

## Devoir à la maison

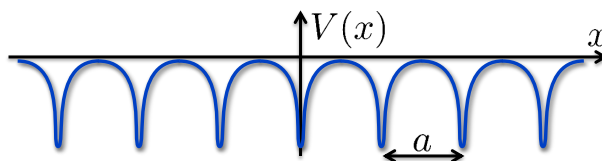
*2 points par question : le total est donc sur 18*

# La méthode $\vec{k} \cdot \vec{p}$

On s'intéresse à un modèle de cristal unidimensionnel. On écrit l'hamiltonien sous la forme

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + V(\hat{x})$$

où  $V(x)$  est un potentiel supposé pair et périodique de période  $a$  :  $V(-x) = V(x)$  et  $V(x-a) = V(x)$ .



On rappelle que le théorème de Bloch nous permet de rechercher les fonctions propres de l'hamiltonien sous la forme

$$\psi(x) = e^{ikx} u(x)$$

où  $k \in [-\pi/a, \pi/a[$  et  $u(x-a) = u(x)$ .

1. Montrer que  $|u\rangle$  obéit à l'équation  $\hat{H}|u\rangle = E|u\rangle$ , où  $E$  est l'énergie considérée et

$$\hat{H} = \frac{(\hat{p}_x + \hbar k \hat{I})^2}{2m} + V(\hat{x}),$$

$\hat{I}$  étant l'opérateur identité.

On a

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} e^{ikx} u(x) = e^{ikx} \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial u}{\partial x} + \hbar k u(x) \right)$$

soit

$$\hat{p}_x e^{ikx} u(x) = e^{ikx} (\hat{p}_x + \hbar k \hat{I}) u(x)$$

Il vient alors

$$\hat{p}_x^2 e^{ikx} u(x) = e^{ikx} (\hat{p}_x + \hbar k \hat{I})^2 u(x)$$

d'où l'on déduit l'expression demandée.

2. On rappelle que la périodicité de la fonction  $u(x)$  et de sa dérivée nous permet d'affirmer que, pour une valeur donnée de  $k$ , les valeurs possibles de l'énergie sont quantifiées et non dégénérées. On écrira donc

$$\hat{H}|u_{n,k}\rangle = E_n(k)|u_{n,k}\rangle$$

où l'indice entier  $n$  repère les différentes valeurs de l'énergie, classées par ordre croissant. Les états propres  $|u_{n,0}\rangle$  en centre de zone, *i.e.* pour  $k = 0$ , seront simplement notées  $|u_n\rangle$ . Montrer que les fonctions  $u_n(x)$  sont nécessairement paires ou impaires.

En écrivant  $\hat{H}|u_{n,k}\rangle = E_n(k)|u_{n,k}\rangle$  pour  $k = 0$ , on obtient  $\hat{H}_0|u_n\rangle = E_n(0)|u_n\rangle$ . Or l'hamiltonien  $\hat{H}_0$  est invariant par parité car  $V(-x) = V(x)$ . Donc  $[\hat{H}_0, \hat{\Pi}_x] = 0$ . Comme les valeurs propres de  $\hat{H}_0$  sont non dégénérées (pour les fonctions périodiques), on en déduit que les fonctions propres sont nécessairement paires ou impaires. On peut rappeler la démonstration, déjà vue dans les questionnaires en ligne :

$$\hat{H}_0 \hat{\Pi}_x |u_n\rangle = \hat{\Pi}_x \hat{H}_0 |u_n\rangle = E_n(0) \hat{\Pi}_x |u_n\rangle$$

Donc  $\hat{\Pi}_x|u_n\rangle$  appartient au sous-espace propre de  $\hat{H}_0$  pour la valeur propre  $E_n(0)$ . Comme ce sous-espace est de dimension 1 et est engendré par  $|u_n\rangle$ , on en déduit  $\hat{\Pi}_x|u_n\rangle = \lambda|u_n\rangle$ . Ceci signifie que  $|u_n\rangle$  est vecteur propre de  $\hat{\Pi}_x$  et est donc nécessairement paire ou impaire.

**3.** Les fonctions  $u_{n,k}(x)$  pour  $k \neq 0$  sont-elles nécessairement paires ou impaires ?

La réponse est négative. En effet, l'hamiltonien  $\hat{H}$  n'est pas invariant par parité en raison du terme supplémentaire en  $k\hat{p}_x$ . Or  $\hat{\Pi}_x\hat{p}_x = -\hat{p}_x\hat{\Pi}_x$ . La fonction  $u_{n,k}(x)$  n'a donc aucune raison d'être paire ou impaire pour  $k \neq 0$ . On peut néanmoins remarquer que la valeur propre  $E_n(k)$  de l'hamiltonien  $\hat{H}_0$  dans  $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$  est dégénérée deux fois et qu'on peut construire des fonctions paires et impaires à partir de  $\psi_{n,k}(x)$  et  $\psi_{n,-k}(x)$ .

**4.** Montrer que l'on peut écrire  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W}$ , où l'on explicitera l'opérateur  $\hat{W}$ . En développant le terme en  $(\hat{p}_x + \hbar k \hat{I})^2$  dans l'hamiltonien, on obtient

$$\hat{W} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \hat{I} + \frac{\hbar k}{m} \hat{p}_x.$$

Outre le terme trivial proportionnel à l'identité, on remarque un terme supplémentaire en  $k\hat{p}_x$ , qui s'écrirait  $\vec{k} \cdot \vec{\hat{p}}$  pour un modèle à 3 dimensions, d'où le nom de méthode  $\vec{k} \cdot \vec{\hat{p}}$ .

**5.** Dans toute la suite du devoir, on considère une bande d'énergie d'indice  $n$  donné et on s'intéresse à la variation de la fonction  $E_n(k)$  au voisinage de  $k = 0$  (centre de zone). Pour  $k$  suffisamment petit, on traitera l'effet de l'opérateur  $\hat{W}$  à l'aide de la méthode des perturbations, le système non perturbé étant décrit par l'hamiltonien  $\hat{H}_0$  ( $\hat{H}_0|u_n\rangle = E_n(0)|u_n\rangle$ ). Déterminer la correction obtenue au premier ordre de la méthode des perturbations et commenter le résultat obtenu. A l'ordre 1, il suffit de calculer

$$\delta E_n^{(1)}(k) = \langle u_n | \hat{W} | u_n \rangle = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{\hbar k}{m} \langle u_n | \hat{p}_x | u_n \rangle = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

car  $u_n(x)$  étant soit paire soit impaire, le terme  $\langle u_n | \hat{p}_x | u_n \rangle$  s'écrit comme l'intégrale du produit d'une fonction paire par une fonction impaire et est donc nul. A noter que le résultat obtenu correspond à la contribution exacte du terme en  $k^2$  dans  $\hat{W}$  puisqu'il est proportionnel à l'identité. On peut ajouter que l'on retrouve ainsi le résultat pour un électron libre ( $V = 0$ ).

**6.** Calculer la correction au second ordre de la méthode des perturbations.

L'application de la méthode des perturbations au second ordre en  $\hat{W}$  nous donne

$$\delta E_n^{(2)}(k) = \sum_{\ell \neq n} \frac{|\langle u_\ell | \hat{W} | u_n \rangle|^2}{E_n(0) - E_\ell(0)} = \frac{\hbar^2 k^2}{m^2} \sum_{\ell \neq n} \frac{|\langle u_\ell | \hat{p}_x | u_n \rangle|^2}{E_n(0) - E_\ell(0)}$$

**7.** En effectuant un développement au second ordre en  $k$ , montrer que l'on peut écrire

$$E_n(k) \approx E_n + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$$

où l'on donnera l'expression de  $m^*$ , grandeur appelée masse effective pour la bande  $n$ .

A l'aide des résultats obtenus aux questions précédentes, on obtient

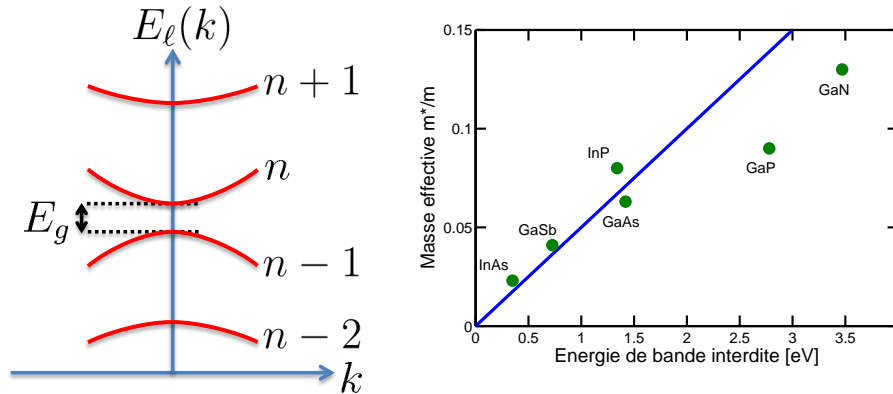
$$E_n(k) \approx E_n + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \left( 1 - \frac{2}{m} \sum_{\ell \neq n} \frac{|\langle u_\ell | \hat{p}_x | u_n \rangle|^2}{E_\ell(0) - E_n(0)} \right) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$$

avec

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{m} - \frac{2}{m^2} \sum_{\ell \neq n} \frac{|\langle u_\ell | \hat{p}_x | u_n \rangle|^2}{E_\ell(0) - E_n(0)}$$

**8.** On s'intéresse maintenant au cas d'un matériau semiconducteur, la bande  $n$  étant la bande dite de conduction, qui est par définition la première bande vide après remplissage des bandes

d'énergie à température nulle. La bande immédiatement inférieure est alors appelée bande de valence. L'énergie de bande interdite, ou gap, du semiconducteur s'écrit alors  $E_g = E_n(0) - E_{n-1}(0)$ . On admet en outre que l'élément de matrice de  $\hat{p}_x$  entre bande de valence et bande de conduction, noté  $P = |\langle u_{n-1} | \hat{p}_x | u_n \rangle|$ , prend approximativement la même valeur dans la plupart des semiconducteurs, avec  $2P^2/m \approx 20$  eV. En comparant différents semiconducteurs, on observe que la masse effective est grossièrement proportionnelle à l'énergie de bande interdite  $E_g$ , comme le montre la figure ci-dessous qui représente le rapport  $m^*/m$  en fonction de  $E_g$ . Quelles hypothèses faut-il faire pour retrouver ce résultat qualitatif à l'aide des résultats obtenus à la question précédente ?



