{2}$$

autrement dit, l'opérateur $\widehat{f}^N$ s'exprime linéairement en fonction des opérateurs $\widehat{I}, \widehat{f}, \ldots, \widehat{f}^{N-1}$.

En particulier, pour $N = 2$, à partir de (2), on trouve

$$\widehat{f}^2 = (f_1 + f_2)\widehat{f} - f_1 f_2. \tag{3}$$

Pour l'opérateur $\widehat{R}$ on a $R_1 = -R_2 = 1$ et de (3) il s'ensuit que $\widehat{R}^2 = 1$.

Pour $N = 3$ et les valeurs propres égales à $f_1 = 0$ et $f_2 = -f_3 \equiv f_0$, à partir de (2), on trouve

$$\widehat{f}^3 = f_0^2\widehat{f}. \tag{4}$$

1.28. Dérivons par rapport à λ les deux membres de l'équation des fonctions propres :

$$\widehat{f}(\lambda)\Psi_n(\lambda) = f_n(\lambda)\Psi_n(\lambda), \tag{1}$$

$$\left(\frac{\partial \widehat{f}}{\partial \lambda}\right)\Psi_n(\lambda) + \widehat{f}\frac{\partial}{\partial \lambda}\Psi_n(\lambda) = \frac{\partial f_n}{\partial \lambda}\Psi_n(\lambda) + f_n\frac{\partial}{\partial \lambda}\Psi_n(\lambda). \tag{2}$$

Multiplions les deux membres de (2) à gauche par Ψ_n^* et intégrons par rapport aux coordonnées q dont dépendent les fonctions $\Psi_n(\lambda, q)$. Compte tenu de l'égalité

$$\int \Psi_n^* \widehat{f}\frac{\partial}{\partial \lambda}\Psi_n d\tau_q = \int (\widehat{f}\Psi_n)^* \frac{\partial}{\partial \lambda}\Psi_n d\tau_q = f_n \int \Psi_n^* \frac{\partial}{\partial \lambda}\Psi_n d\tau_q,$$

venant de l'hermiticité de l'opérateur $\widehat{f}$, on obtient la relation cherchée.

1.29. De l'égalité $\widehat{A}\widehat{L} - \widehat{L}\widehat{A} = 0$, appliquée aux fonctions propres Ψ_{L_i} de l'opérateur $\widehat{L}$ (L_i étant les valeurs propres), il s'ensuit que la fonction $\widehat{A}\Psi_{L_i}$ est également une fonction propre de $\widehat{L}$ correspondant à la même valeur propre L_i. Si la valeur propre L_i n'est pas dégénérée, alors $\widehat{A}\Psi_{L_i} = A_i\Psi_{L_i}$. De même, Ψ_{L_i} est fonction propre de l'opérateur $\widehat{B}$, c'est-à-dire $\widehat{B}\Psi_{L_i} = B_i\Psi_{L_i}$. Si toutes les valeurs propres L_i étaient non dégénérées, alors dans tous les états $\Psi_{L_i}(i = 1, 2, \ldots)$ on aurait la relation

$$(\widehat{A}\widehat{B} - \widehat{B}\widehat{A})\Psi_{L_i} = (A_iB_i - B_iA_i)\Psi_{L_i} = 0. \tag{1}$$

L'égalité (1) valable pour toutes les fonctions propres Ψ_{L_i} formant le système complet signifie que $\widehat{A}\widehat{B} - \widehat{B}\widehat{A} = 0$, ce qui contredit les conditions du problème. Donc parmi les valeurs propres L_i il existe obligatoirement des valeurs propres dégénérées.

1.30. Soit l'intégrale

$$J = \int |(\alpha\widehat{A_1} - i\widehat{B_1})\Psi|^2 d\tau, \tag{1}$$

où $\widehat{A}_1 = \widehat{A} - a$, $\widehat{B}_1 = \widehat{B} - b$; α, a, b étant des paramètres réels.

En vertu de la non-négativité de la fonction sous l'intégrale, il vient pour tous les α

$$J(\alpha) \geq 0. \tag{2}$$

En récrivant (1) sous la forme

$$J = \int (\alpha\widehat{A_1}^* + i\widehat{B_1}^*)\Psi^*(\alpha\widehat{A_1} - i\widehat{B_1})\Psi d\tau,$$

compte tenu de l'hermiticité des opérateurs $\widehat{A}_1$ et $\widehat{B}_1$, ainsi que de la définition de la moyenne (la fonction d'onde est normée à l'unité), il vient

$$J = \int \Psi^*(\alpha^2\widehat{A_1}^2 - i\alpha[\widehat{A_1}, \widehat{B_1}] + \widehat{B_1}^2)\Psi d\tau = \alpha^2\overline{\widehat{A_1}^2} - i\alpha\overline{[\widehat{A_1}, \widehat{B_1}]} + \overline{\widehat{B_1}^2}. \tag{3}$$

Comme $[\widehat{A_1}, \widehat{B_1}] = [\widehat{A}, \widehat{B}] = i\widehat{C}$, il s'ensuit de (2), (3)

$$\alpha^2\overline{(\widehat{A}-a)^2} + \alpha\overline{\widehat{C}} + \overline{(\widehat{B}-b)^2} \geq 0. \tag{4}$$

La condition de positivité du trinôme (4) de second degré en α exige

$$\overline{(\widehat{A}-a)^2} \cdot \overline{(\widehat{B}-b)^2} \geq \overline{\widehat{C}}^2/4. \tag{5}$$

En choisissant dans (5) $a = \overline{A}$, $b = \overline{B}$, on aboutit à l'inégalité cherchée.

L'égalité dans (5) se réalise, d'après (1) et (4), dans le cas où $(\alpha\widehat{A}_1 - i\widehat{B}_1)\Psi = 0$. En particulier, pour les opérateurs $\widehat{A} = \widehat{x}, \widehat{B} = \widehat{p}_x, \widehat{C} = \hbar$ cette condition devient

$$\left(\alpha x - \hbar\frac{d}{dx}\right)\Psi = f\Psi \tag{6}$$

($f = \alpha a - ib$ étant une grandeur complexe quelconque). La solution de l'équation (6) ($\alpha < 0$)

$$\Psi = C_0 \exp\left[\frac{(\alpha x - f)^2}{2\alpha\hbar}\right] \equiv \tilde{C}_0 \exp\left[\frac{ip_0 x}{\hbar} - \frac{(x-x_0)^2}{2a^2}\right]$$

est la forme explicite de la fonction d'onde minimisant la relation d'incertitude pour les opérateurs coordonnée et impulsion.

Il faut noter qu'en appliquant la formule (5) il est nécessaire d'être prudent. Cela ressort, par exemple, de son application pour les opérateurs $\widehat{A} = \widehat{l}_z \equiv -i\partial/\partial\varphi$ et $\widehat{B} = \widehat{\varphi} \equiv \varphi$ (pour lesquels $[\widehat{l}_z, \widehat{\varphi}] = -i$, de sorte que $\widehat{C} = -1$) :

$$\overline{(\Delta l_z)^2} \cdot \overline{(\Delta\varphi)^2} \geq 1/4.$$

Cette inégalité est dépourvu de sens physique vu que $\overline{(\Delta l_z)^2}$ peut prendre des valeurs quelconques (y compris être nul), alors que la grandeur $\overline{(\Delta\varphi)^2}$ ne peut pas être plus grande que π^2.

Le fait est que la relation définissant l'opérateur hermitien $\widehat{f}$ (utilisée essentiellement dans le passage de l'expression (1) à (3)) :

$$\int \Psi_2^* \widehat{f}\Psi_1 d\tau = \int (\widehat{f}\Psi_2)^* \Psi_1 d\tau \tag{7}$$

n'est vraie que pour une *classe déterminée* de fonctions. Cet ensemble de fonctions est appelé domaine de définition de l'opérateur hermitien $\widehat{f}$. C'est ainsi que pour l'opérateur $\widehat{l}_z = -i\partial/\partial\varphi$ on a au lieu de (7), la relation

$$\int_0^{2\pi} \Psi_2^* \left(-i\frac{\partial}{\partial\varphi}\Psi_1\right) d\varphi = \int_0^{2\pi} \left(-i\frac{\partial}{\partial\varphi}\Psi_2\right)^* \Psi_1 d\varphi - i\Psi_2^*\Psi_1\Big|_{\varphi=0}^{\varphi=2\pi}. \tag{8}$$

Toutes les fonctions $\Psi_{1,2}(\varphi)$ comprises dans le domaine de définition de l'opérateur $-i\partial/\partial\varphi$ doivent vérifier

$$\Psi_2^*\Psi_1|_{\varphi=0}^{\varphi=2\pi} \equiv \Psi_2^*(2\pi)\Psi_1(2\pi) - \Psi_2^*(0)\Psi_1(0) = 0, \tag{9}$$

c'est-à-dire

$$\frac{\Psi_1(2\pi)}{\Psi_1(0)} = \left(\frac{\Psi_2^*(0)}{\Psi_2(2\pi)}\right)^* = \text{cte} \tag{9'}$$

ou $\Psi_{1,2}(0) = \Psi_{1,2}(2\pi) = 0$. Comme on le voit aussitôt,

$$\text{cte} \equiv \exp(i\beta), \qquad \beta \text{ étant un nombre réel} \tag{9''}$$

(de plus, aux différentes valeurs de β correspondent des réalisations différentes de l'opérateur $-i\partial/\partial\varphi$ en tant que opérateur hermitien). Pour donner une interprétation physique à l'opérateur projection du moment et pour obtenir l'identité des points $\varphi = 0$ et $\varphi = 2\pi$ (soit pour les fonctions d'onde $\Psi(0) = \Psi(2\pi)$), on pose $\beta = 0$.

Ayant ainsi souligné le rôle important du domaine de définition dans la notion d'opérateur hermitien, on voit aussitôt que la formule (5) ne peut être obtenue qu'à condition de pouvoir utiliser les relations

$$\begin{aligned} \int \Psi^* \widehat{A}^2 \Psi d\tau &= \int (\widehat{A}\Psi)^* (\widehat{A}\Psi) d\tau, \\ \int \Psi^* \widehat{A}\widehat{B}\Psi d\tau &= \int (\widehat{A}\Psi)^* (\widehat{B}\Psi) d\tau, \end{aligned} \tag{10}$$

ainsi que les relations analogues obtenues par permutation des opérateurs $\widehat{A}$ et $\widehat{B}$. On a justifié de façon formelle ces relations en se référant à l'hermiticité des opérateurs. Maintenant, en tenant compte de ce qui a été dit plus haut sur le domaine de définition de l'opérateur, notons que la possibilité d'utiliser les relations (10) suppose que non seulement les fonctions d'onde Ψ, mais également les fonctions $\widehat{A}\Psi$ et $\widehat{B}\Psi$ appartiennent aux domaines de définition des opérateurs $\widehat{A}$ et $\widehat{B}$.

Dans les applications physiques, la fonction d'onde Ψ appartient au domaine de définition des opérateurs considérés en tant qu'hermitiens ; mais pour les fonctions $\widehat{A}\Psi$ et $\widehat{B}\Psi$ cette assertion peut s'avérer fausse et, dans ce cas, la relation (5) n'a plus de sens. De ce point de vue, dans le cas des opérateurs $\widehat{x}$ et $\widehat{p}_x$, l'utilisation des relations (10) ne pose pas de problème.

Pour les opérateurs $\widehat{l}_z$ et $\widehat{\varphi}$, la situation est toute autre et la relation (5) n'est plus applicable dans le cas général. De façon formelle, ceci est lié au fait que pour la fonction d'onde $\Psi(\varphi)$ appartenant au domaine de définition de l'opérateur $-i\partial/\partial\varphi$ (et remplissant la condition $\Psi(0) = \Psi(2\pi)$) la fonction $\widehat{\varphi}\Psi \equiv \varphi\Psi(\varphi)$ n'appartient plus au domaine de définition et, donc

$$\int_0^{2\pi} \Psi^* \widehat{l}_z \widehat{\varphi} \Psi d\varphi \neq \int_0^{2\pi} (\widehat{l}_z \Psi)^* \widehat{\varphi} \Psi d\varphi.$$

Toutefois, dans le cas considéré il est relativement facile de tenir compte de ces difficultés et d'obtenir une relation constituant une généralisation de (5).

En effet, en posant dans (1) $\widehat{A} = \widehat{l}_z, \widehat{B} = \widehat{\varphi}$ (de sorte que $\widehat{C} = -1$), une fois choisi $a = \overline{l}_z, b = \overline{\varphi}$, et compte tenu des relations

$$\int_0^{2\pi} (\widehat{l}_z \Psi)^* \widehat{\varphi} \Psi d\varphi = \int_0^{2\pi} \Psi^* \widehat{l}_z \widehat{\varphi} \Psi d\varphi + 2\pi i |\Psi(2\pi)|^2, \qquad \overline{l_z^2} = \int_0^{2\pi} |\widehat{l}_z \Psi|^2 d\varphi$$

on obtient facilement

$$J = \alpha^2(\overline{l_z^2} - \overline{l_z}^2) - \alpha(1 - 2\pi|\Psi(2\pi)|^2) + (\overline{\varphi^2} - \overline{\varphi}^2) \geq 0 \tag{11}$$

(soulignons qu'on a utilisé la normalisation $\int_0^{2\pi} |\Psi|^2 d\varphi = 1$).

A partir de (11), on obtient la relation d'incertitude pour l_z et φ :

$$\overline{(\Delta l_z)^2} \cdot \overline{(\Delta\varphi)^2} \geq \frac{1}{4}(1 - 2\pi|\Psi(2\pi)|^2)^2.$$

1.31. Les réponses aux questions posées ne sont pas, proprement dit, univoques. La non-commutativité des opérateurs *ne signifie pas* qu'il n'existe pas d'états dans lesquels ces grandeurs physiques possèdent simultanément des valeurs déterminées. La stricte assertion est : les fonctions d'onde de ces états, s'ils existent, ne constituent pas un système complet. Exemple : les opérateurs composantes du moment cinétique ne commutent pas l'un avec l'autre, mais dans l'état de moment $L = 0$ toutes les composantes du moment cinétique possèdent une valeur déterminée $L_i = 0$.
Voir de même le problème 1.33.

Si les opérateurs commutent, cela *ne signifie pas* que si A possède une valeur déterminée, B en possède une également. L'assertion stricte est : les états pour lesquels A et B possèdent simultanément une valeur déterminée existent et les fonctions d'onde de ces états forment un système complet. Exemple : dans le cas d'un mouvement unidimensionnel, les opérateurs impulsion $\widehat{p} = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}$ et énergie cinétique $\widehat{T} = \widehat{p}^2/2m$ commutent ; toutefois, dans l'état $\Psi(x) = C\sin(p_0 x/\hbar)$, l'énergie cinétique a une valeur déterminée, tandis que l'impulsion n'en a pas. Mais si le spectre des valeurs propres de la grandeur A n'est pas dégénéré, alors tout opérateur commutant avec A possède également, dans l'état Ψ_{A_i}, une valeur déterminée (voir problème 1.29).

1.32. $\widehat{R}\widehat{\mathbf{r}}\Psi(\mathbf{r}) = \widehat{R}[\mathbf{r}\Psi(\mathbf{r})] = -\mathbf{r}\Psi(-\mathbf{r}) = -\widehat{\mathbf{r}}\widehat{R}\Psi(\mathbf{r})$, d'où on obtient la relation $[\widehat{R}, \widehat{\mathbf{r}}]_+ \equiv \widehat{R}\widehat{\mathbf{r}} + \widehat{\mathbf{r}}\widehat{R} = 0$. De façon analogue on obtient : $[\widehat{R}, \widehat{\mathbf{p}}]_+ = 0$, $[\widehat{R}, \widehat{\mathbf{L}}]_- = 0$.

1.33. $(\widehat{A}\widehat{B} + \widehat{B}\widehat{A})\Psi_{ab} = (ab + ba)\Psi_{ab} = 2ab\Psi_{ab} = 0$. Donc $ab = 0$, c'est-à-dire que a ou b sont nuls. Exemple : $\widehat{R}\widehat{x} + \widehat{x}\widehat{R} = 0$ et il n'existe qu'une seule fonction d'onde $\Psi_0 = \delta(x)$ simultanément fonction propre des opérateurs $\widehat{x}$ et $\widehat{R}$; la valeur propre de l'opérateur $\widehat{x}$ est $x_0 = 0$.

Notons que des opérateurs qui anticommutent peuvent n'avoir aucune fonction propre commune (voir les matrices de Pauli, chapitre 5 "Spin").

1.34.

a) La solution de l'équation aux fonctions propres de l'opérateur $\widehat{f} = x - \frac{d}{dx}$ conduit à des fonctions propres de la forme $\Psi_f = C\exp[(x - f)^2/2]$. Pour toute "valeur propre" f ces fonctions sont croissantes pour $x \to \pm\infty$. Ces fonctions sont donc exclues, de sorte que l'opérateur $\widehat{f}$ ne possède pas en général de fonction propre.

b) L'équation aux fonctions propres et ses solutions sont de la forme

$$\widehat{f}\Psi_f \equiv \left(x + \frac{d}{dx}\right)\Psi_f = f\Psi_f, \qquad \Psi_f = C\exp\left[-\frac{(x-f)^2}{2}\right]. \tag{1}$$

Mais d'après (1) la valeur propre f peut être un nombre complexe. Les fonctions propres correspondant aux différentes valeurs propres ne sont pas orthogonales. En représentant les valeurs propres f sous la forme $f = f_1 + if_2$ ($f_{1,2}$ sont réels) et en introduisant les fonctions propres normées à l'unité :

$$\tilde{\Psi}_f = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}}\exp\left\{if_2x - \frac{(x-f_1)^2}{2}\right\},$$

on voit qu'elles constituent un système complet, car

$$\frac{1}{2\pi}\iint_{-\infty}^{\infty}\tilde{\Psi}_f^*(x')\tilde{\Psi}_f(x)df_1df_2 = \delta(x-x').$$

c) La solution du problème aux fonctions propres $\Psi_a = \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}$ et aux valeurs propres de la matrice (de l'opérateur) $\widehat{a}$

$$\widehat{a}\Psi_a = \begin{pmatrix} 1 & i \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A+iB \\ 0 \end{pmatrix} = a\Psi_a = a\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}$$

est évidemment la suivante : une valeur propre $a = 1$ correspondant à la fonction propre $\Psi_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$; la seconde valeur propre $a = 0$ correspondant à la fonction propre $\Psi_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$. Les fonctions propres Ψ_0 et Ψ_1 ne sont pas orthogonales, mais forment manifestement un système complet.

d) L'opérateur (matrice) donné ne possède qu'une seule valeur propre non dégénérée $b = 0$. La fonction propre correspondante $\Psi_0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ ne constitue évidemment pas de système complet.

1.35. Soient des fonctions arbitraires Ψ et Φ que l'on écrit sous la forme

$$\Psi = \sum_k a_k\Psi_{f_k}, \qquad \Phi = \sum_k b_k\Psi_{f_k} \tag{1}$$

(pour simplifier l'écriture, on suppose que le spectre des valeurs propres f_i est non dégénéré).

a) L'hermiticité de l'opérateur $\widehat{P}(f_i)$ découle de la suite d'égalités

$$\begin{aligned}\int\Phi^*\widehat{P}(f_i)\Psi d\tau &= \int\Phi^*\widehat{P}(f_i)\sum_k a_k\Psi_{f_k} = a_i\int\Phi^*\Psi_{f_i}d\tau \\ &= a_ib_i^* = \int[\widehat{P}(f_i)\Phi]^*\Psi d\tau \equiv \int[\widehat{P}^\dagger(f_i)\Phi]^*\Psi d\tau.\end{aligned} \tag{2}$$

b) A partir des relations

$$\widehat{P}(f_i)\Psi = \widehat{P}(f_i)\sum_k a_k\Psi_{f_k} = a_i\Psi_{f_i}$$

$$\widehat{P}^2(f_i)\Psi = \widehat{P}(f_i)[\widehat{P}(f_i)\Psi] = a_i\widehat{P}(f_i)\Psi_{f_i} = a_i\Psi_{f_i}.$$

on obtient $\widehat{P}^2(f_i) = \widehat{P}(f_i)$.
L'opérateur $\widehat{P} = \widehat{I} - \widehat{P}(f_i)$ projette sur l'état correspondant aux valeurs de la grandeur f non égales à f_i. Il est facile de montrer que $\widehat{P}^2 = \widehat{P}$.

1.36. La signification physique de $\overline{P(f_i)}$ devient évidente si l'on représente Ψ sous la forme $\Psi = \sum C_k\Psi_{f_k}$ et si l'on se sert de la formule (2) du problème précédent (on suppose la fonction d'onde Ψ normée à l'unité) :

$$\overline{P(f_i)} = \int \Psi^*\widehat{P}(f_i)\Psi d\tau = |C_i|^2 \equiv |C(f_i)|^2,$$

c'est-à-dire que $\overline{P(f_i)}$ est la probabilité $w(f,i)$ que la valeur propre f soit égale à f_i.

1.37. $\widehat{P}(x \geq 0) = \eta(x)$, où $\eta(x)$ est la fonction échelon (la fonction d'Heaviside) donné par

$$\eta(x) = \begin{cases} 1, & x \geq 0, \\ 0, & x < 0. \end{cases}$$

Il est clair que $\widehat{P}^2(x \geq 0) = \widehat{P}(x \geq 0)$.

1.38. Une fonction arbitraire $\Psi(\mathbf{r})$ peut être représentée sous forme d'une superposition de fonctions $\Psi_\pm$, paire (+) et impaire (−) par rapport à l'inversion $\widehat{R}$ ($\widehat{R}\Psi(\mathbf{r}) = \Psi(-\mathbf{r})$) :

$$\Psi(\mathbf{r}) = [\Psi(\mathbf{r}) + \Psi(-\mathbf{r})]/2 + [\Psi(\mathbf{r}) - \Psi(-\mathbf{r})]/2.$$

D'après la définition des opérateurs $\widehat{P}_\pm$, on doit avoir $\widehat{P}_\pm\Psi = [\Psi(\mathbf{r}) \pm \Psi(-\mathbf{r})]/2$; donc, $\widehat{P}_+ = (1 + \widehat{R})/2$, $\widehat{P}_- = (1 - \widehat{R})/2$.

Il est évident que $\widehat{P}_\pm^2 = \widehat{P}_\pm$, $\widehat{P}_+ + \widehat{P}_- = 1$.

1.39. Le noyau de l'opérateur $\widehat{P}$ est de la forme

$$P(x,x') = cf(x)f^*(x'), \qquad c^{-1} = \int |f(x)|^2 dx.$$

$\widehat{P}$ est un projecteur. Il projete sur l'état décrit par la fonction d'onde $\Psi(x) \equiv f(x)$.

1.40. $\widehat{P}(f_i) = \prod_{k=1,\,k\neq i}^{N} \dfrac{(\widehat{f} - f_k)}{(f_i - f_k)}$.

1.41. $\Psi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$, $\qquad \Psi_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{r}) = (2\pi\hbar)^{-3/2}\exp(i\mathbf{p}_0 \cdot \mathbf{r}/\hbar)$,

$$\Phi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r}) = (2\pi\hbar)^{-3/2}\exp(-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}_0/\hbar), \qquad \Phi_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{p}) = \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}_0).$$

1.42. $\Phi(p) = \sqrt{a^2/\hbar}C\exp\left[-\frac{i(p-p_0)x_0}{\hbar} - \frac{(p-p_0)^2a^2}{2\hbar^2}\right]$.

1.43. La probabilité cherchée vaut

$$w = \int_{z_1}^{z_2}\int_{p_1}^{p_2}\int_{-\infty}^{\infty}|F(x, p_y, z)|^2 dx\, dp_y\, dz,$$

où

$$F(x, p_y, z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int e^{-\frac{ip_y y}{\hbar}}\Psi(x, y, z)dy,$$

la fonction $\Psi(x, y, z)$ étant supposée normée à l'unité.

1.44. Multiplions les deux membres de la relation $\widehat{R}\Psi(x) = \Psi(-x)$ à gauche par $\Psi_p^*(x)$ et intégrons. Compte tenu de la relation $\Psi_p(x) = \Psi_{-p}(-x)$, on obtient

$$\widehat{R}\Phi(p) \equiv \int_{-\infty}^{\infty}\Psi_p^*(x)\widehat{R}\Psi(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty}\Psi_{-p}^*(-x)\Psi(-x)dx = \Phi(-p),$$

c'est-à-dire $\widehat{R}\Phi(p) = \Phi(-p)$.

Il est facile de trouver la forme de l'opérateur translation $\widehat{T}_a\Psi(x) = \Psi(x + a)$ en représentation $\mathbf{p}$: on le représente sous la forme $\widehat{T}_a = \exp\left(a\frac{d}{dx}\right) = \exp(ia\widehat{p}/\hbar)$ (voir le problème 1.12 b). Etant donné qu'en représentation $\mathbf{p}$, $\widehat{p} = p$, on a $\widehat{T}_a = \exp(iap/\hbar)$.

1.45. De la condition $\Psi(\mathbf{r}) = R\Psi(-\mathbf{r})$, où $R = \pm 1$ est la parité d'état, on obtient

$$\begin{aligned}\Phi(\mathbf{p}) &= \int \Psi_{\mathbf{p}}^*(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r})dV = R\int \Psi_{\mathbf{p}}^*(\mathbf{r})\Psi(-\mathbf{r})dV \\ &= R\int \Psi_{-\mathbf{p}}^*(-\mathbf{r})\Psi(-\mathbf{r})dV = R\Phi(-\mathbf{p}), \qquad (1)\end{aligned}$$

(dans la transformation (1) on a tenu compte de la propriété $\Psi_p(\mathbf{r}) = \Psi_{-p}(-\mathbf{r})$).

1.46. Par définition (voir problème 1.15), on a :

$$\tilde{\Psi}(x) \equiv \widehat{L}\Psi(x) = \int L(x, x')\Psi(x')dx'. \qquad (1)$$

Substituons dans (1)

$$\Psi(x') = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int \Phi(p')\exp\left(\frac{ip'x'}{\hbar}\right)dp',$$

multiplions les deux membres de (1) par $\Psi_p^*(x)$ à gauche et intégrons en x. Nous obtenons

$$\tilde{\Phi}(p) \equiv \widehat{L}\Phi(p) = \int L(p,p')\Phi(p')dp', \tag{2}$$

$$L(p,p') = \frac{1}{2\pi\hbar}\int\int \exp\left[\frac{i}{\hbar}(p'x' - px)\right] L(x,x')dx\,dx', \tag{3}$$

$$L(x,x') = \frac{1}{2\pi\hbar}\int\int \exp\left[\frac{i}{\hbar}(px - p'x')\right] L(p,p')dp\,dp'. \tag{4}$$

La généralisation de (1)–(4) au cas tridimensionnel est évidente. C'est ainsi que

$$L(\mathbf{p},\mathbf{p}') = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int\int \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}'\cdot\mathbf{r}' - \mathbf{p}\cdot\mathbf{r})\right] L(\mathbf{r},\mathbf{r}')dV\,dV'.$$

1.47. L'opérateur $\widehat{G} = \widehat{r^{-1}}$ possède en représentation $\mathbf{r}$ le noyau

$$G(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \frac{1}{r}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}').$$

Le noyau de cet opérateur en représentation $\mathbf{p}$, d'après le problème précédent, est égal à

$$G(\mathbf{p},\mathbf{p}') = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int \frac{1}{r}\exp\left[\frac{i(\mathbf{p}'-\mathbf{p})\cdot\mathbf{r}}{\hbar}\right]dV = \frac{1}{2\pi^2\hbar(\mathbf{p}-\mathbf{p}')^2}. \tag{1}$$

De façon analogue on obtient le noyau de l'opérateur $\widehat{G}^2 = \frac{\widehat{I}}{r^2}$:

$$G^2(\mathbf{p},\mathbf{p}') = \frac{1}{4\pi^2\hbar|\mathbf{p}-\mathbf{p}'|}. \tag{2}$$

Pour calculer les intégrales entrant dans (1), (2), on a utilisé

$$\int_0^\infty \frac{\sin x}{x} = \pi/2, \qquad \int \frac{1}{r}\exp(i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r})dV = 4\pi/\mathbf{q}^2$$

La vérification de l'égalité $\widehat{G}^2 = \widehat{G}\cdot\widehat{G}$, c'est-à-dire de

$$G^2(\mathbf{p},\mathbf{p}') = \int G(\mathbf{p},\mathbf{p}'')G(\mathbf{p}'',\mathbf{p}')d\mathbf{p}'', \tag{3}$$

est laissée au soin du lecteur.

1.48. Notons $\Psi_{A_n}(q)$ et $\Psi_{B_n}(q)$ les fonctions propres des opérateurs $\widehat{A}$ et $\widehat{B}$ dans une certaine représentation q, $\Psi(q)$ étant la fonction d'onde d'un état quelconque dans la même représentation.

Les fonctions d'onde de cet état en représentation A et B, $a(A_n)$ et $b(B_n)$, se définissent par des relations de la forme

$$\Psi(q) = \sum_n a(A_n)\Psi_{A_n}(q), \qquad a(A_n) = \int \Psi^*_{A_n}\Psi d\tau,$$
$$\Psi(q) = \sum_m b(B_m)\Psi_{B_m}(q), \qquad b(B_m) = \int \Psi^*_{B_m}\Psi d\tau \tag{1}$$

(limitons-nous, pour simplifier, au cas où le spectre des opérateurs $\widehat{A}$ et $\widehat{B}$ est discret ; la généralisation au cas du spectre continu ou au cas général, quand on a simultanément un spectre discret et un spectre continu, est évidente).

En prenant pour fonction d'onde la fonction propre Ψ_{B_k}, on obtient la forme de la fonction d'onde de l'état considéré en représentation A :

$$a_{B_k}(A_n) = \int \Psi^*_{A_n}(q)\Psi_{B_k}(q)d\tau \ ; \tag{2}$$

de façon analogue on obtient la forme de la fonction propre Ψ_{A_n} en représentation B :

$$b_{A_n}(B_k) = \int \Psi^*_{B_k}(q)\Psi_{A_n}(q)d\tau. \tag{3}$$

Des expressions (2) et (3), on obtient $a_{B_k}(A_n) = b^*_{A_n}(B_k)$.

1.49.
a) $\widehat{f}\Psi_i = \sum_k f_{ki}\Psi_k$;
b) $\widehat{f}C_i = \sum_k f_{ik}C_k$, où C_i est la fonction d'onde d'un état en représentation λ.

1.50. $P_{nn'}(f_i) = \delta_{ni}\delta_{n'i}$ si le spectre f_n est discret. Dans le cas où le spectre est continu, on a $P_{f_i}(f, f') = \delta(f - f_i)\delta(f' - f_i)$.

1.51. L'opérateur $\widehat{F} = F(\widehat{f})$ s'interprète comme un opérateur ayant les mêmes fonctions propres que l'opérateur $\widehat{f}$, tandis que les valeurs propres correspondantes sont $F_i = F(f_i)$. Etant donné que le système de fonctions propres Ψ_f est complet (l'opérateur $\widehat{f}$ est hermitien), l'action de l'opérateur $\widehat{F}$ sur une fonction quelconque Ψ est déterminée :

$$\tilde{\Psi} \equiv \widehat{F}\Psi = \widehat{F}\sum_n c(f_n)\Psi_{f_n}(q) = \sum_n c(f_n)F(f_n)\Psi_{f_n}(q). \tag{1}$$

On obtient facilement de (1) que le noyau $F(q, q')$ de l'opérateur $\widehat{F}$ (en représentation q), assimilé à un opérateur linéaire intégral, vaut

$$F(q, q') = \sum_n F(f_n)\Psi_{f_n}(q)\Psi^*_{f_n}(q'),$$

où la somme porte sur toutes les fonctions propres de l'opérateur $\widehat{f}$. En représentation f, l'opérateur $\widehat{F}$ est un opérateur multiplication par $F(f)$.

Après avoir écrit $(-\Delta)^{-1/2} = \hbar[(-i\hbar\nabla)^2]^{-1/2}$, on constate que l'opérateur $(-\Delta)^{-1/2}$ est égal à un facteur près à l'opérateur $\widehat{\dfrac{1}{|\mathbf{p}|}}$. Le noyau (comparer au problème 1.47.) de cet opérateur en représentation $\mathbf{r}$ est :

$$\hbar p^{-1}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = [2\pi^2\hbar(\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2]^{-1}.$$

1.52. Puisque les fonctions propres de l'opérateur $F(\widehat{f})$ constituent des fonctions propres de l'opérateur $\widehat{f}$ et que cet opérateur, comme l'opérateur $\widehat{f}$, possède N valeurs propres différentes, on peut le représenter sous la forme (voir problème 1.27)

$$\widehat{F} = F(\widehat{f}) = \sum_{n=0}^{N-1} c_n \widehat{f}^n \qquad (\widehat{f}^0 \equiv \widehat{I}). \tag{1}$$

Les valeurs c_n s'obtiennent à partir du système d'équations

$$F(f_i) = \sum_{n=0}^{N-1} c_n f_i^n \qquad i = 1, 2, \ldots, N. \tag{2}$$

Dans le cas particulier $N = 2$ le système (2) prend la forme

$$F(f_1) = c_0 + c_1 f_1, \qquad F(f_2) = c_0 + c_1 f_2,$$

d'où l'on tire c_0 et c_1 et la forme de l'opérateur $\widehat{F}$ en vertu de (1) :

$$\widehat{F} = \frac{f_2 F(f_1) - f_1 F(f_2)}{f_2 - f_1} + \frac{F(f_1) - F(f_2)}{f_1 - f_2}\widehat{f}. \tag{3}$$

Dans le cas $N = 3$, pour les valeurs propres indiquées dans l'énoncé, les coefficients c_n dans (1) valent

$$c_0 = F(0), \qquad c_1 = \frac{F(f_0) - F(-f_0)}{2f_0}, \qquad c_2 = \frac{F(f_0) + F(-f_0) - 2F(0)}{2f_0^2}. \tag{4}$$

1.53. Le projecteur possède deux valeurs propres égales à 0 et 1. A partir de la formule (3) du problème précédent on obtient la forme explicite de $\widehat{F}$:

$$\widehat{F} = F(\widehat{P}) = F(0) + [F(1) - F(0)]\widehat{P}.$$

1.54. Les opérateurs $\widehat{R}$, $\widehat{T}_a$, $\widehat{M}_c$ sont unitaires.

1.55. De $\widehat{U}^2 = \widehat{U}$ et $\widehat{U}\widehat{U}^\dagger = \widehat{U}^\dagger\widehat{U} = \widehat{I}$ on obtient $\widehat{U} = \widehat{I}$.

1.56. $|c| = 1$, c'est-à-dire $c = \exp(i\alpha)$, α étant un nombre réel.

1.57. De $\widehat{U} = \widehat{U}_1\widehat{U}_2$, on obtient $\widehat{U}^\dagger = \widehat{U}_2^\dagger\widehat{U}_1^\dagger$, d'où $\widehat{U}\widehat{U}^\dagger = \widehat{U}^\dagger\widehat{U} = \widehat{I}$.

1.58. De l'unitarité de $\widehat{U}$ il s'ensuit que $\widehat{U}\widehat{U}^\dagger = \widehat{I}$. Si $\widehat{U}$ est un opérateur hermitien, c'est-à-dire $\widehat{U}^\dagger = \widehat{U}$, alors $\widehat{U}^2 = 1$. Un opérateur hermitien satisfaisant à une telle équation possède des valeurs propres égales à ± 1 (et seulement ces valeurs). Donc un opérateur hermitien possédant des valeurs propres égales à ± 1 est également unitaire. Un exemple de cet opérateur nous est fourni par l'opérateur réflexion $\widehat{R}$ (un autre exemple, par les matrices de Pauli, voir chapitre 5).

1.59. Comme $\widehat{U}^\dagger = \exp(-i\widehat{F}^\dagger) = \exp(-i\widehat{F})$, $\widehat{U}\widehat{U}^\dagger = \widehat{U}^\dagger\widehat{U} = \widehat{I}$.

1.60. L'unitarité de l'opérateur s'établit facilement si, au préalable, on démontre la relation $(\widehat{L}^{-1})^\dagger = (\widehat{L}^\dagger)^{-1}$. La représentation cherchée de l'opérateur $\widehat{U} = \exp(i\widehat{F})$ découle des transformations

$$\exp(i\widehat{F}) = \exp(i\widehat{F}/2)[\exp(-i\widehat{F}/2)]^{-1} = \frac{\cos(\widehat{F}/2) + i\sin(\widehat{F}/2)}{\cos(\widehat{F}/2) - i\sin(\widehat{F}/2)}.$$

1.61.

$$\begin{aligned}\widehat{F}' = \widehat{U}\widehat{F}\widehat{U}^\dagger &= \widehat{U}\left[c_0 + \sum_i c_i\widehat{A}_i + \sum_{i,k} c_{ik}\widehat{A}_i\widehat{A}_k + \ldots\right]\widehat{U}^\dagger \\ &= c_0 + \sum_i c_i\widehat{U}\widehat{A}_i\widehat{U}^\dagger + \sum_{i,k} c_{ik}\widehat{U}\widehat{A}_i\widehat{A}_k\widehat{U}^\dagger \ldots = 0. \qquad (1)\end{aligned}$$

Compte tenu de la relation $\widehat{U}^\dagger\widehat{U} = 1$, on peut écrire chacun des termes de la somme dans l'expression (1) sous la forme

$$c_{ik\ldots n}\widehat{U}\widehat{A}_i\widehat{A}_k\ldots\widehat{A}_n\widehat{U}^\dagger = c_{ik\ldots n}\widehat{U}\widehat{A}_i\widehat{U}^\dagger\widehat{U}\widehat{A}_k\widehat{U}^\dagger\ldots\widehat{U}^\dagger\widehat{U}\widehat{A}_n\widehat{U}^\dagger = c_{ik\ldots n}\widehat{A}'_i\widehat{A}'_k\ldots\widehat{A}'_n,$$

autrement dit, (1) prend la forme

$$c_0 + \sum_i c_i\widehat{A}'_i + \sum_{i,k} c_{ik}\widehat{A}'_i\widehat{A}'_k\ldots = F(\widehat{A}'_i) = 0,$$

qui est la même que la relation initiale et démontre l'invariance de cette relation par rapport à la transformation unitaire des opérateurs.

1.62. De la condition $\widehat{A}' = \widehat{U}\widehat{A}\widehat{U}^\dagger$ il s'ensuit $\mathrm{Tr}\,\widehat{A}' = \mathrm{Tr}\,(\widehat{U}\widehat{A}\widehat{U}^\dagger) = \mathrm{Tr}\,(\widehat{A}\widehat{U}^\dagger\widehat{U}) = \mathrm{Tr}\widehat{A}$, car $\widehat{U}^\dagger\widehat{U} = 1$ et $\mathrm{Tr}\,(\widehat{A}\widehat{B}\ldots\widehat{D}) = \mathrm{Tr}\,(\widehat{B}\ldots\widehat{D}\widehat{A})$.

De façon analogue, $\det A' = \det(\widehat{U}\widehat{A}\widehat{U}^\dagger) = \det(\widehat{A}\widehat{U}^\dagger\widehat{U}) = \det\widehat{A}$.

1.63. D'un côté, $\det(\widehat{U}\widehat{U}^\dagger) = \det \widehat{I} = 1$; de l'autre, $\det(\widehat{U}\widehat{U}^\dagger) = \det \widehat{U} \cdot \det \widehat{U}^\dagger$, mais $\det \widehat{U}^\dagger = \det \tilde{\widehat{U}}^* = [\det \tilde{\widehat{U}}]^* = [\det \widehat{U}]^*$. Donc, $|\det \widehat{U}|^2 = 1$, soit $\det \widehat{U} = \exp(i\alpha)$, où α est un nombre réel. Si l'on introduit la matrice $\widehat{U}' = \exp(-i\alpha/N)\widehat{U}$, N étant le rang de la matrice $\widehat{U}$, alors $\det \widehat{U}' = 1$.

1.64. Pour démontrer que

$$\det \widehat{U} = \exp(i\mathrm{Tr}\widehat{F}), \tag{1}$$

il faut tenir compte du résultat obtenu dans 1.62 et effectuer la transformation unitaire qui diagonalise la matrice hermitienne $\widehat{F}$. Dans la nouvelle représentation, la propriété (1) est évidente, mais en vertu de l'invariance du déterminant et de la trace de la matrice par rapport aux transformations unitaires, la relation (1) se conserve aussi dans toute représentation.

1.65. Il y a en tout N^2 matrices indépendantes A_{nm} (par exemple, la famille des matrices $A_{nm}^{(ik)} = \delta_{in}\delta_{km}$; $i, k = 1, 2, \ldots, N$). Il est clair que le nombre de matrices hermitiennes indépendantes est le même. Le nombre de matrices unitaires indépendantes vaut également N^2 vu qu'il y a correspondance entre les matrices hermitiennes et unitaires : $\widehat{U} = \exp(i\widehat{F})$ (voir 1.59). Pour que la matrice unitaire soit telle que $\det \widehat{U} = 1$ il faut que $\mathrm{Tr}\widehat{F} = 0$ (voir problème précédent). De cette condition, il découle que le nombre de matrices unitaires indépendantes de déterminant égale à 1 de rang N vaut $N^2 - 1$, comme celui des matrices hermitiennes indépendantes à trace nulle.

1.66. La liaison entre les représentations $\mathbf{r}$ et $\mathbf{p}$ se définit par la transformation

$$\Phi(\mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \mathrm{e}^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}\Psi(\mathbf{r})dV \equiv \widehat{U}\Psi(\mathbf{r}),$$

autrement dit l'opérateur $\widehat{U}$ est un opérateur intégral de noyau

$$U(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \exp(-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}/\hbar)$$

(l'opérateur agit sur les fonctions $\Psi(\mathbf{r})$). Le noyau de l'opérateur $\widehat{U}^\dagger$ agissant sur les fonctions $\Phi(\mathbf{p})$ vaut

$$U^\dagger(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \exp(i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}/\hbar).$$

L'opérateur $\widehat{U}\widehat{U}^\dagger$ possède un noyau qui vaut

$$(2\pi\hbar)^{-3} \int \exp(-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}/\hbar) \exp(i\mathbf{p}' \cdot \mathbf{r}/\hbar)d\mathbf{r} = \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}'),$$

c'est-à-dire qu'il est unitaire (dans l'espace des fonctions $\Phi(\mathbf{p})$). De façon analogue on obtient $\widehat{U}^\dagger\widehat{U} = 1$ (dans l'espace des fonctions $\Psi(\mathbf{r})$).

Donc, $\widehat{U}\widehat{U}^\dagger = \widehat{U}^\dagger\widehat{U} = 1$, c'est-à-dire que $\widehat{U}$ est un opérateur unitaire.

1.67. Les opérateurs $\widehat{x}' = \widehat{U}\widehat{x}\widehat{U}^\dagger, \widehat{p}' = \widehat{U}\widehat{p}\widehat{U}^\dagger$ sont de la forme :
a) $\widehat{x}' = -\widehat{x}$, $\widehat{p}' = -\widehat{p}$;
b) $\widehat{x}' = \widehat{x} + a$, $\widehat{p}' = \widehat{p}$;
c) $\widehat{x}' = c\widehat{x}$, $\widehat{p}' = \frac{1}{c}\widehat{p}$.

Les relations données entre les opérateurs $\widehat{x}', \widehat{p}'$ et $\widehat{x}, \widehat{p}$ s'obtiennent très facilement en utilisant la représentation **r**. C'est ainsi que pour $\widehat{U} = \widehat{T}_a$, on obtient

$$\widehat{U}^\dagger = \widehat{T}_a^\dagger = \widehat{T}_{-a}$$

et

$$\widehat{U}\widehat{x}\widehat{U}^\dagger\Psi(x) = \widehat{T}_a\widehat{x}\widehat{T}_{-a}\Psi(x) = \widehat{T}_a[x\Psi(x-a)] = (x+a)\Psi(x) = (\widehat{x}+a)\Psi(x),$$

c'est-à-dire $\widehat{x}' = \widehat{x} + a$,

$$\widehat{U}\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\widehat{U}^\dagger\Psi(x) = \widehat{T}_a\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\widehat{T}_{-a}\Psi(x) = \widehat{T}_a\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x-a) = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial(x+a)}\Psi(x) = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x),$$

autrement dit $\widehat{p}' = \widehat{p}$, etc.

CHAPITRE 2

MOUVEMENT UNIDIMENSIONNEL

2.1. Pour les éneriges et les fonctions d'onde, on obtient :

$$E_n = \frac{\hbar^2\pi^2(n+1)^2}{2ma^2}\ ; \qquad n = 0, 1, \ldots,$$
$$\Psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi(n+1)x}{a}, & 0 < x < a, \\ 0, & x < 0,\ x > a. \end{cases} \tag{1}$$

Avec l'inversion des coordonnées par rapport au point $x = a/2$, les fonctions d'onde se transforment de la façon suivante :

$$\Psi'_n(x) \equiv \Psi_n(x') = \Psi_n(-x+a) = (-1)^n\Psi(n)$$

c'est-à-dire possèdent une certaine parité $(-1)^n$. Cette propriété peut servir au calcul d'intégrales (d'éléments matriciels, etc.) qui comportent la fonction d'onde $\Psi_n(x)$[1].

2.2. La fonction de distribution de la coordonnée est donnée par

$$dw_n(x) = |\Psi_n(x)|^2dx, \qquad \overline{x} = a/2, \qquad \overline{x^2} = a^2\left[\frac{1}{3} - \frac{1}{2\pi^2(n+1)^2}\right]\ ;$$
$$\overline{(\Delta x)^2} = a^2\left[\frac{1}{12} - \frac{1}{2\pi^2(n+1)^2}\right].$$

1 On utilise la numérotation des niveaux du spectre discret E_n et de la fonction propre Ψ_n, qui pour l'état fondamental, prend la valeur $n = 0$. En outre, n coïncide avec le nombre de zéros de la fonction d'onde $\Psi_n(x)$, à l'exception des zéros pour $x \to \pm\infty$ (ou sur les parois infrachissables du puits de potentiel, comme aux points $x = 0, a$ du problème). Le nombre quantique radial $n_r = 0, 1, 2, \ldots$ des champs centraux a le même sens.

La fonction d'onde dans le n-ième état stationnaire en représentation $\mathbf{p}$ a la forme :

$$\Phi_n(p) = \frac{1}{\sqrt{\pi a \hbar}} \int_0^a \sin\left(\frac{\pi(n+1)x}{a}\right) \exp\left(-\frac{ipx}{\hbar}\right) dx =$$

$$= -\frac{2\sqrt{\pi a \hbar^3}(n+1)\exp(-ipa/2\hbar)}{p^2a^2 - \pi^2\hbar^2(n+1)^2} \cdot \begin{cases} \cos(pa/2\hbar), & n \text{ pair}, \\ i\sin(pa/2\hbar), & n \text{ impair}, \end{cases}$$

et définit la répartition de l'impulsion de la particule $dw_n(p) = |\Phi_n(p)|^2 dp$.

On obtient

$$\overline{p} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n^*(x)\widehat{p}\Psi_n(x)dx = 0,$$

$$\overline{(\Delta p)^2} = \overline{p^2} = \int_{-\infty}^{\infty} |\widehat{p}\Psi_n(x)|^2 dx = \frac{\hbar^2\pi^2(n+1)^2}{a^2}. \tag{1}$$

En utilisant les valeurs obtenus $\overline{(\Delta x)^2}$ et $\overline{(\Delta p)^2}$, on trouve

$$\overline{(\Delta x)^2}\,\overline{(\Delta p)^2} = \hbar^2\left[\frac{\pi^2(n+1)^2}{12} - \frac{1}{2}\right] \geq \frac{\hbar^2(\pi^2-6)}{12} \approx \frac{\hbar^2}{3}.$$

Rappelons que dans le cas général (voir 1.30) : $\overline{(\Delta x)^2}\,\overline{(\Delta p)^2} \geq \frac{\hbar^2}{4}$.

Notons que $\overline{p^k}$ peut être obtenu à l'aide de la formule

$$\overline{p^k} = \int p^k dw_n(p) = \int_{-\infty}^{+\infty} p^k |\Phi_n(p)|^2 dp.$$

Mais le calcul est alors plus fastidieux qu'avec les formules (1).

2.3. $\overline{T}_{nn} = \overline{p^2/2m} = E_n$ (voir problème précédent). $\overline{T^2} = \infty$ (!). La valeur infinie de $\overline{T^2}$ découle, par exemple, de la forme de la fonction de distribution de l'impulsion de la particule obtenue dans le problème précédent pour $|p| \to \infty$. Comme $|\Phi_n(p)| \sim p^{-2}$ pour $|p| \to \infty$, $dw_n(p) \sim dp/p^4$ et l'intégrale déterminant la valeur moyenne $T^2 \sim p^4$ diverge.

Ce résultat peut être aussi obtenu à l'aide de la formule de la mécanique quantique pour les valeurs moyennes

$$\overline{T_{nn}^2} = \int_{-\infty}^{\infty} \left|\frac{\widehat{p}^2}{2m}\Psi_n(x)\right|^2 dx.$$

si l'on tient compte de ce que $\widehat{p}^2\Psi_n(x) \equiv -\hbar^2\Psi_n''(x)$ comporte des termes proportionnels à $\delta(x)$ ou à $\delta(x-a)$ (la dérivée première de $\Psi_n(x)$ est une fonction discontinue aux points $x = 0$ et $x = a$, la dérivée de cette fonction discontinue, elle, est donc proportionnelle à la distribution δ ; $\int \delta^2(x)dx = \infty$).

2.4.

a) La fonction d'onde est normée à l'unité pour $A = \sqrt{30/a^5}$.

Les coefficients C_n du développement de la fonction d'onde $\Psi(x)$ sur les fonctions propres de l'hamiltonien $\Psi_n(x)$, indiqués dans 2.1, valent ($\Psi(x) = \sum C_n \Psi_n(x)$)

$$C_n = \sqrt{\frac{60}{a^6}} \int_0^a x(x-a) \sin \frac{(n+1)\pi x}{a} dx = -\frac{\sqrt{240}}{\pi^3} \frac{1+(-1)^n}{(n+1)^3}, \tag{1}$$

et ne sont différents de zéro que pour des n pairs.

En vertu des principes de la mécanique quantique, la probabilité de présence de la particule dans le $n^{\text{ème}}$ état stationnaire vaut $w_n = |C_n|^2$.

A partir de (1), on trouve $w(E_0) = 960/\pi^6 \approx 0,999$; $w(E_2) \approx 0,001$, etc.

En utilisant les sommes connues (voir, par exemple [11])

$$\sum_{k=0}^{\infty} (2k+1)^{-4} = \pi^4/96, \qquad \sum_{k=0}^{\infty} (2k+1)^{-2} = \pi^2/8,$$

on obtient

$$\overline{E} = \sum E_n w_n = \frac{10}{\pi^2} E_0 \approx 1,013 E_0 \ ; \qquad \overline{E^2} = \sum E_n^2 w_n = \frac{120}{\pi^4} E_0^2 \ ;$$
$$\sqrt{\overline{(\Delta E)^2}} = \frac{2\sqrt{5}}{\pi^2} E_0.$$

b) La fonction d'onde est normée à l'unité pour $B = \sqrt{8/3a}$. Les probabilités w_n ne sont différentes de zéro que pour des n pairs et sont égales à

$$w_n = \frac{256}{3\pi^2} \frac{1}{(n+1)^2[(n+1)^2-4]^2}, \qquad n \text{ pair} \ ;$$
$$w(E_0) = 0,961 \ ; \qquad w(E_2) \approx 0,038, \text{ etc.} \ ;$$
$$\overline{E} = 4E_0/3, \qquad \overline{E^2} = 16E_0^2/3, \qquad \Delta E \equiv \sqrt{\overline{(\Delta E)^2}} = 4\sqrt{2}E_0/3.$$

2.5. En représentation énergie les opérateurs $\widehat{x}, \widehat{p}$ sont des matrices

$$X_{mn} = \int \Psi_m^* x \Psi_n dx, \qquad P_{mn} = \int \Psi_m^* \widehat{p} \Psi_n dx, \tag{1}$$

où $\Psi_n(x)$ sont les fonctions propres de l'hamiltonien, introduites dans 2.1.

Le calcul des intégrales (1) donne

$$X_{mn} = \begin{cases} \dfrac{4a}{\pi^2} \dfrac{(m+1)(n+1)[(-1)^{m+n}-1]}{(m-n)^2(m+n+2)^2}, & m \neq n, \\ a/2, & m = n, \end{cases}$$

$$P_{mn} = \begin{cases} \dfrac{2i\hbar}{a} \dfrac{(m+1)(n+1)[(-1)^{m+n}-1]}{(m-n)(m+n+2)}, & m \neq n, \\ 0, & m = n. \end{cases}$$

Ces matrices agissent sur la fonction d'onde qui, en représentation énergie, est décrite par la colonne

$$C = \begin{pmatrix} C_0 \\ C_1 \\ \vdots \end{pmatrix},$$

où les C_n sont les coefficients du développement de la fonction $\Psi(x)$ sur la base des fonctions propres $\Psi_n(x)$ de l'hamiltonien.

2.6. En faisant dans l'équation de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi_n''(x) + \left[\frac{kx^2}{2} - e\mathcal{E}_0 x\right]\Psi_n(x) = E_n\Psi_n(x) \tag{1}$$

($V(x) = -e\mathcal{E}_0 x$ est l'énergie potentielle d'une particule chargée dans le champ électrique homogène $\mathcal{E}_0$) le changement de variable $x \to z = x - e\mathcal{E}_0/k$, on donne à (1) la forme de l'équation de Schrödinger d'un oscillateur harmonique ordinaire (sans champ) ; ainsi la solution de (1) est :

$$E_n = \hbar\omega(n + 1/2) - e^2\mathcal{E}_0^2/2k, \qquad \omega = \sqrt{k/m}, \qquad n = 0, 1, \ldots,$$
$$\Psi_n(x) = \Psi_n^{\text{osc}}(z) = \Psi_n^{\text{osc}}(x - e\mathcal{E}_0/k),$$

où les $\Psi_n^{\text{osc}}(x)$ constituent les fonctions d'onde bien connues des états stationnaires de l'oscillateur harmonique. Notons que sous l'action d'un champ homogène tous les niveaux d'énergie de l'oscillateur se déplacent d'une même grandeur.

2.7. Les fonctions d'onde des états stationnaires pairs du spectre discret sont de la forme ($E < 0$)

$$\Psi(x) = \begin{cases} A\cos[\sqrt{2m(U_0 - |E|)/\hbar^2}x], & |x| \le a, \\ B\exp[-\sqrt{2m|E|/\hbar^2}|x|], & |x| > a. \end{cases} \tag{1}$$

La continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée au point $x = a$ donne l'équation définissant le spectre des niveaux pairs

$$\sqrt{U_0 - |E|}\tan\sqrt{2m(U_0 - |E|)a^2/\hbar^2} = \sqrt{|E|} \tag{2}$$

(au point $x = -a$ la condition de raccordement des fonctions d'onde est automatiquement satisfaite vu la parité des fonctions).

De façon analogue, on obtient l'équation pour les niveaux impairs de la particule :

$$\sqrt{U_0 - |E|}\cot\sqrt{2m(U_0 - |E|)a^2/\hbar^2} = -\sqrt{|E|} \tag{3}$$

Il est commode d'analyser les équations (2) et (3) graphiquement. L'analyse s'avérant très simple, donnons-en les résultats finaux.

a) L'équation (2) pour $0 < |E| < U_0$ possède N_+ racines, où N_+, nombre d'états pairs du spectre discret, est défini par la condition :

$$(N_+ - 1)\pi < \sqrt{2mU_0a^2/\hbar^2} \leq N_+\pi, \tag{4}$$

donc quels que soient les paramètres du puits il existe au moins un niveau pair.

b) Le nombre N_- racines de l'équation (3) est déterminée par la relation

$$N_-\pi - \pi/2 < \sqrt{2mU_0a^2/\hbar^2} \leq N_-\pi + \pi/2. \tag{5}$$

Les états impairs du spectre discret n'existent que si $mU_0a^2 \geq \dfrac{\pi^2\hbar^2}{8}$.

c) A mesure que l'énergie croît, les niveaux pairs et impairs se succèdent en alternance, mais le niveau fondamental est pair.

d) Les relations (4), (5) peuvent être réunies en une seule :

$$(N - 1)\pi/2 < \sqrt{2mU_0a^2/\hbar^2} \leq N\pi/2, \tag{6}$$

où N est le nombre total de niveaux du spectre discret : $N = N_+ + N_-$.

e) La réalisation de l'égalité dans les seconds membres des relations (4)–(6) correspond à la condition d'apparition d'un nouveau niveau : le $(N_+ + 1)^{\text{ème}}$ niveau pair et $(N_- + 1)^{\text{ème}}$ niveau impair, respectivement, lorsque U_0 augmente, c'est-à-dire lorsque le paramètre $\xi = ma^2U_0/\hbar^2$ croît.

Dans le cas d'un puits profond $\xi >> 1$, introduisons la grandeur $E'_n = U_0 - |E_n|$, énergie du niveau mesurée à partir du "fond" du puits. Pour les premiers niveaux de la particule (tels que $E'_n << U_0$), on peut, à partir des équations (2) et (3), obtenir les expressions approchées suivantes :

$$E'_n \approx \frac{\hbar^2\pi^2(n+1)^2}{8ma^2}\left[1 - \sqrt{\frac{2}{\xi}}\right], \qquad n = 0, 1, 2, \ldots \tag{7}$$

Notons que, selon (7), les premiers niveaux d'énergie d'un puits profond sont plus bas que les niveaux d'un puits de profondeur infinie de même largeur $2a$.

2.8. Dans le cas d'un puits peu profond $ma^2U_0/\hbar^2 \ll 1$, comme on l'a constaté dans la solution du problème précédent, il n'existe qu'un seul état pair du spectre discret. Pour obtenir l'énergie du niveau à partir de l'équation (2) du problème précédent il faut tenir compte de la petitesse de l'argument de la tangente et écrire cette équation sous la forme

$$\sqrt{U_0 - |E_0|}\sqrt{2m(U_0 - |E_0|)a^2/\hbar^2} \approx \sqrt{|E_0|} \tag{1}$$

Vu que $\sqrt{2m(U_0 - |E_0|)a^2/\hbar^2} \ll 1$, il s'ensuit de façon évidente que $|E_0| \ll U_0$ et en négligeant dans le premier membre de (1) la grandeur $|E_0|$ par rapport à U_0, il vient

$$|E_0| \approx \frac{2mU_0a^2}{\hbar^2}U_0 \ll U_0 \ ; \tag{2}$$

autrement dit, la profondeur du niveau dans un puits peu profond est beaucoup plus petite que celle du puits (fig. 17).

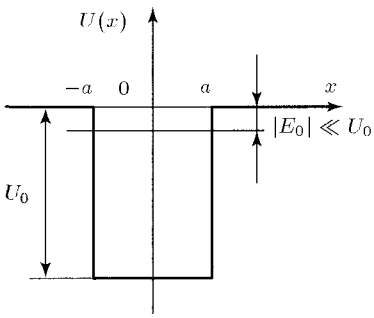

Figure 17

La forme approchée de la fonction d'onde normée de l'état fondamental dans un puits peu profond se déduit de l'expression (1) de la fonction d'onde du problème précédent si l'on tient compte du fait qu'au sein du puits, $|x| \leq a$, la fonction d'onde est pratiquement constante :

$$\Psi_0(x) \approx B \exp\left[-\sqrt{\frac{2m|E_0|}{\hbar^2}}|x|\right],$$
$$B = (2m|E_0|/\hbar^2)^{1/4}. \qquad (3)$$

Les moyennes cherchées sont :

$$\overline{U(x)} \approx -\frac{4ma^2U_0^2}{\hbar^2} \approx 2E_0, \qquad \overline{T} \approx \frac{2ma^2U_0^2}{\hbar^2} \approx -E_0$$

2.9. Grâce à la forme approchée de la fonction d'onde (voir formule (3) du problème précédent), on obtient : $\overline{x} = 0$, $\overline{(\Delta x)^2} = \overline{x^2} = (2\kappa^2)^{-1}$, $\kappa^2 = 2mU_0/\hbar^2$. La probabilité de trouver la particule au sein du puits est

$$w = \int_{-a}^{a} |\Psi_0|^2 dx \approx 2\kappa a \ll 1.$$

On remarque facilement que la faible probabilité de trouver la particule au sein du puits est due au fait que la fonction d'onde diminue lentement à l'extérieur du puits avec l'accroissement de $|x|$. En effet, comme $|\Psi_0|^2 \sim \mathrm{e}^{-2\kappa|x|}$, la particule a une bonne probabilité de se trouver à une distance $|x| \sim 1/\kappa = \sqrt{\hbar^2/2m|E_0|} \gg a$. Dans la cas plus général où on a un puits de potentiel arbitraire dont les dimensions caractéristiques sont de l'ordre de a, la particule a une probabilité prépondérante de se trouver hors du puits (dans le domaine classiquement inaccessible) si son énergie remplit la condition $|E_n| \ll \hbar^2/2ma^2$ (ces niveaux d'énergie sont dits peu liés).

La forme approchée de la fonction d'onde en représentation $\mathbf{p}$ est[2] :

$$\Phi_0(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-\frac{ipx}{\hbar}} \Psi_0(x) dx \approx \frac{\sqrt{2\kappa^3\hbar^3}}{\sqrt{\pi}(p^2 + \hbar^2\kappa^2)},$$
$$\overline{p} = 0, \qquad \overline{(\Delta p)^2} = \overline{p^2} = (\kappa\hbar)^2, \qquad \overline{(\Delta x)^2}\,\overline{(\Delta p)^2} = \hbar^2/2. \qquad (1)$$

2.10. L'équation de Schrödinger a la forme :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi'' + \left[\tilde{U}(x) + \alpha\delta(x - x_0)\right]\Psi = E\Psi. \qquad (1)$$

2 L'expression obtenue pour $\Phi_0(p)$ n'est pas valable pour de grandes impulsions $|p| \gg \hbar/a = \hbar\kappa/\kappa a \gg \hbar\kappa$, car pour ces valeurs de p, il est essentiel dans le calcul de l'intégrale de (1), que la forme de la fonction d'onde $\Psi_0(x)$ soit exacte dans le domaine $|x| \leq a$. La fonction d'onde $\Phi_0(p)$ exacte pour $|p| \to \infty$ est de la forme

$$\Phi_0(p) \approx \sqrt{\frac{2\kappa^2\hbar^5}{\pi a^2}} \frac{1}{p^3} \sin\frac{pa}{\hbar}.$$

De l'équation de Schrödinger (1) il s'ensuit que la fonction d'onde $\Psi(x)$ est continue au point x_0 et que sa dérivée est discontinue en ce point. La grandeur du saut de la dérivée de la fonction d'onde doit être telle que le terme avec la distribution δ de la fonction $\Psi''(x)$ (la dérivée d'une fonction discontinue est proportionnelle à la distribution δ) puisse compenser le terme $\alpha\delta(x-x_0)\Psi(x_0)$ dans le premier membre de l'équation (1). En intégrant (1) sur le domaine $x_0-\varepsilon < x < x_0+\varepsilon$, $\varepsilon > 0$, et en faisant tendre $\varepsilon \to 0$, on obtient

$$\begin{aligned} &\Delta\Psi'(x_0) \equiv \Psi'(x_0+0) - \Psi'(x_0-0) = (2m\alpha/\hbar^2)\Psi(x_0), \\ &\Psi(x_0+0) = \Psi(x_0-0). \end{aligned} \tag{2}$$

2.11. L'équation de Schrödinger et sa solution sont de la forme

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi'' - \alpha\delta(x)\Psi = E\Psi\ ; \qquad E = -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m}, \qquad \kappa > 0\ ;$$
$$\Psi(x) = \begin{cases} A\exp(-\kappa x), & x > 0, \\ B\exp(\kappa x), & x < 0. \end{cases}$$

En utilisant la relation (2) du problème précédent (compte tenu de la substitution $\alpha \to -\alpha$), on obtient $A = B$ et $\kappa = \kappa_0 = \alpha m/\hbar^2$, $E_0 = -m\alpha^2/2\hbar^2$, c'est-à-dire qu'il n'y a qu'un seul état lié dont la fonction d'onde normée est de la forme $\Psi_0(x) = \sqrt{\kappa_0}\exp(-\kappa_0|x|)$. Cette fonction, comme il fallait s'y attendre, est paire.

On obtient

$$\overline{U} = -\alpha\int_{-\infty}^{\infty}\delta(x)\Psi_0^2(x)dx = -m\alpha^2/\hbar^2 = 2E_0\ ;$$
$$\overline{T} = \frac{1}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}|\widehat{p}\Psi_0(x)|^2dx = m\alpha^2/2\hbar^2 = -E_0.$$

Le potentiel $U(x) = -\alpha\delta(x)$ peut être obtenu comme limite $a \to 0$, $U_0 \to \infty$, $2aU_0 = \alpha$ du potentiel étudié dans 2.7 et 2.8. Dans ce passage $\xi = ma^2U_0/\hbar^2 \to 0$, c'est-à-dire que le puits est peu profond. Comme cela se voit facilement, les résultats approchés de l'énergie et de la fonction d'onde de l'état fondamental de la particule dans un puits peu profond sont exacts pour le potentiel δ.

2.12. Notons $E_n, \Psi_n(x), n = 0, 1, \ldots$, les niveaux d'énergie et les fonctions d'onde normées des états stationnaires dans le champ $U(x)$. Ces fonctions d'onde possèdent une certaine parité $(-1)^n$. De plus, les fonctions d'onde des niveaux impairs sont, pour $x = 0$, égales à $\Psi_{2k+1}(0) = 0$.

Pour une particule dans le champ $\tilde{U}(x)$ on introduit des notations analogues : $\tilde{E}_k$, $\tilde{\Psi}_k(x)$, $k = 0, 1, \ldots$; $\tilde{\Psi}_k(0) = 0$.

Les fonctions $\tilde{\Psi}_k$ et les fonctions impaires $\Psi_n(x)$ satisfont (pour $x \geq 0$) à la même équation de Schrödinger et aux mêmes conditions aux limites aux points $x = 0$ et $x = \infty$; il y a entre elles la correspondance suivante (fig. 18) :

$$\tilde{E}_k = E_{2k+1}, \qquad \tilde{\Psi}_k(x) = \sqrt{2}\Psi_{2k+1}(x).$$

Si le champ $U(x)$ possède N états liés, le nombre de ces états dans le champ $\tilde{U}(x)$ vaut alors $N/2$ pour N pair et $(N-1)/2$ pour N impair. Dans le cas $N = 1$, il n'y a pas d'états liés dans le champ $\tilde{U}(x)$.

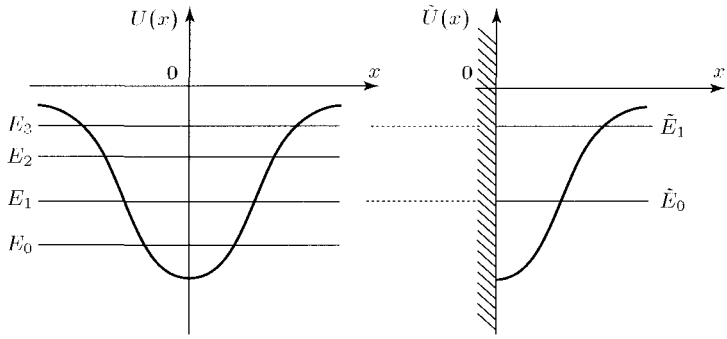

Figure 18

2.13. Cherchons la valeur moyenne de l'énergie de la particule dans l'état décrit par la fonction d'onde normée $\Psi(x,\alpha) = \sqrt{\alpha}\exp(-\alpha|x|)$, $\alpha > 0$ étant un paramètre. Compte tenu de

$$\overline{T} = \frac{\overline{p^2}}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{d}{dx}\Psi\right)^2 dx = \frac{\hbar^2\alpha^2}{2m},$$

on obtient

$$\overline{E}(\alpha) = \frac{\hbar^2\alpha^2}{2m} + \alpha\int \exp[-2\alpha|x|]U(x)dx. \tag{1}$$

Le seconde terme de (1) pour $\alpha \to 0$ vaut

$$\alpha\int \exp[-2\alpha|x|]U(x)dx \approx \alpha\int U(x)dx < 0. \tag{2}$$

En utilisant (1) et (2), on constate aisément que pour des valeurs suffisamment petites du paramètre α la grandeur $\overline{E}(\alpha)$ est négative ; mais $\overline{E}(\alpha) \geq E_0$, où E_0 est l'énergie de l'état fondamental. Donc, $E_0 < 0$ et l'état fondamental est un état lié.

2.14. En introduisant les notations $E = \varepsilon\hbar^2/2ma^2$, $z = x/a$, écrivons l'équation de Schrödinger sous la forme

$$-\frac{d^2\Psi}{dz^2} + \xi f(z)\Psi = \varepsilon\Psi \qquad \left(\xi = \frac{2mU_0a^2}{\hbar^2}\right). \tag{1}$$

En notant par $\varepsilon_n(\xi), \widehat{\Psi}_n(z,\xi)$ les valeurs propres du spectre discret et les fonctions propres normées de l'équation (1), on obtient la solution de l'équation de Schrödinger

dans le champ $U = U_0 f(x/a)$:

$$\Psi_n(x) = \tilde{\Psi}_n(x/a)/\sqrt{a}, \qquad E_n = \varepsilon_n \hbar^2/2ma^2 = \varepsilon_n U_0/\xi,$$
$$\overline{x}_{nn} = a\overline{z}_{nn}, \qquad \overline{(\Delta x)^2} = a^2\overline{(\Delta z)^2_{nn}}.$$

Les grandeurs $\varepsilon_n, \overline{z}, \overline{(\Delta z)^2}$ (la valeur moyenne est calculée avec les fonctions $\tilde{\Psi}_n$) ne dépendent que de la valeur du paramètre ξ.

2.15. L'énergie potentielle d'une particule est de la forme (figure 19)

$$U(z) = \begin{cases} mgz, & z > 0, \\ \infty, & z < 0, \end{cases}$$

(la direction de $(-g)$ est la direction positive de l'axe z, le miroir est à $z = 0$). Le mouvement le long des axes x, y étant libre et n'intervenant pas dans le problème considéré, on étudiera uniquement, dans ce qui suit, le mouvement de la particule le long de l'axe z.

Par le changement de variable

$$x = (2m^2g/\hbar^2)^{1/3}(z - E/mg)$$

on transforme l'équation de Schrödinger dans le champ $U(z)$ en

$$\Psi''(x) - x\Psi(x) = 0. \qquad (1)$$

La solution de l'équation (1), décroissante pour $x \to \infty$, est la fonction d'Airy $\Phi(x)$ [1], c'est-à-dire

$$\Psi(z) = A\Phi\left[\left(\frac{2m^2g}{\hbar^2}\right)^{1/3}\left(z - \frac{E}{mg}\right)\right].$$

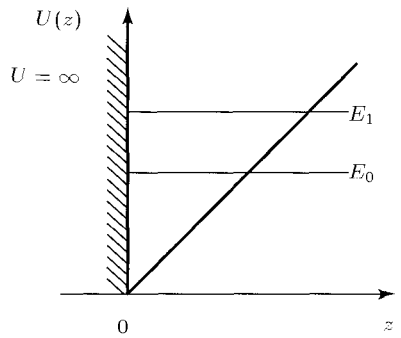

Figure 19

La quantification des niveaux d'énergie apparaît grâce à la condition aux limites

$$\Psi(z = 0) = \Phi[-(2m^2g/\hbar^2)^{1/3}E/mg] = 0. \qquad (2)$$

En notant $(-\alpha_k)$ $(k = 1, 2, \ldots)$ la séquence des racines de la fonction d'Airy [1] dans l'ordre croissant de α_k, on obtient de (2) le spectre d'énergie :

$$E_n = (mg^2\hbar^2/2)^{1/3}\alpha_{n+1}, \qquad n = 0, 1, \ldots$$

En particulier, l'énergie de l'état fondamental est $(n = 0, \alpha_1 \approx 2,34)$

$$E_0 = 2,34(mg^2\hbar^2/2)^{1/3} = 1,86(mg^2\hbar^2)^{1/3}.$$

2.16. La fonction d'onde de l'état fondamental est paire : $\Psi_0(x) = \Psi_0(-x)$ et il suffit de la trouver pour $x \geq 0$ (alors $\Psi_0'(0) = 0$). A l'aide des substitutions $y = \xi \exp(-x/2a)$, $E = -\hbar^2\kappa^2/2m$, $\xi = \sqrt{8ma^2U_0/\hbar^2}$, $\nu = 2\kappa a$ ($\kappa > 0$), l'équation de Schrödinger pour $x \geq 0$ se ramène à l'équation de Bessel :

$$\frac{d^2\Psi}{dy^2} + \frac{1}{y}\frac{d\Psi}{dy} + (1 - \nu^2/y^2)\Psi = 0. \tag{1}$$

Comme pour $x \to \infty$ ($y \to 0$) la fonction d'onde $\Psi(x)$ doit décroître, il faut choisir la solution de l'équation (1) sous la forme ($x \geq 0$)

$$\Psi(x) = CJ_\nu(y) = CJ_\nu[\xi \exp(-x/2a)]. \tag{2}$$

La condition $\Psi'(x = 0) = 0$ définit le spectre des niveaux pairs :

$$J_\nu'(\xi) = J'_{\sqrt{8m|E|a^2/\hbar^2}}(\sqrt{8mU_0a^2/\hbar^2}) = 0. \tag{3}$$

De plus, le niveau fondamental correspond à la plus grande valeur de $|E|$.

Pour un puits de faible profondeur $\xi \ll 1$, en utilisant la formule

$$J_\nu'(\xi) \approx \frac{\nu}{2\Gamma(\nu+1)}(\xi/2)^{\nu-1} - \frac{\nu+2}{2\Gamma(\nu+2)}(\xi/2)^{\nu+1}, \qquad \xi \ll 1,$$

on peut écrire l'équation (3) sous la forme

$$\nu(\nu+1) - (\nu+2)\xi^2/4 \approx 0,$$

d'où

$$\nu = \nu_0 \approx \xi^2/2, \qquad \kappa_0 = 2maU_0/\hbar^2, \qquad E_0 = -\hbar^2\kappa_0^2/2m. \tag{4}$$

Il est aisé de remarquer que, dans ce cas, la fonction d'onde normée de l'état fondamental peut être écrite de façon approchée sous la forme ($J_\nu(y) \approx \frac{1}{\Gamma(\nu+1)}(y/2)^\nu$ pour $y \ll 1$)

$$\Psi_0(x) = cJ_{\nu_0}[\xi \exp(-|x|/2a)] \approx \sqrt{\kappa_0}\exp[-\kappa_0|x|]. \tag{5}$$

Les résultats (4) et (5) pour l'état fondamental au sein d'un puits de faible profondeur se trouvent en accord avec ceux des problèmes 2.8 et 2.11 : le potentiel $U(x) = -\alpha\delta(x)$ peut être obtenu en passant à la limite $a \to 0, U_0 \to \infty$ du potentiel de ce problème, par assimilation de α à

$$\alpha = -\int U(x)dx = 2aU_0.$$

Donc, dans le cas d'un puits de faible profondeur et de forme arbitraire $U(x)$, l'énergie E_0 et la fonction d'onde $\Psi_0(x)$ de l'état fondamental se déterminent non pas par la forme concrète de $U(x)$, mais par la valeur de l'intégrale $\int U(x)dx$.

2.17. En résolvant l'équation de Schrödinger, il faut tenir compte des conditions de raccordement de la solution pour le potentiel δ (voir formules (2) du problème 2.10), des conditions aux limites $\Psi(a) = \Psi(-a) = 0$ ainsi que de la parité bien définie de la fonction d'onde des états stationnaires.

Les fonctions d'onde des niveaux pairs pour $0 < |x| \leq a$ sont de la forme

$$\Psi(x) = A\sin[k(|x| - a)], \qquad k = \sqrt{2mE/\hbar^2} > 0. \tag{1}$$

Les conditions de raccordement de la solution (1) au point $x = 0$ donnent la relation

$$-\tan ka = \frac{k\hbar^2}{m\alpha} \equiv \frac{ka}{\xi} \qquad \left(\xi = \frac{m\alpha a}{\hbar^2}\right), \tag{2}$$

définissant le spectre des niveaux pairs.

Avec $\xi \gg 1$ pour les niveaux inférieurs (pour lesquels $ka \ll \xi$), le second membre de l'équation (2) est très petit. On a donc $k_n a = n\pi - \varepsilon$, avec $\varepsilon \ll 1$ et où $n = 1, 2, \ldots$ est le numéro d'ordre de la racine. On déduit de (2)

$$-\tan k_n a \approx \varepsilon \approx k_n a/\xi \approx n\pi/\xi,$$

c'est-à-dire

$$k_n^{(+)} \approx \frac{\pi n}{a}(1 - 1/\xi), \qquad E_n^{(+)} \approx \frac{\hbar^2\pi^2 n^2}{2ma^2}(1 - 2/\xi) \tag{3}$$

(on introduit l'indice (+) pour indiquer la valeur positive de la parité des niveaux).

Pour les niveaux impairs la fonction d'onde prend, dans le domaine $|x| < a$, la forme $\Psi(x) = B\sin(kx)$ et la condition $\Psi(a) = 0$ définit le spectre des niveaux impairs :

$$k_n^{(-)} a = n\pi, \qquad E_n^{(-)} = \frac{\hbar^2\pi^2 n^2}{2ma^2}, \qquad n = 1, 2, \ldots \tag{4}$$

(notons que pour les états impairs la particule "ne ressent pas" la présence du potentiel δ : $U(x) = \alpha\delta(x)$).

La comparaison de (3) et (4) confirme la nature, mentionnée dans l'énoncé, de la partie inférieure du spectre : la distance $\delta E_n \approx 2E_n^{\pm}/\xi$ entre les niveaux pair et impair pour une même valeur de n est beaucoup plus petite que la distance entre deux paires voisines :

$$\Delta E = |E_{n\pm1} - E_n| \sim E_n^{\pm}/n \qquad (n \ll \xi).$$

Le spectre des niveaux pairs au sein du domaine d'énergie $ka \gg \xi$ (par exemple, les niveaux très excités) s'obtient aisément de (2) en posant $k_n a = (n - 1/2)\pi + \varepsilon, \varepsilon \ll 1$ ($n = 1, 2, \ldots$ étant le numéro d'ordre du niveau pair),

$$\begin{aligned} &-\tan k_n a \approx 1/\varepsilon \approx k_n a/\xi \approx (n - 1/2)\pi/\xi, \\ &k_n^{(+)} a \approx (n - 1/2)\pi + \xi/(n - 1/2)\pi, \\ &E_n^{(+)} = \frac{\hbar^2\pi^2(2n-1)^2}{8ma^2} + \frac{\hbar^2\xi}{ma^2}. \end{aligned} \tag{5}$$

Le premier terme de l'expression $E_n^{(+)}$ décrit le spectre des niveaux pairs au sein d'un puits de profondeur infinie, le second, le déplacement de ces niveaux sous l'action du potentiel $\alpha\delta(x)$.

On laisse au lecteur le soin d'étudier la nature de la partie inférieure du spectre pour $\xi \gg 1$, ainsi que l'étude du cas $\alpha < 0$ et $|\xi| \gg 1$.

2.18. Avec une décroissance suffisamment rapide de $U(x)$ on peut, dans l'équation de Schrödinger, négliger $U(x)$ lorsque $x \to \pm\infty$, de sorte que l'équation de Schrödinger et sa solution prennent la forme (pour $E = 0$)

$$\Psi''(x) = 0, \qquad \Psi(x) \approx A_\pm + B_\pm x, \qquad x \to \pm\infty\ ;$$

ainsi la solution est en général croissante lorsque $x \to \pm\infty$. Pour des paramètres arbitraires du potentiel, l'équation de Schrödinger n'admet pas de solutions aussi bien pour $x \to +\infty$ que pour $x \to -\infty$ (de façon absolument analogue à la non existence de solution décroissante de l'équation de Schrödinger lorsque $x \to \pm\infty$ pour une énergie arbitraire $E < 0$). C'est seulement avec un choix particulier des paramètres du potentiel (par exemple, du paramètre α si $U(x)$ a la forme $U(x) = \alpha\tilde{U}(x)$) que des solutions ne croissant pas pour $x \to \pm\infty$ existent. Lorsque une telle solution existe, le potentiel $U(x)$ devient critique car au moindre approfondissement du potentiel (variation $\delta U(x) \leq 0$) il apparaît un nouvel état lié, c'est-à-dire que le nombre d'états liés augmente d'une unité.

Pour saisir la nature des solutions de l'équation de Schrödinger à $E = 0$, étudions le niveau énergétique le plus haut E_n du spectre discret. Sa fonction d'onde $\Psi_n(x)$ est de la forme pour $x \to \pm\infty$

$$\Psi(x) \propto \exp(-\kappa|x|), \qquad \kappa = \sqrt{2m|E_n|/\hbar^2}.$$

Avec la diminution de la profondeur du potentiel, tous les niveaux du spectre discret se déplacent vers le haut (c'est-à-dire $|E_n|$ diminue) et le niveau le plus haut va prendre la valeur $E_n = 0$, simultanément sa fonction d'onde prend la forme $\Psi_{E_n=0}(x) \approx \text{const}$ pour $x \to \pm\infty$. Le nombre de zéros de la fonction $\Psi_{E_n=0}$ constante pour $x \to \pm\infty$ détermine le nombre des états du spectre discret avec $E < 0$.

La solution à $E = 0$ de l'équation de Schrödinger pour le potentiel proposé dans l'énoncé doit être de la forme ($\kappa = \sqrt{2mU_0/\hbar^2}$)

$$\Psi_{E=0}(x) = \begin{cases} A, & x < 0, \\ B\cos(\kappa x + \delta), & 0 < x < 2a, \\ C, & x > 2a. \end{cases} \tag{1}$$

Les conditions de continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée aux points $x = 0$ et $x = 2a$ donnent les relations

$$\delta = 0, \qquad A = B, \qquad B\cos(2\kappa a) = C, \qquad \sin(2\kappa a) = 0, \tag{2}$$

dont la dernière définit la condition d'existence de cette solution. Donc, la condition $2\kappa a = \sqrt{8mU_0a^2/\hbar^2} = n\pi, n = 1, 2, \ldots$ fournit les valeurs des paramètres du puits

pour lesquelles apparaissent de nouveaux états liés à mesure de son approfondissement. La fonction d'onde $\Psi_{E=0}$ a dans ce cas n zéros comme le $(n+1)^{\text{ème}}$ niveau (rappelons que la fonction d'onde de l'état fondamental n'a pas de zéro).

2.19. En nous appuyant sur les considérations présentées dans le problème précédent, cherchons la condition d'existence de la solution de l'équation de Schrödinger constante pour $x \to \infty$ dans le cas où $E = 0$:

$$\Psi_{E=0}(x) = \begin{cases} Ax, & 0 \le x < a, \quad (\Psi_{E=0}(0) = 0) \\ B, & x > a. \end{cases} \tag{1}$$

Les conditions de raccordement de la solution au point $x = a$ (voir 2.10) donnent

$$aA = B, \qquad 2\xi \equiv 2m\alpha a/\hbar^2 = 1, \tag{2}$$

c'est-à-dire que la fonction d'onde $\Psi_{E=0}$ constante n'existe que pour une seule valeur du paramètre $\xi = \xi_0 = 1/2$; en outre, cette fonction d'onde n'a pas de zéros. Les résultats obtenus pour $\Psi_{E=0}$ et ξ_0 signifient que pour $\xi < \xi_0 = 1/2$ il n'y a pas d'états liés et que pour $\xi > \xi_0$ on n'a qu'un seul état lié.

2.20. Posons, pour fixer les idées, $U_1 \ge U_2$. Les états liés ont une énergie $E < U_2$. Cherchons la condition d'existence de la fonction d'onde $\Psi_{E=U_2}$ constante pour $x \to \pm\infty$ et constituant une solution de l'équation de Schrödinger à $E = U_2$:

$$\Psi_{E=U_2}(x) = \begin{cases} A\exp(-\kappa|x|), & x < 0 \qquad (\kappa = \sqrt{2m(U_1 - U_2)/\hbar^2}), \\ B\cos(kx + \delta), & 0 < x < a \quad (k = \sqrt{2mU_2/\hbar^2}), \\ C, & x > a. \end{cases} \tag{1}$$

Les conditions de raccordement de la fonction d'onde et de ses dérivées aux points $x = a$ et $x = 0$ donnent

$$\delta = -ka, \qquad B = C, \qquad A = B\cos(ka), \qquad \kappa = k\tan ka. \tag{2}$$

La dernière des relations (2) est la condition d'existence de la solution de l'équation de Schrödinger de forme (1) constante pour $x \to \pm\infty$. En utilisant les considérations du problème 2.18, on peut conclure que cette condition est aussi celle de l'apparition de nouveaux états liés à mesure que le puits s'approfondit. Si la fonction d'onde (1) n'a pas de zéros (c'est-à-dire pour $ka < \pi/2$) cela correspond à le premier état lié apparaît. Donc, la condition cherchée est de la forme

$$\sqrt{2ma^2U_2/\hbar^2} \ge \arctan\sqrt{(U_1 - U_2)/U_2}. \tag{3}$$

En particulier pour $U_1 = \infty$, la condition (3) prend la forme $U_2 \ge \pi^2\hbar^2/8ma^2$.

Pour $U_1 = U_2$ la condition (3) est remplie quels que soient les paramètres du puits, c'est-à-dire qu'il existe toujours un état lié.

2.21. L'opérateur force en représentation **x** est de la forme $\widehat{F}(x) = -dU/dx$ et l'égalité $\overline{F}_{nn} = 0$ découle des transformations suivantes :

$$\begin{aligned}
\overline{F}_{nn} &= -\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n^*(dU/dx)\Psi_n dx \\
&= -\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d}{dx}(U|\Psi_n|^2)dx + \int_{-\infty}^{\infty} (\Psi_n^* U \Psi_n' + \Psi_n^{*\prime} U \Psi_n)dx = \\
&= E_n \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d}{dx}|\Psi_n|^2 dx - \frac{1}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} \{(\widehat{p^2}\Psi_n^*)\Psi_n' + \Psi_n^{*\prime}\widehat{p^2}\Psi_n\}dx \\
&= \frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d}{dx}(\Psi_n^{*\prime}\Psi_n')dx = 0.
\end{aligned}$$

Dans les transformations, on a tenu compte des égalités

$$U(x) = U^*(x), \qquad \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d}{dx}[U|\Psi_n|^2]dx = 0$$

et on a utilisé l'équation de Schrödinger pour Ψ_n et Ψ_n^*.

2.22. Un puits de potentiel de profondeur infinie peut être obtenu comme limite $U_0 \to \infty$ d'un puits de profondeur finie U_0. Dans ce cas l'opérateur force en représentation **x** prend la forme

$$\widehat{F} = -dU/dx = U_0[\delta(x) - \delta(x-a)] \tag{1}$$

(pour obtenir (1), on a tenu compte du fait que la dérivée de la fonction

$$\eta(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ 1, & x > 0, \end{cases}$$

vaut $d\eta(x)/dx = \delta(x)$).

Les deux termes de l'expression (1) sont les opérateurs des forces agissant sur la particule du côté des parois gauche et droite du puits. Etudions la force $\widehat{F}_{\text{dr}} = -U_0\delta(x-a)$ opérant du côté de la paroi de droite. On voit aisément qu'elle peut être écrite sous la forme $\widehat{F}_{\text{dr}} = \partial U/\partial a = \partial \widehat{H}/\partial a$ car que l'opérateur énergie cinétique est indépendant de a.

En utilisant le résultat obtenu dans le problème 1.28, on obtient

$$\overline{(F_{\text{dr}})_{nn}} = \overline{\left(\frac{\partial H}{\partial a}\right)_{nn}} = \frac{\partial E_n}{\partial a}, \qquad \overline{F_{\text{dr}}} = -2E_n/a < 0. \tag{2}$$

Dans la dernière des relations (2), on a utilisé pour E_n la valeur des niveaux d'énergie d'une particule dans un puits de profondeur infinie.

La force agissant sur la particule du côté de la paroi gauche vaut $\overline{F} = -\overline{(F_{\text{dr}})}$, vu que la force moyenne totale agissant sur la particule est nulle (voir problème précédent).

On a trouvé la force moyenne agissant sur la particule du côté de chacune des parois du puits. La force exercée par la particule sur les parois du puits est de signe opposé et est dirigée naturellement de l'intérieur vers la paroi correspondante.

L'expression (2) de la force est identique à celle de la mécanique classique moyenne dans le temps de la force exercée sur la particule par la paroi.

2.23.

a) La valeur moyenne de la force exercée par la paroi droite du puits, selon la première des formules (2) du problème précédent, est

$$\overline{F}_{\mathrm{dr}} = \partial E_0/\partial(2a) = E_0/a, \qquad E_0 \approx -2ma^2U_0^2/\hbar^2, \tag{1}$$

où $2a$ est la largeur du puits et où E_0 a éte obtenu dans le problème 2.8.

b) En calculant la valeur moyenne de l'opérateur force $\widehat{F}_{\mathrm{dr}} = -U_0\delta(x-a)$ exercée par la paroi droite du puits sur la particule dans l'état fondamental obtenu dans 2.8, on aboutit de nouveau à (1).

En mécanique classique la moyenne dans le temps de la force agissant sur la particule à partir de la paroi droite du puits vaut $\overline{F}_{\mathrm{cl}} = -(U_0 - |E_0|)/a$. La comparaison de cette grandeur au résultat (1) de la mécanique quantique montre que $|\overline{F}_{\mathrm{q}}| \ll |\overline{F}_{\mathrm{cl}}|$.

La différence importante entre la force classique et la force quantique pouvait être prévue, en tenant compte du résultat obtenu dans le problème 2.9, selon lequel la particule liée dans un puits peu profond a une probabilité faible de se trouver dans le puits (alors que dans le cas classique, cette probabilité est égale à 1).

2.24. La valeur moyenne de la force agissant sur la particule dans un état stationnaire du spectre discret est nulle (voir problème 2.21). Cette force est créée par le potentiel $\tilde{U}(x)$ dans le domaine $x > 0$. En utilisant les transformations analogues à celles utilisées dans le problème 2.21, on obtient l'expression

$$\overline{F}_{nn} = -\int_0^\infty |\Psi_n(x)|^2(d\tilde{U}/dx)dx = -(\hbar^2/2m)|\Psi_n'(0)|^2. \tag{1}$$

$\overline{F}_{nn}$ est également la valeur moyenne de la force avec laquelle la particule agit sur la paroi impénétrable située à l'origine des coordonnées ($x = 0$).

En reportant dans la formule (1) la valeur $\Psi_n'(0)$ de la fonction d'onde de la particule dans un puits de profondeur infinie (voir problème 2.1), on retrouve le résultat du problème 2.22.

2.25. La valeur moyenne de la force avec laquelle la particule, dans un état lié, agit sur le puits carré est exprimée par l'intégrale

$$\overline{(F_{\mathrm{dr}})_{nn}} = \int_0^\infty |\Psi_n(x)|^2(dU/dx)dx. \tag{1}$$

En utilisant les mêmes transformations de l'intégrale (1) que dans le problème 2.21, on obtient

$$\overline{(F_{\mathrm{dr}})_{nn}} = \begin{cases} E_n|\Psi_n^{(+)}(0)|^2 < 0, \\ \frac{\hbar^2}{2m}|\Psi_n^{(-)\prime}(0)|^2 > 0, \end{cases} \tag{2}$$

où l'indice $(\pm)$ indique la nature paire ou impaire de la fonction d'onde. Pour obtenir (2), on a tenu compte de ce que $\Psi'_n(0) = 0$ pour les fonctions d'onde paires et $\Psi_n(0) = 0$ pour les fonctions d'onde impaires.

2.26. Les fonctions d'onde mentionnées dans l'énoncé du problème précédent présentent beaucoup d'analogie avec la fonction d'onde $\Psi_0(x)$ de l'état fondamental de la particule : elles satisfont aux conditions aux limites exigées, n'ont pas de zéros dans l'intervalle $0 < x < a$ et ont une parité positive dans l'inversion des coordonnées par rapport au centre du puits. Aussi peut-on s'attendre à ce que la valeur moyenne de l'énergie de la particule dans ces états soit suffisamment proche de l'énergie de l'état fondamental E_0.