Il faut faire deux hypothèses : la première consiste à négliger le premier terme (en  $1/m$ ) dans l'expression de la masse effective. Cette hypothèse est justifiée par le fait que les semiconducteurs considérés ont tous des masses effectives inférieures à 0.14, ce qui signifie que le terme en  $1/m$  est au moins six fois plus petit que la somme sur les autres bandes et peut donc être négligé. La deuxième hypothèse consiste à négliger la contribution des bandes  $\ell$  autres que la bande de valence dans la somme, par exemple en raison de l'écart en énergie plus important ( $|E_\ell - E_n(0)| \gg E_g$  pour  $\ell \neq (n-1)$ ). A l'aide de ces deux hypothèses, on obtient

$$\frac{1}{m^*} \approx \frac{2}{m^2} \frac{|\langle u_{n-1} | \hat{p}_x | u_n \rangle|^2}{E_{n-1}(0) - E_n(0)} \approx \frac{2P^2}{m^2 E_g}$$

ou encore

$$m^* \approx \frac{m^2}{2P^2} E_g.$$

On retrouve bien le fait que la masse effective est proportionnelle au gap.

### 9. Obtient-on un accord quantitatif ?

L'équation précédente s'écrit

$$\frac{m^*}{m} = \frac{m E_g}{2P^2} = \frac{E_g}{20 \text{ eV}}$$

La droite représentée sur la figure correspond exactement à cette expression, puisqu'on a  $m^*/m = 0.1$  pour  $E_g = 2$  eV.

Le modèle marche donc assez bien pour décrire la masse effective de la bande de conduction. Il se trouve qu'il marche beaucoup moins bien pour la bande de valence, qui est dégénérée en raison de la nature tridimensionnelle du cristal.

**Supplément :** Supposons maintenant que le potentiel atomique est très profond et les électrons sont très liés aux atomes (extension du modèle de benzène PHY311). Nous pouvons bâtir une combinaison d'orbitales (atomiques) telles que la fonction d'onde soit centrée sur les sites  $R_j = ja$  ( $a$  est le pas du réseau) :  $\psi(x) = \sum_j c_j \phi(x - R_j)$ . Le Ket associé s'écrit  $|\psi\rangle = \sum_j c_j |R_j\rangle$  (formellement,  $|R_j\rangle = |\phi(x - R_j)\rangle$  et cette décomposition suppose que les Kets  $|R_j\rangle$  sont orthogonaux).

1. En utilisant le théorème de Bloch (Amphi02), montrer que  $c_j = \frac{1}{\sqrt{N}}e^{-ijak}$  et  $N$  est une constante de normalisation (nombre de sites).

Nous pouvons partir de l'opérateur translation  $\hat{T}$  (Amphi02)

$$\hat{T}(na)\psi(x) = (\hat{T}(a))^n\psi(x) = e^{-inka}\psi(x) = \psi(x - na)$$

Cela implique donc  $\exp(-inka) \sum_j c_j |R_j\rangle = \sum_j c_j |R_j - na\rangle$ . Nous pouvons appliquer le Bra  $\langle R_m|$  à cette égalité, cela donne

$$\exp(-inka)c_m = c_{m+n}$$

Cette égalité est satisfaite pour  $c_j = \frac{1}{\sqrt{N}}e^{-ijak}$ . Le préfacteur peut être vu comme un coefficient de normalisation.

2. Un électron sur un site donné  $R_j = ja$  a une énergie locale  $E_0$ . Par analogie avec le problème de benzène (PHY311), un électron peut 'sauter' virtuellement dans un puits voisin séparé d'une distance  $a$  avec une amplitude  $t$  (terme tunnel). L'Hamiltonien prend alors la forme :

$$\hat{H} = E_0 \sum_j |R_j\rangle\langle R_j| - t \sum_j (|R_{j+1}\rangle\langle R_j| + |R_{j-1}\rangle\langle R_j|).$$

Pour un vecteur d'onde  $k$  donné, montrer que  $\hat{H}|\psi\rangle = E(k)|\psi\rangle$  donne :

$$E(k) = E_0 - 2t \cos(ka).$$

*Ces aspects seront étudiés plus en détail dans les cours de physique statistique et matière condensée.*

Regardons de plus près  $\hat{H}|\Psi_k\rangle = E|\Psi_k\rangle$ . Nous obtenons

$$\hat{H}c_j|R_j\rangle = E_0c_j|R_j\rangle - tc_j(|R_{j+1}\rangle) + c_j|R_{j-1}\rangle).$$

En utilisant les résultats de la deuxième question pour les  $c_j$ , cela donne

$$Ec_n = E(k)c_n = E_0c_n - t(\exp(ika) + \exp(-ika))c_n.$$

Nous trouvons le résultat demandé et vérifions  $E(k) = E(-k)$ . Nous obtenons aussi  $E(k+G) = E(k)$  avec  $G = 2\pi n/a$  où  $n$  est un entier (PC03).

**Méthode des Perturbations : note Groupes 03 et 10**  
 Mme Karyn Le Hur, karyn.le-hur@polytechnique.edu

**Théorie des Perturbations**

**Méthode :**

On considère un système dont le Hamiltonien s'écrit  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda\hat{H}_1$ , où  $\hat{H}_0$  est le Hamiltonien d'un problème connu et  $\lambda$  est un petit paramètre (formellement, nous pouvons isoler un petit paramètre sans dimensions  $\lambda$  qui rend l'application de la méthode plus simple.) :

$$(\hat{H}_0 + \lambda\hat{H}_1)|\psi_n\rangle = W_n|\psi_n\rangle. \quad (1)$$

Nous cherchons des solutions des vecteurs et valeurs propres de l'Hamiltonien en puissance de  $\lambda$  :

$$\begin{aligned} |\psi_n\rangle &= |\psi_n^0\rangle + \lambda|\psi_n^1\rangle + \lambda^2|\psi_n^2\rangle + \dots \\ W_n &= W_n^{(0)} + \lambda W_n^{(1)} + \lambda^2 W_n^{(2)} + \dots \end{aligned} \quad (2)$$

1. On peut procéder avec l'équation de Schrödinger :

$$(\hat{H}_0 + \lambda\hat{H}_1)(|\psi_n^0\rangle + \lambda|\psi_n^1\rangle + \lambda^2|\psi_n^2\rangle + \dots) = (W_n^{(0)} + \lambda W_n^{(1)} + \lambda^2 W_n^{(2)} + \dots)(|\psi_n^0\rangle + \lambda|\psi_n^1\rangle + \lambda^2|\psi_n^2\rangle + \dots). \quad (3)$$

Par identification, nous obtenons alors :

$$\begin{aligned} \hat{H}_0|\psi_n^0\rangle &= W_n^{(0)}|\psi_n^0\rangle \\ \hat{H}_0|\psi_n^1\rangle + \hat{H}_1|\psi_n^0\rangle &= W_n^{(0)}|\psi_n^1\rangle + W_n^{(1)}|\psi_n^0\rangle. \end{aligned} \quad (4)$$

Les  $\psi_n^0$  sont les états propres du problème connu avec la valeur propre  $W_n^{(0)}$ . Pour le moment, nous nous arrêtons à l'ordre 1 pour la théorie de perturbations. Nous pouvons calculer  $W_n^{(1)}$ . En appliquant le Bra  $\langle\psi_n^0|$  à cette égalité, nous obtenons :

$$\langle\psi_n^0|\hat{H}_0|\psi_n^1\rangle + \langle\psi_n^0|\hat{H}_1|\psi_n^0\rangle = W_n^{(0)}\langle\psi_n^0|\psi_n^1\rangle + W_n^{(1)}\langle\psi_n^0|\psi_n^0\rangle. \quad (5)$$

Notons :

$$\langle\psi_n^0|\hat{H}_0|\psi_n^1\rangle = \langle\psi_n^1|\hat{H}_0|\psi_n^0\rangle = W_n^{(0)}\langle\psi_n^0|\psi_n^1\rangle. \quad (6)$$

Cela implique :

$$\lambda W_n^{(1)} = \langle\psi_n^0|\lambda\hat{H}_1|\psi_n^0\rangle. \quad (7)$$

2. La condition de normalisation donne :

$$\begin{aligned} 1 = \langle\psi|\psi\rangle &= \langle\psi^0|\psi^0\rangle + \lambda(\langle\psi_n^0|\psi_n^1\rangle + \langle\psi_n^1|\psi_n^0\rangle) \\ &= 1 + 2\lambda\Re\langle\psi^0|\psi^1\rangle. \end{aligned} \quad (8)$$

Cela implique

$$\Re\langle\psi^0|\psi^1\rangle = 0. \quad (9)$$

Ceci est vrai quelque soit le nombre quantique  $n$ .

### Cas non dégénéré

1. Les vecteurs propres de  $\hat{H}_0$  sont maintenant notés  $|n\rangle = |\psi_n^0\rangle$  et  $W_n^{(0)} = E_n$ . En utilisant les résultats précédents :

$$W_n^{(1)} = \langle n | \hat{H}_1 | n \rangle. \quad (10)$$

2. Nous posons ( $\theta \in \mathcal{R}$ ) :

$$|\psi_n^1\rangle = \sum_{k \neq n} c_k^{(n)} |k\rangle + i\theta |n\rangle. \quad (11)$$

La description du système perturbé se fait évidemment dans le même espace de Hilbert que le système non-perturbé ; nous avons utilisé explicitement le fait que  $\Re e \langle \psi^0 | \psi^1 \rangle = 0$ . Nous remarquons aussi que si  $|\psi_n^1\rangle$  est solution de la deuxième Eq. (4) alors  $|\psi_n^1\rangle - i|\theta_n\rangle$  aussi :

$$\hat{H}_0 |\psi_n^1\rangle - i\theta \hat{H}_0 |n\rangle + \hat{H}_1 |n\rangle = W_n^{(0)} |\psi_n^1\rangle - i\theta W_n^{(0)} |n\rangle + W_n^{(1)} |\psi_n^0\rangle. \quad (12)$$

En utilisant l'Eq. (11) :

$$\sum_{k \neq n} (E_k - E_n) c_k^{(n)} |k\rangle = -(\hat{H}_1 - W_n^{(1)}) |n\rangle. \quad (13)$$

En multipliant à gauche par le Bra  $\langle l |$  :

$$\sum_{k \neq n} (E_k - E_n) c_k^{(n)} \langle l | k \rangle = -\langle l | \hat{H}_1 | n \rangle + W_n^{(1)} \langle l | n \rangle. \quad (14)$$

Si  $\langle l | = \langle n |$  le terme de gauche est zéro et nous retrouvons  $W_n^{(1)} = \langle \psi_n^0 | \hat{H}_1 | \psi_n^0 \rangle$ . Maintenant si  $|l\rangle \neq |n\rangle$  alors  $\langle l | n \rangle = 0$  et en sélectionnant le terme  $l = k$  dans la somme :

$$(E_l - E_n) c_l^{(n)} = -\langle l | \hat{H}_1 | n \rangle. \quad (15)$$

Nous obtenons alors :

$$c_l^{(n)} = \frac{\langle l | \hat{H}_1 | n \rangle}{(E_n - E_l)}. \quad (16)$$

3. Nous regardons maintenant les termes d'ordre 2 en  $\lambda$  :

$$\hat{H}_0 |\psi_n^2\rangle + \hat{H}_1 |\psi_n^1\rangle = E_n |\psi_n^2\rangle + W_n^{(1)} |\psi_n^1\rangle + W_n^{(2)} |\psi_n^0\rangle. \quad (17)$$

Cela donne :

$$\langle n | \hat{H}_0 |\psi_n^2\rangle + \langle n | \hat{H}_1 |\psi_n^1\rangle = E_n \langle n | \psi_n^2 \rangle + \langle n | W_n^{(1)} |\psi_n^1\rangle + \langle n | W_n^{(2)} | n \rangle. \quad (18)$$

Donc :

$$W_n^{(2)} = \langle n | \hat{H}_1 |\psi_n^1\rangle - \langle n | W_n^{(1)} |\psi_n^1\rangle = \langle n | \hat{H}_1 | \psi_n^1 \rangle. \quad (19)$$

Les termes venant de  $\langle n | \hat{H}_1 | i\theta n \rangle$  s'annulent en prenant le complexe conjugué de cette équation. Nous obtenons alors :

$$\lambda^2 W_n^{(2)} = \sum_{k \neq n} \frac{\langle n | \lambda \hat{H}_1 | k \rangle \langle k | \lambda \hat{H}_1 | n \rangle}{E_n - E_k} = \sum_{k \neq n} \frac{|\langle n | \lambda \hat{H}_1 | k \rangle|^2}{E_n - E_k}. \quad (20)$$

**DM :** Notons que si  $k \rightarrow 0$ , alors la méthode des perturbations ci-dessus, cas non-dégénéré s'applique (exemple DM). Nous pouvons maintenant redéfinir généralement  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$  avec  $\hat{H}_1$  ayant des valeurs propres petites devant celles de  $\hat{H}_0$ . Nous obtenons ainsi les formules importantes suivantes. Au premier ordre en perturbation, la correction d'énergie est

$$\delta E_n^{(1)} = \langle \psi_n^0 | \hat{H}_1 | \psi_n^0 \rangle. \quad (21)$$

et

$$\delta E_n^{(2)} = \sum_{k \neq n} \frac{|\langle n | \hat{H}_1 | k \rangle|^2}{E_n - E_k}. \quad (22)$$

DEVOIR 02 - PHY430A

Groupes 03 et 10

Taille du Proton et Théorie des Perturbations : correction

à rendre pour le 13 Octobre 2015

Dans ce devoir maison, on s'intéresse à la détermination expérimentale du rayon du proton grâce à des mesures spectroscopiques sur l'atome d'hydrogène.

En cours, nous avons calculé le spectre de l'atome d'hydrogène en supposant le proton ponctuel, ce qui nous a permis de prendre un potentiel électrostatique  $U_0$  s'écrivant partout dans l'espace  $U_0(r) = q_e/4\pi\epsilon_0 r$ , où  $q_e \geq 0$  est la charge élémentaire. Dans le cas plus réaliste où l'on tient compte du rayon fini du proton, on considère que celui-ci peut être décrit par une distribution de charge à symétrie sphérique  $\rho(r)$  créant un potentiel  $U(r)$  solution de l'équation de Poisson

$$\nabla^2 U = -\frac{\rho}{\epsilon_0}.$$

On appellera  $r_p$  le rayon du proton dans la suite, de l'ordre de  $10^{-15}m$ .  
Les degrés de liberté de spin seront ignorés dans la suite du problème.

1. On considère dans un premier temps le cas où le proton est ponctuel. L'hamiltonien prend la forme  $\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m_e} - q_e U_0(r)$ . On rappelle que dans ce cas, les fonctions d'onde des états propres  $|n, l, m\rangle$  ont la forme  $\psi_{n,\ell,m}(r, \theta, \phi) = R_{n,\ell}(r) Y_{\ell,m}(\theta, \phi)$  où  $Y_{\ell,m}(\theta, \phi)$  sont les harmoniques sphériques.

- (a) (2 points) Rappeler l'équation vérifiée par la fonction  $u_{n,\ell}(r) = rR_{n,\ell}(r)$ .

Voir notes d'amphi et livre. Puisque le potentiel  $U(r)$  ne dépend que de la distance radiale, le problème est invariant par rotation autour de l'origine et on peut écrire les états propres sous la forme  $\psi_{n,\ell,m}(r, \theta, \varphi) = R_{n,\ell}(r) Y_{\ell}^m(\theta, \varphi)$  en coordonnées sphériques. A priori la fonction radiale  $R_{n,\ell}(r)$  pourrait dépendre du nombre quantique azimutal  $m$  mais l'équation obtenue ci-dessous montre que ce n'est en fait pas le cas. L'état  $\psi_{n,\ell,m}(r, \theta, \varphi)$  est un état propre de l'opérateur carré du moment cinétique avec  $\hat{L}^2 \psi_{n,\ell,m} = \hbar^2 \ell(\ell + 1) \psi_{n,\ell,m}$ , de sorte que l'équation de Schrödinger se réduit à

$$E_{n,\ell} u_{n,\ell} = \frac{-\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2 u_{n,\ell}}{\partial r^2} + \left[ \frac{\hbar^2 \ell(\ell + 1)}{2\mu r^2} - q_e U_0(r) \right] u_{n,\ell},$$

où  $u_{n,\ell}(r) = rR_{n,\ell}(r)$ . Dans cette équation,  $\mu$  est la masse réduite de l'électron. A partir de maintenant, on assimilera en particulier la masse réduite  $\mu$  à la masse de l'électron.

- (b) (2 points) Tracer l'allure du potentiel effectif  $U_{0,\ell}^{eff}$  vu par l'électron lorsque celui-ci est dans un état S ( $|n, \ell = 0, m\rangle$ ) ou dans un état de moment cinétique non-nul.

Dans le cas où  $\ell = 0$ , il n'y a que le potentiel coulombien attractif :

$$V_{eff} = -q_e U_0^{eff} = \frac{\hbar^2 \ell(\ell + 1)}{2\mu r^2} - q_e U_0(r)$$

Dans le cas  $\ell \neq 0$ , il s'ajoute la contribution du potentiel centrifuge qui domine à courte distance et empêche l'électron de s'approcher du proton.

- (c) (2 points) En déduire que les états S seront les plus affectés par la taille finie du proton.

Seuls les électrons dans un état S peuvent s'approcher du proton et seront donc sensibles à sa structure interne.

- (d) (2 points) Que dire de l'énergie de l'état 2S et de l'état 2P dans le cas d'un proton ponctuel? A quoi peut-on s'attendre pour ces états si l'on considère la taille finie du proton?

Pour un proton ponctuel, les états 2S et 2P ont même énergie (si l'on néglige les effets de spin (voir amphi 06) et les corrections relativistes). D'après ce qui précède, la taille finie du proton doit lever cette dégénérescence<sup>1</sup>.

2. On considère à présent que le proton possède un rayon fini  $r_p$ . Pour simplifier, on considère que la distribution  $\rho(r)$  s'annule pour  $r \geq r_p$ .

- (a) (2 points) En utilisant le théorème de Gauss, tracer l'allure de  $U(r)$  et de  $U_0(r)$ . Comparer les deux potentiels pour  $r \geq r_p$ .