Dans le calcul de l'énergie moyenne, il faut prendre en compte le fait que $\overline{U(x)} = 0$, car la fonction d'onde est identiquement nulle pour $x \leq 0$ et $x \geq a$, et $U(x) = 0$ pour $0 < x < a$. On a donc $\overline{E} = \overline{T}$.

Vu que $\overline{T} = (\hbar^2/2m) \int |\Psi'(x)|^2 dx$, il est aisé d'obtenir la valeur moyenne $\overline{E}$, après avoir préalablement normé la fonction d'onde à l'unité (voir problème 2.4) :

a) $A^2 = 30/a^5, \qquad \overline{E} = 5\hbar^2/ma^2 = 1,013E_0,$

b) $B^2 = 8/3a, \qquad \overline{E} = 2\hbar^2\pi^2/3ma^2 = 1,333E_0,$

c) $C^2 = 12/a^3, \qquad \overline{E} = 6\hbar^2/ma^2 = 1,216E_0.$

Comme il se doit, les valeurs trouvées $\overline{E}$ sont supérieures à la valeur exacte $E_0 = \hbar^2\pi^2/2ma^2$ de l'énergie de l'état fondamental. La valeur la plus proche de E_0 est fournie par la fonction d'onde de la forme a). Dans b) et c), la différence entre $\overline{E}$ et E_0 est suffisamment grande, de 20 à 30 %. Ces résultats sont tout à fait naturels : la forme de la fonction d'onde a) est la plus proche de la fonction d'onde $\Psi_0(x) = \sqrt{2/a}\sin(\pi x/a)$ de l'état fondamental de la particule. La forme de la fonction d'onde b) près des parois du puits diffère fortement de la fonction d'onde exacte : pour $x \to 0$ $\Psi(x) \propto x^2$ tandis que $\Psi_0(x) \propto x$ (le comportement est identique pour $x \to a$). La fonction d'onde de la forme c) a une dérivée discontinue pour $x = a/2$, tandis que la dérivée de la fonction d'onde $\Psi_0(x)$ est continue en ce point.

2.27. En normant la fonction d'onde à l'unité, on obtient $\overline{E}(a)$. Pour toute valeur du paramètre a, on a l'inégalité $\overline{E}(a) \geq E_0$, où E_0 est l'énergie de l'état fondamental. En choisissant la valeur $a = a_0$ à partir de la condition $\overline{E}(a_0) = \min \overline{E}(a)$, on conclut que $\overline{E}(a_0)$ constitue l'approximation la plus proche (pour la classe étudiée des fonctions d'essai) de la grandeur E_0 (avec $E_0 \leq \overline{E}$). Plus la fonction d'essai est proche de la fonction d'onde de l'état fondamental, plus $\overline{E(a_0)}$ est proche de la valeur E_0.

Les calculs dans ce problème s'effectuent facilement si l'on prend en compte la valeur de l'intégrale ($b > 0$, n un entier)[3]

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{(b+x^2)^{n+1}} = \frac{(-1)^n}{n!}\frac{d^n}{db^n}\int \frac{dx}{(b+x^2)} = \frac{(-1)^n}{n!}\frac{d^n}{db^n}(\pi b^{-1/2}) = \frac{\pi(2n-1)!!}{2^n n! b^{n+1/2}}$$

3 La notation $(2n-1)!!$ signifie $(2n-1)!! \equiv 1 \cdot 3 \cdot 5 \cdot \ldots \cdot (2n-1)$.

a) $A^2 = (2/\pi a), \qquad \overline{T} = (\hbar^2/2m)\int |\Psi'(x)|^2 dx = \hbar^2/4ma^2,$

$\overline{U} = \overline{kx^2/2} = ka^2/2, \qquad \overline{E}(a) = \hbar^2/4ma^2 + ka^2/2,$

$\overline{E}(a_0) = \min \overline{E}(a) = \hbar\omega/\sqrt{2} \approx 0,71\hbar\omega, \qquad (a_0^2 = \sqrt{\hbar^2/2km},\ \omega = \sqrt{k/m})\ ; \qquad (1)$

b) $B^2 = 16/5\pi a, \qquad \overline{T} = 7\hbar^2/10ma^2, \qquad \overline{U} = ka^2/10,$

$\overline{E}(a_0) = \sqrt{7}\hbar\omega/5 \approx 0,53\hbar\omega, \qquad (a_0^2 = \sqrt{7\hbar^2/km}). \qquad (2)$

Les résultats (1) et (2) doivent être comparés à la valeur exacte $E_0 = \hbar\omega/2$. Notons que dans les deux cas a) et b) on a la relation $\overline{T}(a_0) = \overline{U}(a_0)$ qui est en accord avec le théorème du viriel.

La fonction d'onde exacte de l'état fondamental d'un oscillateur est de la forme

$$\Psi_0(x) = (\sqrt{\pi}x_0)^{-1/2}\exp(-x^2/2x_0^2), \qquad x_0^2 = \sqrt{\hbar^2/km}.$$

Comme $\exp(-x) = \lim\limits_{\nu\to\infty}(1 + x/\nu)^{-\nu}$, l'utilisation d'une fonction d'essai de la forme $\Psi = A(1 + x^2/a^2)^{-\nu}$ avec le choix des paramètres variationnels $a^2 = 2\nu x_0^2$ et $\nu \to \infty$ conduit à $\overline{E} \to E_0$, c'est-à-dire à la valeur exacte de l'énergie de l'état fondamental.

2.28.

a) $\overline{E}(a) = \hbar^2/4ma^2 - 2\alpha/\pi a,$

$\overline{E}(a_0) = \min \overline{E}(a) = -4m\alpha^2/\pi^2\hbar^2 \approx 0,81E_0\ ;$

b) $\overline{E}(a) = 7\hbar^2/10ma^2 - 16\alpha/5\pi a,$

$\overline{E}(a_0) = \min \overline{E}(a) = -256m\alpha^2/70\pi^2\hbar^2 \approx 0,74E_0.$

2.29.

a) Pour $A^2 = 4\alpha^3$ la fonction d'onde est normée à l'unité. On obtient :

$\overline{T} = \hbar^2\alpha^2/2m, \qquad \overline{U} = 3k/2\alpha, \qquad \overline{E}(\alpha) = \hbar^2/2ma^2 + 3k/2\alpha,$

$\overline{E}(\alpha_0) = \min \overline{E}(\alpha) = (243/16)^{1/3}(k^2\hbar^2/2m)^{1/3} \approx 2,48(k^2\hbar^2/2m)^{1/3}\ ; \qquad (1)$

b) $B^2 = 4\sqrt{\alpha^3/\pi}, \qquad \overline{T} = 3\hbar^2\alpha/4m, \qquad \overline{U} = 2k/\sqrt{\pi\alpha},$

$\overline{E}(\alpha_0) = \min \overline{E}(\alpha) = (81/2\pi)^{1/3}(k^2\hbar^2/2m)^{1/3} \approx 2,345(k^2\hbar^2/2m)^{1/3}. \qquad (2)$

Les valeurs approchées (1) et (2) de E_0 doivent être comparées à la valeur exacte $E_0 = 2,338(k^2\hbar^2/2m)^{1/3}$.

Notons que dans les deux cas on a la relation $2\overline{T}(\alpha_0) = \overline{U}(\alpha_0)$ en accord avec le théorème du viriel.

2.30. La forme la plus générale du polynôme du troisième degré satisfaisant aux conditions aux limites $\Psi(0) = \Psi(a) = 0$ est la suivante :

$$\Psi(x) = Ax(a - x)(x - b). \qquad (1)$$

Pour se servir d'une fonction d'onde de la forme (1) dans le calcul approché de l'énergie du premier état excité d'une particule par la méthode variationnelle, il faut rendre

cette fonction orthogonale à la fonction d'onde de l'état fondamental. On satisfait aisément à cette condition en tenant compte de la différence de parité des fonctions d'onde de l'état fondamental et du premier état excité dans l'inversion des coordonnées par rapport au centre du puits ($x = a/2$) : le paramètre b doit être choisi égal à $b = a/2$, de sorte que la fonction d'onde prend la forme

$$\Psi(x) = Ax(a - x)(x - a/2). \tag{2}$$

En calculant $\overline{E}$ dans l'état décrit par la fonction d'onde (2), il est commode de procéder au changement de variable $x \to x' = x - a/2$. Des calculs simples donnent : $A^2 = 840/a^7$ (à partir de la normalisation de la fonction d'onde) et

$$\overline{U} = 0, \qquad \overline{E} = \overline{T} = 21\hbar^2/ma^2 = 1,06E_1, \tag{3}$$

Comme il se doit, la grandeur $\overline{E}$ fournit une limite supérieure à la valeur de l'énergie $E_1 = 2\hbar^2\pi^2/ma^2$ du premier état excité. La valeur trouvée (3) de $\overline{E}$ est une valeur approchée de l'énergie du premier état excité E_1.

2.31. La fonction donnée, étant une fonction impaire de x, est orthogonale à la fonction exacte de l'état fondamental d'un oscillateur qui, elle, est paire. La valeur $\overline{E}(\alpha)$ dans l'état décrit par la fonction d'onde $\Psi(x, \alpha)$ constitue donc une limite supérieure à la valeur E_1 de l'énergie du premier état excité. En minimisant $\overline{E}(\alpha)$, on obtient $\overline{E}(\alpha_0) = \min \overline{E}(\alpha)$. Cette valeur de $\overline{E}(\alpha_0)$ peut être considérée comme la valeur approchée de E_1. Après avoir normé la fonction d'onde ($A^2 = 2\alpha^3$), on calcule

$$\overline{T} = (\hbar^2/2m)\int |\Psi'(x)|^2 dx = \alpha^2\hbar^2/2m, \qquad \overline{U} = 3k/2\alpha^2,$$

$$\overline{E}(\alpha_0) = \sqrt{3}\hbar\omega \approx 1,73\hbar\omega \qquad (\omega = \sqrt{k/m}).$$

La valeur obtenue pour $\overline{E}(\alpha_0)$ est à comparer à la valeur exacte $E_1 = 3\hbar\omega/2$.

2.32. Cherchons $\overline{E}(\kappa)$. Si $\overline{E} < 0$, comme $E_0 \leq \overline{E} < 0$, on peut supposer que dans le champ considéré il y a des états liés (E_0 étant l'énergie de l'état fondamental). Donc, la condition $\overline{E}(\kappa) \leq 0$ est suffisante pour l'existence d'états liés (les paramètres du potentiel s'exprimant en fonction de κ). En choisissant la valeur optimale du paramètre $\kappa = \kappa_0$ sur la base de la relation $\overline{E}(\kappa_0) = 0$, on aboutit aux valeurs approchées des paramètres du potentiel pour lesquelles il y a des états du spectre discret

a) $\overline{T} = \hbar^2|A|^2/8m\kappa$; $\qquad \overline{U} = -\alpha a^2|A|^2\exp(-2\kappa a)$.

La condition $\overline{E}(\kappa) \leq 0$ prend la forme

$$\xi \equiv m\alpha a/\hbar^2 \geq e^y/4y \geq e/4 \approx 0,68 \qquad (y \equiv 2\kappa a). \tag{1}$$

b) $\overline{T} = 3\sqrt{\pi}\hbar^2|B|^2/16m\sqrt{\kappa}$; $\overline{U} = -\alpha a^2|B|^2\exp(-\kappa a^2)$.

La condition $\overline{E}(\kappa) \leq 0$ prend la forme

$$\xi \geq \frac{3\sqrt{\pi}}{16y}e^{y^2} \geq \frac{3\sqrt{2\pi e}}{16} \approx 0,77 \qquad (y^2 \equiv \kappa a^2). \tag{2}$$

Les valeurs minimales du paramètre ξ dans les seconds membres des relations (1) et (2) doivent être interprétées comme des valeurs approchées des paramètres du potentiel pour lesquelles apparaissent des états liés, et ces valeurs sont à comparer à la valeur exacte $\xi_0 = 0,5$. Comme il fallait s'y attendre, le calcul variationnel du paramètre ξ_0 fournit une valeur par excés de la profondeur du puits pour laquelle des états liés apparaissent.

2.33. L'opérateur énergie cinétique $\widehat{T} = \widehat{p}^2/2m$ en représentation **p** est de la forme $\widehat{T} = p^2/2m$. L'opérateur énergie potentielle U, qui en représentation **x** est un opérateur multiplication $\widehat{U} = U(x)$, est en représentation **p** un opérateur intégral avec un noyau $U(p, p')$ égal à

$$U(p, p') \equiv \tilde{U}(p - p'), \qquad \tilde{U}(p) = \frac{1}{2\pi\hbar}\int U(x)\exp(-ipx/\hbar)dx. \tag{1}$$

Ainsi l'équation de Schrödinger en représentation **p** a la forme

$$\widehat{H}\Phi(p) \equiv \frac{p^2}{2m}\Phi(p) + \int_{-\infty}^{\infty}\tilde{U}(p - p')\Phi(p')dp' = E\Phi(p). \tag{2}$$

2.34. Dans le cas où $U(x) = -\alpha\delta(x)$, on obtient

$$\tilde{U}(p) = \frac{1}{2\pi\hbar}\int U(x)\exp(-ipx/\hbar)dx = -\alpha/2\pi\hbar,$$

et l'équation de Schrödinger en représentation **p** (voir problème précédent) prend la forme

$$\frac{p^2}{2m}\Phi(p) - \frac{\alpha}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\Phi(p)dp = E\Phi(p). \tag{1}$$

En notant

$$\int_{-\infty}^{\infty}\Phi(p)dp = C, \tag{2}$$

on obtient la solution de l'équation (1) sous la forme ($E = -|E| < 0$)

$$\Phi(p) = \frac{\alpha m}{\pi\hbar}\frac{C}{p^2 + 2m|E|}. \tag{3}$$

A partir des relations (2) et (3), on obtient

$$1 = \frac{\alpha m}{\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dp}{p^2 + 2m|E|} = \frac{\alpha}{\hbar}\sqrt{\frac{m}{2|E|}}. \tag{4}$$

L'équation (4) définit le spectre d'énergie de la particule. Elle n'a évidemment qu'une seule solution $E_0 = -m\alpha^2/2\hbar^2$. A ce niveau correspond la fonction d'onde (3) qui, avec le choix de $C = \sqrt{2\pi m\alpha/\hbar}$, est normée à l'unité.

2.35. Le noyau de l'opérateur $\widehat{U} = k\widehat{x}^2/2$ en représentation $\mathbf{p}$ a la forme

$$\begin{aligned} U(p,p') &= \frac{k}{4\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} x^2 \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(p-p')x\right] dx \\ &= -\frac{k\hbar}{4\pi}\frac{\partial^2}{\partial p^2}\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(p-p')x\right] dx = -\frac{k\hbar^2}{2}\frac{\partial^2}{\partial p^2}\delta(p-p'), \end{aligned}$$

et l'équation de Schrödinger en représentation $\mathbf{p}$ prend la forme

$$\left[\frac{p^2}{2m} - \frac{k\hbar^2}{2}\frac{\partial^2}{\partial p^2}\right]\Phi(p) = E\Phi(p),$$

qui est absolument analogue à l'équation de Schrödinger d'un oscillateur en représentation $\mathbf{x}$. Sa solution est évidemment :

$$\Phi_n(p) = \frac{\exp[-p^2/2m\omega\hbar]}{\sqrt{2^n n!\sqrt{\pi m\omega\hbar}}} H_n\left(\frac{p}{\sqrt{m\omega\hbar}}\right),$$

$$E_n = \hbar\omega(n+1/2), \qquad n = 0, 1, 2, \ldots$$

2.36. La solution de l'équation pour G_E avec $x < x'$ a la forme

$$G_E(x,x') = A(x')\exp[\kappa(x-x')] + B(x')\exp[-\kappa(x-x')], \qquad \kappa = \sqrt{2m|E|/\hbar^2} > 0.$$

La condition de décroissance de G_E pour $(x - x') \to -\infty$ exige que $B(x') = 0$. De façon analogue, pour $x > x'$ on a $G_E = C(x')\exp[-\kappa(x-x')]$. Au point $x = x'$ la fonction G_E est continue et sa dérivée dG_E/dx subit en ce point un saut égal (comparer à la solution du problème 2.10) à

$$G'_E(x = x' + 0, x') - G'_E(x = x' - 0, x') = -2m/\hbar^2.$$

Les conditions de raccordement de la fonction de Green G_E au point $x = x'$ donnent $A(x') = C(x') = m/\kappa\hbar^2$ et

$$G_E(x,x') = \frac{m}{\kappa\hbar^2}\exp[-\kappa|x-x'|]. \tag{1}$$

Notons que $G_E(x,x')$ ne dépend que de $|x - x'|$ (et non pas de x et x' séparément). Cette propriété de la fonction de Green est liée à l'homogénéité de l'espace (unidimensionnel dans le cas du problème) pour des particules libres.

A l'aide de la fonction de Green on peut écrire la solution générale de l'équation ($E < 0$)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\Psi(x) - E\Psi(x) = f(x) \tag{2}$$

sous la forme

$$\Psi(x) = A\exp(-\kappa x) + B\exp(\kappa x) + \int_{-\infty}^{\infty} G_E(x,x')f(x')dx'. \tag{3}$$

Si l'on pose dans l'équation (2), $f(x) = -U(x)\Psi(x)$, il s'agit alors de l'équation de Schrödinger, dont (3) est la solution formelle sous forme intégrale. Dans les applications physiques, on s'intéresse aux solutions de l'équation de Schrödinger qui ne croissent pas lorsque $x \to \pm\infty$ (ce qui s'établit aisément en observant le comportement de G_E pour $x \to \pm\infty$) ; il est alors nécessaire de poser dans (3) $A = B = 0$. La solution intégrale de l'équation de Schrödinger intégrale prend donc la forme

$$\Psi(x) = -\frac{m}{\kappa\hbar^2}\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\kappa|x - x'|)U(x')\Psi(x')dx'. \tag{4}$$

L'équation (4) est équivalente à l'équation de Schrödinger compte tenu des conditions aux limites (la décroissance de la solution pour $x \to \pm\infty$). Elle n'admet une solution que pour des valeurs $E_n < 0$, appartenant au spectre d'énergie de la particule.

La fonction de Green peut être abordée d'un point de vue quelque peu différent : elle peut être assimilée à un opérateur linéaire $\widehat{G}_E$, dont le noyau en représentation **x** est de la forme $G_E(x, x')$. En outre, de la définition de $G_E(x, x')$, il s'ensuit que

$$(\widehat{H} - E)\widehat{G}_E = \widehat{I}, \qquad \widehat{H} = \widehat{p}^2/2m. \tag{5}$$

L'équation (5) est valable en toute représentation. Sa solution formelle est :

$$\widehat{G}_E = \frac{\widehat{I}}{\widehat{H} - E}. \tag{6}$$

En tenant compte du résultat du problème 1.46, on obtient $G_E(x, x')$, noyau de l'opérateur $\widehat{G}_E$ en représentation **x** ($E < 0$)

$$G_E(x, x') = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{p^2/2m + |E|}\frac{\exp[ip(x - x')/\hbar]}{2\pi\hbar}dp = \frac{m}{\kappa\hbar^2}\exp(-\kappa|x - x'|),$$

en accord avec l'expression (1).

2.37. L'équation (4) du problème précédent pour $U(x) = -\alpha\delta(x)$ prend la forme

$$\Psi(x) = \frac{\alpha m}{\kappa\hbar^2}\Psi(0)\exp(-\kappa|x|). \tag{1}$$

De (1), découle la condition $\alpha m/\kappa\hbar^2 = 1$ qui définit la valeur de l'unique niveau du spectre discret, $E_0 = -m\alpha^2/2\hbar^2$ et la forme de la fonction d'onde $\Psi_0(x) = A\exp(-\kappa_0|x|)$.

2.38. Etudions $\Psi_0(x)$, la fonction d'onde de l'état fondamental de la particule avec $E_0 < 0$ ($|E_n| \leq |E_0|$). Cette fonction, qui n'a pas de zéros pour des valeurs finies de x, est réelle ; en outre, $\Psi_0(x) \geq 0$ (cette dernière condition est toujours remplie grâce à un choix adéquat du facteur de phase). La fonction $\Psi_0(x)$ satisfait à l'équation intégrale (4) du problème 2.36. Posons dans cette équation $x = x_0$ où x_0 est le point correspondant au maximum de la fonction $\Psi_0(x)$:

$$\Psi_0(x_0) = \frac{m}{\kappa_0\hbar^2}\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\kappa_0|x_0 - x'|)|U(x')|\Psi_0(x')dx'. \tag{1}$$

Remarquons que la fonction sous l'intégrale dans le second membre de (1) est positive ou nulle et que la substitution de $\exp(-\kappa_0|x_0-x'|)\Psi_0(x')$ dans l'intégrale par $\Psi_0(x_0)$ ne peut qu'augmenter le second membre de (1). On obtient donc

$$\Psi_0(x_0) \leq \frac{m}{\kappa_0\hbar^2}\Psi_0(x_0)\int |U(x)|dx. \tag{2}$$

D'où

$$|E_n| \leq |E_0| = \frac{\hbar^2\kappa_0^2}{2m} \leq \frac{m}{2\hbar^2}\left[\int_{-\infty}^{\infty} U(x)dx\right]^2, \tag{3}$$

ce qu'il fallait démontrer.

L'égalité, dans la formule (2), ne se réalise que dans le cas d'un potentiel de la forme de $U(x) = -\alpha\delta(x-a)$. L'égalité approchée (2) n'a lieu que pour des puits de potentiel peu profonds remplissant la condition $|U_0|ma^2/\hbar^2 \ll 1$, où U_0 et a sont les valeurs caractéristiques du potentiel et de son rayon d'action.

2.39. La fonction de Green $G_E(x,x')$ $(x,x' \geq 0)$ peut être obtenue directement comme solution de l'équation différentielle pour G_E, de la même façon que dans le problème 2.36, et elle est de la forme

$$G_E(x,x') = \frac{m}{\kappa\hbar^2}[\exp(-\kappa|x-x'|) - \exp(-\kappa|x+x'|)] \tag{1}$$

(la forme (1) de la fonction de Green est évidente compte tenu du résultat du problème 2.36 et de la symétrie du problème).

2.40. La solution de l'équation de Schrödinger sous forme intégrale pour les états du spectre discret (avec $\tilde{U} \leq 0$) est

$$\Psi(x) = -\frac{m}{\kappa\hbar^2}\int_0^{\infty}[\exp(-\kappa|x-x'|) - \exp(-\kappa|x+x'|)]|\tilde{U}(x')|\Psi_0(x')dx'. \tag{1}$$

Dans l'hypothèse où il existe des états liés, soit $\Psi_0(x)$ la fonction d'onde de l'état fondamental d'une particule d'énergie $E_0 = -\frac{\hbar^2\kappa_0^2}{2m} < 0$. La fonction $\Psi_0(x)$ n'a pas de zéros (en négligeant les zéros en $x=0$ et $x=\infty$) et on admet qu'avec un choix adéquat du facteur de phase la fonction $\Psi_0(x)$ est une fonction réelle remplissant la condition $\Psi_0(x) \geq 0$. En utilisant la relation (1) pour $\Psi_0(x_0)$ où x_0 est le point où la fonction $\Psi_0(x)$ est maximum, on obtient l'inégalité

$$1 \leq \frac{m}{\kappa_0\hbar^2}\int_0^{\infty}[\exp(-\kappa_0|x_0-x|) - \exp(-\kappa_0|x_0+x|)]|\tilde{U}(x)|dx. \tag{2}$$

Comme $|x+x'| - |x-x'| \leq 2x'$ (rappelons que $x,x' \geq 0$), on a

$$\begin{aligned} 0 &\leq \exp(-\kappa|x-x'|) - \exp(-\kappa|x+x'|) \\ &= \exp(-\kappa|x-x'|)[1-\exp(-\kappa|x+x'|+\kappa|x-x'|)] \\ &\leq \exp(-\kappa|x-x'|)[1-\exp(-2\kappa x')] \leq 2\kappa x', \end{aligned} \tag{3}$$

et, compte tenu de l'inégalité (3), dans la relation (2), il vient

$$\frac{2m}{\hbar^2}\int_0^\infty x|\tilde{U}(x)|dx \geq 1. \tag{4}$$

La condition (4) est une condition *nécessaire* à l'existence d'états liés dans le potentiel $U(x)$ considéré.

Rappelons qu'une condition suffisante d'existence d'états liés peut être obtenue par la méthode variationnelle (voir problème 2.32).

L'application de la relation (4) au puits de potentiel indiqué dans l'énoncé fournit la condition nécessaire à l'existence d'états liés : $U_0ma^2/\hbar^2 \geq 1$; la condition exacte est : $U_0ma^2/\hbar^2 \geq \pi^2/8 \approx 1,24$ (voir, par exemple, le problème 2.20).

Notons que la condition (4) pour le potentiel $\tilde{U}(x) = \alpha\delta(x-a)$ est une condition nécessaire et suffisante d'existence d'états liés.

2.41. La fonction de Green $G_E(x,x')$ $(0 \leq x, x' \leq a)$ satisfait à l'équation

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}G_E - EG_E = \delta(x-x')$$

avec les conditions aux limites $G_E(x=0,x') = G_E(x=a,x') = 0$ et, par suite, a la forme $(\kappa = \sqrt{2mE/\hbar^2})$

$$G_E(x,x') = \begin{cases} A(x')\sin\kappa x, & 0 \leq x < x', \\ B(x')\sin\kappa(x-a), & x' < x \leq a. \end{cases} \tag{1}$$

Les conditions de raccordement de la fonction $G_E(x,x')$ (1) au point $x = x'$ sont absolument analogues à celles utilisées dans la résolution du problème 2.36 et permettent de trouver $A(x')$ et $B(x')$ et donc d'obtenir l'expression finale :

$$G_E(x,x') = \frac{-2m\sin[\kappa(x+x'-|x'-x|)/2]\sin[\kappa(x+x'+|x'-x|-2a)/2]}{\kappa\hbar^2\sin\kappa a}. \tag{2}$$

La fonction de Green G_E est donc une fonction analytique de la variable complexe E $(\kappa = \sqrt{2mE/\hbar^2})$ comportant les points singuliers suivants :

a) le point $E = 0$ est un point singulier isolé ;
b) le point $E = \infty$ est un point singulier essentiel ;
c) les points $E_n = \hbar^2\kappa_n^2/2m$, où $\kappa_n a = (n+1)\pi, n = 0,1,2,\ldots$, constituent des pôles de la fonction de Green G_E.

Il est évident que la position des pôles E_n de la fonction G_E, dans le plan de la variable complexe E, coïncide avec les valeurs E_n des niveaux d'énergie de la particule dans le puits.

2.42.

a) D'après le problème 2.38, $|E_0|$ a une valeur maximale pour $U(x) = -\alpha\delta(x-a)$.

b) Le nombre maximal d'états liés correspondant aux conditions de ce problème est égal à l'infini. En effet, il existe des potentiels qui satisfont aux conditions de l'énoncé et qui ont la forme $U(x) \sim -\alpha|x|^{-\nu}$ avec $1 < \nu < 2$ pour $x \to \pm\infty$. Pour les potentiels ayant ce comportement à l'infini, il existe des états liés d'énergie aussi petite que l'on veut $E < 0$ (voir chap. III paragraphe 18 de [1]) et il se produit une accumulation des niveaux d'énergie du spectre discret au point $E = 0$.

2.43. La solution de l'équation de Schrödinger d'une particule libre, pour $x \geq 0$, satisfaisant à la condition $\Psi(0) = 0$, est de la forme $\Psi_k(x) = A(k)\sin(kx)$, $k = \sqrt{2mE/\hbar^2} > 0$. Choisissant $A(k)$ à partir de la condition de normalisation

$$\int_0^\infty \Psi_k(x)\Psi^*_{k'}(x)dx = \delta(k-k'). \tag{1}$$

Compte tenu des formules bien connues

$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \exp(ikx)dx = \delta(k), \qquad \frac{1}{\pi}\int_0^\infty \cos(kx)dx = \delta(k),$$

on obtient

$$\begin{aligned}\int_0^\infty \Psi_k(x)\Psi^*_{k'}(x)dx &= \frac{1}{2}A(k)A^*(k')\int_0^\infty \{\cos[(k-k')x] - \cos[(k+k')x]\}dx \\ &= \frac{\pi}{2}A(k)A^*(k')\delta(k-k') = \frac{\pi}{2}|A(k)|^2\delta(k-k').\end{aligned}$$

Donc $A(k) = \sqrt{2/\pi}$ et les fonctions propres de l'hamiltonien normées sur la distribution δ en k sont de la forme $\Psi_k(x) = \sqrt{2/\pi}\sin(kx)$, $x > 0$.

Les fonctions propres de l'hamiltonien $\Psi_E(x)$ normées avec la distribution δ en énergie sont

$$\Psi_E(x) = \sqrt{\frac{dk}{dE}}\Psi_k(x) = \left(\frac{2m}{\pi^2 E\hbar^2}\right)^{1/4}\sin\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}x\right).$$

Le caractère complet des systèmes de fonctions $\Psi_k(x), \Psi_E(x)$ pour $x > 0$ est fourni par les relations

$$\int_0^\infty \Psi^*_k(x')\Psi_k(x)dk = \int_0^\infty \Psi^*_E(x')\Psi_E(x)dE = \delta(x-x'),$$

dont la première est obtenue directement en permutant les variables x et k dans l'équation (1).

2.44. La solution de l'équation de Schrödinger pour $x < 0$ et $x > 0$, décroissante pour $x \to \infty$, est de la forme

$$\Psi_E(x) = \begin{cases} A\sin(kx+\delta), & x < 0 \quad (k = \sqrt{2mE/\hbar^2}), \\ C\exp(-\kappa x), & x > 0 \quad (\kappa = \sqrt{2m(U_0 - E)/\hbar^2}). \end{cases} \tag{1}$$

Les conditions de continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée au point $x = 0$ donnent

$$A \sin\delta = C, \qquad kA\cos\delta = -\kappa C, \tag{2}$$

c'est-à-dire $\tan\delta = -k/\kappa < 0$; en supposant que $-\pi/2 \leq \delta < 0$, il découle de (2) que $C = -\sqrt{k^2/(k^2+\kappa^2)}A$.

Un calcul direct (laissé au soin du lecteur) confirme l'orthogonalité des fonctions d'onde (1) pour les différentes valeurs de E.

Pour normer la fonction d'onde (1) avec la distribution δ en énergie ou avec la variable k, il faut choisir les valeurs du coefficient A du problème précédent, c'est-à-dire $A(k) = \sqrt{2/\pi}$ et $A(E) = \sqrt{dk/dE}A(k)$.

Les fonctions d'onde $\Psi_E(x)$ (1) obtenues pour $0 < E \leq U_0$ ne constituent pas un système complet, vu que ce dernier doit aussi inclure les fonctions d'onde de la particule d'énergie $E > U_0$.

2.45. L'équation de Schrödinger en représentation **p** et sa solution sont de la forme

$$\frac{p^2}{2m}\Phi_E(p) - i\hbar F_0 \frac{d}{dp}\Phi_E(p) = E\Phi_E(p), \tag{1}$$

$$\Phi_E(p) = C(E)\exp\left[-\frac{ip^3}{6m\hbar F_0} + \frac{iEp}{F_0\hbar}\right]. \tag{2}$$

La normalisation de la fonction d'onde (2) avec la distribution δ en énergie

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Phi_E(p)\Phi^*_{E'}(p)dp = \delta(E - E')$$

donne $C(E) = (2\pi\hbar F_0)^{-1/2}$. En se servant de cette valeur de $C(E)$, il est facile d'établir le caractère complet du système de fonctions $\Phi_E(p)$:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Phi^*_E(p')\Phi_E(p)dE = \delta(p - p').$$

2.46. La solution de l'équation de Schrödinger décrivant la réflexion (et la transmission) des particules d'énergie $E > U_0$ sur une paroi est de la forme (les particules arrivent sur la paroi depuis la gauche)

$$\Psi_k(x) = \begin{cases} e^{ikx} + A(k)e^{-ikx}, & x < 0 \quad (k = \sqrt{2mE/\hbar^2} > 0), \\ B(k)e^{ik'x}, & x > 0 \quad (k' = \sqrt{2m(E-U_0)/\hbar^2} > 0). \end{cases} \tag{1}$$

La continuité de la fonction d'onde (1) et de sa dérivée au point $x = 0$ donnent les relations

$$1 + A = B, \qquad k(1 - A) = k'B \ ;$$
$$A(k) = \frac{k - k'}{k + k'}, \qquad B(k) = \frac{2k}{k + k'}. \tag{2}$$

Les coefficients de réflexion $R = |A|^2$ et de transmission $D = k'|B|^2/k$:

$$R(E) = \left(\frac{\sqrt{E} - \sqrt{E - U_0}}{\sqrt{E} + \sqrt{E - U_0}}\right)^2, \qquad D(E) = \frac{4\sqrt{E(E - U_0)}}{(\sqrt{E} + \sqrt{E - U_0})^2}. \tag{3}$$

et on a, comme attendu, la relation $R(E) + D(E) = 1$.

Cas limites :

$$\begin{aligned} R(E) &\approx U_0^2/16E^2 \to 0, && \text{pour } E \to \infty, \\ D(E) &\approx 4\sqrt{(E - U_0)/U_0} \to 0, && \text{pour } E \to U_0. \end{aligned}$$

2.47. On suppose ici que les particules incidentes viennent de la gauche ($x < 0$). La solution de l'équation de Schrödinger décrivant la réflexion de ces particules est de la forme

$$\Psi_k(x) = \begin{cases} e^{ikx} + A(k)e^{-ikx}, & x < 0 \quad (k = \sqrt{2mE/\hbar^2} > 0), \\ B(k)e^{ikx}, & x > 0. \end{cases} \tag{1}$$

Les conditions de raccordement de la fonction d'onde (1) au point $x = 0$ (voir les relations (2) du problème 2.10) donnent

$$\begin{gathered} 1 + A = B, \qquad ik(B - 1 + A) = 2m\alpha B/h^2 \ ; \\ A(k) = \frac{m\alpha}{ikh^2 - m\alpha}, \qquad B(k) = \frac{ikh^2}{ikh^2 - m\alpha}. \end{gathered} \tag{2}$$

Les coefficients de réflexion $R(E) = |A|^2$ et de transmission $D(E) = |B|^2$ possèdent la propriété $R + D = 1$, de plus

$$\begin{aligned} R(E) &\approx m\alpha^2/2Eh^2 \to 0, && \text{pour } E \to \infty, \\ D(E) &\approx 2Eh^2/m\alpha^2 \to 0, && \text{pour } E \to 0. \end{aligned}$$

Comme dans les relations (2), $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$, les fonctions $A(E)$ et $B(E)$ sont des fonctions analytiques de la variable complexe E qui possèdent les points singuliers suivants :

a) les points $E = 0$ et $E = \infty$ sont des points de branchement ;

b) un pôle au point E_0 est défini par la condition $i\sqrt{2mE_0} = m\alpha/h$.

Comme les fonctions $A(E)$ et $B(E)$ possèdent des points de branchement, elles constituent des fonctions multiformes (dans le problème concerné, à deux feuillets). Pour la définition univoque des fonctions $A(E)$ et $B(E)$ dans le plan de la variable complexe E, faisons dans ce plan une coupure suivant le demi-axe réel $E > 0$ (fig. 20) et définissons le *feuillet physique* par la condition suivant laquelle pour les points du plan E, adjoints directement au "bord" supérieur de la coupure (les points de type 1 sur la figure), la phase du nombre E est nulle (le feuillet physique est l'un des feuillets de la surface de Riemann des fonctions multiformes). Ainsi pour des valeurs

de la variable E sur le "bord" supérieur de la coupure du feuillet physique, les valeurs des fonctions analytiques $A(E)$ et $B(E)$ coïncident avec les valeurs des amplitudes physiques de réflexion $A(E)$ et de transmission $B(E)$ des particules pour les valeurs correspondantes de l'énergie $E < 0$.

Etablissons sur quel feuillet de la surface de Riemann (physique ou non) se trouve le point E_0 constituant le pôle des fonctions $A(E)$ et $B(E)$. Comme la phase des points E sur le demi-axe négatif $E < 0$ ($ImE = 0$) du feuillet physique vaut π, pour ces points du feuillet physique $\sqrt{E} = i|\sqrt{E}|$. On remarque donc que le point E_0 se trouve sur le feuillet physique pour $\alpha < 0$, autrement dit, dans le cas d'un puits de potentiel ; la valeur E_0 coïncide également avec celle du niveau unique du spectre discret dans le potentiel $U(x) = -|\alpha|\delta(x)$. Dans le cas d'une barrière de potentiel, $\alpha > 0$, les états liés disparaissent, et le pôle des fonctions $A(E)$ et $B(E)$ se trouve sur le feuillet non physique (phase E_0 égale à 3π). Ce pôle correspond à un niveau dit virtuel.

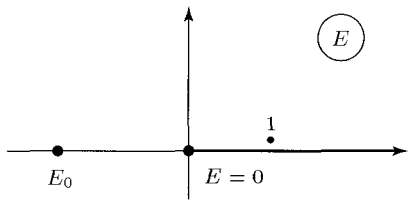

Figure 20

2.48. Admettons que les particules incidentes vont de la gauche vers la droite. La fonction d'onde décrivant la transmission et la réflexion des particules d'énergie E sur la barrière de potentiel est la solution de l'équation de Schrödinger et prend la forme

$$\Psi_k(x) = \begin{cases} e^{ikx} + Ae^{-ikx}, & x < 0 \quad (k = \sqrt{2mE/\hbar^2} > 0), \\ Be^{i\kappa x} + Ce^{-i\kappa x}, & 0 < x < a \quad (\kappa = \sqrt{2m(E - U_0)/\hbar^2}), \\ Ge^{ik(x-a)}, & x > a. \end{cases} \tag{1}$$

Les conditions de continuité de la fonction d'onde (1) et de sa dérivée aux points $x = 0$ et $x = a$ donnent les relations

$$\begin{aligned} &1 + A = B + C, \qquad k(1 - A) = \kappa(B - C), \\ &Be^{i\kappa a} + Ce^{-i\kappa a} = G, \qquad \kappa(Be^{i\kappa a} - Ce^{-i\kappa a}) = kG. \end{aligned} \tag{2}$$

La résolution du système d'équations (2) permet de trouver les amplitudes de réflexion A et de transmission G des particules :

$$A = \frac{(k^2 - \kappa^2)\sin\kappa a}{(\kappa^2 + k^2)\sin\kappa a + 2ik\kappa\cos\kappa a}, \qquad G = \frac{2ik\kappa}{(\kappa^2 + k^2)\sin\kappa a + 2ik\kappa\cos\kappa a}. \tag{3}$$

Les résultats obtenus plus haut sont aussi valables pour $E < U_0$. La grandeur κ est alors purement imaginaire.

Les coefficients de réflexion $R = |A|^2$ et de transmission $D = |G|^2$ satisfont à la relation $R+D = 1$, on ne donne donc dans la suite que la valeur du coefficient $D(E)$:

$$D(E) = \begin{cases} \dfrac{4E(E-U_0)}{4E(E-U_0)+U_0^2\sin^2\sqrt{2m(E-U_0)a^2/\hbar^2}}, & E > U_0, \quad (4) \\[2ex] \dfrac{4E(U_0-E)}{4E(U_0-E)+U_0^2\sinh^2\sqrt{2m(U_0-E)a^2/\hbar^2}}, & E < U_0, \quad (5) \end{cases}$$

Il s'ensuit des expressions exactes (4) et (5) que l'on a :

a) $D(E) \approx 1 - \dfrac{U_0^2}{4E^2}\sin^2\sqrt{2m(E-U_0)a^2/\hbar^2} \approx 1$ pour $E \gg U_0$, (6)

b) $D(E) \approx \dfrac{16E(U_0-E)}{U_0^2}\exp\left[-2\sqrt{2m(U_0-E)a^2/\hbar^2}\right] \ll 1$ pour $\dfrac{ma^2(U_0-E)}{\hbar^2} \gg 1$,

c) $D(E) \approx \dfrac{4E}{U_0}\left[\sinh\sqrt{2m(U_0-E)a^2/\hbar^2}\right]^{-2} \ll 1$ pour $E \ll ma^2U_0^2/\hbar^2$ et $E \ll U_0$,

d) $D(E) \approx (1+ma^2U_0^2/2E\hbar^2)^{-1}$ pour $ma^2U_0/\hbar^2 \ll 1$ et $ma^2E/\hbar^2 \ll 1$. (7)

Dans le dernier cas, $D(E)$ a la même valeur que pour un potentiel de la forme de $U(x) = \alpha\delta(x)$ avec $\alpha = U_0a = \int U(x)dx$ (voir problème 2.47).

2.49. Le problème peut-être résolu en suivant la solution donnée pour le problème précédent. Mais il est aisé de voir que l'on peut se servir directement de la formule (4) du problème précédent si l'on y remplace U_0 par $-U_0$:

$$D(E) = \frac{4E(E+U_0)}{4E(E+U_0)+U_0^2\sin^2\sqrt{2m(E+U_0)a^2/\hbar^2}}, \quad (1)$$

où $U_0 > 0$ est la profondeur du puits.

Dans les cas limites a) et d) (voir l'énoncé du problème précédent) la valeur du coefficient $D(E)$ se détermine d'après les formules (6) et (7) du problème précédent (avec substitution à U_0 de $-U_0$).

Pour $E \to 0$, l'expression (1) devient

$$D(E) = \frac{4E}{U_0\sin^2\sqrt{2mU_0a^2/\hbar^2}} \to 0. \quad (2)$$

Cependant la formule (2) n'est pas correcte si l'on a $\sqrt{2ma^2U_0/\hbar^2} = n\pi$, $n = 1, 2, \ldots$, ce qui correspond aux paramètres du puits pour lesquels il apparaît de nouveaux états liés à mesure que le puits s'approfondit (voir problème 2.18). Dans ce cas, à partir de (1), on voit que $D(E) \to 1$ pour $E \to 0$ (comparer à (2)).

2.50. Admettons que les particules incidentes viennent de la gauche. La fonction d'onde, solution de l'équation de Schrödinger pour les valeurs cherchées de l'énergie E, a la forme

$$\Psi_k(x) = \begin{cases} e^{ikx}, & x < 0 \quad (k = \sqrt{2mE/\hbar^2} > 0), \\ A\sin kx + B\cos kx, & 0 < x < a, \\ C\exp[ik(x-a)], & x > a. \end{cases} \tag{1}$$

Dans le domaine $x < 0$, l'onde réfléchie $G\exp(-ikx)$ n'existe pas car on cherche la fonction d'onde des particules complètement transmises.

Effectuant le raccordement de la fonction d'onde (1) aux points $x = a$ (les conditions de raccordement sont fixées par les relations (2) du problème 2.10), on obtient

$$\begin{gathered} B = 1, \qquad kA - ik = 2m\alpha/\hbar^2, \qquad A\sin ka + B\cos ka = C, \\ ikC - kA\cos ka + kB\sin ka = 2m\alpha C/\hbar^2. \end{gathered} \tag{2}$$

Le système d'équations algébriques (2) permettant de déterminer les grandeurs A, B, C est, à proprement parler, surdéfini. Il ne possède de solution qu'à la condition

$$\tan ka = -k\hbar^2/\alpha m, \tag{3}$$

définissant les valeurs des énergies $E = \hbar^2k^2/2m$, pour lesquelles les particules ne se réfléchissent pas sur cette barrière de potentiel.

2.51. Après le changement de variable $x \to z = -\exp(-x/a)$, l'équation de Schrödinger s'écrit sous la forme

$$-\frac{\hbar^2}{2ma^2}z^2\Psi''_{zz} - \frac{\hbar^2}{2ma^2}z\Psi'_z + \frac{U_0}{1-z}\Psi = E\Psi. \tag{1}$$

En posant $\Psi(z) = w(z)z^{-ik_1a}$, où $k_1 = \sqrt{2m(E-U_0)/\hbar^2} > 0$, l'équation (1) devient

$$z(1-z)w'' + (1-z)(1-2ik_1a)w' + (k_1^2 - k^2)a^2w = 0 \tag{2}$$

ayant pour solution les fonctions hypergéométriques $F(\alpha, \beta, \gamma, z)$ dont les paramètres sont définis par

$$\alpha = -i(k+k_1)a, \qquad \beta = i(k-k_1)a, \qquad \gamma = 1 - 2ik_1a. \tag{3}$$

La solution des équations (1) et (2) nécessaire à la description du processus de réflexion des particules venant de la gauche doit être choisie sous la forme

$$w = F(\alpha, \beta, \gamma, z), \qquad \Psi_k(x) = Ce^{ik_1x}F(\alpha, \beta, \gamma, -e^{-x/a}), \tag{4}$$

car c'est justement cette solution qui donne à l'expression asymptotique de la fonction d'onde pour $x \to +\infty$ (avec $z \to 0$) la forme $\Psi_k(x) \approx C\exp(ik_1x)$.

En utilisant la formule liant les fonctions hypergéométriques d'arguments z et $1/z$ [12], on obtient l'expression asymptotique de la fonction d'onde (4) pour $x \to -\infty$:

$$\begin{aligned}\Psi_k(x) &= C\exp(ik_1x)F(\alpha,\beta,\gamma,-\mathrm{e}^{-x/a}) \\ &\approx \frac{C\Gamma(\gamma)\Gamma(\beta-\alpha)}{\Gamma(\beta)\Gamma(\gamma-\alpha)}\mathrm{e}^{-ikx} + \frac{C\Gamma(\gamma)\Gamma(\alpha-\beta)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\gamma-\beta)}\mathrm{e}^{ikx}.\end{aligned} \tag{5}$$

Le premier terme dans la formule (5) ($k = \sqrt{2mE/\hbar^2} > 0$) décrit les particules réfléchies et le second les particules incidentes. En se servant des expressions asymptotiques de la fonction d'onde pour $x \to \pm\infty$, on obtient le coefficient (ou la probabilité) de transmission des particules :

$$D = \frac{j_{\text{trans}}}{j_{\text{incid}}} = \frac{k_1}{k}\left|\frac{\Gamma(\alpha)\Gamma(\gamma-\beta)}{\Gamma(\gamma)\Gamma(\alpha-\beta)}\right|^2 = \frac{k_1}{k}\left|\frac{\Gamma(-i(k+k_1)a)\Gamma(1-i(k+k_1)a)}{\Gamma(1-2ik_1a)\Gamma(-2ika)}\right|^2 ; \tag{6}$$

cette expression peut être mise sous la forme (en utilisant des propriétés de la fonction Γ [12])

$$D(E) = \frac{\sinh(2\pi k_1 a)\sinh(2\pi ka)}{\sinh^2(\pi(k_1+k)a)}. \tag{7}$$

On déduit de (7) les expressions limites

$$\begin{aligned}D(E) &\approx 1 - \frac{2\pi^2 ma^2U_0^2}{E\hbar^2}\exp\left[-4\pi a\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\right] \to 1 \text{ pour } E \to \infty, \\ D(E) &\approx \frac{4\pi a\sqrt{2m}}{\hbar}\coth\left(\pi a\sqrt{\frac{2mU_0}{\hbar^2}}\right)\sqrt{E-U_0} \propto \sqrt{E-U_0} \to 0 \text{ pour } E \to U_0.\end{aligned} \tag{8}$$

2.52. L'équation de Schrödinger, après le changement de variable $z = \tanh(x/a)$ et introduction d'une nouvelle fonction $w(z)$ selon la formule ($k = \sqrt{2mE/\hbar^2} > 0$)

$$\Psi = (1-z^2)^{-ika/2}w(z), \tag{1}$$

prend la forme

$$(1-z^2)w'' - 2z(1-ika)w' + \left(k^2a^2 + ika - \frac{2mU_0a^2}{\hbar^2}\right)w = 0. \tag{2}$$

Par changement de variable $(1-z) = 2u$, l'équation (2) se transforme en l'équation

$$u(1-u)\frac{d^2w}{du^2} + (1-ika-2(1-ika)u)\frac{dw}{du} + \left(k^2a^2 + ika - \frac{2mU_0a^2}{\hbar^2}\right)w = 0, \tag{3}$$

dont la solution est la fonction hypergéométrique $F(\alpha,\beta,\gamma,u)$ avec les paramètres

$$\begin{aligned}\alpha &= (1-2ika)/2 + \sqrt{1/4 - 2ma^2U_0/\hbar^2}, \\ \beta &= (1-2ika)/2 - \sqrt{1/4 - 2ma^2U_0/\hbar^2}, \\ \gamma &= 1 - ika.\end{aligned} \tag{4}$$

Dans le problème de la transmission de particules venant de la gauche, la solution de l'équation (3) doit être cherchée sous la forme de $w = CF(\alpha, \beta, \gamma, u)$, car c'est justement avec un tel choix de w que la fonction d'onde Ψ a le bon comportement pour $x \to +\infty$:

$$\Psi(x) \approx C\, 4^{-ika/2} \exp(ikx), \qquad x \to +\infty \tag{5}$$

(de plus, $z \approx 1 - 2\exp(-2x/a) \to 1, u \to 0$ et

$$(1 - z^2)^{-ika/2} \approx [4\exp(-2x/a)]^{-ika/2} \propto \exp(ikx)).$$

Ainsi la fonction $\Psi_k(x)$ est de la forme

$$\Psi_k(x) = C\,[\cosh^2(x/a)]^{ika/2} F(\alpha, \beta, \gamma, \frac{1 - \tanh(x/a)}{2}). \tag{6}$$

Du fait que pour $x \to -\infty$ l'argument $u = (1 - \tanh(x/a))/2$ de la fonction hypergéométrique de (6) vaut $u \approx 1 - \exp(2x/a) \to 1$, en utilisant la relation

$$F(\alpha, \beta, \gamma, z) = \frac{\Gamma(\gamma)\Gamma(\gamma - \alpha - \beta)}{\Gamma(\gamma - \alpha)\Gamma(\gamma - \beta)} F(\alpha, \beta, \alpha + \beta + 1 - \gamma, 1 - z) +$$
$$\frac{\Gamma(\gamma)\Gamma(\alpha + \beta - \gamma)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)} (1 - z)^{\gamma - \alpha - \beta} F(\gamma - \alpha, \gamma - \beta, \gamma + 1 - \alpha - \beta, 1 - z),$$

on obtient l'expression asymptotique de la fonction (6) pour $x \to -\infty$:

$$\Psi_k(x) \approx C\, 4^{-ika/2} \frac{\Gamma(\gamma)\Gamma(\alpha + \beta - \gamma)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)} \exp(ikx) +$$
$$+ C\, 4^{-ika/2} \frac{\Gamma(\gamma)\Gamma(\gamma - \alpha - \beta)}{\Gamma(\gamma - \alpha)\Gamma(\gamma - \beta)} \exp(-ikx). \tag{7}$$

D'après les formules (4), (5) et (7), on trouve le coefficient de transmission :

$$D(E) = \left| \frac{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)}{\Gamma(\gamma)\Gamma(\alpha + \beta - \gamma)} \right|^2 = \frac{\sinh^2(\pi k a)}{\sinh^2(\pi k a) + \cos^2\left(\pi\sqrt{\frac{1}{4} - \frac{2ma^2 U_0}{\hbar^2}}\right)}. \tag{8}$$

L'expression (8) est valable pour toute valeur des paramètres du potentiel, y compris pour $U_0 < 0$, c'est-à-dire dans le cas d'un puits de potentiel. Pour $8ma^2U_0/\hbar^2 > 1$, l'argument du cosinus dans (8) est purement imaginaire, et il est commode de remplacer $\cos(i\pi\tilde{\xi}) = \cosh \pi\tilde{\xi}$ ($\tilde{\xi} \equiv \sqrt{2ma^2U_0/\hbar^2 - 1/4}$).

Notons une propriété intéressante du coefficient $D(E)$: dans le cas d'un puits de potentiel $U_0 < 0$, si la condition

$$\sqrt{1/4 + 2ma^2|U_0|/\hbar^2} = n + 1/2, \; n = 1, 2, \ldots$$

est remplie, le coefficient de transmission $D(E)$ vaut 1 quelle que soit l'énergie des particules, autrement dit, les particules traversent le champ sans réflexion.

Etudions quelques cas limites de la formule (8).

a) Un potentiel faible ($ma^2|U_0|/\hbar^2 \ll 1$) et des particules lentes ($ka \ll 1$) :

$$D(E) \approx \frac{E}{E + 2ma^2U_0^2/\hbar^2}. \tag{9}$$

b) Un potentiel faible et des particules pas trop lentes ($ka \gtrsim 1$) :

$$D(E) \approx 1 - 4\pi^2m^2a^4U_0^2/\hbar^4 \sinh^2(\pi ka) \approx 1. \tag{10}$$

c) Une barrière de faible transparence ($ma^2U_0/\hbar^2 \gg 1$) et des particules rapides ($ka \gg 1$) :

$$D(E) \approx \frac{1}{1 + \exp\left[\frac{2\pi a}{\hbar}\sqrt{2m}(\sqrt{U_0} - \sqrt{E})\right]}. \tag{11}$$

d) Une barrière de faible transparence et $|E - U_0| \ll U_0$:

$$D(E) \approx \left\{1 + \exp\left[-\frac{\pi a}{\hbar}\sqrt{\frac{2m}{U_0}}(E - U_0)\right]\right\}^{-1}. \tag{12}$$

e) Une barrière de faible transparence et $E \to 0$:

$$D(E) \approx \frac{8\pi^2ma^2E}{\hbar^2} \exp\left(-2\pi\sqrt{\frac{2ma^2U_0}{\hbar^2}}\right) \to 0. \tag{13}$$

f) Une barrière (ou un puits) de dimension arbitraire et $E \to \infty$:

$$D(E) \approx 1 - 4\cos^2\left(\pi\sqrt{\frac{1}{4} - \frac{2ma^2U_0}{\hbar^2}}\right) \exp\left[-2\pi\sqrt{\frac{2ma^2E}{\hbar^2}}\right] \to 1. \tag{14}$$

2.53. Pour $x < 0$, la fonction d'onde décrivant la réflexion sur la barrière de potentiel des particules d'énergie E venant de la gauche, a la forme

$$\Psi_k(x) = e^{ikx} + A(E)e^{-ikx} \qquad \left(k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} > 0\right). \tag{1}$$

Pour $x > 0$, à l'aide du changement de variable

$$y = \left[\frac{2mU_0}{a\hbar^2}\right]^{1/3}\left(x - a + \frac{Ea}{U_0}\right),$$

l'équation de Schrödinger se ramène à

$$\frac{d^2\Psi}{dy^2} + y\Psi = 0. \tag{2}$$

Comme on le sait, les solutions de l'équation (2) s'expriment au moyen des fonctions cylindriques Z_ν avec $\nu = 1/3$:

$$\Psi = C\sqrt{y}Z_{1/3}\left(\frac{2}{3}y^{3/2}\right).$$

Dans le problème considéré, la solution de l'équation (2) doit être choisie sous la forme

$$\Psi_k = C(E)\sqrt{y}H^{(1)}_{1/3}\left(\frac{2}{3}y^{3/2}\right). \tag{3}$$

où $H^{(1)}_{1/3}$ est la fonction de Hankel, car c'est justement cette solution qui a le comportement asymptotique nécessaire (onde évanescente) pour $x \to +\infty$ (donc $y \to +\infty$) :

$$\Psi_k \approx C\sqrt{\frac{3}{\pi\sqrt{y}}}\exp\left[i\left(\frac{2}{3}y^{3/2} - \frac{5\pi}{12}\right)\right].$$

Comme la densité du flux des particules dans l'état décrit par la fonction d'onde (3) pour $x \to +\infty$ vaut

$$j_{\text{trans}} = \frac{\hbar}{2mi}\left\{\Psi^*\frac{d}{dx}\Psi - \Psi\frac{d}{dx}\Psi^*\right\} \approx \frac{3}{\pi}|C(E)|^2\left(\frac{2\hbar U_0}{am^2}\right)^{1/3}. \tag{4}$$

et que la densité du flux des particules incidentes de la fonction d'onde (1) pour $x \to -\infty$ vaut $j_{\text{incid}} \equiv \hbar k/m$, on obtient le coefficient de transmission

$$D(E) = \frac{j_{\text{trans}}}{j_{\text{incid}}} = \frac{3}{\pi k}\left[\frac{2mU_0}{a\hbar^2}\right]^{1/3}|C(E)|^2. \tag{5}$$

La grandeur $C(E)$ est obtenue à partir de la condition de raccordement des fonctions d'onde (1) et (3) au point $x = 0$. La continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée pour $x = 0$ donne

$$1 + A = C\sqrt{y_0}H^{(1)}_{1/3}\left(\frac{2}{3}y_0^{3/2}\right), \qquad iak(1 - A) = C\xi y_0 H^{(1)}_{-2/3}\left(\frac{2}{3}y_0^{3/2}\right), \tag{6}$$

où sont introduites les notations

$$\xi = (2ma^2U_0/\hbar^2)^{1/3}, \qquad y_0 = y(x = 0) = \xi(E/U_0 - 1).$$

De (6), on déduit

$$C = 2ika\left[\xi y_0 H^{(1)}_{-2/3}\left(\frac{2}{3}y_0^{3/2}\right) + ika\sqrt{y_0}H^{(1)}_{1/3}\left(\frac{2}{3}y_0^{3/2}\right)\right]^{-1}. \tag{7}$$

En tenant compte de (5) et (7), on obtient l'expression finale de $D(E)$:

$$D(E) = \frac{12kaU_0}{\pi|E - U_0|\left|\xi\sqrt{y_0}H^{(1)}_{-2/3}\left(\frac{2}{3}y_0^{3/2}\right) + ikaH^{(1)}_{1/3}\left(\frac{2}{3}y_0^{3/2}\right)\right|^2}. \tag{8}$$

Dans le cas d'une barrière pour laquelle $\xi \gg 1$, et d'une énergie de particules satisfaisant aux conditions $E < U_0, \xi(1 - E/U_0) \gg 1$, la formule (8) peut être mise sous la forme[3]

$$D(E) \approx \frac{4\sqrt{E(U_0 - E)}}{U_0} \exp\left[-\frac{4}{3}\sqrt{\frac{2ma^2(U_0 - E)^3}{\hbar^2 U_0^2}}\right] \ll 1. \tag{9}$$

Pour $\xi \gg 1$ et $E > U_0, \xi|1 - E/U_0| \gg 1$, l'expression (8) devient

$$D(E) \approx \frac{4\sqrt{E(E - U_0)}}{(\sqrt{E} + \sqrt{E - U_0})^2}. \tag{10}$$

Pour $E \to 0$, de l'expression (9) on obtient

$$D(E) \sim k \sim \sqrt{E} \to 0. \tag{11}$$

Comme il est aisé de le voir dans (8), ce comportement de $D(E)$ pour $E \to 0$ a lieu quelle que soit la valeur du paramètre ξ.

2.54. Etudions une barrière de la forme la plus générale, avec un potentiel $U(x)$ de la forme d'un seuil de potentiel, c'est-à-dire $U(x) \to 0$ pour $x \to -\infty$ et $U(x) \to U_0$ pour $x \to +\infty$. Le résultat obtenu peut être généralisé au cas d'une énergie potentielle $U(x) \to -\infty$ pour $x \to -\infty$ et (ou) $x \to +\infty$). Pour fixer les idées, on suppose que les particules incidentes vont dans le sens positif de l'axe des x.

La fonction d'onde du problème considéré satisfait à l'équation de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi_k'' + U(x)\Psi_k = E\Psi_k. \tag{1}$$

et a les comportements asymptotiques pour $x \to \pm\infty$:

$$\Psi_k(x) \approx \begin{cases} e^{ikx} + A(k)e^{-ikx}, & x \to -\infty, \\ B(k)e^{ik_1 x}, & x \to +\infty, \end{cases} \tag{2}$$

où

$$k = \sqrt{2mE/\hbar^2} > 0, \qquad k_1 = \sqrt{2m(E - U_1)/\hbar^2} > 0.$$

Ecrivons l'équation complexe conjuguée de l'équation (1) :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi_k^{*\prime\prime} + U(x)\Psi_k^* = E\Psi_k^*. \tag{3}$$

4 Il faut être attentif lors les transformations de l'expression (8), car l'argument des fonctions de Hankel $\left(\frac{2}{3}y_0^{3/2} = \frac{2}{3}\left[\xi\left(\frac{E}{U_0} - 1\right)\right]^{3/2}\right)$ est alors égal à $3\pi/2$ (l'argument de la phase de la fonction de Hankel dans (3) pour $y(x) \to +\infty$ est nul par définition) ; quant aux relations sur les fonctions cylindriques (y compris leurs expressions asymptotiques) figurant dans la littérature, elles se rapportent habituellement au cas où l'argument est inférieur à π en module. Le procédé permettant de pallier à cet inconvénient est discuté en détail dans la résolution du problème 9.34 (Tome II).

En multipliant (1) à gauche par Ψ_k^* et (3) par Ψ_k et en faisant la soustraction terme à terme, on obtient

$$\Psi_k^* \Psi_k'' - \Psi_k \Psi_k^{*\prime\prime} \equiv \frac{d}{dx}(\Psi_k^* \Psi_k' - \Psi_k \Psi_k^{*\prime}) = 0,$$

c'est-à-dire

$$\Psi_k^*(x)\Psi_k'(x) - \Psi_k(x)\Psi_k^{*\prime}(x) = \text{const}. \tag{4}$$

En calculant les valeurs du premier membre de la relation (4) pour $x \to \pm\infty$ à l'aide de l'expression (2), on obtient

$$|A(k)|^2 + \frac{k_1}{k}|B(k)|^2 = 1, \tag{5}$$

ce qui démontre l'égalité recherchée vu que $R = |A|^2$ et $D = \frac{k_1}{k}|B|^2$.

Soulignons que la relation (5) est la conséquence directe de l'égalité (4) qui, à son tour, se déduit de la loi de conservation du nombre de particules (équation de continuité) en mécanique quantique : div $\mathbf{j} + \partial|\Psi|^2/\partial t = 0$ qui, appliquée aux états stationnaires ($\partial|\Psi|^2/\partial t = 0$), prend la forme div $\mathbf{j} = 0$. Cette dernière relation est équivalente à (4).

2.55. Etudions la barrière de potentiel de forme la plus générale décrite au début de la résolution du problème précédent. Notons par $\Psi_-(x)$ et $\Psi_+(x)$ les fonctions d'onde d'états stationnaires décrivant le processus de transmission des particules d'énergie E et arrivant sur la barrière de potentiel étudiée, respectivement depuis la droite et depuis la gauche. Ces fonctions d'ondes sont pour $x \to \pm\infty$ de la forme

$$\Psi_+(x) \approx \begin{cases} \mathrm{e}^{ikx} + A(k)\mathrm{e}^{-ikx}, & x \to -\infty, \\ B(k)\mathrm{e}^{ik_1 x}, & x \to +\infty, \end{cases}$$

$$\Psi_-(x) \approx \begin{cases} \overline{B}(k)\mathrm{e}^{-ikx}, & x \to -\infty, \\ \mathrm{e}^{-ik_1 x} + \overline{A}(k)\mathrm{e}^{ik_1 x}, & x \to +\infty, \end{cases} \tag{1}$$

avec

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} > 0, \qquad k_1 = \sqrt{\frac{2m(E - U_0)}{\hbar^2}} > 0$$

et satisfont à la même équation de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi_\pm'' + U(x)\Psi_\pm = E\Psi_\pm.$$

En multipliant l'équation pour $\Psi_+(x)$ par $\Psi_-(x)$ à gauche et l'équation pour $\Psi_-(x)$ par $\Psi_+(x)$, et en soustrayant terme à terme, on obtient

$$\Psi_-(x)\Psi_+'(x) - \Psi_+(x)\Psi_-'(x) = \text{const}. \tag{2}$$

En calculant le premier membre de (2) pour $x \to \pm\infty$ à l'aide des fonctions d'onde (1), on obtient $k\overline{B} = k_1 B$, on a donc

$$D_+(E) = \frac{k_1}{k}|B|^2 = \frac{k}{k_1}|\overline{B}|^2 = D_-(E), \tag{3}$$

ce qui démontre l'égalité des coefficients de transmission des particules d'énergie E à travers la barrière de potentiel indépendamment de leurs sens.

2.56. La fonction d'onde décrivant la transmission des particules à travers la barrière a, pour $x \to \pm\infty$, la forme

$$\Psi(x) \approx \begin{cases} e^{ikx} + A(k)e^{-ikx}, & x \to -\infty, \quad k = \left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} > 0\right), \\ B(k)e^{ik_1x}, & x \to +\infty, \quad k_1 = \left(\sqrt{\frac{2m(E-U_0)}{\hbar^2}} > 0\right). \end{cases}$$

La probabilité de transmission $D(E)$ vaut

$$D(E) = \frac{k_1}{k}|B(k_1)|^2. \tag{1}$$

Pour $E \to U_0$, $k_1 \to 0$, $B(k_1) \to B(0) \neq 0$ et de (1) on obtient

$$D(E) \propto \sqrt{E - U_0} \to 0. \tag{2}$$

2.57. La problème peut être résolu comme dans 2.36, où l'on a obtenu la fonction de Green $G_E(x, x')$ pour $E < 0$:

$$G_E(x, x') = \frac{m}{\kappa\hbar^2}\exp(-\kappa|x - x'|), \qquad \kappa = \sqrt{-2mE/\hbar^2} > 0. \tag{1}$$

Il est toutefois facile de s'apercevoir que la forme de la fonction $G_E^{(\pm)}(x, x')$, pour $E > 0$, peut être établie directement à partir de l'expression (1) avec $E > 0$, si l'on représente κ sous la forme

$$\kappa = \sqrt{-2mE/\hbar^2} = \mp ik, \qquad k = \sqrt{2mE/\hbar^2} > 0\ ;$$

on obtient

$$G_E^{(\pm)}(x, x') = \pm\frac{im}{k\hbar^2}\exp(\pm ik|x - x'|). \tag{2}$$

En utilisant la fonction de Green (2), on peut écrire, pour $E > 0$, l'équation de Schrödinger sous la forme d'une équation intégrale ($E = p^2/2m$) :

$$\Psi(x) = Ae^{ipx/\hbar} + Be^{-ipx/\hbar} - \int_{-\infty}^{\infty} G_E^{(\pm)}(x, x')U(x')\Psi(x')dx'.$$

On constate aisément que si l'on pose $B = 0$ et $A = 1$, la solution $\Psi_p(x)$ de cette équation intégrale

$$\Psi_p(x) = e^{ipx/\hbar} - \int_{-\infty}^{\infty} G_E^{(\pm)}(x, x')U(x')\Psi(x')dx' \tag{3}$$

décrit la transmission, à travers la barrière de potentiel, des particules d'impulsion p. Le premier terme dans le seconde membre de (3) décrit les particules incidentes et le terme intégral de l'équation (3), pour $x \to \pm\infty$, décrit la réflexion de la particule et la variation de la fonction d'onde des particules libres $\exp(ipx/\hbar)$ sous l'action du potentiel. Ceci se montre en remplaçant dans (3) la fonction de Green $G_E^{(\pm)}$ par son expression asymptotique pour $x \to \pm\infty$.

Notons que les fonctions de Green (2) d'une particule libre $G_E^{(\pm)}$ pour $E > 0$ et celle $G_E^{(\pm)}$ pour $E < 0$, obtenues dans le problème 2.36, peuvent être considérées comme les valeurs limites différentes d'une fonction analytique de la variable complexe E :

$$\tilde{G}_E(x - x') = i\sqrt{\frac{m}{2\hbar^2 E}} \exp\left[i\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}|x - x'|\right].$$

Le point $E = 0$ de cette fonction est un point de branchement. En effectuant une coupure du plan E le long de demi-axe réel du point $E = 0$ vers la droite (fig. 21), procédons à l'étude de la fonction de Green $\tilde{G}_E$ sur le feuillet physique de sa surface de Riemann (voir à cette occasion la solution du problème 2.47). On voit aisément que sur le "bord" supérieur de la coupure (c'est-à-dire aux points $E + i0$, $E > 0$) la fonction de Green $\tilde{G}_E$ coïncide avec $G_E^{(+)}$ et sur le "bord" inférieur de la coupure avec $G_E^{(-)}$, tandis que sur le demi-axe des valeurs négatives réelles de E la fonction $\tilde{G}_E$ coïncide avec la fonction de Green G_E du problème 2.36. Notons également que sur le feuillet physique $\tilde{G}_E \to 0$ pour $E \to \infty$.

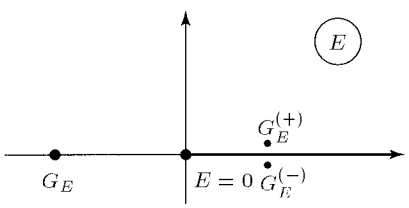

Figure 21

2.58. L'équation (3) du problème précédent à laqualle satisfait la fonction d'onde $\Psi_p(x)$ qui décrit la transmission (et la réflexion) des particules d'impulsion p, prend la forme suivante pour le potentiel $U(x) = \alpha\delta(x)$

$$\Psi_p(x) = e^{ipx/\hbar} - \frac{im\alpha}{k\hbar^2} e^{ik|x|}\Psi_p(0), \qquad (\hbar k = |p| = \sqrt{2mE}). \tag{1}$$

De (1) on tire $\Psi_p(0)$ puis la solution de cette équation :

$$\Psi_p(0) = (1 + im\alpha/k\hbar^2)^{-1}. \tag{2}$$

En tenant compte (1) et (2), on obtient les coefficients de transmission et de réflexion (comparer au résultat du problème 2.58)

$$D(E) = \frac{E}{E + m\alpha^2/2\hbar^2}, \qquad R(E) = \frac{m\alpha^2/2\hbar^2}{E + m\alpha^2/2\hbar^2}.$$

2.59. Compte tenu de la forme explicite de la fonction de Green $G_E^{(+)}(x, x')$ dans l'équation (3) du problème 2.57 et en passant dans cette équation à la limite $x \to \pm\infty$, on aboutit aisément aux expressions suivantes des coefficients de transmission et de réflexion :

$$D(E) = \left|1 - \frac{im}{|p|\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-ipx/\hbar} U(x)\Psi_p(x)dx\right|^2, \tag{1}$$

$$R(E) = \frac{m^2}{p^2\hbar^2}\left|\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{ipx/\hbar} U(x)\Psi_p(x)dx\right|^2, \tag{2}$$

où $\Psi_p(x)$ est la fonction d'onde décrivant la réflexion des particules d'impulsion p, normée sur la densité unitaire des particules du flux incident.

CHAPITRE 3

MOMENT CINÉTIQUE

3.1. L'opérateur recherché doit transformer la fonction d'onde $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_N)$ en la même fonction Ψ avec des coordonnées ayant subi une rotation, c'est-à-dire

$$\Psi'(\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_N) = \widehat{R}(\boldsymbol{\varphi}_0)\Psi(\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_N) \equiv \Psi(\mathbf{r}'_1, \ldots, \mathbf{r}'_N). \tag{1}$$

où $\mathbf{r}' = \widehat{R}\mathbf{r}$ est l'image de $\mathbf{r}$ par la rotation. L'égalité (1) signifie que la valeur de la fonction d'onde du système de N particules est indépendante du système de coordonnées (initial $\mathbf{r}$ ou ayant subi la rotation $\mathbf{r}'$) dans lequel est décrite la position des points de l'espace, c'est-à-dire que la fonction d'onde Ψ est un scalaire.

Pour trouver la forme explicite de l'opérateur $\widehat{R}(\boldsymbol{\varphi}_0)$, introduisons momentanément le système de coordonnées cylindriques dont l'axe polaire est le long de l'axe de rotation. En utilisant ces variables la relation (1) prend la forme

$$\begin{aligned}\widehat{R}\Psi(\rho_1, z_1, \varphi_1, \ldots, \rho_N, z_N, \varphi_N) &= \Psi(\rho_1, z_1, \varphi_1 + \varphi_0, \ldots, \rho_N, z_N, \varphi_N + \varphi_0) = \\ &= \exp\left(\varphi_0 \sum_{a=1}^{N} \partial/\partial\varphi_a\right) \Psi(\rho_1, z_1, \varphi_1, \ldots, \rho_N, z_N, \varphi_N)\end{aligned} \tag{2}$$

(comparer à 1.12 où on a étidié l'opérateur translation $\widehat{T}_a$). Comme l'opérateur $\widehat{L}_z = -i\sum \partial/\partial\varphi_a$ est l'opérateur de la composante du moment cinétique d'un système de N particules selon l'axe z, l'opérateur rotation est de la forme

$$\widehat{R}(\boldsymbol{\varphi}_0) = \exp(i\varphi_0 \widehat{L}_z) = \exp(i\boldsymbol{\varphi}_0 \cdot \widehat{\mathbf{L}}) \ ; \tag{3}$$

la seconde des représentations (3) de l'opérateur $\widehat{R}$ est la plus générale, car elle ne dépend pas du choix concret du système de coordonnées (toutefois il est important que le moment soit déterminé par rapport à un point situé sur l'axe de rotation).

3.2. Les opérateurs impulsion $\widehat{\mathbf{P}}$ et moment $\widehat{\mathbf{L}}$ du système sont liés aux opérateurs transformant la fonction d'onde lors des translations et des rotations du système de coordonnées infinitésimales (voir problème 1.12 et 3.1) par des relations très simples :

$$\widehat{T}(\delta\mathbf{a}) \approx 1 + \frac{i}{\hbar}\delta\mathbf{a} \cdot \widehat{\mathbf{P}}, \qquad \widehat{R}(\delta\boldsymbol{\varphi}_0) \approx 1 + \frac{i}{\hbar}\delta\boldsymbol{\varphi}_0 \cdot \widehat{\mathbf{L}}.$$

Toute translation du système de coordonnées permute avec toute autre translation, et donc, les opérateurs composantes de l'impulsion commutent. Deux rotations autour de deux axes non parallèles ne permutent pas, d'où la non-commutativité des opérateurs des différentes composantes du moment.

3.3. En vertu de l'équivalence des axes x, y, z, il vient

$$\mathbf{L}^2 \equiv \overline{\mathbf{L}^2} = \overline{L_x^2} + \overline{L_y^2} + \overline{L_z^2} = 3\overline{L_z^2}. \tag{1}$$

En raison de l'équiprobabilté des différentes valeurs de la projection du moment, on obtient

$$\overline{L_z^2} = \frac{1}{2l+1} \sum_{m=-l}^{l} m^2 = \frac{l(l+1)}{3}. \tag{2}$$

La valeur de la somme dans l'expression (2) peut être calculée de la façon suivante :

$$\sum_{m=0}^{l} m^2 = \left[\frac{d^2}{d\alpha^2} \sum_{m=0}^{l} \mathrm{e}^{\alpha m}\right]_{\alpha=0} = \left[\frac{d^2}{d\alpha^2} \frac{1-\mathrm{e}^{\alpha(l+1)}}{1-\mathrm{e}^{\alpha}}\right]_{\alpha=0} = \frac{l(l+1)(2l+1)}{6}.$$

En tenant compte de (1) et (2), on obtient $\mathbf{L}^2 = l(l+1)$.

3.4. Les commutateurs se calculent si l'on utilise les relations

$$\begin{aligned} &[\widehat{A}, \widehat{B}\widehat{C}] = [\widehat{A}, \widehat{B}]\widehat{C} + \widehat{B}[\widehat{A}, \widehat{C}], \\ &[\widehat{L}_i, \widehat{x}_k] = i\varepsilon_{ikl}\widehat{x}_l, \\ &[\widehat{L}_i, \widehat{p}_k] = i\varepsilon_{ikl}\widehat{p}_l. \end{aligned} \tag{1}$$

C'est ainsi, par exemple, que le commutateur $[\widehat{L}_i, \widehat{\mathbf{r}}^2]$ vaut[1]

$$[\widehat{L}_i, \widehat{x}_k\widehat{x}_k] = [\widehat{L}_i, \widehat{x}_k]\widehat{x}_k + \widehat{x}_k[\widehat{L}_i, \widehat{x}_k] = 0 \qquad (\varepsilon_{ikl}\widehat{x}_k\widehat{x}_l = 0).$$

Les autres commutateurs s'obtiennent de façon analogue :

a) Du fait de la propriété

$$[\widehat{L}_i, \widehat{f}] = 0, \tag{2}$$

pour tout opérateur d'une grandeur scalaire $\widehat{f}$, tous les commutateurs sont nuls.

b) Les commutateurs ont la forme

$$[\widehat{L}_i, \widehat{f}_k] = i\varepsilon_{ikl}\widehat{f}_l, \tag{3}$$

où $\widehat{f}_k$ est l'opérateur de la $k^{\text{ème}}$ projection de l'opérateur vectoriel correspondant (ainsi, pour $\widehat{\mathbf{f}} = (\widehat{\mathbf{p}} \cdot \widehat{\mathbf{r}})\widehat{\mathbf{p}}$ on a $\widehat{f}_k = (\widehat{\mathbf{p}} \cdot \widehat{\mathbf{r}})\widehat{p}_k$, etc.).

1 Dans ce livre, on utilise la convention d'Einstein : la répétion d'un indice dans une expression sous-entend une sommation, le signe de sommation étant omis.

c) Les commutateurs mentionnés ont la forme

$$[\widehat{L}_i, \widehat{f}_{kl}] = i(\varepsilon_{ikp}\delta_{nl} + \varepsilon_{iln}\delta_{kp})\widehat{f}_{pn}, \tag{4}$$

où $\widehat{f}_{kl}$ sont les opérateurs des composantes du tenseur correspondant (ainsi pour le premier commutateur, on a $\widehat{f}_{kl} = \widehat{x}_k\widehat{x}_l$, etc.).

La structure générale (2)–(4) des commutateurs des opérateurs des composantes du moment $\widehat{L}_i$ avec les opérateurs scalaires, vectoriels et tensoriels vient des propriétés de transformation de l'opérateur $\widehat{\mathbf{L}}$ dans les rotations du système de coordonnées et de celles des tenseurs : tous les tenseurs de même rang se transforment de la même façon (indépendamment de la forme concrète du tenseur).

3.5. Les opérateurs $\widehat{\mathbf{L}}$ et $\widehat{\mathbf{L}}'$ sont liés de la façon suivante :

$$\widehat{\mathbf{L}}' = \widehat{\mathbf{L}} - \frac{1}{\hbar}\mathbf{a} \wedge \widehat{\mathbf{p}}, \qquad \widehat{L}'_i = \widehat{L}_i - \frac{1}{\hbar}\varepsilon_{imn}a_m\widehat{p}_n.$$

Comme $[\widehat{L}_i, \widehat{p}_k] = i\varepsilon_{ikl}\widehat{p}_l$, en utilisant la relation $\varepsilon_{imn}\varepsilon_{kln} = \delta_{ik}\delta_{ml} - \delta_{il}\delta_{mk}$, on obtient

$$[\widehat{L}_i, \widehat{L}'_k] = i\varepsilon_{ikl}\widehat{L}_l + \frac{1}{\hbar}\delta_{ik}(\mathbf{a} \cdot \widehat{\mathbf{p}}) - \frac{i}{\hbar}a_i\widehat{p}_k.$$

3.6. Grâce aux relations de commutativité des matrices du moment

$$\widehat{L}_i\widehat{L}_k - \widehat{L}_k\widehat{L}_i = i\varepsilon_{ikl}\widehat{L}_l$$

et compte tenu de la formule $\mathrm{Tr}(\widehat{A}\widehat{B}) = \mathrm{Tr}(\widehat{B}\widehat{A})$, on obtient $\mathrm{Tr}\widehat{L}_l = 0$.

3.7. L'opérateur moment $\widehat{\mathbf{L}}$ d'un système de deux particules a la forme

$$\widehat{\mathbf{L}} = \widehat{\mathbf{l}}_1 + \widehat{\mathbf{l}}_2 = -i\left\{\mathbf{r}_1 \wedge \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1} + \mathbf{r}_2 \wedge \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_2}\right\} \tag{1}$$

Passons des variables $\mathbf{r}_1$, $\mathbf{r}_2$ aux variables $\mathbf{r}$, $\mathbf{R}$ grâce aux formules

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1, \qquad \mathbf{R} = \frac{m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2}{m_1 + m_2},$$
$$\mathbf{r}_1 = \mathbf{R} - \frac{m_2}{m_1 + m_2}\mathbf{r}, \qquad \mathbf{r}_2 = \mathbf{R} + \frac{m_1}{m_1 + m_2}\mathbf{r}.$$

Comme

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1} = \frac{m_1}{m_1 + m_2}\frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}, \qquad \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_2} = \frac{m_2}{m_1 + m_2}\frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}},$$

l'expression (1) peut s'écrire sous la forme

$$\widehat{\mathbf{L}} = -i\mathbf{r} \wedge \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} - i\mathbf{R} \wedge \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} \tag{2}$$

où le premier terme est l'opérateur moment du système de deux particules par rapport au centre d'inertie, tandis que le second représente l'opérateur moment lié au mouvement du centre de masse.

3.8. En mécanique classique, le moment de deux particules par rapport au centre de masse vaut $\mathbf{M} = \mathbf{r} \wedge \mathbf{p}$, où $\mathbf{r}$ est le rayon vecteur entre les deux particules, $\mathbf{p}$ l'impulsion relative $\mathbf{p} = \mu \mathbf{v}_{\text{rel}} = \mu \dot{\mathbf{r}}$ (μ étant la masse réduite) ; on a donc $\mathbf{r} \cdot \mathbf{M} = 0$.

En mécanique quantique, pour démontrer l'assertion du problème, il faut montrer l'hermiticité de l'opérateur $\widehat{\mathbf{r}} \cdot \widehat{\mathbf{L}}$ et son égalité à zéro. Comme les composantes de même indice x_i et $\widehat{L}_i$ commutent, on a $(\widehat{\mathbf{r}} \cdot \widehat{\mathbf{L}})^\dagger = \widehat{\mathbf{L}}^\dagger \cdot \widehat{\mathbf{r}}^\dagger = \widehat{\mathbf{L}} \cdot \widehat{\mathbf{r}} = \widehat{\mathbf{r}} \cdot \widehat{\mathbf{L}}$ et donc :

$$\widehat{\mathbf{r}} \cdot \widehat{\mathbf{L}} = -i\widehat{\mathbf{r}} \cdot \left\{ \widehat{\mathbf{r}} \wedge \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \right\} = -i \left\{ \widehat{\mathbf{r}} \wedge \widehat{\mathbf{r}} \right\} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} = 0.$$

3.9. Les fonctions recherchées $\Psi_{r_0 lm}(r, \theta, \varphi)$ sont la solution du système d'équations

$$\widehat{r}\Psi_{r_0 lm} \equiv r\Psi_{r_0 lm}(r, \theta, \varphi) = r_0 \Psi_{r_0 lm}(r, \theta, \varphi),$$
$$\widehat{\mathbf{l}}^2 \Psi_{r_0 lm} = l(l+1)\Psi_{r_0 lm}, \qquad \widehat{l}_z \Psi_{r_0 lm} = m\Psi_{r_0 lm}$$

et ont manifestement la forme

$$\Psi_{r_0 lm} = C(r_0)\delta(r - r_0) Y_{lm}(\theta, \varphi).$$

Le coefficient C, se définit à partir de la condition de normalisation

$$\int \Psi_{r_0' l' m'}(r, \theta, \varphi) \Psi_{r_0 lm}(r, \theta, \varphi) dV = \delta(r_0 - r_0')\delta_{ll'}\delta_{mm'}$$

et vaut $C(r_0) = 1/r_0$.

3.10.

a) L'opérateur moment en représentation $\mathbf{r}$ et $\mathbf{p}$ est de la forme (en représentation $\mathbf{p}$, $\widehat{\mathbf{r}} = i\hbar\partial/\partial\mathbf{p}$)

$$\widehat{\mathbf{l}} = -i\mathbf{r} \wedge \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}, \qquad \widehat{\mathbf{l}} = i\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \wedge \mathbf{p} = -i\mathbf{p} \wedge \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}}.$$

En comparant ces expressions et tenant compte de la forme connue de la fonction propre des opérateurs $\widehat{\mathbf{l}}^2$ et $\widehat{l}_z$ en représentation $\mathbf{r}$, on en déduit qu'en représentation $\mathbf{p}$, ces fonctions propres sont de la forme

$$\Psi_{lm} = Y_{lm}(\widetilde{\theta}, \widetilde{\varphi})$$

où $\widetilde{\theta}, \widetilde{\varphi}$ sont les angles polaire et azimutal du vecteur $\mathbf{p}$ en coordonnées sphériques (en représentation $\mathbf{p}$, aussi bien qu'en représentation $\mathbf{r}$, l'opérateur moment agit dans l'espace des variables angulaires).

b) En recherchant les fonctions propres $\widehat{\mathbf{l}}^2$ et $\widehat{l}_z$ par ce procédé, il faut tenir compte de la relation

$$\int Y_{lm}(\mathbf{n}) \exp(-ikr\mathbf{n}\cdot\mathbf{n}_0) d\Omega_{\mathbf{n}} = (-i)^l 4\pi \sqrt{\frac{\pi}{2kr}} J_{l+1/2}(kr) Y_{lm}(\mathbf{n}_0).$$

où $\mathbf{n}$, $\mathbf{n}_0 = \mathbf{p}/|\mathbf{p}|$ sont des vecteurs unitaires, $Y_{lm}(\mathbf{n}) \equiv Y_{lm}(\theta, \varphi)$ (θ, φ étant les angles polaire et azimutal du vecteur $\mathbf{n}$) et $J_{l+1/2}$ la fonction de Bessel.

3.11. Compte tenu des relations de commutation des composantes du moment, on obtient sans peine

$$\widehat{l}_z \widehat{l}_\pm = \widehat{l}_\pm (\widehat{l}_z \pm 1). \tag{1}$$

En appliquant l'égalité (1) à la fonction propre Ψ_m, on obtient

$$\widehat{l}_z (\widehat{l}_\pm \Psi_m) = (m \pm 1)(\widehat{l}_\pm \Psi_m),$$

autrement dit, les fonctions $\widehat{l}_\pm \Psi_m$ sont également des fonctions propres de l'opérateur $\widehat{l}_z$ (dans certains cas, l'une de ces fonctions (ou les deux pour $l = 0$) peut être identiquement nulle).

3.12. Compte tenu du résultat obtenu dans le problème précédent, ainsi que de l'orthogonalité des fonctions propres correspondant aux différentes valeurs propres d'un opérateur hermitien, on obtient

$$\langle m|\widehat{l}_+|m\rangle \propto \langle m|m+1\rangle = 0, \qquad \langle m|\widehat{l}_+^2|m\rangle = 0. \tag{1}$$

Comme $\widehat{l}_+ = \widehat{l}_x + i\widehat{l}_y$, de la première des relations (1), on déduit :

$$\bar{l}_x + i\bar{l}_y = 0. \tag{2}$$

Les valeurs moyennes $\bar{l}_x$ et $\bar{l}_y$ sont des nombres réels, aussi l'égalité (2) signifie que $\bar{l}_x = \bar{l}_y = 0$.

La seconde des relations (1) est équivalente à l'égalité

$$\overline{l_x^2 - l_y^2} + i\,(\overline{\widehat{l}_x\widehat{l}_y + \widehat{l}_y\widehat{l}_x}) = 0,$$

ou (car $\overline{\widehat{l}_x\widehat{l}_y + \widehat{l}_y\widehat{l}_x}$ est un nombre réel)

$$\overline{l_x^2} = \overline{l_y^2}, \qquad \overline{\widehat{l}_x\widehat{l}_y + \widehat{l}_y\widehat{l}_x} = 0. \tag{3}$$

A partir de la relation de commutativité $[\widehat{l}_x, \widehat{l}_y] = i\widehat{l}_z$, on obtient $\overline{\widehat{l}_x\widehat{l}_y - \widehat{l}_y\widehat{l}_x} = im$, ce qui donne, compte tenu de (3), $\overline{\widehat{l}_x\widehat{l}_y} = -\overline{\widehat{l}_y\widehat{l}_x} = im/2$.

3.13. Comme $\overline{\widehat{l}_x^2 + \widehat{l}_y^2} \equiv \overline{\widehat{\mathbf{l}}^2 - \widehat{l}_z^2} = l(l+1) - m^2$, et compte tenu du résultat du problème précédent, on obtient

$$\overline{\widehat{l}_x^2} = \overline{\widehat{l}_y^2} = [l(l+1) - m^2]/2.$$

3.14. L'opérateur de la composante du moment sur l'axe $\tilde{z}$ a la forme

$$\widehat{l}_{\tilde{z}} = \cos\alpha \cdot \widehat{l}_z + \sin\alpha\cos\beta \cdot \widehat{l}_x + \sin\alpha\sin\beta \cdot \widehat{l}_y, \tag{1}$$

où α, β sont les angles polaire et azimutal de la direction de l'axe $\tilde{z}$.

La valeur moyenne de l'opérateur $\widehat{l}_{\tilde{z}}$ dans l'état Ψ_{lm} est donc

$$\overline{l}_{\tilde{z}} = m\cos\alpha$$

(selon le problème 3.12, $\overline{l}_x = \overline{l}_y = 0$).

Compte tenu du résultat des deux problèmes précédents, on obtient sans peine

$$\overline{l_{\tilde{z}}^2} = \frac{1}{2}[l(l+1) - m^2]\sin^2\alpha + m^2\cos^2\alpha,$$

$$\overline{(\Delta l_{\tilde{z}})^2} = \overline{l_{\tilde{z}}^2} - \overline{l}_{\tilde{z}}^2 = \frac{1}{2}[l(l+1) - m^2]\sin^2\alpha.$$

3.15. Le développement de la fonction d'onde en série de fonctions propres normées $\Psi_m(\varphi) = \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}$ de l'opérateur $\widehat{l}_z$ a la forme ($\cos\varphi = (e^{i\varphi} + e^{-i\varphi})/2$)

$$\Psi(\varphi) = \frac{A}{2^n}(e^{i\varphi} + e^{-i\varphi})^n = \frac{A}{2^n}\sum_{k=0}^{n} C_n^k e^{i(n-2k)\varphi} = \frac{\sqrt{2\pi}A}{2^n}\sum_k C_n^k \Psi_{n-2k}(\varphi), \tag{1}$$

où $C_n^k = \frac{n!}{k!(n-k)!}$. En déterminant $|A|^2$ à partir de la condition de normalisation de la fonction d'onde $\Psi(\varphi)$

$$\begin{aligned} |A|^{-2} &= \int_0^{2\pi} \cos^{2n}\varphi d\varphi = \frac{1}{2^{2n}}\int_0^{2\pi}(e^{i\varphi} + e^{-i\varphi})^{2n} d\varphi = \\ &= \frac{1}{2^{2n}}\sum_{k=0}^{2n} C_{2n}^k \int_0^{2\pi} e^{i(2n-2k)\varphi} d\varphi = \frac{2\pi}{2^{2n}} C_{2n}^n = \frac{\pi(2n-1)!!}{2^{n-1}n!} \end{aligned} \tag{2}$$

(dans (2) on a utilisé $\int_0^{2\pi} e^{im\varphi} d\varphi = 2\pi\delta_{0,m}$), on obtient à partir de (1) les probabilités des projections du moment qui sont différentes de zéro :

$$w(m) = \frac{2\pi|A|^2}{2^{2n}}\left[C_n^{\frac{n-m}{2}}\right]^2 = \frac{n!}{2^n(2n-1)!!}\left[C_n^{\frac{n-m}{2}}\right]^2,$$

pour $m = n, n-2, \ldots, -n$.

3.16. Dans le développement de la fonction d'onde normée en série des fonctions propres Y_{lm} des opérateurs $\widehat{\mathbf{l}}^2$ et $\widehat{l}_z$, seuls les termes $m = 2$ sont non nul, donc

$$\Psi \equiv \frac{1}{\sqrt{4\pi}}e^{2i\varphi} = \sum_{l,m} C_{lm}Y_{lm}(\theta,\varphi) = \sum_{l=2}^{\infty} C_l Y_{l,2}(\theta,\varphi). \tag{1}$$

Compte tenu de la forme explicite des fonctions sphériques ($l \geq 2$)

$$Y_{l,2} = i^l \sqrt{\frac{(2l+1)}{2}\frac{(l-2)!}{(l+2)!}}(1-z^2)\frac{d^2}{dz^2}P_l(z)\frac{e^{2i\varphi}}{\sqrt{2\pi}}, \qquad z = \cos\theta,$$

on obtient l'expression des coefficients C_l du développement (1) :

$$C_l = \int \Psi Y^*_{l,2} d\Omega = (-i)^l \sqrt{\frac{(2l+1)}{4}\frac{(l-2)!}{(l+2)!}} \int_{-1}^{1} (1-z^2)P_l''(z)dz. \tag{2}$$

L'intégrale, dans (2), se calcule facilement si l'on tient compte des relations

$$(1-z^2)P_l'' = 2zP_l' - l(l+1)P_l, \qquad P_l(1) = (-1)^l P_l(-1) = 1, \qquad \int_{-1}^{1} P_l(z)dz = \delta_{l0},$$

de sorte que la probabilité des différentes valeurs du moment est égale à

$$w(l) = |C_l|^2 = \frac{(2l+1)(l-2)!}{(l+2)!}[1+(-1)^l]^2, \qquad l \geq 2. \tag{3}$$

3.17. En utilisant la relation entre les fonctions sphériques $Y^*_{lm} = (-1)^{l-m}Y_{l,-m}$ et l'opérateur

$$\widehat{l}_+ = e^{i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right),$$

on obtient

$$\widehat{l}_+ \sum_m |Y_{lm}|^2 = \sum_m (-1)^{l-m}\{Y_{l,-m}\widehat{l}_+ Y_{lm} + Y_{lm}\widehat{l}_+ Y_{l,-m}\}. \tag{1}$$

Du fait que

$$\widehat{l}_+ Y_{lm}(\theta,\varphi) = \sqrt{(l+m+1)(l-m)}Y_{l,m+1},$$

en changeant dans la seconde somme de (1) l'indice de sommation m par $m' = m-1$, on trouve que l'expression (1) vaut zéro. La somme figurant dans l'énoncé ne dépend manifestement pas de φ. Compte tenu de la forme explicite de $\widehat{l}_+$ et de la nullité de l'expression (1), on voit que cette somme ne dépend pas non plus de θ, c'est donc une grandeur constante. La valeur de cette constante s'obtient en posant dans la somme $\theta = 0$. Vu que $|Y_{lm}(\theta=0,\varphi)|^2 = (2l+1)\delta_{m0}/4\pi$, l'égalité du problème est démontrée.

Le problème peut également être résolu en utilisant le théorème d'addition des harmoniques sphériques

$$P_l(\cos\alpha) = \frac{4\pi}{2l+1}\sum_{m=-l}^{l} Y_{lm}(\theta,\varphi)Y^*_{lm}(\theta',\varphi'). \tag{2}$$

où $\cos\alpha = \cos\theta\cos\theta' + \sin\theta\sin\theta'\cos(\varphi-\varphi')$, en posant dans (2) $\theta = \theta', \varphi = \varphi'$; dans ce cas $\cos\alpha = 1, P_l(1) = 1$.

3.18. Vu que pour la valeur du moment L sa projection sur l'axe z prend un nombre fini $(2L+1)$ de valeurs $L, L-1, \ldots, -L$, l'opérateur cherché $\widehat{P}(M)$ a la forme (voir problème 1.40)

$$\widehat{P}(M) = \prod_{\substack{m=-L \\ m \neq M}}^{L} \frac{(\widehat{L}_z - m)}{(M-m)}.$$

3.19. Dans la formule décrivant, selon 3.1, la transformation de la fonction d'onde en représentation $\mathbf{r}$:

$$\Psi'(r,\theta,\varphi) = \exp(i\boldsymbol{\varphi}_0 \cdot \widehat{\mathbf{L}})\Psi(r,\theta,\varphi), \tag{1}$$

écrivons (compte tenu de la valeur déterminée du moment l) les fonctions d'onde sous la forme

$$\Psi' = \sum_m C'_m(r) Y_{lm}(\theta,\varphi), \qquad \Psi = \sum_m C_m(r) Y_{lm}(\theta,\varphi),$$

où C_m, C'_m sont les fonctions d'onde radiales des états initial et transformé en représentation l_z.

En multipliant (1) à gauche par $Y^*_{lm}(\theta,\varphi)$ et en intégrant par rapport aux angles, on obtient

$$C'_m(r) \equiv \exp(i\boldsymbol{\varphi}_0 \cdot \widehat{\mathbf{L}})C_m(r) = \sum_{m'=-l}^{l} [\exp(i\boldsymbol{\varphi}_0 \cdot \widehat{\mathbf{L}})]_{mm'} C_{m'}(r) \tag{2}$$

où $(\widehat{L}_i)_{mn}$ est la matrice de la composante i du moment. Les relations (2) déterminent la loi de transformation cherchée de la fonction d'onde (pour l'interprétation de la matrice $(\exp \widehat{A})_{mn}$ voir 1.12 et 1.52).

3.20. A partir de la relation de commutation $\widehat{L}_z \widehat{f} - \widehat{f}\widehat{L}_z = 0$, on a

$$\widehat{L}_z(\widehat{f}\Psi_M) = M(\widehat{f}\Psi_M) \ ;$$

autrement dit, la fonction $\widehat{f}\Psi_M$, comme la fonction Ψ_M, est une fonction propre de $\widehat{L}_z$ correspondant à la même valeur propre M et l'égalité $\langle M'|\widehat{f}|M\rangle = 0$ pour $M' \neq M$ est évidente.

En utilisant la propriété de commutation $[\widehat{L}_+, \widehat{f}] = 0$ $(\widehat{L}_+ = \widehat{L}_x + i\widehat{L}_y)$, on obtient

$$\langle n, L, M+1|\widehat{L}_+\widehat{f}|n, L, M\rangle = \langle n, L, M+1|\widehat{f}\widehat{L}_+|n, L, M\rangle. \tag{1}$$

Comme $\widehat{L}_+\Psi_{LM} = \sqrt{(L-M)(L+M+1)}\Psi_{L,M+1}$,

$$\langle n, L, M+1|\widehat{L}_+ \equiv [\widehat{L}_-|n, L, M+1\rangle]^* = \sqrt{(L-M)(L+M+1)}\langle n, L, M|,$$

l'égalité (1) est équivalente à la condition $f_{MM} = f_{M+1,M+1}$, ce qui démontre que les éléments diagonaux f_{MM} sont indépendants de M.

3.21. En représentant la fonction d'onde arbitraire sous la forme

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{l,m} C_{lm}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi),$$

et compte tenu de la propriété des fonctions sphériques $\widehat{R}Y_{lm}(\theta,\varphi) = (-1)^l Y_{lm}(\theta,\varphi)$, ainsi que du lien entre la fonction d'onde $\Psi(\mathbf{r})$ en représentation $\mathbf{r}$ (dans ce cas, il serait plus exact de parler de la représentation en variables angulaires, vu que la dépendance radiale de la fonction d'onde ne présente pas de rapport direct avec la description de l'état de la particule) et C_{lm} en représentation ll_z, on obtient sans peine la transformation cherchée :

$$C'_{lm}(r) = \widehat{R}C_{lm}(r) = (-1)^l C_{lm}(r).$$

3.22. En représentant la fonction sphérique $Y_{10}(\theta,\varphi)$ sous la forme

$$Y_{10} = i\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta = i\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{z}{r} = i\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}{r}, \qquad \mathbf{k} = (0,0,1),$$

et compte tenu de l'équivalence de toutes les directions de l'espace, on obtient

$$\Psi_{\tilde{m}=0} = i\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{\mathbf{n}_0\cdot\mathbf{r}}{r} = i\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\{\cos\theta\cos\alpha + \sin\theta\sin\alpha\cos(\varphi-\beta)\}$$

(le vecteur $\mathbf{n}_0$ est dirigé suivant l'axe $\tilde{z}$).

3.23. En représentant la fonction sphérique $Y_{1,\pm1}$ sous la forme

$$Y_{1,\pm1} = \mp i\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{\pm i\varphi} = \mp i\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\frac{x\pm iy}{r},$$

et compte tenu de l'équivalence des différentes orientations du système de coordonnées, en utilisant la permutation cyclique des variables x, y, z on obtient

$$\Psi_{l_x=\pm1} = \mp i\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\frac{y\pm iz}{r} = \mp i\sqrt{\frac{3}{8\pi}}(\sin\theta\sin\varphi \pm i\cos\theta).$$

La fonction d'onde $\Psi_{l_x=0}$ s'obtient directement du résultat du problème précédent avec $\alpha = \pi/2, \beta = 0$. De façon absolument analogue, on établit la forme de la fonction d'onde $\Psi_{l_y}(\theta,\varphi)$.

3.24.

a) Soient $w(1)$ et $w(-1)$ les probabilités que les projections du moment aient une valeur $m' = \pm1$ sur l'axe z' indiqué dans le problème.

Sur la base des résultats obtenus dans le problème 3.14, on obtient

$$\overline{\widehat{l}_{z'}} = \sum_{m'} w(m')m' = w(1) - w(-1) = m\cos\alpha, \tag{1}$$

$$\overline{l^2_{z'}} = \sum_{m'} w(m')m'^2 = w(1) + w(-1) = m^2 + \left(1 - \frac{3m^2}{2}\right)\sin^2\alpha. \tag{2}$$

A partir de (1) et (2), on obtient sans peine

$$w(1,m) \equiv w(1) = [2m^2 + 2m\cos\alpha + (2-3m^2)\sin^2\alpha]/4,$$
$$w(-1,m) \equiv w(-1) = [2m^2 - 2m\cos\alpha + (2-3m^2)\sin^2\alpha]/4,$$
$$w(0,m) \equiv 1 - w(1) - w(-1).$$

b) On laisse au soin du lecteur la résolution du problème par ce procédé.

3.25. Les fonctions d'onde $\Psi_{l_i=0}(\theta,\varphi)$ $(i = 1,2,3)$ ont la forme

$$\Psi_{l_z=0} = Y_{10} = i\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta \equiv i\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{z}{r},$$
$$\Psi_{l_x=0} = i\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{x}{r} = i\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\sin\theta\cos\varphi,$$
$$\Psi_{l_y=0} = i\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{y}{r} = i\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\sin\theta\sin\varphi,$$

et leur indépendance ainsi que leur caractère complet (dans l'espace des variables angulaires) sont évidents (dans le cas $l = 1$, il y a trois fonctions d'onde indépendantes).

On voit sans peine que les différentes fonctions d'onde $\Psi_{l_i=0}$ sont orthogonales :

$$\int \Psi^*_{l_i=0}(\theta,\varphi)\Psi_{l_k=0}(\theta,\varphi)d\Omega = \delta_{ik},$$

par suite, les coefficients C_i dans le développement en série de la fonction d'onde normée $\Psi_{l=1}$, correspondant à une particule de moment $l = 1$, suivant ces fonctions $\Psi_{l=1} = \sum_i C_i\Psi_{l_i=0}$, déterminent la probabilité $w(i) = |C_i|^2$ pour que la projection du moment de la particule sur l'axe i soit nulle.

Notons que le résultat obtenu dans ce problème n'a aucun rapport avec le développement en série d'une fonction d'onde quelconque sur les fonctions propres d'un opérateur hermitien (les opérateurs $\widehat{l}_i$ ne commutent pas entre eux).

3.26. En utilisant les formules classiques des éléments matriciels $(l_i)_{mm'}$, on obtient pour la valeur du moment $l = 1$ la forme des matrices cherchées. Ces matrices constituent des opérateurs en représentation l_z qui agissent sur la fonction d'onde dans cette représentation :

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_0 \\ \psi_{-1} \end{pmatrix}; \qquad \widehat{l}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1/\sqrt{2} & 0 \\ 1/\sqrt{2} & 0 & 1/\sqrt{2} \\ 0 & 1/\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix};$$

$$\widehat{l}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}; \quad \widehat{l}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i/\sqrt{2} & 0 \\ i/\sqrt{2} & 0 & -i/\sqrt{2} \\ 0 & i/\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix};$$

$$\widehat{l}_+ = \widehat{l}_x + i\widehat{l}_y = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \qquad \widehat{l}_- = \widehat{l}_x - i\widehat{l}_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix};$$

$$\widehat{l}_+^3 = \widehat{l}_-^3 = 0.$$

3.27. L'équation de la fonction d'onde $\widehat{l}_x \Psi_{l_x=0} = 0$, en représentation l_z, a la forme

$$\widehat{l}_x \Psi_{l_x=0} \equiv \begin{pmatrix} 0 & 1/\sqrt{2} & 0 \\ 1/\sqrt{2} & 0 & 1/\sqrt{2} \\ 0 & 1/\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b/\sqrt{2} \\ (a+c)/\sqrt{2} \\ b/\sqrt{2} \end{pmatrix} = 0 \ ;$$

$$\Psi_{l_x=0} = \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}$$

d'où $b = 0, a = -c$.

La fonction propre normée $\Psi_{l_x=0}$ est donc donnée par :

$$\Psi_{l_x=0} = \frac{e^{i\alpha}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

3.28. Dans le cas où $l = 1$, les valeurs propres de la composante du moment sur un axe quelconque sont $0, \pm 1$, de sorte que, selon 1.27, on obtient

$$\widehat{l}_x^3 = \widehat{l}_x, \qquad \widehat{l}_y^3 = \widehat{l}_y \tag{1}$$

(il est possible de vérifier les relations (1) en représentation l_z directement par le calcul du produit des matrices données dans 3.26).

Dans l'état ayant les valeurs données $l = 1$ et $l_z = m$ on a, selon 3.12 et 3.13,

$$\overline{l_x} = \overline{l_y} = 0, \qquad \overline{l_x^2} = \overline{l_y^2} = (2 - m^2)/2. \tag{2}$$

Compte tenu de (1) et (2), on obtient

$$\overline{l_x^n} = \overline{l_y^n} = \begin{cases} 0, & n \text{ impair}, \\ (2 - m^2)/2, & n \text{ pair } (n > 0). \end{cases}$$

3.29. L'opérateur $(\mathbf{a} \cdot \widehat{\mathbf{l}})$ est l'opérateur projection du moment sur la direction du vecteur $\mathbf{a}$ (multiplié par la grandeur a) et, dans le cas $l = 1$, ses valeurs propres sont $0, \pm a$. La forme explicite de l'opérateur $\widehat{F}$ découle du résultat du problème 1.52 :

$$\widehat{F} = F(0) + \frac{F(a) - F(-a)}{2a}(\mathbf{a} \cdot \widehat{\mathbf{l}}) + \frac{F(a) + F(-a) - 2F(0)}{2a^2}(\mathbf{a} \cdot \widehat{\mathbf{l}})^2.$$

3.30. Compte tenu de la forme de l'opérateur $\widehat{R}(\boldsymbol{\varphi}_0) = \exp(i\boldsymbol{\varphi}_0 \cdot \widehat{\mathbf{l}})$, sur la base du résultat obtenu dans le problème précédent, la forme explicite de cet opérateur est :

$$\widehat{R}(\boldsymbol{\varphi}_0) = 1 + i \sin\varphi_0 (\mathbf{n}_0 \cdot \widehat{\mathbf{l}}) - (1 - \cos\varphi_0)(\mathbf{n}_0 \cdot \widehat{\mathbf{l}})^2 \qquad (\mathbf{n}_0 = \boldsymbol{\varphi}_0/\varphi_0, \quad \mathbf{n}_0^2 = 1). \tag{1}$$

3.31. Choisissons le vecteur rotation $\boldsymbol{\varphi}_0$ du système de coordonnées, de manière à ce qu'à l'issue de la rotation, l'axe z du système initial de coordonnées (sur lequel la projection du moment a une valeur déterminée m) ait l'orientation de l'axe $\tilde{z}$. Dans

ce cas, la fonction d'onde $\Psi_{\widetilde{m}}(\theta,\varphi) = \widehat{R}Y_{lm}(\theta,\varphi)$ décrira l'état d'une particule de moment l et dont la projection sur l'axe $\widetilde{z}$ (dont la direction est fixée par les angles α,β) est $\widetilde{m}$, en accord avec le sens de l'opérateur $\widehat{R}(\boldsymbol{\varphi}_0)$ comme opérateur de rotation du système de coordonnées.

On voit sans peine qu'il faut pour cela que les composantes du vecteur $\boldsymbol{\varphi}_0$ soient choisies égales à $\boldsymbol{\varphi}_0 = (\alpha\sin\beta, -\alpha\cos\beta, 0)$. Compte tenu de la forme explicite des opérateurs

$$\widehat{l}_x = i\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cos\varphi\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}, \qquad \widehat{l}_y = -i\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + i\sin\varphi\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi},$$
$$\widehat{R}(\boldsymbol{\varphi}_0) = 1 + i\sin\alpha(\widehat{l}_x\sin\beta - \widehat{l}_y\cos\beta) - (1-\cos\alpha)(\widehat{l}_x\sin\beta - \widehat{l}_y\cos\beta)^2$$

et de l'harmonique sphérique $Y_{10} = i\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta$, on obtient après des calculs simples

$$\Psi_{\widetilde{m}=0}(\theta,\varphi) = i\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\{\cos\alpha\cos\theta + \sin\alpha\sin\theta\cos(\varphi-\beta)\},$$

en accord avec le résultat du problème 3.22. De façon analogue, on trouve les fonctions $\Psi_{\widetilde{m}=\pm1}(\theta,\varphi)$.

3.32. Selon 3.18, on obtient

$$\widehat{P}(0) = 1 - \widehat{l}_z^2, \qquad \widehat{P}(1) = (\widehat{l}_z^2 + \widehat{l}_z)/2, \qquad \widehat{P}(-1) = (\widehat{l}_z^2 - \widehat{l}_z)/2. \tag{1}$$

En représentation l_z, ces opérateurs prennent la forme (voir 3.26)

$$\widehat{P}(0) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \widehat{P}(1) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \widehat{P}(-1) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

en accord avec le résultat du problème 1.50.

On établit sans peine les propriétés $\widehat{P}^2(m) = \widehat{P}(m)$ et $\sum\limits_m \widehat{P}(m) = \widehat{I}$.

L'action de l'opérateur $\widehat{P}(m)$ sur une fonction d'onde quelconque donne une fonction qui est une fonction propre de l'opérateur $\widehat{l}_z$ pour la valeur propre m (ou donne $\widehat{P}(m)\Psi \equiv 0$). Ainsi, par exemple,

$$\widehat{P}(0)\Psi \equiv \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = b\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \text{de sorte que } \Psi_{m=0} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

3.33. Les projecteurs $\widehat{P}(\widetilde{m})$ s'obtiennent directement à partir des expressions (1) du problème précédent, en remplaçant dans ces dernières l'opérateur $\widehat{l}_z$ par l'opérateur projection du moment sur l'axe $\widetilde{z}$ dont la direction $\mathbf{n}_0$ dans l'espace est déterminé par les angles polaire α et azimutal β :

$$\widehat{l}_{\widetilde{z}} = \mathbf{n}_0\cdot\widehat{\mathbf{l}} = \cos\alpha\cdot\widehat{l}_z + \sin\alpha\cos\beta\cdot\widehat{l}_x + \sin\alpha\sin\beta\cdot\widehat{l}_y.$$

En particulier, l'opérateur $\widehat{P}(\widetilde{m}=0)$ en représentation l_z a la forme

$$\widehat{P}(\widetilde{m}=0)=\begin{pmatrix} (\sin^2\alpha)/2 & -\mathrm{e}^{-i\beta}(\sin 2\alpha)/2\sqrt{2} & -\mathrm{e}^{-2i\beta}(\sin^2\alpha)/2 \\ -\mathrm{e}^{i\beta}(\sin 2\alpha)/2\sqrt{2} & \cos^2\alpha & \mathrm{e}^{-i\beta}(\sin 2\alpha)/2\sqrt{2} \\ -\mathrm{e}^{2i\beta}(\sin^2\alpha)/2 & \mathrm{e}^{i\beta}(\sin 2\alpha)/2\sqrt{2} & (\sin^2\alpha)/2 \end{pmatrix}.$$

En faisant agir cet opérateur sur une fonction quelconque, choisie ici sous la forme

$$\Psi=\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

on obtient la fonction propre $\Psi_{\widetilde{m}=0}$ de l'opérateur $\widehat{l_z}$ correspondant à la valeur propre $\widetilde{m}=0$:

$$\Psi_{\widetilde{m}=0}=\begin{pmatrix} (\sin\alpha)/\sqrt{2} \\ -\mathrm{e}^{i\beta}\cos\alpha \\ -\mathrm{e}^{2i\beta}(\sin\alpha)/\sqrt{2} \end{pmatrix}.$$

De façon analogue, on peut obtenir la forme de la fonction d'onde $\Psi_{\widetilde{m}=0}(\theta,\varphi)$ d'une particule dans l'espace des variables angulaires en faisant agir un projecteur $\widehat{P}(\widetilde{m}=0)$ sur une fonction d'onde quelconque ayant un moment $l=1$ (par exemple, $Y_{10}(\theta,\varphi)$).

3.34. En notant $\Psi_{Ll_1l_2}$ les fonctions propres des opérateurs $\widehat{\mathbf{L}}^2$, $\widehat{\mathbf{l}}_1^2$, $\widehat{\mathbf{l}}_2^2$, on obtient

$$\begin{aligned}
\widehat{\mathbf{l}}_1\cdot\widehat{\mathbf{l}}_2\Psi_{Ll_1l_2} &= \frac{L(L+1)-l_1(l_1+1)-l_2(l_2+1)}{2}\Psi_{Ll_1l_2}, \\
\widehat{\mathbf{l}}_1\cdot\widehat{\mathbf{L}}\Psi_{Ll_1l_2} &= \frac{L(L+1)+l_1(l_1+1)-l_2(l_2+1)}{2}\Psi_{Ll_1l_2}, \\
\widehat{\mathbf{l}}_2\cdot\widehat{\mathbf{L}}\Psi_{Ll_1l_2} &= \frac{L(L+1)+l_2(l_2+1)-l_1(l_1+1)}{2}\Psi_{Ll_1l_2}.
\end{aligned}$$

3.35. Soit $\widehat{\mathbf{V}}=\widehat{\mathbf{l}}_1\wedge\widehat{\mathbf{l}}_2$, on constate sans peine que les opérateurs des composantes de ce vecteur $\widehat{V}_i=\varepsilon_{ikl}\widehat{l}_{1k}\widehat{l}_{2l}$ sont hermitiens. Compte tenu de la relation de commutation des composantes du moment $[\widehat{l}_i,\widehat{l}_k]=i\varepsilon_{ikl}\widehat{l}_l$, ainsi que de l'égalité $\varepsilon_{ikl}\varepsilon_{\alpha\beta l}=\delta_{i\alpha}\delta_{k\beta}-\delta_{i\beta}\delta_{k\alpha}$, on obtient après des transformations fort simples, la forme de l'opérateur $\widehat{\mathbf{V}}^2$

$$\widehat{\mathbf{V}}^2=\widehat{V}_i\widehat{V}_i=\widehat{\mathbf{l}}_1^2\widehat{\mathbf{l}}_2^2-(\widehat{\mathbf{l}}_1\cdot\widehat{\mathbf{l}}_2)^2-\widehat{\mathbf{l}}_1\cdot\widehat{\mathbf{l}}_2. \tag{1}$$

Les valeurs propres de cet opérateur, compte tenu du résultat du problème précédent, sont très faciles à obtenir et on ne les écrira pas.

A partir de l'identité $(\mathbf{a}\wedge\mathbf{b})^2=\mathbf{a}^2\mathbf{b}^2-(\mathbf{a}\cdot\mathbf{b})^2$, valable pour des vecteurs classiques (qui ne sont pas des opérateurs), on peut écrire l'opérateur $\widehat{\mathbf{V}}^2$ sous la forme

$$\widehat{\mathbf{V}}^{2'}=\widehat{V}_i\widehat{V}_i=\widehat{\mathbf{l}}_1^2\widehat{\mathbf{l}}_1^2-(\widehat{\mathbf{l}}_1\cdot\widehat{\mathbf{l}}_1)^2, \tag{2}$$

expression différente de (1).

La différence entre (1) et (2) montre qu' en général, il n'existe pas de correspondance univoque entre l'opérateur de la mécanique quantique et la grandeur de la physique classique.

3.36. Les commutateurs indiqués se calculent de la même façon que dans 3.4 et leurs structures ont une forme identique, c'est-à-dire que, dans le cas a), les commutateurs sont nuls, dans le cas b), $[\widehat{L}_i, \widehat{f}_k] = i\varepsilon_{ikl}\widehat{f}_l$, etc.

3.37. Les valeurs possibles du moment total L du système satisfont aux conditions

$$\max\{|l_1 - l_2|, |m_1 + m_2|\} \leq L \leq l_1 + l_2.$$

Compte tenu de la commutativité des opérateurs $\widehat{l}_{1i}$ et $\widehat{l}_{2k}$, ainsi que de la nullité des valeurs moyennes $\overline{l}_x = \overline{l}_y = 0$ dans les états ayant une valeur déterminée de l_z (voir, par exemple, 3.12), on obtient sans peine les moyennes cherchées ($\widehat{\mathbf{L}}^2 = \widehat{\mathbf{l}}_1^2 + \widehat{\mathbf{l}}_2^2 + 2\widehat{\mathbf{l}}_1\widehat{\mathbf{l}}_2$) :

$$\overline{L}_x = \overline{L}_y = 0, \qquad \overline{L}_z = m_1 + m_2, \tag{1}$$

$$\overline{\widehat{\mathbf{L}}^2} = l_1(l_1+1) + l_2(l_2+1) + 2m_1m_2. \tag{2}$$

3.38. Les valeurs possibles du moment total L sont $l_1 + l_2$ et $l_1 + l_2 - 1$. Soit $w(L)$ la probabilité que le moment total soit égal à L. Compte tenu de la relation $w(l_1 + l_2) + w(l_1 + l_2 - 1) = 1$ et du résultat du problème précédent, représentons $\overline{\widehat{\mathbf{L}}^2}$ sous la forme

$$\overline{\widehat{\mathbf{L}}^2} = \sum_L L(L+1)w(L) = (l_1+l_2)(l_1+l_2+1)w(l_1+l_2) +$$
$$+(l_1+l_2-1)(l_1+l_2)[1 - w(l_1+l_2)] = l_1(l_1+1) + l_2(l_2+1) + 2l_1(l_2-1). \tag{1}$$

De (1), il s'ensuit que

$$w(l_1+l_2) = \frac{l_2}{l_1+l_2}, \qquad w(l_1+l_2-1) = \frac{l_1}{l_1+l_2}. \tag{2}$$

3.39. Supposons que la fonction $\Psi_{LM}(m_1, m_2)$ corresponde à une valeur déterminée L du moment total et de sa projection M sur l'axe z (elle n'est évidemment différente de zéro que pour $m_1 + m_2 = M$).

Etudions la fonction $\widetilde{\Psi}(m_1, m_2) \equiv \Psi_{LM}(m_2, m_1)$. En raison de la symétrie des opérateurs $\widehat{\mathbf{L}}^2$ et $\widehat{L}_z$ ($\widehat{\mathbf{L}} = \widehat{\mathbf{l}}_1 + \widehat{\mathbf{l}}_2$) par rapport à la permutation de $\widehat{\mathbf{l}}_1$ et $\widehat{\mathbf{l}}_2$ et de la forme universelle des opérateurs $\widehat{l}_i$, composantes du moment en représentation l_z (pour une valeur déterminée de l), il devient évident que la fonction $\widetilde{\Psi}$ est aussi une fonction propre des opérateurs $\widehat{\mathbf{L}}^2$ et $\widehat{L}_z$ correspondant aux mêmes valeurs propres L, M. Il est connu que l'addition de deux moments l_1 et l_2 en un moment total L avec une projection donnée M se fait d'une manière unique (dans le cas où ces valeurs de L et M sont acceptables). Cela signifie que $\widetilde{\Psi}(m_1, m_2) = C\Psi_{LM}(m_1, m_2)$ et en permutant une deuxième fois m_1 et m_2, on obtient $C^2 = 1$, c'est-à-dire $C = \pm 1$.

Pour établir la nature de la symétrie de la fonction d'onde pour différentes valeurs de L on peut procéder de la façon suivante. Etudions la fonction d'onde correspondant à $L = 2l$ et $M = 2l$, $\Psi_{L=2l,M=2l}(m_1, m_2) = \delta_{m_1,l}\delta_{m_2,l}$. Cette fonction est manifestement symétrique par rapport à la permutation des variables m_1 et m_2. Il est de même évident que la nature de la symétrie de la fonction d'onde dépend de la valeur de L et ne dépend pas de M; ceci est vrai, car dans une rotation, les systèmes de coordonnées des fonctions d'onde ayant des valeurs différentes de M et des valeurs de L identiques se transforment entre elles ; de façon plus formelle, cette assertion peut être démontrée à l'aide de l'opérateur $\widehat{L}_- = \widehat{l}_{1x} + \widehat{l}_{2x} - i\widehat{l}_{1y} - i\widehat{l}_{2y}$:

$$\Psi_{L,M=L-n} = C\widehat{L}_-^n \Psi_{L,M=L},$$

en tenant compte de sa symétrie par rapport à la permutation des moments des deux sous-systèmes. La fonction d'onde de l'état avec $L = 2l$ et $M = 2l - 1$ est également symétrique, est de la forme

$$\begin{aligned}\Psi_{2l,2l-1}(m_1, m_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}}\{\Psi^{(1)}_{l_{1z}=l}(m_1)\Psi^{(2)}_{l_{2z}=l-1}(m_2) + \Psi^{(1)}_{l_{1z}=l-1}(m_1)\Psi^{(2)}_{l_{2z}=l}(m_2)\} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\{\delta_{m_1,l}\delta_{m_2,l-1} + \delta_{m_1,l-1}\delta_{m_2,l}\}. \qquad (1)\end{aligned}$$

La forme la plus générale de la fonction $\Psi_{2l-1,2l-1}(m_1, m_2)$ est

$$\Psi_{2l-1,2l-1}(m_1, m_2) = \alpha\delta_{m_1,l}\delta_{m_2,l-1} + \beta\delta_{m_1,l-1}\delta_{m_2,l} \qquad (2)$$

et, compte tenu de son orthogonalité à la fonction d'onde (1), on obtient $\alpha = -\beta$, c'est-à-dire que la fonction correspondant au moment $L = 2l - 1$ est antisymétrique.

En écrivant, ensuite, de façon analogue à (1) et (2) les fonctions correspondant à $M = 2l - 2$ et $L = 2l, 2l - 1, 2l - 2$, tout en tenant compte des symétries établies plus haut des fonctions correspondant à $L = 2l$ et $2l - 1$, on voit sans peine que la fonction d'onde de l'état avec $L = 2l - 2$ est symétrique par rapport à la permutation des variables m_1 et m_2.

En continuant cette étude, on peut aboutir à la conclusion que les fonctions d'onde des états ayant une valeur donnée de L sont douées de la symétrie suivante :

$L = 2l, 2l - 2, 2l - 4, \ldots$ sont les fonctions d'onde symétriques,

$L = 2l - 1, 2l - 3, \ldots$ sont les fonctions d'onde antisymétriques.

Remarquons qu'en résolvant le problème, on ne s'est pas servi de la valeur concrète du moment l. La nature de la symétrie établie pour la fonction d'onde a lieu aussi bien pour des valeurs entières de l que pour les valeurs demi-entières qui apparaissent dans l'étude du spin des particules (voir chapitre 5).

3.40. En écrivant la fonction d'onde normée de l'état étudié (en représentation $l_{1z}l_{2z}$ soit $\Psi = \delta_{m_1,l}\delta_{m_2,l-1}$) sous la forme

$$\Psi = \frac{1}{2}\{(\delta_{m_1,l}\delta_{m_2,l-1} + \delta_{m_1,l-1}\delta_{m_2,l}) + (\delta_{m_1,l}\delta_{m_2,l-1} - \delta_{m_1,l-1}\delta_{m_2,l})\}$$

et, compte tenu de la symétrie de la fonction d'onde pour les différentes valeurs de L par rapport à la permutation des variables m_1 et m_2 établie au problème précédent, les probabilités de deux valeurs du moment $L = 2l$ et $L = 2l - 1$ sont identiques et valent $1/2$.

3.41. Les fonctions d'onde normées des états indiqués dans l'énoncé en représentation $l_{1z}l_{2z}$ sont, selon 3.39, de la forme

$$\Psi_{L=2l,M=2l-1}(m_1, m_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\{\delta_{m_1,l}\delta_{m_2,l-1} + \delta_{m_1,l-1}\delta_{m_2,l}\}, \tag{1}$$

$$\Psi_{L=2l-1,M=2l-1}(m_1, m_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\{\delta_{m_1,l}\delta_{m_2,l-1} - \delta_{m_1,l-1}\delta_{m_2,l}\}. \tag{2}$$

De (1) et (2), on voit que, dans les états considérés, les projections des moments des deux systèmes sur l'axe z ne peuvent prendre que les valeurs l et $l - 1$, et les probabilités correspondantes sont identiques et valent $1/2$.

3.42. La fonction d'onde de l'état considéré $\Psi = \delta_{m_1,0}\delta_{m_2,0}$ (en représentation $l_{1z}l_{2z}$) est symétrique par rapport à la permutation des variables m_1 et m_2 et, selon 3.39, dans cet état, le moment total ne peut prendre que deux valeurs $L = 0$ et 2. Les probabilités de ces valeurs de L se calculent de manière absolument analogue à la résolution du problème 3.38 et valent $w(L = 2) = 2/3$, $w(L = 0) = 1/3$.

Pour une valeur arbitraire de l et $l_{1z} = l_{2z} = l-1$, les probabilités des valeurs possibles de $L = 2l, 2l - 2$ du moment total sont

$$w(L = 2l) = \frac{2l}{4l - 1}, \qquad w(L = 2l - 2) = \frac{2l - 1}{4l - 1}.$$

3.43. Ecrivons la fonction d'onde normée de l'état considéré sous la forme (en représentation $l_{1z}l_{2z}$)

$$\Psi = \delta_{m_1,1}\delta_{m_2,-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\frac{1}{\sqrt{2}}(\delta_{m_1,1}\delta_{m_2,-1} + \delta_{m_1,-1}\delta_{m_2,1}) + \frac{1}{\sqrt{2}}(\delta_{m_1,1}\delta_{m_2,-1} - \delta_{m_1,-1}\delta_{m_2,1})\right\}. \tag{1}$$

Les valeurs possibles du moment total sont $L = 0, 1, 2$. Compte tenu de la symétrie de la fonction d'onde ayant une valeur déterminée de L, par rapport à la permutation des variables m_1 et m_2, établie dans 3.39, on remarque que le second terme entre accolades de (1) est la fonction d'onde normée de l'état avec $L = 1$, tandis que le premier décrit une superposition des états avec $L = 2$ et $L = 0$. Il est évident que la probabilité de l'état avec $L = 1$ vaut $w(L = 1) = 1/2$ et $w(L = 0) = 1/2 - w(L = 2)$. En écrivant $\overline{\widehat{\mathbf{L}}^2}$ sous la forme

$$\overline{\widehat{\mathbf{L}}^2} = \sum_L L(L + 1)w(L) = 6w(L = 2) + 1,$$

et, du fait que, selon 3.37, cette moyenne vaut $\overline{\widehat{\mathbf{L}}^2} = 2$, on obtient

$$w(L=2) = 1/6, \qquad w(L=1) = 1/2, \qquad w(L=0) = 1/3.$$

La généralisation au cas l quelconque, mentionnée dans l'énoncé, donne

$$w(L=2l) = \frac{2l-1}{8l-2}, \qquad w(L=2l-1) = \frac{1}{2}, \qquad w(L=2l-2) = \frac{l}{4l-1}.$$

3.44. La solution du problème découle directement des deux points suivants :

a) en vertu de la symétrie de la fonction d'onde $\Psi_{LM}(m_1, m_2)$ par rapport à la permutation des variables m_1 et m_2, les probabilités d'avoir une valeur m sont les mêmes, c'est-à-dire

$$w_1(m) = w_2(m) \tag{1}$$

($w_{1,2}$ sont les fonctions de distribution des projections du premier et du deuxième moment) ;

b) dans l'état décrit par la fonction d'onde $\Psi_{LM}(m_1, m_2)$ les projections m_1 et m_2 sont liées de façon univoque l'une à l'autre, vu que $m_1 + m_2 = M$, et ainsi la probabilité de m_1 pour le premier moment est égale à celle de $m_2 = M - m_1$ pour le second, c'est-à-dire

$$w_1(m_1) = w_2(M - m_1) \tag{2}$$

De (1) et (2), on obtient l'égalité demandée :

$$w_{1,2}(m) = w_{2,1}(M - m).$$

3.45. Compte tenu de la symétrie de la fonction d'onde $\Psi = \delta_{m_1,0}\delta_{m_2,0}$ dans l'état considéré par rapport à la permutation des variables m_1 et m_2, on obtient que les valeurs possibles du moment total L sont $L = 0, 2, 4$. Les probabilités $w(L)$ de ces valeurs de L satisfont à la condition

$$w(L=0) + w(L=2) + w(L=4) = 1 \tag{1}$$

alors que $\overline{\widehat{\mathbf{L}}^2}$, selon 3.37, vaut

$$\overline{\widehat{\mathbf{L}}^2} = 20w(L=4) + 6w(L=2) = 12. \tag{2}$$

Des conditions (1) et (2), il n'est pas difficile d'obtenir les limites suivantes des probabilités ($w(L) \geq 0$) :

$$3/7 \leq w(L=4) \leq 3/5, \qquad 0 \leq w(L=2) \leq 4/7, \qquad 0 \leq w(L=0) \leq 2/5.$$

Les valeurs exactes de ces probabilités, obtenues en utilisant les coefficients de Clebsch-Gordan, sont

$$w(L=0) = 1/5, \qquad w(L=2) = 2/7 \text{ et } w(L=4) = 18/35.$$

3.46. La fonction d'onde avec $L = 0$ se présente sous la forme

$$\Psi_{L=0} = \sum_{m=-l}^{l} C_m \Psi_m^{(1)} \Psi_{-m}^{(2)}, \tag{1}$$

où $\Psi_m^{(1,2)}$ sont les fonctions d'onde normées à l'unité de chacun des systèmes avec un moment l et une projection m sur l'axe z. L'action de $\widehat{L}_+ = \widehat{L}_x + i\widehat{L}_y = \widehat{l}_{1+} + \widehat{l}_{2+}$ sur la fonction (1) doit évidemment donner

$$\widehat{L}_+ \Psi_{L=0} = (\widehat{l}_{1+} + \widehat{l}_{2+})\Psi_{L=0} = 0, \tag{2}$$

Compte tenu de la relation

$$\widehat{l}_+ \Psi_m = \sqrt{(l-m)(l+m+1)}\Psi_{m+1},$$

on déduit de l'égalité (2), après des transformations simples, que

$$\widehat{L}_+ \Psi_{L=0} = \sum_m \sqrt{(l-m)(l+m+1)}(C_m + C_{m+1})\Psi_{m+1}^{(1)} \Psi_{-m}^{(2)} = 0,$$

c'est-à-dire $C_{m+1} = -C_m$, de sorte que $|C_m| = \text{const} = 1/\sqrt{2l+1}$ (la valeur de la constante vient de la condition de normalisation de la fonction d'onde $\Psi_{L=0}$ à l'unité).

On voit que dans l'état de moment total $L = 0$, les probabilités des différentes valeurs des projections des moments de chacun des deux systèmes sur l'axe z sont les mêmes et valent $w = (2l+1)^{-1}$. En raison de la symétrie sphérique de l'état $L = 0$ et de l'équivalence de différentes directions dans l'espace, la probabilité de toute valeur de la projection de chaque moment $(l, l-1, \ldots, -l)$ sur un axe arbitraire est aussi égale à $(2l+1)^{-1}$.

3.47. Cherchons la forme des fonctions normées Ψ_{LM} en représentation $l_{1z}l_{2z}$. Il est clair que

$$\Psi_{2,2} = \Psi_{1,1}^{(1)}\Psi_{1,1}^{(2)}, \qquad \Psi_{2,-2} = \Psi_{1,-1}^{(1)}\Psi_{1,-1}^{(2)}, \tag{1}$$

où $\Psi_{l,l_z}^{(1,2)}$ représente la fonction d'onde de la particule 1(2) (ou du sous-système) de moment $l = 1$ dans sa représentation l_z.

La forme de la fonction d'onde ψ_{LM} correspondant aux états avec $L = 1$ ou 2 et $M = \pm 1$, ainsi qu'avec $L = 1$, $M = 0$ se déduit directement de la symétrie de la fonction d'onde par rapport à la permutation des variables m_1 et m_2 établie dans le problème 3.39 :

$$\Psi_{2(1),1} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\Psi_{1,1}^{(1)}\Psi_{1,0}^{(2)} \pm \Psi_{1,0}^{(1)}\Psi_{1,1}^{(2)}\right\}, \tag{2}$$

$$\Psi_{2(1),-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\Psi_{1,-1}^{(1)}\Psi_{1,0}^{(2)} \pm \Psi_{1,0}^{(1)}\Psi_{1,-1}^{(2)}\right\}, \tag{3}$$

$$\Psi_{1,0} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\Psi_{1,1}^{(1)}\Psi_{1,-1}^{(2)} - \Psi_{1,-1}^{(1)}\Psi_{1,1}^{(2)}\right\}. \tag{4}$$

Le signe "+" dans les expressions (2) et (3) correspond à $L = 2$, le signe "–" à $L = 1$.

La forme de la fonction d'onde $\Psi_{0,0}$ se déduit du résultat du problème précédent :

$$\Psi_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left\{ \Psi^{(1)}_{1,1}\Psi^{(2)}_{1,-1} - \Psi^{(1)}_{1,0}\Psi^{(2)}_{1,0} + \Psi^{(1)}_{1,-1}\Psi^{(2)}_{1,1} \right\}. \tag{5}$$

La fonction d'onde $\Psi_{2,0}$, compte tenu de sa symétrie par rapport à la permutation des variables m_1 et m_2, peut être écrite sous la forme

$$\Psi_{2,0} = C_1 \left\{ \Psi^{(1)}_{1,1}\Psi^{(2)}_{1,-1} + \Psi^{(1)}_{1,-1}\Psi^{(2)}_{1,1} \right\} + C_2\Psi^{(1)}_{1,0}\Psi^{(2)}_{1,0}. \tag{6}$$

A partir de l'orthogonalité des fonctions d'onde $\Psi_{2,0}$ et $\Psi_{0,0}$, on trouve que $C_2 = 2C_1$ et, une fois choisi dans (6) $C_1 = 1/\sqrt{6}$, $C_2 = 2/\sqrt{6}$, on obtient la fonction d'onde normée $\Psi_{2,0}$.

Les probabilités des différentes projections des moments de chaque particule sur l'axe z dans les états Ψ_{LM} s'obtiennent sans peine à partir des fonctions d'onde Ψ_{LM} établies dans (1)–(6).

Pour établir la dépendance angulaire des fonctions d'onde $\Psi_{LM}(\theta_1, \varphi_1, \theta_2, \varphi_2)$ d'un système de deux particules de moments $l_1 = l_2 = 1$, utilisons la relation

$$\Psi_{LM}(\theta_1, \varphi_1, \theta_2, \varphi_2) = \sum_{m_1, m_2} \Psi_{LM}(m_1, m_2) Y_{1m_1}(\theta_1, \varphi_1) Y_{1m_2}(\theta_2, \varphi_2) \tag{7}$$

liant la représentation en variables angulaires à la représentation $l_{1z}l_{2z}$.

Compte tenu de la forme (5) de la fonction d'onde pour $L = 0$ en représentation $l_{1z}l_{2z}$, ainsi que de la forme des fonctions sphériques $Y_{1m}(\theta, \varphi)$ (ces fonctions sont données dans les solutions des problèmes 3.22 et 3.23), on obtient, selon (7), après des transformations simples :

$$\Psi_{0,0} = \frac{\sqrt{3}}{4\pi}\{\cos\theta_1 \cos\theta_2 + \sin\theta_1 \sin\theta_2 \cos(\varphi_1 - \varphi_2)\} = \frac{\sqrt{3}}{4\pi}\mathbf{n}_1 \cdot \mathbf{n}_2 \qquad (\mathbf{n} = \mathbf{r}/r). \tag{8}$$

3.48. Il y a en tout $3 \times 3 \times (2l + 1) = 9 \times (2l + 1)$ états différents du système. Ces états sont classés de la façon suivante d'après les valeurs possibles L du moment total du système :

$$\begin{array}{rcl} (2l+5) & \text{états correspondant à} & L = l+2, \\ 2(2l+3) & - & L = l+1, \\ 3(2l+1) & - & L = l, \\ 2(2l-1) & - & L = l-1, \\ (2l-3) & - & L = l-2. \end{array} \tag{1}$$

Pour résoudre le problème, il est commode d'additionner d'abord les moments des deux sous-systèmes avec $l = 1$ en un moment total L_{12} prenant les valeurs $L_{12} = 0, 1, 2$ et, ensuite, d'additionner les moments L_{12} et $l_3 = l$ en un moment total L de tout le système. Il faut dans ce cas prendre en considération qu'une valeur donnée L peut

être obtenue, en général, de plusieurs façons différentes. C'est ainsi que la valeur $L = l + 1$ peut s'obtenir par addition du moment l du troisième sous-système au moment $L_{12} = 1$ ainsi qu'au moment $L_{12} = 2$.

En obtenant (1), on a supposé que $l \geq 2$. L'étude du cas $l = 1$ est laissé au soin du lecteur.

3.49. Comme les valeurs propres de l'opérateur $2\widehat{\mathbf{l}}_1\widehat{\mathbf{l}}_2 + l_1(l_1+1) + l_2(l_2+1)$ sont égales à $L(L+1)$, où L est la valeur du moment total, on obtient le projecteur $\widehat{P}(L)$ (comparer au problème 1.40) :

$$\widehat{P}(L) = \prod_{\substack{|l_1 - l_2| \leq L' \leq l_1 + l_2 \\ L' \neq L}} \frac{2\widehat{\mathbf{l}}_1 \cdot \widehat{\mathbf{l}}_2 + l_1(l_1+1) + l_2(l_2+1) - L'(L'+1)}{L(L+1) - L'(L'+1)}. \qquad (1)$$

3.50. On peut évidemment représenter le projecteur $\widehat{P}(L, M)$ sous la forme $\widehat{P}(L, M) = \widehat{P}(M)\widehat{P}(L)$, où $\widehat{P}(L)$ est le projecteur sur les états de valeur L donnée du moment total trouvé dans 3.49 et où $\widehat{P}(M)$ est le projecteur sur les états de valeur M donnée du moment total $\widehat{L}_z = \widehat{l}_{1z} + \widehat{l}_{2z}$ sur l'axe z. Comme on le montre sans peine, $\widehat{P}(M)$ a pour expression

$$\widehat{P}(M) = \prod_{\substack{-L \leq m \leq L \\ m \neq M}} \frac{(\widehat{l}_{1z} + \widehat{l}_{2z} - m)}{(M - m)}.$$

3.51. Dans le cas de $l_1 = l_2 = 1$, le projecteur $\widehat{P}(L = 0)$ d'après la formule (1) du problème 3.49 a pour expression

$$\widehat{P}(L = 0) = \frac{(\widehat{\mathbf{l}}_1 \cdot \widehat{\mathbf{l}}_2)^2 - 1}{3}.$$

En agissant avec cet opérateur sur une fonction d'onde quelconque Ψ d'un système composé de deux sous-systèmes de moments $l_1 = l_2 = 1$, on obtient une fonction propre (non normée) de l'opérateur du moment total correspondant à $L = 0$, c'est-à-dire

$$\Psi_{L=0} = C\widehat{P}(L = 0)\Psi$$

(C étant le coefficient de normalisation).

En représentant l'opérateur $\widehat{\mathbf{l}}_1\widehat{\mathbf{l}}_2$ sous la forme

$$\widehat{\mathbf{l}}_1 \cdot \widehat{\mathbf{l}}_2 = \widehat{l}_{1z}\widehat{l}_{2z} + (\widehat{l}_{1+}\widehat{l}_{2-} + \widehat{l}_{1-}\widehat{l}_{2+})/2,$$

où on a pris par commodité la fonction propre Ψ sous la forme (en représentation $l_{1z}l_{2z}$)

$$\Psi = \Psi^{(1)}_{1,0}\Psi^{(2)}_{1,0}$$

on obtient, après des transformations simples,

$$\begin{aligned}\Psi_{L=0} &= C\widehat{P}(L=0)\Psi = C\widehat{P}(L=0)\Psi^{(1)}_{1,0}\Psi^{(2)}_{1,0} = \\ &= \frac{C}{3}\left\{-\Psi^{(1)}_{1,1}\Psi^{(2)}_{1,-1} + \Psi^{(1)}_{1,0}\Psi^{(2)}_{1,0} - \Psi^{(1)}_{1,-1}\Psi^{(2)}_{1,1}\right\}.\end{aligned}$$

En choisissant dans la dernière expression $C = -\sqrt{3}$, on obtient la fonction d'onde normée avec $L = 0$ en accord avec le résultat obtenu dans le problème 3.47.

3.52. Grâce à la relation de commutation $\widehat{L}_z\widehat{f}_z - \widehat{f}_z\widehat{L}_z = 0$, on voit que les éléments matriciels non diagonaux de l'opérateur $\widehat{f}_z$ sont nuls

$$\langle L, M', n|\widehat{L}_z\widehat{f}_z - \widehat{f}_z\widehat{L}_z|L, M, n\rangle = (M' - M)\langle L, M', n|\widehat{f}_z|L, M, n\rangle = 0$$

(de même que les éléments matriciels de l'opérateur $\widehat{L}_z$).

A partir des relations de commutation

$$[\widehat{L}_z, \widehat{f}_\pm] = \pm\widehat{f}_\pm, \qquad (\widehat{f}_\pm \equiv \widehat{f}_x \pm i\widehat{f}_y)$$

on déduit directement

$$(M' - M)\langle nLM'|\widehat{f}_\pm|nLM\rangle = \pm\langle nLM'|\widehat{f}_\pm|nLM\rangle. \tag{1}$$

D'après (1), on voit que l'opérateur $\widehat{f}_+$ ne possède des éléments matriciels différents de zéro $(f_+)_{M'M}$ que pour $M' = M+1$, tandis que ceux de $(f_-)_{M'M}$ ne sont différents de zéro que pour $M' = M - 1$ (propriétés analogues à celles de $(L_\pm)_{M'M}$).

En prenant un élément matriciel de la forme $\langle n, L, M+2|\ldots|n, L, M\rangle$ dans les deux membres de l'égalité $[\widehat{L}_+, \widehat{f}_+] = 0$ (constituant un corollaire direct des relations de commutation des opérateurs $\widehat{L}_i$ et $\widehat{f}_k$) et compte tenu des relations

$$\begin{aligned}\widehat{L}_+|n, L, M\rangle &= \sqrt{(L-M)(L+M+1)}|n, L, M+1\rangle, \\ \langle n, L, M|\widehat{L}_+ &= \sqrt{(L-M+1)(L+M)}\langle n, L, M-1|,\end{aligned} \tag{2}$$

on obtient sans peine

$$\frac{(f_+)_{M+2,M+1}}{(f_+)_{M+1,M}} = \frac{\sqrt{(L-M-1)(L+M+2)}}{\sqrt{(L-M)(L+M+1)}} = \frac{(L_+)_{M+2,M+1}}{(L_+)_{M+1,M}}. \tag{3}$$

De (3), on obtient

$$(f_+)_{M+1,M} = a(n, L)(L_+)_{M+1,M}, \tag{4}$$

et, compte tenu de ce qui a été dit dans l'énoncé sur les éléments matriciels des opérateurs $\widehat{f}_+$ et $\widehat{L}_+$, on conclut que (4) est équivalent à "l'égalité"

$$\widehat{f}_+ \doteq a(n, L)\widehat{L}_+. \tag{5}$$

De façon analogue, on déduit de la condition $[\widehat{L}_-, \widehat{f}_-] = 0$ que

$$\widehat{f}_- \doteq a(n, L)\widehat{L}_-. \tag{6}$$

En prenant l'élément matriciel diagonal de l'égalité $[\widehat{L}_-, \widehat{f}_+] = -2\widehat{f}_z$, on obtient sans peine que $(f_z)_{MM} = a(n, L)M$, autrement dit que

$$\widehat{f}_z \doteq a(n, L)\widehat{L}_z. \tag{7}$$

De façon absolument analogue, à partir de la relation $[\widehat{L}_+, \widehat{f}_-] = 2\widehat{f}_z$, on déduit que $(f_z)_{MM} = b(n, L)M$, ce qui justifie l'égalité $a(n, L) = b(n, L)$, de sorte que les expressions (5)–(7) peuvent être écrites sous la forme

$$\widehat{\mathbf{f}} \doteq a(n, L)\widehat{\mathbf{L}}. \tag{8}$$

Pour trouver la grandeur $a(n, L)$, prenons l'élément matriciel diagonal de l'opérateur $\widehat{\mathbf{f}} \cdot \widehat{\mathbf{L}}$ (vu que l'opérateur $\widehat{\mathbf{f}} \cdot \widehat{\mathbf{L}}$ est un opérateur scalaire qui commute avec $\widehat{L}_i$, ses éléments diagonaux ne dépendent pas de M, voir 3.20).

Un calcul direct donne

$$\langle nLM|\widehat{\mathbf{f}} \cdot \widehat{\mathbf{L}}|nLM\rangle = a(n, L)\langle nLM|\widehat{\mathbf{L}}^2|nLM\rangle = a(n, L)L(L+1),$$

d'où

$$a(n, L) = \frac{\langle nLM|\widehat{\mathbf{f}} \cdot \widehat{\mathbf{L}}|nLM\rangle}{L(L+1)}. \tag{9}$$

3.53. Selon le problème précédent et le problème 3.36 b il vient

$$\langle nLM'|\widehat{\mathbf{l}}_1 \wedge \widehat{\mathbf{l}}_2|L, M, n\rangle = a(n, L)(\widehat{\mathbf{L}})_{M'M},$$

où

$$a(n, L) = \langle nLM|\widehat{\mathbf{l}}_1 \wedge \widehat{\mathbf{l}}_2 \cdot \widehat{\mathbf{L}}|nLM\rangle / L(L+1).$$

Vu que $\widehat{\mathbf{L}} = \widehat{\mathbf{l}}_1 + \widehat{\mathbf{l}}_2$ et compte tenu des relations de commutation $[\widehat{l}_i, \widehat{l}_k] = i\varepsilon_{ikn}\widehat{l}_n$ des composantes de chacun des moments $\widehat{\mathbf{l}}_1$, $\widehat{\mathbf{l}}_2$ et de celles de $\widehat{l}_{1i}$ et de $\widehat{l}_{2k}$, on montre sans peine que $a = 0$, c'est-à-dire que tous les éléments matriciels de l'opérateur $\widehat{\mathbf{l}}_1 \wedge \widehat{\mathbf{l}}_2$ dans des états correspondant à une même valeur L du moment total du système sont nuls.

3.54. Sur la base des résultats obtenus dans les problèmes 3.52 et 3.34, il vient

$$\overline{\mathbf{l}}_1 \equiv \langle nLM|\widehat{\mathbf{l}}_1|nLM\rangle = a_1\overline{\mathbf{L}}, \qquad a_1 = \frac{L(L+1) + l_1(l_1+1) - l_2(l_2+1)}{2L(L+1)},$$

On obtient une expression analogue (avec substitution de l'indice 2 à 1 et réciproquement) pour $\overline{\mathbf{l}}_2$.

Etant donné que dans l'état à valeur déterminée M, les valeurs moyennes $\overline{L}_x, \overline{L}_y$ sont nulles, il vient

$$\overline{\mu_x} = 0, \quad \overline{\mu_y} = 0, \quad \overline{\mu_z} = \frac{(g_1+g_2)L(L+1)+(g_1-g_2)[l_1(l_1+1)-l_2(l_2+1)]}{2L(L+1)}M. \quad (1)$$

3.55. Dans ce problème, $L = l_1 + l_2$. Il est évident que la forme de la fonction d'ondes $\Psi_{L,M=L}$ est :

$$\Psi_{LL} = \Psi^{(1)}_{l_1 l_1}\Psi^{(2)}_{l_2 l_2}. \quad (1)$$

A partir de la propriété de l'opérateur $\widehat{L}_-$:

$$\widehat{L}_-\Psi_{LM} = \sqrt{(L-M+1)(L+M)}\Psi_{L,M-1}, \quad (2)$$

on obtient

$$\Psi_{LM} = \left[\frac{(L+M)!}{(L-M)!(2L)!}\right]^{1/2}(\widehat{L}_-)^{L-M}\Psi_{LL}. \quad (3)$$

Comme $\widehat{L}_- = \widehat{l}_{-1} + \widehat{l}_{2-}$ et que les opérateurs $\widehat{l}_{-1}$ et $\widehat{l}_{2-}$ commutent entre eux, du fait de la forme explicite de la fonction d'onde (1) et de la propriété (2), on déduit sans peine de (3)

$$\begin{aligned}\Psi_{LM} &= G(L,M)\sum_m C^m_{L-M}(\widehat{l}_{1-})^m(\widehat{l}_{2-})^{L-M-m}\Psi^{(1)}_{l_1 l_1}\Psi^{(2)}_{l_2 l_2} = \\ &= G(L,M)\sum_m C^m_{L-M}G^{-1}(l_1, l_1-m)G^{-1}(l_2, l_2-L+M+m)\times \\ &\times \Psi^{(1)}_{l_1,l_1-m}\Psi^{(2)}_{l_2,l_2-L+M+m} \equiv \sum_{m_1} C^{LM}_{l_1 m_1 l_2 m_2}\Psi^{(1)}_{l_1 m_1}\Psi^{(2)}_{l_2 m_2} \quad (M = m_1+m_2) \quad (4)\end{aligned}$$

avec

$$G(L,M) = \left[\frac{(L+M)!}{(L-M)!(2L)!}\right]^{1/2}, \qquad C^m_L = \frac{L!}{m!(L-m)!}. \quad (5)$$

De (4), on déduit la valeur des coefficients de Clebsch-Gordan

$$C^{LM}_{l_1 m_1 l_2 m_2} = G(L,M)G^{-1}(l_1,m_1)G^{-1}(l_2,m_2)C^{l_1-m_1}_{L-M} \qquad (M = m_1+m_2).$$

En tenant compte de (5), on aboutit finalement à l'expression :

$$C^{LM}_{l_1 m_1 l_2 m_2} = \left[\frac{(2l_1)!(2l_2)!(L+M)!(L-M)!}{(2L)!(l_1+m_1)!(l_1-m_1)!(l_2+m_2)!(l_2-m_2)!}\right]^{1/2}, \qquad L = l_1+l_2.$$

3.56. Les coefficients de Clebsch-Gordan ont déjà été obtenus pour ce cas dans le problème 3.46. Ayant choisi le coefficient C_m dans la solution de ce problème égal à $C_l = (2l+1)^{-1/2}$, pour $m = l$, on a

$$C^{00}_{l,m,l,-m} = C_m = \frac{(-1)^{l-m}}{\sqrt{2l+1}}.$$

3.57. Etudions une fonction d'onde de la forme

$$\widetilde{\Psi}_l = t_{ik\ldots n} x_i x_k \ldots x_n \equiv t_{ik\ldots n} n_i n_k \ldots n_n r^l.$$

Compte tenu du fait que l'opérateur carré du moment d'une particule $\widehat{\mathbf{l}}^2$ est proportionnel à la partie angulaire de l'opérateur laplacien en coordonnées sphériques, soit plus précisément,

$$\widehat{\mathbf{l}}^2 = -r^2 \Delta_{\theta,\varphi} = r^2(\Delta_r - \Delta), \qquad \Delta_r = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r}, \tag{1}$$

on obtient

$$\begin{aligned} &r^2 \Delta_r \widetilde{\Psi}_l = r^2 t_{ik\ldots n} n_i n_k \ldots n_n \Delta_r r^l = l(l+1)\widetilde{\Psi}_l, \\ &\Delta \widetilde{\Psi}_l = (\partial/\partial x_m)(\partial/\partial x_m) t_{ikp\ldots n} x_i x_k x_p \ldots x_n \\ &= t_{ikp\ldots n}(\delta_{im}\delta_{km} x_p \ldots x_n + \ldots) = t_{mmp\ldots n} x_p \ldots x_n n + \ldots = 0. \end{aligned} \tag{2}$$

On déduit immédiatement de (1) et (2) que

$$\widehat{\mathbf{l}}^2 \widetilde{\Psi}_l = l(l+1)\widetilde{\Psi}_l.$$

Il est évident que la fonction d'onde Ψ_l indiquée dans l'énoncé est aussi une fonction propre de l'opérateur $\widehat{\mathbf{l}}^2$.

3.58. Cherchons d'abord le nombre de composantes indépendantes $\widetilde{g}(l)$ du tenseur $\widetilde{t}_{ik\ldots n}$ de rang l symétrique par rapport à tout couple d'indices. Notons : n_1 le nombre d'indices d'une certaine composante de ce tenseur égaux à 1, n_2 le nombre d'indices égaux à 2 et $n_3 = (l - n_1 - n_2)$ le nombre d'indices égaux à 3. En raison de la symétrie du tenseur, les composantes ayant des nombres n_1 et n_2 identiques sont égales et diffèrent l'une de l'autre si n_1 et n_2 diffèrent. Si la valeur de n_1 est fixée, le nombre n_2 peut être égal à $0, 1, \ldots, (l - n_1)$, autrement dit, le nombre de composantes distinctes du tenseur pour n_1 donné vaut $(l - n_1 + 1)$. Le nombre total de composantes distinctes $\widetilde{g}(l)$ vaut

$$\widetilde{g}(l) = \sum_{n_1=0}^{l} (l - n_1 + 1) = (l+1)^2 - \sum_{n_1=0}^{l} n_1 = \frac{(l+1)(l+2)}{2}.$$

Pour obtenir le nombres de composantes indépendantes $g(l)$ d'un tenseur symétrique $t_{ik\ldots n}$ avec une trace nulle $t_{iip\ldots n} = 0$, remarquons que la dernière condition est un ensemble de relations linéaires entre les composantes du tenseur $\widetilde{t}_{ik\ldots n}$. Le nombre de ces relations complémentaires vaut évidemment $\widetilde{g}(l-2)$. Donc,

$$g(l) = \widetilde{g}(l) - \widetilde{g}(l-2) = 2l + 1,$$

ce qu'il fallait démontrer.

3.59. En utilisant l'écriture $|\Psi_{l=1}|^2 = |(\mathbf{t}\cdot\mathbf{n})|^2 = t_i^* t_k n_i n_k$ et compte tenu de la valeur de l'intégrale

$$\int n_i n_k d\Omega = 4\pi\delta_{ik}/3,$$

on obtient à partir de la condition de normalisation de la fonction d'onde $|\mathbf{t}|^2 = \frac{3}{4\pi}$ (il faut se souvenir que le vecteur $\mathbf{t}$ est, en général, complexe).

3.60. Compte tenu de la forme explicite des harmoniques sphériques Y_{1m} (elles sont données, par exemple, lors de la résolution des problèmes 3.22 et 3.23), on obtient les valeurs des composantes du vecteur $\mathbf{t}(m)$ pour lesquelles la fonction d'onde $\Psi_{l=1} = \mathbf{t}(m)\cdot\mathbf{n}$ coïncide avec l'harmonique sphérique correspondante :

$$\mathbf{t}(m=0) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}(0,0,i), \qquad \mathbf{t}(m=\pm 1) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}(\mp i, 1, 0).$$

Dans le cas $l = 2$, les composantes $t_{ik}(m)$ valent

$$t_{ik}(m=2) = -\sqrt{\frac{15}{32\pi}}\begin{pmatrix} 1 & i & 0 \\ i & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$t_{ik}(m=1) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & i \\ 1 & i & 0 \end{pmatrix},$$

$$t_{ik}(m=0) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix},$$

$$t_{ik}(m=-1) = -[t_{ik}(m=1)]^*, \qquad t_{ik}(m=-2) = [t_{ik}(m=2)]^*$$

3.61. Un calcul simple donne

$$\sum_{m=-1}^{1} t_i^*(m) t_k(m) = \frac{3}{4\pi}\delta_{ik}.$$

3.62. Représentons le vecteur complexe $\mathbf{t}$ sous la forme $\mathbf{t} = \mathbf{a}_1 + i\mathbf{a}_2$ où $\mathbf{a}_1$ et $\mathbf{a}_2$ sont des vecteurs réels.

a) Dans le cas où $\mathbf{a}_1 // \mathbf{a}_2$, c'est-à-dire que $\mathbf{t} = a\mathbf{n}_0$ ($\mathbf{n}_0$ étant un vecteur réel), la projection du moment sur l'axe dirigé suivant $\mathbf{n}_0$ a une valeur déterminée égale à zéro. Mais si les vecteurs $\mathbf{a}_1$ et $\mathbf{a}_2$ ne sont pas parallèles, il n'existe pas d'axe sur lequel la projection du moment a la valeur déterminée $\widetilde{m} = 0$.

b) Dans le cas où $\mathbf{a}_1 \perp \mathbf{a}_2$ et $a_1 = a_2$ la projection du moment sur l'axe dirigé suivant le vecteur $\mathbf{a}_1 \wedge \mathbf{a}_2$ présente une valeur déterminée $\widetilde{m} = 1$ (et $\widetilde{m} = -1$ sur la direction opposée).

Dans le cas général, quand aucune de ces deux conditions n'est remplie, il n'existe pas d'axe sur lequel la projection du moment a une valeur déterminée. Cette assertion est vraie pour toute valeur du moment $L \geq 1$ (mais pas dans le cas d'un moment égal à 1/2, voir 5.12).

3.63. En représentant le vecteur $\mathbf{t}$ (voir 3.62) sous la forme $\mathbf{t} = \mathbf{a}_1 + i\mathbf{a}_2$, où $\mathbf{a}_1$ et $\mathbf{a}_2$ sont des vecteurs réels et, compte tenu du résultat obtenu dans le problème 3.60, on constate sans peine que la probabilité d'obtenir une valeur de la projection du moment $\widetilde{m} = 0$ sur l'axe dirigé suivant le vecteur $\mathbf{a}_1 \wedge \mathbf{a}_2$ est nulle. Si $\mathbf{a}_1 // \mathbf{a}_2$, la probabilité d'obtenir une valeur de la projection du moment $\widetilde{m} = 0$ sur un axe quelconque perpendiculaire à ces vecteurs est nulle.

3.64.

$$w(\widetilde{m} = 0) = |\mathbf{t} \cdot \mathbf{n}_0|^2, \qquad w(\widetilde{m} = \pm 1) = \frac{1}{2}|\mathbf{t} \cdot \mathbf{n}_1 \mp i\mathbf{t} \cdot \mathbf{n}_0 \wedge \mathbf{n}_1|^2. \tag{1}$$

Dans les expressions (1), le vecteur $\mathbf{t}$ est considéré normé à l'unité, $|\mathbf{t}|^2 = 1$, $\mathbf{n}_1$ est un vecteur unitaire réel perpendiculaire à $\mathbf{n}_0$ (le choix du vecteur $\mathbf{n}_1$ n'est pas univoque, toutefois les valeurs des expressions (1) ne dépendent pas du choix de ce dernier). Il est commode de passer à un nouveau système de coordonnées avec l'axe $\widetilde{z}$ dirigé suivant $\mathbf{n}_0$, l'axe $\widetilde{x}$ suivant $\mathbf{n}_1$ et l'axe $\widetilde{y}$ suivant le vecteur $\mathbf{n}_0 \wedge \mathbf{n}_1$ et d'utiliser la forme connue des composantes des vecteurs $\mathbf{t}(m)$ correspondant aux états ayant une projection déterminée du moment sur l'axe z (voir 3.60).

3.65. En posant $\mathbf{t} = \sqrt{3/4\pi}\mathbf{a}$, où $|\mathbf{a}| = 1$, on obtient à partir des conditions de normalisation de la fonction d'onde les moyennes cherchées :

$$\begin{aligned} \overline{n_i n_k} &= \frac{3}{4\pi}\int a_l^* n_l n_i n_k n_m a_m d\Omega = \\ &= \frac{3}{4\pi} a_l^* a_m \frac{4\pi}{15}(\delta_{ik}\delta_{ml} + \delta_{im}\delta_{kl} + \delta_{il}\delta_{km}) = \frac{1}{5}(\delta_{ik} + a_i^* a_k + a_k^* a_i). \end{aligned} \tag{1}$$

Si l'on écrit le vecteur complexe $\mathbf{a}$ sous la forme $\mathbf{a} = \mathbf{a}_1 + i\mathbf{a}_2$, où $\mathbf{a}_1$ et $\mathbf{a}_2$ sont des vecteurs réels, l'expression (1) prend alors la forme

$$\overline{n_i n_k} = \frac{1}{5}[\delta_{ik} + 2(a_{1i}a_{1k} + a_{2i}a_{2k})].$$

3.66. Vu que

$$\widehat{l}_i \Psi_{l=1} = -i\varepsilon_{ikn} x_k \frac{\partial}{\partial x_n} t_m \frac{x_m}{r} = -i\varepsilon_{ikn} t_n n_k$$

et que la fonction d'onde est normée à l'unité $\mathbf{t} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\mathbf{a}$, où $|\mathbf{a}| = 1$, on obtient sans peine

$$\bar{l}_i = -i\frac{3}{4\pi}\varepsilon_{ikn} a_n a_m^* \int n_m n_k d\Omega = -i\varepsilon_{ikn} a_k^* a_n,$$

c'est-à-dire

$$\bar{\mathbf{l}} = -i\mathbf{a}^* \wedge \mathbf{a}. \tag{1}$$

En posant $\mathbf{a} = \mathbf{a}_1 + i\mathbf{a}_2$ ($\mathbf{a}_{1,2}$ étant des vecteurs réels), l'expression (1) peut être écrite sous la forme

$$\bar{\mathbf{l}} = 2\mathbf{a}_1 \wedge \mathbf{a}_2.$$

3.67. Comme l'action de l'opérateur $\widehat{l_i} = -\varepsilon_{inl} x_n \frac{\partial}{\partial x_l}$ sur la fonction de la forme $\Psi = \mathbf{a} \cdot \mathbf{n}$ donne

$$\Phi_i \equiv \widehat{l_i}\Psi = \widehat{l_i} a_k n_k = -i\varepsilon_{ikn} a_n n_k \equiv b_{i,k} n_k,$$

on obtient la forme de l'opérateur $\widehat{l_i}$ en représentation vectorielle

$$b_{i,k} \equiv \widehat{l_i} a_k = -i\varepsilon_{ikn} a_n.$$

On voit que si dans cette représentation, on écrit la fonction d'onde sous la forme d'une colonne

$$\Psi = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix}$$

les matrices $\widehat{l_i}$ avec les éléments $(l_i)_{kn} = -i\varepsilon_{ikn}$, seront alors des opérateurs de composantes du moment :

$$\widehat{l_x} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad \widehat{l_y} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \widehat{l_z} = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

On montre sans peine que les relations de commutation pour les matrices $\widehat{l_i}$ des composantes du moment possèdent, comme il se doit, la forme habituelle, c'est-à-dire $[\widehat{l_i}, \widehat{l_k}] = i\varepsilon_{ikn}\widehat{l_n}$; quant à la matrice $\widehat{\mathbf{l}}^2$, elle est égale à $\widehat{\mathbf{l}}^2 = 2 \cdot \widehat{I}$ ($\widehat{I}$ étant la matrice unité).

La fonction d'onde a_k ($k = 1, 2, 3$) en représentation vectorielle et la fonction d'onde c_m ($m = 1, 0, -1$) en représentation l_z sont liées par une transformation unitaire $a_k = \sum_m U_{km} c_m$. La recherche de la matrice unitaire U_{km} est laissée au soin du lecteur.

3.68.

a) La forme la plus générale de la dépendance angulaire de la fonction d'onde d'un système à deux particules de moments $l_1 = l_2 = 1$ est

$$\Psi = a_{ik} n_{1i} n_{2k}, \tag{1}$$

où $\mathbf{n}_1 = \mathbf{r}_1/r_1, \mathbf{n}_2 = \mathbf{r}_2/r_2, a_{ik}$ étant un tenseur quelconque de rang deux muni de neuf composantes indépendantes correspondant aux neufs états indépendants distincts (dans l'espace des variables angulaires) du système.

b) En représentant le tenseur a_{ik} sous la forme

$$a_{ik} = \frac{a_{nn}}{3}\delta_{ik} + \frac{a_{ik} - a_{ki}}{2} + \frac{1}{2}\left(a_{ik} + a_{ki} - \frac{2}{3}a_{nn}\delta_{ik}\right), \tag{2}$$

écrivons la fonction d'onde (1) de la façon suivante :

$$\Psi = C\mathbf{n}_1 \cdot \mathbf{n}_2 + \mathbf{t} \cdot \mathbf{n}_1 \wedge \mathbf{n}_2 + t_{ik} n_{1i} n_{2k}, \tag{3}$$

où

$$C = a_{nn}/3, \qquad t_{ik} = \frac{1}{2}[a_{ik} + a_{ki} - 2C\delta_{ik}],$$
$$2t_l = \varepsilon_{ikl} a_{ik}, \qquad a_{ik} - a_{ki} = 2\varepsilon_{ikl} t_l$$

(t_{ik} est un tenseur symétrique de trace nulle $t_{ii} = 0$).

Compte tenu du résultat du problème 3.57, il n'est pas difficile de montrer que la représentation de la fonction d'onde sous la forme (3) est formée par la somme de trois termes dont chacun correspond à une valeur déterminée $L = 0, 1, 2$ du moment total du système :

$$\Psi_{L=0} = C\mathbf{n}_1 \cdot \mathbf{n}_2, \qquad \Psi_{L=1} = \mathbf{t} \cdot \mathbf{n}_1 \wedge \mathbf{n}_2,$$
$$\Psi_{L=2} = t_{ik} n_{1i} n_{2k} \equiv \frac{1}{2} a_{ik}\left[n_{1i} n_{2k} + n_{1k} n_{2i} - \frac{2}{3}\mathbf{n}_1 \cdot \mathbf{n}_2 \delta_{ik}\right]. \tag{4}$$

L'expression pour $\Psi_{L=0}$ est en accord, tout naturellement, avec le résultat du problème 3.47.

c) Pour que les fonctions d'onde Ψ_L données dans (4) correspondent à un état ayant une valeur donnée M de la projection du moment total sur l'axe z, les composantes du vecteur $t_i(M)$ et du tenseur $t_{ik}(M)$ doivent être choisies sous la forme établie dans 3.60.

En particulier, la fonction d'onde $\Psi_{2,2}$ est dans ce cas de la forme

$$\Psi_{2,2} = -\sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin\theta_1 \sin\theta_2 e^{i\varphi_1} e^{i\varphi_2} = \sqrt{\frac{10\pi}{3}} Y_{11}(\theta_1, \varphi_1) Y_{11}(\theta_2, \varphi_2),$$

c'est-à-dire qu'elle est réellement la fonction propre (non normée) des opérateurs $\widehat{\mathbf{L}}^2$ et $\widehat{L}_z$, correspondant aux valeurs propres $L = 2$ et $M = 2$.

CHAPITRE 4

MOUVEMENT DANS UN CHAMP CENTRAL

4.1. L'opérateur de Hamilton correspondant à l'hamiltonien d'un rotateur plan classique $H = M_z^2/2I$ ($M_z \equiv p_\varphi$ étant la valeur de la composante du moment du rotateur selon l'axe perpendiculaire au plan de rotation) est de la forme

$$\widehat{H} = \frac{\widehat{M_z^2}}{2I} = -\frac{\hbar^2}{2I}\frac{d^2}{d\varphi^2}.$$

La solution de l'équation de Schrödinger stationnaire

$$\widehat{H}\Psi(\varphi) \equiv -\frac{\hbar^2}{2I}\Psi''(\varphi) = E\Psi(\varphi),$$

avec la condition supplémentaire $\Psi(\varphi + 2\pi) = \Psi(\varphi)$, donne les niveaux d'énergie E_m et les fonctions propres normées $\Psi_m(\varphi)$:

$$E_m = \frac{\hbar^2 m^2}{2I}, \qquad \Psi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}, \qquad m = \pm|m|, \tag{1}$$

$|m|$ étant un entier, $|m| = 0, 1, 2, \ldots$ Tous les niveaux d'énergie du rotateur plan, sauf le niveau fondamental $m = 0$, sont doublement dégénérés. Les fonctions propres (1) de l'opérateur $\widehat{H}$ sont aussi fonctions propres de l'opérateur $\widehat{l_z} = -id/d\varphi$. En formant avec ces dernières des combinaisons linéaires ($m \neq 0$)

$$\Psi^{(\pm)}_{|m|}(\varphi) = \frac{\Psi_m(\varphi) \pm \Psi_{-m}(\varphi)}{\sqrt{2}} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\begin{cases} \cos(m\varphi) \\ i\sin(m\varphi) \end{cases},$$

on obtient des fonctions propres $\Psi^{\pm}_{|m|}$ de parité ± 1 (paire et impaire) dans la réflexion des coordonnées par rapport à un axe x (dans le plan de rotation).

4.2. Le problème se résout sans peine si l'on tient compte des solutions obtenues dans le problème 3.15.

Les probabilités non nulles des différentes valeurs de la projection du moment m et de l'énergie E_m, ainsi que leurs moyennes sont

$$w(m) = \frac{n!}{2^n(2n-1)!!}\left[C_n^{\frac{n-m}{2}}\right]^2, \qquad m = n, n-2, \ldots, -n,$$
$$w(E_m) = w(m) + w(-m) = 2w(m), \qquad m = n, n-2, \ldots, 2(1),$$
$$w(E_0) = w(m=0) \neq 0, \qquad \text{seulement pour } n \text{ pair},$$
$$\overline{m} = 0$$
$$\overline{E} = \int_0^{2\pi} \Psi^* \widehat{H} \Psi d\varphi = \frac{\hbar^2 C_n^2}{2I}\int_0^{2\pi} \cos^{2n-2}\varphi\{n^2\cos^2\varphi - n(n-1)\}d\varphi = \frac{n^2\hbar^2}{2I(2n-1)}.$$

4.3. L'hamiltonien d'un rotateur spatial classique vaut $H = \mathbf{M}^2/2I$, l'opérateur de Hamilton a donc la forme $\widehat{H} = \hbar^2\widehat{\mathbf{l}}^2/2I$ ($\mathbf{l}^2$ étant l'opérateur carré du moment).

Les niveaux d'énergie et les fonctions propres normées de l'hamiltonien sont

$$E_l = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2I}, \qquad \Psi_{lm}(\theta,\varphi) = Y_{lm}(\theta,\varphi),$$
$$l = 0, 1, \ldots; \qquad m = l, l-1, \ldots, -l.$$

Les Y_{lm} sont les harmoniques sphériques. Chaque niveau d'énergie du rotateur est dégénéré $(2l+1)$ fois (le niveau fondamental $l = 0$ n'est pas dégénéré). La fonction d'onde a une parité égale à $(-1)^l$.

4.4.

a) La projection du moment possède une valeur déterminée $m = 0$. En écrivant la fonction d'onde sous la forme

$$\Psi = C\cos^2\theta = \frac{\sqrt{4\pi}C}{3}\left[\frac{1}{\sqrt{4\pi}} - \frac{1-3\cos^2\theta}{\sqrt{4\pi}}\right]$$

et compte tenu de la forme explicite des harmoniques sphériques Y_{00} et Y_{20}[1], on obtient sans peine que dans l'état indiqué le moment du rotateur ne peut prendre que deux valeurs : $l = 0$ et $l = 2$ avec les probabilités

$$w(l=0) = 5/9, \qquad w(l=2) = 4/9\ ; \qquad \overline{E} = \frac{\hbar^2\overline{\widehat{\mathbf{l}}^2}}{2I} = \frac{4\hbar^2}{3I}.$$

b) La projection du moment possède la valeur $m = 2$. La fonction de distribution des valeurs du moment l du rotateur (et de son énergie) est fournie par l'expression (3) du problème 3.16. La valeur moyenne de l'énergie du rotateur (comme d'ailleurs celle de $\overline{\widehat{\mathbf{l}}^2}$) s'avère infinie, ce qui signifie que l'état considéré du rotateur ne peut être réalisé "expérimentalement".

---

1 $Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$, $Y_{20} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(1 - 3\cos^2\theta)$.

4.5. Comme les opérateurs

$$\widehat{H}_1 = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{kx^2}{2}, \qquad \widehat{H}_2 = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{ky^2}{2}$$

commutent entre eux et avec l'hamiltonien de l'oscillateur plan $\widehat{H} = \widehat{H}_1 + \widehat{H}_2$, les fonctions propres de l'hamiltonien $\widehat{H}$, constituant un système complet, peuvent également être considérées comme des fonctions propres des opérateurs $\widehat{H}_1$ et $\widehat{H}_2$. Compte tenu de cette circonstance, ainsi que de la forme bien connue des fonctions propres et des niveaux d'énergie de l'oscillateur linéaire ordinaire, on obtient les fonctions d'onde normées des états stationnaires et les niveaux d'énergie de l'oscillateur plan sous la forme

$$\Psi_{n_1 n_2}(x,y) = \Psi^{\text{osc}}_{n_1}(x)\Psi^{\text{osc}}_{n_2}(y), \qquad E_N = \hbar\omega(N+1), \qquad N = 0,1,\ldots,$$
$$\omega = \sqrt{k/m}, \qquad N = n_1 + n_2\ ; \qquad n_1 = 0,1,2,\ldots, \qquad n_2 = 0,1,2,\ldots$$

Au niveau d'énergie E_N correspondent les fonctions propres linéairement indépendantes $\Psi_{n_1 n_2}$ avec $n_1 = 0,1,\ldots,N$ (et $n_2 = N, N-1,\ldots,0$), c'est-à-dire que ce niveau de l'oscillateur est dégénéré $(N+1)$ fois.

4.6. En utilisant la forme explicite de la fonction d'onde $\Psi^{\text{osc}}_n(x)$, on peut écrire la fonction d'onde Ψ_{11} sous la forme

$$\Psi_{11} = \frac{2xy}{\sqrt{\pi}a^3}\exp\left(-\frac{x^2+y^2}{2a^2}\right) = \frac{2\cos\varphi\sin\varphi}{\sqrt{\pi}a^3}\rho^2\exp\left(-\frac{\rho^2}{2a^2}\right) \tag{1}$$

(ρ, φ étant les coordonnées polaires). Comme $2\cos\varphi\sin\varphi = \sin 2\varphi = (\mathrm{e}^{2i\varphi} - \mathrm{e}^{-2i\varphi})/2i$ on déduit de (1) que dans l'état décrit par la fonction d'onde Ψ_{11} la projection du moment sur la direction perpendiculaire au plan des oscillations ne peut prendre que deux valeurs $m = \pm 2$ avec la même probabilité égale à $1/2$.

4.7. L'hamiltonien en variables cylindriques a la forme

$$\widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right] + U(\rho).$$

Les opérateurs $\widehat{p}_z$ et $\widehat{l}_z$ commutent entre eux et avec l'hamiltonien ; aussi existe-t-il un système complet de fonctions qui constituent les fonctions propres de ces opérateurs et qui prennent la forme

$$\Psi_{n_\rho m p_z} = \frac{1}{\sqrt{4\pi^2\hbar}}\exp\left[i\left(\frac{p_z z}{\hbar} + m\varphi\right)\right]\psi_{n_\rho|m|}(\rho), \tag{1}$$

où $\psi_{n_\rho|m|}$ est la solution de l'équation de Schrödinger radiale pour un mouvement "transversal" de la particule

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[-\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\rho\frac{d}{d\rho} + \frac{m^2}{\rho^2}\right]\psi_{n_\rho|m|} + U(\rho)\psi_{n_\rho|m|} = E_{n_\rho|m|}\psi_{n_\rho|m|},$$

définissant également le spectre d'énergie de ce mouvement "transversal" $E_{n_\rho|m|}$; n_ρ étant le nombre quantique radial qui coïncide avec le nombre de zéros de la fonction d'onde radiale (sans compter les zéros en $\rho = 0$ et en $\rho = \infty$).

A la fonction d'onde (1) correspond l'énergie de la particule

$$E_{n_\rho|m|p_z} = E_{n_\rho|m|} + p_z^2/2\mu.$$

A chaque niveau d'énergie du spectre discret du mouvement "transversal" $E_{n_\rho|m|}$ (ou plus brièvement, à un niveau d'un potentiel à deux dimensions $U(\rho)$) correspond soit une seule fonction propre (pour $m = 0$), soit deux (pour $m \neq 0$). Si, par contre, apparaît une dégénérescence accidentelle (c'est-à-dire que pour des valeurs distinctes du couple de nombres n_ρ et $|m|$ les niveaux d'énergie coïncident), la multiplicité des niveaux peut avoir d'autres valeurs (voir, par exemple, le problème 4.45)

Le niveau fondamental dans un potentiel bidimensionnel $U(\rho)$ possède des nombres quantiques $n_\rho = 0, m = 0$ et n'est pas dégénéré. Le premier niveau excité peut posséder les nombres quantiques suivants : soit $n_\rho = 0, |m| = 1$, soit $n_\rho = 1, m = 0$ (pour une dégénérescence accidentelle il peut s'avérer que les niveaux correspondant aux nombres quantiques indiqués coïncident). Aucun autre nombre quantique ne peut apparaître à la première excitation. Ainsi la multiplicité $g = 3$ du premier niveau excité est, en principe, possible, alors que la valeur $g = 4$ est impossible.

4.8. Compte tenu de la commutativité des opérateurs $\widehat{H}$ et $\widehat{l}_z$, on peut représenter les fonctions propres de l'hamiltonien sous la forme $\psi_{n_\rho m}(\rho, \varphi) = \psi_{n_\rho|m|}(\rho)e^{im\varphi}$, avec

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho} + \kappa^2_{n_\rho|m|} - \frac{m^2}{\rho^2}\right]\psi_{n_\rho|m|} = 0, \qquad \rho < a, \tag{1}$$

$$\psi_{n_\rho|m|}(\rho = a) = 0, \qquad \kappa_{n_\rho|m|} = \sqrt{2\mu E_{n_\rho|m|}/\hbar^2}\ ; \tag{2}$$

n_ρ étant un nombre quantique radial égal au nombre de zéros de la fonction $\psi_{n_\rho|m|}(\rho)$ sans compter les zéros en $\rho = a$ et $\rho = 0$ (pour $m \neq 0$).

La solution de l'équation (1) ayant un bon comportement pour $\rho \to 0$ (en fait ne divergeant pas pour $\rho \to 0$) est

$$\psi_{n_\rho|m|}(\rho) = CJ_m(\kappa_{n_\rho|m|}\rho), \tag{3}$$

où J_m est la fonction de Bessel. La condition à la limite (2) définit le spectre d'énergie de la particule :

$$E_{n_\rho|m|} = \hbar^2\alpha^2_{n_\rho+1,m}/2\mu a^2, \tag{4}$$

où $\alpha_{km} > 0$ est la $k^{\text{ème}}$ racine de la fonction de Bessel $J_m(\alpha_{km}) = 0$; en particulier, on a $\alpha_{10} \approx 2,40, \alpha_{11} \approx 3,83$ et donc, $E_{00} \approx 2,88\frac{\hbar^2}{\mu a^2}$ et $E_{01} \approx 7,33\frac{\hbar^2}{\mu a^2}$.

4.9. Sans fixer pour le moment la valeur m, écrivons la fonction propre de l'hamiltonien comme $\Psi_{n_\rho m} = \chi_{n_\rho|m|}e^{im\varphi}$ où $\chi_{n_\rho|m|}$ satisfait à l'équation ($E_{n_\rho|m|} < 0$)

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho} - \frac{m^2}{\rho^2}\right]\chi_{n_\rho|m|} + U(\rho)\chi_{n_\rho|m|} = E_{n_\rho|m|}\chi_{n_\rho|m|}. \tag{1}$$

Compte tenu de la forme du potentiel et des conditions aux limites de $\chi_{n_\rho|m|}$ pour $\rho \to 0$ et $\rho \to \infty$, on aboutit à la solution de l'équation (1) :

$$\chi_{n_\rho|m|} = \begin{cases} C_1 J_{|m|}\left(\sqrt{2\mu(U_0 - |E_{n_\rho|m|}|)/\hbar^2}\rho\right), & \rho < a, \\ C_2 K_{|m|}\left(\sqrt{2\mu|E_{n_\rho|m|}|/\hbar^2}\rho\right), & \rho > a, \end{cases} \tag{2}$$

où $K_{|m|}$ est la fonction de MacDonald.

Les conditions de continuité de la fonction d'onde (2) et de sa dérivée au point $\rho = a$ conduisent à la relation

$$\sqrt{|E_{n_\rho|m|}|}\; J_{|m|}\left(\sqrt{2\mu(U_0 - |E_{n_\rho|m|}|)a^2/\hbar^2}\right)\; K'_{|m|}\left(\sqrt{2\mu|E_{n_\rho|m|}|a^2/\hbar^2}\right) =$$
$$= \sqrt{U_0 - |E_{n_\rho|m|}|}\; J'_{|m|}\left(\sqrt{2\mu(U_0 - |E_{n_\rho|m|}|)a^2/\hbar^2}\right)\; K_{|m|}\left(\sqrt{2\mu|E_{n_\rho|m|}|a^2/\hbar^2}\right), \tag{3}$$

définissant les niveaux d'énergie du spectre discret ($-U_0 < E_{n_\rho|m|} < 0$).

Dans le cas d'un puits peu profond $\xi = \mu a^2 U_0/\hbar^2 \ll 1$, les arguments des fonctions cylindriques dans la relation (3) sont petits. Pour $m = 0$, compte tenu des formules

$$J_0(x) \approx 1, \qquad J'_0(x) \approx -x/2, \qquad K_0(x) \approx \ln(2/\gamma x), \qquad K'_0(x) \approx -1/x,$$

valable pour $x \ll 1$ ($\gamma = 1,781$ est constante d'Euler), la relation (3) prend la forme

$$\mu(U_0 - |E_{n_\rho 0}|)a^2\hbar^{-2} \ln\sqrt{2\hbar^2/\mu a^2|E_{n_\rho 0}|/\gamma} \approx 1. \tag{4}$$

Cette dernière équation n'admet qu'une racine E_{00} :

$$E_{00} \approx -\frac{2\hbar^2}{\gamma\mu a^2}\exp\left(-\frac{2\hbar^2}{\mu a^2 U_0}\right) \equiv -\frac{2}{\gamma}\frac{U_0}{\xi}\exp(-2/\xi), \tag{5}$$

qui s'obtient sans peine si l'on remarque que (voir l'équation (4)) $|E_{n_\rho 0}| \ll U_0$ et que l'on néglige $|E_{n_\rho 0}|$ dans le cofacteur devant le logarithme.

Pour $m \neq 0$, les états liés dans un puits peu profond sont absents car la relation (3) n'admet pas de solution (voir problème suivant). Ainsi, dans un puits peu profond à deux dimensions, comme dans le cas unidimensionnel (voir problème 2.8), il n'y a qu'un état lié. L'énergie de cet état est petite comparée à la profondeur du puits :

$$|E_{00}|/U_0 \approx \frac{2}{\gamma}\frac{1}{\xi}\exp(-2/\xi) \ll 1$$

(comparer à la valeur correspondante $|E_0|/U_0 \sim \xi \ll 1$ du cas unidimensionnel).

4.10. Les niveaux d'énergie des états liés s'obtiennent à partir de la solution de l'équation transcendante (3) obtenue dans le problème précédent.

Dans le cas d'un puits peu profond $\xi = \mu a^2 U_0/\hbar^2 \ll 1$, compte tenu de la forme connue des fonctions $K_m(z)$ et $K'_m(z)$ pour $z \to 0$ ($m \neq 0$), on montre sans peine que l'équation mentionnée n'a pas de racines (le premier et le second membres de

l'équation sont de signes opposés), autrement dit les états liés n'existent pas (pour $m \neq 0$). Ces états n'apparaissent qu'avec un approfondissement suffisant du puits. Pour obtenir les paramètres du puits pour lesquels il y a des états liés, il faut noter que lors de l'apparition d'un niveau, son énergie est très faible. En envisageant ce cas, écrivons l'équation (3) du problème précédent sous la forme

$$\frac{xJ'_{|m|}(x)}{J_{|m|}(x)} \approx -|m|, \qquad x \equiv \sqrt{\frac{2\mu(U_0 - |E_{0|m|}|)a^2}{\hbar^2}}. \tag{1}$$

(on a tenu compte du fait que $K_m(z) \approx \frac{1}{2}(|m|-1)!(\frac{z}{2})^{-|m|}$ pour $z \to 0$).

A partir de (1), on peut conclure que la condition

$$\sqrt{2\xi}J'_{|m|}(\sqrt{2\xi}) + |m|J_{|m|}(\sqrt{2\xi}) = 0 \tag{2}$$

définit les paramètres du puits pour lesquels apparaissent des états liés avec une projection du moment $m \neq 0$.