D'après le théorème de Gauss, les deux potentiels sont identiques pour  $r \geq r_p$ . La taille finie du proton régularise cependant la divergence de  $U_0(r)$  en  $r = 0$  – pour une distribution de charge uniforme,  $U$  converge vers une constante à  $r = 0$  et est parabolique pour  $r \leq r_p$ .

- (b) (1 point) Soit  $\hat{H}$  le hamiltonien de l'électron dans le potentiel  $U$ . Celui-ci s'écrit

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$$

avec  $\hat{H}_1 = -q_e(U(r) - U_0(r))$ . Dans la suite, nous traiterons  $\hat{H}_1$  comme une perturbation devant  $\hat{H}_0$ . Rappeler la dégénérescence d'un niveau  $n$  à l'ordre zéro? Expliquer brièvement la méthode de perturbations à l'ordre 1 appliquée au niveau d'énergie  $E_n$ .

Ceci est un rappel de cours : le niveau  $E_n$  est dégéré  $n^2$  fois. Il diagonaliser la restriction de  $\hat{H}_1$  au sous-espace propre associé à la valeur propre  $E_n$ . Formellement, cet exercice consisterait à diagonaliser une matrice  $n^2 \times n^2$ . Dans la suite, nous utilisons une approximation qui rend le problème tractable analytiquement.

- (c) (1 point) Dans la suite, nous relierons les corrections d'énergie du niveau  $n$  à la probabilité de présence  $|\psi_{n,l,m}(r=0)|^2$ . Justifier que seul le niveau  $l=0$  peut être gardé dans la théorie de perturbations (dans la suite, nous ignorerons les autres états).

La fonction d'onde  $\psi_{n,l,m}(r)$  est non nulle en  $r=0$  uniquement pour  $l=0$  (Amphi06).

- (d) (1 point) En utilisant la théorie des perturbations à l'ordre 1, montrer que l'énergie de l'état  $|nS\rangle = |n,0,0\rangle$  est déplacée d'une quantité

$$\delta E_{nS} = \int_{r \leq r_p} 4\pi r^2 dr |\psi_{nS}(r)|^2 q_e (U_0(r) - U(r)),$$

---

1. Notons que les effets relativistes et d'électrodynamique quantique contribuent aussi à la levée de dégénérescence entre les états 2S et 2P.

où  $\psi_{nS}$  désigne la fonction d'onde de l'état  $nS$  qui ne dépend que de  $r$ .

Les états  $nS$  étant non-dégénérés (on oublie le spin et nous ne considérons pas les états P), on peut appliquer la théorie des perturbations et l'on obtient à l'ordre 1

$$\delta E_{nS} = \langle nS | \hat{H}_1 | nS \rangle = \int d^3\mathbf{r} |\psi_{nS}(r)|^2 q_e (U_0(r) - U(r)).$$

- (e) (2 points) Comparer  $r_p$  au rayon de Bohr  $a_0$ . En déduire que l'on peut approcher l'expression précédente par

$$\delta E_{nS} = q_e |\psi_{nS}(0)|^2 \int_{r \leq r_p} 4\pi r^2 dr (U_0(r) - U(r)).$$

Comme  $U_0$  et  $U$  coïncident pour  $r \geq r_p$ , l'intégrale ne porte que sur les valeurs  $r \leq r_p$ . Or, comme  $r_p \simeq 1$  fm et que la fonction d'onde  $\psi_{nS}$  a une largeur typique  $a_0 \simeq 10^{-10}$  m  $\gg r_p$ , on peut remplacer  $|\psi_{nS}(r)|^2$  par  $|\psi_{nS}(0)|^2$  dans l'intégrale.

- (f) (1 point) *Question difficile* : Montrer que

$$\delta E_{nS} = \frac{q_e^2 |\psi_{nS}(0)|^2 \langle r^2 \rangle}{6\epsilon_0},$$

avec

$$\langle r^2 \rangle = \frac{1}{q_e} \int d^3\mathbf{r} \rho(r) r^2.$$

*Indication* : on pourra noter que

$$\int d^3\mathbf{r} (U_0(r) - U(r)) = \int d^3\mathbf{r} (U_0(r) - U(r)) \nabla^2 (r^2/6)$$

puis faire apparaître le laplacien du potentiel électrostatique grâce au théorème de Green-Ostrogradsky.

En utilisant le fait qu'en coordonnées sphériques  $\nabla^2 = r^{-1} \partial_r^2(r \cdot)$ , on voit que  $\nabla^2 r^2/6 = 1$ . On a donc

$$\int d^3\mathbf{r} (U_0(r) - U(r)) = \int d^3\mathbf{r} (U_0(r) - U(r)) \nabla^2 (r^2/6).$$

En appliquant deux fois le théorème d'Ostrogradsky, on voit que pour des fonctions  $f$  et  $g$  décroissant suffisamment vite, on a

$$\int d^3\mathbf{r} f \nabla^2 g = \int d^3\mathbf{r} g \nabla^2 f.$$

On en déduit donc que

$$\int d^3\mathbf{r} (U_0(r) - U(r)) = \int d^3\mathbf{r} \frac{r^2}{6} \nabla^2 (U_0(r) - U(r)),$$

soit en utilisant l'équation de Poisson

$$\int d^3\mathbf{r} (U_0(r) - U(r)) = - \int d^3\mathbf{r} \frac{r^2}{6\epsilon_0} (\rho_0(r) - \rho(r)).$$

Comme  $\rho_0(r) = q_e \delta(\mathbf{r})$  ce terme ne contribue pas à l'intégrale et l'on a finalement

$$\int d^3\mathbf{r} (U_0(r) - U(r)) = \int d^3\mathbf{r} \frac{r^2 \rho(r)}{6\epsilon_0}.$$

- (g) (2 points) En supposant que  $|\psi_{nS}(0)|^2$  est de l'ordre de  $1/a_0^3$  pour  $n$  pas trop grand, donner un ordre de grandeur de  $\delta E_{2S}/|E_{2S}|$ .

Comme  $\langle r^2 \rangle \simeq r_p^2$

$$\delta E_{2S} \simeq \frac{q_e^2}{\epsilon_0 a_0} \left( \frac{r_p}{a_0} \right)^2.$$

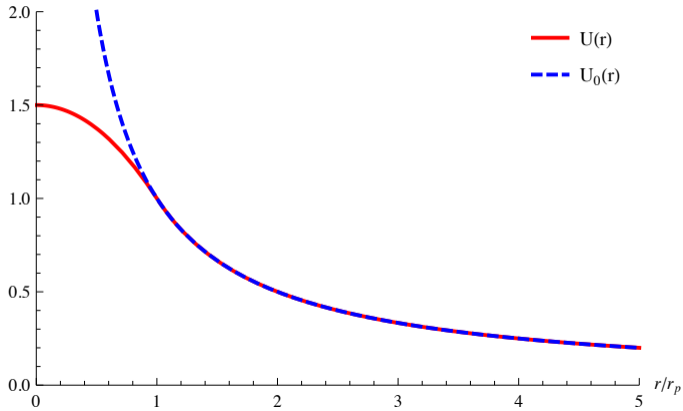
Comme par ailleurs le Rydberg est de l'ordre de  $q_e^2/4\pi\epsilon_0 a_0$ , on en déduit que

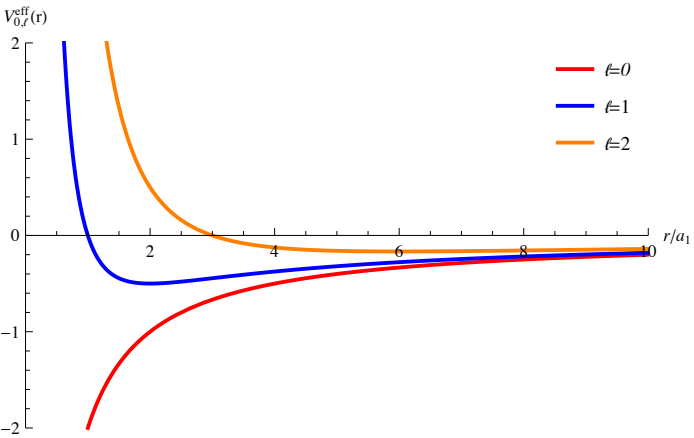
$$\frac{\delta E_{2S}}{E_{2S}} \simeq \left( \frac{r_p}{a_0} \right)^2 \simeq 10^{-10}.$$

- (h) (2 points) Une équipe internationale (<https://muhy.web.psi.ch/wiki/index.php>) a récemment déterminé le rayon du proton par la mesure de l'écart d'énergie entre les états 2S et 2P d'atomes d'hydrogène muoniques dans lesquels l'électron est remplacé par un muon, une particule élémentaire de même charge que l'électron mais de masse  $m_\mu = 207m_e$ . Donner la nouvelle valeur du rayon de Bohr. Quel est l'intérêt d'utiliser un tel système ?

Comme le rayon de Bohr a pour expression  $a_0 = \hbar^2/m_e e^2$  (avec  $e^2 = q_e^2/(4\pi\epsilon_0)$ , voir PC01), si l'on remplace l'électron par une particule plus massive,  $a_0$  diminue, ici d'un facteur 200. En conséquence, le muon est localisé plus près du proton et est donc plus sensible aux effets de taille finie de celui-ci. Si l'on reprend l'estimation ci-dessus, on constate que le décalage attendu pour l'énergie du niveau 2S est pour un atome muonique

$$\left( \frac{\delta E_{2S}}{E_{2S}} \right)_\mu \simeq \left( \frac{\delta E_{2S}}{E_{2S}} \right)_e \left( \frac{m_\mu}{m_e} \right)^2 \simeq 10^{-6}.$$

$(4\pi\epsilon_0/q_e)U(r)$ 



# Mécanique quantique Avancée

## Devoir Maison

### Électrodynamique Quantique en Cavité

Serge Haroche a reçu le prix Nobel de Physique 2012 pour ses travaux sur l'électrodynamique quantique en cavité au cours desquels il a étudié l'interaction entre un atome unique et un champ électromagnétique contenant un petit nombre de photons (<http://www.cqed.org/>). Dans ces expériences, dont nous allons étudier l'un des aspects, des atomes sont préparés dans un état de Rydberg et passent un à un dans une cavité où sont injectés un petit nombre de photons (Fig. 1). Les miroirs de la cavité sont supraconducteurs, ce qui permet d'y garder les photons un temps long (pratiquement une seconde).