La condition (2) est équivalente à

$$J_{|m|-1}(\sqrt{2\xi}) = 0. \tag{3}$$

En particulier, compte tenu de la valeur $x_1 \approx 2,40$ de la première racine de la fonction de Bessel $J_0(x)$, on obtient la condition d'existence dans ce puits d'états liés avec $|m| = 1$:

$$U_0 \geq 2,88\frac{\hbar^2}{\mu a^2} \qquad (\sqrt{2\xi} \geq x_1). \tag{4}$$

Notons que les conditions (2) et (3) définissent non seulement les paramètres du puits pour lesquels apparaît le premier état lié avec $m \neq 0$ (la plus petite racine première de l'équation (3)), mais sont également celles d'apparition de nouveaux états liés avec $m \neq 0$ à mesure que le puits s'approfondit.

4.11. Le problème se résout de façon analogue à 4.9.

La fonction $\chi_{n_\rho|m|}(\rho)$ est de la forme

$$\chi_{n_\rho|m|}(\rho) = \begin{cases} C_1 I_m(\kappa_{n_\rho m}\rho) & (\kappa_{n_\rho m} = \sqrt{2\mu|E_{n_\rho|m|}|/\hbar^2}), \quad \rho < a, \\ C_2 K_m(\kappa_{n_\rho m}\rho), & \rho > a. \end{cases} \tag{1}$$

Les conditions de raccordement de la fonction (1) au point $\rho = a$, absolument analogues à celles de raccordement obtenues avec un potentiel δ dans le cas unidimensionnel (voir problème 2.10), aboutissent à la relation

$$x[K'_m(x)I_m(x) - K_m(x)I'_m(x)] = -\frac{2\mu\alpha a}{\hbar^2}K_m(x)I_m(x) \qquad (x \equiv \kappa_{n_\rho m}a), \tag{2}$$

définissant le spectre d'énergie de la particule. Compte tenu de la valeur du wronskien $I_m(x)K'_m(x) - I'_m(x)K_m(x) = -1/x$, écrivons (2) sous la forme

$$K_m(\kappa_{n_\rho m}a)I_m(\kappa_{n_\rho m}a) = \hbar^2/2\mu\alpha a. \tag{3}$$

On peut constater que le premier membre de l'équation (3) $F_m(z) \equiv K_m(z)I_m(z)$, avec $z = \kappa_{n_\rho m}a \geq 0$, est une fonction de z monotone décroissante : $F_m(z) \to 0$ pour $z \to \infty$ (car dans ce cas $I_m(z) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi z}}e^z$, $K_m(z) \approx \sqrt{\frac{\pi}{2z}}e^{-z}$). Démontrons la monotonie de $F_m(z)$. Supposons que $F_m(z)$ ne soit pas monotone. Dans ce cas le graphe de cette fonction pour des valeurs de z suffisamment grandes a la forme représentée sur la figure 22, et pour la valeur du second membre de (3) égale à f_0, l'équation (3) aura au moins deux racines : z_1 et z_2. Cela signifie que dans le potentiel étudié il existe deux niveaux de même valeur m, la dépendance radiale des fonctions d'onde correspondantes étant définie par la formule (1).

Mais ces deux niveaux ne peuvent exister, car les fonctions propres de l'hamiltonien qui leur correspondent ne seraient pas orthogonales entre elles (en effet, la fonction d'onde de la forme (1) pour tout $\kappa_{n_\rho m}$ a un signe déterminé, les fonctions $I_m(z)$ et $K_m(z)$ n'ont pas de zéros, et deux de ces fonctions pour des $\kappa_{n_\rho m}$ différents ne peuvent être orthogonales). Donc, $F_m(z)$ est une fonction de z qui décroît de façon monotone ($z \geq 0$).

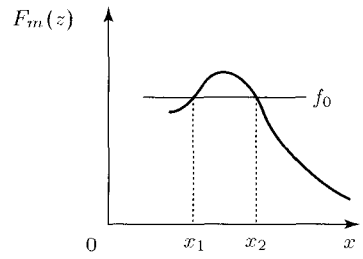

Figure 22

Lorsque $z \to 0$, $F_0(z) \to \infty$ car

$$I_0(z) \approx 1 + \frac{z^2}{4}, \qquad K_0(z) \approx \ln\frac{2}{\gamma z}. \tag{4}$$

Les graphes des fonctions du premier et du second membres de l'équation (3) sont représentés sur la figure 23, qui montre que pour $m = 0$ il n'y a qu'un (et seulement un) niveau du spectre discret.

Pour un puits peu profond $\xi = \mu\alpha a/\hbar^2 \ll 1$ (dans ce cas le second membre de (3) est grand) on trouve selon (3) et (4)

$$\ln\frac{2}{\gamma\kappa_{00}a} \approx \frac{1}{2\xi},$$

c'est-à-dire

$$E_{00} \approx -\frac{2\hbar^2}{\gamma^2\mu a^2}e^{-1/\xi} \quad \left(|E_{00}| \ll \frac{\hbar^2}{\mu a^2}\right).$$

Pour un puits profond $\xi \gg 1$, en utilisant les expressions asymptotiques des fonctions cylindriques, on obtient $E_{00} \approx -\mu\alpha^2/2\hbar^2$.

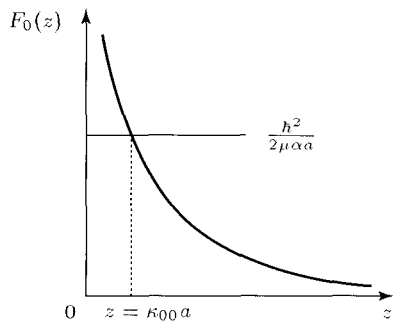

Figure 23

4.12. Le problème se résout de façon analogue au précédent. La différence ne se manifeste que dans le fait que pour $m \neq 0$ la valeur maximale de la fonction $F_m(z) = I_m(z)K_m(z)$ vaut $I_m(0)K_m(0) = 1/2|m|$ (voir fig. 24).

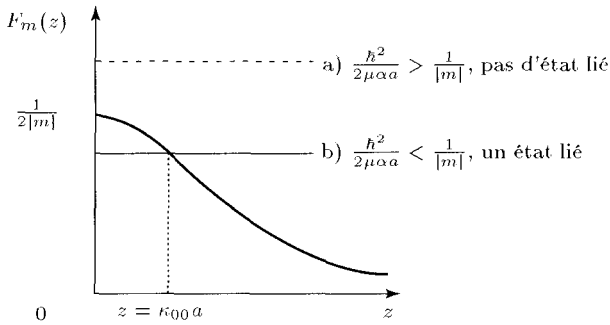

Figure 24

L'équation (3) du problème précédent n'a qu'une seule racine (et rien qu'une seule) dans le cas où la condition

$$\mu\alpha a/\hbar^2 > |m|$$

est remplie. Dans le cas contraire, les états liés pour $m \neq 0$ n'existent pas.

4.13. L'équation de Schrödinger pour la partie radiale de la fonction propre $\Psi_{n_\rho m} = \chi_{n_\rho|m|}(\rho)e^{im\varphi}$ de l'hamiltonien :

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho} - \frac{m^2}{\rho^2}\right]\chi_{n_\rho|m|} - \frac{\alpha}{\rho}\chi_{n_\rho|m|} = E_{n_\rho|m|}\chi_{n_\rho|m|},$$

après le changement de variable $\chi_{n_\rho|m|} = u_{n_\rho m}/\sqrt{\rho}$, prend la forme

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{m^2 - 1/4}{\rho^2}\right]u_{n_\rho m} - \frac{\alpha}{\rho}u_{n_\rho m} = E_{n_\rho|m|}u_{n_\rho m}. \tag{1}$$

Cette équation avec les conditions aux limites $u_{n_\rho m}(0) = 0$, $u_{n_\rho m}(\infty) = 0$ est absolument analogue à celle obtenue lors de la recherche de la fonction d'onde radiale $u_{n_r l}$ et des niveaux d'énergie d'une particule dans un champ coulombien $U(r) = -\alpha/r$ si l'on écrit la fonction propre de l'hamiltonien sous la forme $\Psi_{n_r lm} = Y_{lm}u_{n_r l}(r)/r$. La différence ne se manifeste que dans la substitution du facteur $l(l+1)$ (dans l'énergie centrifuge) par $m^2 - 1/4$. Compte tenu de l'expression bien connue

$$E_{n_r l} = -\frac{\mu\alpha^2}{2\hbar^2(n_r + l + 1)^2} \tag{2}$$

des niveaux d'énergie d'une particule dans un champ coulombien, en remplaçant, comme dit plus haut, $l + 1/2$ par $|m|$, on obtient le spectre d'énergie de la particule dans le potentiel à deux dimensions $U(\rho) = -\alpha/\rho$:

$$E_{n_\rho|m|} = -\frac{\mu\alpha^2}{2\hbar^2(n_\rho + |m| + 1/2)^2} \tag{3}$$

L'expression (3) montre que dans le potentiel considéré, comme dans le potentiel coulombien, il existe une dégénérescence accidentelle, car l'énergie ne dépend que de la combinaison $n_\rho + |m|$ des nombres quantiques n_ρ et m. Si l'on introduit le nombre quantique $N = n_0 + |m| + 1$ (constituant l'analogue du nombre quantique principal $n = n_\rho + l + 1$ dans le champ coulombien), l'expression (3) peut être alors écrite sous la forme

$$E_N = -\frac{\mu\alpha^2}{2\hbar^2(N - 1/2)^2}, \qquad N = 1, 2, \ldots \tag{4}$$

Le niveau d'énergie E_N possède manifestement la multiplicité de dégénérescence

$$g(N) = 1 + \sum_{|m|=1}^{N-1} 2 = 2N - 1.$$

4.14. Comme les fonctions données présentent beaucoup d'analogies avec la fonction d'onde de l'état fondamental – elles correspondent à la valeur $m = 0$ et n'ont pas de zéros dans l'intervalle $0 < \rho < a$ – on peut s'attendre à ce que la valeur moyenne de l'énergie de la particule dans les états indiqués soit assez proche, par excès, de l'énergie de l'état fondamental.

a) La fonction d'onde est normée à l'unité pour $|A|^2 = 6/\pi a^4$. On a :

$$\overline{T} = \overline{\frac{p^2}{2\mu}} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\int \Psi^*(\rho)\left[\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\rho\frac{d}{d\rho}\Psi(\rho)\right]2\pi\rho d\rho = \frac{\pi\hbar^2}{\mu}\int \rho\left|\frac{d}{d\rho}\Psi(\rho)\right|^2 d\rho = \frac{3\hbar^2}{\mu a^2}.$$

Comme la fonction d'onde pour $\rho \geq a$ est identiquement nulle, vu qu'un puits de profondeur infinie peut être considéré comme la limite d'un puits de profondeur finie, on a $\overline{U(\rho)} = 0$. On trouve donc

$$E_0 \equiv E_{n_\rho=0,m=0} \approx \overline{E} = \frac{3\hbar^2}{\mu a^2}. \tag{1}$$

b) On obtient $|B|^{-2} = (\pi^2 - 4)a^2/2\pi$ à partir de la normalisation de la fonction d'onde. On obtient finalement :

$$\overline{U(\rho)} = 0, \qquad \overline{T} = \frac{\pi^2(\pi^2+4)}{8(\pi^2-4)}\frac{\hbar^2}{\mu a^2}, \qquad E_0 \approx \overline{E} = \overline{T} \approx 2,92\frac{\hbar^2}{\mu a^2}. \tag{2}$$

Les valeurs approchées de (1) et (2) pour l'énergie E_0 de l'état fondamental de la particule doivent être comparées à la valeur exacte $E_0 = 2,88\frac{\hbar^2}{\mu a^2}$ (problème 4.8).

4.15. D'après l'énoncé, la fonction d'onde d'une particule avec les nombres quantiques $n_\rho = 0, m = \pm 1$ est approximée par la fonction de la forme

$$\Psi_{0,\pm 1} = C\rho(a-\rho)\exp(\pm i\varphi). \tag{1}$$

Cette fonction a beaucoup de points communs avec la fonction d'onde exacte : comportement correct pour $\rho \to 0$, absence de zéros de la partie radiale dans l'intervalle $0 < \rho < a$, condition aux limites pour $\rho = a$ remplie. Aussi peut-on s'attendre à ce que la valeur moyenne de l'énergie de la particule dans l'état indiqué soit voisine de la valeur exacte E_{01} de l'énergie du premier état excité avec $|m| = 1$, en accord avec le principe de la méthode variationnelle (il faut rappeler que les fonctions d'onde des états avec $|m| = 1$ sont orthogonales aux fonctions d'onde correspondant à $m = 0$).

La normalisation de la fonction d'onde (1) à l'unité donne $|C|^2 = 30/\pi a^6$. On a donc

$$\overline{T} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\int\int \Psi^*\left(\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)\Psi\rho d\rho d\varphi =$$

$$= \frac{\hbar^2}{2\mu}\int\int\left[\left|\frac{\partial\Psi}{\partial\rho}\right|^2 + \frac{1}{\rho^2}|\Psi|^2\right]\rho d\rho d\varphi = \frac{15}{2}\frac{\hbar^2}{\mu a^2}.$$

Comme $\overline{U(\rho)} = 0$, on obtient pour la valeur approchée de l'énergie E_{01} (calculée par la méthode variationnelle la plus simple)

$$E_{01} \approx \overline{E} = \overline{T} = 7,50\frac{\hbar^2}{\mu a^2}, \tag{2}$$

valeur qui doit être comparée à la valeur exacte $E_{01} = 7,33\frac{\hbar^2}{\mu a^2}$ (problème 4.8).

4.16. La fonction donnée dans l'énoncé est normée à l'unité pour $|C|^2 = 2\alpha^2/\pi$. Alors,

$$\overline{T} = \frac{\hbar^2}{2\mu}\int\left|\frac{d}{d\rho}\Psi(\rho)\right|^2 2\pi\rho d\rho = \frac{\hbar^2\alpha^2}{2\mu},$$

$$\overline{U(\rho)} = \frac{\overline{k\rho^2}}{2} = \frac{3}{4}\frac{k}{\alpha^2}, \qquad \overline{E}(\alpha) = \overline{T} + \overline{U} = \frac{\hbar^2\alpha^2}{2\mu} + \frac{3}{4}\frac{k}{\alpha^2}.$$

En minimisant la grandeur $\overline{E}(\alpha)$ par rapport à α, on trouve une valeur approchée de l'énergie de l'état fondamental :

$$E_0 \approx \min\overline{E(\alpha)} = \sqrt{3/2}\hbar\omega = 1,22\hbar\omega.$$

La valeur exacte est $E_0 = \hbar\omega$.

4.17. La fonction de Green satisfait à l'équation ($\kappa = \sqrt{-2\mu E/\hbar^2} > 0$)

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}(\Delta - \kappa^2)G_E(\boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') = \delta(\boldsymbol{\rho} - \boldsymbol{\rho}'). \tag{1}$$

On introduit la variable $\tilde{\boldsymbol{\rho}} = \boldsymbol{\rho} - \boldsymbol{\rho}'$ et compte tenu de ce que $\Delta_{\tilde{\boldsymbol{\rho}}} = \Delta_{\boldsymbol{\rho}}$ (vu que $\Delta = \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2$), l'équation (1) s'écrit sous la forme

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}(\Delta_{\tilde{\boldsymbol{\rho}}} - \kappa^2)G_E(\tilde{\boldsymbol{\rho}}) = \delta(\tilde{\boldsymbol{\rho}}). \tag{2}$$

D'après (2) la fonction de Green des variables $\tilde{\boldsymbol{\rho}}$, $\boldsymbol{\rho}'$ ne dépend pas de $\boldsymbol{\rho}'$ et, comme on le voit sans peine, compte tenu de la symétrie axiale de l'équation (2), elle n'est fonction que de la grandeur $\tilde{\rho} = |\boldsymbol{\rho} - \boldsymbol{\rho}'|$. La solution de l'équation (2) pour $\tilde{\boldsymbol{\rho}} \neq 0$ est de la forme

$$G_E(\tilde{\rho}) = C_1 I_0(\kappa\tilde{\rho}) + C_2 K_0(\kappa\tilde{\rho}).$$

La condition de décroissance de la fonction de Green pour $\rho \to \infty$ donne $C_1 = 0$. Pour déterminer C_2, intégrons les deux membres de l'équation (2) sur un disque de rayon ε et de centre $\tilde{\rho} = 0$. Pour le second membre, on trouve l'unité. L'intégration du second terme du premier membre de l'équation donne zéro pour $\varepsilon \to 0$. L'intégrale du premier terme est transformée à l'aide du théorème d'Ostrogradski-Gauss :

$$\int \Delta G dV = \oint \boldsymbol{\nabla} G \cdot d\mathbf{S}.$$

Dans le cas bidimensionnel[2] $dV \equiv dS$, $d\mathbf{S} \equiv d\mathbf{l} = \mathbf{n}dl$.

Vu que, pour $x \to 0$, $K_0(x) \approx \ln 2/\gamma x$, $\boldsymbol{\nabla} K_0(\kappa\rho) \approx -\boldsymbol{\rho}/\rho^2$ pour $\rho \to 0$, et après intégration il vient $\frac{\pi\hbar^2}{\mu}C_2 = 1$. L'expression finale de la fonction de Green est donc

$$G_E(\boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') = \mu K_0(\kappa|\boldsymbol{\rho} - \boldsymbol{\rho}'|)/\pi\hbar^2.$$

Le fait que la fonction de Green dépende uniquement de $|\boldsymbol{\rho} - \boldsymbol{\rho}'|$ est la conséquence de l'homogénéité et de l'isotropie de l'espace (dans le cas présent, du plan) pour les particules libres.

4.18. Une étude absolument analogue à celle menée dans le problème précédent, aboutit à la forme suivante des fonctions de Green :

$$G_E^{(\pm)}(\boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') = \pm i\frac{\mu}{2\hbar^2}H_0^{(1,2)}(\kappa|\boldsymbol{\rho} - \boldsymbol{\rho}'|), \qquad \kappa = \sqrt{2\mu E/\hbar^2} > 0,$$

où $H_0^{(1,2)}(x)$ est la fonction de Hankel.

4.19. La fonction de Green satisfait à l'équation ($\kappa = \sqrt{2IE/\hbar^2}$)

$$-\frac{\hbar^2}{2I}\left(\frac{d^2}{d\varphi^2} + \kappa^2\right)G_E(\varphi, \varphi') = \delta(\varphi - \varphi'). \tag{1}$$

A partir de considérations de symétrie, il s'ensuit de façon évidente que G_E est une fonction de la forme $G_E = G_E(|\varphi - \varphi'|)$; il résulte de l'équation (1) que pour $\varphi \neq \varphi'$

$$G_E = C\cos[\kappa|\varphi - \varphi'| + \alpha].$$

La valeur $C = I/(\kappa\hbar^2 \sin\kappa\pi)$ se déduit de la condition de raccordement de la fonction G_E au point $\varphi = \varphi'$ (comparer à la solution du problème 2.36). α se détermine à partir des conditions d'égalité de la fonction de Green et de sa dérivée aux points $\varphi - \varphi' = \pm\pi$ correspondant au même point de l'espace[3] ; on trouve $\alpha = -\kappa\pi$.

Donc la fonction de Green a la forme

$$G_E = \frac{I\cos[\kappa|\varphi - \varphi'| - \kappa\pi]}{\kappa\hbar^2 \sin\kappa\pi}.$$

La fonction de Green G_E présente des pôles aux points $\kappa = \pm m$ (m étant des entiers, $m = 0, 1, 2, \ldots$), autrement dit aux points $E_m = \hbar^2 m^2/2I$ du plan de la variable E, de sorte que les positions des pôles coïncident avec les valeurs des niveaux d'énergie du rotateur.

---

2 Notons que le vecteur unitaire $\mathbf{n}$ de la "normale extérieure" est perpendiculaire au contour d'intégration ! Dans le problème considéré

$$d\mathbf{l} = \mathbf{n}dl = \frac{\boldsymbol{\rho}}{\rho}\rho d\varphi = \boldsymbol{\rho}d\varphi.$$

3 Il est clair que ces conditions sont équivalentes à l'égalité $G_E(\varphi, \varphi') = G_E(\varphi + 2\pi, \varphi')$.

4.20. Si l'on représente la fonction propre de l'hamiltonien d'une particule dans un champ central sous la forme $\Psi_{n_r lm} = R_{n_r l}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)/r$, alors les niveaux d'énergie $E_{n_r l}$ et la partie radiale $R_{n_r l}$ de la fonction d'onde se définissent à partir de la solution de l'équation

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}U(r)\right] R_{n_r l} = E_{n_r l} R_{n_r l} \tag{1}$$

avec les conditions aux limites $R_{n_r l}(0) = 0$ et $R_{n_r l}(\infty) = 0$.

a) L'équation (1) prend une forme absolument analogue à l'équation de Schrödinger à une dimension dans le potentiel

$$\tilde{U}(x) = \begin{cases} U(x) + \hbar^2 l(l+1)/(2\mu x^2), & x > 0, \\ \infty, & x < 0, \end{cases}$$

et comme on sait [1] que dans le cas unidimensionnel, la fonction propre de l'hamiltonien correspondant au $N^{\text{ème}}$ niveau (à mesure que l'énergie croît) possède $N-1$ zéros (sans compter le zéro correspondant à $x \to \infty$ et celui correspondant à la limite de la paroi impénétrable où la fonction d'onde doit être nulle), on peut affirmer que $E_{n_r l}$ augmente pour un l fixé et un n_r croissant. Le niveau le plus bas (pour un l donné) correspond à la valeur $n_r = 0$.

b) En assimilant de façon formelle $E_{n_r l}$ pour un n_r donné à une fonction de l qui varie de façon continue (de sorte que cette fonction n'acquiert un sens physique (une valeur du niveau d'énergie) que pour $l = 0, 1, 2, \ldots$), on a, sur la base du résultat obtenu au problème 1.28 et appliqué à l'équation (1),

$$\frac{\partial E_{n_r l}}{\partial l} = \overline{\frac{\partial \hat{H}}{\partial l}} = \overline{\frac{\hbar^2(2l+1)}{2\mu r^2}} > 0,$$

ce qui démontre l'accroissement de la grandeur $E_{n_r l}$ avec l'augmentation de l (pour une valeur fixée de n_r).

4.21.

a) Il ne peut y avoir de niveaux doublement dégénérés (notons qu'il s'agit de particules sans spin).

b) Comme les nombres quantiques de l'état fondamental sont $n_r = 0$, $l = 0$, le premier niveau excité, selon le problème précédent, correspond soit à $n_r = 1$, $l = 0$ (le niveau non dégénéré), soit à $n_r = 0$, $l = 1$ (multiplicité égale à 3). La valeur des nombres quantiques du premier état excité dépend de la forme du champ $U(r)$. Enfin, dans le cas d'une dégénérescence accidentelle les grandeurs $E_{n_r l}$ pour $n_r = 1, l = 0$ et $n_r = 0, l = 1$ peuvent être les mêmes. Dans ce cas on a une dégénérescence quadruple du niveau. La valeur de la multiplicité du premier niveau excité est donc égale à 1, 3 ou 4.

c) Au niveau d'énergie d'une particule dans un champ central avec la multiplicité $g = 7$ correspondent les états ayant une valeur déterminée du moment $l = 3$.

Si $g = 9$, deux cas se présentent : soit le niveau donné correspond à des états de la particule ayant la valeur $l = 4$ du moment et le niveau est alors pair, soit, dans le cas d'une dégénérescence accidentelle, ce niveau correspond à des valeurs du moment de la particule $l = 0, 1, 2$ (et le niveau ne présente pas de parité déterminée). Ce dernier cas a lieu, par exemple, dans un champ coulombien.

4.22.

a) Compte tenu du résultat du problème 4.20 sur la nature de la variation de $E_{n_r l}$ avec l'accroissement de l, on voit clairement que, indépendamment de la forme du potentiel $U(r)$, pour le $N^{\text{ème}}$ niveau du spectre discret, la valeur du moment de la particule ne peut dépasser $l_{\max} = N - 1$ (de plus, si $l = l_{\max}$, alors $n_r = 0$).

b) La valeur maximale de la multiplicité du niveau s'obtient dans le cas où ce niveau correspond à des états de la particule ayant des valeurs du moment allant de $l = 0$ à $l = l_{\max} = N - 1$ et vaut

$$g_{\max}(N) = \sum_{l=0}^{N-1} (2l + 1) = N^2 \tag{1}$$

(notons que les niveaux avec les mêmes valeurs de n_r (ou de l) et différentes valeurs de $l(n_r)$ ne peuvent évidemment être dégénérés).

La valeur (1) de $g_{\max}(N)$ est obtenue pour le champ coulombien.

Notons que si pour un N quelconque, la grandeur $g(N)$ prend la valeur maximale possible, pour $\tilde{N} \leq N$, la grandeur $g(\tilde{N})$ a également la valeur maximale possible (1) avec $N = \tilde{N}$. Dans ce cas, pour des valeurs données $\tilde{N}$ et l, le nombre quantique $n_r = \tilde{N} - l - 1$ est défini de façon univoque.

4.23. En utilisant les remarques faites lors de la résolution du problème 4.5 sur un oscillateur plan, on trouve sans peine la solution sous la forme

$$\begin{aligned} &\Psi_{n_1 n_2 n_3}(x, y, z) = \Psi^{\text{osc}}_{n_1}(x)\Psi^{\text{osc}}_{n_2}(y)\Psi^{\text{osc}}_{n_3}(z) \ ; \qquad n_1, n_2, n_3 = 0, 1, 2 \ldots, \\ &E_N = \hbar\omega(N + 3/2), \qquad N = n_1 + n_2 + n_3, \qquad N = 0, 1, 2 \ldots \end{aligned} \tag{1}$$

La multiplicité du $N^{\text{ème}}$ niveau (l'état fondamental correspond à la valeur $N = 0$) vaut

$$G(N) = \sum_{n_1=0}^{N} (N - n_1 + 1) = \frac{(N + 1)(N + 2)}{2}. \tag{2}$$

4.24. Le potentiel $U = kr^2/2$ correspond à un champ central ; aussi les niveaux d'énergie et les fonctions propres de l'hamiltonien peuvent-ils être classés à l'aide des nombres quantiques n_r, l, m (voir de même le problème suivant). A l'état fondamental correspondent les nombres quantiques $n_r = 0, l = 0$ (en effet, la fonction d'onde Ψ_{000} du problème précédent n'a pas de zéros et a la symétrique sphérique ; elle correspond donc à $l = 0$).

Les valeurs possibles des nombres quantiques du premier niveau excité sont (on a indiqué entre parenthèses la valeur de la multiplicité du niveau) :

$$n_r = 1, l = 0 \quad (g = 1) \; ; \qquad n_r = 0, l = 1 \quad (g = 3).$$

Comme dans le problème précédent la multiplicité d'un oscillateur pour $N = 1$ (premier niveau excité) vaut $G = 3$, il s'ensuit aussitôt qu'à ce niveau correspondent les nombres quantiques $n_r = 0$ et $l = 1$.

Les nombres quantiques disponibles pour le second niveau excité sont alors :

$$n_r = 1, l = 0 \quad (g = 1) \; ; \qquad n_r = 0, l = 2 \quad (g = 5) \tag{1}$$

(voir problème 4.20). Etant donné que pour l'oscillateur avec $N = 2$, $G = 6$, cette valeur de G ne peut être obtenue que si $E_{n_r=1,l=0} = E_{0,2}$ ce qui correspond à une dégénérescence "accidentelle" des niveaux.

Compte tenu des nombres quantiques de l'oscillateur établis plus haut, pour $N = 3$ on peut avoir :

$$n_r = 0, l = 3 \quad (g = 7) \; ; \qquad n_r = 1, l = 1 \quad (g = 3) \; ; \qquad n_r = 2, l = 0 \quad (g = 1). \tag{2}$$

Vu que $G(N = 3) = 10$ au niveau de l'oscillateur $N = 3$, correspondent les nombres quantiques $n_r = 0, l = 3$ et $n_r = 1, l = 1$.

La classification d'un niveau d'énergie quelconque de l'oscillateur suivant les valeurs des nombres quantiques n_r, l sera donnée dans le problème suivant.

Compte tenu de la forme explicite de la fonction d'onde

$$\Psi_n^{\text{osc}}(x) = (2^n n! x_0 \sqrt{\pi})^{-1/2} \mathrm{e}^{-x^2/2x_0^2} H_n(x/x_0)$$

et de l'expression des polynômes d'Hermite $H_0 = 1, H_2 = 4x^2 - 2$, on trouve sans peine la fonction cherchée $\Psi_{l=0}$ pour $N = 2$ (ayant la symétrique sphérique) :

$$\Psi_{l=0} = \frac{1}{\sqrt{3}}\{\Psi_{200} + \Psi_{020} + \Psi_{002}\} = \frac{4r^2/x_0^2 - 6}{\sqrt{3}(2x_0\sqrt{\pi})^{3/2}} \mathrm{e}^{-r^2/2x_0^2}.$$

4.25. En représentant la fonction propre de l'hamiltonien sous la forme $\Psi_{n_r lm} = R_{n_r l}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$, on obtient l'équation

$$\left\{ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} - \frac{kr^2}{2}\right]\right\} R_{n_r l} = 0. \tag{1}$$

En introduisant une nouvelle variable $x = \sqrt{k\mu} r^2/h$, nous transformons (1) en

$$\left\{ x\frac{d^2}{dx^2} + \frac{3}{2}\frac{d}{dx} + \left[\frac{E}{2\hbar\omega} - \frac{l(l+1)}{4x} - \frac{x}{4}\right]\right\} R_{n_r l} = 0. \tag{2}$$

Nous cherchons la solution de l'équation (2) sous la forme

$$R_{n_r l} = \mathrm{e}^{-x/2} x^{l/2} w. \tag{3}$$

Compte tenu de (2) et (3) w satisfait à l'équation

$$x\frac{d^2w}{dx^2} + \left(l + \frac{3}{2} - x\right)\frac{dw}{dx} + \left(\frac{E}{2\hbar\omega} - \frac{l}{2} - \frac{3}{4}\right)w = 0. \tag{4}$$

Pour $r \to 0$ ($x \to 0$) la fonction d'onde $R_{n_r l}$ doit avoir un comportement $R \propto r^l \propto x^{l/2}$ et donc on doit avoir $w \to \text{const}$ pour $x \to 0$. La solution de l'équation (4) doit être choisie sous la forme

$$w(x) = CF(-E/2\hbar\omega + l/2 + 3/4, l + 3/2, x), \tag{5}$$

où $F(\alpha, \beta, x)$ est une fonction hypergéométrique dégénérée.

Pour que la fonction d'onde radiale (3) décroisse lorsque $r \to \infty$, il faut que la fonction hypergéométrique (5) devienne un polynôme (car si $F \propto e^x$ pour $x \to +\infty$, $R \propto e^{x/2}$ diverge pour $x, r \to \infty$).

La fonction (5) se réduit à un polynôme lorsque

$$-E/2\hbar\omega + l/2 + 3/4 = -n_r, \qquad n_r = 0, 1, 2, \ldots, \tag{6}$$

ce qui définit le spectre d'énergie de la particule

$$E_{n_r l} = \hbar\omega(l + 2n_r + 3/2) \equiv \hbar\omega(N + 3/2), \qquad N = 2n_r + l = 0, 1, 2, \ldots \tag{7}$$

Les fonctions d'onde correspondant aux niveaux d'énergie (7) sont de la forme

$$\Psi_{n_r lm} = Cr^l \exp(-\mu\omega r^2/2\hbar)F(-n_r, l + 3/2, \mu\omega r^2/\hbar)Y_{lm}(\theta, \varphi).$$

Il est clair qu'à cette valeur de N correspondent des états de la particule de moment $l = N, N-2, \ldots$ La multiplicité du niveau vaut

$$g(N) = \sum_{l=N,N-2,\ldots} (2l+1) = \frac{(N+1)(N+2)}{2},$$

en accord avec le résultat obtenu dans le problème 4.23.

Etant donné que les valeurs possibles du moment de la particule dans les états correspondant à une valeur donnée de N diffèrent l'une de l'autre d'un multiple de 2, les niveaux d'énergie de l'oscillateur possèdent une parité déterminée qui vaut $(-1)^N$.

4.26. Un calcul simple (il est commode dans ce cas d'utiliser la relation obtenue dans le problème 1.9) donne $[\widehat{H}, \widehat{T}_{ik}] = 0$. Ces opérateurs $\widehat{T}_{ik}$ ne commutent pas avec l'opérateur $\widehat{\mathbf{l}}^2$:

$$[\widehat{\mathbf{l}}^2, \widehat{T}_{11}] = \left(\frac{4i}{\hbar}\widehat{x}\widehat{p}_x + 2\right)(\widehat{\mathbf{p}}^2/\mu - k\widehat{\mathbf{r}}^2) - \left(\frac{4i}{\hbar}\widehat{\mathbf{r}}\cdot\widehat{\mathbf{p}} + 6\right)(\widehat{p}_x^2/\mu - k\widehat{x}^2) \neq 0.$$

La commutativité des opérateurs $\widehat{\mathbf{l}}^2$ et $\widehat{T}_{ik}$ avec l'hamiltonien et leur non-commutativité entre eux expliquent (voir problème 1.29) la présence dans le spectre de l'hamiltonien

d'une dégénérescence "accidentelle". Comme on le sait (voir problème précédent), la dégénérescence "accidentelle" des niveaux de l'oscillateur a la propriété suivante : la dégénérescence des niveaux $E_{n_r l}$ est obtenue pour des valeurs de l de même parité (l pairs ou impairs). Cette particularité est la conséquence du fait que les opérateurs $\widehat{T}_{ik}$ ne commutent pas avec $\widehat{\mathbf{l}}^2$, mais commutent, par contre, avec l'opérateur réflexion $\widehat{R}$, de sorte que les niveaux de l'oscillateur possèdent une parité déterminée (comparer à la dégénérescence accidentelle dans le champ coulombien discutée dans le problème suivant).

4.27. Il est naturel d'associer à $\mathbf{A}$ l'opérateur vectoriel hermitien

$$\widehat{\mathbf{A}} = \frac{h}{2\mu}\{\widehat{\mathbf{p}} \wedge \widehat{\mathbf{l}} - \widehat{\mathbf{l}} \wedge \widehat{\mathbf{p}}\} - \frac{\alpha \mathbf{r}}{r}.$$

Un calcul simple (quoiqu'un peu fastidieux) donne $[\widehat{H}, \widehat{\mathbf{A}}] = 0$. Toutefois, les composantes de l'opérateur $\widehat{\mathbf{A}}$ ne commutent pas avec $\widehat{\mathbf{l}}^2$. C'est évident sans calculs : si l'on avait $[\widehat{\mathbf{l}}^2, \widehat{\mathbf{A}}] = 0$, on aurait un système complet de fonctions propres de l'opérateur $\widehat{\mathbf{l}}^2$ et d'une des composantes de l'opérateur $\widehat{\mathbf{A}}$; ces fonctions seraient aussi des fonctions propres de l'opérateur réflexion (elles posséderaient une parité déterminée), or c'est impossible, vu que les opérateurs $\widehat{\mathbf{A}}$ et $\widehat{R}$ ne commutent pas (ils anticommutent). La commutativité de l'opérateur réflexion $\widehat{R}$ et des composantes de $\widehat{\mathbf{A}}$ avec l'hamiltonien et leur non-commutativité mutuelle expliquent (ou, plus précisément, permettent de comprendre) la dégénérescence accidentelle des niveaux d'une particule dans un champ coulombien. Ceci explique aussi pourquoi les niveaux d'énergie n'ont pas de parité déterminée (comparer à la la dégénérescence accidentelle des niveaux d'un oscillateur).

4.28. Compte tenu de la forme normée de la fonction d'onde de l'état fondamental $\Psi_0(r) = (\pi a^3)^{-1/2} e^{(-r/a)}$, $a = \hbar^2/Ze^2\mu$, il vient

$$\overline{r^n} = \int r^n |\Psi_0|^2 d\mathbf{r} = \frac{1}{\pi a^3} \int r^{n+2} \exp\left(-\frac{2r}{a}\right) dr d\Omega = \frac{(n+2)!}{2} \left(\frac{a}{2}\right)^n.$$

4.29. Le potentiel cherché est le potentiel électrostatique $\varphi(r)$ d'un système caractérisé par une densité volumique de charge de la forme

$$\rho(\mathbf{r}) = e\delta(\mathbf{r}) - e|\Psi_0(r)|^2, \tag{1}$$

où Ψ_0 est la fonction propre de l'état fondamental d'un électron au sein de l'atome d'hydrogène (elle est donnée dans le problème précédent avec $Z = 1$). Le premier terme de (1) décrit la densité de charge liée à la présence du proton, le second est la densité volumique de la charge du "nuage" électronique.

Cherchons $\varphi(r)$ en utilisant la solution générale connue de l'équation de Poisson de l'électrostatique (rappelons que, dans ce livre, on utilise les unités CGS) :

$$\varphi(\mathbf{r}) = \int \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' = \frac{e}{r} - e \int \frac{|\Psi_0(r')|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}'. \tag{2}$$

En utilisant les formules

$$\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} = \begin{cases} \dfrac{1}{r}\sum\limits_{l=0}^{\infty} P_l(\cos\theta)(r'/r)^l & r' < r, \\ \dfrac{1}{r'}\sum\limits_{l=0}^{\infty} P_l(\cos\theta)(r/r')^l & r' > r, \end{cases} \tag{3}$$

où θ est l'angle entre les vecteurs $\mathbf{r}$ et $\mathbf{r}'$, effectuons l'intégration dans la formule (2), en utilisant un système de coordonnées sphériques avec l'axe z suivant le vecteur $\mathbf{r}$. Comme les polynômes de Legendre sont orthogonaux, seul le terme $l = 0$ dans (3) donne une contribution non nulle quand on intègre par rapport à θ. Ainsi (2) prend la forme

$$\varphi(r) = \frac{e}{r} - \frac{4e}{a^3}\left\{\frac{1}{r}\int_0^r \mathrm{e}^{-2r'/a}(r')^2 dr' + \int_r^\infty \mathrm{e}^{-2r'/a} r' dr'\right\}. \tag{4}$$

Après intégration dans (4), on obtient

$$\varphi(r) = e\left(\frac{1}{r} + \frac{1}{a}\right)\mathrm{e}^{-2r/a}. \tag{5}$$

Cas limites :

$\varphi(r) \approx \dfrac{e}{r}$, $r \to 0$ (champ coulombien du proton) ;

$\varphi(r) \approx \dfrac{e}{a}\mathrm{e}^{-2r/a}$, $r \to \infty$ (écrantage pratiquement complet du proton par l'électron).

4.30. Le champ électrique moyen cherché est le champ électrostatique d'un système se caractérisant par la densité volumique de charge

$$\rho(\mathbf{r}) = e\delta(\mathbf{r}) - e|\Psi_{210}(\mathbf{r})|^2,$$

où

$$\Psi_{210}(r,\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{1}{32\pi a^5}}\, r\cos\theta \mathrm{e}^{-r/2a}$$

est la fonction d'onde de l'état $2p$ de l'électron ($n = 2, l = 1$) au sein de l'atome d'hydrogène avec $m = 0$, a étant le rayon de Bohr.

Le champ créé par un système de charges peut s'exprimer, à grande distance sous la forme d'une série de termes multipolaires. Comme le système considéré a une charge totale et un moment dipolaire nuls (voir, par exemple, 1.21), le champ du système sera, aux grandes distances, de nature quadrupolaire.

Les composantes du tenseur d'un moment quadrupolaire

$$D_{ik} = \int \rho(3x_i x_k - r^2\delta_{ik})dV = -e\int |\Psi_{210}|^2 r^4(3n_i n_k - \delta_{ik})drd\Omega$$

s'obtiennent sans peine si l'on écrit $\cos^2\theta = n_z n_z \equiv n_3 n_3$ et grâce à la relation

$$\int n_i n_k n_l n_m d\Omega = \frac{4\pi}{15}(\delta_{ik}\delta_{lm} + \delta_{il}\delta_{km} + \delta_{im}\delta_{kl}), \tag{1}$$

de sorte que

$$D_{ik} = -12ea^2(3\delta_{i3}\delta_{k3} - \delta_{ik}).$$

Le tenseur prend une forme diagonale et ses composantes non nulles valent

$$D_{33} = -2D_{11} = -2D_{22} = -24ea^2 < 0.$$

Le potentiel électrostatique $\varphi(\mathbf{r})$ et le champ électrique $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ s'obtiennent alors grâce aux formules de l'électrostatique.

4.31. La valeur moyenne de l'intensité du champ électrique à des grandes distances de l'atome, vaut selon 4.29,

$$\overline{\mathbf{E}}(\mathbf{R}) = -\nabla\varphi(R) \approx \frac{2e\mathbf{R}}{a^2R}\exp(-2R/a), \tag{1}$$

autrement dit elle diminue de façon exponentielle avec la distance.

Le champ électrique $\mathbf{E}(\mathbf{R})$ généré par le proton se trouvant à l'origine des coordonnées et par l'électron au point $\mathbf{r}$ vaut ($R \gg r$)

$$\mathbf{E}(\mathbf{R}) = \frac{e\mathbf{R}}{R^3} - \frac{e(\mathbf{R}-\mathbf{r})}{|\mathbf{R}-\mathbf{r}|^3} \approx \frac{er[\mathbf{n} - 3\mathbf{N}(\mathbf{n}\cdot\mathbf{N})]}{R^3}, \tag{2}$$

où $\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$, $\mathbf{N} = \mathbf{R}/R$.

En utilisant la représentation (2) pour $E_i(\mathbf{R})$ et en calculant la valeur moyenne de E_iE_k pour les différentes positions de l'électron dans l'espace se caractérisant par la fonction de distribution $dw = |\Psi_{000}(r)|^2dV$ (Ψ_{000} étant la fonction d'onde de l'état fondamental de l'électron au sein de l'atome d'hydrogène), on obtient

$$\begin{aligned}\overline{E_i(\mathbf{R})E_k(\mathbf{R})} &= \frac{e^2}{R^6}\int|\Psi_{000}(r)|^2r^4[n_i - 3N_in_lN_l]\,[n_k - 3N_kn_mN_m]drd\Omega \\ &= \frac{e^2a^2}{R^6}(\delta_{ik} + 3N_iN_k).\end{aligned} \tag{3}$$

En comparant (1) et (3), on voit bien que, lorsque la distance augmente, le champ moyen décroît exponentiellement, alors que les fluctuations du champ électrique, dont l'ordre de grandeur est $\sqrt{\overline{\mathbf{E}^2(\mathbf{R})}}$, ne diminuent que suivant une loi de puissance $\propto R^{-3}$.

4.32. La quantification en coordonnées paraboliques est présentée, par exemple, dans [1]. Les fonctions d'onde des états stationnaires du spectre discret en coordonnées paraboliques

$$\xi = r + z, \qquad \eta = r - z, \qquad \varphi = \arctan(y/x)$$

sont de la forme (dans ce problème on se sert des unités atomiques $e = \hbar = \mu = 1$)

$$\Psi_{n_1n_2m}(\xi,\eta,\varphi) = \sqrt{\frac{2}{n^4}}f_{n_1m}(\xi/n)f_{n_2m}(\eta/n)\frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}},$$

où

$$f_{nm}(x) = \frac{1}{|m|!}\sqrt{\frac{(n+|m|)!}{n!}}\exp\left(-\frac{x}{2}\right)x^{|m|/2}F(-n,|m|+1,x),$$

$n = (n_1 + n_2 + |m| + 1)$ est le nombre quantique principal.

La fonction d'onde du premier niveau excité ($n = 2$) a la forme

$$\Psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{16\pi}}(1-\xi/2)\exp\left(-\frac{\xi+\eta}{4}\right). \tag{1}$$

Pour obtenir la fonction de distribution en coordonnée z de l'électron, il est commode de passer des variables ξ, η, φ aux variables cylindriques ρ, z, φ et d'intégrer suivant le plan perpendiculaire à l'axe z :

$$\begin{aligned} w(z)dz &= dz\int_0^\infty\int_0^{2\pi}|\Psi_{100}|^2\rho d\rho d\varphi = \\ &= \frac{dz}{8}\int_0^\infty\left[1-\frac{\sqrt{\rho^2+z^2}+z}{2}\right]^2 \mathrm{e}^{-\sqrt{\rho^2+z^2}}\rho d\rho = \\ &= \frac{\mathrm{e}^{-|z|}}{8}\left\{\left[\left(\frac{|z|+z}{2}\right)^2+\frac{1}{2}\right](|z|+1)-|z|\frac{|z|+z}{2}\right\}dz. \end{aligned} \tag{2}$$

A l'aide de (2), on obtient la probabilité de présence de l'électron dans les demi-espaces $z \geq 0$ et $z \leq 0$:

$$W(z \geq 0) = \int_0^\infty w(z)dz = 7/8, \qquad W(z \leq 0) = 1/8,$$

ainsi que $\overline{z}$ et le moment dipolaire moyen de l'atome :

$$\overline{z} = 3,\ \overline{d_x} = \overline{d_y} = 0,\ \overline{d_z} = -\overline{z} = -3 \text{ unités atomiques } = -3\hbar^2/\mu e.$$

En écrivant la fonction d'onde (1) sous la forme

$$\Psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{16\pi}}(1-\frac{r+r\cos\theta}{2})\exp(-r/2),$$

compte tenu de la forme explicite de la fonction d'onde Ψ_{nlm} de l'électron au sein de l'atome d'hydrogène, on trouve sans peine que, dans l'état considéré, le moment de l'électron peut prendre deux valeurs $l = 0$ et 1 avec des probabilités égales $W(l=0) = W(l=1) = 1/2$.

4.33. En représentant la fonction d'onde sous la forme

$$\Psi_{nlm} = Y_{lm}(\theta,\varphi)\chi_{nl}(r)/\sqrt{r},$$

on obtient à partir de l'équation de Schrödinger

$$\chi''_{nl} + \frac{1}{r}\chi'_{nl} + \left[\kappa^2_{nl} - \frac{(l+1/2)^2}{r^2}\right]\chi_{nl} = 0 \qquad \left(E_{nl} = \frac{\hbar^2\kappa^2_{nl}}{2\mu}\right) ;$$

avec les conditions aux limites $\chi_{n_r l}(0) = \chi_{n_r l}(a) = 0$, la fonction d'onde radiale et les niveaux d'énergie de la particule sont :

$$\chi_{n_r l} = C J_{l+1/2}(\kappa_{n_r l} r), \qquad E_{n_r l} = \frac{\hbar^2 \alpha^2_{n_r+1,l}}{2\mu a^2}, \qquad \kappa_{n_r l} a = \alpha_{n_r+1,l},$$

où α_{nl} est la $n^{\text{ème}}$ racine (dans l'ordre des x croissant sans compter le zéro en $x = 0$) de la fonction de Bessel $J_{l+1/2}(x)$, c'est-à-dire que $J_{l+1/2}(\alpha_{nl}) = 0$. En particulier, dans l'état fondamental ($n_r = 0, l = 0$), on a la valeur $\alpha_{10} = \pi$ $\left(J_{1/2}(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \sin x\right)$.

4.34. En représentant la fonction d'onde sous la forme $\Psi_{n_r lm} = Y_{lm} \chi_{n_r l}(r)/\sqrt{r}$, on obtient à partir de l'équation de Schrödinger ($E_{n_r l} = -\hbar^2 \kappa^2_{n_r l}/2\mu < 0$)

$$\chi''_{n_r l} + \frac{1}{r}\chi'_{n_r l} + \left[\kappa^2_{n_r l} + \frac{2\mu\alpha}{\hbar^2}\delta(r-a) - \frac{(l+1/2)^2}{r^2}\right]\chi_{n_r l} = 0,$$

la fonction d'onde radiale

$$\chi_{n_r l}(r) = \begin{cases} C_1 I_{l+1/2}(\kappa_{n_r l} r), & r < a, \\ C_2 K_{l+1/2}(\kappa_{n_r l} r), & r > a. \end{cases} \tag{1}$$

Les conditions de raccordement de la fonction (1) au point $r = a$ (absolument identiques à celles du potentiel unidimensionnel en forme de δ, établies dans 2.10) donnent la relation

$$I_{l+1/2}(\kappa_{n_r l} a) K_{l+1/2}(\kappa_{n_r l} a) = \frac{\hbar^2}{2\mu\alpha a}, \tag{2}$$

définissant le spectre d'énergie de la particule (comparer au problème 4.11). On a noté dans le problème 4.11 que la fonction $F_\nu(x) \equiv I_\nu(x) K_\nu(x)$ sur le demi-axe $x \geq 0$ est une fonction qui décroît de façon monotone ; de plus, pour $x \to \infty$ cette fonction tend vers zéro et pour $x \to 0$ elle prend une valeur maximale égale à $F_\nu(0) = 1/2\nu$ ($\nu > 0$). Aussi l'équation (2), pour un l fixé, admet soit une racine, si $\mu\alpha a/\hbar^2 > l + 1/2$, soit n'en admet pas du tout, si cette condition n'est pas remplie. Donc, la condition $\mu\alpha a/\hbar^2 > l + 1/2$ est la condition d'existence des états liés avec le moment l.

Il est manifeste que le nombre de niveaux N du spectre discret (nombre d'états liés) de la particule dans le potentiel considéré se détermine par la condition

$$\mu\alpha a/\hbar^2 - 1/2 < N < \mu\alpha a/\hbar^2 + 1/2.$$

4.35. Si la fonction d'onde $\Psi_{n_r lm}$ des états s stationnaires ($l = 0$) d'une particule est représentée sous la forme $\Psi_{n_r 00} = R_{n_r}(r)/r$ et si l'on procède à un changement de variable $x = \exp(-r/2a)$, alors l'équation de Schrödinger prend la forme

$$\frac{d^2}{dx^2} R_{n_r} + \frac{1}{x}\frac{d}{dx} R_{n_r} + \left[\lambda^2 - \frac{p^2}{x^2}\right] R_{n_r} = 0, \tag{1}$$

où

$$\lambda = \sqrt{\frac{8\mu U_0 a^2}{\hbar^2}} > 0, \qquad p = \sqrt{-\frac{8\mu E_{n_r 0} a^2}{\hbar^2}} > 0.$$

La solution de l'équation (1) a la forme

$$R_{n_r} = C_1 J_p(\lambda x) + C_2 J_{-p}(\lambda x)$$

($J_p(x)$ étant une fonction de Bessel). Vu que pour $r \to \infty$ ($x \to 0$), la fonction d'onde $\Psi_{n_r 00}$ doit s'annuler, il est nécessaire de choisir $C_2 = 0$.

Pour que la fonction d'onde ne diverge pas au point $r = 0$, on doit avoir

$$J_p(\lambda) = 0, \qquad \text{ou} \qquad J_{\sqrt{-8\mu a^2 E_{n_r 0}/\hbar^2}}\left(\sqrt{\frac{8\mu U_0 a^2}{\hbar^2}}\right) = 0, \tag{2}$$

ce qui détermine le spectre d'énergie des états s de la particule.

Comme la position sur l'axe des x du premier zéro de la fonction de Bessel $J_p(x)$ se décale vers la droite lorsque p augmente ($p \geq 0$, $x > 0$; le zéro pour $x = 0$ est exclu de l'étude) et comme la valeur du premier zéro de la fonction de Bessel pour $p = 0$: $J_0(x_1) = 0$, est $x_1 \approx 2,40$, la condition d'existence des états liés s (et, en conséquence, des états du spectre discret en général) est de la forme

$$U_0 \geq \frac{\hbar^2 x_1^2}{8\mu a^2} \approx 0,72.\frac{\hbar^2}{\mu a^2} \tag{3}$$

Comme les nouveaux états liés qui apparaissent, lorsque la profondeur du puits augmente, ont une faible énergie de liaison, on obtient à partir de la formule (2) les valeurs des paramètres du puits correspondant à l'apparition du $N^{\text{ème}}$ état s du spectre discret :

$$J_0\left(\sqrt{\frac{8\mu a^2 U_0}{\hbar^2}}\right) = 0, \qquad U_0 = \frac{\hbar^2 x_N^2}{8\mu a^2}, \tag{4}$$

où x_N est la $N^{\text{ème}}$ racine de la fonction $J_0(x)$. En particulier, pour $N \gg 1$, en se servant de l'expression asymptotique de la fonction $J_0(x)$, il vient

$$x_N \approx \pi N - \pi/4. \tag{5}$$

De plus, le nombre d'états s du spectre discret (nombre d'états liés) d'une particule dans un puits profond est donné par la condition

$$N < \sqrt{\frac{8\mu a^2 U_0}{\pi^2 \hbar^2}} + \frac{1}{4} < N + 1.$$

4.36. Si l'on représente la fonction d'onde sous la forme $\Psi_{n_r 00} = R_{n_r}(r)/r$, l'équation de Schrödinger pour la fonction R_n et la condition à la limite $R_{n_r}(0) = 0$ ont exactement la même forme que dans le cas d'un mouvement unidimensionnel. Aussi constate-t-on sans peine que

$$E_{n_r 0} = E_{n_r}, \qquad \Psi_{n_r 00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} R_{n_r}(r).$$

Compte tenu de la correspondance établie et du résultat du problème 2.20, la condition d'existence dans le potentiel considéré des états s du spectre discret est de la

forme $\mu a^2 U/\hbar^2 \geq \pi^2/8$.

4.37. Pour $r \to \infty$, la fonction d'onde $\Psi_{E=0,l=0}(r)$ a, en général, un comportement de la forme $\Psi_{00} \to \text{const}$ (ce qui correspond au comportement de la fonction d'onde $\Psi_{E=0} \propto x$ pour $x \to \infty$ dans le cas unidimensionnel voir problème 2.18). Toutefois, si les paramètres du potentiel sont choisis de manière à ce qu'au moindre approfondissement il apparaisse un nouvel état lié (ou le premier, s'il n'y en avait pas), la fonction d'onde, pour ces valeurs des paramètres, acquiert pour $r \to \infty$ la forme $\Psi_{00} \approx a/r$. Il faut pour cela que la décroissance du potentiel, pour $r \to \infty$, soit suffisamment rapide : $U(r)$ doit décroître plus vite que r^{-2}.

Pour le potentiel indiqué dans l'énoncé, l'équation de Schrödinger pour $E = 0$ et $l = 0$ est de la forme

$$R'' + \frac{2\mu\alpha}{\hbar^2 r^n} R = 0 \qquad (a < r < \infty) \tag{1}$$

($\Psi_{00} = R(r)/r$). La solution de l'équation (1) s'exprime à l'aide des fonctions cylindriques [12] :

$$R(r) = C_1\sqrt{r}J_\nu(\beta r^{-1/2\nu}) + C_2\sqrt{r}N_\nu(\beta r^{-1/2\nu}), \tag{2}$$

où

$$\nu = \frac{1}{n-2} > 0, \qquad \beta = 2\nu\sqrt{2\mu\alpha/\hbar^2}.$$

Pour $r \to \infty$, le premier terme dans (2) devient constant, tandis que le second diverge proportionnellement à r. Ainsi, la détermination des paramètres du potentiel correspondant à l'apparition de nouveaux états s du spectre discret exige-t-elle le choix de $C_2 = 0$. Dans ce cas, la condition à la limite $R(a) = 0$ définit les valeurs cherchées des paramètres du potentiel :

$$J_\nu(\beta a^{-1/2\nu}) = 0. \tag{3}$$

La plus petite racine de la fonction de Bessel dans (3) détermine les paramètres du potentiel pour lesquels apparaît le premier état lié s (et le premier état lié, en général). En particulier, pour $n = 3$, on a $\nu = 1$ et, compte tenu de la valeur $x_1 = 3,83$ de la première racine de la fonction $J_1(x)$ (sans compter $x = 0$), on obtient la condition d'existence d'états liés dans le champ de la forme considérée pour $n = 3$:

$$\mu\alpha/a\hbar^2 \geq x_1^2/8 \approx 1,83.$$

4.38. Notons par $E_n(\lambda)$ l'énergie du $n^{\text{ème}}$ niveau dans un potentiel de la forme

$$U(r,\lambda) = U(r) + \lambda\delta U(r).$$

Sur la base du résultat obtenu dans le problème 1.28, on a

$$\frac{\partial E_n(\lambda)}{\partial\lambda} = \left(\frac{\partial H}{\partial\lambda}\right)_{nn} = (\delta U)_{nn} \geq 0,$$

et l'assertion du problème s'avère évidente, vu que $E_n = E_n(\lambda = 0)$, $\tilde{E}_n = E_n(\lambda = 1)$ (l'égalité ne se réalise que pour $\delta U \equiv 0$).

4.39. Il est connu (voir, par exemple, [1]) que dans le potentiel $U = -\alpha/r^2$ il n'existe pas d'état lié pour $\mu\alpha < \hbar^2/8$ et la particule "chute" sur le centre du champ pour $\mu\alpha > \hbar^2/8$.

Comme $-U_0/\sinh^2(r/a) \geq -U_0 a^2/r^2$, d'après le problème précédent, on peut postuler que si $\mu a^2 U_0 < \hbar^2/8$, il n'existe pas d'état lié. Mais si $\mu a^2 U_0 > \hbar^2/8$, il y a chute de la particule sur le centre du champ, car lorsque $r \to 0$ on a $U(r) \approx -U_0 a^2/r^2$, et la condition de chute n'est fonction que du comportement du potentiel aux faibles distances ($r \to 0$).

4.40. Une étude analogue à celle menée pour la résolution du problème 2.22, donne la valeur moyenne suivante

$$\overline{(p)}_{n_r l} = -\frac{1}{4\pi a^2}\frac{\partial E_{n_r l}}{\partial a} = \frac{1}{2\pi a^3}E_{n_r l}.$$

4.41. Compte tenu des considérations générales sur le calcul variationnel de l'énergie de l'état fondamental d'une particule, exposées lors de la résolution du problème 2.27, on obtient :

a) $|C|^2 = (2\kappa^2/\pi)^{3/2}$, déduit de la condition de normalisation de la fonction d'onde d'essai

$$\overline{T} = \frac{\overline{\mathbf{p}^2}}{2\mu} = \frac{\hbar^2}{2\mu}\int |\nabla\Psi|^2 dV = \frac{3\hbar^2\kappa^2}{2\mu},$$

$$\overline{U} = -\frac{\overline{\alpha}}{r} = -\alpha\int \frac{1}{r}|\Psi|^2 dV = -\sqrt{\frac{8}{\pi}}\alpha\kappa.$$

En minimisant la valeur $\overline{E(\kappa)} = \overline{T} + \overline{U}$ par rapport à κ, on obtient

$$(E_0)_{\text{var}} = \min \overline{E(\kappa)} = -\frac{4}{3\pi}\frac{\mu\alpha^2}{\hbar^2} \approx -0,42\frac{\mu\alpha^2}{\hbar^2}. \qquad (1)$$

b) $|C|^2 = \frac{15}{2\pi a^5}$, $\overline{T} = \frac{5\hbar^2}{\mu a^2}$, $\overline{U} = -\frac{5\alpha}{2a}$,

$$(E_0)_{\text{var}} = -\frac{5}{16}\frac{\mu\alpha^2}{\hbar^2} \approx -0,31\frac{\mu\alpha^2}{\hbar^2}. \qquad (2)$$

Les valeurs (1) et (2) de $(E_0)_{\text{var}}$ sont des valeurs approchées de l'énergie de l'état fondamental d'une particule dans le potentiel coulombien. La valeur exacte est $E_0 = -\mu\alpha^2/2\hbar^2$.

Vu que le calcul variationnel de l'énergie de l'état fondamental aboutit toujours à une valeur surestimée de E_0 ($E_0 \leq (E_0)_{\text{var}}$), on peut même en ignorant la valeur exacte de E_0, affirmer que la valeur de (1) est plus proche de la valeur exacte que celle de (2).

4.42.

a) On a $|C|^2 = \alpha^3/\pi$, d'après de la condition de normalisation de la fonction d'onde d'essai,

$$\overline{T} = \hbar^2\alpha^2/2\mu, \qquad \overline{U} = 3k/2\alpha^2,$$
$$(E_0)_{\text{var}} = \min \overline{E(\alpha)} = \sqrt{3}\hbar\omega \approx 1,73\hbar\omega \ ; \tag{1}$$

b) $|C|^2 = \frac{15}{2\pi a^5}$, $\overline{T} = \frac{5\hbar^2}{\mu a^2}$, $\overline{U} = \frac{ka^2}{7}$,

$$(E_0)_{\text{var}} = \min \overline{E(a)} = 2\sqrt{\frac{5}{7}}\hbar\omega \approx 1,69\hbar\omega. \tag{2}$$

Les résultats (1) et (2) du calcul variationnel de l'énergie de l'état fondamental d'un oscillateur doivent être comparés à la valeur exacte $E_0 = 3\hbar\omega/2$ (voir, par exemple, problème 4.23).

4.43. La fonction d'essai indiquée décrit l'état d'une particule de moment $l = 1$. Cette fonction, de même que la fonction d'onde exacte avec $n_r = 0, l = 1$, se comporte comme il le faut pour $r \to 0$ ($\Psi \propto r^l$) et sa partie radiale ne présente pas de zéros. Aussi peut-on s'attendre à ce que la valeur moyenne de l'énergie de la particule après minimisation suivant le paramètre variationnel κ soit suffisamment proche de la valeur exacte $E_{n_r=0,l=1}$. En calculant les intégrales en coordonnées sphériques et en tenant compte de la relation

$$\int n_i n_k d\Omega = \frac{4\pi}{3}\delta_{ik},$$

on obtient après des calculs assez simples :

$|\mathbf{a}|^2 = 8\kappa^5\sqrt{2/\pi^3}$, d'après la condition de normalisation de la fonction d'onde d'essai, et

$$\overline{T} = \frac{\hbar^2}{2\mu}\int |\nabla\Psi|^2 dV = \frac{5\hbar^2\kappa^2}{2\mu}, \qquad \overline{U} = -\overline{\frac{\alpha}{r}} = \frac{4\sqrt{2}\alpha\kappa}{3\sqrt{\pi}},$$
$$(E_{01})_{\text{var}} = \min \overline{E(\kappa)} = -\frac{16}{45\pi}\frac{\mu\alpha^2}{\hbar^2} = -0,113\frac{\mu\alpha^2}{\hbar^2}. \tag{1}$$

Ce résultat doit être comparé à la valeur exacte $E_{01} = -\mu\alpha^2/8\hbar^2 = -0,125\mu\alpha^2/\hbar^2$.

4.44. Compte tenu des remarques formulées lors de la résolution du problème précédent, on obtient

$$|\mathbf{a}|^2 = \frac{\alpha^2}{\pi}, \qquad \overline{T} = \frac{\hbar^2\alpha^2}{2\mu}, \qquad \overline{U} = \frac{15k}{4\alpha^2},$$
$$(E_0)_{\text{var}} = \min \overline{E(\alpha)} = \frac{\sqrt{30}}{2}\hbar\omega = 2,74\hbar\omega. \tag{1}$$

La valeur exacte de l'énergie calculée est $\frac{5}{2}\hbar\omega$.

4.45. La fonction de Green satisfait à l'équation ($E = -\hbar^2\kappa^2/2\mu < 0$)

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}(-\Delta + \kappa^2)G_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \tag{1}$$

Il résulte de façon évidente à partir des considérations de symétrie que c'est une fonction de la forme $G_E = f(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ (c'est-à-dire qu'elle ne dépend que de $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$). De plus, la fonction $f(r)$ satisfait à l'équation

$$(-\Delta + \kappa^2)f(r) = \frac{2\mu}{\hbar^2}\delta(\mathbf{r}). \tag{2}$$

Comme en coordonnées sphériques $\Delta = \Delta_r + \Delta_{\theta,\varphi}$ avec $\Delta_r = \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r$, l'équation (2), pour $r \neq 0$, peut être écrite sous la forme

$$\frac{d^2}{dr^2}(rf) - \kappa^2(rf) = 0.$$

Sa solution est

$$f(r) = \frac{C_1}{r}\mathrm{e}^{-\kappa r} + \frac{C_2}{r}\mathrm{e}^{\kappa r} \qquad (\kappa > 0).$$

La condition de décroissance de la fonction de Green pour $r \to \infty$ exige que $C_2 = 0$, tandis que la relation $\Delta\dfrac{1}{r} = -4\pi\delta(\mathbf{r})$ permet de déterminer la valeur de la constante C_1 et finalement la forme de G_E :

$$G_E(\rho, \rho') = \frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\frac{\mathrm{e}^{-\kappa|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \tag{3}$$

En utilisant la fonction de Green, on peut écrire l'équation de Schrödinger, pour les états liés, sous forme d'une équation intégrale :

$$\Psi(\mathbf{r}) = -\int G_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}')U(\mathbf{r}')\Psi(\mathbf{r}')dV' = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int \frac{\mathrm{e}^{-\kappa|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}U(\mathbf{r}')\Psi(\mathbf{r}')dV' \tag{4}$$

(comparer à la solution du problème 2.36).

4.46. Appliquons l'équation (4) du problème précédent à la fonction d'onde de l'état fondamental d'une particule ($l = 0$) avec $E_0 < 0$, en supposant que cet état existe. Comme la fonction d'onde $\Psi_0(r)$ de l'état fondamental est à symétrie sphérique et ne possède pas de zéros (de sorte que, sans restreindre la généralité de l'étude, on peut la considérer comme non négative, $\Psi_0(r) \geq 0$), dans l'équation

$$\Psi_0(r) = \frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int \frac{\mathrm{e}^{-\kappa|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}[-U(r')]\Psi_0(r')dV' \tag{1}$$

l'expression sous le signe intégral est positive ou nulle.

En notant r_0 la valeur de r pour laquelle la fonction Ψ_0 devient maximale, on déduit de (1) l'inégalité

$$\Psi_0(r) \leq \frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\Psi_0(r_0)\int \frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}|U(r')|dV', \tag{2}$$

qui est vérifiée pour toute valeur de la variable r (y compris $r = r_0$).

Compte tenu de la relation

$$\int \frac{d\Omega'}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} = \min\left\{\frac{4\pi}{r}, \frac{4\pi}{r'}\right\} \leq \frac{4\pi}{r'},$$

obtenue par intégration sur des variables angulaires du développement $|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^{-1}$ en série des polynômes de Legendre (voir problème 4.29), on déduit de (2)

$$\frac{\Psi_0(r)}{\Psi_0(r_0)} \leq \frac{2\mu}{\hbar^2}\int_0^\infty r'|U(r')|dr'. \tag{3}$$

La condition nécessaire d'existence des états liés dans le potentiel $U(r)$ découle directement de (3).

Compte tenu de la relation entre le spectre d'énergie d'une particule dans un potentiel central et celui du cas unidimensionnel, établie dans 4.36, on note sans peine que le résultat du problème étudié est analogue à celui obtenu dans le problème 2.40 pour un mouvement à une dimension.

a) La condition nécessaire : $\xi = \mu a^2 U_0/\hbar^2 \geq 1$; (la condition exacte : $\xi \geq \pi^2/8 = 1,24$).

b) $\xi = \mu a^2 U_0/\hbar^2 \geq 1/2$ ($\xi \geq 0,72$ – condition exacte).

4.47. Appliquons l'équation (4) du problème 4.45 à une fonction d'onde du spectre discret associée aux nombres quantiques $n_r = 0$ et l quelconque, en admettant qu'un tel état existe. Etudions, pour fixer les idées, la valeur $m = 0$, de sorte que la fonction d'onde prenne la forme

$$\Psi_{n_r=0,l,m=0} = P_l(\cos\theta)f_l(r). \tag{1}$$

L'équation initiale devient

$$P_l(\cos\theta)f_l(r) = \frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int \frac{e^{-\kappa|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}[-U(r')]P_l(\cos\theta')f_l(r')dV'. \tag{2}$$

La fonction $f_l(r)$ de (1) ne possède pas de zéros (sans compter les zéros en $r = 0, \infty$), et, sans restreindre la généralité, on peut admettre qu'elle n'est pas négative, $f_l \geq 0$. Etant donné qu'on s'intéresse à la condition d'existence des états liés apparaissant lorsque la profondeur du puits augmente, et comme le niveau ne fait qu'apparaître, ce dernier a une énergie de liaison aussi petite que l'on veut ; on peut alors remplacer dans l'équation (2) $\exp(-\kappa|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)$ par l'unité. Ensuite, en se servant du développement

en série de $|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^{-1}$ sur les polynômes de Legendre, introduit dans la résolution du problème 4.29, et, compte tenu du théorème d'addition des polynômes de Legendre

$$P_l(\cos\gamma) = P_l(\cos\theta)P_l(\cos\theta') + \sum_{m=1}^{l} 2\,\frac{(l-m)!}{(l+m)!}P_l^m(\cos\theta)P_l^m(\cos\theta')\cos m(\varphi-\varphi'),$$
$$\cos\gamma = \cos\theta\cos\theta' + \sin\theta\sin\theta'\cos(\varphi-\varphi')$$

(γ étant l'angle entre les vecteurs $\mathbf{r}$ et $\mathbf{r}'$), on peut procéder à l'intégration dans le second membre de l'équation (2) et obtenir l'inégalité (comparer à la solution du problème précédent)

$$f_l(r) \le \frac{2\mu}{(2l+1)\hbar^2}\int_0^\infty f_l(r')|U(r')|dr'. \tag{3}$$

En fixant dans (3) la valeur de r égale à r_0, pour laquelle $f_l(r)$ devient maximale, et en sortant de sous le signe d'intégrale la fonction $f_l(r')$ au point $r'=r_0$ (ce qui ne peut que renforcer l'inégalité (3)), on aboutit sans peine à la condition

$$\int_0^\infty r|U(r)|dr \ge \frac{(2l+1)\hbar^2}{2\mu}.$$

4.48. Cherchons la valeur moyenne de l'énergie de la particule dans l'état étudié (avec $|C|^2=\kappa^3/\pi$, déduit de la condition de normalisation de la fonction d'onde d'essai) :

$$\overline{T} = \hbar^2\kappa^2/2\mu, \qquad \overline{U} = 4\kappa^3\int_0^\infty r^2U(r)\mathrm{e}^{-2\kappa r}dr, \qquad \overline{E} = \overline{T}+\overline{U}.$$

Comme $E_0 \le \overline{E}$ (E_0 étant l'énergie de l'état fondamental), si $\overline{E}\le 0$ il y a au moins un état lié. Donc si pour une valeur quelconque du paramètre $\kappa>0$ on a

$$\kappa\int_0^\infty |U(r)|r^2\mathrm{e}^{-2\kappa r}dr \ge \hbar^2/8\mu, \tag{1}$$

il existe un état lié dans le potentiel.

Il est manifeste que la valeur optimale du paramètre κ (pour laquelle la condition (1) est remplie) est celle pour laquelle l'expression dans le premier membre de (1), qui est fonction de κ, devient maximale. De sorte que la condition suffisante cherchée prend la forme

$$\max\left\{\kappa\int_0^\infty |U(r)|r^2\mathrm{e}^{-2\kappa r}dr\right\} \ge \hbar^2/8\mu. \tag{2}$$

a) La condition (2) prend la forme

$$\max\left\{\alpha\kappa a^2\mathrm{e}^{-2\kappa a}\right\} \ge \hbar^2/8\mu, \qquad \text{ou} \qquad \xi = \frac{\alpha a\mu}{\hbar^2} \ge \frac{\mathrm{e}}{4} \approx 0,68. \tag{3}$$

La condition exacte d'existence d'états liés est : $\xi \ge 0,5$.

b) $\xi = \frac{\mu a^2 U_0}{\hbar^2} \geq \frac{27}{32} \approx 0,84$ - condition suffisante ; $\xi \geq 0,72$ - condition exacte d'existence d'états du spectre discret.

4.49.
a) $\xi_n = 0,5$; $\xi_0 = 0,5$; $\xi_s = e/4 \approx 0,68$;
b) $\xi_n = 0,5$; $\xi_0 \approx 0,72$; $\xi_s = 27/32 \approx 0,84$;
c) $\xi_n = 0,5$; $\xi_0 = 0,84$; $\xi_s = 1$.
Notons que, comme il fallait s'y attendre, $\xi_n \leq \xi_0 \leq \xi_s$.

4.50. Des calculs analogues à ceux du problème 4.48 donnent la condition suffisante d'existence des états liés : $\xi = \mu a^2 U_0/\hbar^2 \geq \frac{9\sqrt{3}}{8} \approx 1,94$.

La condition nécessaire d'existence est $\xi \geq 1$; la condition exacte (calculée numériquement) est $\xi \geq 1,34$.

4.51. La condition suffisante d'existence d'au moins un état lié ayant un moment $l = 1$ est de la forme

$$\max\left\{\kappa^3 \int_0^\infty r^4 |U(r)| e^{-2\kappa r} dr \geq\right\} \geq \frac{3\hbar^2}{8\mu}. \tag{1}$$

Pour le potentiel de Yukawa la condition (1) prend la forme $\xi = \mu\alpha r_0/\hbar^2 \geq 128/27 \approx 4,74$, tandis que la condition nécessaire, en accord avec 4.47, donne $\xi \geq 3/2$.

4.52. La fonction d'onde $\Phi_0(\mathbf{p})$ de l'état fondamental de la particule en représentation $\mathbf{p}$ est de la forme

$$\Phi_0(\mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \Psi_0(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} dV = \sqrt{\frac{8\hbar^5}{\pi^2 a^5}} \frac{1}{(p^2 + \hbar^2/a^2)^2} \qquad \left(a = \frac{\hbar^2}{\mu\alpha}\right).$$

La distribution en impulsions de la particule est : $dw(\mathbf{p}) = |\Phi_0(\mathbf{p})|^2 d\mathbf{p}$.

4.53. La fonction d'onde normée de l'état fondamental de la particule, selon le résultat du problème 4.33, a la forme ($n_r = 0$, $l = 0$)

$$\Psi_0(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi a}} \frac{\sin(\pi r/a)}{r}, \qquad r \leq a.$$

La fonction d'onde en représentation $\mathbf{p}$

$$\Phi_0(\mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \Psi_0(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} dV = \frac{(a\hbar^3)^{1/2}}{p} \frac{\sin(pa/\hbar)}{\pi^2\hbar^2 - p^2 a^2}$$

définit la fonction de distribution des impulsions de la particule

$$dw = |\Phi_0(\mathbf{p})|^2 d\mathbf{p} = \frac{a\hbar^3}{p^2} \frac{\sin^2(pa/\hbar)}{(\pi^2\hbar^2 - p^2 a^2)^2} d\mathbf{p}.$$

4.54. L'équation de Schrödinger en représentation $\mathbf{p}$ a la forme (voir problème 2.33)

$$\frac{p^2}{2\mu}\Phi(\mathbf{p}) + \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{U}(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\Phi(\mathbf{p}')d\mathbf{p}' = E\Phi(\mathbf{p}). \tag{1}$$

$$\tilde{U}(\mathbf{q}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int U(\mathbf{r})\exp(-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}/\hbar)dV.$$

Pour le potentiel δ, on a

$$\tilde{U}(q) = -\frac{\alpha}{(2\pi\hbar)^3}\int \delta(r-a)\mathrm{e}^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}/\hbar}dV = \frac{\alpha a}{2\pi^2\hbar^2}\frac{\sin(aq/\hbar)}{q}. \tag{2}$$

En portant (2) dans l'équation (1) et en tenant compte du fait que pour les états avec $l = 0$, la fonction d'onde $\Phi(p)$ ne dépend pas des variables angulaires, on peut écrire cette équation sous la forme

$$\left(\frac{p^2}{2\mu} - E\right)\Phi(p) - \frac{\alpha a}{\pi\hbar^2}\int \frac{\sin\left(\frac{a}{\hbar}\sqrt{p^2+\tilde{p}^2-2p\tilde{p}\cos\theta}\right)}{\sqrt{p^2+\tilde{p}^2-2p\tilde{p}\cos\theta}}\Phi(\tilde{p})\tilde{p}^2\sin\theta d\theta d\tilde{p} = 0. \tag{3}$$

Après une intégration élémentaire par rapport à l'angle θ l'équation (3) prend la forme

$$\left(\frac{p^2}{2\mu} - E\right)\Phi(p) - \frac{2\alpha}{\pi\hbar p}\sin\left(\frac{pa}{\hbar}\right)\int_0^{\infty}\sin\left(\frac{\tilde{p}a}{\hbar}\right)\Phi(\tilde{p})\tilde{p}d\tilde{p} = 0. \tag{4}$$

En notant dans l'équation (4)

$$\int_0^{\infty}\sin\left(\frac{\tilde{p}a}{\hbar}\right)\Phi(\tilde{p})\tilde{p}d\tilde{p} = C, \tag{5}$$

écrivons sa solution :

$$\Phi(p) = \frac{4\mu\alpha C}{\pi\hbar(p^2-2\mu E)}\frac{\sin(pa/\hbar)}{p}. \tag{6}$$

A partir des expressions (5) et (6), on aboutit à la relation

$$\frac{4\mu\alpha}{\pi\hbar}\int_0^{\infty}\frac{\sin^2(pa/\hbar)}{p^2-2\mu E}dp = 1, \tag{7}$$

définissant les niveaux d'énergie des états liés $E = -\hbar^2\kappa^2/2\mu < 0$.

En écrivant la relation (7) sous la forme

$$\frac{\mu\alpha}{\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1-\cos(2pa/\hbar)}{p^2+\hbar^2\kappa^2}dp = 1 \tag{8}$$

et en calculant l'intégrale à l'aide du théorème des résidus (en utilisant de plus la relation $\cos x = (\mathrm{e}^{ix} + \mathrm{e}^{-ix}/2)$, on obtient

$$\frac{\mu\alpha a}{\hbar^2}(1-\mathrm{e}^{-2\kappa a}) = a\kappa. \tag{9}$$

La relation (9) définissant le spectre d'énergie des états liés s est tout naturellement équivalente à la condition (2) du problème 4.34 pour $l = 0$, obtenue à partir de la solution de l'équation de Schrödinger en représentation $\mathbf{r}$.

Il découle de la relation (9) que pour $\xi = \mu\alpha a/\hbar^2 > 1/2$, il y a au sein du puits un état lié s, et pour $\xi < 1/2$ il n'y a plus d'états liés.

4.55. La solution de ce problème peut être obtenue à partir des formules du problème précédent grâce à des modifications simples.

Il suffit pour cela de préciser les deux points suivants.

1) La solution de l'équation initiale – de l'équation (1) du problème précédent – doit remplir la condition $\Phi(p) = 0$ avec $p \leq p_0$. Aussi les formules (3)–(5), (7) du problème précédent restent valables si la borne inférieure d'intégration en p (égale à zéro) est remplacée par la valeur p_0 (dans ce cas la fonction d'onde ne prend la forme donnée dans l'expression (6) du problème précédent que pour $p > p_0$).

2) A un état lié correspond maintenant une énergie de la particule $E < E_0 = p_0^2/2\mu$ (et non pas $E < 0$, comme dans le problème précédent), car c'est justement la grandeur E_0 qui est la valeur minimale de l'énergie d'une particule "libre". Ainsi, les niveaux d'énergie du spectre discret de la particule se déterminent à partir de l'équation

$$\frac{4\mu\alpha}{\pi\hbar}\int_{p_0}^{\infty}\frac{\sin^2(pa/\hbar)}{p^2 - 2\mu E}dp = 1, \tag{1}$$

et, de plus, les valeurs cherchées de E doivent satisfaire à la condition $E < E_0$.

On constate sans peine que, pour $\alpha > 0$, l'équation (1) ne possède qu'une seule solution, vu que le premier membre de l'équation (1), fonction de la variable E, croît de façon monotone avec E à partir de la valeur zéro pour $E \to -\infty$, jusqu'à la valeur $+\infty$ pour $E \to E_0$ (on admet que $p_0 \neq n\pi\hbar/a$).

Pour obtenir la grandeur de l'énergie de liaison de la particule $\varepsilon = E_0 - E > 0$ dans le cas d'un puits peu profond $\xi = \mu\alpha a/\hbar^2 \ll 1$, on remarque que pour $\xi \to 0$, d'après l'équation (1), $E \to E_0$, $\varepsilon \to 0$ (pour $\varepsilon = 0$ l'intégrale dans (1) diverge sur la borne inférieure) et la valeur de l'intégrale dans (1) se définit dans le domaine des p voisins de la borne inférieure.

Donc, pour $\varepsilon \to 0$, on a

$$\int_{p_0}^{\infty}\frac{\sin^2(pa/\hbar)dp}{p^2 - p_0^2 + 2\mu\varepsilon} \approx \sin^2\left(\frac{p_0 a}{\hbar}\right)\int_{p_0}^{\infty}\frac{dp}{p^2 - p_0^2 + 2\mu\varepsilon} \approx -\frac{\sin^2(p_0 a/\hbar)}{2p_0}\ln\frac{\varepsilon}{4E_0}, \tag{2}$$

et de l'équation (1), pour $\xi \ll 1$, on obtient l'énergie de liaison de la particule :

$$\varepsilon \sim E_0 \exp\{-\pi p_0 a/2\xi\hbar\sin^2(p_0 a/\hbar)\}. \tag{3}$$

Puisque, dans l'évaluation de l'intégrale (2), on s'est limité, pour $\varepsilon \to 0$, au calcul de la partie singulière (divergente) de l'intégrale, cette formule n'est valable qu'à un

terme constant près (que l'on ne calcule pas). C'est pourquoi on n'a pas utilisé le symbole de l'égalité approchée dans la relation (3) car il faudrait pour cela calculer l'intégrale (2) de façon plus précise.

Notons que, pour $\xi \to 0$, l'énergie de liaison de la particule tend vers zéro suivant la loi exponentielle : $\varepsilon \sim E_0 \exp(-c/\xi)$.

4.56. En représentant la fonction d'onde des états stationnaires d'une particule ayant un moment $l = 0$ sous la forme $\Psi_{k,l=0,m=0} = R_k(r)/r$ où $k = \sqrt{2\mu E/\hbar^2}$, on obtient pour la fonction R_k l'équation

$$-R_k'' + \frac{2\mu\alpha}{\hbar^2}\delta(r-a)R_k = k^2 R_k. \tag{1}$$

Pour obtenir des niveaux quasi discrets, il faut trouver des solutions de l'équation (1) qui, pour $r \to \infty$, soient de la forme $R_k(r) \propto \exp(ikr)$ (comme on le sait, en posant ainsi le problème, on n'obtient de solution que pour certaines valeurs complexes de la grandeur $k = k_1 - ik_2$, $k_{1,2} > 0$; alors $E = E_0 - i\Gamma/2$, E_0 étant l'énergie du niveau, $\Gamma = 2\hbar^2 k_1 k_2/\mu$ sa largeur).

La solution de l'équation (1) satisfaisant aux conditions exigées est de la forme

$$R_k(r) = \begin{cases} C_1 \sin(kr), & r < a, \\ C_2 \exp(ikr), & r > a. \end{cases} \tag{2}$$

Les conditions de raccordement de la fonction d'onde au point $r = a$ (voir problème 2.10) conduisent à la relation

$$ika - ka\cot ka = \frac{2\mu\alpha a}{\hbar^2} \tag{3}$$

qui détermine le spectre des niveaux quasi discrets (avec $l = 0$).

D'après l'équation (3), dans le cas où $\xi = \mu\alpha a/\hbar^2 \gg 1$, les valeurs de la grandeur ka pour les niveaux inférieurs (tels que $|ka| \ll \xi$) soient proches de $(n+1)\pi$ et, en écrivant les valeurs des racines de l'équation (3) sous la forme

$$k_n a = (n+1)\pi + \varepsilon_1 - i\varepsilon_2 \qquad (n = 0, 1, \ldots\,; |\varepsilon_{1,2}| \ll 1),$$

on obtient sans peine à partir de (3) les valeurs approchées de ε_1 et ε_2 :

$$\varepsilon_1 \approx -\frac{(n+1)\pi}{2\xi}, \qquad \varepsilon_2 \approx \varepsilon_1^2 \approx \frac{(n+1)^2\pi^2}{4\xi^2}.$$

Donc, l'énergie E_0 du niveau quasi discret et sa largeur Γ sont données par :

$$(E_0)_n \approx \frac{\hbar^2\pi^2(n+1)^2}{2\mu a^2}\left(1 - \frac{1}{\xi}\right), \qquad \Gamma_n \approx \frac{\hbar^2\pi^3(n+1)^3}{2\mu a^2\xi^2}.$$

Les énergies des niveaux quasi discrets sont proches des niveaux d'énergie d'une particule dans un puits de potentiel de profondeur infinie de rayon a (voir 4.33). Pour $\xi \to \infty$, quand la barrière de potentiel devient impénétrable aux particules, les niveaux quasi discrets se transforment en niveaux du spectre discret.

CHAPITRE 5

SPIN

5.1. Les fonctions propres $\Psi_{s_x} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ et les valeurs propres s_x de l'opérateur $\widehat{s}_x = \widehat{\sigma}_x/2$ s'obtiennent à partir de la solution de l'équation

$$\widehat{s}_x \Psi_{s_x} = s_x \Psi_{s_x} \ ; \qquad \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} b \\ a \end{pmatrix} = s_x \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix},$$

d'où

$$b = 2s_x a, \qquad a = 2s_x b. \tag{1}$$

La solution non triviale du système d'équations (1) n'existe qu'à la condition $4s_x^2 = 1$ qui détermine les valeurs possibles (le spectre) de la grandeur $s_x = \pm 1/2$. De (1), on déduit : $a = b$ pour $s_x = 1/2$ et $a = -b$ pour $s_x = -1/2$. Normées à l'unité $||\Psi_{s_x}||^2 \equiv |a|^2 + |b|^2 = 1$, les fonctions propres Ψ_{s_x} sont de la forme

$$\Psi_{s_x=+1/2} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \qquad \Psi_{s_x=-1/2} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

De façon analogue, on obtient

$$\Psi_{s_y=+1/2} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}, \qquad \Psi_{s_y=-1/2} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix},$$

$$\Psi_{s_z=+1/2} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad \Psi_{s_z=-1/2} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

5.2. L'opérateur spin $\widehat{\mathbf{s}} = \widehat{\boldsymbol{\sigma}}/2$ est un opérateur vectoriel (plus précisément, pseudovectoriel) ; aussi l'opérateur projection du spin $\widehat{s}_{\mathbf{n}}$ sur une direction arbitraire $\mathbf{n}$ ($\mathbf{n}^2 = 1$) s'exprime au moyen des composantes $\widehat{s}_x$, $\widehat{s}_y$, $\widehat{s}_z$ comme dans le cas d'un vecteur ordinaire, c'est-à-dire

$$\widehat{s}_{\mathbf{n}} = \mathbf{n} \cdot \widehat{\mathbf{s}} = \frac{1}{2}\mathbf{n} \cdot \widehat{\boldsymbol{\sigma}} = \frac{1}{2}(\sin\theta\cos\varphi \cdot \widehat{\sigma}_x + \sin\theta\sin\varphi \cdot \widehat{\sigma}_y + \cos\theta \cdot \widehat{\sigma}_z),$$

où θ, φ sont les angles polaire et azimutal définissant la direction du vecteur $\mathbf{n}$. En utilisant la forme explicite des matrices de Pauli, l'opérateur $\widehat{s}_{\mathbf{n}}$ peut s'exprimer sous la forme d'une matrice carrée de dimension 2 :

$$\widehat{s}_{\mathbf{n}} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta\cdot e^{-i\varphi} \\ \sin\theta\cdot e^{i\varphi} & -\cos\theta \end{pmatrix},$$

La valeur $\overline{s}_{\mathbf{n}}$ dans l'état Ψ_{s_z} ayant une valeur déterminée s_z de la projection de spin sur l'axe z avec $s_z = +1/2$ vaut

$$\overline{s}_{\mathbf{n}} = \frac{1}{2}(1\ 0)\begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta\cdot e^{-i\varphi} \\ \sin\theta\cdot e^{i\varphi} & -\cos\theta \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\cos\theta.$$

De façon analogue pour $s_z = -1/2$, on obtient $\overline{s}_{\mathbf{n}} = -\frac{1}{2}\cos\theta$.

Notons que la valeur de $\overline{s}_{\mathbf{n}} = s_z\cos\theta$ peut être obtenue sans calculs à partir du résultat du problème 3.14.

Désignons par $w(+)$ la probabilité d'avoir une valeur de la projection du spin $s_{\mathbf{n}} = 1/2$, $w(-) = 1 - w(+)$ la probabilité d'avoir une valeur $s_{\mathbf{n}} = -1/2$. Sachant que $\overline{s}_{\mathbf{n}} = s_z\cos\theta$, il vient

$$\overline{s}_{\mathbf{n}} = w(+)\frac{1}{2} + w(-)\left(-\frac{1}{2}\right) = \frac{1}{2}[2w(+) - 1] = s_z\cos\theta$$

$$w(+) = \frac{1 + 2s_z\cos\theta}{2}, \qquad w(-) = \frac{1 - 2s_z\cos\theta}{2}.$$

En particulier, pour $s_z = +1/2$ on a $w(+) = \cos^2(\theta/2)$, $w(-) = \sin^2(\theta/2)$.

5.3. L'opérateur possède deux valeurs propres égales à $f_{1,2} = a \pm |\mathbf{b}|$.

5.4. Comme la projection du spin sur tout axe ne prend que deux valeurs égales à $\pm 1/2$, le carré de la projection du spin (sur tout axe) possède pour *tous* les états la valeur déterminée $1/4$.

5.5. L'hermiticité de l'opérateur (de la matrice) $\widehat{L} = \widehat{L}^\dagger$ entraîne que

$$\widehat{L} = \begin{pmatrix} a & b \\ b^* & c \end{pmatrix},$$

a, c étant des nombres réels. Cette matrice $\widehat{L}$ (comme d'ailleurs tout opérateur hermitien) peut, par une transformation unitaire, être mise sous forme diagonale

$$\widehat{L}' = \begin{pmatrix} l_1 & 0 \\ 0 & l_2 \end{pmatrix},$$

où les nombres réels $l_{1,2}$ sont les valeurs propres de la matrice (de l'opérateur) $\widehat{L}$. L'invariance de la trace et du déterminant de la matrice par rapport aux transformations unitaires (voir 1.62) permet d'écrire les relations

$$\mathrm{Tr}\,\widehat{L} = a + c = l_1 + l_2, \qquad \det\widehat{L} = ac - |b|^2 = l_1 l_2,$$

et l'on obtient les valeurs propres cherchées

$$l_{1,2} = \frac{a+c}{2} \pm \sqrt{\frac{(a-c)^2}{4} + |b|^2}.$$

5.6. Un système complet de l'ensemble des matrices carrées de dimension 2 se compose de quatre matrices indépendantes. L'indépendance des quatre matrices $\widehat{I}$, $\widehat{\sigma}_i$ s'avère évidente (voir aussi le commentaire à la fin de la solution du problème).

En calculant la trace dans les deux membres de la relation étudiée

$$\widehat{A} = a_0\widehat{I} + \mathbf{a}\cdot\widehat{\boldsymbol{\sigma}} = a_0\widehat{I} + a_i\widehat{\sigma}_i, \tag{1}$$

et en tenant compte de ce que Tr $\widehat{\sigma}_i = 0$, Tr $\widehat{I} = 2$, il vient $a_0 = \frac{1}{2}$ Tr $\widehat{A}$.

En multipliant l'égalité (1) à droite par la matrice $\widehat{\sigma}_k$ et en utilisant la propriété des matrices de Pauli $\widehat{\sigma}_i\widehat{\sigma}_k = \delta_{ik}\widehat{I} + i\varepsilon_{ikl}\widehat{\sigma}_l$, on obtient (en calculant la trace) $a_k = \frac{1}{2}$ Tr $(\widehat{A}\widehat{\sigma}_k) = \frac{1}{2}$ Tr $(\widehat{\sigma}_k\widehat{A})$. Notons que les valeurs établies pour a_0 et a_i démontrent l'indépendance des matrices $\widehat{I}$, $\widehat{\sigma}_i$, car, pour $\widehat{A} = 0$ dans l'égalité (1), on a $a_0 = 0$, $a_i = 0$.

5.7. $|\widehat{\sigma}_z| = \sqrt{\widehat{\sigma}_z^2} = \widehat{I}$, $|\widehat{\boldsymbol{\sigma}}| = \sqrt{\widehat{\boldsymbol{\sigma}}^2} = \sqrt{3}\widehat{I}$.

A partir des relations de commutation des matrices de Pauli, on montre que $\widehat{\boldsymbol{\sigma}} \wedge \widehat{\boldsymbol{\sigma}} = 2i\widehat{\boldsymbol{\sigma}}$ et donc que $\widehat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot(\widehat{\boldsymbol{\sigma}}\wedge\widehat{\boldsymbol{\sigma}}) = 6i\widehat{I}$.

5.8. A partir de la relation $\widehat{\sigma}_i\widehat{\sigma}_k = \delta_{ik}\widehat{I} + i\varepsilon_{ikl}\widehat{\sigma}_l$, on montre facilement que $(\widehat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\mathbf{a})^2 = \widehat{\sigma}_i a_i \widehat{\sigma}_k a_k = a_i a_i = \mathbf{a}^2$ et donc

$$(\widehat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\mathbf{a})^n = \begin{cases} a^n & \text{si } n \text{ pair,} \\ a^{n-1}(\widehat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\mathbf{a}) & \text{si } n \text{ impair,} \end{cases}$$

5.9. Etant donné que l'opérateur $\widehat{f} = a + \mathbf{b}\cdot\widehat{\boldsymbol{\sigma}}$ a deux valeurs propres distinctes (voir problème 5.3), l'opérateur $\widehat{F} = F(\widehat{f})$ s'obtient à partir du résultat obtenu dans le problème 1.52 :

$$\widehat{F} = \frac{F(a+b) + F(a-b)}{2} + \frac{F(a+b) - F(a-b)}{2b}(\mathbf{b}\cdot\widehat{\boldsymbol{\sigma}}), \tag{1}$$

où $b = |\mathbf{b}|$. A partir de (1), on obtient

$$\exp(i\mathbf{a}\cdot\widehat{\boldsymbol{\sigma}}) = \cos a + i\sin a\left(\widehat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\frac{\mathbf{a}}{a}\right).$$

5.10. En représentation s_x l'opérateur (la matrice) $\widehat{s}_x$ est diagonal et a la forme de l'opérateur $\widehat{s}_z$ en représentation s_z :

$$\widehat{s}_x = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

La forme des opérateurs $\widehat{s}_y$ et $\widehat{s}_z$ en représentation s_x ne se définit pas de façon univoque : il y une infinité de choix pour ces opérateurs (ces différents choix correspondent aux différentes matrices unitaires laissant la matrice $\widehat{s}_x$ diagonale). Toutefois, quel que soit le choix des opérateurs $\widehat{s}_y$, $\widehat{s}_z$, les relations de commutation entre les composantes du moment $[\widehat{s}_i, \widehat{s}_k] = i\varepsilon_{ikl}\widehat{s}_l$ doivent se conserver.

Un choix possible des opérateurs $\widehat{s}_i$ est

$$\widehat{s}_x = \widehat{\sigma}_z/2, \qquad \widehat{s}_y = \widehat{\sigma}_x/2, \qquad \widehat{s}_z = \widehat{\sigma}_y/2 \tag{1}$$

(on l'obtient par permutation cyclique, à partir de la représentation standard, des opérateurs des composantes du spin : $\widehat{s}_x = \widehat{\sigma}_x/2$, $\widehat{s}_y = \widehat{\sigma}_y/2$, $\widehat{s}_z = \widehat{\sigma}_z/2$).

Donnons un autre choix possible pour les opérateurs de spin en représentation s_x : $\widehat{s}_x = \widehat{\sigma}_z/2$, $\widehat{s}_y = \widehat{\sigma}_y/2$, $\widehat{s}_z = -\widehat{\sigma}_x/2$.

La forme des opérateurs des composantes du spin (1) peut être obtenue à partir de la représentation standard $\widehat{\boldsymbol{\sigma}}/2$ à l'aide de la transformation unitaire $\widehat{U}$: $\widehat{\mathbf{s}} = \widehat{U}(\widehat{\boldsymbol{\sigma}}/2)\widehat{U}^\dagger$. On laisse au lecteur le soin de montrer que l'opérateur $\widehat{U}$ est de la forme

$$\widehat{U} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1+i & 1+i \\ -1+i & 1-i \end{pmatrix}.$$

5.11.

$$\widehat{s}_+ = \widehat{s}_x + i\widehat{s}_y = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \widehat{s}_- = \widehat{s}_x - i\widehat{s}_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \widehat{s}_+^2 = \widehat{s}_-^2 = 0.$$

5.12. Cherchons les fonctions propres

$$\Psi_{s_n=1/2} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}.$$

de l'opérateur projection du spin sur l'axe dont la direction est donnée par le vecteur unitaire $\mathbf{n}$ (voir problème 5.2). Compte tenu de la forme explicite de l'opérateur $\widehat{s}_n$ (voir problème 5.2), on obtient sans peine à partir de $\widehat{s}_n\Psi_{s_n=1/2} = \frac{1}{2}\Psi_{s_n=1/2}$

$$a\sin(\theta/2) = b\mathrm{e}^{-i\varphi}\cos(\theta/2). \tag{1}$$

Pour $a = \cos(\theta/2)$, $b = \mathrm{e}^{i\varphi}\sin(\theta/2)$ et $\Psi_{s_n=1/2}$ prend la forme indiquée dans l'énoncé, où $\theta = 2\alpha$ et $\varphi = \beta$ sont les angles polaire et azimutal de la direction du vecteur $\mathbf{n}$ sur lequel la projection du spin possède la valeur déterminée $s_n = 1/2$.

Pour $\theta = 2\alpha = \pi/2$ et $\varphi = \beta = 0$, on obtient la fonction propre $\Psi_{s_x=1/2}$. Pour $\theta = \pi/2$ et $\varphi = \pi$, on trouve la fonction propre $\Psi_{s_x=-1/2}$, etc.

5.13. Le projecteur $\widehat{P}_{s_z=1/2}$ doit posséder les propriétés suivantes :

1) L'action sur la fonction d'onde d'état correspondant à une projection du spin $s_z = -1/2$ sur l'axe z doit donner zéro. Le projecteur a donc la forme $\widehat{P}_{s_z=1/2} = a(1+\widehat{\sigma}_z)$ (a étant une constante arbitraire).

2) L'action sur la fonction d'onde d'état correspondant à $s_z = 1/2$ doit conserver la valeur du spin, ce qui donne $a = 1/2$.

Donc,

$$\widehat{P}_{s_z=\pm 1/2} = \frac{1}{2}(1 \pm \widehat{\sigma}_z). \tag{1}$$

Comme il fallait s'y attendre, les projecteurs (1) sont hermitiens et satisfont à la relation $\widehat{P}_{s_z=\pm 1/2} = \widehat{P}^2_{s_z=\pm 1/2}$ (voir 1.35).

5.14. $\widehat{P}_{s_n=\pm 1/2} = \frac{1}{2}(1 \pm \widehat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{n})$.

En agissant avec l'opérateur $\widehat{P}_{s_n=1/2}$ sur un spineur quelconque Ψ, on obtient la fonction propre $\Psi_{s_n=1/2}$ de l'opérateur $\widehat{s}_n$ correspondant à la valeur propre $s_n = 1/2$. Choisissons Ψ sous la forme $\Psi = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, on obtient alors

$$\Psi_{s_n=1/2} = \widehat{P}_{s_n=1/2}\Psi = \frac{1 + \widehat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{n}}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \cos\theta \\ e^{i\varphi} \sin\theta \end{pmatrix} = \cos\frac{\theta}{2} \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ e^{i\varphi} \sin\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}.$$

La forme trouvée du spineur $\Psi_{s_n=1/2}$ (non normé) est en accord avec le résultat du problème 5.12 (θ et φ sont les angles polaire et azimutal de la direction du vecteur $\mathbf{n}$).

5.15. La transformation du spineur Ψ lors des rotations du système de coordonnées (transformation spinorielle) est analogue à la transformation de la fonction d'onde d'état d'une particule ayant une valeur déterminée du moment l en représentation l_z introduite dans 3.19 :

$$\Psi' = \begin{pmatrix} \psi_1' \\ \psi_2' \end{pmatrix} = \exp\left(i\boldsymbol{\varphi}_0 \cdot \frac{\widehat{\boldsymbol{\sigma}}}{2}\right) \Psi = \left(\cos\frac{\varphi_0}{2} + i \sin\frac{\varphi_0}{2} \widehat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{n}_0\right) \Psi. \tag{1}$$

De (1), découle la loi de transformation du spineur $\Phi^* = (\varphi_1^*, \varphi_2^*)$:

$$\Phi^{*\prime} = \Phi^* \left(\cos\frac{\varphi_0}{2} - i \sin\frac{\varphi_0}{2} \widehat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{n}_0\right). \tag{2}$$

Compte tenu de (1) et (2), on obtient sans peine que $\Phi^{*\prime}\Psi' = \Phi^*\Psi$.

5.16. En utilisant les relations (1) et (2) du problème précédent et la relation $\widehat{\sigma}_i\widehat{\sigma}_k = \delta_{ik}\widehat{I} + i\varepsilon_{ikl}\widehat{\sigma}_l$, on obtient après des transformations simples

$$\mathbf{V}' = \Phi^{*\prime}\widehat{\boldsymbol{\sigma}}\Psi' = \mathbf{V}\cos\varphi_0 - (\mathbf{n}_0 \wedge \mathbf{V})\sin\varphi_0 + 2\mathbf{n}_0(\mathbf{n}_0 \cdot \mathbf{V})\sin^2\frac{\varphi_0}{2}, \tag{1}$$

ce qui constitue la loi de transformation d'un vecteur lors de la rotation définie dans l'énoncé du problème précédent. En particulier, pour $\mathbf{n}_0 = (0, 0, 1)$ (rotation du système de coordonnées autour de l'axe z), on obtient à partir de (1)

$$V_x' = \cos\varphi_0 \cdot V_x + \sin\varphi_0 \cdot V_y, \qquad V_y' = -\sin\varphi_0 \cdot V_x + \cos\varphi_0 \cdot V_y, \qquad V_z' = V_z.$$

5.17. La forme des spineurs

$$\Psi_{11} = \Psi^{(1)}_{1/2,1/2}\Psi^{(2)}_{1/2,1/2} \text{ et } \Psi_{1,-1} = \Psi^{(1)}_{1/2,-1/2}\Psi^{(2)}_{1/2,-1/2}$$

est évidente.

De la condition $\widehat{\mathbf{S}}^2\Psi_{00} = 0$, il s'ensuit

$$(\Psi^*_{00}\widehat{\mathbf{S}}^2\Psi_{00}) = ||\widehat{\mathbf{S}}\Psi_{00}||^2 = ||\widehat{S}_x\Psi_{00}||^2 + ||\widehat{S}_y\Psi_{00}||^2 + ||\widehat{S}_z\Psi_{00}||^2 = 0,$$

de sorte que

$$\widehat{S}_x\Psi_{00} = 0,$$

ou

$$\begin{aligned}\widehat{S}_x\Psi_{00} &= \frac{1}{2}[\widehat{\sigma}_{x1} + \widehat{\sigma}_{x2}]\left\{C_1\Psi^{(1)}_{1/2,1/2}\Psi^{(2)}_{1/2,-1/2} + C_2\Psi^{(1)}_{1/2,-1/2}\Psi^{(2)}_{1/2,1/2}\right\}\\ &= \frac{1}{2}(C_1 + C_2)\left\{\Psi^{(1)}_{1/2,1/2}\Psi^{(2)}_{1/2,1/2} + \Psi^{(1)}_{1/2,-1/2}\Psi^{(2)}_{1/2,-1/2}\right\} = 0,\end{aligned}$$

ce qui donne $C_1 = -C_2$ pour la fonction Ψ_{00}. Les fonctions Ψ_{10} et Ψ_{00} étant orthogonales, $C_1 = C_2$ pour la fonction Ψ_{10}.

Donc les fonctions propres normées Ψ_{10} et Ψ_{00} sont de la forme

$$\begin{aligned}\Psi_{10} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\Psi^{(1)}_{1/2,1/2}\Psi^{(2)}_{1/2,-1/2} + \Psi^{(1)}_{1/2,-1/2}\Psi^{(2)}_{1/2,1/2}\right\},\\ \Psi_{00} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\Psi^{(1)}_{1/2,1/2}\Psi^{(2)}_{1/2,-1/2} - \Psi^{(1)}_{1/2,-1/2}\Psi^{(2)}_{1/2,1/2}\right\}.\end{aligned}$$

Les fonctions Ψ_{SS_z} obtenues possèdent une symétrie déterminée par rapport à la permutation des variables de spin des deux particules (elles sont symétriques pour $S = 1$ et antisymétriques pour $S = 0$) en accord avec le résultat du problème 3.39.

5.18. Comme $\widehat{\mathbf{S}}^2 = \frac{1}{4}(\widehat{\boldsymbol{\sigma}_1} + \widehat{\boldsymbol{\sigma}}_2)^2$ et $\widehat{\boldsymbol{\sigma}}^2 = 3$, alors $\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \widehat{\boldsymbol{\sigma}}_2 = -3 + 2\widehat{\mathbf{S}}^2$, et les fonctions propres de l'opérateur $\widehat{\mathbf{S}}^2$ sont également des fonctions propres de l'opérateur $\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \widehat{\boldsymbol{\sigma}}_2$ correspondant aux valeurs propres -3 (pour $S = 0$) et $+1$ (pour $S = 1$). Notons que si l'on cherche la valeur moyenne de l'opérateur $\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \widehat{\boldsymbol{\sigma}}_2$ pour les quatre états indépendants ayant des valeurs déterminées S et S_z (en admettant qu'ils sont équiprobables) on trouve une valeur nulle.

5.19. Représentons le spineur sous la forme

$$\Psi_{\alpha\beta} = \frac{1}{2}[\varphi_\alpha\chi_\beta + \chi_\alpha\varphi_\beta] + \frac{1}{2}[\varphi_\alpha\chi_\beta - \chi_\alpha\varphi_\beta]. \tag{1}$$

Compte tenu du résultat obtenu dans le problème 5.17 sur la symétrie des spineurs Ψ_{SS_z} par rapport à la permutation des variables de spin des deux particules, on remarque que le premier terme dans le second membre de (1) correspond à la valeur $S = 1$ du spin total, tandis que le second terme de la somme correspond à $S = 0$.

Etant donné que la fonction initiale $\Psi_{\alpha\beta}$ est normée à l'unité, la normalisation de chacun des termes de la somme dans l'expression (1) définit la probabilité de la valeur correspondante du spin total. Donc, on obtient

$$w(S=0,1)=\frac{1}{4}(\varphi_\alpha^*\chi_\beta^*\mp\chi_\alpha^*\varphi_\beta^*)(\varphi_\alpha\chi_\beta\mp\chi_\alpha\varphi_\beta)=\frac{1}{2}(1\mp|\varphi_\alpha^*\chi_\alpha|^2),$$

où le signe "+" se rapport à $S=1$, le signe "−" à $S=0$; $\overline{\widehat{\mathbf{S}}^2}=2w\ (S=1)$.

5.20. Sachant que l'opérateur hermitien $\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_1\cdot\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_2$ n'a que deux valeurs propres distinctes égales à -3 et $+1$ (voir 5.18), on a la relation $(\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_1\cdot\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_2-1)(\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_1\cdot\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_2+3)=0$ ou $(\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_1\cdot\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_2)^2=3-2\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_1\cdot\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_2$ (comparer à 1.27).

5.21. En utilisant les résultats des problèmes 1.52 et 5.18, on aboutit sans peine à

$$\widehat{F}=\frac{3F(a+b)+F(a-3b)}{4}+\frac{F(a+b)-F(a-3b)}{4}\,\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_1\cdot\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_2,$$

5.22. La forme des projecteurs s'obtient sans peine si l'on tient compte du fait que les fonctions propres de l'opérateur $\widehat{\mathbf{S}}^2$ sont également les fonctions propres de l'opérateur $\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_1\cdot\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_2$:

$$\widehat{P}_{S=0}=\frac{1-\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_1\cdot\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_2}{4},\qquad \widehat{P}_{S=1}=\frac{3+\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_1\cdot\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_2}{4}.$$

5.23. Représentons un spineur arbitraire sous la forme

$$\Psi_{\alpha\beta}=\frac{1}{2}[\Psi_{\alpha\beta}+\Psi_{\beta\alpha}]+\frac{1}{2}[\Psi_{\alpha\beta}-\Psi_{\beta\alpha}],\tag{1}$$

où le premier et second termes de la somme dans le membre de droite décrit l'état correspondant à la valeur $S=1$ du spin total et le second à la valeur $S=0$ (ceci est dû à la symétrie de ces fonctions par rapport à la permutation des variables de spin des deux particules). L'action des projecteurs $\widehat{P}_{S=0,1}$ donne

$$\widehat{P}_{S=1}\Psi_{\alpha\beta}=\frac{1}{2}[\Psi_{\alpha\beta}+\Psi_{\beta\alpha}],\qquad \widehat{P}_{S=0}\Psi_{\alpha\beta}=\frac{1}{2}[\Psi_{\alpha\beta}-\Psi_{\beta\alpha}].\tag{2}$$

Par définition, l'action de l'opérateur d'echange de spin $\widehat{C}$ s'écrit

$$\widehat{C}\Psi_{\alpha\beta}=\Psi_{\beta\alpha}=\frac{1}{2}[\Psi_{\alpha\beta}+\Psi_{\beta\alpha}]-\frac{1}{2}[\Psi_{\alpha\beta}-\Psi_{\beta\alpha}].\tag{3}$$

Utilisant les équations (2), (3) et la forme explicite des projecteurs établie dans le problème précédent, il vient

$$\widehat{C}=\widehat{P}_{S=1}-\widehat{P}_{S=0}=\frac{1+\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_1\cdot\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_2}{2}.\tag{4}$$

Notons les propriétés suivantes de l'opérateur $\widehat{C}$. C'est un opérateur hermitien. Ses fonctions propres sont des spineurs correspondants à une valeur déterminée du spin

total S ; les valeurs propres correspondantes sont égales à $+1$ pour $S = 1$ et -1 pour $S = 0$. Il est immédiat que $\widehat{C}^2 = 1$.

5.24. On voit aussitôt que les projecteurs sur les états à projection déterminée du spin total sur l'axe z valant ± 1 sont de la forme

$$\widehat{P}_{S_z=1} = \frac{\widehat{S}_z(\widehat{S}_z+1)}{2}, \qquad \widehat{P}_{S_z=-1} = \frac{\widehat{S}_z(\widehat{S}_z-1)}{2}, \qquad \left(\widehat{S_z} = \frac{\widehat{\sigma}_{1z}+\widehat{\sigma}_{2z}}{2}\right).$$

Ensuite, il devient évident que

$$\widehat{P}_{S=1,S_z=1} = \widehat{P}_{S_z=1}, \qquad \widehat{P}_{1,-1} = \widehat{P}_{S_z=-1},$$
$$\widehat{P}_{00} = \widehat{P}_{S=0} = \frac{1}{4}(1 - \widehat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \widehat{\boldsymbol{\sigma}}_2) \qquad \text{(voir 5.22)}.$$

A partir de la relation

$$\sum_{SS_z} \widehat{P}_{SS_z} = \widehat{P}_{00} + \widehat{P}_{10} + \widehat{P}_{11} + \widehat{P}_{1,-1} = 1,$$

on obtient la forme de l'opérateur

$$\widehat{P}_{10} = \frac{1 - 2\widehat{\sigma}_{1z}\widehat{\sigma}_{2z} + \widehat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \widehat{\boldsymbol{\sigma}}_2}{4}.$$

5.25.

a) Les spineurs Ψ_{SS_z} sont les fonctions propres de l'opérateur $\widehat{V}_1$ auxquelles correspondent les valeurs propres

$$(V_1)_{SS_z} = 2aS_z - 3b + 2bS(S+1)$$

(car $\widehat{S}_z = (\widehat{\sigma}_{1z} + \widehat{\sigma}_{2z})/2$ et $\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \widehat{\boldsymbol{\sigma}}_2 = -3 + 2\widehat{\mathbf{S}}^2$).

b) Cherchons la forme de l'opérateur

$$\widehat{V}_2 = \frac{a_1+a_2}{2}(\widehat{\sigma}_{1z} + \widehat{\sigma}_{2z}) + \frac{a_1-a_2}{2}(\widehat{\sigma}_{1z} - \widehat{\sigma}_{2z}) + b\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \widehat{\boldsymbol{\sigma}}_2$$

en représentation SS_z. Dans cette représentation, c'est une matrice dont les éléments sont

$$(V_2)_{SS_z,S'S'_z} \equiv (\Psi^*_{S'S'_z}\widehat{V}_2\Psi_{SS_z}). \tag{1}$$

En numérotant les états correspondants aux nombres quantiques SS_z de la façon suivante :

$$S = 1, S_z = 1 \to 1 \ ; \qquad 1, -1 \to 2 \ ; \qquad 1, 0 \to 3 \ ; \qquad 0, 0 \to 4,$$

et, compte tenu de la forme explicite des fonctions de spin Ψ_{SS_z} obtenue dans 5.17, on obtient la forme matricielle de $\widehat{V}_2$:

$$\widehat{V}_2 = \begin{pmatrix} A & 0 & 0 & 0 \\ 0 & B & 0 & 0 \\ 0 & 0 & C & E \\ 0 & 0 & E^* & D \end{pmatrix} ; \qquad \begin{array}{l} A = a_1 + a_2 + b, \\ B = -a_1 - a_2 + b, \\ C = b, \quad E = E^* = a_1 - a_2, \\ D = -3b. \end{array}$$

A l'aide d'une transformation unitaire, cette matrice hermitienne peut être mise sous une forme diagonale qui détermine directement ses valeurs propres. On conclut sans peine, en s'appuyant sur la forme de la matrice $\widehat{V}_2$, que deux des ces valeurs propres valent A et B auxquelles correspondent les fonction propres $\Psi_{S=1,S_z=1}$ et $\Psi_{1,-1}$ respectivement. L'opérateur unitaire (matrice) diagonalisant la matrice $\widehat{V}_2$ en représentation SS_z ne "mélange" que les états avec les nombres quantiques $1,0$ et $0,0$, de sorte que les deux autres valeurs propres sont obtenues par diagonalisation de la matrice 2×2 $\begin{pmatrix} C & E \\ E^* & D \end{pmatrix}$. Tous calculs faits (voir éventuellement le problème 5.5), on obtient les valeurs propres de l'opérateur $\widehat{V}_2$:

$$(V_2)_1 = A = a_1 + a_2 + b, \qquad (V_2)_2 = B = -a_1 - a_2 + b,$$
$$(V_2)_{3,4} = -b \pm \sqrt{(a_1 - a_2)^2 + 4b^2}.$$

On laisse au soin du lecteur la recherche des fonctions propres correspondant aux valeurs propres $(\widehat{V}_2)_{3,4}$.

5.26. Dans l'état indiqué, le spin total de n particules quelconques a une valeur déterminée égale à $S(n) = ns$.

5.27. Sachant que

$$\widehat{\mathbf{S}}^2 = \frac{1}{4}\left(\sum_{a=1}^{N} \widehat{\boldsymbol{\sigma}}_a\right)^2 = \frac{1}{4}\left(\sum_a \widehat{\boldsymbol{\sigma}}_a^2 + \sum_{a \neq b} \widehat{\boldsymbol{\sigma}}_a \cdot \widehat{\boldsymbol{\sigma}}_b\right),$$

$\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_a^2 = 3$, et qu'il n'y a pas de corrélation entre les spins des différentes particules et que les valeurs moyennes de $\overline{\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_a}$ valent

$$\overline{(\widehat{\sigma}_a)_i} = \begin{cases} 0, & i = 1,2, \\ 1, & i = 3, \qquad a \leq n, \\ -1, & i = 3, \qquad a \geq n+1, \end{cases}$$

on obtient sans peine

$$\overline{\widehat{\mathbf{S}}^2} = \frac{1}{4}\{N^2 - 4nN + 2N + 4n^2\}. \tag{1}$$

Notons que l'expression (1) peut être obtenue sans calcul, en utilisant le résultat du problème 3.37, si l'on considère de façon formelle le système de N particules comme composé de deux sous-systèmes dont l'un regroupe les n premières particules et possède le spin $S_1 = n/2$, $S_{1z} = n/2$, tandis que second rassemble les particules restantes et se caractérise par les nombres quantiques $S_2 = (N-n)/2$, $S_{1z} = -(N-n)/2$.

5.28. Le spin total ne peut prendre que deux valeurs : $S = N/2$ et $S = (N-2)/2$ $(N \geq 2)$, dont les probabilités s'obtiennent facilement en tenant compte de la valeur $\overline{\widehat{\mathbf{S}}^2}$ dans l'état considéré :

$$w\left(S = \frac{N}{2}\right) = \frac{1}{N}, \qquad w\left(S = \frac{N-2}{2}\right) = \frac{N-1}{N}.$$

5.29. Les probabilités des deux valeurs possibles du moment total d'une particule $j = l \pm 1/2$ sont égales à (comparer à 3.38)

$$w(j = l + 1/2) = \frac{l + 2ms_z + 1}{2l + 1}, \qquad w(j = l - 1/2) = \frac{l - 2ms_z}{2l + 1}.$$

5.30. Examinons un système composé de $N = 2J$ particules de spin $s = 1/2$; ici, toutes les particules possèdent une projection déterminée du spin $s_z = +1/2$ sur l'axe z, c'est-à-dire que l'état est caractérisé par les valeurs $S = J$, $S_z = J$ du spin total du système.

Selon le problème 5.2, pour une particule isolée de spin $s_z = 1/2$, la probabilité que la projection du spin sur l'axe dirigé suivant le vecteur $\mathbf{n}$ soit égale à $s_n = +1/2$ est $w(s_n = +1/2) = \cos^2(\theta/2)$ et à $s_n = +1/2$ est $w(s_n = -1/2) = \sin^2(\theta/2)$ où θ est l'angle formé par les axes $\mathbf{n}$ et z.

Soient $m = J + J_n$ particules parmi les $2J$ particules. La probabilité que chacune ces m particules ait comme projection du spin sur la direction $\mathbf{n}$ $s_n = +1/2$ et les $J - J_n$ particules restantes aient chacune une projection $s_n = -1/2$ a pour expression :

$$w = [\cos^2(\theta/2)]^{J+J_n}[\sin^2(\theta/2)]^{J-J_n}. \tag{1}$$

Multipliant (1) par le nombre de combinaisons possibles de choisir ces m particules parmi les $2J$ particules du système on obtient la probabilité $W(J_n)$ que la projection du spin total sur la direction du vecteur $\mathbf{n}$ vaut J_n ($J_n = (J + J_n)(1/2) + (J - J_n)(-1/2)$) :

$$W(J_n) = C_{2J}^{J+J_n}[\cos^2(\theta/2)]^{J+J_n}[\sin^2(\theta/2)]^{J-J_n}. \tag{2}$$

La formule (2) fournit la solution au problème posé, car la probabilité cherché ne dépend pas de la "nature" du moment (orbital ou de spin, "élémentaire" ou composé, etc.).

Notons que le passage de la formule (1) à la formule (2) peut sembler, à première vue, incorrect du point de vue de la mécanique quantique, car on a procédé à l'addition des probabilités (et non des amplitudes !). Le calcul est cependant correct car les amplitudes impliquées sont orthogonales (les spineurs $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ et $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ sont orthogonaux).

5.31. La fonction d'onde de l'état avec $J = 3/2$, $J_z = 3/2$ en représentation $j_{1z}j_{2z}$ est de la forme

$$\Psi_{3/2,3/2} = \Psi_{1,1}^{(1)}\Psi_{1/2,1/2}^{(2)}.$$

En faisant agir l'opérateur $\widehat{J}_- = \widehat{J}_x - i\widehat{J}_y = \widehat{j}_{1-} + \widehat{j}_{2-}$ sur la fonction $\Psi_{3/2,3/2}$, on obtient la fonction $\Psi_{3/2,1/2}$:

$$\Psi_{3/2,1/2} = \left\{\sqrt{\frac{2}{3}}\Psi_{1,0}^{(1)}\Psi_{1/2,1/2}^{(2)} + \frac{1}{\sqrt{3}}\Psi_{1,1}^{(1)}\Psi_{1/2,-1/2}^{(2)}\right\} \tag{3}$$

(la forme des opérateurs $\hat{j}_{1,2-}$ est donnée dans les problèmes 3.26 et 5.11, le facteur $1/\sqrt{3}$ dans l'expression (1) est introduit pour la normalisation).

De (1), se déduisent les valeurs des probabilités des projections des moments sur l'axe z dans l'état $J = 3/2$, $J_z = 1/2$:

$$w(j_{1z} = 1) = w\left(j_{2z} = -\frac{1}{2}\right) = \frac{1}{3}, \qquad w(j_{1z} = 0) = w\left(j_{2z} = \frac{1}{2}\right) = \frac{2}{3}.$$

Ecrivons le spineur avec $J = 1/2$, $J_z = 1/2$ sous la forme

$$\Psi_{1/2,1/2} = C_1 \Psi^{(1)}_{1,1} \Psi^{(2)}_{1/2,-1/2} + C_2 \Psi^{(1)}_{1,0} \Psi^{(2)}_{1/2,1/2}.$$

L'orthogonalité de cette fonction avec $\Psi_{3/2,1/2}$ et sa normalisation à l'unité conduisent à $C_1 = \sqrt{2/3}$ et $C_2 = -1/\sqrt{3}$. On en déduit les probabilités des projections des moments dans l'état $J = 1/2$, $J_z = 1/2$:

$$w(j_{1z} = 1) = w\,(j_{2z} = -1/2) = \frac{2}{3}, \qquad w(j_{1z} = 0) = w\,(j_{2z} = 1/2) = \frac{1}{3}.$$

De façon analogue on peut étudier les autres états donnés dans l'énoncé du problème.

5.32. Dans l'état ayant la valeur maximale possible du spin $S = N/2$, le spin total de deux particules vaut 1 et la fonction d'onde est symétrique par rapport à la permutation des variables de spin de ces particules. Il en est ainsi dans la permutation d'un nombre quelconque des particules (voir, par exemple, 5.17).

Pour les états à $S < N/2$ avec $N > 2$, la fonction de spin n'a pas, en général, de symétrie déterminée par rapport à la permutation des variables de spin de deux particules (voir 5.33).

5.33. Les valeurs possibles du spin total sont : $S = 3/2, 1/2$.

Les états de spin à valeurs déterminées S et S_z avec $S = 1/2$ sont doublement dégénérés car le spin total $S = 1/2$ peut être obtenu par deux procédés indépendants :

1) par addition des spins des deux premières particules en un spin total $S_{12} = 0$;
2) par addition du spin résultant $S_{12} = 1$ des deux premières particules au spin de la troisième en un spin total $S = 1/2$.

Etant donné que le nombre d'états de spin indépendants pour une valeur S donnée vaut $2S + 1$ (en l'absence de dégénérescence en S), le nombre total d'états de spin différents est égal à $(2 \cdot \frac{3}{2} + 1) + 2(2 \cdot \frac{1}{2} + 1) = 8$, comme il se doit.

La forme des fonctions de spin $\Psi_{S=3/2,S_z=\pm 3/2}$ est évidente :

$$\Psi_{3/2,3/2} = \Psi^{(1)}_{1/2,1/2} \Psi^{(2)}_{1/2,1/2} \Psi^{(3)}_{1/2,1/2}, \qquad \Psi_{3/2,-3/2} = \Psi^{(1)}_{1/2,-1/2} \Psi^{(2)}_{1/2,-1/2} \Psi^{(3)}_{1/2,-1/2}.$$

Les fonctions de spin des états à $S = 3/2$, $S_z = \pm 1/2$ s'obtiennent sans peine si l'on tient compte de la propriété de symétrie des fonctions par rapport à la permutation

des variables de spin de particules (voir problème précédent) :

$$\Psi_{3/2,1/2} = \frac{1}{\sqrt{3}}\left\{\Psi^{(1)}_{1/2,1/2}\Psi^{(2)}_{1/2,1/2}\Psi^{(3)}_{1/2,-1/2} + \Psi^{(1)}_{1/2,1/2}\Psi^{(2)}_{1/2,-1/2}\Psi^{(3)}_{1/2,1/2} + \Psi^{(1)}_{1/2,-1/2}\Psi^{(2)}_{1/2,1/2}\Psi^{(3)}_{1/2,1/2}\right\},$$

$$\Psi_{3/2,-1/2} = \frac{1}{\sqrt{3}}\left\{\Psi^{(1)}_{1/2,-1/2}\Psi^{(2)}_{1/2,-1/2}\Psi^{(3)}_{1/2,1/2} + \Psi^{(1)}_{1/2,-1/2}\Psi^{(2)}_{1/2,1/2}\Psi^{(3)}_{1/2,-1/2} + \Psi^{(1)}_{1/2,1/2}\Psi^{(2)}_{1/2,-1/2}\Psi^{(3)}_{1/2,-1/2}\right\}.$$

Si la fonction de spin correspond à un spin total $S_{12} = 0$ des deux premières particules, elle décrit manifestement l'état $S = 1/2$. Aussi a-t-on

$$\begin{aligned}\Psi^{(\alpha)}_{1/2,1/2} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\Psi^{(1)}_{1/2,1/2}\Psi^{(2)}_{1/2,-1/2} - \Psi^{(1)}_{1/2,-1/2}\Psi^{(2)}_{1/2,1/2}\right\}\Psi^{(3)}_{1/2,1/2},\\ \Psi^{(\alpha)}_{1/2,-1/2} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\Psi^{(1)}_{1/2,1/2}\Psi^{(2)}_{1/2,-1/2} - \Psi^{(1)}_{1/2,-1/2}\Psi^{(2)}_{1/2,1/2}\right\}\Psi^{(3)}_{1/2,-1/2}.\end{aligned} \tag{1}$$

Comme on l'a noté plus haut, les états de spin à $S = 1/2$, $S_z = \pm 1/2$ sont doublement dégénérés. Le second couple de fonctions $\Psi^{(\beta)}_{1/2,\pm 1/2}$ linéairement indépendantes par rapport aux fonctions (1) s'obtient sans peine après l'examen des états à spin résultant $S_{23} = 0$ des seconde et troisième particules :

$$\begin{aligned}\Psi^{(\beta)}_{1/2,1/2} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\Psi^{(1)}_{1/2,1/2}\left\{\Psi^{(2)}_{1/2,1/2}\Psi^{(3)}_{1/2,-1/2} - \Psi^{(2)}_{1/2,-1/2}\Psi^{(3)}_{1/2,1/2}\right\},\\ \Psi^{(\beta)}_{1/2,-1/2} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\Psi^{(1)}_{1/2,-1/2}\left\{\Psi^{(2)}_{1/2,1/2}\Psi^{(3)}_{1/2,-1/2} - \Psi^{(2)}_{1/2,-1/2}\Psi^{(3)}_{1/2,1/2}\right\}.\end{aligned} \tag{2}$$

Bien que les fonctions (1) et (2) soient linéairement indépendantes elles ne sont pas orthogonales (pour les mêmes valeurs de S_z). La fonction de spin la plus générale correspondant à $S = 1/2$ est une superposition des fonctions (1) et (2). On laisse au soin du lecteur l'étude les états ayant un moment résultant $S_{13} = 0$, ainsi que l'expression des fonctions de spin de ces états au moyen des fonctions (1) et (2).

5.34. Les valeurs possible du spin total sont $S = 0, 1, 2$.

Les états de spin ayant des valeurs déterminées de S et de S_z ont les dégénérescences suivantes : $g_1 = 3$ pour $S = 1$, $g_2 = 1$ (pas de dégénérescence) pour $S = 2$, $g_0 = 2$ pour $S = 0$. De cette façon, le nombre total d'états vaut

$$G = \sum_{i=0}^{2} g_i(2S_i + 1) = 16,$$

comme il se doit. (Comparer à la solution du problème 3.48.)

5.35.

a) Comme l'état d'un système de moment total $J = 0$ a la symétrie sphérique (la fonction d'onde ne varie pas avec la rotation du système de coordonnées autour de tout axe passant par le point par rapport auquel le moment possède la valeur déterminée $J = 0$), la valeur moyenne de tout multipôle est nulle ($\overline{\mathbf{d}} = 0$, $\overline{\boldsymbol{\mu}} = 0$, $\overline{D}_{ik} = 0$, etc.).

b) Etudions les éléments matriciels de la forme

$$\langle n, J = 1/2, J_z' | \widehat{M}_{\{i\}} | n, J = 1/2, J_z \rangle \tag{1}$$

où n représente l'ensemble des nombres quantiques qui, avec J et J_z constituent un ensemble complet, tandis que $\widehat{M}_{\{i\}}$ est la représentation symbolique de l'opérateur d'un moment multipolaire quelconque (ainsi, $\widehat{M}_{\{i\}} \equiv \widehat{d}_i = \sum_a e_a x_{ai}$ moment dipolaire, $\widehat{M}_{\{i\}} \equiv \widehat{D}_{ik} = \sum_a e_a (3x_{ai}x_{ak} - r_a^2 \delta_{ik})$ pour le moment quadrupolaire, etc.).

Après intégration par rapport aux coordonnées orbitales des particules et sommation sur les variables de spins, l'expression (1) peut être représentée sous la forme

$$\langle J_z' | \widetilde{\widehat{M}}_{\{i\}} | J_z \rangle \tag{2}$$

où $\widetilde{\widehat{M}}_{\{i\}}$ sont des matrices agissant dans l'espace des variables d'un spin 1/2 (car $J = 1/2$).

Examinons la forme possible des matrices $\widetilde{\widehat{M}}_{\{i\}}$.

Pour un moment quadrupolaire D_{ik}, en vertu de la structure tensorielle de l'expression étudiée, on peut écrire la relation suivante :

$$(D_{ik})_{J_z' J_z} = \langle J_z' | A\delta_{ik} + B\varepsilon_{ikl}\tilde{\sigma}_l | J_z \rangle \ ;$$

mais la condition de symétrie (par rapport aux indices i et k) exige $B = 0$, tandis que la nullité de la trace, $D_{ii} = 0$, donne $A = 0$, c'est-à-dire que les éléments matriciels d'un tenseur de moment quadrupôlaire (y compris ses valeurs moyennes) sont identiquement nuls lorsque le moment du système vaut $J = 1/2$.

Pour le moment dipôlaire magnétique du système, on peut écrire

$$(\mu_i)_{J_z' J_z} = a \langle J_z' | \widehat{\sigma}_i | J_z \rangle, \tag{3}$$

et il n'y aucune raison de poser $a = 0$, c'est-à-dire que la valeur moyenne $\overline{\mu}_i$ est, en général, différente de zéro.

Dans le cas du moment dipolaire électrique, on peut écrire, de façon analogue à (3), que

$$(d_i)_{J_z' J_z} = b \langle J_z' | \widehat{\sigma}_i | J_z \rangle.$$

Etant donné que le moment dipolaire $\mathbf{d}$ est un vecteur polaire (réel), tandis que les éléments matriciels de l'opérateur de spin sont les composantes d'un (pseudo-) vecteur axial, la grandeur b doit être un pseudo-scalaire (si b est un scalaire réel, il faut aussi que $b = 0$). Pour avoir $b \neq 0$, il faut que système concerné soit démuni de parité déterminée ; dans le cas contraire (voir 1.21), $b = 0$ et donc $\overline{\mathbf{d}} = 0$.

5.36. Les fonctions d'onde s'obtiennent en utilisant le résultat du problème 5.12 :

$$\Psi_{\mathbf{p}_0,\lambda=1/2} = \frac{e^{i\mathbf{p}_0\cdot\mathbf{r}/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \begin{pmatrix} \cos(\tilde{\theta}/2) \\ \sin(\tilde{\theta}/2)e^{i\tilde{\varphi}} \end{pmatrix},$$

$$\Psi_{\mathbf{p}_0,\lambda=-1/2} = \frac{e^{i\mathbf{p}_0\cdot\mathbf{r}/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \begin{pmatrix} \sin(\tilde{\theta}/2) \\ -\cos(\tilde{\theta}/2)e^{i\tilde{\varphi}} \end{pmatrix},$$

où $\tilde{\theta}$, $\tilde{\varphi}$ sont les angles polaire et azimutal définissant la direction du vecteur $\mathbf{p}_0$.

5.37. Vu qu'en représentation $\mathbf{p}$, l'opérateur impulsion est l'opérateur multiplication, on a, dans cette représentation, $\widehat{\lambda} = (\widehat{\mathbf{s}} \cdot \mathbf{n})$, où $\mathbf{n} = \mathbf{p}/p$. La commutativité des opérateurs $[\widehat{j}_i, \widehat{\lambda}] = 0$ peut se vérifier directement par le calcul. Toutefois, elle est évidente car elle résulte de la propriété générale suivante : l'opérateur moment total du système commute avec un opérateur scalaire (ou pseudo-scalaire) arbitraire appartenant à ce système. Notons que l'opérateur hélicité peut être également écrit sous la forme $\widehat{\lambda} = (\widehat{\mathbf{j}} \cdot \mathbf{n})$ car $\widehat{\mathbf{l}} \cdot \mathbf{n} \equiv 0$.

5.38. Faisons agir l'opérateur $\widehat{\mathbf{j}}^2$ sur la fonction donnée :

$$\widehat{\mathbf{j}}^2\Psi \equiv \left(\widehat{\mathbf{l}} + \frac{\widehat{\boldsymbol{\sigma}}}{2}\right)^2 (\widehat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{n})\chi. \tag{1}$$

Compte tenu des relations $[\widehat{j}_i, (\widehat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\mathbf{n})] = 0, \widehat{\mathbf{l}}\chi = 0$, l'expression (1) peut être représentée sous la forme

$$\widehat{\mathbf{j}}^2\Psi = (\widehat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{n}) \left(\frac{\widehat{\boldsymbol{\sigma}}}{2}\right)^2 \chi = \frac{3}{4}(\widehat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{n})\chi = \frac{3}{4}\Psi. \tag{2}$$

qui montre que la fonction Ψ correspond à l'état de valeur $j = 1/2$ du moment total.

Le fait que la fonction mentionnée corresponde à $l = 1$ est immédiat, compte tenu du résultat du problème 3.57.

Comme $\Psi^*\Psi = \chi^*(\widehat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{n})^2\chi = \chi^*\chi = \text{const}$ (qui ne dépend pas de $\mathbf{n}$), la distribution suivant les directions de l'impulsion de la particule est isotrope, de même que dans le cas de l'état $s_{1/2}$. La condition de normalisation

$$\int \Psi^*\Psi d\Omega = 4\pi\chi^*\chi = 1, \qquad \chi = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix},$$

est vérifiée pour $\chi^*\chi = |a|^2 + |b|^2 = 1/4\pi$.

A partir de la relation

$$\Psi^*\widehat{\mathbf{j}}\Psi \equiv \chi^*(\widehat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{n}) \left(\widehat{\mathbf{l}} + \frac{\widehat{\boldsymbol{\sigma}}}{2}\right) (\widehat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{n})\chi = \chi^*\frac{\widehat{\boldsymbol{\sigma}}}{2}\chi,$$

on voit que les propriétés du moment dans l'état concerné sont absolument identiques à celles du vecteur de spin dans l'état décrit par le spineur χ. Aussi, ayant choisi

$\chi = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, on obtient la fonction Ψ décrivant l'état $p_{1/2}$ de la particule ayant une projection déterminée $j_z = 1/2$ du moment total sur l'axe z.

5.39. Compte tenu du résultat obtenu dans le problème précédent, on conclut que les fonctions données décrivent les états d'une particule à valeur déterminée $j = 1/2$ du moment total. Le moment orbital l de la particule dans ces états ne possède pas de valeur déterminée ; il peut, et avec une même probabilité égale à 1/2, acquérir les deux valeurs : $l = 0$ et 1. Aussi, dans les états considérés, la parité de la particule n'a, également, pas de valeur déterminée.

Les fonctions données décrivent les états de la particule à hélicité déterminée λ (voir 5.37) :

$$\widehat{\lambda}\Psi_\pm = \frac{1}{2}(\widehat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{n})(1 \pm \widehat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{n}) = \frac{1}{2}(\widehat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{n} \pm 1)\chi = \pm\frac{1}{2}\Psi_\pm.$$

5.40. La forme la plus générale de la dépendance spin-angulaire de la fonction d'onde d'une particule de spin $s = 1/2$ correspondant au moment $l = 1$ est la suivante :

$$\Psi = (\mathbf{c} \cdot \mathbf{n})\chi. \tag{1}$$

où $\mathbf{c}$ est un vecteur arbitraire, $\chi = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ un spineur arbitraire ($\mathbf{c}$ et χ étant indépendants du vecteur $\mathbf{n}$).

Une fonction de la forme (1) ne correspond pas, en général, à une valeur déterminée j du moment total et constitue une superposition d'états $j = 1/2$ et $j = 3/2$. Pour dégager de cette fonction la partie correspondant à l'état $j = 3/2$, agissons sur la fonction (1) avec le projecteur $\widehat{P}_{j=3/2}$. La forme de cet opérateur

$$\widehat{P}_{j=3/2} = \frac{1}{3}(2 + \widehat{\mathbf{l}} \cdot \widehat{\boldsymbol{\sigma}})$$

se déduit du résultat du problème 3.49. On obtient sans peine

$$\Psi_{j=3/2} = \widehat{P}_{j=3/2}\Psi = \frac{1}{3}\{2\mathbf{c} \cdot \mathbf{n} + i(\mathbf{c} \wedge \mathbf{n}) \cdot \widehat{\boldsymbol{\sigma}}\}\chi \tag{2}$$

en accord avec l'énoncé du problème.

On laisse au lecteur le soin de normer la fonction de la forme (2), ainsi que de vérifier son orthogonalité avec la fonction d'onde de l'état $p_{1/2}$ analysée dans 5.38.

Notons que le nombre total de fonctions indépendantes de la forme (1) est six (trois choix indépendants des composantes du vecteur $\mathbf{c}$ et deux du spineur χ). Quant au nombre de fonctions indépendantes de la forme (2), il est égal à quatre.

La fonction (1) avec le choix $\mathbf{c} = (0, 0, 1)$ et $\chi = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ décrit un état de la particule avec $l_z = 0$ (voir, par exemple, 3.22) et $s_z = 1/2$ et, par conséquent, une valeur déterminée de $j_z = 1/2$ (dans ce cas le moment total j n'a pas de valeur déterminée !).

La fonction (2) avec le choix indiqué de $\mathbf{c}$ et χ est de la forme

$$\Psi_{j=3/2,j_z=1/2} = \frac{1}{3}\begin{pmatrix} 2\cos\theta \\ -\sin\theta e^{i\varphi} \end{pmatrix}$$

et décrit un état de la particule avec $j = 3/2$ et $j_z = 1/2$ (le projecteur $\widehat{P}_j$ commute manifestement avec $\widehat{j}_z$ et si la fonction (1) est une fonction propre de $\widehat{j}_z$, la fonction (2) est alors également une fonction propre de $\widehat{j}_z$ correspondant à la même valeur propre j_z).

De façon analogue, on peut obtenir la forme explicite de la fonction d'onde de l'état $p_{3/2}$ d'une particule pour d'autres valeurs de j_z.

5.41.

a) Etudions la fonction d'onde de la forme

$$\Psi = \begin{pmatrix} Y_{lm}(\theta,\varphi) \\ 0 \end{pmatrix}, \tag{1}$$

correspondant à une particule avec une valeur déterminée de l et $j_z = m + 1/2$. Cette fonction n'est pas une fonction propre de l'opérateur $\widehat{\mathbf{j}}^2$ mais constitue une superposition d'états $j = l + 1/2$ et $j = l - 1/2$.

En faisant agir le projecteur $\widehat{P}(j = l + 1/2)$ sur la fonction d'onde (1) (la forme de l'opérateur

$$\widehat{P}(j = l + 1/2) = \frac{l + 1 + \widehat{\mathbf{l}}\cdot\widehat{\boldsymbol{\sigma}}}{2l+1}$$

se déduisant du résultat du problème 3.49) et compte tenu des relations

$$\begin{aligned} &\widehat{\mathbf{l}}\cdot\widehat{\boldsymbol{\sigma}} \equiv 2\widehat{\mathbf{l}}\cdot\widehat{\mathbf{s}} = 2\widehat{l}_z\widehat{s}_z + \widehat{l}_+\widehat{s}_- + \widehat{l}_-\widehat{s}_+, \\ &\widehat{j}_+\Psi_{jj_z} = \sqrt{(j-j_z)(j+j_z+1)}\Psi_{j,j_z+1}, \\ &\widehat{j}_-\Psi_{jj_z} = \sqrt{(j+j_z)(j-j_z+1)}\Psi_{j,j_z-1}, \end{aligned} \tag{2}$$

on obtient sans peine la forme explicite des fonctions cherchées :

$$\Psi_{j=l+1/2,l,j_z=m+1/2} = C\widehat{P}(j = l + 1/2)\Psi = \frac{1}{\sqrt{2l+1}}\begin{pmatrix} \sqrt{l+m+1}Y_{lm} \\ \sqrt{l-m}Y_{l,m+1} \end{pmatrix}, \tag{3}$$

où le coefficient C est choisi de façon à normer la fonction d'onde spin-angulaire à l'unité.

b) La norme de la fonction d'onde des états ayant des valeurs déterminées des nombres quantiques l, $j = l + 1/2$, $j_z = l + 1/2$ est évidente :

$$\Psi_{l+1/2,l,l+1/2} = \begin{pmatrix} Y_{ll}(\theta,\varphi) \\ 0 \end{pmatrix},$$

En faisant agir l'opérateur sur cette fonction $\widehat{j}_-^n$, où $n = l + 1/2 - j_z$, on aboutit à la fonction $\Psi_{l+1/2,l,j_z}$. Compte tenu de ce que $\widehat{j}_- = \widehat{l}_- + \widehat{s}_-$, $\widehat{s}_-^2 = 0$ et, donc,

$$\widehat{j}_-^n = (\widehat{l}_- + \widehat{s}_-)^n = \widehat{l}_-^n + n\widehat{j}_-^{n-1}\widehat{s}_-,$$

et de la relation (2), on aboutit à la forme (3) déjà connue des fonctions :

$$\Psi_{l+1/2,l,m+1/2} = \tilde{C}\widehat{j}_-^{l-m}\begin{pmatrix} Y_{ll} \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2l+1}}\begin{pmatrix} \sqrt{l+m+1}Y_{lm} \\ \sqrt{l-m}Y_{l,m+1} \end{pmatrix}.$$

5.42. $\widehat{P}(j = l - 1/2) = (l - \widehat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \widehat{\mathbf{l}})/(2l+1)$,

$$\begin{aligned} \Psi_{j=l-1/2,l,j_z=m+1/2} &= C\widehat{P}(j = l - 1/2)\begin{pmatrix} Y_{lm} \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2l+1}}\begin{pmatrix} \sqrt{l-m}Y_{lm} \\ -\sqrt{l+m+1}Y_{l,m+1} \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

5.43. On peut démontrer cette propriété directement par le calcul. Toutefois, il est plus simple de l'établir par des considérations basées sur la commutativité des opérateurs $\widehat{j}_i$ et $\widehat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{n}$ ($[\widehat{j}_i, (\widehat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{n})] = 0$) et la nature pseudo-scalaire de l'opérateur $\widehat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{n}$.

Soit $\Psi_{jl_2j_z}$ la fonction propre des opérateurs $\widehat{\mathbf{j}}^2$, $\widehat{\mathbf{l}}^2$, $\widehat{j}_z$ avec $l_2 = j - 1/2$. Cette fonction possède une parité déterminée valant $R_2 = (-1)^{l_2}$. Etudions la fonction $\tilde{\Psi} = (\widehat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{n})\Psi_{jl_2j_z}$. On obtient sans peine

$$\begin{aligned} \widehat{j}_z\tilde{\Psi} &= \widehat{j}_z(\widehat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{n})\Psi_{jl_2j_z} = (\widehat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{n})\widehat{j}_z\Psi_{jl_2j_z} = j_z(\widehat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{n})\Psi_{jl_2j_z} = j_z\tilde{\Psi}, \\ \widehat{\mathbf{j}}^2\tilde{\Psi} &= \widehat{\mathbf{j}}^2(\widehat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{n})\Psi_{jl_2j_z} = (\widehat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{n})\widehat{\mathbf{j}}^2\Psi_{jl_2j_z} = j(j+1)\tilde{\Psi}, \\ \widehat{R}\tilde{\Psi} &= \widehat{R}(\widehat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{n})\Psi_{jl_2j_z} = -(\widehat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{n})\widehat{R}\Psi_{jl_2j_z} = (-1)^{l_2+1}\tilde{\Psi}. \end{aligned}$$

La fonction $\tilde{\Psi}$ est fonction propre des opérateurs $\widehat{\mathbf{j}}^2$, $\widehat{j}_z$, $\widehat{R}$; la parité de cette fonction est opposée à celle de la fonction $\Psi_{jl_2j_z}$. Etant donné que pour le j donné, les valeurs possibles du moment orbital l sont $l_{1,2} = j \pm 1/2$, et que la parité de l'état vaut $(-1)^l$, il devient évident que si dans l'état $\Psi_{jl_2j_z}$ le moment orbital est égal à l_2, alors dans l'état $\tilde{\Psi}$ il est égal à $l_1 = j + 1/2$. Ainsi, la fonction $\tilde{\Psi} \equiv \Psi_{jl_1j_z}$ est une fonction propre des opérateurs $\widehat{\mathbf{j}}^2$, $\widehat{\mathbf{l}}^2$, $\widehat{j}_z$.

Notons que

$$\tilde{\Psi}^*\tilde{\Psi} = \Psi_{jl_2j_z}^*(\widehat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{n})^2\Psi_{jl_2j_z} = \Psi_{jl_2j_z}^*\Psi_{jl_2j_z},$$

les fonctions de distribution angulaires de l'impulsion de la particule dans les états décrits par les fonctions d'onde $\tilde{\Psi}$ et $\Psi_{jl_2j_z}$ sont donc identiques.

5.44. $\Psi_{j,j_z,\lambda=\pm 1/2} = \frac{1}{\sqrt{2}}\{1 \pm (\widehat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{n})\}\Psi_{jlj_z}$.

Compte tenu de la forme explicite des fonctions Ψ_{jlj_z} (voir 5.41), il vient

$$\Psi_{j,j_z,\lambda=1/2} = \sqrt{\frac{2}{2l+1}}\{\sqrt{l+m+1}\cos(\theta/2)\,Y_{lm} + \\ +\sqrt{l-m}\sin(\theta/2)\,\mathrm{e}^{-i\varphi}\,Y_{l,m+1}\}\begin{pmatrix}\cos(\theta/2)\\ \sin(\theta/2)\,\mathrm{e}^{i\varphi}\end{pmatrix},$$

$$\Psi_{j,j_z,\lambda=-1/2} = \sqrt{\frac{2}{2l+1}}\{\sqrt{l+m+1}\sin(\theta/2)\,Y_{lm} - \\ -\sqrt{l-m}\cos(\theta/2)\,\mathrm{e}^{-i\varphi}\,Y_{l,m+1}\}\begin{pmatrix}\sin(\theta/2)\\ -\cos(\theta/2)\,\mathrm{e}^{i\varphi}\end{pmatrix},$$

où $m = j_z - 1/2$.

5.45. La valeur moyenne du moment magnétique s'obtient directement à partir du résultat du problème 3.54 :

$$\overline{\mu}_x \equiv \langle jlj_z|\widehat{\mu}_x|jlj_z\rangle = \overline{\mu}_y = 0,$$
$$\overline{\mu}_z = \frac{j_z}{j(j+1)}\left\{\left[j(j+1) - l(l+1) + \frac{3}{4}\right]\mu_0 + \left[j(j+1) + l(l+1) - \frac{3}{4}\right]\frac{e\hbar}{4mc}\right\},$$

soit

$$\overline{\mu}_z = j_z\left[\frac{\mu_0}{j} + \frac{2j-1}{4j}\frac{e\hbar}{mc}\right], \qquad l = j - 1/2,$$
$$\overline{\mu}_z = \frac{j_z}{j+1}\left[-\mu_0 + (2j+3)\frac{e\hbar}{4mc}\right], \qquad l = j + 1/2.$$

CHAPITRE 6

MOUVEMENT DANS UN CHAMP MAGNÉTIQUE

6.1. On doit imposer au potentiel vecteur la condition complémentaire div$\mathbf{A} = 0$ (choix de jauge dit coulombien) ; dans ce cas $\widehat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{A} = \mathbf{A} \cdot \widehat{\mathbf{p}}$

6.2. En physique classique, la vitesse et l'impulsion généralisée d'une particule chargée dans un champ électromagnétique sont liées par la relation

$$\mathbf{v} = \frac{1}{\mu}\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r})\right).$$

La transposition naturelle à la mécanique quantique de cette relation est donnée par l'opérateur hermitien de la vitesse de la particule

$$\widehat{\mathbf{v}} = \frac{1}{\mu}\left(\widehat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r})\right). \tag{1}$$

Cette relation peut être obtenue directement à partir du commutateur $\widehat{\mathbf{v}} = \frac{i}{\hbar}[\widehat{H}, \mathbf{r}]$ (voir 7.2). En utilisant la relation (1), on obtient sans peine

$$\begin{aligned}
&[\widehat{v}_i, \widehat{x}_k] = -\frac{i\hbar}{\mu}\delta_{ik}, \\
&[\widehat{v}_i, \widehat{v}_k] = -\frac{e}{\mu^2 c}\left\{[\widehat{p}_i, A_k] + [A_i, \widehat{p}_k]\right\} = \frac{ie\hbar}{\mu^2 c}\left\{\frac{\partial A_k}{\partial x_i} - \frac{\partial A_i}{\partial x_k}\right\} = \frac{ie\hbar}{\mu^2 c}\varepsilon_{ikl}B_l.
\end{aligned} \tag{2}$$

La dernière ligne (2) peut être écrite sous forme vectorielle :

$$\widehat{\mathbf{v}} \wedge \widehat{\mathbf{v}} = \frac{ie\hbar}{\mu^2 c}\mathbf{B}(\mathbf{r}) \tag{3}$$

(si le lecteur n'est pas à l'aise avec les formules d'analyse vectorielle on l'invite, pour obtenir les relations (2) et (3), à étudier les commutateurs $[\widehat{v}_x, \widehat{v}_y]$, $[\widehat{v}_x, \widehat{v}_z]$, etc., en tenant compte de $\mathbf{B} = \text{rot } \mathbf{A}$).

6.3. En mécanique classique, le mouvement d'une particule chargée dans un champ magnétique homogène suivant le plan perpendiculaire au champ magnétique s'effectue

sur un cercle (orbite de Larmor) dont le carré du rayon ρ^2_{Lar} vaut

$$\boldsymbol{\rho}^2_{\text{Lar}} = \frac{1}{\omega_0^2} v_\perp^2 = \frac{1}{\omega_0^2}(v_x^2 + v_y^2), \tag{1}$$

avec $\omega_0 = |e|B/\mu c$ et où l'axe z est dirigé le long du champ magnétique.

Les vecteurs $\boldsymbol{\rho}$, $\boldsymbol{\rho}_0$, $\mathbf{v}_\perp$ sont les rayons vecteurs de la particule, du centre de l'orbite (du cercle) et la vitesse de la particule dans le plan x, y ; ils sont liés par la relation

$$\boldsymbol{\omega} \wedge (\boldsymbol{\rho} - \boldsymbol{\rho}_0) = \mathbf{v}_\perp, \tag{2}$$

où les composantes du vecteur $\boldsymbol{\omega}$ sont $\boldsymbol{\omega} = \left(0, 0, \omega = \frac{-eB}{\mu c} = \frac{-e}{|e|}\omega_0\right)$. La formule (2) exprime la nature du mouvement de la particule dans le plan x, y (rotation uniforme), le signe de ω déterminant le sens de la rotation.

D'après l'expression (2) :

$$x_0 = x - \frac{1}{\omega} v_y, \qquad y_0 = y + \frac{1}{\omega} v_x, \qquad \rho_0^2 = x_0^2 + y_0^2.$$

Pour généraliser à la mécanique quantique les grandeurs x_0, y_0, $\boldsymbol{\rho}_0^2$, $\boldsymbol{\rho}^2_{\text{Lar}}$, il est naturel d'introduire les opérateurs des grandeurs correspondantes sous la forme

$$\widehat{x}_0 = \widehat{x} - \frac{1}{\omega}\widehat{v}_y = x - \frac{1}{\mu\omega}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial y} - \frac{e}{c}A_y\right),$$
$$\widehat{y}_0 = \widehat{y} + \frac{1}{\omega}\widehat{v}_x, \qquad \widehat{\boldsymbol{\rho}}_0^2 = \widehat{x}_0^2 + \widehat{y}_0^2, \qquad \widehat{\boldsymbol{\rho}}^2_{\text{Lar}} = \frac{1}{\omega_0^2}(\widehat{v}_x^2 + \widehat{v}_y^2),$$

où l'opérateur vitesse $\widehat{\mathbf{v}}$ a été introduit dans le problème précédent.

On établit sans peine les relations de commutation suivantes[1]

$$[\widehat{H}, \widehat{x}_0] = [\widehat{H}, \widehat{y}_0] = [\widehat{H}, \widehat{\boldsymbol{\rho}}_0^2] = [\widehat{H}, \widehat{\boldsymbol{\rho}}^2_{\text{Lar}}] = 0,$$
$$[\widehat{x}_0, \widehat{y}_0] = -\frac{i\hbar c}{eB}, \qquad [\widehat{\boldsymbol{\rho}}_0^2, \widehat{\boldsymbol{\rho}}^2_{\text{Lar}}] = 0$$

(pour le calcul des commutateurs, utiliser les résultats obtenus dans le problème précédent et le problème 1.9).

La commutativité des opérateurs étudiés avec l'hamiltonien signifie que les grandeurs x_0, y_0, $\boldsymbol{\rho}_0^2$, $\boldsymbol{\rho}^2_{\text{Lar}}$ constituent des intégrales du mouvement, comme dans le cas classique.

6.4.

a) Les opérateurs $\widehat{p}_y$ et $\widehat{p}_z$ commutent entre eux et avec l'hamiltonien

$$\widehat{H} = \frac{1}{2\mu}\left\{\widehat{p}_x^2 + \left(\widehat{p}_y - \frac{e}{c}B_0 x\right)^2 + \widehat{p}_z^2\right\}.$$

---

1 Rappelons que $\widehat{H} = \frac{1}{2\mu}\left(\widehat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 \equiv \frac{\mu\widehat{\mathbf{v}}^2}{2}$, $\mathbf{B} = \text{rot}\ \mathbf{A} = (0, 0, B)$.

La solution du problème peut être obtenue sans faire de choix de jauge du potentiel vecteur, mais le calcul se simplifie un peu si l'on utilise la jauge $\mathbf{A} = (0, Bx, 0)$.

Les fonctions propres de l'hamiltonien peuvent être choisies de façon à ce qu'elles soient aussi fonctions propres des opérateurs $\widehat{p}_y$ et $\widehat{p}_z$:

$$\Psi_{Ep_yp_z}(x,y,z) = \frac{1}{2\pi\hbar}\exp\left[\frac{i}{\hbar}(p_y y + p_z z)\right]\psi(x). \tag{1}$$

Les niveaux d'énergie de la particule et la dépendance des fonctions propres par rapport à la variable x s'obtiennent à partir de l'équation

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\psi''(x) + \frac{1}{2\mu}\left(p_y - \frac{eB_0 x}{c}\right)^2\psi(x) = E_t\psi(x), \tag{2}$$

où l'on a introduit l'énergie E_t du mouvement transversal :

$$E_t = E - p_z^2/2\mu.$$

Comme la solution de l'équation (2) s'exprime tout naturellement au moyen de la solution bien connue de l'équation de Schrödinger de l'oscillateur harmonique linéaire, on obtient les fonctions propres et les niveaux d'énergie de la particule sous la forme

$$\Psi_{np_yp_z}(x,y,z) = \frac{1}{2\pi\hbar}\exp\left[\frac{i}{\hbar}(p_y y + p_z z)\right]\Psi_n^{\text{osc}}\left(x - \frac{cp_y}{eB_0}\right),$$
$$E_{np_z} = \frac{|e|\hbar B_0}{\mu c}\left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{p_z^2}{2\mu}, \qquad n = 0, 1, 2, \ldots$$

Notons que les niveaux d'énergie du mouvement transversal (*les niveaux de Landau*)

$$(E_t)_n = \frac{|e|\hbar B_0}{\mu c}\left(n + \frac{1}{2}\right), \qquad n = 0, 1, 2, \ldots$$

sont discrets. Leur multiplicité est infinie (l'énergie ne dépend pas de la grandeur p_y qui prend des valeurs arbitraires $-\infty < p_y < +\infty$. La partie "transversale" de la fonction propre $\Psi_{np_yp_z}$ ne se norme pas à l'unité. Aussi, dans ces états stationnaires, la particule ne se localise-t-elle pas dans un domaine limité de l'espace (suivant la direction transversale) malgré la nature discrète du spectre d'énergie (voir de même 6.10).

b)

$$\Psi_{np_xp_z} = \frac{1}{2\pi\hbar}\exp\left[\frac{i}{\hbar}(p_x x + p_z z)\right]\Psi_n^{\text{osc}}\left(y + \frac{cp_x}{eB_0}\right),$$

les niveaux d'énergie E_{np_z} ne dépendent évidemment pas du choix de jauge du potentiel vecteur, c'est-à-dire qu'ils s'expriment avec la même formule qu'en a).

6.5. Compte tenu du fait que les deux systèmes de fonctions propres de l'hamiltonien $\Psi_{np_yp_z}(x,y,z)$ et $\Psi_{np_xp_z}(x,y,z)$ sont complets, chaque fonction de l'un des systèmes

peut être représentée sous forme d'une superposition de fonctions propres de l'autre système ; en particulier,

$$\Psi_{np_xp_z}(x,y,z) = \sum_{n'} \int C_{np_xp_z}^{n'p'_yp'_z} \Psi_{n'p'_yp'_z}(x,y,z) dp'_y dp'_z. \tag{1}$$

Les coefficients de ce développement peuvent être calculés suivant la formule générale

$$C_{np_xp_z}^{n'p'_yp'_z} = \int \Psi^*_{n'p'_yp'_z} \Psi_{np_xp_z} dV. \tag{2}$$

Etant donné que ces systèmes de fonctions décrivent un même système physique et que l'énergie du mouvement transversal de la particule dans un champ magnétique homogène se détermine de façon univoque par le nombre quantique n (ou n'), il peut sembler à première vue que les coefficients $C_{np_xp_z}^{n'p'_yp'_z}$ ne sont différents de zéro que pour $n = n'$. Or il n'en est pas ainsi ! Bien que le système physique soit le même, il est caractérisé de façon formelle par des hamiltoniens différents dont la forme dépend du choix de jauge affectant le potentiel vecteur. Les fonctions propres de l'hamiltonien pour un choix de jauge donné ne sont donc pas fonctions propres pour un autre choix.

Pour obtenir une relation entre les fonctions d'onde étudiées ne comprenant que des termes avec $n = n'$, on peut remarquer que la transformation de jauge peut être associée à une transformation unitaire réalisée par l'opérateur

$$\widehat{U} = \exp\left(\frac{ie}{\hbar c} f\right),$$

où f détermine la transformation de jauge

$$\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla f.$$

Dans le cas considéré $\mathbf{A} = (0, Bx, 0)$, $\mathbf{A}' = (-By, 0, 0)$, de sorte que $f = -Bxy$. Comme les fonctions propres $\Psi_{np_yp_z}$ de l'hamiltonien $\widehat{H}$ (pour le choix de jauge $\mathbf{A}$) deviennent après la transformation unitaire $\Psi' = \widehat{U}\Psi_{np_yp_z}$ des fonctions propres de l'hamiltonien $\widehat{H}'$ (pour le choix de jauge $\mathbf{A}'$) correspondant aux mêmes valeurs propres, la relation cherchée prend la forme

$$\Psi_{np_xp_z} = \exp\left(-\frac{ieB}{\hbar c} xy\right) \int C_{p_x}^{p_y} \Psi_{np_yp_z} dp_y.$$

6.6. L'hamiltonien est de la forme ($\hbar\,\widehat{\mathbf{l}} = \widehat{\mathbf{r}} \wedge \widehat{\mathbf{p}} = -i\hbar\,\widehat{\mathbf{r}} \wedge \boldsymbol{\nabla}$)

$$\widehat{H} = \frac{\widehat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} - \frac{e\hbar}{2\mu c}\mathbf{B}_0 \cdot \widehat{\mathbf{l}} + \frac{e^2}{8\mu c^2}(\mathbf{B}_0 \wedge \mathbf{r})^2.$$

Après avoir choisi l'axe z le long du champ $\mathbf{B}_0$, on note que les opérateurs $\widehat{l}_z$ et $\widehat{p}_z$ commutent entre eux et avec l'hamiltonien. Aussi, les fonctions propres de l'opérateur

$\widehat{H}$ peuvent-elles être choisies comme étant simultanément des fonctions propres des opérateurs $\widehat{l}_z$ et $\widehat{p}_z$. Ces fonctions sont de la forme (en coordonnées cylindriques)

$$\Psi_{Emp_z}(\rho, z, \varphi) = \frac{1}{2\pi\sqrt{\hbar}} \exp\left[i\left(m\varphi + \frac{p_z z}{\hbar}\right)\right] f(\rho), \tag{1}$$

où la fonction $f(\rho)$ satisfait à l'équation

$$\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\rho\frac{d}{d\rho}f + \left[\frac{2\mu E_t}{\hbar^2} - \frac{m^2}{\rho^2} + \frac{emB_0}{\hbar c} - \frac{e^2 B_0^2 \rho^2}{4\hbar^2 c^2}\right] f = 0, \tag{2}$$

qui définit également le spectre d'énergie du mouvement transversal : $E_t = E - p_z^2/2\mu$. En introduisant les notations

$$a = \sqrt{\frac{\hbar c}{|e|B_0}} > 0, \qquad k_t^2 = \frac{2\mu E_t}{\hbar^2} = \frac{1}{\hbar^2}(2\mu E_t - p_z^2) \tag{3}$$

et en effectuant le changement de variable $x = \rho^2/2a^2$, l'équation (2) prend la forme

$$\frac{d^2 f}{dx^2} + \frac{1}{x}\frac{df}{dx} + \left[\frac{k_t^2 a^2}{2x} - \frac{m^2}{4x^2} + \frac{e}{|e|}\frac{m}{2x} - \frac{1}{4}\right] f = 0. \tag{4}$$

On cherche une solution de cette équation sous la forme

$$f(x) = \mathrm{e}^{-x/2} x^{|m|/2} w(x). \tag{5}$$

L'équation (4) devient

$$xw'' + (|m| + 1 - x)w' - \frac{1}{2}\left(1 + |m| - \frac{e}{|e|}m - k_t^2 a^2\right) w = 0. \tag{6}$$

La solution de cette équation doit être choisie sous la forme

$$w(x) = CF\left[\frac{1}{2}\left(1 + |m| - \frac{e}{|e|}m - k_t^2 a^2\right), |m| + 1, x\right], \tag{7}$$

où F est une fonction hypergéométrique dégénérée (la seconde solution de l'équation (6), linéairement indépendante de (7), diverge pour x (et ρ) $\to 0$, et, par suite, ne remplit pas la condition aux limites de la fonction d'onde pour $\rho \to 0$).

La fonction $w(x)$ dans (7) doit se réduire à un polynôme : dans le cas contraire elle se comporterait comme e^x pour $x \to \infty$ et la fonction f (et avec elle la fonction propre de l'hamiltonien) serait croissante pour x (et ρ) $\to \infty$ car $\mathrm{e}^{x/2} = \exp(\rho^2/4a^2)$. La fonction (7) se réduit à un polynôme si

$$\frac{1}{2}\left(1 + |m| - \frac{e}{|e|}m - k_t^2 a^2\right) = -r, \qquad r = 0, 1, 2, \ldots,$$

condition qui détermine le spectre d'énergie du mouvement transversal de la particule dans un champ magnétique homogène.

En introduisant la notation

$$2n+1 \equiv 2r+1+|m|-\frac{e}{|e|}m, \qquad n=0,1,2,\ldots, \tag{8}$$

on aboutit à l'expression suivante des niveaux d'énergie du mouvement transversal :

$$(E_t)_n = \hbar\omega_0(n+1/2), \qquad \omega_0 = \frac{|e|B_0}{\mu c}. \tag{9}$$

A partir des relations (8) et (9), on déduit qu'au niveau d'énergie $(E_t)_n$ donc à une valeur donnée n, correspondent des états de la particule ayant les valeurs suivantes de la projection du moment m

$$\begin{aligned} m &= -n, -n+1, \ldots, -1, 0, +1, \ldots, +\infty, && \text{pour } e>0,\\ m &= -\infty, \ldots, -1, 0, +1, \ldots, n, && \text{pour } e<0, \end{aligned}$$

de sorte que chaque niveau a une multiplicité infinie.

Les fonctions propres de l'hamiltonien $\widehat{H}$ sont de la forme

$$\Psi_{nmp_z} = C\left(\frac{\rho}{a}\right)^{|m|} \exp\left[im\varphi + \frac{i}{\hbar}p_z z - \frac{\rho^2}{4a^2}\right] F(-r, |m|+1, \rho^2/2a^2), \tag{10}$$

où r s'exprime au moyen de n, m selon (8).

Notons que les fonctions propres de l'hamiltonien (10) décrivent des états stationnaires d'une particule dans un champ magnétique homogène, qui sont localisés, dans le plan transversal ; elles peuvent donc être normées à l'unité (dans le plan x, y).

6.7. Le spectre des valeurs propres des opérateurs $\widehat{\boldsymbol{\rho}}_0^2$ et $\widehat{\boldsymbol{\rho}}_{\text{Lar}}^2$ s'établit simplement en utilisant l'analogie formelle avec l'opérateur de Hamilton d'un oscillateur linéaire pour lequel on a

$$\widehat{H} = \frac{\widehat{P}^2}{2\mu} + \frac{k\widehat{Q}^2}{2}, \qquad [\widehat{P}, \widehat{Q}] = \frac{\hbar}{i}$$

avec le spectre d'énergie : $E_n = \hbar\omega(n+1/2)$, $\omega = \sqrt{k/\mu}$, $n = 0, 1, \ldots$

En écrivant $\widehat{\boldsymbol{\rho}}_{\text{Lar}}^2$ sous la forme (voir 6.2 et 6.3)

$$\widehat{\boldsymbol{\rho}}_{\text{Lar}}^2 = \frac{1}{\omega_0^2}(\widehat{v}_x^2 + \widehat{v}_y^2) \equiv \frac{\widehat{P}^2}{\omega_0^2} + \frac{\widehat{Q}^2}{\omega_0^2}, \qquad \widehat{P} \equiv \widehat{v}_x, \qquad \widehat{Q} \equiv \widehat{v}_y, \qquad [\widehat{P}, \widehat{Q}] = \frac{ie\hbar B_0}{c\mu^2} \tag{1}$$

(l'axe z étant dirigé le long du champ magnétique), on remarque que l'expression (1) décrit un "oscillateur" avec $\mu = \omega_0^2/2$ et $k = 2/\omega_0^2$, le rôle de $\hbar$ étant joué par la grandeur $|e|\hbar B/c\mu^2$ (notons que le spectre de $\widehat{\boldsymbol{\rho}}_{\text{Lar}}^2$ ne dépend pas du signe de la partie droite du commutateur dans l'expression (1)). On obtient ainsi le spectre des valeurs propres de l'opérateur $\widehat{\boldsymbol{\rho}}_{\text{Lar}}^2$:

$$(\boldsymbol{\rho}_{\text{Lar}}^2)_n = a^2(2n+1), \qquad n = 0, 1, 2, \ldots \qquad (a^2 = \hbar c/|e|B_0).$$

De façon absolument analogue, on obtient le spectre de l'opérateur $\widehat{\boldsymbol{\rho}}_0^2$:

$$\widehat{\boldsymbol{\rho}}_0^2 = \widehat{x}_0^2 + \widehat{y}_0^2, \qquad [\widehat{x}_0, \widehat{y}_0] = -i\hbar c/eB_0, \qquad (\boldsymbol{\rho}_0^2)_k = a^2(2k+1), \qquad k = 0, 1, 2, \ldots,$$

On a de plus les relations

$$\widehat{\boldsymbol{\rho}}_{\text{Lar}}^2 = 2\widehat{H}_t/\mu\omega_0^2, \tag{2}$$

$$\widehat{\boldsymbol{\rho}}_0^2 = \frac{2\widehat{H}_t}{\mu\omega_0^2} - \frac{2}{\mu\omega}\widehat{l}_z \qquad \left(\omega = -\frac{e}{|e|}\omega_0\right), \tag{3}$$

où $\widehat{H}_t$ est l'hamiltonien du mouvement transversal de la particule dans un champ magnétique $\widehat{H}_t = \widehat{H} - \widehat{p}_z^2/2\mu$. Pour obtenir (3), on a utilisé le choix de jauge suivant du potentiel vecteur : $\mathbf{A} = \frac{1}{2}\mathbf{B}_0 \wedge \mathbf{r}$. A partir de (2) et (3), on montre que les fonctions d'onde Ψ_{nmp_z}, obtenues dans le problème précédent, sont fonctions propres des opérateurs $\widehat{\boldsymbol{\rho}}_0^2$ et $\widehat{\boldsymbol{\rho}}_{\text{Lar}}^2$ pour les valeurs propres :

$$(\boldsymbol{\rho}_{\text{Lar}}^2)_n = a^2(2n+1), \qquad (\boldsymbol{\rho}_0^2)_k = a^2(2k+1), \qquad k = n + \frac{e}{|e|}m.$$

6.8. En notant Ψ_n les fonctions d'onde des états étudiés, on obtient, selon 6.6,

$$|\Psi_n|^2 = C^2(\rho/a)^{2n}\mathrm{e}^{-\rho^2/2a^2}. \tag{1}$$

En utilisant les formules

$$\Gamma(\nu) = \int_0^\infty \mathrm{e}^{-x}x^{\nu-1}dx, \qquad \Gamma(n) = (n-1)!, \qquad \Gamma(2x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}2^{2x-1}\Gamma(x)\Gamma(x+1/2),$$

on norme sans peine l'expression (1) à l'unité (dans le plan x, y) et l'on obtient les moyennes suivantes :

$$\begin{aligned} \overline{\rho} &= \int_0^\infty \rho|\Psi_n|^2 2\pi\rho d\rho = a\sqrt{2}\frac{\Gamma(n+3/2)}{\Gamma(n+1)}, \\ \overline{\rho^2} &= 2\pi\int_0^\infty \rho^3|\Psi_n|^2 d\rho = 2a^2(n+1), \qquad \pi a^2C^2 = [2^{n+1}\Gamma(n+1)]^{-1}. \end{aligned} \tag{2}$$

La valeur la plus probable $\rho_{\text{p.p.}}$ de la variable ρ, pour laquelle la fonction $2\pi\rho|\Psi_n|^2$ (densité de probabilité de distribution en ρ) est maximale, vaut $\rho_{\text{p.p.}} = a\sqrt{2n+1}$.

Dans les états décrits par la fonction d'onde Ψ_n, les opérateurs $\widehat{\boldsymbol{\rho}}_0^2$ et $\widehat{\boldsymbol{\rho}}_{\text{Lar}}^2$ possèdent des valeurs déterminées (voir problème précédent) égales à

$$(\boldsymbol{\rho}_0^2)_0 = a^2, \qquad (\boldsymbol{\rho}_{\text{Lar}}^2)_n = a^2(2n+1).$$

Dans le cas $n \gg 1$ (limite quasi classique), compte tenu du comportement asymptotique de $\Gamma(x)$ pour $x \to \infty$:

$$\Gamma(x) \approx \sqrt{2\pi}x^{x+1/2}\mathrm{e}^{-x},$$

on obtient selon (2) $\overline{\rho} \approx a\sqrt{2n}$, et donc,

$$\rho_{\text{p.p.}} = \sqrt{(\boldsymbol{\rho}^2_{\text{Lar}})_n} \approx \sqrt{\overline{\rho^2}} \approx \overline{\rho} \approx a\sqrt{2n} \gg a. \tag{3}$$

Les relations (3) signifient que la distribution radiale (en ρ) de la particule pour $n \gg 1$ présente un maximum étroit près de la valeur $\rho_{\text{p.p.}}$. La grandeur $2\pi\rho|\Psi_n|^2$ peut alors prendre la forme

$$\begin{aligned} 2\pi\rho|\Psi_n|^2 &= \tilde{C}(\rho/a)^{2n+1}\exp(-\rho^2/2a^2) = \tilde{C}\exp\left\{-\frac{\rho^2}{2a^2} + (2n+1)\ln\frac{\rho}{a}\right\} \\ &\approx \tilde{\tilde{C}}\exp\left\{-\frac{(\rho-\rho_{\text{p.p.}})^2}{a^2}\right\}, \qquad \tilde{\tilde{C}} = \frac{1}{a\sqrt{\pi}}, \end{aligned} \tag{4}$$

(l'argument de l'exponentielle est développé ici en série au voisinage du maximum atteint au point $\rho_{\text{p.p.}}$). De (4), il s'ensuit que

$$\Delta\rho \equiv \sqrt{\overline{\rho^2} - \overline{\rho}^2} \approx a/\sqrt{2} \ll \overline{\rho}.$$

Donc la probabilité de présence de la particule n'est manifestement non nulle que dans un anneau étroit de rayon $a\sqrt{2n}$ et de largeur a. Cela correspond au passage à la limite classique et à l'orbite circulaire de la particule ; de plus, le rayon de l'orbite dépend de l'énergie de la particule exactement de la même façon que dans le cas de la mécanique classique. Notons que l'égalité $m = -\frac{e}{|e|}n$, valable pour les états de la particule avec $n \gg 1$, après substitution de $m = M_z/\hbar$ et $n \approx E_t/\hbar\omega_0$, se transforme en une relation classique entre le moment de la particule par rapport au centre de l'orbite et l'énergie de son mouvement transversal :

$$E_t = \boldsymbol{\omega}\cdot\mathbf{M} = \frac{|e|B_0}{\mu c}|M_z|.$$

Cette relation s'obtient sans peine à partir des expressions classiques

$$\mathbf{M} = \mathbf{r}\wedge\mathbf{p}, \qquad \mathbf{v}_t = \boldsymbol{\omega}\wedge\mathbf{r}, \qquad \boldsymbol{\omega} = -\frac{|e|\mathbf{B}_0}{\mu c}, \qquad \mu\mathbf{v} = \mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A} = \mathbf{p} - \frac{e}{2c}\mathbf{B}_0\wedge\mathbf{r}$$

(pour $\boldsymbol{\omega}$, voir 6.3) en réalisant les transformations suivantes :

$$E_t = \frac{\mu\mathbf{v}_t^2}{2} = \frac{1}{2}\boldsymbol{\omega}\wedge\mathbf{r}\cdot\left(\mathbf{p} + \frac{\mu}{2}\boldsymbol{\omega}\wedge\mathbf{r}\right) = \frac{\boldsymbol{\omega}\cdot\mathbf{M}}{2} + \frac{\mu}{4}\mathbf{v}_t^2 = \frac{\boldsymbol{\omega}\cdot\mathbf{M}}{2} + \frac{1}{2}E_t.$$

6.9. Pour les états avec $n = 0$, $m = \frac{e}{|e|}|m|$, on a, selon 6.6,

$$|\Psi_{n=0,m,p_z}|^2 = C^2(\rho/a)^{2|m|}\mathrm{e}^{-\rho^2/2a^2}. \tag{1}$$

Vu que l'expression (1) ne diffère de l'expression (1) du problème précédent que par la substitution de $|m|$ à n, toutes les caractéristiques de la distribution spatiale de la particule : $\overline{\rho}$, $\overline{\rho^2}$, $\rho_{\text{p.p.}}$ et la forme de $|\Psi|^2$ avec $m \gg 1$ s'obtiennent directement des résultats du problème précédent (on ne les écrit pas).

Toutefois, l'interprétation des états étudiés n'a rien de commun avec le problème précédent. L'énergie du mouvement transversal pour $n = 0$ prend une valeur minimale égale à $(E_t)_n = \hbar\omega_0/2$, et ces états sont essentiellement "non classiques".

Dans les états étudiés, les opérateurs $\widehat{\boldsymbol{\rho}}_0^2$ et $\widehat{\boldsymbol{\rho}}_{\text{Lar}}^2$ acquièrent des valeurs déterminées (voir problème 6.7) égales à

$$(\boldsymbol{\rho}_0^2)_{|m|} = a^2(2|m| + 1), \qquad (\boldsymbol{\rho}_{\text{Lar}}^2)_0 = a^2.$$

Pour $|m| \gg 1$, quand

$$\overline{\rho} \approx \sqrt{\overline{\rho^2}} \approx \rho_{\text{p.p.}} = \sqrt{(\boldsymbol{\rho}_0^2)_{|m|}} \approx a\sqrt{2|m|} \gg a,$$

la distribution radiale de la particule possède un maximum étroit au voisinage de $\rho_{\text{p.p.}}$; la largeur de ce maximum est de l'ordre de la grandeur a (voir problème précédent). On peut faire correspondre à ces états la situation classique suivante : une distribution homogène d'orbites de rayon minimal (égal à $\sqrt{(\boldsymbol{\rho}_{\text{Lar}}^2)_0} = a$) dans un domaine annulaire étroit de rayon $R = a\sqrt{2|m|} \gg a$ et de largeur de l'ordre de a.

6.10. Dans des états stationnaires du spectre discret dans un potentiel $U(\mathbf{r})$, une particule est toujours localisée dans un domaine limité de l'espace.

La propriété particulière des états du spectre discret du mouvement transversal de la particule au sein d'un champ magnétique homogène est liée au fait que les niveaux d'énergie ont une multiplicité infinie.

Soit un paquet d'ondes composé des fonctions propres Ψ_{np_y} (voir 6.4 ; la dépendance de la fonction d'onde par rapport à la variable z est négligée) :

$$\Psi_n = \int C(p_y)\Psi_{np_y}(x, y)dp_y. \tag{1}$$

Il est évident que la fonction d'onde (1) est une fonction propre de l'hamiltonien $\widehat{H}_t$; de plus, si

$$\int |C(p_y)|^2 dp_y = 1, \tag{2}$$

cette fonction est normée, c'est-à-dire qu'elle décrit une particule localisée. En particulier, les fonctions d'onde Ψ_{nm} (voir 6.6) satisfont aux conditions (1) et (2).

Et, inversement, à partir des fonctions propres normées Ψ_{nm}, il est possible de composer les fonctions d'onde de la forme

$$\tilde{\Psi}_n = \sum_m C_m(n)\Psi_{nm},$$

qui sont également fonctions propres de l'opérateur $\widehat{H}_t$; toutefois, dans le cas où $\sum |C_m|^2 = \infty$, ces fonctions décrivent une particule non localisée dans un domaine limité du plan x, y.

6.11. En dirigeant l'axe z le long du champ magnétique, l'axe x le long du champ électrique et en utilisant un choix de jauge du potentiel vecteur de la forme $A_x = 0$, $A_y = Bx$, $A_z = 0$, on obtient l'hamiltonien de la particule

$$\widehat{H} = \frac{\widehat{p}_x^2}{2\mu} + \frac{\left(\widehat{p}_y - \frac{e}{c}Bx\right)^2}{2\mu} + \frac{\widehat{p}_z^2}{2\mu} - e\mathcal{E}x. \tag{1}$$

Comme les opérateurs $\widehat{p}_y$ et $\widehat{p}_z$ commutent entre eux et avec l'hamiltonien, les fonctions propres peuvent être choisies sous la forme

$$\Psi_{Ep_yp_z}(x, y, z) = \frac{1}{2\pi\hbar}\exp\left[\frac{i}{\hbar}(p_y y + p_z z)\right] f(x). \tag{2}$$

où la fonction $f(x)$ satisfait à l'équation

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}f''(x) - e\mathcal{E}xf + \frac{\left(p_y - \frac{e}{c}Bx\right)^2}{2\mu}f = E_t f, \qquad E_t = E - p_z^2/2\mu. \tag{3}$$

L'équation (3) se réduit sans peine à l'équation de Schrödinger bien connue d'un oscillateur linéaire. On obtient, donc, les fonctions propres de l'hamiltonien (1) et les niveaux d'énergie correspondants sous la forme

$$\begin{gathered}\Psi_{np_yp_z}(x, y, z) = \frac{1}{2\pi\hbar}\exp\left[\frac{i}{\hbar}(p_y y + p_z z)\right]\Psi_n^{\text{osc}}\left(x - \frac{cp_y}{eB} - \frac{\mu c^2\mathcal{E}}{eB^2}\right),\\ E_{np_yp_z} = \hbar\omega(n + 1/2) + \frac{p_z^2}{2\mu} - \frac{c\mathcal{E}p_y}{B} - \frac{\mu c^2\mathcal{E}^2}{2B^2}, \qquad n = 0, 1, 2, \ldots,\end{gathered} \tag{4}$$

où Ψ_n^{osc} est la fonction des états stationnaires de l'oscillateur de pulsation propre $\omega_0 = |e|B/\mu c$.

Pour $\mathcal{E} = 0$ les expressions (4) se réduisent à la solution du problème 6.4, a).

6.12. Avec le choix de jauge du potentiel vecteur $\mathbf{A} = \frac{1}{2}[\mathbf{B}\wedge\mathbf{r}]$, l'hamiltonien prend la forme (en coordonnées cylindriques avec l'axe z dirigé le long du champ magnétique)

$$\widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{\partial^2}{\rho^2\partial\varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{ieB}{c\hbar}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right] + \frac{kz^2}{2} + \left(\frac{k}{2} + \frac{e^2B^2}{8\mu c^2}\right)\rho^2.$$

Les opérateurs $\widehat{l}_z$ et $\widehat{H}_l = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{kz^2}{2}$ commutent entre eux et avec l'hamiltonien. Ainsi les fonctions propres de $\widehat{H}$ peuvent être choisies comme fonctions propres de ces opérateurs, de sorte que

$$\Psi_{Emn_z} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}\Psi_{n_z}^{\text{osc}}f(\rho), \qquad m = 0, 1, \ldots, \tag{1}$$

et l'équation de Schrödinger se réduit à l'équation pour la fonction $f(\rho)$:

$$-\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\rho\frac{df}{d\rho} + \left[\frac{m^2}{\rho^2} - \frac{eBm}{c\hbar} + \left(\frac{\tilde{\omega}^2\mu^2}{\hbar^2} + \frac{e^2B^2}{4c^2\hbar^2}\right)\rho^2 - k_l^2\right]f = 0, \tag{2}$$

où

$$\tilde{\omega} = \sqrt{\frac{k}{\mu}}, \qquad k_t^2 = \frac{2\mu}{\hbar^2} E_t = \frac{2\mu}{\hbar^2}[E - \hbar\tilde{\omega}(n_2 + 1/2)].$$

En effectuant la changement de variable $\xi = \rho^2/2a^2$, où

$$a = \left(\frac{e^2B^2}{c^2\hbar^2} + \frac{4\tilde{\omega}^2\mu^2}{\hbar^2}\right)^{-1/4},$$

l'équation (2) prend la forme

$$\frac{d^2f}{d\xi^2} + \frac{1}{\xi}\frac{df}{d\xi} + \left[\frac{k_t^2a^2}{2\xi} + \frac{eBma^2}{2\hbar c\xi} - \frac{m^2}{4\xi^2} - \frac{1}{4}\right] f = 0, \tag{3}$$

absolument identique à celle de l'équation (4) du problème 6.6 (en remplaçant seulement la grandeur $k_t^2a^2 + em/|e|$ par $k_t^2a^2 + eBma^2/\hbar c$).