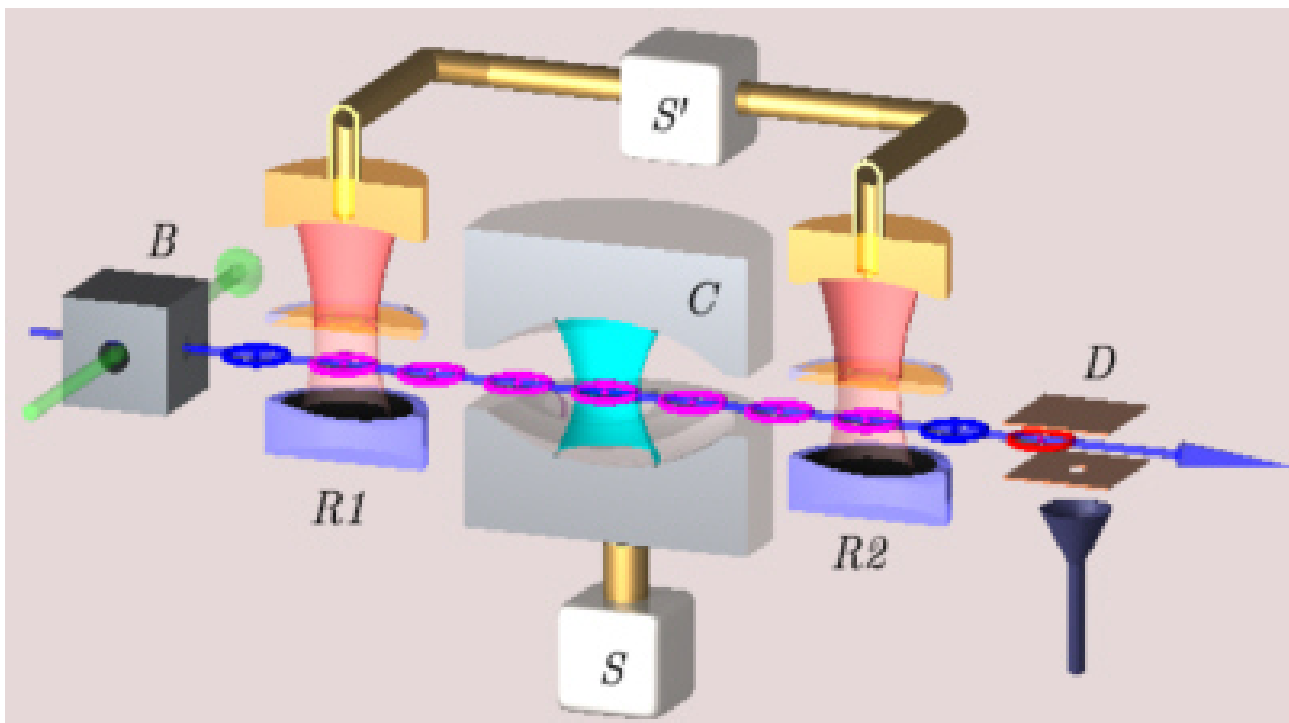


FIGURE 1 – Schéma général de l'expérience de Serge Haroche. Des atomes sont préparés dans un état de Rydberg dans la boîte à circulariser  $B$ , puis passent dans la cavité  $C$  où ils interagissent avec les photons. L'état de l'atome est mesuré dans le détecteur  $D$ . Les sources de micro-ondes  $R_1$  et  $R_2$  permettent de manipuler les états internes de l'atome avant et après le passage dans la cavité supraconductrice.

En électrodynamique quantique, on montre que l'on peut représenter chaque mode du champ électrodynamique par un oscillateur harmonique fictif de fréquence  $\omega_L$ , la fréquence du mode considéré (voir PHY562). Chaque état de l'oscillateur,  $|n\rangle$ , correspond alors à un état du champ contenant  $n$  photons dans le mode considéré.

Considérons un atome à deux niveaux,  $|e\rangle$  et  $|f\rangle$ , séparés d'une énergie  $\hbar\omega_a$ , que l'on place dans une cavité Fabry-Pérot résonnante pour un mode du champ électromagnétique de fréquence  $\omega_L \simeq \omega_a$ . On admet que le hamiltonien du système couplé atome-champ peut se mettre sous la forme

$$\hat{H} = \hbar\omega_a|e\rangle\langle e| + \hbar\omega_L \left( \hat{a}^\dagger \hat{a} + 1/2 \right) + \hbar\Omega \left( |e\rangle\langle f| \otimes \hat{a} + |f\rangle\langle e| \otimes \hat{a}^\dagger \right).$$

Il s'agit du hamiltonien de Jaynes-Cummings, où  $\hat{a}^\dagger$  et  $\hat{a}$  sont les opérateurs création et annihilation de l'oscillateur harmonique fictif représentant le champ électromagnétique et où  $\Omega$  est pris réel.

1. Interpréter les différents termes de  $\hat{H}$ .
2. Rappeler l'action des opérateurs création et annihilation sur les états  $|n\rangle$ . Déterminer alors l'action de  $\hat{H}$  sur les états  $|e, n\rangle = |e\rangle \otimes |n\rangle$  et  $|f, n\rangle = |f\rangle \otimes |n\rangle$ , et en déduire que pour tout  $n$ ,  $\hat{H}$  laisse stable le sous-espace  $\mathcal{E}_n$  engendré par  $|e, n\rangle$  et  $|f, n+1\rangle$ .
3. En déduire les vecteurs propres et les énergies propres de  $\hat{H}$  dans le cas où  $\omega_L = \omega_a$ , condition que l'on supposera satisfaite dans la suite.
4. A  $t = 0$ , on prépare l'atome dans l'état  $|e\rangle$ , le champ électromagnétique étant vide de photons (état  $|n = 0\rangle$ ). Quel est l'état du système à un instant  $t > 0$ ? En déduire la probabilité  $P_e(t)$  de trouver l'atome dans l'état  $|e\rangle$  à l'instant  $t$ .
5. Les résultats expérimentaux sont représentés sur la Fig. 2(a). Commenter ces résultats. Quelle est la valeur de  $\Omega$ ? La courbe continue correspond à la prédiction de la question précédente, multipliée par une exponentielle décroissante,  $e^{-t/\tau}$ . Quel est le temps de relaxation  $\tau$ ?
6. L'état initial du champ est à présent supposé de la forme  $\sum_n c_n |n\rangle$ . Quelle est la probabilité  $P_e(t)$  de trouver le système dans l'état  $|e\rangle$  à un instant  $t$ ? Donner en particulier les fréquences de Fourier de  $P_e(t)$ .
7. Commenter les figures expérimentales 2(b)-(c) à la lumière de la question précédente. Combien de photons y a-t-il typiquement dans la cavité?

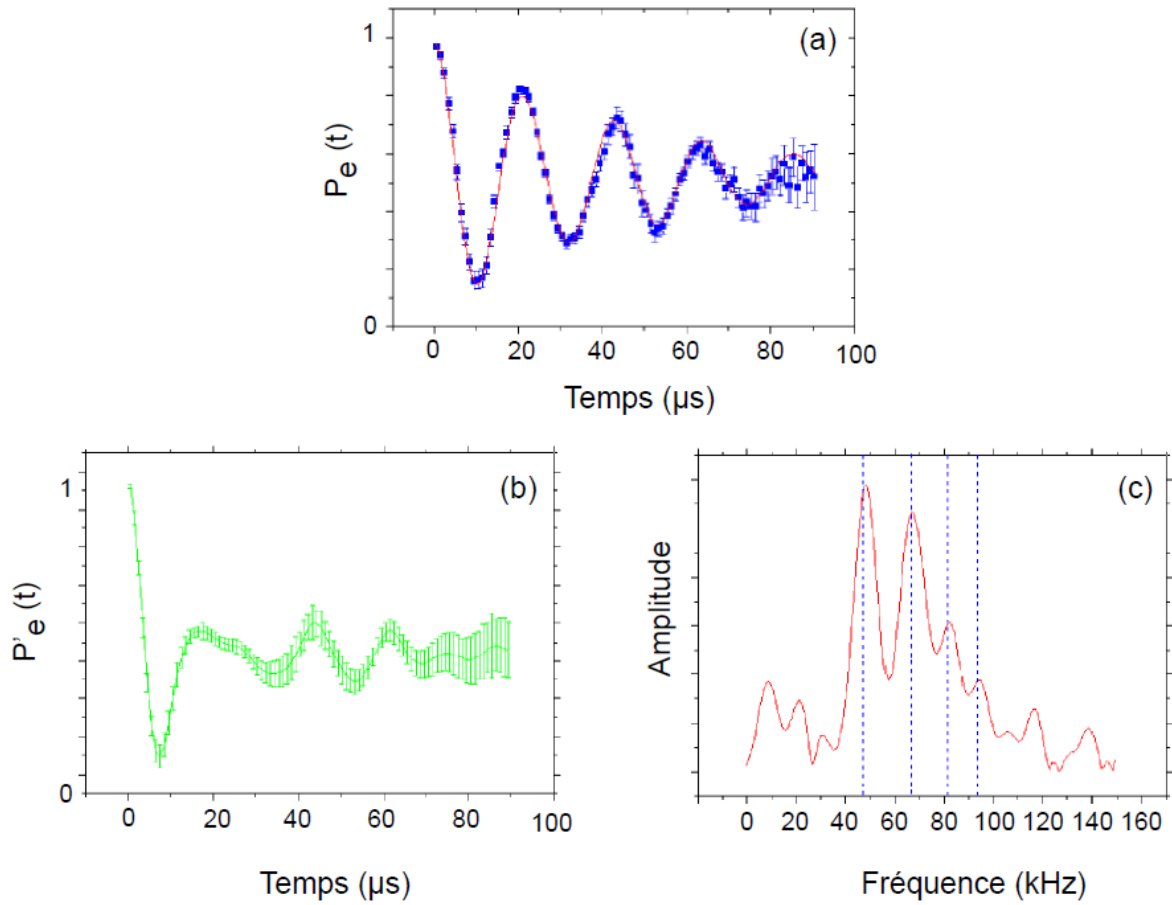


FIGURE 2 – Dépendance temporelle de la probabilité de trouver l'atome dans l'état  $|e\rangle$  lorsque le champ est préparé sans photon (a) et dans un état quelconque (b). Le spectre de Fourier de  $P_e(t)$  est représenté sur la figure (c).

$$\hat{H} = \hbar\omega_a |e\rangle\langle e| \otimes \hat{I} + \hbar\omega_L \hat{I} \otimes \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2}\right) + \hbar\Omega (|e\rangle\langle f| \otimes \hat{a} + |f\rangle\langle e| \otimes \hat{a}^\dagger)$$

1) L'hamiltonien  $\hat{H}$  contient l'hamiltonien de l'atome (système à deux niveaux), l'hamiltonien du champ électromagnétique, l'interaction (dipolaire entre le champ électromagnétique et l'atome)

$$2) \hat{a}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle \quad \hat{a} |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle$$

$$\hat{a}^\dagger \hat{a} |n\rangle = n |n\rangle$$

action de  $\hat{H}$  sur  $|e, n\rangle$  et  $|f, n\rangle$

$$\hat{H} |e, n\rangle = \hbar\omega_a |e, n\rangle + \hbar\omega_L \hat{a}^\dagger \sqrt{n} |n-1, e\rangle + \hbar\Omega \sqrt{n+1} |f, n+1\rangle + \hbar\omega_L \frac{1}{2} |e, n\rangle$$

$$\hat{H} |e, n\rangle = \hbar\omega_a |e, n\rangle + \hbar\omega_L \left(n + \frac{1}{2}\right) |e, n\rangle + \hbar\Omega \sqrt{n+1} |f, n+1\rangle$$

de la même manière nous trouvons

$$\hat{H} |f, n\rangle = \hbar\omega_L \left(n + \frac{1}{2}\right) |f, n\rangle + \hbar\Omega \sqrt{n} |e, n-1\rangle$$

Soit un état  $|\psi\rangle \in \mathcal{E}_n$   $|\psi\rangle = a|e, n\rangle + b|f, n+1\rangle$

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

$$\hat{H}|\psi\rangle = \left( a \left[ \hbar\omega_a + \hbar\omega_L \left( n + \frac{1}{2} \right) \right] + \left[ b \hbar\Omega \sqrt{n+1} \right] \right) |e, n\rangle + \left( a \hbar\Omega \sqrt{n+1} + b \hbar\omega_L \left( n + \frac{3}{2} \right) \right) |f, n+1\rangle$$

On vérifie que  $\hat{H}|\psi\rangle \in \mathcal{E}_n$

3) Cas résonance  $\omega_a = \omega_L$   $\hat{H}|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$

$$|\psi\rangle = a|e, n\rangle + b|f, n+1\rangle$$

cela donne :

$$\left[ a \left( \hbar\omega_a + \hbar\omega_L \left( n + \frac{1}{2} \right) \right) + \left[ b \hbar\Omega \sqrt{n+1} \right] \right] = \lambda a$$

$$\left[ a \hbar\Omega \sqrt{n+1} + b \hbar\omega_L \left( n + \frac{3}{2} \right) \right] = \lambda b$$

Soit  $(\omega_a = \omega_L)$   $\left( a \hbar\omega_a \left( n + \frac{3}{2} \right) + b \hbar\Omega \sqrt{n+1} \right) \frac{1}{a} = (*)$

$$\left( b \hbar\omega_a \left( n + \frac{3}{2} \right) + a \hbar\Omega \sqrt{n+1} \right) \frac{1}{b} = (*)$$

$$\hbar\omega_a \left( n + \frac{3}{2} \right) + \frac{b}{a} \hbar\Omega \sqrt{n+1} = \hbar\omega_a \left( n + \frac{3}{2} \right) + \frac{a}{b} \hbar\Omega \sqrt{n+1}$$

soit  $\left( \frac{a}{b} \right)^2 = 1$  Donc  $\left( \frac{a}{b} \right) = +1$  ou  $\left( \frac{a}{b} \right) = -1$

Soit l'état propre  $|\psi\rangle_n^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} (|e, n\rangle + |f, n+1\rangle)$

$$\lambda_+ = \hbar\omega_a \left( n + \frac{3}{2} \right) + \hbar\Omega \sqrt{n+1}$$

Soit l'état propre  $|\psi\rangle_n^- = \frac{1}{\sqrt{2}} (|e, n\rangle - |f, n+1\rangle)$

$$\lambda_- = \hbar\omega_a \left( n + \frac{3}{2} \right) - \hbar\Omega \sqrt{n+1}$$

4) A  $t=0$ , on prépare l'atome dans l'état  $|e\rangle$  avec  $n=0$ .

$$|\psi(t=0)\rangle = |e,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi\rangle_0^+ + |\psi\rangle_0^-)$$

$$|\psi\rangle_0^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} |e,0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |f,1\rangle \quad \lambda^+ = \hbar\omega_a \frac{3}{2} + \hbar\Omega$$

$$|\psi\rangle_0^- = \frac{1}{\sqrt{2}} |e,0\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} |f,1\rangle \quad \lambda^- = \hbar\omega_a \frac{3}{2} - \hbar\Omega$$

cherchons  $|\psi(t)\rangle = N(t) |\psi\rangle_0^+ + M(t) |\psi\rangle_0^-$

$$i\hbar\partial_t \begin{pmatrix} N(t) \\ M(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hbar\omega_a \frac{3}{2} + \hbar\Omega \\ \hbar\omega_a \frac{3}{2} - \hbar\Omega \end{pmatrix} \begin{pmatrix} N(t) \\ M(t) \end{pmatrix}$$

Pour vérifier donc  $|\psi\rangle_{t>0} = \frac{1}{\sqrt{2}} \exp -i\left(\omega_a \frac{3}{2} + \Omega\right)t |\psi\rangle_0^+$

$$+ \frac{1}{\sqrt{2}} \exp -i\left(\omega_a \frac{3}{2} - \Omega\right)t |\psi\rangle_0^-$$

Projetons  $|\psi\rangle_{t>0}$  sur  $|e\rangle$ ;  $\hat{P} = |\psi\rangle_{t>0} \langle\psi|_{t>0}$

$$P_e(t) = \langle e,0 | \hat{P} | e,0 \rangle$$

$$\langle e,0 | \psi \rangle_{t>0} = \frac{1}{2} \left[ \exp -i\left(\omega_a \frac{3}{2} + \Omega\right)t + \exp -i\left(\omega_a \frac{3}{2} - \Omega\right)t \right]$$

$$P_e(t) = \frac{1}{4} \exp(-i\omega_a \frac{3}{2}t) \exp(i\omega_a \frac{3}{2}t) 2[\cos(\Omega t)]^2$$

$$P_e(t) = \frac{1}{2} (1 + \cos(2\Omega t))$$

5) Selon les résultats expérimentaux,  $P_e(t)$  oscille de manière amortie avec une période de  $22 \mu\text{s}$  soit une fréquence de  $46 \text{ kHz}$ .  $\Omega \approx 23 \text{ kHz}$ .

En regardant la figure, nous pouvons estimer le temps de relaxation à environ  $\tau \approx 4 \times 22 \mu\text{s}$

Ce temps de relaxation peut être dû aux "pertes" dans la cavité.

6) Nous pouvons aisément généraliser le résultat

$$|\psi\rangle_{t=0} = \sum_{n \geq 0} c_n |e, n\rangle = \sum_{n \geq 0} c_n \left( \frac{1}{\sqrt{2}} |\psi\rangle_n^+ + \frac{1}{\sqrt{2}} |\psi\rangle_n^- \right)$$

Dans ce cas  $\langle e, n | \psi \rangle_{t > 0} = c_n \exp(-i(n + \frac{3}{2})\omega_a t) \cos(\Omega\sqrt{n+1}t)$

Il en découle  $P_e(t) = \sum_{n \geq 0} c_n^2 \cos^2(\Omega\sqrt{n+1}t)$

$$= \sum_{n \geq 0} c_n^2 \frac{1 + \cos(2\Omega\sqrt{n+1}t)}{2}$$

$P_e(t)$  est décrit par une série d'oscillations de fréquences de  $2\Omega\sqrt{n+1}$ ,  $n \in \mathbb{N}$ .

7) L'amplitude de fréquences  $\approx 46 \text{ kHz}$  ( $n=0$ ) [et  $67 \text{ kHz}$  ( $n=1$ )] est la plus grande.