En utilisant la solution du problème 6.6, on obtient à partir de l'équation (3)

$$f_{n_1m} = C(\rho/a)^{|m|}\exp(-\rho^2/4a^2)F(-n_1, |m| + 1, \rho^2/2a^2),$$
$$(E_t)_{n_1m} = -\frac{e\hbar Bm}{2\mu c} + \hbar\sqrt{\tilde{\omega}^2 + \frac{e^2B^2}{4\mu^2c^2}}(1 + |m| + 2n_1), \qquad n_1 = 0, 1, 2, \ldots \tag{4}$$

Les expressions (1) et (4) définissent les fonctions propres de l'hamiltonien $\Psi_{n_1mn_2}$, ainsi que les niveaux d'énergie

$$E_{n_1mn_2} = -\frac{e\hbar Bm}{2\mu c} + \hbar\sqrt{\tilde{\omega}^2 + \frac{e^2B^2}{4\mu^2c^2}}(2n_1 + |m| + 1) + \hbar\tilde{\omega}(n_2 + 1/2). \tag{5}$$

Selon (5), les nombres quantiques du niveau fondamental sont $n_1 = n_2 = m = 0$ et, dans un champ magnétique faible $|e|B/\mu c \ll \tilde{\omega}$,

$$E_{000} \approx 3\hbar\tilde{\omega}/2 + \frac{e^2\hbar B^2}{8\mu^2c^2\tilde{\omega}}. \tag{6}$$

A partir de (6), on obtient l'expression de la susceptibilité magnétique χ_0 :

$$\chi_0 = -\frac{e^2\hbar}{4\mu^2c^2\tilde{\omega}} \qquad \left(\Delta E_0 = -\frac{\chi_0 B^2}{2}\right).$$

6.13. Avec le choix de jauge du potentiel vecteur $\mathbf{A} = \frac{1}{2}\mathbf{B} \wedge \mathbf{r}$, l'hamiltonien du mouvement transversal d'une particule chargée prend la forme

$$\widehat{H}_t = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{\hbar^2}{2\mu\rho^2}\widehat{l}_z^2 - \frac{e\hbar B}{2\mu c}\widehat{l}_z + \frac{e^2B^2\rho^2}{8\mu c^2}. \tag{1}$$

En posant dans (1) $\rho = a = \text{const}$, on obtient l'hamiltonien d'un rotateur plan dans un champ magnétique ($I = \mu a^2$) :

$$\widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2I}\frac{d^2}{d\varphi^2} + \frac{ie\hbar B}{2\mu c}\frac{d}{d\varphi} + \frac{e^2B^2I}{8\mu^2c^2}.$$

Il est évident que les fonctions propres de l'opérateur $\widehat{l}_z = -i\partial/\partial\varphi$ sont fonctions propres de l'hamiltonien ; elles sont donc de la forme

$$\Psi_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}, \qquad m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots,$$
$$E_m = \frac{\hbar^2 m^2}{2I} - \frac{e\hbar Bm}{2\mu c} + \frac{e^2B^2I}{8\mu^2c^2} \tag{2}$$

L'expression (2) montre que le champ peut être omis car c'est une grandeur constante indépendante de l'état du rotateur. D'après (2), le champ magnétique lève la double dégénérescence des niveaux d'énergie excités du rotateur libre.

L'interprétation de l'expression (2) de E_m est évidente : dans l'état décrit par la fonction d'onde Ψ_m le rotateur possède un moment magnétique $\boldsymbol{\mathcal{M}}$ dont la composante selon z est $\frac{|e|\hbar m}{2\mu c}$; ainsi l'énergie d'interaction avec le champ magnétique vaut

$$-\boldsymbol{\mathcal{M}} \cdot \mathbf{B} = -\frac{e\hbar Bm}{2\mu c}.$$

6.14. Vu que les valeurs propres E_t de l'hamiltonien du mouvement transversal de la particule, $\widehat{H}_t = \frac{1}{2\mu}\left(\widehat{\mathbf{p}}_t - \frac{e}{c}\mathbf{A}_t\right)^2$, sont positives (voir 1.23), qu'en dehors du solénoïde, la particule est libre et que pour $E_t > 0$ il n'y pas de solution décroissante de l'équation de Schrödinger d'une particule libre lorsque $\rho \to \infty$, le solénoïde ne peut "lier" la particule.

On est en mesure de montrer directement, à partir de la forme de l'équation de Schrödinger, que le spectre de l'opérateur $\widehat{H}_t$ ($E_t > 0$) est continu. Pour cela, utilisons le choix suivant de potentiel vecteur $\mathbf{A} \equiv \mathbf{A}_t = \frac{1}{2}f(\rho)\mathbf{n}_0 \wedge \mathbf{r}$, où le vecteur $\mathbf{n}_0$ est dirigé suivant l'axe du solénoïde et où la fonction $f(\rho)$ et $\mathbf{B} = \text{rot}\ \mathbf{A} = (0, 0, B(\rho))$ sont définis par

$$f(\rho) = \begin{cases} B_0, & \rho < R, \\ \left(\frac{R}{\rho}\right)^2 B_0, & \rho > R, \end{cases} \qquad B(\rho) = \begin{cases} B_0, & \rho < R, \\ 0, & \rho > R. \end{cases}$$

L'hamiltonien $\widehat{H}_t$ prend la forme

$$\widehat{H}_t = \frac{1}{2\mu}\left[-\frac{\hbar^2}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial}{\partial\rho} - \frac{\hbar^2}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{ie\hbar f(\rho)}{c}\frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{e^2\rho^2f^2(\rho)}{4c^2}\right].$$

Les fonctions propres de cet opérateur peuvent être choisies sous la forme

$$\Psi_{E_t m} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}\frac{\chi(\rho)}{\sqrt{\rho}}.$$

Dans ce cas, l'équation de Schrödinger prend la forme classique d'une équation de Schrödinger unidimensionnelle ($\chi(0) = 0$) :

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\chi'' + \left[\frac{\hbar^2(m^2 - 1/4)}{2\mu\rho^2} - \frac{e\hbar m f(\rho)}{2\mu c} + \frac{e^2\rho^2 f^2(\rho)}{8\mu c^2}\right]\chi = E_t\chi,$$

avec une énergie potentielle effective

$$U_{\text{eff}} = \frac{1}{2\mu}\left\{\left(\frac{\hbar m}{\rho} - \frac{e\rho f(\rho)}{2c}\right)^2 - \frac{\hbar^2}{4\rho^2}\right\},$$

dont l'allure est donnée sur la fig. 25 (la forme de la courbe dépend des valeurs des paramètres m, B_0, etc. ; le dessin correspond au cas $m \neq 0$ et à une valeur suffisamment grande de B_0, de sorte que $B_0R^2 \gg \hbar c/|e|$).

Sur la base de considérations générales (entre la nature du spectre d'énergie et la forme du potentiel), on constate que, pour le potentiel U_{eff} du problème et $E_t > 0$ quelconque, il n'y a qu'une solution (et une seulement) de l'équation de Schrödinger (la seconde diverge pour $\rho \to 0$). Cette solution ne décroît évidemment pas lorsque $\rho \to \infty$, de sorte qu'elle décrit une particule qui n'est pas localisée dans un domaine limité de l'espace.
La figure permet également de saisir la différence qualitative entre les cas où $R \neq \infty$ et $R = \infty$.

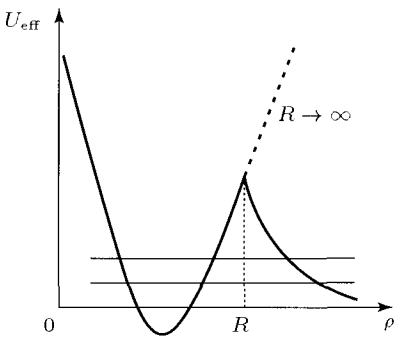

Figure 25

Pour $R \neq \infty$, il y a des niveaux d'énergie quasi discrets (les niveaux les plus bas sont marqués sur la figure). Pour $R \to \infty$, la largeur de ces niveaux tend vers zéro, et ils se transforment en niveaux habituels du spectre discret d'une particule chargée dans un champ magnétique homogène.

6.15. La solution du problème s'obtient à partir de la solution du problème précédent.

6.16. Pour résoudre ce problème, utilisons la méthode variationnelle.

Avec le choix de jauge du potentiel vecteur $\mathbf{A} = \frac{1}{2}\mathbf{B}_0 \wedge \mathbf{r}$, l'hamiltonien de la particule prend la forme (on utilise le système de coordonnées cylindriques avec l'axe z est dirigé le long du champ magnétique)

$$\widehat{H} = \widehat{H}_t^{(0)} + \frac{\widehat{p}_z^2}{2\mu} + U(r), \tag{1}$$

où

$$\widehat{H}_t^{(0)} = -\frac{\hbar^2}{2\mu\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{\hbar^2}{2\mu\rho^2}\widehat{l}_z^2 - \frac{e\hbar B\widehat{l}_z}{2\mu c} + \frac{e^2B^2\rho^2}{8\mu c^2}.$$

Examinons des fonctions d'onde normées à l'unité de la forme

$$\Psi = \sqrt{\kappa}\mathrm{e}^{-\kappa|z|}\Psi_{n=0,m}(\rho,\varphi), \tag{2}$$

où $\Psi_{n=0,m}$ est la partie "transversale" normée à l'unité (dans le plan x, y) de la fonction d'onde Ψ_{nmp_z} du problème 6.6. Cherchons la valeur moyenne de l'hamiltonien (1) dans l'état décrit par la fonction d'onde (2) :

$$\overline{E}(\kappa) = \int \Psi^* \widehat{H}\Psi\rho d\rho d\varphi dz = \frac{\hbar\omega_0}{2} + \frac{\hbar^2\kappa^2}{2\mu} + \kappa\int U(r)\mathrm{e}^{-2\kappa|z|}|\Psi_{n=0,m}|^2 dV \tag{3}$$

($\omega_0 = |e|B_0/\mu c$). On voit, à partir de l'expression (3) ($U(r) \leq 0$), que, pour des valeurs suffisamment petites du paramètre κ,

$$\overline{E}(\kappa) \leq \hbar\omega_0/2, \tag{4}$$

et comme la valeur minimale de l'énergie d'une particule dans un champ magnétique homogène vaut $\hbar\omega_0/2$, l'inégalité (4) signifie que l'hamiltonien (1) possède des valeurs propres inférieures à $\hbar\omega_0/2$; comme dans les états correspondants la particule ne peut aller vers l'infini, elle est localisée dans un domaine limité de l'espace (aussi bien dans le plan x, y que le long de l'axe z). Notons que le nombre de ces états est infiniment grand, comme d'ailleurs celui des valeurs de m.

6.17. En dirigeant l'axe z le long du champ magnétique, l'hamiltonien de la particule a pour expression

$$\widehat{H} = \frac{\widehat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} - \boldsymbol{\mu}\cdot\mathbf{B} = \frac{\widehat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} - \mu_0 B_0\widehat{\sigma}_z. \tag{1}$$

Etant donné que les opérateurs $\widehat{\mathbf{p}}$ et $\widehat{s}_z = \widehat{\sigma}_z/2$ commutent entre eux et avec l'hamiltonien (1), les fonctions propres et les valeurs propres de l'opérateur $\widehat{H}$ sont de la forme

$$\Psi_{\mathbf{p}s_z} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\exp\left(i\frac{\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}{\hbar}\right)\chi_{s_z}, \qquad E_{ps_z} = \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} - 2\mu_0 B_0 s_z,$$

où

$$\chi_{s_z=+1/2} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad \chi_{s_z=-1/2} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

6.18. Si l'on choisit l'axe z selon la direction du vecteur $\mathbf{B}_0$ à l'intérieur du solénoïde, on a l'hamiltonien du mouvement transversal d'un neutron (μ_0 étant le moment magnétique du neutron)

$$\widehat{H}_t = \frac{\widehat{\mathbf{p}}_t^2}{2\mu} - \mu_0 B(\rho)\widehat{\sigma}_z.$$

où

$$B(\rho) = \begin{cases} B_0, & \rho < R \quad (R - \text{ rayon du solénoïde}), \\ 0, & \rho > R \quad . \end{cases}$$

Comme l'opérateur $\widehat{s}_z = \widehat{\sigma}_z/2$ commute avec l'hamiltonien, les fonctions propres de $\widehat{H}_t$ peuvent être choisies sous la forme

$$\Psi_{E_t s_z} = f(\rho, \varphi)\chi_{s_z},$$

où χ_{s_z} est fonction propre de l'opérateur $\widehat{s}_z$ correspondant à la valeur propre $s_z = +1/2$ ou $-1/2$. Le problème de la détermination de la fonction $f(\rho, \varphi)$ se réduit à la résolution de l'équation de Schrödinger dans un champ bidimensionnel $U(\rho)$ de la forme

$$U(\rho) = \begin{cases} -2\mu_0 B_0 s_z \equiv -U_0 & \rho < R, \\ 0, & \rho > R. \end{cases}$$

Sachant que pour le neutron $\mu_0 < 0$, alors avec $s_z = +1/2$ le potentiel (1) constitue une barrière de potentiel et les états du spectre discret n'existent pas. Avec $s_z = -1/2$ le champ $U(\rho)$ représente un puits de potentiel de rayon R et de profondeur $U_0 = |\mu_0 B_0|$. Les états stationnaires du spectre discret dans un tel puits ont été étudiés auparavant dans les problèmes 4.9 et 4.10.

6.19. L'hamiltonien d'une particule en coordonnées cylindriques avec l'axe z dirigé le long du champ magnétique est de la forme

$$\widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{\partial^2}{\rho^2\partial\varphi^2}\right] - \mu_0 B(\rho)\widehat{\sigma}_z.$$

Les opérateurs $\widehat{s}_z$, $\widehat{p}_z$, $\widehat{l}_z$ commutent entre eux et avec l'hamiltonien ; les fonctions propres de l'opérateur $\widehat{H}$ peuvent donc s'écrire sous la forme

$$\Psi_{Ep_z m s_z} = \frac{1}{2\pi\sqrt{\hbar}}\exp\left[i\left(m\varphi + \frac{p_z z}{\hbar}\right)\right] f(\rho)\chi_{s_z},$$

où χ_{s_z} est le spineur d'une particule correspondant à une projection déterminée s_z du spin sur l'axe z. La fonction $f(\rho)$ est solution de l'équation

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial}{\partial\rho} - \frac{m^2}{\rho^2}\right] f - 2\mu_0 s_z B(\rho) f = E_t f,$$

où $E_t = E - p_z^2/2\mu$. L'équation définit également le spectre d'énergie du mouvement transversal de la particule.

6.20. L'hamiltonien est de la forme $\widehat{H} = \frac{p^2}{2\mu} - \mu_0 B(x)\widehat{\sigma}_z$. Les opérateurs $\widehat{s}_z$, $\widehat{p}_z$, $\widehat{l}_z$ commutent entre eux et avec l'hamiltonien : les fonctions propres de ces opérateurs peuvent également être fonctions propres de l'hamiltonien. Dans le processus de réflexion du neutron sur la surface de séparation "vide – champ magnétique", ce neutron possède des valeurs déterminées de s_z, p_y, p_z et de l'énergie E. Ainsi la fonction d'onde peut être représentée sous la forme

$$\Psi_{Ep_y p_z s_z} = \frac{1}{2\pi\hbar}\exp\left[\frac{i}{\hbar}(p_y y + p_z z)\right] f(x)\chi_{s_z},$$

où χ_{s_z} est le spineur du neutron ayant une valeur déterminée s_z de la projection du spin sur l'axe z. La fonction $f(x)$ satisfait à l'équation

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}f'' - 2\mu_0 s_z B(x) f = E_t f, \qquad E_l = E - (p_y^2 + p_z^2)/2\mu. \tag{1}$$

Les valeurs de l'énergie E de la particule et de l'énergie E_l du mouvement "longitudinal" se déterminent d'après les conditions du problème et sont égales à

$$E_l = \begin{cases} p_x^2/2\mu, & \text{si les particules proviennent du domaine} \\ & x < 0, \text{ alors } p_x > 0 \text{ (par la suite – cas a)),} \\ p_x^2/2\mu - 2\mu_0 s_z B_0, & \text{si les particules proviennent du domaine} \\ & x > 0, \text{ alors } p_x < 0 \text{ (cas b)).} \end{cases}$$

L'équation (1) doit être résolue avec les conditions aux limites correspondant à la réflexion et à la transmission des particules :

$$f(x) \approx \begin{cases} C_1 e^{ip'_x x/\hbar}, & x \to +\infty, \quad p'_x > 0 \quad \text{(cas a)),} \\ C_2 e^{ip'_x x/\hbar}, & x \to -\infty, \quad p'_x < 0 \quad \text{(cas b)),} \end{cases}$$

où p'_x est la composante correspondante de l'impulsion des particules réfractées (les signes "$\pm$" se rapportent aux cas a) et b) respectivement) :

$$p'_x = \pm\sqrt{p_x^2 \pm 4\mu\mu_0 s_z B_0}. \tag{2}$$

En utilisant le résultat du problème 2.46, on obtient le coefficient de réflexion :

$$R = \left(\frac{|p_x| - |p'_x|}{|p_x| + |p'_x|}\right)^2 = \left(\frac{|p_x| - |\sqrt{p_x^2 \pm 4\mu\mu_0 s_z B_0}|}{|p_x| + |\sqrt{p_x^2 \pm 4\mu\mu_0 s_z B_0}|}\right)^2. \tag{3}$$

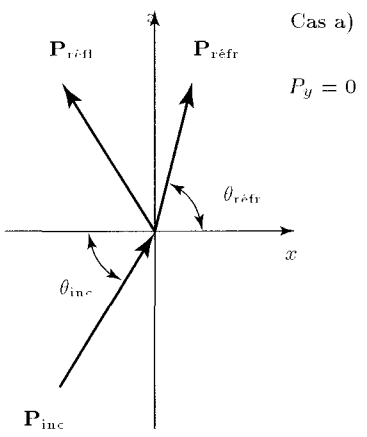

Figure 26

Les vecteurs (p_x, p_y, p_z), $(-p_x, p_y, p_z)$, (p'_x, p_y, p_z) représentant les impulsions des particules incidentes, réfléchies et réfractées se trouvent dans un même plan. Il est évident que l'angle de réflexion est égal à l'angle d'incidence (les angles sont comptés à partir de la direction de la normale à la surface de séparation, voir fig. 29), tandis que les angles de réfraction et d'incidence sont liés par l'expression

$$\tan\theta_{\text{inc}} = \tan\theta_{\text{réfr}}\sqrt{1 \pm 4\mu\mu_0 s_z B_0/p_x^2}. \tag{4}$$

Les formules (3) et (4) sont valables à condition que l'expression sous le radical ne soit pas négative. Dans le cas contraire, il y a réflexion totale des neutrons sur la surface de séparation ($R = 1$).

6.21. L'hamiltonien de la particule diffère des hamiltoniens étudiés dans 6.4 et 6.6 par la présence d'un terme supplémentaire $-\mu_0 B_0 \widehat{\sigma}_z$. La solution du problème s'exprime manifestement à partir de celles des problèmes 6.4 et 6.6. En particulier, avec le choix de jauge du potentiel vecteur utilisé dans 6.4 a), on obtient les fonctions propres et les valeurs propres de l'hamiltonien :

$$\begin{aligned}
\Psi_{np_y p_z s_z} &= \Psi_{np_y p_z}(x, y, z)\chi_{s_z}, \\
E_{np_y p_z} &= \frac{\hbar|e|B_0}{\mu c}\left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{p_z^2}{2\mu} - 2\mu_0 B_0 s_z.
\end{aligned}$$

6.22. En utilisant les propriétés des matrices de Pauli et les relations du problème 6.2, on a

$$\left\{\boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\widehat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\right\}^2 \equiv \widehat{\sigma}_i \widehat{\sigma}_k \widehat{v}_i \widehat{v}_k \mu^2 = \mu^2(\delta_{ik} + i\varepsilon_{ikl}\widehat{\sigma}_l)\widehat{v}_i \widehat{v}_k = \mu^2 \mathbf{v}^2 - \frac{e\hbar}{c}\mathbf{B}(\mathbf{r}) \cdot \boldsymbol{\sigma},$$

et l'assertion du problème s'avère évidente si l'on tient compte du fait que la valeur du moment magnétique de l'électron et du muon vaut $\mu_0 = e\hbar/2\mu c$ (e, μ étant la charge et la masse de la particule concernée).

Pour les autres particules de spin $s = 1/2$ pour lesquelles $\mu_0 \neq \frac{e\hbar}{2\mu c}$ l'hamiltonien de Pauli

$$\widehat{H} = \frac{\left(\widehat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2}{2\mu} - \mu_0 \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} + e\varphi$$

est différent de celui donné dans l'énoncé.

6.23. L'hamiltonien de l'électron (ainsi que celui du positron ou des muons $\mu^{\pm}$ de moment magnétique $\mu_0 = e\hbar/2\mu c$) peut, selon le problème précédent, être écrit sous la forme

$$\widehat{H} = \frac{\mu}{2}(\widehat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \widehat{\mathbf{v}})^2,$$

et, manifestement, l'opérateur $\widehat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \widehat{\mathbf{v}}$ commute avec l'hamiltonien.

6.24. L'hamiltonien de l'électron, selon 6.22, a la forme

$$\widehat{H} = \frac{1}{2\mu}\left\{\boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\widehat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\right\}^2,$$

et ses valeurs propres ne sont pas négatives, $E \geq 0$. L'absence d'états liés de l'électron se comprend donc aisément (voir la résolution du problème 6.14).

6.25. Selon l'électrodynamique classique, le champ magnétique créé par une densité volumique de courant $\mathbf{j}(\mathbf{r})$ vaut

$$\mathbf{B}(\mathbf{R}) = \frac{1}{c}\int \frac{\mathbf{j}(\mathbf{r}) \wedge (\mathbf{R} - \mathbf{r})}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}|^3} dV. \tag{1}$$

En l'absence de champ magnétique extérieur,

$$\mathbf{j} = -\frac{ie\hbar}{2\mu}(\Psi\boldsymbol{\nabla}\Psi^* - \Psi^*\boldsymbol{\nabla}\Psi), \tag{2}$$

($-e$ étant la charge de la particule) et compte tenu de la forme de la fonction d'onde, on voit immédiatement que, pour l'état $1s$, $\mathbf{j} = 0$ et $\mathbf{B} \equiv 0$.

La fonction d'onde des états $2p$ d'une particule est de la forme

$$\Psi = \sqrt{\frac{1}{32\pi a^5}}(\boldsymbol{\varepsilon}\cdot\mathbf{r})\mathrm{e}^{-r/2a}, \tag{3}$$

où $a = \hbar^2/Ze^2\mu$ et $|\boldsymbol{\varepsilon}|^2 = 1$ (pour la dépendance angulaire de la fonction d'onde (3) voir 3.59 et 3.60). En s'appuyant sur (1)–(3), on a

$$\mathbf{B}(0) = -\frac{ie\hbar}{64\pi\mu c a^5}\int\frac{\mathrm{e}^{-r/a}}{r^3}[\mathbf{r}\wedge\{\boldsymbol{\varepsilon}^*(\boldsymbol{\varepsilon}\cdot\mathbf{r}) - \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{\varepsilon}^*\cdot\mathbf{r})\}]dV. \tag{4}$$

(pour obtenir (4), il est utile de remarquer que, dans l'expression (2) du courant, l'opérateur $\boldsymbol{\nabla}$ n'agit que sur les facteurs $(\boldsymbol{\varepsilon}\cdot\mathbf{r})$ et $(\boldsymbol{\varepsilon}^*\cdot\mathbf{r})$ de la fonction d'onde, vu que $\mathbf{r}\wedge\boldsymbol{\nabla}f(r) = 0$; $\boldsymbol{\nabla}(\boldsymbol{\varepsilon}\cdot\mathbf{r}) = \boldsymbol{\varepsilon}$).

En introduisant le vecteur $\mathbf{b} = \boldsymbol{\varepsilon}^*\wedge\boldsymbol{\varepsilon}$, on obtient sans peine

$$\mathbf{r}\wedge\{\boldsymbol{\varepsilon}^*(\boldsymbol{\varepsilon}\cdot\mathbf{r}) - \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{\varepsilon}^*\cdot\mathbf{r})\} = \mathbf{r}\wedge(\mathbf{r}\wedge\mathbf{b}) = \mathbf{r}(\mathbf{r}\cdot\mathbf{b}) - \mathbf{b}r^2,$$

et l'intégrale de l'expression (4) prend la forme

$$\int\frac{\mathrm{e}^{-r/a}}{r^3}[\mathbf{r}(\mathbf{r}\cdot\mathbf{b}) - \mathbf{b}r^2]dV \equiv \mathbf{I}. \tag{5}$$

Pour calculer le vecteur $\mathbf{I}$, étudions l'intégrale

$$\int\frac{\mathrm{e}^{-r/a}}{r^3}x_i x_k dV = C\delta_{ik}. \tag{6}$$

En faisant la somme des termes de la relation (6) pour $i, k = 1, 2, 3$, il vient

$$3C = \int\frac{\exp(-r/a)}{r}dV = 4\pi a^2. \tag{7}$$

et on déduit de (5)–(7) que $\mathbf{I} = -\frac{8\pi a^2}{3}\mathbf{b}$ et, finalement, l'expression du champ magnétique devient :

$$\mathbf{B}(0) = \frac{ie\hbar}{24\mu c a^3}[\boldsymbol{\varepsilon}^*\wedge\boldsymbol{\varepsilon}]. \tag{8}$$

En particulier, dans les états $2p$ de la particule ayant une valeur déterminée m de la projection du moment sur l'axe z, compte tenu de la forme des vecteurs $\boldsymbol{\varepsilon}(m)$ (voir 3.60), on a, selon l'expression (8),

$$\mathbf{B}(0)_{m=0} = 0, \qquad \mathbf{B}(0)_{m=\pm1} = \left(0, 0, \mp\frac{e\hbar}{24\mu c a^3}\right). \tag{9}$$

6.26. L'opérateur moment magnétique d'une particule sans spin en l'absence de champ magnétique extérieur est de la forme ($-e$ étant la charge de la particule)

$$\widehat{\boldsymbol{\mathcal{M}}} = -\frac{e\hbar}{2\mu c}\widehat{\mathbf{l}},$$

et, donc, dans les conditions du problème ses éléments matriciels sont

$$(\widehat{\boldsymbol{\mathcal{M}}})_{mn} = -\frac{e\hbar}{2\mu c}, \int \Psi_m^* \widehat{\mathbf{l}} \Psi_n dV \tag{1}$$

ne sont différents de zéro que dans le cas où les deux fonctions d'onde Ψ_n et Ψ_m correspondent à des états $2p$ de la particule (on n'étudiera pas la superposition des états $2s$ et $2p$).

En représentant les fonctions d'onde Ψ_n et Ψ_m sous une forme analogue à l'expression (3) du problème précédent, on obtient

$$(\widehat{\boldsymbol{\mathcal{M}}})_{mn} = \frac{ie\hbar}{2\mu c}[\boldsymbol{\varepsilon}_m^* \wedge \boldsymbol{\varepsilon}_n] \tag{2}$$

(la formule (2) peut être obtenue par le calcul de l'intégrale (1) de façon analogue au procédé adopté dans le problème précédent ; elle peut, toutefois, être obtenue sans calcul si l'on utilise le résultat du problème 3.66).

6.27. L'opérateur moment orbital d'une particule est de la forme $\widehat{\mathbf{l}} = \frac{1}{\hbar}[\widehat{\mathbf{r}} \wedge \widehat{\mathbf{p}}]$. Le moment magnétique d'une particule chargée en théorie classique est de la forme

$$\widehat{\boldsymbol{\mathcal{M}}} = \frac{e}{2c}(\mathbf{r} \wedge \mathbf{v}) = \frac{e}{2\mu c}\left[\mathbf{r} \wedge \left(\widehat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\right]. \tag{1}$$

La généralisation de la relation (1) à la mécanique quantique est l'opérateur $\widehat{\boldsymbol{\mathcal{M}}}$ du moment magnétique d'une particule sans spin :

$$\widehat{\boldsymbol{\mathcal{M}}} = \frac{e}{2\mu c}\left[\mathbf{r} \wedge \left(\widehat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\right],$$

ou

$$\widehat{\boldsymbol{\mathcal{M}}} = \frac{e\hbar}{2\mu c}\widehat{\mathbf{l}} - \frac{e^2}{2\mu c^2}\mathbf{r} \wedge \mathbf{A}. \tag{2}$$

En cherchant la valeur moyenne des deux membres de la relation (2), on obtient

$$\overline{\boldsymbol{\mathcal{M}}} = \frac{e\hbar}{2\mu c}\overline{\mathbf{l}} - \frac{e^2}{2\mu c^2}\overline{\mathbf{r} \wedge \mathbf{A}}. \tag{3}$$

L'égalité (3) ne contredit pas l'invariance de jauge. Dans un état physique donné de la particule, $\overline{\boldsymbol{\mathcal{M}}}$ ne dépend pas du choix de jauge du potentiel, tandis que les grandeurs $\overline{\mathbf{l}}$ et $\overline{\mathbf{r} \wedge \mathbf{A}}$ en dépendent. Avec la transformation de jauge du potentiel

vecteur $\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla f$, la valeur de $\bar{\mathbf{I}}$ varie à cause de la modification de la fonction d'onde :

$$\Psi' = \exp\left(\frac{ie}{\hbar c} f\right) \Psi$$

(la fonction d'onde Ψ dans le choix de jauge initial du potentiel et la fonction d'onde Ψ' dans le nouveau choix de jauge décrivent le même état physique de la particule !). De plus, la variation de la grandeur $\bar{\mathbf{I}}$ est complètement compensée par celle du deuxième terme dans le second membre de la relation (3) du fait de la transformation de jauge.

Notons que l'égalité (3) peut être obtenue en partant de la définition du moment magnétique du courant :

$$\widehat{\mathcal{M}} = \frac{1}{2c} \int \mathbf{r} \wedge \mathbf{j} dV,$$

en utilisant l'expression connue

$$\mathbf{j} = \frac{ie\hbar}{2\mu}(\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi) - \frac{e^2}{\mu c} \mathbf{A} \Psi^* \Psi \tag{4}$$

de la densité de courant d'une particule chargée sans spin dans un champ magnétique.

6.28. Compte tenu de la forme explicite de la fonction d'onde Ψ_{nmp_z} (voir formule (10) du problème 6.6), du choix de jauge du potentiel vecteur $\mathbf{A} = \frac{1}{2}\mathbf{B}_0 \wedge \mathbf{r}$ utilisé dans ce cas et de l'expression de la densité de courant de la particule chargée sans spin au sein d'un champ magnétique (voir formule (4) du problème précédent), on obtient (dans le système de coordonnées cylindriques)

$$j_\rho = 0, \qquad j_z = \frac{ep_z}{\mu} |\Psi_{nmp_z}|^2, \qquad j_\varphi = \left(\frac{e\hbar m}{\mu\rho} - \frac{e^2 B_0 \rho}{2\mu c}\right) |\Psi_{nmp_z}|^2.$$

6.29. La densité de courant d'une particule chargée possédant un moment magnétique de spin a la forme

$$\mathbf{j} = \mathbf{j}_{\text{orb}} + \mathbf{j}_{\text{sp}},$$

où le premier terme est lié au mouvement orbital de la particule et est donné par la formule (4) du problème 6.27, tandis que le second est le courant du moment magnétique de spin que, pour un spin $s = 1/2$, vaut

$$\mathbf{j}_{\text{sp}} = \mu_0 c \, \mathbf{rot}(\Psi^* \widehat{\boldsymbol{\sigma}} \Psi).$$

Les fonctions d'onde des états sont de la forme

$$\Psi \equiv \Psi_{nmp_z s_z} = \Psi_{nmp_z} \chi_{s_z},$$

où χ_{s_z} est fonction propre de l'opérateur $\widehat{s}_z$. Donc,

$$\mu_0 \Psi^* \widehat{\boldsymbol{\sigma}} \Psi = (0, 0, 2\mu_0 s_z |\Psi_{nmp_z}|^2).$$

La grandeur $|\Psi_{nmp_z}|^2$ ne dépendant que de la variable ρ, il vient

$$(j_{\text{sp}})_\rho = (j_{\text{sp}})_z = 0, \qquad (j_{\text{sp}})_\varphi = -2\mu_0 c s_z \frac{\partial}{\partial\rho}|\Psi_{nmp_z}|^2.$$

Le courant du mouvement orbital dans les états considérés a la même forme que dans 6.28.

6.30. La fonction d'onde de l'électron a la forme

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}\mathrm{e}^{-r/a}\chi \qquad (a = \hbar^2/Ze^2\mu),$$

où χ est un spineur. Dans l'état considéré la densité de courant liée au mouvement orbital de l'électron est nulle et le courant est déterminé par le moment magnétique de spin :

$$\mathbf{j} = \mathbf{j}_{\text{sp}} = \mu_0 c\ \mathbf{rot}(\Psi^*\widehat{\boldsymbol{\sigma}}\Psi) = -\mu_0 c(\overline{\boldsymbol{\sigma}} \wedge \boldsymbol{\nabla}\rho),$$

où

$$\overline{\boldsymbol{\sigma}} = \chi^*\widehat{\boldsymbol{\sigma}}\chi, \qquad \rho(r) = \frac{1}{\pi a^3}\mathrm{e}^{-2r/a}.$$

Selon la formule bien connue de l'électrodynamique, le potentiel vecteur du champ magnétique cherché vaut

$$\mathbf{A}(\mathbf{R}) = \frac{1}{c}\int\frac{\mathbf{j}(\mathbf{r})dV}{|\mathbf{R}-\mathbf{r}|} = -\mu_0\overline{\boldsymbol{\sigma}} \wedge \int\frac{\boldsymbol{\nabla}\rho}{|\mathbf{R}-\mathbf{r}|}dV.$$

On effectue les transformations

$$\int\frac{\boldsymbol{\nabla}\rho dV}{|\mathbf{R}-\mathbf{r}|} = \int\left\{\boldsymbol{\nabla}\frac{\rho(r)}{|\mathbf{R}-\mathbf{r}|} - \rho\boldsymbol{\nabla}\frac{1}{|\mathbf{R}-\mathbf{r}|}\right\}dV = \boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{R}}\int\frac{\rho(r)}{|\mathbf{R}-\mathbf{r}|}dV, \tag{1}$$

où l'on a utilisé le théorème d'Ostrogradski-Gauss et la relation

$$\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{r}}f(\mathbf{R}-\mathbf{r}) = -\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{R}}f(\mathbf{R}-\mathbf{r}).$$

L'intégrale de la formule (1) a été calculée dans 4.29 :

$$\int\frac{\rho(r)dV}{|\mathbf{R}-\mathbf{r}|} = \frac{1}{R} - \left(\frac{1}{R}+\frac{1}{a}\right)\mathrm{e}^{-2R/a} \equiv f(R),$$

on obtient donc l'expression du potentiel vecteur

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = -\mu_0(\overline{\boldsymbol{\sigma}} \wedge \boldsymbol{\nabla}f(r)).$$

Nous n'écrirons pas les expressions du champ magnétique $\mathbf{B} = \mathbf{rot}\mathbf{A}$ pour des valeurs arbitraire de $\mathbf{r}$ et ne donnerons que les expressions limites :

$$\mathbf{B}(0) = \frac{8\mu_0\overline{\boldsymbol{\sigma}}}{3a^3}, \qquad \mathbf{B}(\mathbf{r}) \approx \frac{3(\boldsymbol{\mu}\cdot\mathbf{r})\mathbf{r} - \boldsymbol{\mu}r^2}{r^5} \quad \text{pour } r \to \infty, \tag{2}$$

pour les grandes distances à l'atome, le champ magnétique est celui crée par un dipôle magnétique valant $\boldsymbol{\mu} = \mu_0 \overline{\boldsymbol{\sigma}}$.

6.31. Dans les conditions du problème le courant engendrant le champ magnétique est un courant du moment magnétique de spin qui vaut

$$\mathbf{j} = (\mathbf{j}_{\text{sp}}) = \mu_0 c \mathbf{rot}(\Psi^* \widehat{\boldsymbol{\sigma}} \Psi) = -\mu_0 c(\overline{\boldsymbol{\sigma}} \wedge \boldsymbol{\nabla}\rho(r)),$$

où

$$\rho = |\psi(r)|^2, \qquad \overline{\boldsymbol{\sigma}} = \chi^* \widehat{\boldsymbol{\sigma}} \chi, \qquad \boldsymbol{\mu} \equiv \mu_0 \overline{\boldsymbol{\sigma}}.$$

(on a tenu compte du fait que la fonction d'onde de la particule est de la forme $\Psi = \psi(r)\chi$).

Pour obtenir le champ magnétique à l'origine des coordonnées

$$\begin{aligned} \mathbf{B}(0) &= \frac{1}{c}\int \frac{\mathbf{r} \wedge \mathbf{j}(\mathbf{r})}{r^3} dV = -\int \frac{1}{r^3}[\mathbf{r} \wedge (\boldsymbol{\mu} \wedge \boldsymbol{\nabla}\rho)] dV \\ &= -\int \frac{1}{r^3}[\boldsymbol{\mu}(\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\nabla}\rho) - (\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\mu})\boldsymbol{\nabla}\rho] dV \end{aligned} \tag{1}$$

on est amené à calculer des intégrales de la forme

$$\int \frac{1}{r^3} x_i \frac{\partial}{\partial x_k} \rho(r) dV = C\delta_{ik}. \tag{2}$$

Compte tenu de la relation

$$\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\nabla}\rho = x_i \frac{\partial}{\partial x_i}\rho(r) = x_i \frac{x_i}{r}\frac{\partial}{\partial r}\rho(r) = r\frac{\partial}{\partial r}\rho(r),$$

on obtient l'expression de C :

$$3C = \int \frac{1}{r^3} x_i \frac{\partial}{\partial x_i}\rho(r) dV = \int \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\rho(r) dV = -4\pi\rho(0). \tag{3}$$

A l'origine des coordonnées, le champ magnétique s'écrit donc :

$$\mathbf{B}(0) = \frac{8\pi}{3}\boldsymbol{\mu}\rho(0) = \frac{8\pi\mu_0}{3}\overline{\boldsymbol{\sigma}}|\Psi(0)|^2. \tag{4}$$

En particulier, pour l'état $1s$ de la particule dans un champ coulombien, on retrouve à partir de (4) la première des relations (2) du problème précédent.

CHAPITRE 7

EVOLUTION DES ÉTATS EN FONCTION DU TEMPS

7.1. A partir de la relation

$$\frac{d}{dt}(\widehat{A}\widehat{B}) = \frac{\partial}{\partial t}(\widehat{A}\widehat{B}) + \frac{i}{\hbar}[\widehat{H}, \widehat{A}\widehat{B}],$$

et après des transformations évidentes, grâce à l'utilisation du résultat du problème 1.9, on aboutit à la règle de dérivation cherchée :

$$\frac{d}{dt}(\widehat{A}\widehat{B}) = \widehat{\dot{A}}\,\widehat{B} + \widehat{A}\widehat{\dot{B}}.$$

7.2. Compte tenu de la forme de l'hamiltonien (en représentation $\mathbf{r}$)

$$\widehat{H} = \frac{(\widehat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)/c)^2}{2\mu} + e\varphi(\mathbf{r}, t),$$

où $\widehat{\mathbf{p}} = -i\hbar\boldsymbol{\nabla}$, on obtient sans peine

$$\widehat{\mathbf{v}} = \widehat{\dot{\mathbf{r}}} = \frac{i}{\hbar}[\widehat{H}, \mathbf{r}] = \frac{1}{\mu}\left(\widehat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right).$$

7.3.

$$\widehat{\mathbf{w}} = \frac{d\widehat{\mathbf{v}}}{dt} = \frac{\partial\widehat{\mathbf{v}}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}[\widehat{H}, \widehat{\mathbf{v}}] = \frac{\mathbf{e}}{\mu}\mathbf{E} + \frac{e}{2c\mu}\{\widehat{\mathbf{v}} \wedge \mathbf{B} - \mathbf{B} \wedge \widehat{\mathbf{v}}\}, \tag{1}$$

où

$$\mathbf{E} = -\boldsymbol{\nabla}\varphi - \frac{1}{c}\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}, \qquad \mathbf{B} = \text{rot } \mathbf{A}.$$

La relation (1) est une généralisation naturelle à la mécanique quantique de l'équation du mouvement d'une particule chargée dans un champ électromagnétique

$$\mu\mathbf{w} \equiv \mu\ddot{\mathbf{r}} = \mathbf{F} = e\mathbf{E} + \frac{e}{c}(\mathbf{v} \wedge \mathbf{B}).$$

7.4. En cherchant la valeur moyenne de l'opérateur $\widehat{f}$, on obtient

$$\overline{f} = \int \Psi_n^* \widehat{f}\, \Psi_n d\tau = -\frac{i}{\hbar} \int \Psi_n^* (\widehat{f}\widehat{H} - \widehat{H}\widehat{f}) \Psi_n d\tau = 0. \tag{1}$$

(On a tenu compte de l'équation $\widehat{H}\Psi_n = E_n \Psi_n$ et on a utilisé l'hermiticité de l'opérateur $\widehat{H}$.)

7.5.

a) L'opérateur force $\widehat{\mathbf{F}}$ en représentation $\mathbf{r}$ a la forme $\widehat{\mathbf{F}} = -\boldsymbol{\nabla} U$. Comme $\widehat{H} = \widehat{\mathbf{p}}^2/2\mu + U$, on a $\widehat{\mathbf{F}} = -\boldsymbol{\nabla} U \equiv \frac{i}{\hbar}[\widehat{H}, \widehat{\mathbf{p}}] = \widehat{\dot{\mathbf{p}}}$, et en utilisant le résultat du problème précédent, on obtient $\overline{\mathbf{F}} = 0$.

b) La valeur moyenne de l'opérateur force peut être obtenue grâce à la série de transformations suivantes :

$$\begin{aligned}
\overline{\mathbf{F}} &= -\int \Psi_n^* (\boldsymbol{\nabla} U) \Psi_n dV \\
&= -\int \boldsymbol{\nabla}(\Psi_n^* U \Psi_n) dV + \int \{(\boldsymbol{\nabla}\Psi_n^*) U \Psi_n + (\Psi_n^* U \boldsymbol{\nabla}\Psi_n)\} dV \\
&= -\int \boldsymbol{\nabla}(\Psi_n^* U \Psi_n) dV + E_n \int \boldsymbol{\nabla}(\Psi_n^* \Psi_n) dV \\
&+ \frac{\hbar^2}{2\mu} \int \{(\boldsymbol{\nabla}\Psi_n^*)(\Delta\Psi_n) + (\Delta\Psi_n^*)(\boldsymbol{\nabla}\Psi_n)\} dV
\end{aligned} \tag{1}$$

(on a tenu compte du fait que $U\Psi_n = (E_n - \widehat{\mathbf{p}}^2/2\mu)\Psi_n$). En utilisant le théorème d'Ostrogradski-Gauss, on montre que l'expression (1) est nulle. Pour cela, il faut remarquer que la dernière intégrale dans l'expression (1) peut être écrite, compte tenu de la commutativité des opérateurs $\boldsymbol{\nabla}$ et Δ et de l'hermiticité de l'opérateur Δ, comme

$$\int \{(\boldsymbol{\nabla}\Psi_n^*)(\Delta\Psi_n) + (\Delta\Psi_n^*)(\boldsymbol{\nabla}\Psi_n)\} dV = \int \boldsymbol{\nabla}(\Psi_n^* \Delta\Psi_n) dV = 0.$$

7.6. Le théorème du viriel de la mécanique classique postule que si l'énergie potentielle du système mécanique est une fonction homogène de ses coordonnées (cartésiennes) et que le mouvement du système est fini (c'est-à-dire qu'il s'effectue dans un domaine limité de l'espace) et qu'il n'y a pas de "chute des particules le centre d'intéraction", alors les valeurs moyennes par rapport au temps des énergies cinétique et potentielle du système sont liées par la relation

$$n\overline{U} = 2\overline{T}, \tag{1}$$

où n est le degré d'homogénéité de la fonction $U(x_1, x_2, \ldots, x_{3N})$, N étant le nombre de particules du système, de sorte que d'après le théorème d'Euler sur les fonctions homogènes

$$nU = \sum_{i=1}^{3N} x_i \frac{\partial U}{\partial x_i} = \sum_{a=1}^{N} \mathbf{r}_a \cdot \frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}_a}. \tag{2}$$

Le théorème du viriel est valable aussi en mécanique quantique si on remplace dans (1) les valeurs moyennes par rapport au temps par les moyennes prises dans l'état stationnaire du spectre discret. (Cela signifie que si le système est isolé, on peut ne pas considérer le mouvement de son centre de masse).

a) Compte tenu des relations entre les opérateurs

$$\frac{d\widehat{\mathbf{r}}_a}{dt} = \dot{\widehat{\mathbf{r}}}_a = \frac{1}{\mu}\widehat{\mathbf{p}}_a, \qquad \frac{d\widehat{\mathbf{p}}_a}{dt} = \dot{\widehat{\mathbf{p}}}_a = -\frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}_a},$$

(résultat du problème 7.1) et de l'égalité (2), il vient

$$\frac{d}{dt}\sum_{a=1}^{N}\widehat{\mathbf{p}}_a\widehat{\mathbf{r}}_a = \sum(\dot{\widehat{\mathbf{p}}}_a\widehat{\mathbf{r}}_a + \widehat{\mathbf{p}}_a\dot{\widehat{\mathbf{r}}}_a) = 2\widehat{T} - n\widehat{U}. \tag{3}$$

On démontre directement le théorème du viriel en mécanique quantique si l'on prend la valeur moyenne de l'égalité (3) et si l'on tient compte du résultat obtenu dans le problème 7.4.

b) Dans la démonstration par ce procédé, on se limitera au mouvement d'une particule dans un potentiel extérieur de la forme $U = \alpha r^n$. Notons par $\Psi_k(\mathbf{r})$ les fonctions propres normées de l'hamiltonien correspondant aux valeurs propres du spectre discret. Considérons les fonctions d'onde de la forme

$$\tilde{\Psi}_k(\mathbf{r}) = (1+\lambda)^{3/2}\Psi_k[(1+\lambda)\mathbf{r}], \tag{4}$$

qui, comme les fonctions propres $\Psi_k(\mathbf{r})$, sont normées à l'unité et cherchons la valeur moyenne de l'énergie de la particule dans les états décrits par les fonctions d'onde (4) :

$$\overline{E}_k(\lambda) = \int \tilde{\Psi}_k\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta + U\right)\tilde{\Psi}_k dV = (1+\lambda)^2\overline{T}_{kk} + (1+\lambda)^{-n}\overline{U}_{kk}, \tag{5}$$

où $\overline{T}_{kk}$, $\overline{U}_{kk}$ sont les valeurs moyennes des énergies cinétique et potentielle de la particule dans l'état $\Psi_k(\mathbf{r})$.

Pour $\lambda \to 0$, l'équation (5) devient

$$\overline{E}_k(\lambda) \approx E_k + (2\overline{T}_{kk} - n\overline{U}_{kk})\lambda,$$

et la condition d'extrèmum de la valeur propre de l'hamiltonien exigeant que $\left.\frac{\partial \overline{E}_k(\lambda)}{\partial \lambda}\right|_\lambda = 0$ donne la démonstration du théorème du viriel.

c) Un potentiel de la forme $U = \alpha r^n$ est caractérisé par le seul paramètre α. Aussi est-il commode de représenter les potentiels d'interaction des particules a et b sous la forme

$$U_{ab} = \alpha C_{ab}|\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b|^n,$$

où les C_{ab} sont des grandeurs sans dimension. Il est de même commode de représenter les masses des particules sous la forme $m_a = \mu_a m$, où m est une masse

étalon, de sorte que μ_a sont des grandeurs sans dimension. De plus, l'hamiltonien d'un système de N particules, dont les interactions mutuelles et celles avec un champ central extérieur sont décrites par des potentiels de la forme $U = \alpha r^n$ (où r est la distance entre deux particules ou la distance par rapport au centre du champ extérieur), prend la forme

$$\widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\sum_a \frac{\Delta_a}{\mu_a} + \sum_{a<b} \alpha C_{ab}|\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b|^n + \sum_a \alpha C_a r_a^n.$$

Les valeurs propres $E_k(m, \hbar, \alpha; C_a, C_{ab}, \mu_a, n)$ du spectre discret de cet hamiltonien ne dépendent que de trois paramètres dimensionnels m, $\hbar$, α, à partir desquels on ne peut d'une et d'une seule façon former une combinaison ayant la dimension d'une énergie :

$$\varepsilon = \alpha\left(\frac{\hbar^2}{m\alpha}\right)^{\frac{n}{n+2}},$$

par contre, on ne peut former aucun paramètre sans dimension. On a donc

$$E_k = \alpha\left(\frac{\hbar^2}{m\alpha}\right)^{\frac{n}{n+2}} \varepsilon_k(C_a, C_{ab}, \mu_a, n).$$

Compte tenu de ce que $U \equiv \alpha\partial\widehat{H}/\partial\alpha$ et en s'appuyant sur le résultat obtenu dans 1.28, on obtient

$$\overline{U}_{kk} = \alpha\frac{\partial E_k}{\partial\alpha} = \frac{2}{n+2}E_k.$$

Grâce à cette relation et à l'égalité $E_k = \overline{T}_{kk} + \overline{U}_{kk}$, on montre le théorème du viriel.

7.7. L'opérateur du moment dipolaire du système a la forme $\widehat{d}_i = e\sum_{a=1}^{N} x_{ai}$. En introduisant l'opérateur dérivée du moment dipolaire $\dot{\widehat{d}}_i$ par rapport au temps et en utilisant la formule

$$(\dot{d}_i)_{nm} = i\frac{E_n - E_m}{\hbar}(d_i)_{nm},$$

où E_m sont les niveaux d'énergie du système, on obtient sans peine

$$\sum_m (E_m - E_n)(d_i)_{nm}(d_k)_{mn} = \frac{i\hbar}{2}\sum_m (\dot{d}_i)_{nm}(d_k)_{mn} - \\ -\frac{i\hbar}{2}\sum_m (d_i)_{nm}(\dot{d}_k)_{mn} = \frac{i\hbar}{2}(\dot{d}_i d_k - d_i\dot{d}_k)_{nn} \qquad (1)$$

(on a utilisé ici la règle de multiplication des matrices).

En tenant compte de la définition de $\widehat{d_i}$ et de la commutativité des opérateurs coordonnée $\widehat{x}_{ai}$ et vitesse $\widehat{\dot{x}}_{bk} = \frac{\hbar}{i\mu}\frac{\partial}{\partial x_{bk}}$ de particules différentes ($a \neq b$),

$$\widehat{\dot{x}}_{ai}\widehat{x}_{bk} - \widehat{x}_{bk}\widehat{\dot{x}}_{ai} = \frac{\hbar}{i\mu}\delta_{ik}\delta_{ab},$$

on obtient, à partir des relations (1), pour $i = k$, du fait de l'égalité $(d_i)_{nm} = (d_i)^*_{mn}$,

$$\sum_m (E_m - E_n)|(d_i)_{nm}|^2 = \frac{i\hbar e^2}{2}\sum_{a=1}^{N}(\dot{x}_{ai}x_{ai} - x_{ai}\dot{x}_{ai})_{nn} = \frac{e^2\hbar^2 N}{2\mu}, \tag{2}$$

ce qu'il fallait démontrer[1].

7.8. Ecrivons l'équation de Schrödinger et son équation complexe conjuguée :

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta\Psi(\mathbf{r},t) + \int U(\mathbf{r},\mathbf{r}')\Psi(\mathbf{r}',t)dV', \tag{1}$$

$$-i\hbar\frac{\partial\Psi^*(\mathbf{r},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta\Psi^*(\mathbf{r},t) + \int U^*(\mathbf{r},\mathbf{r}')\Psi^*(\mathbf{r}',t)dV'. \tag{2}$$

En multipliant l'équation (1) à gauche par $\Psi^*(\mathbf{r},t)$ et l'équation (2) par $\Psi(\mathbf{r},t)$ puis en les soustrayant terme à terme, on obtient la relation

$$\frac{\partial\rho(\mathbf{r},t)}{\partial t} + \operatorname{div}\mathbf{j}(\mathbf{r},t) = \frac{1}{i\hbar}\left\{\Psi^*(\mathbf{r},t)\int U(\mathbf{r},\mathbf{r}')\Psi(\mathbf{r}',t)dV' - \right.$$
$$\left. -\Psi(\mathbf{r},t)\int U^*(\mathbf{r},\mathbf{r}')\Psi^*(\mathbf{r}',t)dV'\right\} \tag{3}$$

$\left(\text{au lieu de l'équation classique de continuité } \frac{\partial\rho}{\partial t} + \operatorname{div}\mathbf{j} = 0\right)$, où

$$\rho = |\Psi(\mathbf{r},t)|^2, \qquad \mathbf{j} = -\frac{i\hbar}{2\mu}(\Psi^*\boldsymbol{\nabla}\Psi - \Psi\boldsymbol{\nabla}\Psi^*).$$

Comme le second membre de l'équation (3) est différent de zéro (sauf dans le cas où le potentiel est local $U(\mathbf{r},\mathbf{r}') = U(\mathbf{r})\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$), la loi de conservation n'est pas vérifiée (comparer à 7.9). On note toutefois que si le potentiel non local est hermitien, la loi de conservation est vérifiée dans tout l'espace. En effet, en intégrant le relation (3) sur tout l'espace, on obtient

$$\frac{d}{dt}\int|\Psi(\mathbf{r},t)|^2dV = 0, \qquad \int|\Psi(\mathbf{r},t)|^2dV = \text{ const}$$

1 Soulignons que dans (2) il n'y a pas de sommation sur l'indice i (c'est-à-dire que la relation est valable pour les trois composantes). En effectuant cette sommation, il faut remplacer $|(d_i)_{nm}|^2$ par $|\mathbf{d}_{nm}|^2$ et multiplier le second membre de (2) par 3.

Notons de même que la relation (2) peut être généralisée immédiatement dans le cas d'un système composé de particules ayant des charges et des masses différentes.

(l'intégrale du second membre de (3) est nulle à cause de l'hermiticité de l'opérateur $\widehat{U}$; la nullité de l'intégrale du second terme du premier membre de (3) vient du théorème d'Ostrogradski-Gauss).

Le fait que la loi locale de conservation de la probabilité ne soit pas vérifiée peut s'interpréter comme la création et l'annihilation de particules en différents points de l'espace. Quant à la conservation de la norme de la fonction d'onde d'état, elle témoigne de l'égale intensité de ces processus, ce qui est garanti par l'hermiticité de l'opérateur $\widehat{U}$. Lorsque l'opérateur $\widehat{U}$ est hermitien, il y a autant de créations que d'annihilations.

7.9. Une étude classique (voir, par exemple, 7.8) conduit à la relation

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r},t)}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j}(\mathbf{r},t) = \frac{2}{\hbar} U_1(\mathbf{r}) |\Psi(\mathbf{r},t)|^2, \tag{1}$$

où, comme habituellement,

$$\rho = |\Psi(\mathbf{r},t)|^2, \qquad \mathbf{j} = -\frac{i\hbar}{2\mu}(\Psi^* \boldsymbol{\nabla}\Psi - \Psi \boldsymbol{\nabla}\Psi^*).$$

En intégrant l'équation (1) dans un volume arbitraire, il vient

$$\frac{d}{dt}\int_V |\Psi(\mathbf{r},t)|^2 dV = -\oint_S \mathbf{j} d\mathbf{s} + \frac{2}{\hbar}\int_V U_1(\mathbf{r}) |\Psi(\mathbf{r},t)|^2 dV. \tag{2}$$

Pour $U_1 \equiv 0$ la relation (2) est la loi de conservation de la probabilité qui montre que la variation de probabilité de présence de la particule dans le volume V par unité de temps est égale (avec le signe moins) au courant de probabilité à travers la surface S délimitant ce volume. Pour $U_1 \neq 0$ le second terme dans le deuxième membre de l'expression (2) perturbe ce bilan et constitue ainsi un "mécanisme" supplémentaire de variation (avec le temps) de la probabilité et, par suite, de la norme de la fonction d'onde d'état, ce qui peut s'interpréter comme une modification du nombre de particules dans le système. Il va de soi que pour $U_1 > 0$ ce "mécanisme" supplémentaire augmente le nombre de particules, tandis que pour $U_1 < 0$, il le diminue, c'est-à-dire que les particules sont absorbées. Notons que l'intensité de ces processus (de production et d'absorption) au point considéré de l'espace est proportionnelle à la densité de probabilité de présence des particules $|\Psi|^2$.

7.10. En représentant le fonction d'onde sous la forme

$$\Psi(x, t=0) = \frac{A}{4}\left(3\sin\frac{\pi x}{a} - \sin\frac{3\pi x}{a}\right)$$

et, compte tenu de la forme des fonctions propres et des valeurs propres de l'hamiltonien de la particule (voir 2.1), on obtient, en accord avec la formule générale définissant la dépendance par rapport au temps de la fonction d'onde,

$$\begin{aligned}\Psi(x,t) &= \frac{A}{4}\left(3\sin\frac{\pi x}{a}\exp\left(-\frac{i\hbar\pi^2 t}{2\mu a^2}\right) - \sin\frac{3\pi x}{a}\exp\left(-\frac{9i\hbar\pi^2 t}{2\mu a^2}\right)\right)\\ &= \frac{A}{4}\exp\left(-\frac{i\hbar\pi^2 t}{2\mu a^2}\right)\left(3\sin\frac{\pi x}{a} - \exp\left(-\frac{4i\hbar\pi^2 t}{\mu a^2}\right)\sin\frac{3\pi x}{a}\right).\end{aligned}$$

Au bout du temps $T = \mu a^2/2\pi\hbar$, la particule revient à son état initial.

7.11. Compte tenu du résultat obtenu dans le problème 4.1, on trouve

$$\Psi(\varphi, t) = \frac{A}{2}\left[1 - \exp\left(-\frac{2i\hbar t}{I}\right)\cos(2\varphi)\right].$$

Au bout du temps $T = \pi I/\hbar$ le rotateur revient à son état initial.

7.12. Représentons la fonction d'onde sous la forme

$$\Psi(\theta, t = 0) = A\cos^2\theta = \frac{A}{3}[(3\cos^2\theta - 1) + 1] \tag{1}$$

et comme le premier et le second termes dans l'expression entre crochets sont respectivement proportionnels aux harmoniques sphériques Y_{20} et Y_{00} constituant les fonctions propres de l'hamiltonien (voir 4.3), on obtient

$$\Psi(\theta, t) = \frac{A}{3}\left\{1 + (3\cos^2\theta - 1)\exp\left(-\frac{3i\hbar t}{I}\right)\right\}.$$

Au temps $T = 2\pi I/3\hbar$, le rotateur revient à l'état initial.

7.13. Développons la fonction d'onde sur la base des fonctions propres de l'opérateur impulsion (et de l'hamiltonien) :

$$\Psi(x, t = 0) = \int c(p)\Psi_p(x)dp, \qquad \Psi_p(x) = (2\pi\hbar)^{-1/2}\exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right),$$

où

$$\begin{aligned} c(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int \Psi(x, t = 0)\exp\left(-\frac{ipx}{\hbar}\right)dx \\ &= \frac{A}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int \exp\left[-\frac{x^2}{2a^2} + \frac{imv_0 x}{\hbar} - \frac{ipx}{\hbar}\right]dx. \end{aligned} \tag{1}$$

L'intégrale dans l'expression (1) se réduit tout simplement à l'intégrale de Poisson, et

$$c(p) = \frac{aA}{\sqrt{\hbar}}\exp\left[-\frac{1}{2\hbar^2}(mv_0 a - pa)^2\right].$$

La fonction d'onde $\Psi(x, t)$ de la particule à un instant t quelconque peut être obtenue à partir de l'expression

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= \int c(p)\exp\left(-\frac{ip^2 t}{2\hbar m}\right)\Psi_p(x)dp \\ &= \frac{aA}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int \exp\left[-\frac{ip^2 t}{2\hbar m} + \frac{ipx}{\hbar} - \frac{a^2}{2\hbar^2}(mv_0 - p)^2\right]dp. \end{aligned} \tag{2}$$

L'intégrale dans l'expression (2) est analogue à celle de la formule (1) et son calcul, après des transformations simples mais longues, donne

$$\Psi(x,t) = \frac{A}{\sqrt{1+\frac{ith}{ma^2}}} \exp\left[\frac{-ma^2\hbar^2(x-v_0t)^2 + i\hbar^3x^2t + ia^4m^2v_0h(2x-v_0t)}{2m(a^4h^2+t^2h^4/m^2)}\right]. \quad (3)$$

Selon (3), on obtient

$$|\Psi(x,t)|^2 = \frac{|A|^2}{\sqrt{1+\frac{\hbar^2t^2}{m^2a^4}}} \exp\left[-\frac{(x-v_0t)^2}{a^2\left(1+\frac{t^2\hbar^2}{m^2a^4}\right)}\right]. \quad (4)$$

La fonction d'onde $\Psi(x,t)$ est normée à l'unité pour $|A|^2 = (\pi a^2)^{-1/2}$. Ainsi on obtient

$$\overline{x(t)} = \int x|\Psi(x,t)|^2dx = v_0t, \qquad \overline{(\Delta x(t))^2} = \overline{(x-\overline{x(t)})^2} = \frac{a^2}{2}\left(1+\frac{t^2\hbar^2}{m^2a^4}\right). \quad (5)$$

La fonction

$$c(p,t) = \exp\left(-\frac{ip^2t}{2hm}\right)c(p)$$

est la fonction d'onde de la particule en représentation $\mathbf{p}$ et, compte tenu de la forme de $c(p)$, on obtient

$$\overline{p(t)} = \int p|c(p,t)|^2dx = mv_0, \qquad \overline{(\Delta p(t))^2} = \frac{\hbar^2}{2a^2}. \quad (6)$$

Les résultats obtenus dans (4)–(6) ont un sens simple : la fonction de distribution en coordonnées de la particule a selon (4) la forme d'une Gaussienne, dont le centre $\overline{x(t)}$ se déplace à la vitesse v_0 (égale à $\overline{p}/m$) et dont la largeur (donnée par $\sqrt{\overline{(\Delta x(t))^2}}$) augmente (le paquet s'étale). L'étalement du paquet est lié au fait que l'impulsion de la particule n'a pas de valeur déterminée.

La durée t_0 pour laquelle la largeur du paquet double est donnée par

$$t_0 = \sqrt{3}ma^2/h. \quad (7)$$

Donnons une estimation numérique du temps t_0.

1) Pour une particule de masse $m = 10^{-27}$ g (électron) avec $a = 10^{-8}$ cm (dimensions atomiques) on a, selon (7), $t_0 \sim 10^{-16}$ s.

2) Pour une particule macroscopique ($m = 10^{-6}$ g, $a = 10^{-2}$ cm) la formule (7) donne $t_0 \sim 10^{16}$ $s \sim 10^{10}$ années !

7.14. Selon le problème précédent

$$\overline{(\Delta x(t))^2} = \frac{a^2}{2}\left(1 + \frac{t^2\hbar^2}{m^2a^4}\right) \equiv \frac{a^2(t)}{2}. \tag{1}$$

A partir de l'expression (1), on trouve

$$[a^2(t)]_{\min} = t\hbar/m, \text{ c'est-à-dire } a^2(t) \geq t\hbar/m.$$

7.15. La fonction d'onde d'une particule à un instant quelconque est donnée par

$$\Psi(x,t) = \int C(E)\exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right)\Psi_E(x)dE. \tag{1}$$

Il est évident que, pour $t \to \infty$, $|\Psi(x,t)|^2$ décroît en raison de l'oscillation rapide de la fonction sous l'intégrale de l'expression (1) (plus précisément, de l'oscillation de ses parties réelle et imaginaire).

La décroissance de $|\Psi(x,t)|^2$ et la conservation de la normalisation de la fonction d'onde signifient que la particule s'éloigne à une distance infiniment grande pour $t \to \infty$. On retrouve la nature infinie du mouvement d'une particule libre classique.

7.16. En écrivant la fonction d'onde $\Psi(x, t = 0)$ comme une somme de fonctions propres de l'hamiltonien d'une particule dans le potentiel $U(x) = -\alpha\delta(x)$, on trouve

$$\Psi(x,t) = \exp\left(-\frac{iE_0t}{\hbar}\right)C_0\Psi_0(x) + \int_0^\infty C(E)\mathrm{e}^{-iEt/\hbar}\Psi_E(x)dE, \tag{1}$$

où

$$\Psi_0(x) = \sqrt{\kappa_0}\exp(-\kappa_0|x|), \qquad E_0 = -\frac{\kappa_0^2\hbar^2}{2m}, \qquad \kappa_0 = \frac{m\alpha}{\hbar^2}$$

représente la fonction d'onde normée et l'énergie de l'unique état du spectre discret dans le champ considéré (voir 2.11).

Le second terme de (1) (la contribution du spectre continu à la fonction d'onde) pour $t \to \infty$ s'annule en raison l'oscillation rapide des parties réelle et imaginaire de la fonction sous l'intégrale. On a donc

$$|\Psi(x, t = \infty)|^2 = |C_0\Psi_0(x)|^2 = \kappa_0|C_0|^2\exp(-2\kappa_0|x|). \tag{2}$$

On choisit la valeur du coefficient A dans la fonction d'onde $\Psi(x, t = 0)$ pour qu'elle soit normée : $A^2 = \beta$. Après le calcul de la grandeur

$$C_0 = \int \Psi(x, t = 0)\Psi_0^*(x)dx = 2\sqrt{\kappa_0\beta}(\kappa_0 + \beta)^{-1},$$

l'expression (2) s'écrit sous la forme

$$W(x, t = \infty) = |\Psi(x, t = \infty)|^2 = \frac{4\beta\kappa_0^2}{(\kappa_0 + \beta)^2}\exp(-2\kappa_0|x|)$$

et représente la fonction de distribution en coordonnées de la particule pour $t \to \infty$. La norme de cette fonction est donnée par

$$w \equiv \int_{-\infty}^{\infty} W(x, t = \infty) dx = 4\beta\kappa_0(\kappa_0 + \beta)^{-2} \leq 1.$$

Le fait que la norme de la fonction W ait une valeur inférieure à l'unité montre que la particule peut s'éloigner (avec une probabilité $1 - w$) à une distance infinie. On a, malgré tout, conservation de la norme de la fonction d'onde car :

$$\int |\Psi(x, t = \infty)|^2 dx = \int \lim_{t\to\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx \neq \lim_{t\to\infty} \int |\Psi(x, t)|^2 dx = 1.$$

7.17. La fonction d'onde $\Psi(x, t)$ est de la forme

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{p^2 t}{2m} - px\right)\right] \Phi_0(p) dp. \tag{1}$$

Pour $t \to \infty$ (et $x \to \pm\infty$) la phase de l'exposant de l'exponentielle dans l'expression (1) varie rapidement lors d'une faible variation de p, ce qui entraîne des oscillations rapides des parties réelle et imaginaire de la fonction sous l'intégrale, et donne donc une contribution faible à l'intégrale (1). La contribution dominante est celle correspondant aux domaines d'intégration où l'exposant de l'exponentielle se modifie le plus lentement, c'est-à-dire aux domaines proches des points p_0 définis à partir de la condition

$$\frac{\partial}{\partial p}\left(\frac{p^2 t}{2m} - px\right) = 0, \qquad p_0 = \frac{mx}{t}.$$

En sortant de l'intégrale la valeur de la fonction $\Phi_0(p_0)$ au point extrême et en calculant l'intégrale ainsi obtenue, on obtient la forme asymptotique de la fonction d'onde pour $t \to \infty$:

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &\approx \frac{\Phi_0(mx/t)}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{p^2 t}{2m} - px\right)\right] dp \\ &= \sqrt{\frac{m}{it}} \Phi_0\left(\frac{mx}{t}\right) \exp\left\{\frac{imx^2}{2\hbar t}\right\}. \end{aligned} \tag{2}$$

Notons le sens du résultat (2) : la valeur de la fonction d'onde pour $t \to \infty$ au point $x \to \pm\infty$ (de sorte que $x/t =$ const $\equiv v_0 = p_0/m$) se définit par la fonction d'onde $\Phi_0(p_0)$ en représentation $\mathbf{p}$; c'est justement cette impulsion p_0 que doit avoir la particule libre en mécanique classique pour pouvoir se déplacer d'une distance x durant le temps t.

7.18. En développant la fonction d'onde sur la base des fonctions propres de l'oscillateur harmonique, on obtient

$$\Psi(x,t) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n \exp(-iE_n t/\hbar)\Psi_n(x), \tag{1}$$

où

$$\begin{aligned}
\Psi_n(x) &= (2^n n! a\sqrt{\pi})^{-1/2} \exp(-x^2/2a^2) H_n(x/a), \\
C_n &= \int \Psi(x,t=0)\Psi_n^*(x)dx = \\
&= (2^n n!\pi)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} H_n(x/a) \exp\left[-\frac{x^2}{2a^2} - \frac{(x-x_0)^2}{2a^2} + \frac{ip_0 x}{\hbar}\right] \frac{dx}{a}
\end{aligned} \tag{2}$$

(on a choisi $A = (a\sqrt{\pi})^{-1/2}$ à partir de la condition de normalisation de la fonction d'onde).

Pour calculer C_n, utilisons la fonction génératrice des polynômes d'Hermite

$$\exp(-z^2 + 2\xi z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} H_n(\xi) z^n. \tag{3}$$

Multiplions les deux membres de la relation (3) par $\exp\left[-\xi^2 + \frac{\xi x_0}{a} + \frac{i\xi p_0 a}{\hbar}\right]$ et intégrons par rapport à ξ. A droite, le coefficient devant z^n est manifestement proportionnel à C_n. L'intégrale à gauche se transforme de la façon suivante :

$$\begin{aligned}
&\int_{-\infty}^{\infty} \exp[-z^2 - \xi^2 + 2\xi z + \xi x_0/a + ip_0 a\xi/\hbar] d\xi \\
&\quad = \sqrt{\pi} \exp\left[\frac{1}{4}\left(\frac{x_0}{a} + \frac{ip_0 a}{\hbar}\right)^2\right] \exp\left[z\left(\frac{x_0}{a} + \frac{ip_0 a}{\hbar}\right)\right] \\
&\quad = \sqrt{\pi} \exp\left[\frac{1}{4}\left(\frac{x_0}{a} + \frac{ip_0 a}{\hbar}\right)^2\right] \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}\left(\frac{x_0}{a} + \frac{ip_0 a}{\hbar}\right)^n z^n.
\end{aligned}$$

En égalant les coefficients devant z^n dans l'expression obtenue après intégration des deux membres de l'égalité (3), on obtient

$$C_n = (2^n n!)^{-1/2} \left(\frac{x_0}{a} + \frac{ip_0 a}{\hbar}\right)^n \exp\left[-\frac{x_0^2}{4a^2} + \frac{ip_0 x_0}{2\hbar} - \frac{p_0^2 a^2}{4\hbar^2}\right].$$

Vu que $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$ et compte tenu de la valeur trouvée pour C_n, la relation (1) peut s'écrire sous la forme

$$\begin{aligned}
\Psi(x,t) = &\frac{1}{\sqrt[4]{\pi a^2}} \sum_n \frac{1}{2^n n!} \left(\frac{x_0}{a} + \frac{ip_0 a}{\hbar}\right)^n H_n(x/a) \\
&\times \exp\left[-\frac{x^2}{2a^2} - \frac{x_0^2}{4a^2} - \frac{p_0^2 a^2}{4\hbar^2} + \frac{ip_0 x_0}{\hbar} - i\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)t\right].
\end{aligned} \tag{4}$$

A l'aide de la formule (3), la série (4) peut être calculée

$$\Psi(x,t) = (\pi a^2)^{-1/4} \exp\left[-\frac{x^2}{2a^2} - \frac{x_0^2}{4a^2} - \frac{p_0^2 a^2}{4\hbar^2} + \frac{ip_0 x_0}{2\hbar}\right]$$
$$\times \exp\left[-\frac{1}{4}\left(\frac{x_0}{a} + \frac{ip_0 a}{\hbar}\right)^2 e^{-2i\omega t} + \left(\frac{x_0}{a} + \frac{ip_0 a}{\hbar}\right)\frac{x}{a} e^{-i\omega t} - \frac{i\omega t}{2}\right].$$

Il est commode d'écrire cette dernière expression sous la forme

$$\Psi(x,t) = (\pi a^2)^{-1/4} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{a} - \frac{x_0}{a}\cos\omega t - \frac{p_0 a}{\hbar}\sin\omega t\right)^2\right.$$
$$+\frac{ix}{a}\left(\frac{p_0 a}{\hbar}\cos\omega t - \frac{x_0}{a}\sin\omega t\right) + \frac{ip_0 x_0}{\hbar}\sin^2\omega t$$
$$\left.+\frac{ix_0^2}{4a^2}\sin 2\omega t - \frac{ip_0^2 a^2}{4\hbar^2}\sin 2\omega t - \frac{i\omega t}{2}\right]. \tag{5}$$

D'après (5) (rappelons que $a^2 = \hbar/m\omega$), on a

$$|\Psi(x,t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi a^2}} \exp\left[-\frac{1}{a^2}\left(x - x_0\cos\omega t - \frac{p_0}{m\omega}\sin\omega t\right)^2\right], \tag{6}$$

ce qui montre que la distribution en coordonnées de la particule a la forme d'une Gaussienne dont le centre $\overline{x(t)}$ se déplace suivant la loi

$$x_0(t) \equiv \overline{x(t)} = x_0\cos\omega t + \frac{p_0}{m\omega}\sin\omega t$$

(oscillation avec une pulsation ω) dont la largeur est constante (il n'y pas d'étalement du paquet) et vaut $\overline{(\Delta x(t))^2} = a^2/2$.

Compte tenu de l'expression (5) de la fonction d'onde, on obtient les caractéristiques de la distribution en impulsions de l'oscillateur :

$$\overline{p(t)} = p_0\cos\omega t - m\omega x_0\sin\omega t, \qquad \overline{(\Delta p(t))^2} = \hbar^2/2a^2 = \text{ const.}$$

Notons que les grandeurs $\overline{x(t)}$ et $\overline{p(t)}$ varient avec le temps de la même façon que la coordonnée et l'impulsion de l'oscillateur classique.

On laisse au soin du lecteur le calcul des probabilités d'excitation des différents niveaux stationnaires dans l'état considéré pour ce problème (c'est-à-dire l'étude de la grandeur $w_n = |C_n|^2$).

7.19. Comme la fonction de Green temporelle satisfait à l'équation de Schrödinger en variables x, t, elle peut être représentée sous la forme

$$G(x,t\,;x',t') = \int \exp\left[-\frac{ip^2}{2m\hbar}(t-t')\right] C_p(x',t')\Psi_p(x)dp, \tag{1}$$

où $\Psi_p(x) = (2\pi\hbar)^{-1/2}\exp(ipx/\hbar)$ sont les fonctions propres de l'opérateur impulsion et de l'hamiltonien d'une particule libre.

De la relation (1) pour $t = t'$ (dans ce cas la fonction de Green est égale à $\delta(x - x')$) et de l'égalité

$$\int \Psi_p^*(x)\Psi_p(x')dp = \delta(x - x')$$

il découle que

$$C_p = \Psi_p^*(x'). \tag{2}$$

Les relations (1) et (2) nous permettent de trouver la forme cherchée de la fonction de Green :

$$\begin{aligned} G(x,t\,;x',t') &= \int \exp\left[-\frac{ip^2}{2m\hbar}(t-t')\right]\Psi_p^*(x')\Psi_p(x)dp \\ &= (2\pi\hbar)^{-1}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{p^2(t-t')}{2m}+px'-px\right)\right]dp \\ &= \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar(t-t')}}\exp\left[\frac{im(x-x')^2}{2\hbar(t-t')}\right]. \end{aligned} \tag{3}$$

La généralisation de la formule (3) au cas tridimensionnel est immédiate :

$$G(\mathbf{r},t\,;\mathbf{r}',t') = \left[\frac{m}{2i\pi\hbar(t-t')}\right]^{3/2}\exp\left[\frac{im(\mathbf{r}-\mathbf{r}')^2}{2\hbar(t-t')}\right].$$

A l'aide de la fonction de Green temporelle, la fonction d'onde $\Psi(x,t)$ de la particule peut être obtenue à partir de la fonction d'onde connue $\Psi(x,t=0)$ par la formule

$$\Psi(x,t) = \int G(x,t\,;x',0)\Psi(x',t'=0)dx'.$$

Notons que la dépendance de la fonction de Green par rapport aux coordonnées et au temps en $(x - x')$ et $(t - t')$ est liée à l'homogénéité de l'espace et du temps pour des particules libres.

7.20. $$G(\mathbf{p},t\,;\mathbf{p}',t') = \exp\left[-\frac{i\mathbf{p}^2(t-t')}{2m\hbar}\right]\delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}').$$

7.21. La fonction de Green n'est pas nulle pour $x, x' < 0$. Par rapport aux variables x, t elle satisfait à l'équation de Schrödinger pour une particule libre avec la condition limite $G(x = 0, t; x', t') = 0$.

Compte tenu du résultat obtenu dans le problème 7.19, on montre que la fonction de Green cherchée a la forme

$$G(x,t\,;x',t') = \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar(t-t')}}\left[\exp\left\{\frac{im(x-x')^2}{2\hbar(t-t')}\right\} - \exp\left\{\frac{im(x+x')^2}{2\hbar(t-t')}\right\}\right].$$

7.22. En utilisant dans la formule

$$\Psi(x,t) = \int G(x,t\,;x',t'=0)\Psi(x',t'=0)dx' \tag{1}$$

la valeur de la fonction d'onde $\Psi(x,0)$ donnée dans l'énoncé et la fonction de Green trouvée dans le problème précédent, on aboutit à l'expression de la fonction d'onde :

$$\Psi(x,t) = A\sqrt{\frac{ma^2}{ma^2+i\hbar t}}\left\{\exp\left[\frac{1}{2(1+\hbar^2t^2/m^2a^4)a^2}\left(-\left(x+x_0-\frac{p_0t}{m}\right)^2+\right.\right.\right.$$
$$\left.+\frac{i\hbar t}{ma^2}(x+x_0)^2+\frac{2ip_0a^2}{\hbar}(x+x_0)-\frac{itp_0^2a^2}{m\hbar}-\frac{2ip_0x_0}{\hbar}\left(a^2+\frac{h^2t^2}{m^2a^2}\right)\right)\right]-$$
$$\left.-\exp[(x\to -x)]\right\}, \tag{2}$$

où $\exp[(x\to -x)]$ désigne une expression analogue au premier terme exponentiel de la formule (2) avec la seule substitution de $(-x)$ à x.

La fonction d'onde (2) est une superposition de deux paquets d'ondes dont le premier décrit les particules heurtant la paroi, tandis que le second décrit les particules réfléchies. Pour $t < mx_0/p_0$, le premier terme dans (2) est dominant (il décrit les particules incidentes). Pour $t > mx_0/p_0$ et si $p_0 \gg h/a$ (voir la note[2]), c'est le second terme qui domine (particules réfléchies).

7.23. En représentation **p** la fonction de Green est de la forme

$$G(p,t\,;p',t') = \int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left[-\frac{iE(t-t')}{\hbar}\right]\Phi_E^*(p')\Phi_E(p)dE, \tag{1}$$

où

$$\Phi_E(p) = (2\pi F_0\hbar)^{-1/2}\exp\left[-\frac{ip^3}{6m\hbar F_0}+\frac{iEp}{\hbar F_0}\right]$$

est la fonction propre de l'hamiltonien de la particule (voir 2.45).

Le calcul de l'intégrale dans l'expression (1) donne

$$G(p,t\,;p',t') = \exp\left[-\frac{i(p^3-(p')^3)}{6m\hbar F_0}\right]\delta(p-p'-F_0(t-t')).$$

7.24. Compte tenu des relations entre les fonctions de Green en représentation **r** et en représentation **p**

$$G(x,t\,;x',t') = (2\pi\hbar)^{-1}\int\exp\left[\frac{i(px-p'x')}{\hbar}\right]G(p,t\,;p',t')dp'\,dp,$$

2 La condition $p_0 \gg \hbar/a$ est nécessaire pour assimiler le paquet d'ondes à une particule. Dans le cas contraire ($p_0 \lesssim \hbar/a$ dans l'état initial), la particule a avec une probabilité importante (~ 1), une valeur négative de l'impulsion $p < 0$ (comparer à 1.42) ; il en est de même pour la particule réfléchie. La différence entre les cas $p_o \gg h/a$ et $p_0 \lesssim h/a$ se manifeste dans le fait que pour $p_0 \lesssim \hbar/a$ le premier terme de (2) n'est plus négligeable par rapport au second, même pour $t \to \infty$.

et de la forme explicite de la fonction $G(p,t;p',t)$ trouvée dans le problème précédent, on obtient sans peine

$$G(x,t\,;x',t') = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar(t-t')}}\exp\left\{\frac{iF_0^2(t-t')^3}{24m\hbar}+\right.$$
$$\left.+\frac{iF_0}{2\hbar}(t-t')(x+x')+\frac{im(x-x')^2}{2\hbar(t-t')}\right\}.$$

On laisse le soin au lecteur d'étudier le mouvement du paquet d'ondes. Notons seulement que la densité de probabilité $|\Psi(x,t)|^2$ est une Gaussienne, avec

$$\overline{x(t)} = x_0 + p_0t/m + F_0t^2/2m, \qquad \overline{(\Delta x(t))^2} = \frac{a^2}{2}\left(1+\frac{\hbar^2t^2}{m^2a^4}\right).$$

7.25. Pour obtenir la fonction de Green il faut calculer la somme

$$G(x,t\,;x',t') = \sum_{n=0}^{\infty}\exp\left[\frac{-iE_n(t-t')}{\hbar}\right]\Psi_n^*(x')\Psi_n(x), \tag{1}$$

où

$$\Psi_n(x) = (2^n a\sqrt{\pi}n!)^{-1/2}\exp\left(-\frac{x^2}{2a^2}\right)H_n\left(\frac{x}{a}\right),$$
$$E_n = \hbar\omega(n+1/2), \qquad a = \sqrt{\hbar/m\omega}.$$

Compte tenu de la formule vérifiée par les polynômes d'Hermite (voir [12])

$$(1-t^2)^{-1/2}\exp\left[\frac{2xyt-(x^2+y^2)t^2}{1-t^2}\right] = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{H_n(x)H_n(y)}{2^n n!}t^n,$$

on calcule sans peine la somme (1) et l'on obtient la forme explicite de la fonction de Green

$$G(x,t\,;x',t') = \frac{\exp\left[\dfrac{2xx'-(x^2+(x')^2)\cos\omega(t-t')}{2ia^2\sin\omega(t-t')}\right]}{\sqrt{2\pi ia^2\sin\omega(t-t')}}, \tag{2}$$

7.26. Soit un système K' en mouvement à la vitesse V le long de l'axe x par rapport au système K, de sorte que $x = x' + Vt$, $t = t'$.

Les énergies potentielles de ces deux systèmes sont liées par la relation $U'(x',t') \equiv U'(x-Vt,t) = U(x,t)$ (on se limite, pour simplifier, au cas d'un mouvement unidimensionnel, la généralisation à un mouvement tridimensionnel s'avère évidente).

Pour obtenir l'opérateur unitaire $\widehat{U}$ (ne pas confondre avec $U(x,t)$) correspondant à la transformation de Galilée on postule que si la fonction d'onde $\Psi(x,t)$ satisfait à l'équation de Schrödinger (dans le système K)

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = \widehat{H}\Psi = \left[\frac{\widehat{p}^2}{2m}+U(x,t)\right]\Psi(x,t), \tag{1}$$

la fonction

$$\Psi'(x',t) = \widehat{U}\Psi(x,t), \tag{2}$$

est alors la solution de l'équation de Schrödinger dans le système K' (et inversement)

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi'(x',t) = \widehat{H}'\Psi' = \left[\frac{\widehat{p}'^2}{2m} + U'(x',t)\right]\Psi'(x',t), \tag{3}$$

Comme les deux fonctions Ψ et Ψ' décrivent un même état physique de la particule (exprimé dans des systèmes de coordonnées différents), la condition

$$|\Psi'(x',t)|^2 \equiv |\Psi'(x-Vt,t)|^2 = |\Psi(x,t)|^2, \tag{4}$$

exprimant l'indépendance, par rapport au système de référence choisi, de la densité de probabilité de présence de la particule en un point donné de l'espace, doit être vérifiée. A partir de (4), on montre que l'opérateur $\widehat{U}$ dans la relation (2) a la forme

$$\widehat{U} = \exp\{iS(x,t)\}, \tag{5}$$

où $S(x,t)$ est une fonction réelle. Reportant l'expression

$$\Psi'(x',t) = \exp\{iS(x,t)\}\Psi(x,t) \tag{6}$$

dans l'équation (3) que l'on réécrit avec les variables (x,t), on obtient

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t) + i\hbar\left(-\frac{\hbar}{m}\frac{\partial S}{\partial x} - V\right)\frac{\partial\Psi}{\partial x} + \\ &+ \left[U(x,t) - \frac{i\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 S}{\partial x^2} + \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 + \hbar V\frac{\partial S}{\partial x} + \hbar\frac{\partial S}{\partial t}\right]\Psi(x,t). \end{aligned} \tag{7}$$

En exigeant que l'équation (7) soit identique à (1), on obtient un système d'équations permettant de déterminer la forme de la fonction $S(x,t)$:

$$\begin{aligned} &\frac{\hbar}{m}\frac{\partial S}{\partial x} + V = 0, \\ &-\frac{i\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 S}{\partial x^2} + \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 + \hbar V\frac{\partial S}{\partial x} + \hbar\frac{\partial S}{\partial t} = 0. \end{aligned} \tag{8}$$

De la première équation de (8) on obtient

$$S(x,t) = -\frac{mVx}{\hbar} + f(t),$$

et la seconde permet d'obtenir $f(t)$:

$$S(x,t) = -\frac{mVx}{\hbar} + \frac{mV^2t}{2\hbar} + C. \tag{9}$$

L'expression (9) (où l'on peut choisir $C = 0$) détermine avec la formule (5) la forme de l'opérateur unitaire.

Compte tenu des relations (6) et (9), on établit sans peine la loi de transformation de la fonction d'onde de la particule en représentation $\mathbf{p}$ pour la transformation de Galilée :

$$\Phi'(p', t) = \Phi(p = p' + mV, t) \exp\left(-\frac{imV^2 t}{2\hbar} + \frac{ipVt}{\hbar}\right), \tag{10}$$

d'où l'on obtient la relation $w'(p - mV, t) = w(p, t)$ entre les fonctions de distribution en impulsions de la particule dans les systèmes K et K'.

7.27. Supposons que la fonction d'onde $\Psi(\mathbf{r}, t)$ soit solution de l'équation de Schrödinger

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \frac{1}{2m}\left(\widehat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)\right)^2 \Psi + e\varphi(\mathbf{r}, t)\Psi \tag{1}$$

pour un certain choix de jauge $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$, $\varphi(\mathbf{r}, t)$ des potentiels du champ électromagnétique.

L'invariance de l'équation de Schrödinger par rapport à la transformation de jauge des potentiels signifie que si l'on passe à un nouveau choix de jauge des potentiels

$$\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \boldsymbol{\nabla} f(\mathbf{r}, t), \qquad \varphi' = \varphi - \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t} f(\mathbf{r}, t)$$

il doit exister un opérateur unitaire $\widehat{U}$ pour lequel la fonction d'onde $\Psi' = \widehat{U}\Psi$ décrit le même état physique de la particule que la fonction d'onde Ψ (mais pour un nouveau choix de jauge). Cette fonction Ψ' doit satisfaire à la relation

$$|\Psi'(\mathbf{r}, t)|^2 = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2, \tag{2}$$

et doit être une solution de l'équation de Schrödinger

$$i\hbar\frac{\partial\Psi'}{\partial t} = \frac{1}{2m}\left(\widehat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}'\right)^2 \Psi' + e\varphi'\Psi' \tag{3}$$

Pour obtenir l'opérateur $\widehat{U}$, notons que, selon (2), il doit être de la forme

$$\widehat{U} = \exp\{iS(\mathbf{r}, t)\}, \tag{4}$$

où $S(\mathbf{r}, t)$ est une fonction réelle. En utilisant une fonction d'onde de la forme

$$\Psi'(\mathbf{r}, t) = \exp\{iS(\mathbf{r}, t)\}\Psi(\mathbf{r}, t), \tag{5}$$

dans l'équation (3) et en exigeant que l'équation de la fonction d'onde Ψ soit de la forme (1), on obtient l'équation permettant de définir la fonction $S(\mathbf{r}, t)$ (comparer à la solution du problème précédent) :

$$\hbar\boldsymbol{\nabla} S(\mathbf{r}, t) = \frac{e}{c}\boldsymbol{\nabla} f(\mathbf{r}, t), \qquad \hbar\frac{\partial}{\partial t} S(\mathbf{r}, t) = \frac{e}{c}\frac{\partial}{\partial t} f(\mathbf{r}, t), \tag{6}$$

La solution du système d'équations (6) donne

$$S(\mathbf{r},t) = \frac{e}{\hbar c} f(\mathbf{r},t) + C \tag{7}$$

ce qui avec (4), définit la forme de l'opérateur unitaire cherché (la constante C dans (7) peut être prise égale à 0).

La généralisation au cas d'un système de particules chargées quelconques est facile :

$$\widehat{U} = \exp\left\{\frac{i}{\hbar c}\sum_a e_a f(\mathbf{r}_a,t)\right\},$$

où la somme est effectuée sur toutes les particules.

7.28. Dans les transformations unitaires (y compris celles qui dépendent explicitement du temps), les fonctions d'onde et les opérateurs des grandeurs physiques se transforment, comme on le sait, de la façon suivante

$$\Psi \to \Psi' = \widehat{U}\Psi, \qquad \widehat{f} \to \widehat{f}' = \widehat{U}\widehat{f}\widehat{U}^\dagger.$$

En particulier,

$$\widehat{H}' = \widehat{U}\widehat{H}\widehat{U}^\dagger. \tag{1}$$

Etablissons la forme que prend l'équation de Schrödinger $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = \widehat{H}\Psi$ dans la transformation unitaire $\widehat{U}(t)$ dépendant explicitement du temps. De l'équation de Schrödinger pour la fonction d'onde Ψ, il s'ensuit que

$$i\hbar\widehat{U}\frac{\partial}{\partial t}\Psi \equiv i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\widehat{U}\Psi) - i\hbar\left(\frac{\partial\widehat{U}}{\partial t}\right)\Psi = \widehat{U}\widehat{H}\Psi \tag{2}$$

Etant donné que $\widehat{U}^\dagger\widehat{U} = \widehat{I}$ et que $\Psi' = \widehat{U}\Psi$, nous pouvons écrire (2) sous la forme

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi' = \left\{\widehat{U}\widehat{H}\widehat{U}^\dagger + i\hbar\left(\frac{\partial\widehat{U}}{\partial t}\right)\widehat{U}^\dagger\right\}\Psi' \tag{3}$$

qui représente l'équation de Schrödinger pour l'hamiltonien $\widehat{H}''$ donné par

$$\widehat{H}'' \equiv \widehat{U}\widehat{H}\widehat{U}^\dagger + i\hbar\left(\frac{\partial\widehat{U}}{\partial t}\right)\widehat{U}^\dagger = \widehat{H}' + i\hbar\left(\frac{\partial\widehat{U}}{\partial t}\right)\widehat{U}^\dagger \tag{4}$$

(on montre sans peine que l'opérateur $\widehat{H}''$ est hermitien).

L'expression (4) résout le problème posé. Ainsi avec une transformation unitaire $\widehat{U}(t)$ on peut faire correspondre à l'hamiltonien $\widehat{H}$ deux opérateurs : $\widehat{H}'$ et $\widehat{H}''$. Pour saisir le sens du résultat obtenu et éclaircir le rôle des opérateurs $\widehat{H}'$ et $\widehat{H}''$ il faut tenir compte du fait que l'hamiltonien $\widehat{H}$ remplit deux fonctions :

1) il détermine l'évolution temporelle de la fonction d'onde du système en accord avec l'équation de Schrödinger ;

2) dans le cas où l'opérateur $\widehat{H}$ ne dépend pas explicitement du temps, il devient une intégrale du mouvement et ses valeurs propres ont un sens physique direct représentant les niveaux d'énergie du système.

Toutefois, si $\widehat{H}(t)$ dépend explicitement du temps, il perd sa seconde fonction (l'énergie ne se conserve pas ; quant aux valeurs propres de l'hamiltonien instantané $\widehat{H}(t)$, elles n'ont pas, en général, de sens physique pour le système concerné).

Si l'hamiltonien de départ $\widehat{H}$ ne dépend pas du temps et remplit les deux fonctions indiquées plus haut, alors avec la transformation unitaire dépendant explicitement du temps, ces fonctions se répartissent entre les opérateurs $\widehat{H}'$ et $\widehat{H}''$: l'opérateur $\widehat{H}''$ définit l'évolution temporelle de la fonction d'onde, tandis que $\widehat{H}'$ est l'opérateur correspondant à une grandeur constante. Il est clair que les spectres des valeurs propres de $\widehat{H}$ et $\widehat{H}'$ coïncident. De plus, le fait que l'opérateur $\widehat{H}'$ est une intégrale du mouvement peut être confirmé directement par le calcul :

$$\frac{d}{dt}\widehat{H}' \equiv \frac{\partial}{\partial t}\widehat{H}' + \frac{i}{\hbar}[\widehat{H}'', \widehat{H}'] = 0.$$

Mais si l'hamiltonien $\widehat{H}(t)$ dépend du temps, il perd alors sa fonction d'intégrale du mouvement. Dans ce cas, l'opérateur $\widehat{H}'$ n'a plus de sens physique direct, alors que l'opérateur $\widehat{H}''$ reste l'opérateur déterminant l'évolution temporelle de la fonction d'onde du système.