PC01, Phys 430 - Physique Quantique Avancée  
 Mme Karyn Le Hur, karyn.le-hur@polytechnique.edu  
 Groupes 03 et 10

**Principe d'Incertitude et Applications**

Le Mardi 1er Septembre 2015

Deux observables ne commutent pas en général (par exemple, la position  $\hat{x}$  et l'impulsion  $\hat{p}_x$ ). L'utilisation des relations de commutation permet de montrer de nombreuses propriétés physiques.

1. À une grandeur  $A$ , nous associons l'observable  $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ ; Pour un état  $|\psi\rangle$  quelconque, nous introduisons les notations pour les valeurs moyennes et les variances :

$$\begin{aligned}\langle A \rangle &= \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle & \langle A^2 \rangle &= \langle \psi | \hat{A}^2 | \psi \rangle \\ \Delta a^2 &= \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2.\end{aligned}\tag{1}$$

A. Montrer que pour deux grandeurs  $A$  et  $B$  (inégalité de Schwarz)

$$\Delta a \Delta b \geq \frac{1}{2} |\langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle|.\tag{2}$$

Pour montrer cela, nous utiliserons le carré de la norme du vecteur  $(\hat{A} + i\lambda\hat{B})|\psi\rangle$ , où  $\lambda$  est un nombre réel.

B. Montrer la relation d'incertitude de Heisenberg :

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}.\tag{3}$$

Que représente  $\hbar$  ?

C. L'Hamiltonien de l'oscillateur harmonique unidimensionnel, de masse  $m$  et de pulsation  $\omega$ , prend la forme :

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2.\tag{4}$$

Considérons un état quantique de l'oscillateur harmonique décrit par l'écart type sur la position  $\Delta x$ . Utiliser la relation d'incertitude dans l'Eq. (3), pour trouver une borne inférieure à l'énergie de l'oscillateur harmonique unidimensionnel en fonction de  $\Delta x$ . Trouver ensuite la valeur de  $\Delta x$  qui minimise  $\langle H \rangle$ . En déduire une borne inférieure de  $\langle H \rangle$ .

2. Dans cet exercice, nous introduisons les coordonnées sphériques et considérons les **relations d'incertitude à trois dimensions**. Nous appliquerons les inégalités de type Heisenberg obtenues ci-dessous pour trouver les bornes inférieures de l'énergie de problèmes physiques importants comme l'atome d'hydrogène.

A. On considère à trois dimensions une fonction réelle  $f(r)$  de la variable  $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ . Ici,  $f'(r)$  est la dérivée de  $f$  et  $f(\hat{r})\psi(\vec{r}) = f(r)\psi(\vec{r})$ .

Montrer les relations de commutation

$$[\hat{p}_x, f(\hat{r})] = -i\hbar \frac{\hat{x}}{\hat{r}} f'(\hat{r}) \quad [\hat{p}_x, \hat{x}f(\hat{r})] = -i\hbar \left( f(\hat{r}) + \frac{\hat{x}^2}{\hat{r}} f'(\hat{r}) \right). \quad (5)$$

Nous utiliserons  $[\hat{p}_x, \hat{x}f(\hat{r})] = [\hat{p}_x, \hat{x}]f(\hat{r}) + \hat{x}[\hat{p}_x, f(\hat{r})]$ .

B. On considère l'opérateur  $\hat{A}_x = \hat{p}_x + i\lambda\hat{x}f(\hat{r})$  et les opérateurs analogues  $\hat{A}_y, \hat{A}_z$  ( $\lambda$  est réel). Calculer  $\langle \psi | (\hat{A}_x^\dagger \hat{A}_x + \hat{A}_y^\dagger \hat{A}_y + \hat{A}_z^\dagger \hat{A}_z) | \psi \rangle$  pour un état  $|\psi\rangle$  arbitraire, et écrire le résultat comme un polynôme du second degré en  $\lambda$ .

C. Chercher une inégalité pour le produit  $\langle p^2 \rangle \langle r^2 f^2 \rangle$  valable pour toute fonction  $f$ .

D. En considérant les choix  $f(r) = 1$ ,  $f(r) = 1/r$  et  $f(r) = 1/r^2$  démontrer les relations suivantes :

$$\langle p^2 \rangle \langle r^2 \rangle \geq \frac{9}{4} \hbar^2 \quad \langle p^2 \rangle \geq \hbar^2 \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle^2 \quad \langle p^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4} \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle. \quad (6)$$

### Application à l'atome d'hydrogène :

E. L'Hamiltonien de l'atome d'hydrogène prend la forme :

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m_e} - \frac{e^2}{\hat{r}}. \quad (7)$$

Nous avons défini  $e^2 = q^2/(4\pi\epsilon_0)$  et  $\epsilon_0$  est la permittivité du vide. Que représentent les deux termes dans l'Hamiltonien ? Supposons que l'électron effectue une trajectoire "semi-classique" circulaire autour du noyau. Quel est alors le rayon moyen de la trajectoire électronique ?

F. Utiliser la deuxième relation (6) pour trouver une borne inférieure à l'énergie de l'état fondamental de l'atome d'hydrogène.

G. (Facultatif) Montrer que l'on peut aussi déterminer la fonction d'onde de l'état fondamental à l'aide de ces relations.

# Principe d'Incertitude: PC01, Buts

Cette incertitude est fondamentale parce que les particules se comportent en fait comme des **ondes**: exemple important

Incertitude impulsion

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{h}{4\pi} = \frac{\hbar}{2}$$

(voir aussi TF PHYS311)

Incertitude position

Dans quel cas, avons-nous l'égalité? Exemple, **oscillateur harmonique**

Werner Heisenberg a réalisé qu'en mesurant les particules à une échelle microscopique, nous ne pouvons pas mesurer toutes les propriétés exactement

Quelquefois, l'image classique (planétaire) peut servir comme point de départ, **N. Bohr 1913...**

# Atome d'hydrogène, Bohr

Un électron a une énergie cinétique

L'électron a aussi une énergie potentielle due à l'attraction due au « proton »

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m_e} - \frac{e^2}{\hat{r}}$$

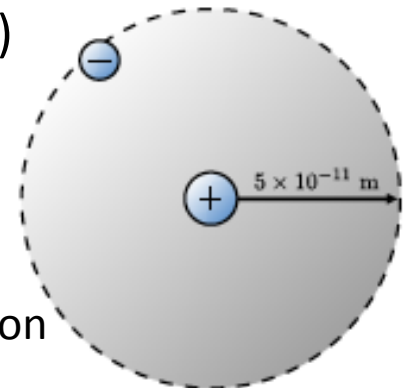
Classiquement, la minimisation de l'énergie tendrait à dire  $r$  tend vers « zéro » (attention taille du proton) et  $p$  tend vers zéro.

La stabilité des atomes implique en fait que le rayon moyen  $\langle r \rangle$  soit fini

Etat Fondamental:  $\langle r \rangle = a_B \approx 0.5 \text{ \AA}$  et  $E \approx -13.6 \text{ eV}$  (voir cours...)

**Etablissons une relation avec le principe d'incertitude...**

Une dérivation simple sera aussi faite par analogie avec la quantification du spin ou moment cinétique (PHYS311)



# QUIZZ...

- Soit 2 observables  $\hat{A}$  et  $\hat{B}$

Est-ce que  $i\langle[\hat{A}, \hat{B}]\rangle \in \mathcal{R}$

- OUI

- NON

Groupes 03/10

Mme Karyn Le Hur

En début de séance, nous calculerons pour deux opérateurs hermitiens (observables) liés à des grandeurs physiques (QUIZZ):

$$\begin{aligned} \langle i[\hat{A}, \hat{B}] \rangle^* &= -i\langle \psi | [\hat{B}^\dagger, \hat{A}^\dagger] | \psi \rangle \\ &= -i\langle \psi | [\hat{B}, \hat{A}] | \psi \rangle = +i\langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle \end{aligned} \quad (1)$$

Nous vérifions que  $i\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \in \mathcal{R}$ .

### 1. A. Relations d'incertitude.

Partons de  $(*) = |(\hat{A} + i\lambda\hat{B})|\psi\rangle|^2 \geq 0$ . En utilisant les notations du texte et livre page 153:

$$\begin{aligned} (*) &= \langle \psi | (\hat{A} - i\lambda\hat{B})(\hat{A} + i\lambda\hat{B}) | \psi \rangle \\ &= \langle A^2 \rangle + i\lambda\langle \hat{A}\hat{B} \rangle - i\lambda\langle \hat{B}\hat{A} \rangle + \lambda^2\langle B^2 \rangle \\ &= \langle A^2 \rangle + \lambda^2\langle B^2 \rangle + i\lambda\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle. \end{aligned} \quad (2)$$

$(*)$  est un polynôme en  $\lambda^2$  positif ou nul. Son discriminant est donc négatif ou nul:

$$-\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle^2 - 4\langle A^2 \rangle\langle B^2 \rangle \leq 0. \quad (3)$$

Nous déduisons:

$$\langle A^2 \rangle\langle B^2 \rangle \geq -\frac{1}{4}\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle^2 = \frac{1}{4}(i\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle)^2 = \frac{1}{4} \left| \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \right|^2. \quad (4)$$

Nous pouvons généraliser ce raisonnement en introduisant  $\hat{A}' = \hat{A} - \langle A \rangle \hat{I}$  et  $\hat{B}' = \hat{B} - \langle B \rangle \hat{I}$ , conduisant à:

$$\langle A'^2 \rangle\langle B'^2 \rangle \geq \frac{1}{4} \left| \langle [\hat{A}', \hat{B}'] \rangle \right|^2 = \frac{1}{4} \left| \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \right|^2. \quad (5)$$

Notons que:

$$\langle A'^2 \rangle = \langle A^2 \rangle - 2\langle A \rangle\langle A \rangle + \langle A \rangle^2 = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 = \Delta a^2. \quad (6)$$