Pour illustrer ceci, on peut étudier le passage à la représentation d'Heisenberg réalisé par l'opérateur unitaire

$$\widehat{U} = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\widehat{H}t\right).$$

Dans ce cas, $\widehat{H}' = \widehat{H}$, $\widehat{H}'' = 0$ et l'équation de Schrödinger, dans la nouvelle représentation d'Heisenberg, montre que la fonction d'onde est indépendante du temps.

Considérant que les transformations unitaires en mécanique quantique sont l'analogue des transformations canoniques en mécanique classique, on montre sans peine que la relation (4) est la généralisation à la mécanique quantique de la formule

$$H''(P, Q, t) = H(P, Q, t) + \frac{\partial f}{\partial t}$$

de la mécanique classique, exprimant la transformation de la fonction d'Hamilton par une transformation canonique opérée par la fonction génératrice $f(t)$ dépendant explicitement du temps [4].

7.29.

a) Pour trouver la forme des opérateurs d'Heisenberg

$$\widehat{x}(t) = \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\widehat{H}t}\widehat{x}\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\widehat{H}t}, \qquad \widehat{p}(t) = \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\widehat{H}t}\widehat{p}\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\widehat{H}t}, \qquad \widehat{H} = \widehat{p}^2/2m,$$

utilisons la représentation **p** dans laquelle, comme on le sait,

$$\widehat{p} = p, \qquad \widehat{x} = i\hbar\partial/\partial p.$$

On trouve alors sans peine

$$\widehat{p}(t) = p = \widehat{p},$$
$$\widehat{x}(t) = \exp\left(\frac{ip^2t}{2m\hbar}\right) i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\exp\left(-\frac{ip^2t}{2m\hbar}\right) = i\hbar\frac{\partial}{\partial p} + \frac{pt}{m} = \widehat{x} + \frac{t}{m}\widehat{p},$$

autrement dit, les relations entre les opérateurs sont absolument les mêmes qu'entre les grandeurs classiques correspondantes ; de plus, les opérateurs $\widehat{x}$, $\widehat{p}$ jouent le rôle des conditions initiales pour les opérateurs $\widehat{x}(t)$, $\widehat{p}(t)$.

b) En représentation d'Heisenberg, les opérateurs $\widehat{x}(t)$, $\widehat{p}(t)$ dépendent explicitement du temps et leurs équations de mouvement sont de la forme

$$\frac{d\widehat{x}(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar}[\widehat{H}, \widehat{x}(t)], \qquad \frac{d\widehat{p}(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar}[\widehat{H}, \widehat{p}(t)], \tag{1}$$

où les dérivées d/dt sont assimilées à des dérivées par rapport à la dépendance en temps explicite des opérateurs d'Heisenberg ; l'hamiltonien $\widehat{H} = \widehat{H}(\widehat{p}(t)), \widehat{x}(t))$ s'exprime en fonction des opérateurs $\widehat{p}(t)$, $\widehat{x}(t)$ qui obéissent à la relation de commutation habituelle

$$[\widehat{p}(t), \widehat{x}(t)] = -i\hbar.$$

Pour une particule libre $\widehat{H} = \widehat{p}^2(t)/2m$, les équations (1) prennent la forme

$$\frac{d\widehat{x}(t)}{dt} = \frac{\widehat{p}(t)}{m}, \qquad \frac{d\widehat{p}(t)}{dt} = 0. \tag{2}$$

Des équations (2), on obtient

$$\widehat{p}(t) = \widehat{p}_0 = \widehat{p}, \tag{3}$$

c'est-à-dire que l'opérateur $\widehat{p}(t)$ ne dépend pas explicitement du temps. Pour $t = 0$, les opérateurs d'Heisenberg coïncident avec les opérateurs de la représentation de Schrödinger, aussi $\widehat{p}_0 \equiv \widehat{p}$ est-il un opérateur impulsion classique en représentation de Schrödinger.

De la première équation de (2), compte tenu de (3), on obtient sans peine

$$\widehat{x}(t) = \frac{t}{m}\widehat{p}_0 + \widehat{x}_0 = \frac{t}{m}\widehat{p} + \widehat{x},$$

où $\widehat{x}_0 \equiv \widehat{x}$ est l'opérateur coordonnée en représentation de Schrödinger.

7.30.

a) Compte tenu de la forme de l'hamiltonien $\widehat{H} = \frac{\widehat{p}^2}{2m} - F_0 x$, les opérateurs $\widehat{x}(t)$ et $\widehat{p}(t)$ s'obtiennent sans peine en utilisant le résultat du problème 1.14 :

$$\begin{aligned} \widehat{x}(t) &= \exp(i\widehat{H}t/\hbar)\widehat{x}\exp(-i\widehat{H}t/\hbar) = \widehat{x} + t\widehat{p}/m + F_0 t^2/2m, \\ \widehat{p}(t) &= \widehat{p} + F_0 t. \end{aligned} \tag{1}$$

b) Compte tenu des formules $\widehat{H} = \dfrac{\widehat{p}^2}{2m} - F_0\widehat{x}(t)$, et $[\widehat{p}(t), \widehat{x}(t)] = -i\hbar$, on obtient les équations du mouvement pour les opérateurs d'Heisenberg

$$\frac{d\widehat{x}(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar}[\widehat{H}(t), \widehat{x}(t)] = \frac{\widehat{p}(t)}{m}, \qquad \frac{d\widehat{p}(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar}[\widehat{H}(t), \widehat{p}(t)] = F_0, \tag{2}$$

dont la solution donne la forme (1) établie plus haut de ces opérateurs (rappelons que $\widehat{x}$, $\widehat{p}$ sont des opérateurs en représentation de Schrödinger qui correspondent aux conditions initiales des opérateurs d'Heisenberg $\widehat{x}(t)$, $\widehat{p}(t)$).

7.31.

a) Compte tenu du fait que pour un oscillateur

$$\widehat{H} = \frac{\widehat{p}^2}{2m} + \frac{k\widehat{x}^2}{2}, \qquad \frac{i}{\hbar}[\widehat{H}, x] = \frac{\widehat{p}}{m}, \qquad \frac{i}{\hbar}[\widehat{H}, \widehat{p}] = -k\widehat{x},$$

on obtient sans peine en utilisant le résultat du problème 1.14 :

$$\begin{aligned} \widehat{x}(t) &= \exp(i\widehat{H}t/\hbar)\widehat{x}\exp(-i\widehat{H}t/\hbar) \\ &= \widehat{x} + \frac{1}{1!}\frac{it}{\hbar}[\widehat{H}, \widehat{x}] + \frac{1}{2!}\left(\frac{it}{\hbar}\right)^2[\widehat{H}, [\widehat{H}, \widehat{x}]] + \ldots \\ &= \widehat{x} + \frac{1}{1!}t\widehat{p}/m - \frac{1}{2!}t^2\frac{k}{m}\widehat{x} - \frac{1}{3!}t^3\frac{k}{m^2}\widehat{p} + \ldots = \widehat{x}\cos\omega t + \frac{\widehat{p}}{m\omega}\sin\omega t, \quad (1) \\ \widehat{p}(t) &= \widehat{p}\cos\omega t - m\omega\widehat{x}\sin\omega t. \end{aligned}$$

b) Les équations du mouvement pour les opérateurs d'Heisenberg ont la forme

$$\frac{d\widehat{x}(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar}[\widehat{H}(t), \widehat{x}(t)] = \frac{\widehat{p}(t)}{m}, \qquad \frac{d\widehat{p}(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar}[\widehat{H}(t), \widehat{p}(t)] = -k\widehat{x}(t).$$

Ce système d'équations pour les opérateurs $\widehat{x}(t)$, $\widehat{p}(t)$ peut être résolu de la même façon que des fonctions ordinaires (qui ne sont pas des opérateurs), car ces équations étant linéaires, il n'y a de difficultés dues à la non-commutativité des opérateurs. La solution a la forme

$$\widehat{x}(t) = \widehat{C}_1\cos\omega t + \widehat{C}_2\sin\omega t, \qquad \widehat{p}(t) = -m\omega[\widehat{C}_1\sin\omega t - \widehat{C}_2\cos\omega t],$$

où $\widehat{C}_1$ et $\widehat{C}_2$ sont des opérateurs ne dépendant pas du temps et dont la forme s'obtient à partir de l'égalité pour $t = 0$ des opérateurs d'Heisenberg avec les opérateurs $\widehat{x}$, $\widehat{p}$ en représentation de Schrödinger :

$$\widehat{C}_1 = \widehat{x}(0) = \widehat{x}, \qquad m\omega\widehat{C}_2 = \widehat{p}(0) = \widehat{p}.$$

7.32. Le problème se résout de la même façon que le problème précédent. On donne la solution ($\omega = eB_0/mc$) :

$$\begin{aligned}
\widehat{x}(t) &= \widehat{x}\cos\omega t + \frac{\widehat{p}_x}{m\omega}\sin\omega t + \frac{\widehat{p}_y}{m\omega}(1-\cos\omega t),\\
\widehat{p}_x(t) &= \widehat{p}_x\cos\omega t + \widehat{p}_y\sin\omega t - m\omega\widehat{x}\sin\omega t,\\
\widehat{y}(t) &= \widehat{y} - \widehat{x}\sin\omega t + \frac{\widehat{p}_x}{m\omega}(\cos\omega t - 1) + \frac{\widehat{p}_y}{m\omega}\sin\omega t,\\
\widehat{p}_y(t) &= \widehat{p}_y, \qquad \widehat{z}(t) = \widehat{z} + t\widehat{p}_z/m, \qquad \widehat{p}_z(t) = \widehat{p}_z.
\end{aligned}$$

L'opérateur vitesse de la particule $\widehat{\mathbf{v}}(t) = d\widehat{\mathbf{r}}(t)/dt$ s'obtient directement par dérivation par rapport au temps de l'opérateur $\widehat{\mathbf{r}}(t)$.

On propose au lecteur d'étudier lui-même les relations entre les opérateurs $\widehat{\mathbf{r}}(t)$, $\widehat{\mathbf{v}}(t)$ et $\widehat{\mathbf{r}}(0) = \widehat{\mathbf{r}}$, $\widehat{\mathbf{v}}(0) = \widehat{\mathbf{v}}$ et de discuter le problème 6.3 sur la base des relations ainsi obtenues.

7.33. En utilisant les équations du mouvement pour les opérateurs d'Heisenberg $\widehat{\mathbf{r}}(t)$, $\widehat{\mathbf{p}}(t)$, on obtient après quelques transformations simples

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}[\widehat{p}_i(t), \widehat{x}_k(t)] &= [\dot{\widehat{p}}_i(t), \widehat{x}_k(t)] + [\widehat{p}_i(t), \dot{\widehat{x}}_k(t)] =\\
&= \frac{i}{\hbar}\{[[\widehat{H}(t), \widehat{p}_i(t)], \widehat{x}_k(t)] + [\widehat{p}_i(t), [\widehat{H}(t), \widehat{x}_k(t)]]\} = 0\ ;
\end{aligned}$$

autrement dit la valeur du commutateur $[\widehat{p}_i(t), \widehat{x}_k(t)]$ est indépendante du temps et, comme pour $t = 0$ elle vaut $[\widehat{p}_i(0), \widehat{x}_k(0)] = [\widehat{p}_i, \widehat{x}_k] = -i\hbar\delta_{ik}$, elle reste toujours la même pour les opérateurs d'Heisenberg.

7.34. En utilisant la forme des opérateurs $\widehat{x}(t)$, $\widehat{p}(t)$ établie dans 7.29–7.31, on obtient sans peine

a) $[\widehat{p}(t), \widehat{x}(t')] = -i\hbar$;

b) $[\widehat{p}(t), \widehat{x}(t')] = -i\hbar$;

c) $[\widehat{p}(t), \widehat{x}(t')] = -i\hbar\cos\omega(t-t')$.

7.35. En utilisant, dans les hamiltoniens des systèmes donnés $\widehat{H}(t) = \widehat{H}(\widehat{p}(t), \widehat{x}(t))$, l'expression explicite des opérateurs $\widehat{p}(t)$ et $\widehat{x}(t)$, on montre que $\widehat{H}(t) = \widehat{H}(0)$.

Ce dernier résultat est immédiat également dans le cas général[3], car

$$\widehat{H}(t) = \exp(i\widehat{H}(0)t/\hbar)\widehat{H}(0)\exp(-i\widehat{H}(0)t/\hbar) = \widehat{H}(0).$$

7.36. En représentation d'Heisenberg, la fonction d'onde d'un système ne dépend pas explicitement du temps et la dépendance temporelle des valeurs moyennes des

3 Naturellement si $\frac{\partial}{\partial t}\widehat{H} = 0$ dans la représentation de Schrödinger.

grandeurs physiques se détermine complètement par la dépendance par rapport au temps des opérateurs d'Heisenberg correspondants.

Les valeurs moyennes de l'état donné (la fonction d'onde est normée à l'unité avec $A = (\sqrt{\pi a})^{-1/2}$) sont :

$$\overline{x} = \int |\Psi(x)|^2 x dx = x_0, \qquad \overline{x^2} = x_0^2 + a^2/2,$$

$$\overline{p} = -i\hbar \int \Psi^*(x) \frac{d}{dx} \Psi(x) dx = p_0, \qquad \overline{p^2} = p_0^2 + \hbar^2/2a^2,$$

$$\overline{\widehat{x}\widehat{p} + \widehat{p}\widehat{x}} = -i\hbar \int \Psi^*(x) \left(x\frac{d}{dx} + \frac{d}{dx}x \right) \Psi(x) dx = 2x_0 p_0.$$

En utilisant la forme des opérateurs d'Heisenberg établie dans 7.29–7.31, on obtient sans peine :

a) $\overline{x(t)} \equiv \overline{\widehat{x}(t)} = x_0 + p_0 t/m, \qquad \overline{(\Delta x(t))^2} = \frac{a^2}{2}\left(1 + \hbar^2 t^2/m^2 a^4\right),$
$\overline{p(t)} = p_0, \qquad \overline{(\Delta p(t))^2} = \hbar^2/2a^2$;

b) $\overline{x(t)} = x_0 + p_0 t/m + F_0 t^2/2m, \qquad \overline{p(t)} = p_0 + F_0 t,$
$\overline{(\Delta x(t))^2} = \overline{\widehat{x}^2(t)} - \overline{(x(t))^2} = \frac{a^2}{2}\left(1 + \hbar^2 t^2/m^2 a^4\right), \qquad \overline{(\Delta p(t))^2} = \hbar^2/2a^2$;

c) $\overline{x(t)} = x_0 \cos\omega t + \frac{p_0}{m\omega}\sin\omega t, \qquad \overline{p(t)} = p_0 \cos\omega t - m\omega x_0 \sin\omega t,$
$\overline{(\Delta x(t))^2} = \frac{a^2}{2}\left(\cos^2\omega t + \frac{\hbar^2}{m^2\omega^2 a^4}\sin^2\omega t\right),$
$\overline{(\Delta p(t))^2} = \frac{\hbar^2}{2a^2}\left(\cos^2\omega t + \frac{m^2\omega^2 a^4}{\hbar^2}\sin^2\omega t\right)$

(notons que dans le cas d'un oscillateur avec $a^2 = \hbar/m\omega$ les fluctuations de la coordonnée et de l'impulsion s'avèrent indépendantes du temps).

7.37. En affectant aux opérateurs et aux fonctions d'onde en représentation interaction l'indice "int" et en tenant compte de la forme de l'opérateur $\widehat{U} = \exp(i\widehat{H}_0 t/\hbar)$, on obtient

$$\widehat{f}_{\text{int}}(t) = \exp(i\widehat{H}_0 t/\hbar)\widehat{f}\exp(-i\widehat{H}_0 t/\hbar), \tag{1}$$

$$\Psi_{\text{int}}(t) = \exp(i\widehat{H}_0 t/\hbar)\Psi(t), \tag{2}$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi_{\text{int}} = \widehat{H}'_{\text{int}}\Psi_{\text{int}} \equiv \widehat{V}_{\text{int}}\Psi_{\text{int}}, \tag{3}$$

avec
$$\begin{aligned}\widehat{H}'_{\text{int}} &= \exp(i\widehat{H}_0 t/\hbar)(\widehat{H}_0 + \widehat{V})\exp(-i\widehat{H}_0 t/\hbar) \\ &\quad + i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial t}\exp(i\widehat{H}_0 t/\hbar)\right)\exp(-i\widehat{H}_0 t/\hbar) \\ &= \exp(i\widehat{H}_0 t/\hbar)\widehat{V}\exp(-i\widehat{H}_0 t/\hbar) = \widehat{V}_{\text{int}}\end{aligned}$$

(pour trouver la forme de l'équation d'onde (3) en représentation interaction on a tenu compte du résultat obtenu dans le problème 7.28).

Après dérivation par rapport au temps des deux membres de la relation (1), on aboutit aux équations du mouvement pour les opérateurs en représentation interaction :

$$\frac{d}{dt}\widehat{f}_{\text{int}} = \left(\frac{\partial \widehat{f}}{\partial t}\right)_{\text{int}} + \frac{i}{\hbar}[\widehat{H}_0, \widehat{f}_{\text{int}}].$$

Habituellement les opérateurs des grandeurs physiques $\widehat{f}$ en représentation de Schrödinger ne dépendent pas explicitement du temps et pour ces derniers

$$\frac{\partial}{\partial t}\widehat{f} = \left(\frac{\partial}{\partial t}\widehat{f}\right)_{\text{int}} \equiv 0.$$

7.38. Dans ce cas $\widehat{H}_0 = \widehat{p}^2/2m$, $\widehat{V} = -F_0\widehat{x}$ et en utilisant le résultat du problème 7.29 on obtient

$$\widehat{x}_{\text{int}} = \exp\left(\frac{i\widehat{p}^2 t}{2m\hbar}\right)\widehat{x}\exp\left(-\frac{i\widehat{p}^2 t}{2m\hbar}\right) = \widehat{x} + \frac{t}{m}\widehat{p}, \qquad \widehat{p}_{\text{int}} = \widehat{p},$$

$$\widehat{V}_{\text{int}} = -F_0\left(\widehat{x} + \frac{t}{m}\widehat{p}\right), \qquad i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi_{\text{int}} = \widehat{V}_{\text{int}}\Psi_{\text{int}} = -F_0\left(\widehat{x} + \frac{t}{m}\widehat{p}\right)\Psi_{\text{int}}.$$

7.39. De la même façon que dans le problème précédent, on obtient

$$\widehat{H}_0 = \widehat{p}^2/2m, \qquad \widehat{V} = k\widehat{x}^2/2, \qquad \widehat{x}_{\text{int}} = \widehat{x} + \frac{t}{m}\widehat{p},$$

$$\widehat{p}_{\text{int}} = \widehat{p}, \qquad \widehat{V}_{\text{int}} = (kx^2/2)_{\text{int}} = \frac{k}{2}\left(\widehat{x} + \frac{t}{m}\widehat{p}\right)^2,$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi_{\text{int}} = \widehat{V}_{\text{int}}\Psi_{\text{int}} = \frac{k}{2}\left(\widehat{x} + \frac{t}{m}\widehat{p}\right)^2\Psi_{\text{int}}.$$

7.40. Compte tenu de l'hamiltonien de la particule

$$\widehat{H}_0 = \frac{\widehat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \mu\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)\cdot\widehat{\boldsymbol{\sigma}},$$

on obtient selon les formules habituelles

$$\widehat{\mathbf{v}} = \dot{\widehat{\mathbf{r}}} = \frac{i}{\hbar}[\widehat{H}, \widehat{\mathbf{r}}] = \frac{\widehat{\mathbf{p}}}{m},$$

$$\widehat{w}_i = \dot{\widehat{v}}_i = \frac{i}{\hbar}[\widehat{H}, \widehat{v}_i] = \frac{-\mu}{m}\widehat{\sigma}_k[B_k, \frac{\partial}{\partial x_i}] = \frac{\mu}{m}\widehat{\sigma}_k\frac{\partial B_k}{\partial x_i}.$$

L'opérateur accélération peut être écrit sous la forme suivante

$$m\widehat{\mathbf{w}} = -\boldsymbol{\nabla}\widehat{U},$$

où $\widehat{U} = -\widehat{\boldsymbol{\mu}}\cdot\mathbf{B} = -\mu\mathbf{B}\cdot\widehat{\boldsymbol{\sigma}}$ (l'étude a été faite pour une particule de spin $s = 1/2$; cependant, la généralisation au cas d'une particule non chargée et de spin arbitraire s est immédiate en remplaçant $\widehat{\boldsymbol{\sigma}}$ par $\widehat{\mathbf{s}}/s$).

7.41. En choisissant l'axe z le long du champ magnétique, représentons la partie dépendant du spin de l'hamiltonien et l'équation d'onde de la fonction d'onde de spin sous la forme

$$\widehat{H} = -\mu B_0 \widehat{\sigma}_z, \qquad \Psi(t) = \begin{pmatrix} C_1(t) \\ C_2(t) \end{pmatrix}, \qquad i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi(t) = \widehat{H}\Psi(t),$$

d'où

$$i\hbar \dot{C}_1 = -\mu B_0 C_1, \qquad i\hbar \dot{C}_2 = \mu B_0 C_2. \tag{1}$$

La solution des équations (1) est de la forme

$$C_1(t) = \exp(i\omega t) C_1(0), \qquad C_2(t) = \exp(-i\omega t) C_2(0), \tag{2}$$

où $\omega = \mu B_0/\hbar$ et où les valeurs des constantes $C_{1,2}(0)$ s'obtiennent à partir des conditions initiales ; pour un spineur normé $|C_1|^2 + |C_2|^2 = 1$.

Les valeurs moyennes des composantes de spin varient avec le temps suivant la loi

$$\overline{\mathbf{s}(t)} = \frac{1}{2}\Psi^*(t)\widehat{\boldsymbol{\sigma}}\Psi(t), \qquad \overline{s_x(t)} = \overline{s_x(0)}\cos 2\omega t + \overline{s_y(0)}\sin 2\omega t,$$
$$\overline{s_y(t)} = \overline{s_y(0)}\cos 2\omega t - \overline{s_x(0)}\sin 2\omega t, \qquad \overline{s_z(t)} = \overline{s_z(0)} = \text{ const},$$

c'est-à-dire que le vecteur $\overline{\mathbf{s}(t)}$ est en précession avec une vitesse angulaire 2ω autour de la direction du champ magnétique (de l'axe z).

7.42. Le résultat du problème précédent se généralise immédiatement pour un champ magnétique dont l'intensité dépend du temps mais de direction constante, c'est-à-dire pour un champ de la forme $\mathbf{B}(t) = (0, 0, B(t))$.

L'équation d'onde de la fonction d'onde de spin prend la forme

$$i\hbar \dot{C}_1 = -\mu B(t) C_1, \qquad i\hbar \dot{C}_2 = \mu B(t) C_2. \tag{1}$$

La solution des équations (1) est :

$$C_1(t) = C_1(0)\exp(i\xi(t)), \qquad C_2(t) = C_2(0)\exp(-i\xi(t)), \tag{2}$$

où $\xi(t) = \frac{\mu}{\hbar}\int_0^t B(t')dt'$.

Les valeurs moyennes des composantes du spin varient avec le temps suivant la loi

$$\overline{s_x(t)} = \overline{s_x(0)}\cos 2\xi(t) + \overline{s_y(0)}\sin 2\xi(t),$$
$$\overline{s_y(t)} = \overline{s_y(0)}\cos 2\xi(t) - \overline{s_x(0)}\sin 2\xi(t), \qquad \overline{s_z(t)} = \overline{s_z(0)},$$

autrement dit le vecteur $\overline{\mathbf{s}(t)}$ est en précession (en général, de façon irrégulière) autour de l'axe z le long duquel est dirigé le champ magnétique.

7.43. L'hamiltonien de la particule a la forme

$$\widehat{H} = \frac{1}{2\mu}\left(\widehat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r},t)\right)^2 + e\varphi(\mathbf{r},t) - \mu\mathbf{B}(t)\cdot\widehat{\boldsymbol{\sigma}}. \tag{1}$$

Supposons que pour $t = 0$ la fonction d'onde de la particule soit de la forme

$$\Psi(\mathbf{r}, t = 0) = \psi(\mathbf{r}, t = 0)\chi(t = 0), \tag{2}$$

où $\chi(t = 0) = \begin{pmatrix} a(0) \\ b(0) \end{pmatrix}$ est un spineur arbitraire (indépendant de $\mathbf{r}$!), c'est-à-dire qu'il n'y a pas de corrélation entre les variables de spin et d'espace pour $t = 0$. On montre sans peine que la fonction d'onde de la forme

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}, t)\chi(t), \tag{3}$$

est une solution de l'équation de Schrödinger avec l'hamiltonien (1) si les fonctions ψ et χ satisfont aux équations de Schrödinger

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left[\frac{1}{2\mu}\left(\widehat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r},t)\right)^2 + e\varphi(\mathbf{r},t)\right]\psi, \qquad i\hbar\frac{\partial\chi}{\partial t} = -\mu\mathbf{B}(t)\cdot\widehat{\boldsymbol{\sigma}}\chi,$$

dont la première ne contient pas de variables de spin et la seconde, pas de variables d'espace de la particule, de sorte qu'entre les variables de spin et d'espace il n'y a également pas de corrélation à tout instant t.

Compte tenu du fait que la fonction d'onde d'une particule peut être mise pour $t = 0$ sous la forme

$$\Psi(\mathbf{r}, t = 0) = \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{r}, t = 0) \\ \psi_2(\mathbf{r}, t = 0) \end{pmatrix} = \psi_1(\mathbf{r}, t = 0)\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \psi_2(\mathbf{r}, t = 0)\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \tag{4}$$

où chaque terme est une fonction d'onde à variables de spin et d'espace séparées (c'est-à-dire est de la forme (2)), en utilisant (2) et (3) et la linéarité des équations de Schrödinger, on aboutit à la démonstration de l'assertion de l'énoncé. Ainsi, la fonction d'onde (4) d'état de la particule à un instant t se présente sous la forme

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi_1(\mathbf{r}, t)\chi_1(t) + \psi_2(\mathbf{r}, t)\chi_2(t), \tag{5}$$

où le sens des fonctions ψ_1, χ_1, ψ_2, χ_2 est évident. Il est clair que l'assertion du problème est également valable pour une valeur de spin quelconque.

7.44. L'hamiltonien de spin et l'équation de Schrödinger ont la forme

$$\widehat{H} = -\mu\mathbf{B}(t)\cdot\widehat{\boldsymbol{\sigma}} = -\mu\begin{pmatrix} B_0 & B_1\exp(-i\omega_0 t) \\ B_1\exp(i\omega_0 t) & -B_0 \end{pmatrix}, \qquad \Psi = \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix},$$

$$\begin{aligned} i\hbar\dot{a} &= -\mu B_0 a - \mu B_1\exp(-i\omega_0 t)b, \\ i\hbar\dot{b} &= -\mu B_1\exp(i\omega_0 t)a + \mu B_0 b, \end{aligned} \tag{1}$$

En passant aux nouvelles fonctions $\tilde{a}(t)$, $\tilde{b}(t)$ données par $a = \tilde{a}\exp\left(-\frac{i\omega_0 t}{2}\right)$, et $b = \tilde{b}\exp\left(\frac{i\omega_0 t}{2}\right)$, récrivons le système d'équations (1) sous la forme

$$i\dot{\tilde{a}} = -\gamma_1\tilde{a} - \gamma_2\tilde{b}, \qquad i\dot{\tilde{b}} = -\gamma_2\tilde{a} + \gamma_1\tilde{b}, \tag{2}$$

où $\gamma_1 = \dfrac{\mu B_0}{\hbar} + \dfrac{\omega_0}{2}$, et $\gamma_2 = \dfrac{\mu B_1}{\hbar}$.

On obtient la solution du système d'équations (2) sous la forme

$$\tilde{a}(t) = C_1 \exp(i\omega t) + C_2 \exp(-i\omega t),$$
$$\tilde{b}(t) = \frac{\omega - \gamma_1}{\gamma_2} C_1 \exp(i\omega t) + \frac{-\omega - \gamma_1}{\gamma_2} C_2 \exp(-i\omega t),$$

où $\omega = \sqrt{\gamma_1^2 + \gamma_2^2}$.

Compte tenu des conditions initiales $\tilde{a}(0) = a(0) = 1$, $\tilde{b}(0) = b(0) = 0$, on obtient finalement la forme de la fonction d'onde normée :

$$\Psi(t) = \frac{1}{2\omega} \begin{pmatrix} [(\omega + \gamma_1)\mathrm{e}^{i\omega t} + (\omega - \gamma_1)\mathrm{e}^{-i\omega t}] \exp\left(-\frac{i\omega_0 t}{2}\right) \\ 2i\gamma_2 \sin \omega t \cdot \exp\left(\frac{i\omega_0 t}{2}\right) \end{pmatrix},$$

de sorte que la probabilité de renversement du spin (c'est-à-dire d'avoir la valeur de la projection $s_z = -1/2$) à l'instant t vaut

$$W(s_z = -1/2, t) = \left(\frac{\gamma_2}{\omega}\right)^2 \sin^2 \omega t \equiv g \sin^2 \omega t,$$

où

$$g = \left(\frac{\gamma_2}{\omega}\right)^2 = \frac{B_1^2}{B_1^2 + (B_0 + \hbar\omega_0/2\mu)^2}.$$

Pour $|B_1| \ll |B_0|$, la grandeur g (et avec elle la probabilité de renversement du spin) est petite comparée à l'unité pour toutes les valeurs de la pulsation ω_0, à l'exception d'une étroite bande de pulsations voisines du point $(\omega_0)_{\text{res}} = -2\mu B_0/\hbar$ dont la largeur est de l'ordre de $|\Delta\omega_0| \sim B_1\mu/\hbar$.

7.45.

a) L'hamiltonien et l'opérateur unitaire effectuant la transformation en représentation d'Heisenberg sont de la forme (l'axe z est dirigé le long du champ magnétique)

$$\widehat{H} = -\mu B \widehat{\sigma}_z, \qquad \widehat{U} = \exp(i\widehat{H}t/\hbar) \equiv \exp(-i\omega t \widehat{\sigma}_z).$$

En utilisant le résultat obtenu dans le problème 1.14 et compte tenu des relations de commutation des matrices de Pauli $[\widehat{\sigma}_z, \widehat{\sigma}_x] = 2i\widehat{\sigma}_y$, $[\widehat{\sigma}_z, \widehat{\sigma}_y] = -2i\widehat{\sigma}_x$, on obtient

$$\begin{aligned}
\widehat{s}_x(t) &= \exp(-i\omega t \widehat{\sigma}_z) \widehat{s}_x \exp(+i\omega t \widehat{\sigma}_z) \\
&= \frac{1}{2}\left\{\widehat{\sigma}_x + \frac{1}{1!}(-i\omega t)[\widehat{\sigma}_z, \widehat{\sigma}_x] + \frac{1}{2!}(-i\omega t)^2 [\widehat{\sigma}_z, [\widehat{\sigma}_z, \widehat{\sigma}_x]] \ldots +\right\} \\
&= \frac{1}{2}\left\{\widehat{\sigma}_x + \frac{1}{1!} 2\omega t \widehat{\sigma}_y - \frac{(2\omega t)^2}{2!}\widehat{\sigma}_x \ldots +\right\} = \widehat{s}_x \cos 2\omega t + \widehat{s}_y \sin 2\omega t, \\
\widehat{s}_y(t) &= \widehat{s}_y \cos 2\omega t - \widehat{s}_x \sin 2\omega t, \qquad \widehat{s}_z(t) = \widehat{s}_z.
\end{aligned}$$

Vu que dans la représentation d'Heisenberg la fonction d'onde ne dépend pas du temps, on obtient directement $\overline{s(t)}$ à partir de la forme de l'opérateur $\widehat{s}(t)$.

b) L'hamiltonien exprimé au moyen des opérateurs d'Heisenberg est de la forme $\widehat{H}(t) = -2\mu B\widehat{s}_z(t)$. La dépendance en temps des opérateurs $\widehat{s}_i(t)$ est définie par les équations

$$\begin{aligned} &\frac{d}{dt}\widehat{s}_x(t) = \frac{i}{\hbar}[\widehat{H}(t), \widehat{s}_x(t)] = 2\omega\widehat{s}_y(t), \\ &\frac{d}{dt}\widehat{s}_y(t) = -2\omega\widehat{s}_x(t), \qquad \frac{d}{dt}\widehat{s}_z(t) = 0. \end{aligned} \tag{1}$$

où, comme plus haut, $\omega = \mu B/\hbar$. Pour obtenir (1), on a tenu compte des relations de commutation $[\widehat{s}_i(t), \widehat{s}_k(t)] = i\varepsilon_{ikl}\widehat{s}_l(t)$.

A partir de (1), on montre que $\widehat{s}_z(t) = \widehat{s}_z(0) = 1/2\widehat{\sigma}_z$.

Introduisons les opérateurs $\widehat{s}_\pm(t) = \widehat{s}_x(t) \pm i\widehat{s}_y(t)$. Selon (1), on obtient

$$\frac{d}{dt}\widehat{s}_\pm(t) = \mp 2i\omega\widehat{s}_\pm(t). \tag{2}$$

Les équations (2) pour les opérateurs $\widehat{s}_\pm(t)$ peuvent (en raison de leur linéarité) être résolues de la même façon que pour des fonctions ordinaires (qui ne sont pas des opérateurs) ; la solution a la forme

$$\widehat{s}_\pm(t) = \exp(\mp 2i\omega t)\widehat{s}_\pm(0) = \frac{1}{2}\exp(\mp 2i\omega t)(\widehat{\sigma}_x \pm i\widehat{\sigma}_y). \tag{3}$$

A partir des relations (3) on obtient la forme établie plus haut (dans a)) pour les opérateurs d'Heisenberg $\widehat{s}_x(t)$ et $\widehat{s}_y(t)$.

7.46. Le problème se résout de façon absolument analogue à celle utilisée pour le problème précédent. Il faut considérer que malgré la dépendance explicite par rapport au temps de l'hamiltonien en représentation de Schrödinger : $\widehat{H}_{\text{Sch}}(t) = -\mu B(t)\widehat{\sigma}_z$, l'opérateur unitaire décrivant le passage de la représentation de Schrödinger à celle d'Heisenberg possède une forme simple :

$$\widehat{U} = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_0^t \widehat{H}_{\text{Sch}}(t')dt'\right) \equiv \exp\left(-\frac{i\mu}{\hbar}\int_0^t B(t')dt'\,\widehat{\sigma}_z\right) \tag{1}$$

(pour $t = 0$ les deux représentation coïncident). Pour obtenir l'expression (1), il est essentiel que les opérateurs $\widehat{H}(t)$ en représentation de Schrödinger commutent aux différents temps.

Donnons la forme explicite des opérateurs composantes de spin en représentation d'Heisenberg :

$$\begin{aligned} &\widehat{s}_x(t) = \frac{1}{2}[\cos(2\xi(t))\widehat{\sigma}_x + \sin(2\xi(t))\widehat{\sigma}_y], \qquad \widehat{s}_z(t) = \frac{1}{2}\widehat{\sigma}_z, \\ &\widehat{s}_y(t) = \frac{1}{2}[\cos(2\xi(t))\widehat{\sigma}_y - \sin(2\xi(t))\widehat{\sigma}_x], \qquad \xi(t) = \frac{\mu}{\hbar}\int_0^t B(t')dt'. \end{aligned}$$

7.47. En représentation de Schrödinger, l'hamiltonien a la forme

$$\widehat{H} = -\mu B_1 \widehat{\sigma}_z - \mu B_0(\widehat{\sigma}_x \cos\omega_0 t + \widehat{\sigma}_y \sin\omega_0 t) \equiv \widehat{H}_0 + \widehat{V}(t).$$

Le passage à la représentation interaction s'effectue à l'aide de l'opérateur $\widehat{U} = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\widehat{H}_0 t\right) = \exp(-i\tilde{\omega} t \widehat{\sigma}_z)$, où $\tilde{\omega} = \mu B_1/\hbar$. Les opérateurs composantes du spin en représentation interaction présentent la forme des opérateurs d'Heisenberg de l'hamiltonien $\widehat{H}_0$; sur la base du résultat obtenu au problème 7.45, ils valent

$$\widehat{s}_{x\ \mathrm{int}}(t) = \frac{1}{2}[\widehat{\sigma}_x \cos 2\tilde{\omega} t + \widehat{\sigma}_y \sin 2\tilde{\omega} t], \qquad \widehat{s}_{z\ \mathrm{int}}(t) = \frac{1}{2}\widehat{\sigma}_z,$$
$$\widehat{s}_{y\ \mathrm{int}}(t) = \frac{1}{2}[\widehat{\sigma}_y \cos 2\tilde{\omega} t - \widehat{\sigma}_x \sin 2\tilde{\omega} t].$$

Dans l'équation de Schrödinger en représentation interaction

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi_{\mathrm{int}} = \widehat{V}_{\mathrm{int}}(t)\Psi_{\mathrm{int}}, \tag{1}$$

l'opérateur $\widehat{V}_{\mathrm{int}}(t)$ vaut

$$\widehat{V}_{\mathrm{int}}(t) = -\mu B_0[\widehat{\sigma}_x \cos(\omega_0 + 2\tilde{\omega})t + \widehat{\sigma}_y \sin(\omega_0 + 2\tilde{\omega})t)]. \tag{2}$$

L'équation (1) avec l'hamiltonien $\widehat{V}_{\mathrm{int}}$ (2) a la forme de l'équation étudiée dans 7.44 (dans les formules du problème 7.44, il faut substituer $\omega_0 + 2\tilde{\omega}$ à ω_0 et poser $B_1 = 0$). En utilisant le résultat du problème 7.44, on obtient la fonction d'onde en représentation interaction qui satisfait aux conditions initiales $\Psi_{\mathrm{int}}(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$:

$$\Psi_{\mathrm{int}}(t) = \frac{1}{2\omega}\begin{pmatrix} \left[\left(\omega + \tilde{\omega} + \frac{\omega_0}{2}\right)\mathrm{e}^{i\omega t} + \left(\omega - \tilde{\omega} - \frac{\omega_0}{2}\right)\mathrm{e}^{-i\omega t}\right]\exp\left\{-\frac{i}{2}(\omega_0 + 2\tilde{\omega})t\right\} \\ 2i\gamma \sin\omega t \exp\left[\frac{i}{2}(\omega_0 + 2\tilde{\omega})t\right] \end{pmatrix},$$

où $\gamma = \mu B_0/h$, $\omega = \sqrt{(\tilde{\omega} + \omega_0/2)^2 + \gamma^2}$.

Comme l'opérateur $\widehat{s}_{z\,\mathrm{int}} = \widehat{\sigma}_z/2$ ne dépend pas du temps (et conserve une forme diagonale), la signification des composantes supérieure et inférieure de la fonction d'onde $\Psi_{\mathrm{int}}(t)$ est la même que dans la représentation de Schrödinger : ce sont les amplitudes de probabilités des valeurs de la projection du spin sur l'axe z qui valent $+1/2$ et $-1/2$ respectivement.

Le carré du module de la composante inférieure de la fonction d'onde $\Psi_{\mathrm{int}}(t)$ détermine la probabilité de renversement du spin en accord avec le résultat du problème 7.44.

7.48. L'hamiltonien en représentation de Schrödinger a la forme

$$\widehat{H} = -\mu B_0 \widehat{\sigma}_z - \mu B_1 \widehat{\sigma}_x \equiv \widehat{H}_0 + \widehat{V}.$$

Le passage à la représentation interaction s'effectue à l'aide de l'opérateur unitaire $\widehat{U} = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\widehat{H}_0 t\right) = \exp(-i\tilde{\omega} t \tilde{\sigma}_z)$, où $\tilde{\omega} = \mu B_0/\hbar$.

Les opérateurs composantes de spin et l'équation de Schrödinger en représentation interaction sont :

$$\begin{aligned}
&\widehat{s}_{x\ \mathrm{int}}(t) = \frac{1}{2}(\widehat{\sigma}_x \cos 2\tilde{\omega}t + \widehat{\sigma}_y \sin 2\tilde{\omega}t), \qquad \widehat{s}_{z\ \mathrm{int}}(t) = \frac{1}{2}\widehat{\sigma}_z, \\
&\widehat{s}_{y\ \mathrm{int}}(t) = \frac{1}{2}(\widehat{\sigma}_y \cos 2\tilde{\omega}t - \widehat{\sigma}_x \sin 2\tilde{\omega}t), \\
&i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi_{\mathrm{int}} = \widehat{V}_{\mathrm{int}}(t)\Psi_{\mathrm{int}}, \\
&\widehat{V}_{\mathrm{int}}(t) = -2\mu B_1 \widehat{\sigma}_{x\ \mathrm{int}}(t) = -\mu B_1(\widehat{\sigma}_x \cos 2\tilde{\omega}t + \widehat{\sigma}_y \sin 2\tilde{\omega}t).
\end{aligned} \tag{1}$$

L'équation (1) a la forme de l'équation résolue dans 7.44 (si l'on substitue dans les formules du problème 7.44, $2\tilde{\omega}$ à ω_0 et en posant $B_0 = 0$). Compte tenu de la solution obtenue dans ce problème, on obtient la fonction d'onde $\Psi_{\mathrm{int}}(t)$ qui, pour $t = 0$, prend la forme $\Psi_{\mathrm{int}}(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$:

$$\Psi_{\mathrm{int}}(t) = \frac{1}{2\omega}\begin{pmatrix} [(\omega+\tilde{\omega})\mathrm{e}^{i\omega t} + (\omega-\tilde{\omega})\mathrm{e}^{-i\omega t}]\mathrm{e}^{-i\tilde{\omega}t} \\ 2i\gamma \sin\omega t \exp(i\tilde{\omega})t) \end{pmatrix},$$

où $\gamma = \mu B_1/\hbar$, $\omega = \sqrt{\tilde{\omega}^2 + \gamma^2}$.

Comme l'opérateur $\widehat{s}_{z\,\mathrm{int}}(t) = \widehat{\sigma}_z/2$ ne dépend pas du temps, les composantes de la fonction d'onde $\Psi_{\mathrm{int}}(t)$ gardent leur signification habituelle et la probabilité de la valeur de la projection $s_z = -1/2$ à l'instant de temps t est donnée par

$$W(s_z = -1/2, t) = \left(\frac{\gamma}{\omega}\right)^2 \sin^2\omega t = \frac{B_1^2}{B_1^2 + B_0^2}\sin^2\omega t.$$

7.49. La fonction de Green $G_{\alpha,\beta}(t,t')$ satisfaisant à l'équation de Schrödinger avec l'hamiltonien $\widehat{H} = -\mu B\widehat{\sigma}_z$ (l'axe z est dirigé le long du champ magnétique) et valant $G_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta}$ (pour $t = t'$) a la forme

$$G_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} \exp[i\omega(t-t')] & 0 \\ 0 & \exp[-i\omega(t-t')] \end{pmatrix}_{\alpha\beta}, \qquad \omega = \mu B/\hbar.$$

7.50. $$G_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} \exp[i\xi(t,t')] & 0 \\ 0 & \exp[-i\xi(t,t')] \end{pmatrix}_{\alpha\beta}, \qquad \xi(t,t') = \frac{\mu}{\hbar}\int_{t'}^{t} B(\tau)d\tau.$$

7.51. $G_{\alpha\beta}(\mathbf{r},t\,;\mathbf{r}',t') = G(\mathbf{r},t\,;\mathbf{r}',t')G_{\alpha\beta}(t,t')$ [4] où $G(\mathbf{r},t\,;\mathbf{r}',t')$ est la fonction de Green temporelle d'une particule libre sans spin, obtenue dans 7.19, $G_{\alpha\beta}(t,t')$ étant la fonction de spin de Green temporelle dont la forme a été établie dans 7.49.

7.52. $G_{\alpha\beta}(\mathbf{r},t\,;\mathbf{r}',t') = G(\mathbf{r},t\,;\mathbf{r}',t')G_{\alpha\beta}(t,t')$ [4] où la forme de la fonction de spin de $G_{\alpha\beta}(t,t')$ temporelle a été établie dans 7.50.

---

4 La forme multiplicative de la fonction de Green vient du résultat du 7.43 sur la séparation des variables d'espace et de spin de la particule dans un champ magnétique homogène $\mathbf{B}(t)$.

CHAPITRE 8

CALCUL DES PERTURBATIONS. PERTURBATIONS SOUDAINES ET ADIABATIQUES

8.1. Les fonctions propres et les valeurs propres de l'hamiltonien non perturbé sont de la forme (voir 2.1)

$$\Psi_n^{(0)} = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi(n+1)x}{a}, \qquad E_n^{(0)} = \frac{\hbar^2 \pi^2 (n+1)^2}{2ma^2}, \qquad n = 0, 1, \ldots$$

Un calcul simple donne

a) $E_n^{(1)} = V_{nn} = V_0 \left\{ \frac{1}{2} + \frac{1 + (-1)^n}{\pi^2 (n+1)^2} \right\}$;

b) $E_n^{(1)} = V_{nn} = \frac{V_0}{a} \left\{ a - 2b + \frac{a}{\pi(n+1)} \sin \frac{2\pi(n+1)b}{a} \right\}$.

La condition de validité du calcul des perturbations $V_{nm} \ll |E_n^{(0)} - E_m^{(0)}|$ donne

$$|V_0| \ll \frac{\hbar^2 \pi^2}{ma^2}(n+1). \tag{1}$$

La relation (1) montre que quelle que soit l'amplitude des perturbations $|V_0|$, pour n suffisamment grand, le calcul des perturbations permet de déterminer le déplacement des niveaux d'énergie.

8.2. Dans l'expression de $E_n^{(1)}$,

$$E_n^{(1)} = \int_0^a V(x) \frac{2}{a} \sin^2 \frac{\pi(n+1)x}{a} dx = \frac{1}{a} \int_0^a V(x) \left\{ 1 - \cos \frac{2\pi(n+1)x}{a} \right\} dx,$$

le second terme sous le signe intégral contenant $\cos \frac{2\pi(n+1)x}{a}$ oscille rapidement pour $n \gg 1$, de sorte que, pour $n \to \infty$, l'intégrale concernée tend vers 0 :

$$\int_0^a V(x) \cos \frac{2\pi(n+1)x}{a} dx = -\frac{a}{2\pi(n+1)} \int_0^a \frac{\partial V}{\partial x} \sin \frac{2\pi(n+1)x}{a} dx \to 0.$$

Donc, pour $n \to \infty$,

$$E_n^{(1)} \approx \frac{1}{a}\int_0^a V(x)dx. \tag{1}$$

Les valeurs de n pour lesquelles la relation (1) est valable sont en fait fixées par la condition $n \gg a/l$, où l est l'intervalle de la variable x sur lequel la fonction $V(x)$ varie fortement. Pour illustrer le résultat obtenu, on peut prendre les résultats du problème précédent.

8.3. Compte tenu des fonctions propres de l'hamiltonien non perturbé

$$\Psi_n^{(0)} = (2^n\sqrt{\pi}an!)^{-1/2}\exp\left[-\frac{1}{2}(x/a)^2\right]H_n(x/a), \qquad a = \sqrt{\hbar/m\omega},$$

de la relation de récurrence des polynômes d'Hermite

$$H_{n+1}(x) - 2xH_n(x) + 2nH_{n-1}(x) = 0$$

et de l'orthogonalité des fonctions propres, on obtient sans peine les éléments matriciels de la coordonnée x_{nm} (et avec eux les éléments matriciels de la perturbation $V_{nm} = -e\mathcal{E}x_{nm}$) :

$$x_{mn} = x_{nm} = \begin{cases} a\sqrt{\frac{(n+1)}{2}}, & \text{pour } m = n+1, \\ 0, & \text{dans les autres cas.} \end{cases} \tag{1}$$

D'après les formules classiques du calcul des perturbations,

$$\begin{aligned} E_n &\approx E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} = E_n^{(0)} + V_{nn} + \sum_{m\neq n}\frac{|V_{nm}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \\ &= \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right) - \frac{e^2a^2\mathcal{E}^2}{2\hbar\omega} = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right) - \frac{e^2\mathcal{E}^2}{2m\omega^2}. \end{aligned} \tag{2}$$

La valeur de E_n obtenue au second ordre du calcul des perturbations coïncide avec la valeur exacte (voir 2.6). Il est donc évident que les contributions des ordres supérieurs du calcul des perturbations sont nulles.

8.4. Les éléments matriciels V_{nm} de la perturbation $V = \alpha x^2/2$ se calculent sans peine en utilisant le résultat du problème précédent pour les valeurs des éléments matriciels de x_{nm} et en tenant compte de la relation $(x)^2_{nm} = \sum_k x_{nk}x_{km}$:

$$V_{nm} = V_{mn} = \begin{cases} \frac{\alpha a^2}{4}(2n+1), & \text{pour } n = m, \\ \frac{\alpha a^2}{2}\sqrt{(n+1)(n+2)}, & \text{pour } m = n+2, \\ 0, & \text{dans les autres cas.} \end{cases} \tag{1}$$

Compte tenu des valeurs (1) des éléments matriciels, on obtient les valeurs des niveaux d'énergie au second ordre près sous la forme ($\omega = \sqrt{k/m}$)

$$E_n \approx E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)\left(1 + \frac{\alpha}{2k} - \frac{\alpha^2}{8k^2}\right).$$

Il est utile de comparer le résultat obtenu à l'expression exacte des niveaux d'énergie :

$$\begin{aligned} E_n &= \hbar\sqrt{\frac{k+\alpha}{m}}\left(n + \frac{1}{2}\right) = \hbar\sqrt{\frac{k}{m}}\sqrt{1 + \frac{\alpha}{k}}\left(n + \frac{1}{2}\right) \\ &= \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)\left(1 + \frac{\alpha}{2k} - \frac{\alpha^2}{8k^2} + \frac{\alpha^3}{16k^3} - \dots\right), \end{aligned} \tag{2}$$

ainsi, les deux premiers termes $E_n^{(1,2)}$ de la série du calcul des perturbations coïncident avec les termes du développement en série suivant le paramètre α/k de la valeur exacte de E_n, comme on pouvait s'y attendre. Il s'ensuit immédiatement que les termes suivants de la série du calcul des perturbations $E_n^{(p)}$ coïncident également avec les termes du développement (2). La condition de convergence d'une série du calcul des perturbations, comme celle de (2), est de la forme $|\alpha/k| < 1$.

8.5. Un calcul simple fournit les valeurs suivantes des éléments matriciels V_{nm} de la perturbation :

$$\begin{aligned} V_{nm} &= \frac{2V_0}{a}\int_0^a \cos^2\frac{\pi x}{a}\sin\frac{(n+1)\pi x}{a}\sin\frac{(m+1)\pi x}{a}dx \\ &= \begin{cases} V_0/4, & \text{pour } n = m = 0, \\ V_0/2, & \text{pour } n = m \neq 0, \\ V_0/4, & \text{pour } n = m \pm 2, \\ 0, & \text{dans les autres cas.} \end{cases} \end{aligned}$$

Donc la valeur de la correction au premier ordre est $E_n^{(1)} = V_{nn}$. La correction au second ordre vaut

$$E_n^{(2)} = \sum_{m\neq n}\frac{|V_{nm}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} = \frac{ma^2V_0^2}{96\pi^2\hbar^2}\cdot\begin{cases} -\frac{3}{2}, & \text{pour } n = 0, \\ -1, & \text{pour } n = 1, \\ \frac{6}{n(n+2)}, & \text{pour } n \geq 2. \end{cases}$$

La condition de validité du calcul des perturbations est

$$|V_0| \ll \frac{\hbar^2\pi^2}{ma^2}(n+1).$$

8.6. $E_n^{(3)} = \dfrac{m^2a^4V_0^3}{1024\pi^4\hbar^4}$.

8.7. Les fonctions propres de l'hamiltonien non perturbé sont données, par exemple, dans la solution du problème 8.1. Les éléments matriciels de la perturbation V_{nm} ne sont différents de zéro que pour des valeurs paires de n et de m et valent

$$V_{nm} = \frac{2\alpha}{a}\sin\frac{\pi(n+1)}{2}\sin\frac{\pi(m+1)}{2} = \frac{2\alpha}{a}(-1)^{\frac{n+m}{2}}, \tag{1}$$

de sorte que les corrections au premier ordre $E_n^{(1)}$, au second ordre $E_n^{(2)}$ (et plus généralement à un ordre quelconque) des niveaux d'énergie impairs sont nulles en accord avec la solution exacte (voir 2.17).

La correction au premier ordre des niveaux pairs vaut $E_n^{(1)} = 2\alpha/a$, n étant pair. La correction au second ordre des niveaux pairs est de la forme ($m = 2p$)

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|V_{nm}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} = \frac{8m\alpha^2}{\pi^2\hbar^2} \sum_{\substack{p=0 \\ p \neq n/2}}^{\infty} \frac{1}{(n+1)^2 - (2p+1)^2}. \tag{2}$$

La somme dans l'expression (2) se calcule sans peine si on l'écrit sous la forme ($n \equiv 2k$)

$$\sum_{\substack{p=0 \\ p \neq k}}^{\infty} \frac{1}{(n+1)^2 - (2p+1)^2} = \frac{1}{4(2k+1)} \sum_{\substack{p=0 \\ p \neq k}}^{\infty} \left\{ \frac{1}{p+k+1} - \frac{1}{p-k} \right\} =$$

$$= -\frac{1}{4(2k+1)^2} = -\frac{1}{4(n+1)^2}$$

(tous les termes de la somme se compensent à l'exception d'un seul : $(p-k)^{-1}$ pour $p = 3k+1$. Donc

$$E_n^{(2)} = -\frac{2m\alpha^2}{\pi^2\hbar^2(n+1)^2}, \qquad n \text{ étant pair.}$$

La condition de validité des résultats obtenus est

$$\left|\frac{\alpha}{a}\right| \ll \frac{\hbar^2\pi^2}{ma^2}(n+1).$$

8.8. Les fonctions propres normées de tout opérateur sont définies à un facteur de phase près $A_n = \exp(i\alpha_n)$, où α_n est un nombre réel. Ecrivons le nombre α_n sous la forme

$$\alpha_n = 1 + C_n^{(1)} + C_n^{(2)} + C_n^{(3)} + \dots, \tag{1}$$

où, dans la suite des nombres $C_n^{(p)}$, chaque terme $C_n^{(p)}$ est proportionnel à la perturbation à l'ordre p. On montre ainsi qu'à tout ordre du calcul des perturbations, il y a une indétermination dans le calcul du coefficient $c_{nn}^{(p)}$ correspondant au choix arbitraire du coefficient $C_n^{(p)}$ dans l'expression (1), vu que les fonctions Ψ_n et $A_n\Psi_n$ peuvent être choisies comme fonctions propres de l'hamiltonien.

8.9. Les fonctions propres et les valeurs propres d'un rotateur non perturbé sont de la forme (voir 4.1)

$$\Psi_n^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}, \qquad E_m^{(0)} = \frac{\hbar^2 m^2}{2I}, \qquad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

La perturbation vaut $V = -\mathbf{d}\cdot\mathbf{E}_0 = -d\mathcal{E}_0\cos\varphi$. En utilisant la formule $\cos\varphi = (\mathrm{e}^{i\varphi}+\mathrm{e}^{-i\varphi})/2$, on obtient

$$V_{nk} = \begin{cases} -d\mathcal{E}_0/2, & \text{pour } n = k\pm 1, \\ 0, & \text{dans les autres cas.} \end{cases} \tag{1}$$

L'application des formules classiques du calcul des perturbations sur l'état fondamental du rotateur ($m = 0$), qui n'est pas dégénéré, donne

$$E_0 \approx E_0^{(0)} + E_0^{(1)} + E_0^{(2)} = -d^2\mathcal{E}_0^2 I/\hbar^2. \tag{2}$$

La polarisabilité du rotateur α est définie comme le rapport du moment dipolaire induit à l'intensité du champ extérieur. Comme l'énergie du dipôle induit dans le champ $\mathcal{E}_0$ vaut $\Delta E = -\alpha\mathcal{E}_0^2/2$, la polarisabilité de l'état fondamental du rotateur est, selon (2), égale à

$$\alpha_0 = 2Id^2/\hbar^2.$$

8.10. Les états excités d'un rotateur non perturbé sont doublement dégénérés, aussi faut-il se servir de l'équation séculaire[1].

Comme les quatre éléments matriciels $V_{mm'}$ entre les états m et m' correspondant à un même niveau d'énergie ($m, m' = \pm|m|$) sont nuls, la correction au premier ordre des niveaux d'énergie du rotateur non perturbé vaut également zéro.

Pour le calcul de la correction au second ordre $E_m^{(2)}$ des niveaux excités, il faut se servir de la formule générale [1]

$$\left|\sum_k \frac{V_{mk}V_{km'}}{E_m^{(0)} - E_k^{(0)}} - E_m^{(2)}\delta_{mm'}\right| = 0, \tag{1}$$

dans laquelle les indices $m, m' = \pm|m|$ correspondent aux états ayant un niveau doublement dégénéré et l'indice k correspond aux autres états du rotateur non perturbé.

Dans la formule (1) pour le premier niveau excité $|m| = 1$ (voir 8.9), m et m' prennent les valeurs ± 1 et k prend les valeurs $0, \pm 2, \ldots$ Compte tenu des relations (1) du problème précédent, la relation (1) donne

$$\begin{vmatrix} A/3 - E_{m=1}^{(2)} & A/2 \\ A/2 & A/3 - E_{m=1}^{(2)} \end{vmatrix} = 0, \qquad A \equiv \frac{Id^2\mathcal{E}_0^2}{\hbar^2}. \tag{2}$$

Il s'ensuit de (2) que

$$E_{1,1}^{(2)} = -\frac{Id^2\mathcal{E}_0^2}{6\hbar^2}, \qquad E_{1,2}^{(2)} = \frac{5Id^2\mathcal{E}_0^2}{\hbar^2}, \tag{3}$$

1 Dans le problème considéré, il n'est pas nécessaire de recourir au calcul des perturbations pour des niveaux dégénérés. En effet, compte tenu de la symétrie de l'hamiltonien, on voit aussitôt que les fonctions correctes à l'approximation zéro sont (comparer à 4.1)

$$\Psi_{m,1}^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\cos m\varphi, \qquad \Psi_{m,2}^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\sin m\varphi,$$

et dans le calcul des déplacements des niveaux d'énergie $E_{m;1,2}$ on peut utiliser les formules plus simples du calcul des perturbations sans dégénérescence.

le niveau doublement dégénéré pour $|m| = 1$ du rotateur se scinde en deux (la dégénérescence est levée) dans un champ électrique homogène.

Les fonctions à l'approximation zéro correspondant aux niveaux d'énergie (3) ont la forme

$$\Psi_{1,1}^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sin\varphi, \qquad \Psi_{1,2}^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cos\varphi,$$

prévisible compte tenu des considérations de symétrie.

L'application de la formule (1) aux niveaux d'un rotateur non perturbé pour $|m| \geq 2$ donne (dans ce cas les éléments non diagonaux de la matrice dans le premier membre de l'équation (1) sont nuls)

$$E_{m,1}^{(2)} = E_{m,2}^{(2)} = \frac{Id^2\mathcal{E}_0^2}{\hbar^2(4m^2-1)}.$$

Il y a donc déplacement des niveaux mais il n'y pas de levée de la dégénérescence (la levée de dégénérescence apparaît en fait au $2|m|^{\text{ème}}$ ordre du calcul des perturbations).

8.11. Les fonctions propres et les niveaux d'énergie du rotateur non perturbé (voir 4.3) ainsi que la perturbation sont de la forme

$$\Psi_{lm}^{(0)} = Y_{lm}(\theta,\varphi), \qquad E_{lm}^{(0)} = E_l^{(0)} = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2I}, \qquad V = -\mathbf{d}\cdot\mathbf{E}_0 = -d\mathcal{E}_0\cos\theta$$

(l'axe z est dirigé le long du champ électrique). Compte tenu de l'orthogonalité des harmoniques sphériques et de la relation

$$Y_{10} = i\sqrt{3/4\pi}\cos\theta \equiv Y_{00}i\sqrt{3}\cos\theta,$$

on obtient sans peine les éléments matriciels de la perturbation :

$$V_{lm,00} = -V_{00,lm} = \begin{cases} -id\mathcal{E}_0/\sqrt{3}, & \text{pour } l=1 \text{ et } m=0, \\ 0, & \text{dans les autres cas,} \end{cases}$$

et l'énergie de l'état fondamental du rotateur au second ordre du calcul des perturbations :

$$E_{00} \approx E_{00}^{(0)} + E_{00}^{(1)} + E_{00}^{(2)} = -\frac{Id^2\mathcal{E}_0^2}{3\hbar^2}. \tag{1}$$

On trouve à partir de (1) la valeur α_0 de la polarisabilité de l'état fondamental du rotateur (comparer à 8.9) :

$$\alpha_0 = \frac{2Id^2}{3\hbar^2}.$$

8.12. En utilisant la relation bien connue[2]

$$(\cos\theta)Y_{lm} = a_{lm}Y_{l+1,m} + b_{lm}Y_{l-1,m},$$
$$a_{lm} = -i\sqrt{\frac{(l+m+1)(l-m+1)}{(2l+1)(2l+3)}}, \qquad b_{lm} = i\sqrt{\frac{(l+m)(l-m)}{(2l+1)(2l-1)}},$$

on obtient sans peine les éléments matriciels de la perturbation :

$$V_{l'm',lm} = -d\mathcal{E}_0\delta_{mm'}\begin{cases} a_{lm}, & \text{pour } l' = l+1, \\ b_{lm}, & \text{pour } l' = l-1, \\ 0, & \text{dans les autres cas.} \end{cases}$$

Comme les éléments matriciels entre les fonctions d'onde correspondant à un même niveau d'énergie non perturbé (c'est-à-dire avec une valeur l identique) sont nuls, les corrections au premier ordre pour ces niveaux d'énergie sont également nulles.

Pour le calcul des corrections au second ordre et aux ordres supérieurs des niveaux d'énergie, il n'est pas nécessaire d'utiliser la formule du calcul des perturbations dans le cas où les niveaux d'énergie sont dégénérés. En effet, $\widehat{l}_z$ commute avec l'hamiltonien perturbé, on peut donc prendre pour les fonctions d'onde perturbées des fonctions propres de $\widehat{l}_z$. Comme pour une valeur m du niveau non perturbé $E_l^{(0)}$, il n'y a qu'une fonction propre Y_{lm}, on peut utiliser la formule du cas non dégénéré pour trouver la correction au second ordre ($l \geq 1$)

$$\begin{aligned} E_{lm}^{(2)} &= \sum_{l'\neq l,m'} \frac{|V_{l'm',lm}|^2}{E_l^{(0)} - E_{l'}^{(0)}} = \sum_{l'\neq l} \frac{|V_{l'm,lm}|^2}{E_l^{(0)} - E_{l'}^{(0)}} \\ &= \frac{1d^2\mathcal{E}_0^2}{\hbar^2}\frac{2l^3+3l^2+l-m^2(l^2+6l+3)}{l(l+1)(2l-1)(2l+1)(2l+3)} \end{aligned} \tag{1}$$

(à partir de l'équation séculaire on obtient immédiatement la même valeur de $E_{lm}^{(2)}$). Selon (1), la multiplicité $2l+1$ du niveau non perturbé du rotateur du moment l est partiellement levée : ce niveau se scinde en $l+1$ niveaux dont l'un (avec $m=0$) n'est pas dégénéré, tandis que les l autres niveaux sont doublement dégénérés ($m = \pm1, \pm2, \ldots, \pm l$). Il ne se produit pas de nouvelle levée de dégénérescence aux ordres supérieurs du calcul des perturbations. Ceci est dû au fait que, d'une part, la grandeur $m = l_z$ est une intégrale du mouvement et peut avoir une valeur déterminée en même temps que l'énergie du rotateur perturbé et que, d'autre part, l'énergie des états correspondant à $m = \pm l$ est la même en vertu de l'invariance de l'hamiltonien dans une réflexion par rapport à tout plan contenant l'axe z (dans cette réflexion, la projection du vecteur axial (moment cinétique) sur la direction du vecteur polaire (champ électrique) change de signe).

2 On l'obtient sans peine si l'on tient compte des relations entre les harmoniques sphériques Y_{lm} et les polynômes de Legendre associés $P_l^{|m|}$ et si l'on recourt aux relations de récurrence de ces derniers. Rappelons qu'on procède au même choix de facteurs de phase dans la définition des harmoniques sphériques que dans le livre de L. Landau et E. Lifchitz [1] (pour d'autres choix, les phases des grandeurs a_{lm} et b_{lm} peuvent être différentes, toutefois, ceci ne se répercute naturellement pas sur le résultat final du déplacement des niveaux).

8.13. Le niveau considéré de l'oscillateur est doublement dégénéré. Les fonctions propres correspondantes seront choisies sous forme (voir 4.5)

$$\Psi_1^{(0)} \equiv \Psi_{10} = \Psi_1^{\text{osc}}(x)\Psi_0^{\text{osc}}(y), \qquad \Psi_2^{(0)} \equiv \Psi_{01} = \Psi_0^{\text{osc}}(x)\Psi_1^{\text{osc}}(y),$$

où $\Psi_n^{\text{osc}}(x)$ sont les fonctions propres bien connues de l'oscillateur linéaire.

Les élément matriciels de la perturbation se calculent sans peine (voir, par exemple, la solution du problème 8.3) et valent

$$V_{11} = V_{22} = 0, \qquad V_{12} = V_{21} = \alpha a^2/2.$$

L'équation séculaire et sa solution ont la forme

$$\begin{vmatrix} -E_1^{(1)} & \alpha a^2/2 \\ \alpha a^2/2 & -E_1^{(1)} \end{vmatrix} = 0, \qquad E_{1,1(2)}^{(1)} = \mp\frac{\alpha a^2}{2},$$

c'est-à-dire que la dégénérescence du niveau est levée.

Les fonctions d'onde à l'approximation zéro s'obtiennent grâce aux formule classiques

$$\Psi_{1,1(0)}^{(1)} = (\Psi_1^{(0)} \mp \Psi_2^{(0)})/\sqrt{2}.$$

Notons que le problème considéré peut être résolu de façon exacte, car par rotation du système de coordonnées dans le plan x, y, l'énergie potentielle $U(x,y) = k(x^2+y^2)/2 + \alpha xy$ peut s'écrire sous la forme diagonale $U = k_1 x'^2/2 + k_2 y'^2/2$. On laisse au soin du lecteur d'obtenir cette solution exacte et de la comparer aux résultats obtenus par le calcul des perturbations.

8.14. Le second niveau excité d'un oscillateur non perturbé est triplement dégénéré. Les fonctions propres correspondantes sont (voir la solution du problème précédent) :

$$\Psi_1^{(0)} = \Psi_2^{\text{osc}}(x)\Psi_0^{\text{osc}}(y), \qquad \Psi_2^{(0)} = \Psi_1^{\text{osc}}(x)\Psi_1^{\text{osc}}(y),$$
$$\Psi_3^{(0)} = \Psi_0^{\text{osc}}(x)\Psi_2^{\text{osc}}(y).$$

Les éléments matriciels de perturbation non nuls sont égaux à

$$V_{12} = V_{21} = V_{23} = V_{32} = \alpha a^2/\sqrt{2}.$$

La solution de l'équation séculaire donne les corrections au premier ordre du calcul des perturbations des niveaux d'énergie :

$$E_{2,1}^{(1)} = -\alpha a^2, \qquad E_{2,2}^{(1)} = 0, \qquad E_{2,3}^{(1)} = \alpha a^2.$$

Le niveau se scinde donc en trois sous-niveaux, et la dégénérescence est complètement levée.

Les fonctions d'onde à l'approximation zéro correspondant aux trois niveaux d'énergie sont de la forme

$$\Psi_{2,1}^{(0)} = (\Psi_1^{(0)} - \sqrt{2}\Psi_2^{(0)} + \Psi_3^{(0)})/2, \qquad \Psi_{2,2}^{(0)} = (\Psi_1^{(0)} - \Psi_3^{(0)})/\sqrt{2},$$
$$\Psi_{2,3}^{(0)} = (\Psi_1^{(0)} + \sqrt{2}\Psi_2^{(0)} + \Psi_3^{(0)})/2.$$

8.15. Après le changement de variables $x' = x$, $y' = y$, $z' = az/b$, l'équation de Schrödinger et la condition limite pour des fonctions propres de l'hamiltonien prennent la forme

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x'^2}+\frac{\partial^2}{\partial y'^2}+\frac{a^2}{b^2}\frac{\partial^2}{\partial z'^2}\right)\Psi = E\Psi,$$
$$\Psi(r'=a)=0.$$

Vu que $|a-b| \ll a$, en notant $a=(1+\varepsilon)b$, $|\varepsilon| \ll 1$, représentons l'hamiltonien sous la forme $\widehat{H} = \widehat{H}_0 + \widehat{V}$, où

$$\widehat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x'^2}+\frac{\partial^2}{\partial y'^2}+\frac{\partial^2}{\partial z'^2}\right), \qquad \widehat{V} = -\frac{\hbar^2}{2m}(2\varepsilon+\varepsilon^2)\frac{\partial^2}{\partial z'^2}.$$

Les fonctions propres et l'énergie de l'état fondamental d'un hamiltonien non perturbé, selon 4.33, ont pour expression ($r' \le a$)

$$\Psi_0^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2a\pi r'}}\sin\frac{\pi r'}{a}, \qquad E_0^{(0)} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}.$$

La correction au premier ordre en ε de l'énergie de l'état fondamental est égale à

$$E_0^{(1)} = \int \Psi_0^{(0)}\widehat{V}\Psi_0^{(0)}dv' = -\frac{\hbar^2\varepsilon}{m}\int \Psi_0^{(0)}(r')\frac{\partial^2}{\partial z'^2}\Psi_0^{(0)}(r')dv'. \tag{1}$$

Pour le calcul de l'intégrale dans l'expression (1), remarquons qu'en vertu de la symétrie sphérique de la fonction d'onde $\Psi_0^{(0)}$

$$\overline{\frac{\partial^2}{\partial x'^2}} = \overline{\frac{\partial^2}{\partial y'^2}} = \overline{\frac{\partial^2}{\partial z'^2}} = \frac{1}{3}\overline{\Delta'},$$

et, compte tenu de la relation[3] $\Delta'\Psi_0^{(0)} = -\frac{\pi^2}{a^2}\Psi_0^{(0)}$, on obtient

$$E_0^{(1)} = \frac{\hbar^2\pi^2\varepsilon}{3ma^2}, \qquad E_0 \approx E_0^{(0)} + E_0^{(1)} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}\left(1+\frac{2\varepsilon}{3}\right).$$

Comme le volume de l'ellipsoïde vaut

$$v = \frac{4\pi}{3}a^2b = \frac{4\pi}{3}a^3(1+\varepsilon)^{-1} \approx \frac{4\pi}{3}a^3(1-\varepsilon) \equiv \frac{4\pi}{3}R^3,$$

on obtient $E_0 \approx \hbar^2\pi^2/(2mR^2)$, où R est le rayon de la sphère de même volume que l'ellipsoïde. Donc, au premier ordre du calcul des perturbations en ε, l'énergie de l'état fondamental d'une particule de dépend que du volume de l'ellipsoïde.

---

3 Strictement parlant, il faudrait introduire dans le second membre de cette relation un terme complémentaire $-\delta(r'-a)\Psi_0^{(0)}(a)$ (comparer à 2.3) ; toutefois, la prise en compte de ce terme ne modifie pas la valeur de $\overline{\Delta'}$ (car $\Psi_0^{(0)}(a)=0$).

8.16. Le problème se résout de façon analogue au précédent. Les fonctions propres et les valeurs propres de l'hamiltonien non perturbé sont de la forme (voir 4.33)

$$\Psi^{(0)}_{n_r lm} = \frac{\widetilde{C}}{\sqrt{r}} J_{l+1/2}\left(\alpha_{n_r+1,l}\frac{r}{a}\right) Y_{lm}, \qquad E^{(0)}_{n_r l} = \frac{\hbar^2 \alpha^2_{n_r+1,l}}{2ma^2}.$$

et le niveau est $(2l+1)$ fois dégénéré. Comme l'opérateur $\widehat{l}_z$ commute avec l'hamiltonien, il est immédiat que les fonctions d'onde à l'approximation zéro de l'hamiltonien perturbé sont les fonctions d'onde données plus haut, de sorte que pour le calcul du déplacement du niveau on peut se servir de la formule

$$E^{(1)}_{n_r lm} = \int \Psi^{(0)*}_{n_r lm} \widehat{V} \Psi^{(0)}_{n_r lm} dv = -\frac{\varepsilon \hbar^2}{m} \int \Psi^{(0)*}_{n_r lm} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \Psi^{(0)}_{n_r lm} dv. \tag{1}$$

Pour calculer l'intégrale (1), recourons à l'égalité conventionnelle analogue à celle établie dans 3.52 pour les opérateurs vectoriels :

$$\overline{\frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_k}} = A\delta_{ik} + B\varepsilon_{ikl}\widehat{l}_l + C(\widehat{l}_i\widehat{l}_k + \widehat{l}_k\widehat{l}_i). \tag{2}$$

A partir de la symétrie du premier membre de (2) vis à vis des indices i et k, il s'ensuit que $B = 0$ et la condition $\widehat{l}_i \frac{\partial}{\partial x_i} \equiv 0$ conduit à "l'égalité"

$$A + C[2l(l+1) - 1] = 0, \tag{3}$$

tandis que la somme sur i de l'expression (2) avec $k = i$ donne

$$3A + 2l(l+1)C = \overline{\Delta}. \tag{4}$$

De (3) et (4), on obtient A et C et, compte tenu de la relation

$$-\frac{h^2}{2m} \int \Psi^{(0)*}_{n_r lm} \Delta \Psi^{(0)}_{n_r lm} dv = E^{(0)}_{n_r l},$$

en accord avec (1) et (2), il vient

$$E^{(1)}_{n_r lm} = 2\varepsilon E^{(0)}_{n_r l} \frac{(2l^2 + 2l - 1 - 2m^2)}{(2l-1)(2l+3)}. \tag{5}$$

On voit à partir de (5) que la dégénérescence $(2l+1)$ du niveau est partiellement levée : il se scinde en $l+1$ sous-niveaux dont l'un (avec $m = 0$) est non dégénéré, tandis que les autres sont doublement dégénérés. Aux ordres supérieurs du calcul des perturbations, on n'observe pas de nouvelle levée de dégénérescence. On obtient sans peine la valeur moyenne de la correction au premier ordre apportée à tous les sous-niveaux :

$$\overline{E^{(1)}_{n_r lm}} = \frac{1}{2l+1} \sum_m E^{(1)}_{n_r lm} = \frac{2\varepsilon}{3} E^{(0)}_{n_r l},$$

ainsi que la valeur moyenne de l'énergie des sous-niveaux au premier ordre en ε

$$\overline{E_{n_r lm}} = E^{(0)}_{n_r l} + \overline{E^{(1)}_{n_r lm}} = \frac{\hbar^2 \alpha^2_{n_r+1,l}}{2mR^2},$$

qui signifie que $\overline{E_{n_r lm}}$ n'est fonction que du volume de l'ellipsoïde ($v = 4\pi R^3/3$).

8.17. Pour $r \ll a$, le potentiel est de la forme $U \approx -U_0 a/r$ (fig. 27). Dans ce champ coulombien, les fonctions d'onde des premiers niveaux d'énergie sont localisées à une distance de l'ordre de $r_n \sim a_0 n^2 \equiv \dfrac{\hbar^2 n^2}{maU_0}$ du centre de champ et si cette distance est beaucoup plus petite que a, c'est-à-dire si

$$\xi \equiv ma^2 U_0/\hbar^2 \gg n^2 \tag{1}$$

(n étant le nombre quantique principal dans un champ coulombien), il est immédiat qu'à l'approximation "zéro", les premiers niveaux d'énergie et les fonctions d'onde correspondantes sont de la forme

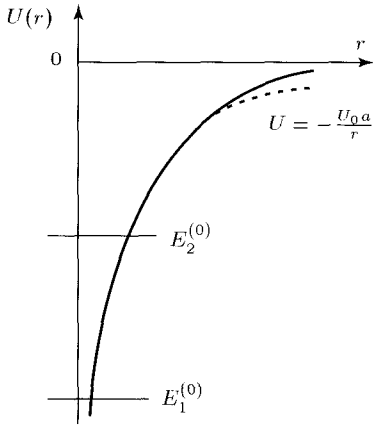

Figure 27

$$\Psi^{(0)}_{n_r lm} = \Psi^{\text{coul}}_{n_r lm}, \qquad E^{(0)}_n = -\frac{ma^2 U_0^2}{2\hbar^2 n^2} = -U_0 \frac{\xi}{2n^2},$$

où $\Psi^{\text{coul}}_{n_r lm}$ sont des fonctions propres bien connues de l'hamiltonien d'une particule dans le potentiel coulombien $U = -\alpha/r$ avec $\alpha = U_0 a$.

La différence entre le potentiel étudié dans le problème et celui du champ coulombien peut être exprimée sous la forme d'une perturbation :

$$V(r) = -U_0 \left[\frac{1}{\exp(r/a) - 1} - \frac{a}{r}\right]. \tag{2}$$

Vu que les fonctions $\Psi^{(0)}_{n_r lm}$ sont des fonctions propres des opérateurs $\widehat{\mathbf{l}}^2$ et $\widehat{l}_z$ qui commutent également avec l'hamiltonien perturbé, elles constituent les fonctions d'onde à l'approximation "zéro" et les corrections au premier ordre des niveaux d'énergie sont

$$E^{(1)}_{n_r l} = \int V(r) |\Psi^{(0)}_{n_r lm}|^2 dv. \tag{3}$$

En développant la perturbation (2) en série des puissances de (r/a) :

$$V(r) = -U_0 \left(-\frac{1}{2} + \frac{r}{12a} + O\left(\frac{r^3}{a^3}\right)\right), \tag{4}$$

et, compte tenu de la valeur de l'intégrale (voir, par exemple, [1])

$$\int r |\Psi^{(0)}_{n_r lm}|^2 dv = \frac{1}{2}[3n^2 - l(l+1)] \frac{\hbar^2}{maU_0}, \tag{5}$$

on obtient selon (3)–(5)

$$E^{(1)}_{n_r l} = U_0 \left\{\frac{1}{2} - \frac{1}{24\xi}[3n^2 - l(l+1)]\right\}, \qquad n = n_r + l + 1. \tag{6}$$

Notons que la prise en compte du terme $O(r^3/a^3)$ dans la formule (4) dans le calcul au premier ordre serait un excès de précision car le terme correspondant $O(U_0/\xi^3)$ dans l'expression de $E^{(1)}$ est du même ordre de grandeur que la correction au second ordre du calcul des perturbations.

Comme on le voit à partir de l'expression obtenue (6), la dégénérescence accidentelle des niveaux dans le champ coulombien est levée par la perturbation et il ne reste que la dégénérescence ordinaire (correspondant aux projections du moment) des niveaux dans un champ central $(2l+1)$.

8.18. Le problème se résout de façon absolument analogue au précédent.

La perturbation est de la forme

$$V(r) = U(r) + \frac{\alpha}{r} \approx \frac{\alpha}{a}\left(1 - \frac{r}{2a}\right),$$

Le déplacement des niveaux au premier ordre du calcul des perturbations est égal à $(\xi \equiv \alpha a m/\hbar^2)$

$$E^{(1)}_{n_r l} \approx \frac{\alpha}{a}\left\{1 - \frac{1}{4\xi}[3n_r^2 + 6n_r(l+1) + (l+1)(2l+3)]\right\}.$$

La condition de validité est $\xi \gg n^2$.

8.19. Dans un champ électrique intense les fonctions d'onde des premiers niveaux d'énergie du rotateur se localisent dans le domaine de petits angles $|\varphi| \ll 1$, car pour $\varphi = 0$ l'énergie potentielle $U = -d\mathcal{E}_0 \cos\varphi$ a un minimum profond (fig. 28). En développant $U(\varphi)$ en série et en se bornant aux premiers termes du développement :

$$U(\varphi) = -d\mathcal{E}_0 \cos\varphi \approx -d\mathcal{E}_0 + \frac{d\mathcal{E}_0}{2}\varphi^2 \qquad (|\varphi| \ll 1), \tag{1}$$

on transforme, à l'approximation "zéro", l'hamiltonien du rotateur en un hamiltonien d'oscillateur linéaire ; dans cette approximation, les fonctions d'onde et les valeurs propres sont de la forme

$$\Psi^{(0)}_n(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2^n\sqrt{\pi}\varphi_0 n!}} \exp\left(-\frac{\varphi^2}{2\varphi_0^2}\right) H_n\left(\frac{\varphi}{\varphi_0}\right), \qquad |\varphi| < \pi,$$

$$E^{(0)}_n = -d\mathcal{E}_0 + \hbar\sqrt{d\mathcal{E}_0/I}(n+1/2)\ ; \qquad n = 0, 1, \ldots, \qquad \varphi_0 = \left(\frac{\hbar^2}{Id\mathcal{E}_0}\right)^{1/4}.$$

La condition de validité du modèle est la petitesse de la fonction propre pour $|\varphi| \sim 1$. Vu que les fonctions d'onde $\Psi^{(0)}_n(\varphi)$ ne sont sensiblement différentes du zéro que pour

$$d\mathcal{E}_0\varphi^2 \lesssim \hbar\omega(n+1/2)\ ;\ \text{c'est-à-dire pour } \varphi^2 \lesssim \varphi_0^2(n+1),$$

la condition de validité des résultats obtenus prend la forme

$$\varphi_0^2(n+1) \ll 1, \text{ ou } \mathcal{E}_0 \gg \frac{\hbar^2}{dI^2}(n+1)^2.$$

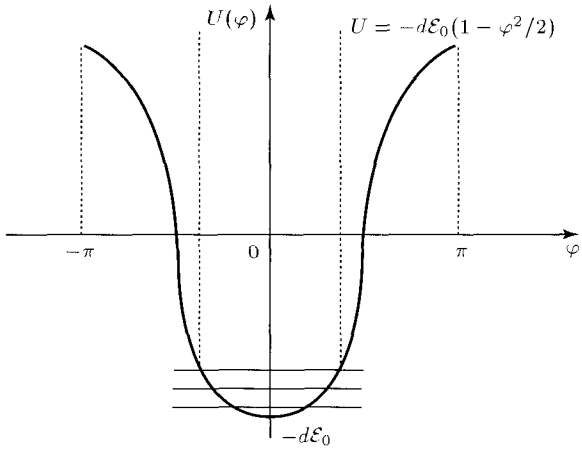

Figure 28

En prenant dans l'expression (1) les termes suivants du développement en φ^2, il est possible de préciser les valeurs des niveaux d'énergie du rotateur. On note sans peine que la correction au premier ordre est de l'ordre de grandeur de

$$E_n^{(1)} = -\frac{d\mathcal{E}_0}{24}\int \varphi^4 |\Psi_n^{(0)}|^2 d\varphi \sim \frac{-d\mathcal{E}_0}{24}\varphi_0^4 (n+1)^2 = -\frac{\hbar^2(n+1)^2}{dI}.$$

8.20. Pour trouver une solution approchée de l'équation de Schrödinger de la "partie radiale" de la fonction propre de l'hamiltonien $\Psi_{n,lm} = R_{n,l}(r)Y_{lm}/r$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}R'' - \frac{\alpha}{r^p}R + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}R = ER,$$

qui définit aussi les niveaux d'énergie de la particule, on développe l'énergie potentielle "effective"

$$U_{\text{eff}} = -\frac{\alpha}{r^p}R + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2},$$

en série au voisinage du point

$$r_0 = \left[\frac{\hbar^2 l(l+1)}{\alpha m p}\right]^{\frac{1}{2-p}},$$

pour lequel U_{eff} présente un minimum :

$$U_{\text{eff}} = -\frac{1}{2}\alpha(2-p)r_0^{-p} + \frac{\alpha(2p-p^2)}{2}r_0^{-(p+2)}(r-r_0)^2 + \dots \qquad (1)$$

Pour $|r - r_0| \ll r_0$, on peut se limiter dans l'expression (1) aux deux premiers termes, et si les fonctions d'onde $R_{n,l}(r)$ ne sont sensiblement différentes de zéro qu'au voisinage

de ces valeurs de la variable r, on retrouve un oscillateur harmonique autour du point d'équilibre $r = r_0$ et avec un coefficient de raideur $k = U''_{\text{eff}}(r_0)$. Alors,

$$
\begin{aligned}
R^{(0)}_{n_r l}(r) &= \frac{1}{\sqrt{2^{n_r} a \sqrt{\pi} n_r!}} \exp\left[-\frac{(r-r_0)^2}{2a^2}\right] H_{n_r}\left(\frac{r-r_0}{a}\right), \\
E^{(0)}_{n_r l} &= -\frac{\alpha(2-p)}{2} r_0^{-p} + \hbar\sqrt{\frac{\alpha(2p-p^2)}{m} r_0^{-p-2}}(n_r + 1/2), \\
a &= \left(\frac{\hbar^2 r_0^{p+2}}{m\alpha(2p-p^2)}\right)^{1/4}.
\end{aligned}
\tag{2}
$$

Pour que les expressions (2) soient valables il faut que la condition utilisée dans les calculs soit remplie : la fonction d'onde $R^{(0)}_{n_r l}$ ne doit être sensiblement différente de zéro que pour $|r - r_0| \ll r_0$. Comme la fonction d'onde $R^{(0)}_{n_r l}$ est sensiblement différente de zéro pour

$$\frac{k}{2}(r - r_0) \lesssim \hbar\omega(n_r + 1/2),$$

on trouve la condition de validité

$$[l(l+1)]^{1/4} \gg \left(\frac{(n_r+1)^2}{2-p}\right)^{1/4}, \tag{3}$$

qui, pour des valeurs suffisamment grandes de l (et des n_r pas trop grands), est toujours réalisable (il est important d'avoir $p < 2$).

La fonction d'onde $R_{n_r l}$ exacte vaut zéro pour $r = 0$, alors que $R^{(0)}_{n_r l}$ approchée est différente de zéro mais decroît exponentiellement au voisinage de $r = 0$.

Dans le cas d'un champ coulombien, la valeur exacte de l'énergie du niveau E_n est donnée par

$$
\begin{aligned}
E_n &= -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2 n^2} = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}\frac{1}{(l + 1/2 + n_r + 1/2)^2} \\
&\approx -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2(l+1/2)^2} + \frac{m\alpha^2}{\hbar^2(l+1/2)^3}(n_r + 1/2),
\end{aligned}
$$

qui est en accord avec l'expression (2) de $E^{(0)}_{n_r l}$ (il faut noter que selon (3), $l \gg 1$, de sorte que $l(l+1) \approx (l+1/2)^2$).

8.21. Le problème se résout de façon analogue au précédent. La "partie radiale de R" de la fonction propre $\Psi_{n_\rho m} = R_{n_\rho m} e^{im\varphi}/\sqrt{\rho}$ de l'hamiltonien du mouvement transversal et les niveaux d'énergie correspondants s'obtiennent à partir de l'équation

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2R}{d\rho^2} + \frac{\hbar^2(m^2 - 1/4)}{2\mu\rho^2}R + 2|\kappa e| \ln\frac{\rho}{a} R = E_l R, \tag{1}$$

dans laquelle κ est la densité linéïque de charge du fil, $\kappa e < 0$, a une constante quelconque. Introduisons par commodité

$$\tilde{\rho}_0 = \left[\frac{\hbar^2\rho_0^2}{4\mu|\kappa e|}\right]^{1/4}, \qquad \rho_0 = \left(\frac{\hbar^2(m^2-1/4)}{2\mu|\kappa e|}\right)^{1/4}, \qquad m \neq 0.$$

L'énergie potentielle effective pour $m \neq 0$

$$U_{\text{eff}}(\rho) = 2|\kappa e| \ln\frac{\rho}{a} + \frac{\hbar^2(m^2-1/4)}{2\mu\rho^2},$$

possède un minimum au point ρ_0. Au voisinage de ce point ($|\rho-\rho_0| \ll \rho_0$)

$$U_{\text{eff}}(\rho) = U_{\text{eff}}(\rho_0) + \frac{2|\kappa e|}{\rho_0^2}(\rho-\rho_0)^2. \tag{2}$$

Avec l'approximation (2) l'équation (1) se ramène à l'équation de Schrödinger d'un oscillateur et admet pour solution

$$R_{n_\rho l}^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2^{n_\rho}\tilde{\rho}_0\sqrt{\pi}(n_\rho)!}} \exp\left[-\frac{(\rho-\rho_0)^2}{2\tilde{\rho}_0^2}\right] H_{n_\rho}\left(\frac{\rho-\rho_0}{\tilde{\rho}_0}\right), \tag{3}$$

$$(E_t^{(0)})_{n_\rho m} = U_{\text{eff}}(\rho_0) + \sqrt{\frac{8e^2\kappa^2}{m^2-1/4}}(n_\rho+1/2). \tag{4}$$

La fonction d'onde (3) n'est sensiblement différente de zéro que pour

$$(\rho-\rho_0)^2 \lesssim (n_\rho+1/2)\left[\frac{\hbar^2\rho_0^2}{\mu|\kappa e|}\right]^{1/2} \equiv (n_\rho+1/2)\left[\frac{2\rho_0^4}{m^2-1/4}\right]^{1/2},$$

de sorte que la condition utilisée pour obtenir à partir de (2) $|\rho-\rho_0| \ll \rho_0$, prend la forme $\sqrt{n_\rho+1/2} \ll \sqrt{|m|}$, ce qui détermine le domaine de validité de la solution approchée obtenue.

8.22. En assimilant dans l'équation (voir 2.57)

$$\Psi_k(x) = \mathrm{e}^{ikx} - \frac{im}{|k|\hbar^2}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{i|k||x-x'|}U(x')\Psi_k(x')dx' \tag{1}$$

l'énergie potentielle à une perturbation et en représentant la fonction d'onde sous la forme $\Psi_k = \Psi_k^{(0)} + \Psi_k^{(1)}$, on obtient sans peine

$$\Psi_k^{(0)} = \mathrm{e}^{ikx}, \qquad \Psi_k^{(0)} \approx -\frac{im}{|k|\hbar^2}\int_{-\infty}^{\infty} U(x')\exp[ikx'+i|k||x-x'|]dx'. \tag{2}$$

En obtenant la relation (2) on a supposé que $|\Psi_k^{(1)}| \ll |\Psi_k^{(0)}|$; or la validité de cette inégalité définit le domaine de validité de la méthode. En désignant par a et U_0 le rayon d'action et la grandeur caractéristique du potentiel, on obtient une estimation

de la grandeur $|\Psi_k^{(1)}|$ et la condition de validité du calcul des perturbations (compte tenu de ce que $|\Psi_k^{(0)}| = 1$) :

$$|\Psi_k^{(1)}| \lesssim \frac{mU_0 a}{|k|\hbar^2}, \qquad \frac{mU_0 a}{|k|\hbar^2} \ll 1.$$

Notons que l'estimation obtenue de la grandeur $|\Psi_k^{(1)}|$ est valable quelle que soit l'énergie de la particule.

Dans les conditions de validité du calcul des perturbations, on obtient pour le coefficient de réflexion des particules ($E = \hbar^2 k^2/2m$) :

$$R(E) \approx \frac{m^2}{k^2\hbar^4}\left|\int_{-\infty}^{\infty} U(x)e^{2ikx}dx\right|^2 \ll 1. \tag{3}$$

si, dans la formule du problème 2.59, on substitue la fonction d'onde approchée $\Psi_k^{(0)} = \exp(ikx)$ à la fonction d'onde exacte.

8.23. Les éléments matriciels de la perturbation $\widehat{V} = -xF_0 f(t)$ valent (voir 2.1)

$$\begin{aligned} V_{n0}(t) &= -\frac{2}{a}F_0 f(t)\int_0^a x\sin\frac{(n+1)\pi x}{a}\sin\frac{\pi x}{a}dx \\ &= \begin{cases} 0 & \text{pour } n \text{ pair } (n \neq 0), \\ \dfrac{8a(n+1)F_0 f(t)}{\pi^2 n^2(n+2)^2} & \text{pour } n \text{ impair.} \end{cases} \end{aligned}$$

Compte tenu de la valeur des intégrales ($\omega_{n0} = \hbar\pi^2 n(n+2)/2ma^2$)

$$\begin{aligned} I_1 &= \int_{-\infty}^{\infty} \exp(i\omega_{n0}t - t^2/\tau^2)dt = \sqrt{\pi}\tau\exp(-\omega_{n0}^2\tau^2/4), \\ I_2 &= \int_{-\infty}^{\infty} \exp(i\omega_{n0}t - |t|/\tau)dt = 2\tau(1+\omega_{n0}^2\tau^2)^{-1}, \\ I_3 &= \int_{-\infty}^{\infty} \exp(i\omega_{n0}t)\frac{dt}{1+(t/\tau)^2} = \pi\tau\exp(-\omega_{n0}\tau) \end{aligned}$$

(la première s'écrit sous la forme d'une intégrale de Poisson, la deuxième se calcule directement, la dernière se calcule à l'aide du théorème des résidus), on obtient les probabilités d'excitation des différents états de la particule (au premier ordre du calcul des perturbations) pour $t \to \infty$ sous la forme

$$W^{(1)}(0 \to n) = \begin{cases} 0 & \text{pour } n \text{ pair } (n \neq 0), \\ \dfrac{64a^2F_0^2(n+1)^2}{\pi^4 n^4(n+2)^4\hbar^2}I_k^2 & \text{pour } n \text{ impair,} \end{cases}$$

où les valeurs de $k = 1, 2, 3$ correspondent aux trois potentiels donnés dans l'énoncé. Notons qu'au premier ordre, ne sont excités que les niveaux impairs, mais $W^{(1)}(0 \to n)$ diminue rapidement avec n, par exemple, $W^{(1)}(0 \to 3)/W^{(1)}(0 \to 1) < 0,007$. La condition de validité de l'approximation est $ma^3F_0 \ll \hbar^2\pi^2$.

8.24. La perturbation est de la forme $\widehat{V} = -ea\mathcal{E}(t)$ et ses éléments matriciels valent (voir 8.3)

$$V_{kn}(t) = -\frac{ea\mathcal{E}(t)}{\sqrt{2}} \cdot \begin{cases} \sqrt{n+1} & \text{pour } k = n+1, \\ \sqrt{n} & \text{pour } k = n-1, \\ 0 & \text{dans les autres cas.} \end{cases}$$

Les probabilités de transitions non nulles de l'oscillateur au premier ordre du calcul des perturbations sont

$$W^{(1)}(n \to k) = \frac{e^2 a^2 |I|^2}{2\hbar^2} \cdot \begin{cases} (n+1) & \text{pour } k = n+1, \\ n & \text{pour } k = n-1, \end{cases} \tag{1}$$

où

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{E}(t) \exp(\pm i\omega t) dt$$

(les signes "+" et "−" correspondent respectivement à $k = n+1$ et à $k = n-1$; la grandeur $|I|^2$ est indépendante de ce signe).

Pour les champs $\mathcal{E}(t)$ indiqués dans l'énoncé, la grandeur I vaut
a) $I = \sqrt{\pi}\tau\mathcal{E}_0 \exp\left(-\omega^2\tau^2/4\right)$;
b) $I = 2\tau\mathcal{E}_0/(1+\omega^2\tau^2)$.

Selon (1), les seules probabilités de transitions de l'oscillateur non nulles sont celles du $n^{\text{ème}}$ état vers les états $(n-1)$ et $(n+1)$. La condition de validité des formules est $ea\mathcal{E}_0\sqrt{n+1} \ll \hbar\omega$.

8.25. Dans l'expression $\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_0(1+(t/\tau)^2)^{-1}$, la grandeur $\mathcal{E}_0$ se détermine à partir de la condition

$$P_0 = \int_{-\infty}^{\infty} F(t)dt = e\int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{E}(t)dt = e\mathcal{E}_0\pi\tau, \text{ c'est-à-dire } e\mathcal{E}_0 = P_0/\pi\tau.$$

La valeur de l'intégrale suivante se calcule à l'aide du théorème des résidus

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{E}(t)\mathrm{e}^{\pm i\omega t}dt = \mathcal{E}_0 \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{\pm i\omega t} \frac{dt}{1+(t/\tau)^2} = \pi\tau\mathcal{E}_0 \exp(-\omega\tau).$$

Les probabilités de transitions de l'oscillateur se déterminent par la formule(1) du problème précédent dans laquelle le grandeur $e^2|I|^2$ vaut

$$e^2|I|^2 = P_0^2\mathrm{e}^{-2\omega\tau}.$$

Les probabilités cherchées pour une valeur de P_0 fixée diminuent de façon monotone avec l'accroissement de τ et s'annulent pour $\tau = \infty$.

8.26. La perturbation est de la forme $\widehat{V} = -d\mathcal{E}(t)\cos\varphi$ et ses éléments matriciels sont (voir 8.9)

$$V_{m'm}(t) = \begin{cases} -d\mathcal{E}(t)/2 & \text{pour } m' = m \pm 1, \\ 0 & \text{dans les autres cas.} \end{cases}$$

Les probabilités de transitions du rotateur, non nulles au premier ordre du calcul des perturbations, sont données par l'expression ($m' = m \pm 1$)

$$W^{(1)}(m \to m') = \frac{d^2}{4\hbar^2}\left|\int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{E}(t)\exp(i\omega_{m'm}t)dt\right|^2. \tag{1}$$

Les valeurs de l'intégrale dans la formule (1) pour les champs $\mathcal{E}(t)$ donnés dans l'énoncé sont données dans la solution du problème 8.24 (il faut tenir compte de ce que les grandeurs $\omega_{m'm}$ sont égales à $(2m+1)\hbar/2I$ et $-(2m-1)\hbar/2I$ pour $m' = m+1$ et $m' = m-1$ respectivement). La condition de validité des résultats obtenus est $d\mathcal{E}_0 \ll \hbar^2(|m|+1)/I$.

A partir de l'expression obtenue pour $W^{(1)}(m \to m')$, il s'ensuit qu'au premier ordre du calcul des perturbations, seuls les niveaux d'énergie du rotateur les plus proches sont excités.

8.27. Les éléments matriciels de la perturbation $\widehat{V} = -d\mathcal{E}(t)\cos\theta$ ont été calculés dans 8.12 :

$$V_{l'm',lm}(t) = \delta_{mm'} \cdot \begin{cases} -d\mathcal{E}(t)a_{lm} & \text{pour } l' = l+1, \\ -d\mathcal{E}(t)b_{lm} & \text{pour } l' = l-1, \\ 0 & \text{dans les autres cas.} \end{cases}$$

On voit qu'au premier ordre du calcul des perturbations, seuls les états du rotateur ayant un moment $l' = l \pm 1$ sont excités (la projection du moment m sur la direction du champ ne varie pas dans ce cas ; l'absence de transitions entre des états ayant des valeurs de m différentes est liée au fait que la projection du moment est une intégrale du mouvement). Les probabilités des transitions sont

$$W^{(1)}(l \to l') = \frac{d^2}{\hbar^2}\begin{cases} |a_{lm}\tilde{I}(\omega_{l+1,l})|^2 & \text{pour } l' = l+1, \\ |b_{lm}\tilde{I}(\omega_{l-1,l})|^2 & \text{pour } l' = l+1, \end{cases} \tag{1}$$

où

$$\tilde{I}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{E}(t)\exp(i\omega t)dt,$$

et où les pulsations $\omega_{l'l}$ des transitions valent $\hbar(l+1)/I$ et $-\hbar l/I$ pour $l' = l+1$ et $l' = l-1$, respectivement. Les valeurs de l'intégrale $\tilde{I}(\omega)$ pour les champs $\mathcal{E}(t)$ donnés dans 8.24 sont données dans la solution de ce problème.

La condition de validité du résultat (1) est $d\mathcal{E}_0 \ll \hbar^2(l+1)/I$.

8.28. Représentons la fonction d'onde $\Psi(t)$ du système avec l'hamiltonien $\widehat{H} = \widehat{H}_0 + \widehat{V}(t)$, où $\widehat{V}(t)$ est une perturbation dépendant du temps sous la forme d'un développement en fonctions propres de l'hamiltonien $\widehat{H}_0$:

$$\Psi(t) = \sum_m a_m(t)\Psi_m^{(0)} \exp(-iE_m^{(0)}t/\hbar).$$

A partir de l'équation de Schrödinger, on déduit les équations pour les coefficients du développement

$$\begin{aligned} \dot{a}_k(t) &= -\frac{i}{\hbar}\sum_m a_m(t)V_{km}(t)\exp(i\omega_{km}^{(0)}t), \\ V_{km}(t) &= \int \Psi_k^{(0)*}\widehat{V}(t)\Psi_m^{(0)}d\tau, \qquad \omega_{km}^{(0)} = \frac{E_k^{(0)} - E_m^{(0)}}{\hbar}. \end{aligned} \tag{1}$$

En supposant qu'avant l'introduction de la perturbation (c'est-à-dire pour $t \to -\infty$) le système se trouvait dans le $n^{\text{ème}}$ état de l'hamiltonien non perturbé, c'est-à-dire $a_k(t \to -\infty) = \delta_{kn}$ (par la suite on écrit $a_{kn}(t)$ à la place de $a_k(t)$), et en considérant la perturbation comme petite, on représente $a_k(t)$ sous forme d'un développement en puissances de la perturbation :

$$a_{kn}(t) = a_{kn}^{(0)} + a_{kn}^{(1)} + \ldots = \delta_{kn} + a_{kn}^{(1)}(t) + a_{kn}^{(2)}(t) + \ldots . \tag{2}$$

Dans l'expression (2), on a tenu compte de ce que, d'après (1), $\dot{a}_{kn}^{(0)} = 0$, et donc que $a_{kn}^{(0)} = \text{const} = \delta_{kn}$. Portons (2) dans (1) et, en rendant égaux dans les deux membres de l'égalité les termes de même ordre en perturbation, on obtient (compte tenu de l'égalité $a_{kn}^{(0)} = \delta_{kn}$)

$$\dot{a}_{kn}^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar}V_{kn}(t)\mathrm{e}^{i\omega_{kn}^{(0)}t}, \qquad \dot{a}_{kn}^{(2)}(t) = -\frac{i}{\hbar}\sum_m V_{km}(t)a_{mn}^{(1)}\mathrm{e}^{i\omega_{km}^{(0)}t}. \tag{3}$$

A partir (3), compte tenu des conditions initiales, on trouve que $a_{kn}^{(1,2)}(t = -\infty) = 0$:

$$\begin{aligned} a_{kn}^{(1)}(t) &= -\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} V_{kn}(t')\exp(i\omega_{kn}^{(0)}t')dt', \\ a_{kn}^{(2)}(t) &= -\frac{1}{\hbar^2}\sum_m \int_{-\infty}^{t} V_{km}(t')\exp(i\omega_{km}^{(0)}t')\int_{-\infty}^{t'} V_{mn}(t'')\exp(i\omega_{mn}^{(0)}t'')dt''\,dt'. \end{aligned} \tag{4}$$

La probabilité de transition du $n^{\text{ème}}$ état initial vers le $k^{\text{ème}}$ état final (après l'action de la perturbation) vaut ($k \neq n$)

$$W(n \to k) = |a_{kn}(t = +\infty)|^2 = |a_{kn}^{(1)}(t = \infty) + a_{kn}^{(2)}(t = \infty) + \ldots|^2,$$

et si $a_{kn}^{(1)}(t=+\infty)=0$, alors l'expression

$$W^{(2)}(n\to k)=|a_{kn}^{(2)}(t=+\infty)|^2 \tag{5}$$

donne la probabilité de transition au second ordre du calcul des perturbations.

8.29. Il n'y a en réalité aucun paradoxe : pour le carré du module de la grandeur $a=1+a^{(1)}+a^{(2)}+\ldots$, constituant le développement en série suivant un petit paramètre $\lambda \ll 1$ (de sorte que $|a^{(n)}\sim\lambda^n)$ jusqu'aux termes au second ordre, il faut connaître la quantité a également jusqu'aux termes au second ordre. En effet,

$$|a|^2=1+2\mathrm{Re}\ a^{(1)}+|a^{(1)}|^2+2\mathrm{Re}\ a^{(2)}+O(\lambda^3)$$
$$(|a^{(1)}|^2\sim \mathrm{Re}\ a^{(2)}\sim\lambda^2).$$

En s'appuyant sur le résultat du problème précédent, on obtient

$$\begin{aligned} a_{nn}(t=\infty) &\approx 1-\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}V_{nn}(t)dt \\ &- \frac{1}{\hbar^2}\sum_m\int_{-\infty}^{\infty}V_{nm}(t)\,\mathrm{e}^{i\omega_{nm}^{(0)}t}\int_{-\infty}^{t}V_{mn}(t')\,\mathrm{e}^{i\omega_{mn}^{(0)}t'}dt'\,dt. \end{aligned} \tag{1}$$

Selon (1), la probabilité pour que le système demeure dans le $n^{\text{ème}}$ état initial, pour $t\to+\infty$, est donnée au second ordre par :

$$\begin{aligned} W_n^{(2)} &= |a_{nn}(t=\infty)|^2=1+\frac{1}{\hbar^2}\left[\int_{-\infty}^{\infty}V_{nn}(t)dt\right]^2 \\ &- \frac{1}{\hbar^2}\sum_m\int_{-\infty}^{\infty}V_{nm}(t)\exp(i\omega_{nm}^{(0)}t)\int_{-\infty}^{t}V_{mn}(t')\exp(i\omega_{mn}^{(0)}t')dt'\,dt \\ &- \frac{1}{\hbar^2}\sum_m\int_{-\infty}^{\infty}V_{nm}^*(t)\exp(-i\omega_{nm}^{(0)}t)\int_{-\infty}^{t}V_{mn}^*(t')\exp(-i\omega_{mn}^{(0)}t')dt'\,dt \end{aligned} \tag{2}$$

(rappelons que $V_{nn}(t)$ est une quantité réelle). Compte tenu de ce que $\omega_{kn}^{(0)}=-\omega_{nk}^{(0)}$, $V_{kn}^*(t)=V_{nk}(t)$ (en vertu de l'hermiticité de l'opérateur $\widehat{V}$), ainsi que de la propriété de l'intégrale

$$\int_{-\infty}^{\infty}dt\int_{-\infty}^{t}dt'f(t,t')=\int_{-\infty}^{\infty}dt'\int_{t'}^{\infty}dt f(t,t'),$$

l'expression (2) se met sous la forme

$$\begin{aligned} W_n^{(2)} &= 1+\frac{1}{\hbar^2}\left[\int_{-\infty}^{\infty}V_{nn}(t)dt\right]^2-\frac{1}{\hbar^2}\sum_m\left|\int_{-\infty}^{\infty}V_{nm}(t)\,\mathrm{e}^{i\omega_{nm}^{(0)}t}dt\right|^2 \\ &= 1-\frac{1}{\hbar^2}\sum_{m\neq n}\left|\int_{-\infty}^{\infty}V_{nm}(t)\,\mathrm{e}^{i\omega_{nm}^{(0)}t}dt\right|^2=1-\sum_{m\neq n}W_n^{(1)}(n\to m). \end{aligned} \tag{3}$$

La relation (3) exprime manifestement la loi de conservation de la norme des fonctions d'onde d'état du système au second ordre du calcul des perturbations.

8.30. A partir de l'expression de l'amplitude de transition au second ordre du calcul des perturbations, établie dans 8.28 :

$$a_{kn}^{(2)}(t=\infty) = -\frac{1}{\hbar^2}\sum_m \int_{-\infty}^{\infty} V_{km}(t)\,\mathrm{e}^{i\omega_{nm}^{(0)}t}\int_{-\infty}^{t} V_{mn}(t')\,\mathrm{e}^{i\omega_{nm}^{(0)}t'}dt'\,dt,$$

et compte tenu des valeurs des éléments matriciels de la perturbation $\widehat{V} = -ex\mathcal{E}(t)$ de l'oscillateur données dans la solution de 8.24, on voit apparaître, au second ordre, des transitions du $n^{\text{ème}}$ état vers les $(n+2)^{\text{ème}}$ et $(n-2)^{\text{ème}}$ états de l'oscillateur interdites au premier ordre (voir 8.24). Compte tenu des valeurs $V_{kn}(t)$, on obtient sans peine

$$\begin{aligned} a_{n+2,n}^{(2)}(+\infty) &= -\frac{e^2a^2\sqrt{(n+1)(n+2)}}{2\hbar^2}\int_{-\infty}^{\infty}\mathcal{E}(t)\,\mathrm{e}^{i\omega t}\int_{-\infty}^{t}\mathcal{E}(t')\,\mathrm{e}^{i\omega t'}dt'\,dt \\ &= -\frac{1}{4\hbar^2}e^2a^2\sqrt{(n+1)(n+2)}\left[\int_{-\infty}^{\infty}\mathcal{E}(t)\,\mathrm{e}^{-i\omega t}dt\right]^2 \end{aligned}$$

et de façon analogue

$$a_{n-2,n}^{(2)}(+\infty) = -\frac{e^2a^2\sqrt{n(n-1)}}{4\hbar^2}\left[\int_{-\infty}^{\infty}\mathcal{E}(t)\,\mathrm{e}^{-i\omega t}dt\right]^2.$$

En utilisant les notations du problème 8.24 :

$$I(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty}\mathcal{E}(t)\,\mathrm{e}^{i\omega t}dt,$$

on obtient, au second ordre du calcul des perturbations, les probabilités de transitions de l'oscillateur, interdites au premier ordre, sous la forme

$$W^{(2)}(n\to m) = |a_{mn}^{(2)}|^2 = \frac{e^4a^4}{16\hbar^4}\cdot\begin{cases}(n+1)(n+2)|I(\omega)|^4, & m=n+2,\\ n(n-1)|I(-\omega)|^4, & m=n-2.\end{cases}$$

Les valeurs de I pour quelques formes du champ $\mathcal{E}(t)$ sont données dans la solution du problème 8.24 avec, pour ces dernières, $|I| \lesssim \mathcal{E}_0/\omega$. La comparaison des probabilités de transitions ayant lieu aux premier et second ordres du calcul des perturbations donne

$$\frac{W^{(2)}}{W^{(1)}} \sim \frac{e^2a^2|I|^2(n+1)}{\hbar^2} \lesssim \frac{e^2a^2\mathcal{E}_0^2(n+1)}{\hbar^2\omega^2} \ll 1$$

dans les conditions de validité du calcul des perturbations.

8.31. Selon 8.26, au premier ordre les transitions du rotateur ne se produisent que de l'état fondamental ($m=0$) vers le premier état excité ($m'=\pm1$), et pour la loi $\mathcal{E}(t)$ proposée dans l'énoncé, les probabilités de ces transitions sont

$$W^{(1)}(m=0\to m=\pm1) = \frac{d^2\mathcal{E}_0^2\tau^2}{4\hbar^2(1+\omega_0^2\tau^2)}, \qquad \omega_0 = \frac{E_1^{(0)}-E_0^{(0)}}{\hbar} = \frac{\hbar}{2I}. \qquad (1)$$

En utilisant l'expression donnant les amplitudes de transition au second ordre, obtenu dans 8.28, et les valeurs des éléments matriciels de la perturbation données dans 8.26, on trouve sans peine qu'au second ordre du calcul des perturbations apparaissent des transitions du rotateur de l'état fondamental ($m = 0$) vers le deuxième état excité ($m' = \pm 2$) d'amplitude (comparer à la solution du problème précédent)

$$a^{(2)}(0 \to \pm 2) = -\frac{d^2}{4\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{E}(t)\, \mathrm{e}^{3i\omega_0 t} \int_{-\infty}^{t} \mathcal{E}(t')\, \mathrm{e}^{i\omega_0 t'} dt'\, dt. \tag{2}$$

Pour le champ $\mathcal{E}(t)$ donnée dans l'énoncé, l'intégrale de l'expression (2) se calcule sans peine et les probabilités des transitions $(m = 0) \to (m' = \pm 2)$ interdites au premier ordre s'avèrent égales à

$$W^{(2)}(0 \to \pm 2) = |a^{(2)}|^2 = \frac{d^4 \mathcal{E}_0^4 \tau^4}{64\hbar^4 (1 + 4\omega_0^2 \tau^2)(1 + 9\omega_0^2 \tau^2)}. \tag{3}$$

La comparaison des probabilités de transitions (1) et (2) donne

$$\frac{W^{(2)}}{W^{(1)}} \sim \frac{d^2 \mathcal{E}_0^2 \tau^2}{16\hbar^2 (1 + 9\omega_0^2 \tau^2)} \lesssim \frac{d^2 \mathcal{E}_0^2}{150\hbar^2 \omega_0^2} \ll 1$$

en accord avec les conditions de validité du calcul des perturbations.

8.32. Le problème se résout de façon analogue au précédent. Au premier ordre du calcul des perturbations, seul est excité l'état $l = 1$, $m = 0$ avec une probabilité

$$W^{(1)}(0, 0 \to 1, 0) = \frac{d^2 \mathcal{E}_0^2 \tau^2}{3\hbar^2 (1 + \omega_0^2 \tau^2)}, \qquad \omega_0 = \frac{E_1^{(0)} - E_0^{(0)}}{\hbar} = \frac{\hbar}{I}.$$

Au second ordre apparaît une transition vers l'état $l = 2$, $m = 0$ avec une probabilité

$$W^{(2)}(0, 0 \to 2, 0) = \frac{4 d^4 \mathcal{E}_0^4 \tau^4}{45\hbar^4 (1 + 4\omega_0^2 \tau^2)(1 + 9\omega_0^2 \tau^2)}.$$

8.33. Dans l'expression de la fonction d'onde de la forme

$$\Psi(t) = \sum_m a_{kn}(t) \Psi_k^{(0)} \mathrm{e}^{-i\omega_k^{(0)} t}$$

les coefficients $a_{kn}(t)$, pour $t > 0$, valent (voir 8.28, $k \neq n$)

$$\begin{aligned} a_{kn}(t) &\approx a_{kn}^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} (V_0)_{kn} \int_0^t \sin(\omega_0 t) \exp(i\omega_{kn}^{(0)} t) dt \\ &= -\frac{i}{2\hbar} (V_0)_{kn} \left[\frac{1 - \exp[i(\omega_0 + \omega_{kn}^{(0)})t]}{\omega_0 + \omega_{kn}^{(0)}} + \frac{1 - \exp[i(\omega_{kn}^{(0)} - \omega_0)t]}{\omega_0 - \omega_{kn}^{(0)}} \right]. \end{aligned} \tag{1}$$

L'expression (1) montre que la condition de validité du calcul des perturbations $|a_{kn}^{(1)}| \ll 1$, donne

$$|(V_0)_{kn}| \ll \hbar \big| |\omega_0| - |\omega_{kn}^{(0)}| \big| \equiv \hbar \varepsilon_{kn}, \tag{2}$$

qui, lorsque ω_0 est proche d'une des pulsations de transition $\omega_{kn}^{(0)}$ (soit $\varepsilon_{kn} \ll |\omega_{kn}^{(0)}|$), restreint sensiblement l'application du calcul des perturbations. Rappelons que la perturbation $\widehat{V}_0$ peut être considérée comme petite dans le cadre du calcul des perturbations stationnaires si

$$|(V_0)_{kn}| \ll \hbar|\omega_{kn}^{(0)}|. \tag{3}$$

Notons que dans le cas d'une perturbation remplissant les conditions (3) mais ne satisfaisant pas à (2) on peut obtenir la forme approchée de la fonction d'onde (voir, par exemple, [1]) ; dans ce cas (1) traduit la dépendance temporelle de la fonction d'onde pour $t \lesssim T$, où la valeur T est limitée par les inégalités $T\varepsilon_{kn} \ll 1$, $T|(V_0)_{kn}| \ll \hbar$ qui découlent de (1) si l'on exige que $|a_{kn}^{(1)}| \ll 1$.

8.34. Si le $n^{\text{ème}}$ état étudié se rapportait à un niveau non dégénéré, alors dans le cas d'une perturbation satisfaisant à la condition

$$|(V_0)_{kn}| \ll \hbar|\omega_{kn}^{(0)}|, \qquad k \neq n$$

les transitions du système dans l'état n seraient petites et la fonction d'onde $\Psi(t)$ se déterminerait au premier ordre du calcul des perturbations à l'aide des formules classiques (le cas d'une perturbation périodique résonnante discuté dans le problème précédent ne sera pas étudié). La situation change quelque peu dans le cas où le $n_1^{\text{ème}}$ état est un niveau dégénéré : bien que les transitions vers les états d'énergie différente soient faibles, les transitions entre les différents états d'un niveau dégénéré peuvent être importantes.

En représentant de façon approchée la fonction d'onde sous la forme $\Psi(t) \approx [a_1\Psi_1^{(0)} + a_2\Psi_2^{(0)}]e^{-i\omega t}$ (on écrit, pour abréger, a_1 au lieu de a_{n_1}, etc.), on obtient habituellement un système d'équations pour les coefficients $a_i(t)$:

$$\begin{aligned} i\hbar\dot{a}_1 &\approx V_{11}a_1 + V_{12}a_2 = V_0 f(t)a_2, \\ i\hbar\dot{a}_2 &\approx V_{21}a_1 + V_{22}a_2 = V_0 f(t)a_1. \end{aligned} \tag{1}$$

D'après (1) on a :

$$\frac{d}{dt}(a_1 \pm a_2) = \mp\frac{i}{\hbar}V_0 f(t)(a_1 \pm a_2). \tag{2}$$

L'équation (2) se résout sans peine. Compte tenu des conditions initiales $a_1(-\infty) = 1$, $a_2(-\infty) = 0$, on obtient

$$a_1(t) = \cos\xi(t), \qquad a_2(t) = -i\sin\xi(t), \qquad \xi(t) = \frac{V_0}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} f(t')dt'. \tag{3}$$

On voit, à partir des expressions (3), que si la perturbation est de durée T suffisamment longue, de sorte que $|\xi(t)| \lesssim |V_0|T/\hbar \gtrsim 1$, alors les transitions entre les états n_1 et n_2 sont importantes et ceci doit être pris en compte dans le calcul des transitions du

système vers les états ayant une énergie différente de l'état initial (dans les formules classiques du calcul des perturbations non stationnaires, il est admis que $a_{n_1} \approx 1$, et, comme on le voit ici, ceci n'est vrai que pour $|V_{nn'}|T \ll \hbar$).

8.35. Calculons d'abord la probabilité de transition (par unité de temps) d'une particule de l'état du spectre discret vers des états du spectre continu sous l'action d'une perturbation périodique de pulsation ω_0 grâce à la formule classique [1]

$$w = \int dw_\nu = \frac{2\pi}{\hbar} \int |F_{\nu n}|^2 \delta(E_\nu - E_n^{(0)} - \hbar\omega_0) d\nu, \tag{1}$$

où l'opérateur $\widehat{F}$ est défini par

$$\widehat{V} = -xF_0 \sin\omega_0 t \equiv \widehat{F} e^{-i\omega_0 t} + \widehat{F}^\dagger e^{i\omega_0 t},$$

soit $\widehat{F} = -ixF_0/2$.

$$F_{\nu n} = \int \Psi_\nu^* \widehat{F} \Psi_n d\tau \qquad (\tau \equiv x)$$

Ici, la fonction d'onde Ψ_n (n représentant l'ensemble des nombres quantiques définissant les fonctions d'onde du spectre discret) correspond à la fonction d'onde $\Psi_0(x)$ de l'unique état du spectre discret au sein du puits de potentiel en δ ($E_n^{(0)} \equiv E_0$ est l'énergie de cet état) :

$$\Psi_0(x) = \sqrt{\kappa} \exp(-\kappa|x|), \qquad E_0 = -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m}, \qquad \kappa = \frac{m\alpha}{\hbar^2}. \tag{2}$$

On entend par ν (ensemble des grandeurs définissant les fonctions d'onde des états stationnaires du spectre continu de l'hamiltonien non perturbé) un "vecteur" d'onde $k = p/\hbar$ de particules arrivant sur le puits ; de plus, pour Ψ_ν il faut prendre les fonctions d'onde $\Psi_k(x)$ décrivant le processus de pénétration et de réflexion de particules d'impulsion $p = \hbar k$ (la forme de ces fonctions a été discutée dans 2.47) ; en outre, si l'on choisit ces fonctions comme étant normées sur la distribution δ en k, alors $d\nu \equiv dk$; $E_\nu = \hbar^2 k^2/2m$.

Compte tenu de ces remarques, on peut procéder à l'intégration par rapport à ν (c'est-à-dire, par rapport à k) dans l'expression (1)

$$w = \frac{2\pi}{\hbar}(|F_{k_1 0}|^2 + |F_{k_2 0}|^2) \left|\frac{dk}{dE_\nu}\right|, \qquad k_{1,2} = \pm\frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(\hbar\omega_0 + E_0)}. \tag{3}$$

Etant donné que parmi les éléments matriciels de l'expression (3) figurent ceux qui contiennent les fonctions d'onde $\Psi_k(x)$ correspondant aux valeurs k satisfaisant à l'inégalité $|k_{1,2}|^2\hbar^2 \gg m\alpha$ pour laquelle l'énergie potentielle peut être assimilée à une perturbation, on peut choisir pour $\Psi_k(x)$ les fonctions d'onde des particules libres :

$$\Psi_k(x) = (2\pi)^{-1/2} \exp(ikx).$$

Compte tenu de la forme explicite de la fonction d'onde et de la perturbation, on obtient

$$F_{k0} = -\frac{iF_0\sqrt{\kappa}}{2\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} x\exp(-\kappa|x| - ikx)dx = -\frac{\sqrt{2}k\kappa^{3/2}F_0}{\sqrt{\pi}(\kappa^2+k^2)^2}, \tag{4}$$

$$w = \frac{2\hbar F_0^2|E_0|^{3/2}\sqrt{\hbar\omega_0 - |E_0|}}{m(\hbar\omega_0)^4}. \tag{5}$$

La probabilité cherchée W_0 est liée à w par la relation : $W_0(t) = \exp(-wt)$.

8.36. L'expression (5) de la probabilité w obtenue dans le problème précédent pour $\hbar\omega_0 \gg |E_0|$ (et avec l'hypothèse que les fonctions d'onde exactes du spectre continu peuvent être remplacées par les fonctions d'onde des particules libres) est en fait valable pour une pulsation arbitraire du champ extérieur ($\hbar\omega_0 > |E_0|$). En effet, modifions le mode de description des états de la particule au sein du spectre continu : servons-nous des fonctions d'onde $\Psi_{k,\pm}(x)$ constituant les fonctions propres de l'hamiltonien et possédant une parité déterminée (± 1) ($k = \sqrt{2mE/\hbar^2} > 0$ (tandis que dans le problème précédent, $-\infty < k < +\infty$). On n'aura pas besoin de la forme explicite des fonctions d'onde des états pairs, car pour les fonctions correspondantes l'élément matriciel de la perturbation est nul. Les fonctions d'onde des états impairs dans un puits de potentiel δ sont celles des particules libres, c'est-à-dire

$$\Psi_{k,-}(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\sin kx.$$

On entend maintenant par ν un ensemble (k, g), où $g = \pm$; quant à "l'intégration" en ν, elle correspond à l'intégration en k et à la somme par rapport à l'indice g. Compte tenu de ces remarques, on obtient sans peine

$$F_{k+,0}(x) \equiv 0, \qquad F_{k-,0}(x) = \sqrt{2i}F_{k0},$$

où F_{k0} est tiré de l'expression (4) du problème précédent et l'on aboutit à la probabilité w définie par la formule (5).

Pour $\hbar\omega_0 < |E_0|$, la probabilité calculée w est manifestement nulle. Cela ne signifie pas que les transitions de la particule vers des états du spectre continu sont complètement absentes : elles apparaissent aux ordres plus élevés du calcul des perturbations, c'est-à-dire avec une probabilité beaucoup plus faible. C'est ainsi que pour $|E_0|/2 < \hbar\omega_0 < |E_0|$ la probabilité w est différente de zéro dès le second ordre.

8.37. Dans la formule classique de la théorie des transitions au sein d'un spectre continu [1]

$$dw_{\nu_0\nu} = \frac{2\pi}{\hbar}|V_{\nu\nu_0}|^2\delta(E_\nu - E_{\nu_0})d\nu, \qquad \nu \neq \nu_0 \tag{1}$$

on choisit pour ν, ν_0 les "vecteurs" d'onde des particules libres ; les fonctions d'onde correspondantes

$$\Psi_k(x) = \sqrt{\frac{m}{\hbar k}}e^{ikx}, \qquad \Psi_{k'}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ik'x}$$

sont normées sur la densité unitaire du flux des particules "incidentes" d'impulsion $p = \hbar k$ et sur la distribution δ en k' pour les particules diffusées (réfléchies) avec $d\nu \equiv dk'$. Après avoir effectué l'intégration en ν (c'est-à-dire en k') dans (1), on obtient la probabilité de transition sous la forme

$$W(k \to k' = -k) = \frac{m^2}{\hbar^4 k^2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} U(x) \mathrm{e}^{2ikx} dx \right|^2, \tag{2}$$

autrement dit, les transitions ne s'effectuent que vers les états avec $k' = -k$, correspondant aux particules réfléchies, et l'expression (2) représente le coefficient de réflexion des particules R.

En notant par a et U_0 le rayon d'action et la valeur caractéristique du potentiel dans le cas où $ka \lesssim 1$ (particules pas trop rapides), on obtient selon (2) une estimation de $W \sim m^2 U_0^2 a^2/\hbar^4 k^2$. Il faut que $\sqrt{W}$ (qui, en gros, correspond à l'amplitude de transition) soit petit devant l'unité pour que le du calcul des perturbations soit valable, soit :

$$ma|U_0| \ll k\hbar^2.$$

8.38. Compte tenu de l'expression connue des coefficients $a(t)$ dans le développement de la fonction d'onde

$$\Psi(t) = \sum_k a_{kn}(t) \Psi_k^{(0)} \mathrm{e}^{-i\omega_k t}$$

(voir, par exemple 8.28) :

$$\begin{aligned} a_{kn}^{(1)}(t) &= -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{t} V_{kn}(t') \mathrm{e}^{i\omega_{kn} t'} dt' \\ &= -\frac{V_{kn}(t)}{\hbar\omega_{kn}} \mathrm{e}^{i\omega_{kn} t} + \frac{1}{\hbar\omega_{kn}} \int_{-\infty}^{t} \mathrm{e}^{i\omega_{kn} t'} \frac{\partial V_{kn}(t')}{\partial t'} dt', \qquad V_{kn}(-\infty) = 0 \end{aligned}$$

(dans l'expression de $a_{kn}^{(1)}$, l'intégrale est calculée par parties), on obtient pour $t > 0$ les résultats suivants :

a) Compte tenu du fait que $d\eta(t)/dt = \delta(t)$,

$$a_{kn}^{(1)}(t) = \frac{1}{\hbar\omega_{kn}} (V_0)_{kn} - \frac{1}{\hbar\omega_{kn}} (V_0)_{kn} \mathrm{e}^{i\omega_{kn} t}. \tag{1}$$

En utilisant la valeur obtenue dans (1) des coefficients $a^{(1)}$, on peut représenter la fonction d'onde $\Psi(t)$ sous la forme (rappelons que $a_{nn}(t) \approx a_{nn}^{(0)} = 1$)

$$\Psi(t) = \left(\Psi_n^{(0)} - \sum_{k \neq n} \frac{(V_0)_{kn}}{\hbar\omega_{kn}} \Psi_k^{(0)} \right) \mathrm{e}^{-i\omega_n t} + \sum_{k \neq n} \frac{(V_0)_{kn}}{\hbar\omega_{kn}} \Psi_k^{(0)} \mathrm{e}^{-i\omega_k t} \ ;$$

ainsi la probabilité de transition $w^{(1)}(n \to k)$ est définie par le carré du module du premier terme de l'expression (1), soit

$$w^{(1)}(n \to k) = \frac{1}{\hbar^2 \omega_{kn}^2} |(V_0)_{kn}|^2, \qquad k \neq n, \tag{2}$$

et le second terme de (1) définit la variation de la fonction d'onde du $n^{\text{ème}}$ état stationnaire du système sous l'action de la perturbation $\widehat{V}_0$ pour $t > 0$.

b)

$$w^{(1)}(n \to k) = \frac{1}{\hbar^2}|(W_0)_{kn}|^2, \qquad k \neq n. \tag{3}$$

Si la perturbation est introduite durant le temps τ, les formules (2) et (3) définissent les probabilités de transitions pour lesquelles $|\omega_{kn}|\tau \ll 1$.

8.39. Notons par $\widehat{H}_0$ et $\widehat{H}_f = \widehat{H}_0 + \widehat{V}_0$ les hamiltoniens du système pour $t < 0$ et $t > 0$ respectivement (ils sont indépendant du temps !) ; Ψ_n et $\tilde{\Psi}_n$ sont les fonctions propres de ces hamiltoniens. La fonction d'onde du système pour $t < 0$ est de la forme $\Psi(t) = \Psi_n \exp(-iE_n t/\hbar)$; elle a la même forme juste après l'introduction de la perturbation $\widehat{V}_0$ (non forcément petite), car sous l'action d'une perturbation $\widehat{V}_0$, la fonction d'onde n'a pas le temps de varier durant le petit intervalle de temps de son introduction (comparer au résultat du problème suivant), comme cela se montre à partir de l'équation de Schrödinger. Ensuite, la dépendance temporelle de la fonction d'onde pour $t > 0$ est définie par l'hamiltonien $\widehat{H}_f$ et prend la forme

$$\Psi(t) = \sum_k a_{kn}\tilde{\Psi}_k e^{-i\tilde{E}_k t/\hbar}, \qquad a_{kn} = \int \tilde{\Psi}_k^* \Psi_n d\tau.$$

Les coefficients a_{kn} dans ce développement donnent l'amplitude des transitions étudiées, de sorte que la probabilité de transition vaut $w(n \to k) = |a_{kn}|^2$. Si la perturbation $\widehat{V}_0$ de l'hamiltonien est petite (pour appliquer du calcul des perturbations), et compte tenu de la forme approchée de la fonction d'onde $\tilde{\Psi}_k$ donnée, par exemple, dans l'énoncé du problème 8.8, on peut directement utiliser la formule (2) du problème précédent.

8.40. Pour étudier la variation de la fonction d'onde sous l'action d'une perturbation ayant la forme d'une distribution $\delta(t)$, représentons cette dernière comme la limite pour $\tau \to 0$ d'une perturbation $\widehat{V}(t,\tau) = \widehat{W}_0 f(t/\tau)/\tau$, où la fonction $f(y)$ a les propriétés

$$f(y) = 0 \text{ pour } |y| \geq 1 \ ; \qquad \int_{-1}^{1} f(y)dy = 1.$$

L'équation de Schrödinger prend la forme (on néglige le terme $\widehat{H}_0$ dans l'hamiltonien vu que l'on ne s'intéresse qu'à la variation de la fonction d'onde durant un temps infiniment petit 2τ ($\tau \to 0$))

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \frac{1}{\tau}\widehat{W}_0 f(t/\tau)\Psi, \qquad |t| < \tau,$$

dont la solution détermine, pour $\tau \to 0$, la variation de la fonction d'onde durant

l'intervalle de temps infiniment petit de la perturbation considérée :

$$\Psi(t) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\widehat{W}_0 \int_{-1}^{t/\tau} f(y)dy\right] \Psi(-\tau),$$
$$\Psi(t=0+) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\widehat{W}_0\right) \Psi(t=0-). \tag{1}$$

Etant donné que la fonction d'onde du système concerné est pour $t < 0$ de la forme $\Psi = \Psi_n^{(0)} \exp(-iE_n t/\hbar)$, après l'action de la distribution δ elle devient, selon (1), égale à

$$\Psi(t=0+) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\widehat{W}_0\right) \Psi_n^{(0)},$$

et les probabilités d'excitation des divers états stationnaires pour $t > 0$ s'expriment à l'aide de la formule

$$w(n \to k) = \left|\int \Psi_k^{(0)*} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\widehat{W}_0\right) \Psi_n^{(0)} d\tau\right|^2. \tag{2}$$

Dans le cas d'une petite perturbation, $|(W_0)_{kn}| \ll h$, en développant dans la formule (2) l'exponentielle en série et en se limitant aux deux premiers termes, on aboutit au résultat du problème 8.38 b).

L'action d'une perturbation de la forme $V(x,t) = -xP_0\delta(t)$, sur une particule classique, consiste en un transfert instantané à cette dernière de l'impulsion $P_0 = \int F(t)dt$. En vertu de (1), ceci reste valable en mécanique quantique. En effet, comparons la fonction d'onde de la particule en représentation **p** juste avant et après l'action de la perturbation :

$$\Psi(t=0-) = \int a(p)\Psi_p(x)dp,$$
$$\Psi(t=0+) = \int b(p)\Psi_p(x)dp = e^{iP_0x/\hbar} \int a(p)\Psi_p(x)dp \equiv$$
$$\equiv \int a(p)\Psi_{p+P_0}(x)dp = \int a(p-P_0)\Psi_p(x)dp,$$

c'est-à-dire $b(p) = a(p - P_0)$.

8.41. On obtient la solution du problème grâce à la formule donnée dans 8.39 :

$$w(0 \to k) = \left|\int \widetilde{\Psi}_k^* \Psi_0 d\tau\right|^2 =$$
$$= \frac{4}{ab}\left|\int_0^a \sin\frac{\pi(k+1)x}{b} \sin\frac{\pi x}{a} dx\right|^2 = \frac{4ab^3}{\pi^2[a^2(k+1)^2 - b^2]^2} \sin^2\frac{\pi(k+1)a}{b}.$$

La condition de validité est $\tau\hbar\pi^2(k+1)^2/ma^2 \ll 1$.

8.42. La fonction d'onde de l'unique état lié au sein d'un puits peu profond et son énergie (de même que les fonctions d'onde des états stationnaires du spectre continu) sont presque identiques à celles obtenues dans le cas d'un puits de potentiel δ : $U(x) = -\alpha\delta(x)$ avec $\alpha = aU_0$ (voir 2.8 et 2.11) et il est commode de partir de la solution exacte obtenue pour ce potentiel. La variation de la largeur du puits est alors équivalente à la substitution du paramètre $\tilde{\alpha} = \alpha b/a$ à α.

La probabilité que la particule quitte le puits est égale à $w = 1 - w_0$, où w_0 est la probabilité d'y rester ; cette dernière s'obtient sans peine à partir de la formule générale donnée dans 8.39 si l'on utilise la forme de la fonction d'onde du spectre discret au sein d'un puits de potentiel δ (voir 2.11) :

$$w_0 \equiv w(0 \to 0) = \left| \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-(\kappa+\tilde{\kappa})|x|} dx \right|^2 \kappa\tilde{\kappa} = \frac{4\kappa\tilde{\kappa}}{(\kappa+\tilde{\kappa})^2} = \frac{4ab}{(a+b)^2}.$$

Ensuite, cherchons l'énergie moyenne de la particule pour $t > 0$. Pour cela déterminons la valeur moyenne de l'hamiltonien $\widehat{\tilde{H}} = \hat{p}^2/2m - \tilde{\alpha}\delta(x)$ dans l'état décrit par la fonction d'onde $\Psi_0(x)$:

$$\overline{E}(t>0) = \int \Psi_0^* \widehat{\tilde{H}} \Psi_0 dx = \overline{\tilde{H}_0} - \overline{(\alpha - \tilde{\alpha})\delta(x)} = E_0 - \frac{\alpha - \tilde{\alpha}}{\alpha} 2E_0 = \left(\frac{2b}{a} - 1\right) E_0. \quad (1)$$

L'énergie moyenne $\overline{\varepsilon}$ des particules s'échappant du puits s'obtient sans peine à partir de l'expression de $\overline{E}(t > 0)$ suivante

$$\overline{E}(t>0) = w_0 E_0(b) + (1 - w_0)\overline{\varepsilon}, \qquad E_0(b) = \frac{b^2}{a^2} E_0. \quad (2)$$

A partir de (1) et (2), on obtient

$$\overline{\varepsilon} = (1 + 2b/a)|E_0| = (1 + 2b/a)\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}. \quad (3)$$

Si $b = 0$, alors pour $t > 0$ la particule devient libre et son énergie moyenne, égale d'après (3) à $|E_0|$, coïncide avec l'énergie cinétique moyenne de l'état initial (pour $t < 0$), comme il fallait s'y attendre.

8.43. Le problème est absolument analogue au précédent. La variation de la profondeur du puits d'un facteur n entraîne les mêmes conséquences que la variation d'un facteur n de sa largeur. Donc la solution du problème s'obtient directement à partir de la solution du problème précédent par la substitution de n à la grandeur b/a.

8.44. L'expression générale donnant les probabilités de transition au cours d'une perturbation brusque, obtenues dans la solution du problème 8.39, se modifie de la façon suivante pour les transitions vers les états du spectre continu :

$$dw_{n\nu} = \left| \int \tilde{\Psi}_\nu^* \Psi_n d\tau \right|^2 d\nu.$$

Ici, on entend par ν l'impulsion p de la particule, et le rôle de $\tilde{\Psi}_\nu$ est joué par les fonctions propres d'impulsion

$$\Psi_p(x) = (2\pi\hbar)^{-1/2}\exp(ipx/\hbar).$$

Compte tenu de la forme de la fonction d'onde de l'état lié dans le puits de potentiel δ (voir 2.11), on obtient sans peine, dans l'approximation adoptée, la probabilité pour que la particule quitte le puits avec une impulsion dans l'intervalle $(p, p+dp)$, donnée par l'expression

$$dw(p) = \frac{2\kappa^3\hbar^3 dp}{\pi(p^2+\kappa^2\hbar^2)^2}, \qquad \kappa = \frac{m\alpha}{\hbar^2}. \tag{1}$$

On a ici $\int dw(p) = 1$, c'est-à-dire que, dans l'approximation considérée, la probabilité pour que la particule demeure liée par le puits est négligeable. D'après (1), la grandeur caractéristique de l'impulsion des particules s'échappant du puits est de l'ordre de $p \sim \kappa\hbar \sim m\alpha/\hbar$. La condition de validité de l'expression (1) est que ces particules puissent être considérées comme libres, c'est-à-dire de pouvoir négliger le potentiel $U(x) = -\tilde{\alpha}\delta(x)$. Selon 8.22 (ou 8.37) il faut pour cela que l'inégalité $m\tilde{\alpha} \ll p\hbar$ soit remplie, c'est-à-dire $\tilde{\alpha} \ll \alpha$ (dans le cas du potentiel en forme de la distribution δ, $aU_0 = \tilde{\alpha}$). Comme on le voit à partir du résultat obtenu dans le problème précédent, la probabilité pour que la particule demeure liée au puits est petite.

8.45. Pour calculer la probabilité cherchée, passons au système de coordonnées K' qui se déplace avec le puits, $x' = x - Vt$. La fonction d'onde de la particule immédiatement avant et après le début du mouvement du puits a dans le système de coordonnées initial la forme (voir 2.11)

$$\Psi_0(x) = \sqrt{\kappa}\exp(-\kappa|x|), \qquad \kappa = m\alpha/\hbar^2. \tag{1}$$

La fonction d'onde d'un tel état de la particule dans le système de coordonnées K' est liée à la fonction d'onde (1) de la façon suivante :

$$\tilde{\Psi}_0(x') = \exp\left(-\frac{imVx'}{\hbar}\right)\Psi_0(x') \tag{2}$$

(la relation (2) exprime le fait que la transformation de la fonction d'onde se réduit à la substitution de $p - mV$ à l'impulsion p. Sa démonstration formelle s'appuie sur le résultat du problème 7.26 avec $t = t' = 0$).

Etant donné que la fonction d'onde de l'état lié de la particule dans le système K' est de la forme (1) avec substitution de x' à x, la probabilité cherchée vaut

$$w = \left|\int \Psi_0^*(x')\tilde{\Psi}_0(x')dx'\right|^2 = \kappa^2\left|\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left[-2\kappa|x| - \frac{imVx}{\hbar}\right]dx\right|^2 = \frac{1}{\left[1+\frac{V^2\hbar^2}{4\alpha^2}\right]^2}.$$

8.46. Compte tenu des fonctions propres de l'oscillateur (voir 2.6) on obtient en accord avec la formule générale des transitions établie dans 8.39

$$\begin{aligned} w(0 \to n) &= \left| \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n^{\text{osc}*}(x - e\mathcal{E}/k)\Psi_0^{\text{osc}}(x)dx \right|^2 = \\ &= \frac{1}{2^n \pi n!} \left| \int_{-\infty}^{\infty} H_n\left(\frac{y}{a}\right) \exp\left[-\frac{y^2}{2a^2} - \frac{(y+x_0)^2}{2a^2}\right] \frac{dy}{a} \right|^2, \qquad (1) \\ y &\equiv x - e\mathcal{E}/k \equiv x - x_0. \end{aligned}$$

L'intégrale dans l'expression (1) a été calculée dans 7.18. On trouve :

$$w(0 \to n) = \frac{1}{n!}\left(\frac{x_0^2}{2a^2}\right)^n \exp\left(-\frac{x_0^2}{2a^2}\right), \qquad \left(x_0 = \frac{e\mathcal{E}}{k}\right).$$

8.47. Le problème se résout de façon analogue au problème 8.45. Compte tenu dans l'expression

$$w(0 \to n) = \left| \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n^{\text{osc}*}(x) \exp\left(-\frac{imVx}{\hbar}\right) \Psi_0^{\text{osc}}(x)dx \right|^2 \qquad (1)$$

de la forme explicite de la fonction propre de l'oscillateur et de la valeur de l'intégrale calculée dans 7.18, on obtient

$$w(0 \to n) = \frac{1}{n!}\left(\frac{m^2V^2a^2}{2\hbar^2}\right)^n \exp\left(-\frac{m^2V^2a^2}{2\hbar^2}\right).$$

8.48. Représentons la fonction d'onde $\Psi(q,t)$ sous la forme

$$\Psi(q,t) = \sum_n C_n(t)\Psi_n(q,t) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_0^t E_n(t')dt'\right), \qquad (1)$$

où $\Psi_n(q,t)$, $E_n(t)$ sont les fonctions propres et les valeurs propres de l'hamiltonien "instantané", c'est-à-dire

$$\widehat{H}(\widehat{p}, q, \lambda(t))\Psi_n(q,t) = E_n(t)\Psi_n(q,t), \qquad (2)$$

et les coefficients $C_n(t)$ sont les fonctions d'onde du système dans la représentation demandée. En portant dans l'équation de Schrödinger non stationnaire la fonction d'onde (1), multiplions à gauche les deux membres de l'équation par $\Psi_k^*(t)$ et intégrons par rapport aux coordonnées du système q. Compte tenu de l'orthogonalité des fonctions d'onde $\Psi_n(t)$, on obtient sans peine l'équation de Schrödinger dans la représentation demandée :

$$\dot{C}_k(t) = -\sum_n C_n(t) \exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_0^t (E_k - E_n)dt'\right] \int \Psi_k^* \dot{\Psi}_n dq. \qquad (3)$$

Il est commode de transformer cette équation de la façon suivante dans le cas où le spectre de l'opérateur $\widehat{H}$ n'est pas dégénéré. Choisissons d'abord les $\Psi_n(t)$ réelles (ce

qui est toujours possible en l'absence du champ magnétique, de sorte que l'hamiltonien soit égal à $\widehat{H} = \widehat{p}^2/2m + U(q, \lambda(t)))$. Alors

$$\int \Psi_n^* \dot{\Psi}_n dq = \frac{d}{2dt} \int \Psi_n^2 dq = 0.$$

Ensuite, dérivons la relation (2) par rapport à t, multiplions les deux membres de l'égalité par $\Psi_k^* = \Psi_k$ avec $k \neq n$ et intégrons par rapport aux coordonnées du système. On obtient finalement

$$\int \Psi_k^* \dot{\Psi}_n dq = -\frac{1}{E_k - E_n} \int \Psi_k \left(\frac{\partial \widehat{H}}{\partial t} \right) \Psi_n dq \qquad (k \neq n),$$

et l'équation (3) prend la forme

$$\dot{C}_k(t) = \sum_{n \neq k} \frac{1}{\hbar \omega_{kn}(t)} C_n(t) \left(\frac{\partial \widehat{H}}{\partial t} \right)_{kn} \exp \left[i \int_0^t \omega_{kn}(t') dt' \right], \tag{4}$$

où $\hbar\omega_{kn} = E_k - E_n$ et où $(\partial \widehat{H}/\partial t)_{kn}$ sont les éléments matriciels de l'opérateur $\partial \widehat{H}/\partial t$.

8.49. Si la dérivée $\partial \widehat{H}/\partial t$ est suffisamment petite (voir plus bas), on déduit alors de l'équation (4) du problème précédent que $\dot{C}_k \approx 0$, soit que $C_k \approx C_{kn}^{(0)} = \text{const} = \delta_{kn}$ en vertu des conditions du problème. A l'ordre suivant du calcul des perturbations adiabatique pour $k \neq n$, on obtient

$$\dot{C}_{kn}^{(1)}(t) = \frac{1}{\hbar \omega_{kn}(t)} \left(\frac{\partial \widehat{H}}{\partial t} \right)_{kn} \exp \left(i \int_0^t \omega_{kn}(t') dt' \right). \tag{1}$$

En intégrant (1) avec la condition initiale donnée, on obtient

$$C_{kn}^{(1)}(t) = \frac{1}{\hbar} \int_0^t \frac{1}{\omega_{kn}(t')} \left(\frac{\partial \widehat{H}}{\partial t'} \right)_{kn} \exp \left(i \int_0^{t'} \omega_{kn}(t'') dt'' \right) dt' \qquad (k \neq n). \tag{2}$$

La condition nécessaire pour la validité de (2) est l'inégalité $|C_{kn}^{(1)}| \ll 1$ $(k \neq n)$. L'estimation de $C_{kn}^{(1)}$ d'après (2) donne

$$|C_{kn}^{(1)}| \sim \left| \frac{\partial \widehat{H}}{\partial t} \frac{1}{\omega_{kn}} \right| \frac{1}{|E_k - E_n|}. \tag{1}$$

A droite, on a le rapport entre la variation de l'hamiltonien pendant une durée de l'ordre de la période de Bohr ω_{kn}^{-1} et la différence entre les énergies des niveaux correspondants. La petitesse de ce rapport est la condition de validité du calcul des perturbations dans l'approximation adiabatique.

Il est utile de se souvenir que, bien que la variation de l'hamiltonien soit lente (au sens mentionné plus haut), ce dernier peut se modifier fortement durant un temps suffisamment long (et même n'avoir rien de commun avec sa forme initiale). Toutefois,

à un instant t quelconque, le système est, avec une probabilité dominante, dans l'état $\Psi_n(t)$. Ce résultat peut être formulé comme une conservation du numéro (dans l'ordre croissant des énergies) de l'état quantique, constituant ainsi la généralisation de la loi de conservation de l'énergie pour un hamiltonien indépendant du temps lors d'une variation adiabatique.

Le résultat obtenu sur la conservation (approchée) du numéro de l'état quantique constitue l'analogue quantique de la conservation de l'invariant adiabatique

$$I = \frac{1}{2\pi} \oint p dq$$

en mécanique classique (voir [5]). Cette analogie est naturelle, en particulier, dans le cas quasi classique (voir chapitre 9 dans le volume II) quand on envisage la règle de quantification de Bohr-Sommerfeld.

8.50. Le problème se résout grâce aux résultats généraux obtenus dans les deux problèmes précédents.

Les fonctions propres et les valeurs propres de l'hamiltonien "instantané"

$$\widehat{H} = \frac{\widehat{p}^2}{2m} + \frac{kx^2}{2} - ex\mathcal{E}(t)$$

ont été obtenues dans 2.6 :

$$\Psi_n(x,t) = \Psi_n^{\text{osc}*}\left(x - \frac{e\mathcal{E}(t)}{k}\right), \qquad E_n(t) = \hbar\omega(n+1/2) - \frac{e^2\mathcal{E}^2(t)}{2k}.$$

L'opérateur $\partial\widehat{H}/\partial t$ est égal à $-ex\dot{\mathcal{E}}(t)$ et ses éléments matriciels $(\partial\widehat{H}/\partial t)_{k0}$ ne sont différents de zéro (pour $k \neq 0$) que pour $k = 1$ (voir 8.3) : $(\partial\widehat{H}/\partial t)_{10} = -ea\dot{\mathcal{E}}/\sqrt{2}$. Compte tenu de ces remarques, la formule générale (2) du problème précédent des transitions adiabatiques prend la forme

$$C_{10}^{(1)}(t = +\infty) = -\frac{ea}{\sqrt{2}\hbar\omega} e^{i\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial\mathcal{E}}{\partial t} e^{i\omega t} dt \tag{1}$$

(ici, on a substitué $t'^{(\prime\prime)} = -\infty$ aux limites inférieures d'intégration à $t'^{(\prime\prime)} = 0$, vu que, d'après les conditions du problème, l'état initial de l'oscillateur est donné pour $t \to -\infty$. Pour la même raison, la borne supérieure d'intégration est prise égale à $+\infty$).

Le facteur de phase $\exp(i\infty)$ est apparu du fait de l'intégration

$$i\int_{-\infty}^{t} \omega_{10} dt = i\omega \int_{-\infty}^{t} dt = i\omega t + i\omega\infty$$

De façon formelle, son apparition est liée au fait qu'on a pris $\Psi(t = -\infty)$ pour Ψ_0^{osc}, la fonction d'onde de l'état initial de l'oscillateur. Dans ce cas, la phase de la fonction d'onde à $t \approx 0$ devient infinie (car $\Psi(t) \sim \exp(-iEt/\hbar)$).

Le carré du module de l'amplitude de transition (1) définit la probabilité de l'unique transition permise au premier ordre du calcul des perturbations adiabatiques de l'oscillateur $W(0 \to 1)$. Si pour $t \to +\infty$ le champ électrique est absent, alors, en intégrant par parties l'intégrale dans (1), on peut écrire la probabilité de transition sous la forme

$$W(0 \to 1) = \frac{e^2 a^2}{2\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{E}(t) \exp(i\omega t) dt \right|^2,$$

qui est analogue à celle obtenue auparavant (voir 8.24) dans le cadre du calcul des perturbations classiques non stationnaires (cependant ces expressions formellement identiques ont des conditions de validité différentes[4]).

Les expressions finales des probabilités d'excitations sont ($\omega\tau \gg 1$) :

a) $W(0 \to 1) = \dfrac{2e^2 a^2 \mathcal{E}_0^2}{\hbar^2 \omega^4 \tau^2}$;

b) $W(0 \to 1) = \dfrac{e^2 a^2 \mathcal{E}_0^2}{2\hbar^2 \omega^4 \tau^2}$.

8.51. La condition $d\mathcal{E}_0 I^2 \ll \tau\hbar^3$ garantit la validité de l'approximation adiabatique, de sorte que, selon 8.49, la fonction d'onde du rotateur à l'instant t est la fonction d'onde de l'état fondamental du rotateur en présence du champ $\mathcal{E}(t)$. En particulier, pour $t \to \infty$ cette fonction d'onde a la forme (voir 8.19)

$$\widetilde{\Psi}_0(\varphi) \approx (\sqrt{\pi}\varphi_0)^{-1/2} \exp(-\varphi^2/2\varphi_0^2), \qquad \varphi_0 = (\hbar^2/Id\mathcal{E}_0)^{1/4} \ll 1.$$

Les probabilités des différentes valeurs de la projection du moment sont données par les expressions

$$\begin{aligned} \tilde{C}_m &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} \mathrm{e}^{-im\varphi} \widetilde{\Psi}_0(\varphi) d\varphi \\ &\approx (2\pi\sqrt{\pi}\varphi_0)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-im\varphi - \frac{\varphi^2}{2\varphi_0^2}} d\varphi = \sqrt{\frac{\varphi_0}{\sqrt{\pi}}} \mathrm{e}^{-m^2\varphi_0^2/2}, \\ w(m) &= |\tilde{C}_m|^2 = \frac{\varphi_0}{\sqrt{\pi}} \mathrm{e}^{-m^2\varphi_0^2} \end{aligned}$$

(on a substitué $(-\infty, +\infty)$ à l'intervalle d'intégration $(-\pi, \pi)$ en φ, vu que la fonction d'onde $\widetilde{\Psi}_0(\varphi)$ pour $|\varphi| \gtrsim 1$ est négligeable).

8.52. Dans le système considéré, la parité se conserve manifestement. Aussi est-il commode d'analyser séparément la dépendance temporelle des composantes paire et impaire de la fonction d'onde. En notant $\Psi_0(x)$ la fonction d'onde de l'état fondamental de la particule dans le cas d'un seul puits $U(x) = -\alpha\delta(x)$ (voir 2.11) et en

4 On saisit aussitot que dans le problème l'égalité du résultat de l'étude adiabatique (pour laquelle les conditions de validité sont $\tau \gg \frac{1}{\omega}$, $\frac{e\mathcal{E}_0 a}{\hbar\omega^2\tau} \ll 1$) avec celui du calcul des perturbations (dont la condition de validité est $\frac{e\mathcal{E}_0 a}{\hbar\omega} \ll 1$) est due à l'action spécifique du champ homogène sur l'oscillateur qui, en fait, se réduit à un déplacement du "point de suspension".

supposant que, pour $t \to -\infty$, la particule est liée par le puits droit, écrivons la fonction d'onde de l'état initial sous la forme

$$\Psi(t=-\infty) = \frac{1}{\sqrt{2}}\{\Psi^{(+)} + \Psi^{(-)}\},$$
$$\Psi^{(\pm)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\Psi_0\left(x - \frac{L(-\infty)}{2}\right) \pm \Psi_0\left(x + \frac{L(-\infty)}{2}\right)\right\}. \tag{1}$$

Si la distance entre les puits est infinie $L(-\infty) = \infty$, les composantes paires comme impaires de la fonction d'onde (1) décrivent une particule se trouvant dans un état lié par le potentiel des deux puits et d'énergie égale à celle de l'état fondamental au sein du potentiel d'un puits (le niveau est doublement dégénéré).

Quelle que soit la loi de "rapprochement" des puits, on peut affirmer que quand les puits convergent en un seul, la composante impaire de la fonction d'onde décrit la particule non liée, car dans un puits de potentiel δ, il n'y a qu'un état pair du spectre discret. Quant à la dépendance temporelle de la fonction d'onde paire et la probabilité pour que la particule reste dans l'état lié, elles dépendent essentiellement de la nature du rapprochement des puits. Mais si le rapprochement des puits est de nature adiabatique (voir 8.49) le résultat est alors immédiat : la particule dans l'état pair reste dans l'état fondamental. Comme dans l'état initial la probabilité de l'état pair de la particule vaut 1/2, la probabilité que la particule reste dans l'état lié au cours d'un rapprochement lent des puits est aussi égale à 1/2. La condition de validité du résultat obtenu est : $|\dot{L}| \ll \alpha\hbar$. De fait, cette condition n'est nécessaire que quand les puits sont à une distance suffisamment petite $L \sim \hbar^2/m\alpha$ ($\hbar^2/m\alpha$ est la distance caractéristique à partir de laquelle la particule se localise dans l'un des puits de potentiel δ). A des distances plus grandes, il n'y a plus de limitation aussi stricte sur la vitesse de déplacement des puits car, dans ce cas, la particule qui est localisée près d'un de puits, n'est pas "sensible" à la présence de l'autre puits. Avec un mouvement du puits à une vitesse arbitraire (mais constante) aucune transition n'a lieu, en accord avec le principe de relativité. De fait pour $L \gg \hbar^2/m\alpha$, il suffit d'éviter des accélérations trop grandes $\ddot{L}$ (on invite le lecteur à établir lui-même les restrictions correspondantes).

Pour conclure, soulignons encore une fois qu'en résolvant le problème on ne s'est servi que de l'approximation adiabatique pour l'étude de la partie paire de la fonction d'onde. Quant à la partie impaire de la fonction d'onde, il est impossible d'étudier sa dépendance temporelle à l'aide de l'approximation adiabatique lorsque les puits se rapprochent à la distance L_0 pour laquelle le niveau impair du spectre discret disparaît (il fusionne avec le spectre continu ; $L_0 = \hbar^2/m\alpha$).

8.53. Notons par $\Psi_{n_1}(x,\xi)$, $E_{n_1}(\xi)$ les fonctions propres et les valeurs propres de l'opérateur $\widehat{\tilde{H}} = \widehat{H}_1(x) + V(x,\xi)$ pour des valeurs fixées ξ des coordonnées du sous-système "lent", c'est-à-dire

$$[\widehat{H}_1 + V(x,\xi)]\Psi_{n_1}(x,\xi) = E_{n_1}(\xi)\Psi_{n_1}(x,\xi). \tag{1}$$

Dans l'approximation adiabatique, les fonctions propres exactes de l'hamiltonien complet du système $\widehat{H}$ s'expriment de façon approchée sous la forme

$$\Psi(x,\xi) \approx \Psi_{n_1 n_2}(x,\xi) = \Phi_{n_1 n_2}(\xi)\Psi_{n_1}(x,\xi),$$

où la fonction d'onde $\Phi_{n_1 n_2}$ et les valeurs approchées $E_{n_1 n_2}$ des niveaux d'énergie du système se déterminent à partir de l'équation de Schrödinger

$$[\widehat{H}_1 + V(x,\xi) + \widehat{H}_2]\Phi_{n_1 n_2}(\xi)\Psi_{n_1}(x,\xi) \approx E_{n_1 n_2}\Phi_{n_1 n_2}(\xi)\Psi_{n_1}(x,\xi). \tag{2}$$

Effectuons dans cette équation les transformations suivantes : compte tenu de la relation (1), multiplions les deux membres de l'équation (2) à gauche par $\Psi^*_{n_1}(x,\xi)$, intégrons par rapport à la coordonnée x du sous-système "rapide" et négligeons l'action de l'opérateur $\widehat{H}_2(\xi)$ sur la variable ξ dans la fonction d'onde $\Psi_{n_1}(x,\xi)$ (c'est-à-dire, que nous posons $\widehat{H}_2\Phi\Psi \approx \Psi\widehat{H}_2\Phi$). Finalement, pour déterminer la fonction d'onde $\Phi_{n_1 n_2}$ et les niveaux d'énergie $E_{n_1 n_2}$ on obtient l'équation de Schrödinger

$$(\widehat{H}_2 + E_{n_1}(\xi))\Phi_{n_1 n_2}(\xi) = E_{n_1 n_2}\Phi_{n_1 n_2}(\xi), \tag{3}$$

qui ne comprend que les coordonnées du sous-système "lent" ; quant à son interaction avec le sous-système "rapide", elle se traduit par une énergie "potentielle" effective $E_{n_1}(\xi)$.

8.54. Le problème se résout à l'aide de l'approximation adiabatique dont les formules sont données dans le problème précédent. Le rôle du sous-système "rapide" est joué par le mouvement de la particule selon l'axe x, le rôle du sous-système "lent", par le mouvement selon l'axe y (l'étude est possible grâce à la condition $a \ll b$). En utilisant les notations du problème précédent (avec la seule substitution de y à ξ) et en choisissant $\widehat{H}_1 = \widehat{p}_x^2/2m$, $\widehat{H}_2 = \widehat{p}_y^2/2m$, $V(x,y) = U(x,y)$, on obtient aisément

$$\Psi_{n_1}(x,y) = \sqrt{\frac{2}{a(y)}}\sin\frac{\pi(n_1+1)(x+a(y)/2)}{a(y)}, \qquad E_{n_1}(y) = \frac{\hbar^2\pi^2(n_1+1)^2}{2ma(y)^2}$$

(le mouvement de la particule suivant l'axe x, pour y fixé, est le mouvement de la particule dans un puits de profondeur infinie et de largeur $a(y) = \sqrt{1-y^2/b^2}$).

Le mouvement de la particule le long de l'axe y, selon l'équation (2) du problème précédent, est défini par le "potentiel"

$$V(y) = \begin{cases} E_{n_1}(y) = \dfrac{\hbar^2\pi^2(n_1+1)^2}{8ma^2(1-y^2/b^2)}, & |y| < b, \\ \infty, & |y| > b. \end{cases}$$

Avec une telle énergie potentielle, on ne peut écrire analytiquement une solution exacte de l'équation de Schrödinger. Toutefois, on peut noter que pour les états de faible énergie, les fonctions d'onde des états stationnaires se localisent dans ce potentiel dans le domaine $|y| \ll b$, or dans ce domaine le potentiel peut être développé en série

$$V(y) \approx \frac{\hbar^2\pi^2(n_1+1)^2}{8ma^2} + \frac{\hbar^2\pi^2(n_1+1)^2}{8ma^2b^2}y^2.$$

Le calcul de $\Phi_{n_1 n_2}(y)$ et de $E_{n_1 n_2}$ se ramène alors au problème d'un l'oscillateur harmonique.

Les expressions finales des premiers niveaux d'énergie du système considéré et des fonctions propres approchées ont la forme

$$E_{n_1 n_2} = \frac{\hbar^2 \pi^2 (n_1+1)^2}{8ma^2} + \frac{\hbar^2 \pi (n_1+1)}{2mab}(n_2+1/2), \qquad n_{1,2} = 0, 1, \ldots,$$

$$\Psi_{n_1 n_2}(x,y) = (2^{n_2}\sqrt{\pi} y_0 n_2!)^{-1/2} \exp\left(-\frac{y^2}{2y_0^2}\right) H_{n_2}(y/y_0)\Psi_{n_1}(x,y),$$

$$\left(y_0 = \sqrt{\frac{2ab}{\pi(n_1+1)}}, \qquad y_0^2(n_2+1/2) \ll b^2\right).$$

8.55. Le problème se résout de façon analogue au problème précédent. Le rôle du sous-système "rapide" est joué par le mouvement de la particule suivant l'axe z, le rôle du sous-système "lent" par le mouvement dans le plan x, y. Les fonctions d'onde et les niveaux d'énergie du sous-système "rapide" pour des coordonnées x, y fixées du sous-système "lent" ont la forme

$$\Psi_{n_1}(z\ ; x, y) = \sqrt{\frac{2}{b(\rho)}} \sin \frac{\pi(n_1+1)(z+b(\rho)/2)}{b(\rho)}, \qquad E_{n_1}(\rho) = \frac{\hbar^2\pi^2(n_1+1)^2}{2mb^2(\rho)},$$

où $b(\rho) = 2b\sqrt{1-(x^2+y^2)/a^2} = 2b\sqrt{1-\rho^2/a^2}$.

Le mouvement du sous-système lent (après le calcul de la moyenne sur le mouvement du sous-système rapide) se caractérise par l'énergie potentielle effective

$$U(\rho) = \begin{cases} E_{n_1}(\rho) & \rho < a, \\ \infty, & \rho > a. \end{cases}$$

En développant $U(\rho)$ en série au voisinage du point du minimum du potentiel ($\rho = 0$) :

$$U(\rho) \approx \frac{\hbar^2\pi^2(n_1+1)^2}{8mb^2} + \frac{\hbar^2\pi^2(n_1+1)^2}{8ma^2b^2}\rho^2. \tag{1}$$

on remarque que le calcul des fonctions d'onde du sous-système lent et des niveaux d'énergie du système se ramène au problème d'oscillateur plan (voir 4.5). Les niveaux d'énergie de la particule dans l'approximation adiabatique s'expriment sous la forme

$$E_{n_1 N} = \frac{\hbar^2\pi^2(n_1+1)^2}{8mb^2} + \frac{\hbar^2\pi(n_1+1)}{2mab}(N+1), \qquad (n_1, N = 0, 1, \ldots),$$
$$((N+1) \ll (n_1+1)a/b).$$

(N est le nombre quantique principal de l'oscillateur plan ; la condition sur la valeur N vient de la condition de localisation de la fonction d'onde du sous-système lent à des distances $\rho \ll a$, pour lesquelles le développement (1) est valable).

8.56. Le sous-système rapide est constitué par le mouvement de la particule dans le plan x, y, le sous-système lent, par le mouvement suivant l'axe z. Les fonctions d'onde du sous-système rapide et les niveaux d'énergie qui leur sont associés pour une valeur fixée de la coordonnée z (voir problème 4.8 sur la particule dans un puits bidimensionnel de profondeur infinie) : $a(z) = a\sqrt{1 - z^2/b^2}$ ont la forme

$$\Psi_{n_1 m}(\rho, \varphi) = C e^{im\varphi} J_m\left(\frac{\alpha_{n_1+1,m}\rho}{a(z)}\right), \qquad E_{n_1 m} = \frac{\hbar^2 \alpha^2_{n_1+1,m}}{2\mu a(z)^2}.$$

En développant l'énergie potentielle effective du sous-système lent en série au voisinage du point du minimum (de la même façon qu'on l'a fait pour la résolution des deux problèmes précédents), on aboutit à l'expression

$$E_{n_1 m n_2} = \frac{\hbar^2 \alpha^2_{n_1+1,m}}{2\mu a^2} + \frac{\hbar^2 \alpha_{n_1+1,m}}{\mu a b}(n_2 + 1), \qquad n_{1,2} = 0, 1, \ldots,$$

pour les premiers niveaux d'énergie de la particule dans l'approximation adiabatique.

8.57. Le sous-système rapide est un oscillateur caractérisé par la coordonnée x. Avec une valeur fixée de y, coordonnée du sous-système lent, les fonctions d'onde et les niveaux d'énergie du sous-système rapide ont la forme ($\omega = \sqrt{k/m}$)

$$\Psi_{n_1}(x, y) \equiv \Psi^{\text{osc}}_{n_1}(x + \alpha y/k), \qquad E_{n_1} = \hbar\omega(n_1 + 1/2) - \alpha^2 y^2/2k.$$

Les fonctions d'onde et les niveaux d'énergie du sous-système lent se déterminent à partir de l'équation (3) du problème 8.53

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{d^2}{dy^2} + \hbar\omega(n_1 + 1/2) + \frac{k - \alpha^2/k}{2}y^2\right)\Phi_{n_1 n_2}(y) = E_{n_1 n_2}\Phi_{n_1 n_2}(y),$$

et manifestement

$$E_{n_1 n_2} = \hbar\omega(n_1 + 1/2) + \hbar\omega\sqrt{\frac{m}{M}\left(1 - \frac{\alpha^2}{k^2}\right)}(n_2 + 1/2). \tag{1}$$

Pour obtenir la solution exacte du problème, effectuons le changement de variable $z = y\sqrt{M/m}$. Dans ce cas, l'hamiltonien du système prend la forme

$$\widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + \frac{kx^2}{2} + \frac{km}{2M}z^2 + \alpha\sqrt{\frac{m}{M}}xz.$$

Ensuite, passons aux nouvelles variables $\tilde{x}$, $\tilde{z}$ grâce aux formules

$$x = \tilde{x}\cos\varphi_0 + \tilde{z}\sin\varphi_0, \qquad z = \tilde{z}\cos\varphi_0 - \tilde{x}\sin\varphi_0,$$
$$\tan 2\varphi_0 = \frac{-2\alpha}{k}\sqrt{m/M}(1 - m/M).$$

Dans cette transformation constituant une rotation dans le plan $\tilde{x}$, $\tilde{z}$ (de sorte que $\Delta = \tilde{\Delta}$), l'hamiltonien prend la forme

$$\widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\tilde{\Delta} + \frac{k_1}{2}\tilde{x}^2 + \frac{k_2}{2}\tilde{z}^2,$$
$$k_{1,2} = \frac{k(1 + m/M)}{2} \pm \frac{k}{2}\sqrt{\left(1 - \frac{m}{M}\right)^2 + \frac{4m\alpha^2}{Mk^2}}$$

(autrement dit, les coordonnées $\tilde{x}$, $\tilde{z}$ sont normales) ; les valeurs propres et donc les niveaux d'énergie du système, sont manifestement égaux à

$$E_{n_1n_2} = \frac{\hbar\omega}{\sqrt{2}}\left[\sqrt{1+\frac{m}{M}+\sqrt{\left(1-\frac{m}{M}\right)^2+\frac{4m\alpha^2}{Mk^2}}}(n_1+1/2)\right.$$
$$\left.+\sqrt{1+\frac{m}{M}-\sqrt{\left(1-\frac{m}{M}\right)^2+\frac{4m\alpha^2}{Mk^2}}}(n_2+1/2)\right] \qquad (2)$$

(notons que la méthode la plus simple, pour déterminer les pulsations propres est de calculer les valeurs propres du tenseur k_{in} présent dans l'énergie potentielle de l'oscillateur $U = \frac{1}{2}k_{in}x_ix_n$; les valeurs propres du tenseur k_{in} s'obtiennent aisément à partir des conditions d'invariance de la trace et du déterminant de la matrice k_{in} par rapport à la rotation du système de coordonnées). De l'expression (2), on obtient sans peine le résultat (1) de l'approximation adiabatique.

8.58. Dans la résolution du problème on utilise l'approximation adiabatique (voir 8.53). Le rôle du sous-système rapide est joué par la particule légère (sa coordonnée est x_1), celui du sous-système lent par la particule lourde. Les niveaux d'énergie et les fonctions d'onde du sous-système rapide pour une coordonnée fixée x_2 du sous-système lent sont de la forme (on admet que la particule lourde se trouve à gauche de la particule légère ; la fonction d'onde est donc nulle pour $x_1 > a$ et $x_1 < x_2$)

$$\Psi_{n_1}(x_1,x_2) = \sqrt{\frac{2}{a-x_2}}\sin\frac{\pi(n_1+1)(x_1-x_2)}{a-x_2}, \qquad E_{n_1}(x_2) = \frac{\hbar^2\pi^2(n_1+1)^2}{2m(a-x_2)^2}$$

L'énergie $E_{n_1}(x_2)$ joue le rôle d'énergie potentielle effective du sous-système lent pour $0 < x_2 < a$; pour $x_2 < 0$ et $x_2 > a$ l'énergie potentielle devient infinie. Pour obtenir les niveaux d'énergie du système, qui correspondent à des états pas trop excités du sous-système lent, développons l'énergie potentielle effective pour $x_2 > 0$ en série au voisinage du point $x_2 = 0$ correspondant au minimum de $E_{n_1}(x_2)$:

$$U(x_2) = \begin{cases} \dfrac{\hbar^2\pi^2(n_1+1)^2}{2ma^2} + \dfrac{\hbar^2\pi^2(n_1+1)^2}{ma^3}x_2, & x_2 > 0, \\ \infty, & x_2 < 0 \end{cases}$$

(comparer à la solution du problème 8.54). Dans ce cas, à partir de l'équation (2) du problème 8.53, qui définit les fonctions d'onde $\Phi_{n_1n_2}$ du sous-système lent et les niveaux d'énergie du système, on obtient aisément les niveaux cherchés dans l'approximation adiabatique (compte tenu du résultat du problème 2.15) :

$$E_{n_1n_2} = \frac{\hbar^2\pi^2(n_1+1)^2}{2ma^2} + \left(\frac{\hbar^6\pi^4(n_1+1)^4}{2m^2Ma^6}\right)^{1/3}\alpha_{n_2+1}, \qquad n_{1,2} = 0,1,\ldots \qquad (1)$$

On laisse au soin du lecteur de démontrer que la condition de validité du résultat (1) a la forme

$$\alpha_{n_2+1} \ll \pi(n_1+1)^{2/3}(M/m)^{1/3}$$

(rappelons que α_n augmente avec n ; voir 2.15).

APPENDICE

OSCILLATEUR HARMONIQUE LINÉAIRE

La résolution de l'équation de Schrödinger pour un oscillateur linéaire

$$\widehat{H}\Psi_n \equiv -\frac{\hbar^2}{2m}\Psi_n''(x) + \frac{kx^2}{2}\Psi_n(x) = E_n\Psi_n(x)$$

donne les niveaux d'énergie $E_n = \hbar\omega(n+1/2)$, $n = 0, 1, 2, \ldots$, $\omega = \sqrt{k/m}$, et les fonctions d'onde normées correspondantes des états stationnaires

$$\Psi_n^{\text{osc}} = \left(\frac{1}{\pi a^2}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \mathrm{e}^{-x^2/2a^2} H_n\left(\frac{x}{a}\right),$$

où $a = \sqrt{\hbar/m\omega}$, $H_n(z)$ sont les polynômes d'Hermite.

Donnons les premiers polynômes d'Hermite :

$$H_0(z) = 1, \qquad H_1(z) = 2z, \qquad H_2(z) = 4z^2 - 2.$$

HARMONIQUES SPHÉRIQUES

Les harmoniques sphériques $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ sont les fonctions propres normées des opérateurs du moment orbital carré de la particule $\widehat{\mathbf{l}}^2$ et de sa projection $\widehat{l}_z$ sur l'axe z :

$$\widehat{\mathbf{l}}^2 Y_{lm}(\theta,\varphi) \equiv -\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial^2\varphi}\right] Y_{lm} = l(l+1)Y_{lm},$$

$$\widehat{l}_z Y_{lm} \equiv -i\frac{\partial}{\partial\varphi}Y_{lm} = mY_{lm},$$

et ont la forme[1]

$$Y_{lm} = (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} i^l \sqrt{\frac{(2l+1)}{4\pi}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_l^{|m|}(\cos\theta)\mathrm{e}^{im\varphi}$$

$$= (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} i^l \sqrt{\frac{(2l+1)}{4\pi}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} \sin^{|m|}\theta \frac{d^{|m|}P_l(\cos\theta)}{d(\cos\theta)^{|m|}}\mathrm{e}^{im\varphi},$$

1 La phase dans la définition des fonctions sphériques est la même que dans [1].

où P_l et $P_l^{|m|}$ sont respectivement les polynômes de Legendre et les fonctions de Legendre associées.

Quelques premières harmoniques sphériques sont :

$$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \qquad Y_{10} = i\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta, \qquad Y_{20} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(1 - 3\cos^2\theta),$$

$$Y_{1,\pm 1} = \mp i\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{\pm i\varphi},$$

$$Y_{2,\pm 1} = \pm\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\cos\theta\sin\theta e^{\pm i\varphi}, \qquad Y_{2,\pm 2} = -\sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\theta e^{\pm 2i\varphi}.$$

FONCTIONS DE BESSEL

La fonction de Bessel est la solution régulière en $z = 0$ de l'équation de Bessel

$$z^2 w'' + zw' + (z^2 - \nu^2)w = 0.$$

Elle est donnée par la série

$$J_\nu(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k (z/2)^{2k+\nu}}{\Gamma(k+\nu+1)\Gamma(k+1)}.$$

La deuxième solution indépendante (singulière en $z = 0$) de l'équation de Bessel est donnée par la fonction de Neumann $N_\nu(z)$ définie comme

$$N_\nu(z) = \frac{J_\nu(z)\cos\pi\nu - J_{-\nu}(z)}{\sin\pi\nu}.$$

Pour $\nu = n$,

$$N_n(z) = \lim_{\nu\to n} N_\nu(z).$$

On utilise également les fonctions d'Hankel $H_\nu^{(1)}(z)$ et $H_\nu^{(2)}(z)$ définies comme

$$H_\nu^{(1,2)}(z) \equiv J_\nu(z) \pm iN_\nu(z).$$

Pour l'argument z imaginaire, on introduit les fonctions de Bessel modifiées et les fonctions de MacDonald :

$$I_\nu(z) \equiv i^{-\nu} J_\nu(iz),$$
$$K_\nu(z) \equiv \frac{\pi}{2} i^{\nu+1} H_\nu^{(1)}(iz).$$

Pour $z \to 0$, ces fonctions ont le comportement

$$J_\nu(z) \approx \frac{1}{\Gamma(\nu+1)}\left(\frac{z}{2}\right)^\nu,$$

$$N_\nu(z) \approx -\frac{\Gamma(\nu)}{\pi}\left(\frac{2}{z}\right)^\nu \text{ pour } \nu > 0, \qquad N_0(z) \approx \frac{2}{\pi}\ln\frac{\gamma z}{2},$$

$$K_n(z) \approx \frac{(n-1)!}{2}\left(\frac{2}{z}\right)^n \text{ pour } n = 1, 2, \ldots, \qquad K_0(z) \approx \ln\frac{2}{\gamma z}$$

ici $\gamma = \mathrm{e}^C = 1,781\ldots$ est la constante d'Euler, $C = 0,5772$.

Pour les grandes valeurs de z, ces fonctions ont le comportement asymptotique suivant :

$$J_\nu(z) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \cos(z - \nu\frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{4}) + O\left(\frac{1}{z^{3/2}}\right),$$

$$N_\nu(z) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \sin(z - \nu\frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{4}) + O\left(\frac{1}{z^{3/2}}\right),$$

$$H_\nu^{(1,2)}(z) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi z}}\, \mathrm{e}^{\pm i(z - \nu\frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{4})} \left[1 + O\left(\frac{1}{z}\right)\right],$$

$$I_\nu(z) \approx \sqrt{\frac{1}{2\pi z}}\, \mathrm{e}^{z} \left[1 + O\left(\frac{1}{z}\right)\right],$$

$$K_\nu(z) \approx \sqrt{\frac{\pi}{2z}}\, \mathrm{e}^{-z} \left[1 + O\left(\frac{1}{z}\right)\right].$$

FONCTION HYPERGÉOMÉTRIQUE ET FONCTION HYPERGÉOMÉTRIQUE DÉGÉNÉRÉE

La fonction hypergéométrique est définie dans le cercle $|z| < 1$ par la série

$$F(\alpha, \beta, \gamma, z) = 1 + \frac{\alpha\beta}{\gamma}\frac{z}{1!} + \frac{\alpha(\alpha+1)\beta(\beta+1)}{\gamma(\gamma+1)}\frac{z^2}{2!} + \ldots$$

et, pour $|z| > 1$, elle s'obtient par prolongement analytique de cette série.

La fonction hypergéométrique est une solution de l'équation

$$z(1-z)u'' + [\gamma - (\alpha+\beta+1)z]u' - \alpha\beta u = 0.$$

Les paramètres α et β sont arbitraires et $\gamma \neq 0, -1, -2, \ldots$ La deuxième solution indépendante de cette équation différentielle est donnée par la fonction

$$z^{1-\gamma} F(\beta - \gamma + 1, \alpha - \gamma + 1, 2 - \gamma, z)$$

qui possède une singularité en $z = 0$.

Si α (ou β) est un entier négatif (ou nul), $\alpha = -n$, la fonction hypergéométrique se réduit à un polynôme de degré n et peut se mettre sous la forme

$$F(-n, \beta, \gamma, z) = \frac{z^{1-\gamma}(1-z)^{\gamma+n-\beta}}{\gamma(\gamma+1)\ldots(\gamma+n-1)} \frac{d^n}{dz^n}[z^{\gamma+n-\beta}(1-z)^{\beta-\gamma}].$$

La fonction hypergéométrique dégénérée est définie par la série

$$F(\alpha, \gamma, z) = 1 + \frac{\alpha}{\gamma}\frac{z}{1!} + \frac{\alpha(\alpha+1)}{\gamma(\gamma+1)}\frac{z^2}{2!} + \ldots$$

convergent quel que soit z fini. Le paramètre α est arbitraire et $\gamma \neq 0, -1, -2, \ldots$

La fonction hypergéométrique dégénérée est une solution de l'équation

$$zu'' + (\gamma - z)u' - \alpha u = 0$$

dont la deuxième solution indépendante est donnée par la fonction

$$z^{1-\gamma} F(\alpha - \gamma + 1, 2 - \gamma, z)$$

qui possède une singularité pour $z = 0$.

Si α est un entier négatif (ou nul), $\alpha = -n$, la fonction hypergéométrique dégénérée se réduit à un polynôme de degré n et peut se mettre sous la forme

$$F(-n, \gamma, z) = \frac{1}{\gamma(\gamma+1)\ldots(\gamma+n-1)} z^{1-\gamma} \mathrm{e}^{z} \frac{d^n}{dz^n} (\mathrm{e}^{-z} z^{\gamma+n-1}).$$

PARTICULE DANS LE CHAMP COULOMBIEN (ATOME HYDROGÉNOÏDE)

Les fonctions d'onde des états liés dans le champ coulombien d'attraction $U = -\alpha/r$ avec $\alpha > 0$ peuvent être représentées sous la forme $\Psi_{n_r lm} = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$ (n_r étant le nombre quantique radial, $n = n_r + l + 1$ le nombre quantique principal), où la partie radiale de la fonction d'onde est donnée par l'expression ($a = \hbar^2/m\alpha$)

$$R_{nl} = -\frac{2}{n^2 a^{3/2}} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{[(n+l)!]^2}} \mathrm{e}^{-r/na} \left(\frac{2r}{na}\right)^l L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na}\right),$$

où $L_n^k(z)$ sont les polynômes de Laguerre généralisés. L'énergie de cet état est égale à $E_n = -\dfrac{m\alpha^2}{2\hbar^2 n^2}$. Les parties radiales de la fonction d'onde des premiers états sont

$$R_{10} = \tfrac{2}{a^{3/2}} \mathrm{e}^{-r/a} \qquad \text{(état fondamental } 1s\text{)},$$

$$R_{20} = \tfrac{1}{\sqrt{2a^3}} \left(1 - \tfrac{r}{2a}\right) \mathrm{e}^{-r/2a} \qquad \text{(état } 2s\text{)},$$

$$R_{21} = \tfrac{1}{2\sqrt{6a^3}} \tfrac{r}{a} \mathrm{e}^{-r/2a} \qquad \text{(état } 2p\text{)}.$$

BIBLIOGRAPHIE

1) L.D. Landau, E.M. Lifchitz, Mécanique quantique, Mir, Moscou, 1975

2) A.S. Davydov, Quantum mechanics, Pergamon Press, Oxford, 1969

3) Cl. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Lalöe, Mécanique quantique, Hermann, Paris, 1973

4) A. Messiah, Mécanique quantique, Tomes 1 et 2, Dunod, Paris, 1995

5) L.D. Landau, E.M. Lifchitz, Mécanique, Mir, Moscou, 1982

6) L.D. Landau, E.M. Lifchitz, Théorie des champs, Mir, Moscou, 1989

7) L.D. Landau, E.M. Lifchitz, Physique statistique, Mir, Moscou, 1967

8) A.I. Akhiezer, V.B. Berestetskii, Qaunrum Electrodynamics, John Wiley and sons, New York, 1965

9) M. Preston, Physics of the Nucleus, London 1962

10) S. Flügge, Practical Quantum Mechanics, Springer-Verlag, Berlin, 1971

11) I.S. Gradshtein, I.M. Ryzhik, Table of Integrals, Series, and Products, Academic Press, Boston, San Diego, New York, London, Sydney, Tokyo, Toronto, 1994

12) H. Batemen, A. Erdélyi, Higher Transcendental Functions, Mc Graw-Hill Book Company, New York, 1953

TABLE DES MATIÈRES

Avant-propos 5

Symboles et constantes 7

Chapitre 1. Opérateurs en mécanique quantique 9

1.1. Notions générales de la théorie des opérateurs linéaires 9

1.2. Fonctions propres, valeurs propres, moyennes 11

1.3. Eléments de théorie des représentations. Transformations unitaires 15

Chapitre 2. Mouvement unidimensionnel 19

2.1. Etats stationnaires du spectre discret 19

2.2. Etats du spectre continu. Pénétration à travers des barrières de potentiel 27

Chapitre 3. Moment cinétique 31

3.1. Propriétés générales du moment cinétique 31

3.2. Moment $L = 1$ 33

3.3. Addition des moments 35

3.4. Formalisme tensoriel en théorie du moment cinétique 39

Chapitre 4. Mouvement dans un champ central 41

4.1. Systèmes à symétrie axiale 41

4.2. Etats du spectre discret dans des champs centraux 43

Chapitre 5. Spin 51

5.1. Formalisme du spin $s = 1/2$ 51

5.2. Etats orbitaux de la particule avec spin 55

Chapitre 6. Mouvement dans un champ magnétique 59

6.1. Particule chargée sans spin dans un champ magnétique 59

6.2. Particule avec spin dans un champ magnétique 62

6.3. Champ magnétique créé par les mouvements orbitaux et par le spin des particules 63

Chapitre 7. Evolution des états en fonction du temps 65

7.1. Particules sans spin 65

7.2. Particules douées de spin 70

Chapitre 8. Calcul des perturbations. Perturbations soudaines et adiabatiques 73

8.1. Calcul des perturbations stationnaires 73

8.2. Calcul des perturbations non stationnaires. Transitions dans le spectre continu 76

8.3. Perturbations soudaines 79

8.4. Approximation adiabatique 80

8.4.1. Approximation adiabatique dans les problèmes non stationnaires 80

8.4.2. Approximation adiabatique dans les problèmes stationnaires 81

Solutions 83

Chapitre 1. Opérateurs en mécanique quantique 85

Chapitre 2. Mouvement unidimensionnel 105

Chapitre 3. Moment cinétique 143

Chapitre 4. Mouvement dans un champ central 171

Chapitre 5. Spin 203

Chapitre 6. Mouvement dans un champ magnétique 221

Chapitre 7. Variation d'état en fonction du temps 243

Chapitre 8. Calcul des perturbations. Perturbations soudaines et adiabatiques 273

Appendice 313

Bibliographie 317

Imprimé en France, JOUVE, 11, bd de Sébastopol, 75001 PARIS - FRANCE
N° 314584K. Dépôt légal : Octobre 2002