Ceci est donc équivalent à:

$$\Delta a^2 \Delta b^2 \geq \frac{1}{4} \left| \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \right|^2. \quad (7)$$

Finalement (inégalité de Schwarz):

$$\Delta a \Delta b \geq \frac{1}{2} \left| \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \right|. \quad (8)$$

B. Nous considérons la représentation de position. (RAPPELS UTILES de PHYS311) A un Ket  $|\psi\rangle$  est associée la fonction d'onde  $\psi(x)$ :

$$\begin{aligned}\hat{x}\psi(x) &= x\psi(x) \\ \hat{p}_x\hat{x}\psi(x) &= -i\hbar\frac{d}{dx}(x\psi(x)) = -i\hbar\psi(x) - i\hbar x\psi'(x) \\ \hat{x}\hat{p}_x\psi(x) &= -i\hbar x\psi'(x).\end{aligned}\tag{9}$$

Nous vérifions donc:

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = \hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x} = +i\hbar\hat{I}.\tag{10}$$

En notant  $\Delta x = (\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2)^{1/2}$  et  $\Delta p_x = (\langle p_x^2 \rangle - \langle p_x \rangle^2)^{1/2}$  et en appliquant les résultats de la question **A.**:

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}.\tag{11}$$

**Note:** L'égalité est satisfaite quand  $|\hat{x}|\psi\rangle + i\lambda\hat{p}_x|\psi\rangle = 0$ , soit

$$x\psi(x) + \lambda\hbar\psi'(x) = 0.\tag{12}$$

La solution de cette équation conduit à ( $\lambda > 0$ ):

$$\psi(x) \propto \exp\left(-\frac{x^2}{2\hbar\lambda}\right).\tag{13}$$

Ceci constitue le paquet d'onde minimal tel que  $\langle x \rangle = \langle p_x \rangle = 0$ . On obtient tous les paquets d'onde minimaux par translation de la position ou de l'impulsion.

C. Pour l'oscillateur harmonique unidimensionnel:

$$E = \langle H \rangle \geq \frac{\Delta p_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\Delta x^2.\tag{14}$$

Nous pouvons utiliser que  $\Delta x \Delta p_x \geq \hbar/2$  tel que  $\Delta p_x^2 \geq \frac{\hbar^2}{4} \frac{1}{\Delta x^2}$ . Cela conduit à:

$$E \geq E_0(\Delta x) = \left(\frac{\hbar^2}{8m} \frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2\Delta x^2\right).\tag{15}$$

Nous nous intéressons à la borne inférieure de l'énergie.  $\Delta x$  doit donc être solution de:

$$\frac{\partial E_0}{\partial \Delta x} = 0.\tag{16}$$

Cela conduit à

$$m\omega^2\Delta x - \frac{\hbar^2}{4m}(\Delta x)^{-3} = 0.\tag{17}$$

Donc,  $\Delta x^{-2} = (2m\omega)/\hbar$ . La borne inférieure de l'énergie est finalement:

$$E_0 = \frac{1}{2}m\omega^2 \frac{\hbar}{2m\omega} + \frac{\hbar^2}{8m} \frac{2m\omega}{\hbar} = \frac{\hbar\omega}{2}.$$

$E_0$  correspond en fait à l'énergie de l'état fondamental de l'oscillateur harmonique unidimensionnel (voir livre p. 81), pour lequel  $\Delta p_x \Delta x = \hbar/2$  et la fonction d'onde est Gaussienne (Contrôle PHYS311).

Rappel: La constante de Planck  $\hbar$  a la dimension d'une énergie fois un temps  $\hbar = 1,054572... \times 10^{-34} J_s$ .

**Note:** Nous pouvons facilement généraliser cet argument à trois dimensions dû à la séparation des variables et nous obtenons ainsi  $E_0 = \frac{3}{2}\hbar\omega$ . Revoir la notion d'ECOC (ensemble complet d'observables qui commutent), pour le QCM.

## 2. Mécanique Quantique Tri-dimensionnelle

A. On commence par évaluer:

$$[\hat{p}_x, f(\hat{r})]. \quad (18)$$

Choisissons un Ket  $|\psi\rangle$  associé à la fonction d'onde  $\psi(\vec{r})$ . On voit donc:

$$[\hat{p}_x, f(\hat{r})]\psi(\vec{r}) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} [f(r)\psi(\vec{r})] - f(r) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(\vec{r}) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} f(r)\psi(\vec{r}) = -\frac{x}{r} i\hbar f'(r)\psi(\vec{r}). \quad (19)$$

Maintenant en utilisant l'égalité:

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] \quad (20)$$

avec:  $\hat{A} = \hat{p}_x$ ,  $\hat{B} = \hat{x}$  et  $\hat{C} = f(\hat{r})$ , en utilisant les résultats obtenus précédemment et  $[\hat{p}_x, \hat{x}] = -i\hbar\hat{I}$  cela donne immédiatement le résultat demandé.

B. Définissons:

$$\begin{aligned} \vec{p} &= \hat{p}_x \vec{e}_x + \hat{p}_y \vec{e}_y + \hat{p}_z \vec{e}_z \\ \vec{r} &= \hat{x} \vec{e}_x + \hat{y} \vec{e}_y + \hat{z} \vec{e}_z, \end{aligned} \quad (21)$$

où  $\vec{e}_x$ ,  $\vec{e}_y$  et  $\vec{e}_z$  sont des vecteurs unitaires. Le calcul de la question B. peut être simplifié si l'on écrit:

$$\langle \psi | \hat{A}_x^\dagger \hat{A}_x + \hat{A}_y^\dagger \hat{A}_y + \hat{A}_z^\dagger \hat{A}_z | \psi \rangle = \langle \psi | (\vec{p} - i\lambda \vec{r} f(\hat{r})) \cdot (\vec{p} + i\lambda \vec{r} f(\hat{r})) | \psi \rangle. \quad (22)$$

En particulier,

$$\vec{p} \cdot \vec{p} = \hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2. \quad (23)$$

Cela donne:

$$\langle \psi | (\vec{p} - i\lambda \vec{r} f(\hat{r})) \cdot (\vec{p} + i\lambda \vec{r} f(\hat{r})) | \psi \rangle = \langle p^2 \rangle + i\lambda \sum_{j \in \{x,y,z\}} \langle [\hat{p}_j, \hat{j} f(\hat{r})] \rangle + \lambda^2 \langle r^2 f(r)^2 \rangle. \quad (24)$$

C. En utilisant le fait que la norme d'un vecteur doit être positive ou nulle cela implique (en utilisant aussi les résultats précédents):

$$4\langle p^2 \rangle \langle r^2 f^2 \rangle \geq \left| \sum_{j \in \{x,y,z\}} \langle [\hat{p}_j, \hat{j} f(\hat{r})] \rangle \right|^2. \quad (25)$$

En utilisant les résultats précédents, et

$$\begin{aligned} [\hat{p}_y, \hat{y}f(\hat{r})] &= -i\hbar(f(\hat{r}) + \frac{\hat{y}^2}{r}f'(\hat{r})) \\ [\hat{p}_z, \hat{z}f(\hat{r})] &= -i\hbar(f(\hat{r}) + \frac{\hat{z}^2}{r}f'(\hat{r})), \end{aligned} \quad (26)$$

cela donne:

$$4\langle p^2 \rangle \langle r^2 f^2 \rangle \geq \hbar^2 |3\langle f \rangle + \langle r f' \rangle|^2. \quad (27)$$

D. Pour  $f = 1$  nous obtenons:

$$\langle p^2 \rangle \langle r^2 \rangle \geq 9\hbar^2/4. \quad (28)$$

Pour  $f = 1/r$  nous obtenons

$$\langle p^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4} |3\langle 1/r \rangle - \langle 1/r \rangle|^2 \rightarrow \langle p^2 \rangle \geq \hbar^2 \langle 1/r \rangle^2. \quad (29)$$

Pour  $f = 1/r^2$ , nous trouvons de même:

$$\langle p^2 \rangle \langle \frac{1}{r^2} \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4} \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle^2. \quad (30)$$

soit:

$$\langle p^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4} \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle. \quad (31)$$

E. Considérons l'atome d'hydrogène (nous avons défini  $e^2 = q^2/(4\pi\epsilon_0)$ ):

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m_e} - \frac{e^2}{\hat{r}}. \quad (32)$$

Argument qualitatif: Si la trajectoire de l'électron a un rayon typique  $r$ , prenons une image classique où le moment cinétique est quantifié (par analogie au spin PHYS311) tel que  $L_z = pr \sim \hbar$ . Dans ce cas, l'énergie (classique) associée s'écrit:

$$E \sim \frac{\hbar^2}{2m_e r^2} - \frac{e^2}{r}. \quad (33)$$

En minimisant  $E$  par rapport à  $r$  cela donne

$$0 = -\frac{\hbar^2}{m_e r^3} + \frac{e^2}{r^2} \rightarrow r = a_B = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} \sim 0.5A \quad (34)$$

*Il est important de faire attention à l'analyse dimensionnelle et unités.  $a_B$  correspond au rayon de Bohr.*

F. Maintenant, on peut aussi évaluer l'énergie directement et utiliser la deuxième relation dans Eq. (6) du texte:

$$E = \langle H \rangle = \frac{\langle p^2 \rangle}{2m_e} - e^2 \langle 1/r \rangle \geq \frac{\hbar^2}{2m_e} \langle 1/r \rangle^2 - e^2 \langle 1/r \rangle \quad (35)$$

On peut vérifier que le minimum d'énergie est obtenu quand  $\langle r \rangle = a_B$  (et vaut  $\approx -13.6eV$ ).  
 G. (Facultatif) D'un point de vue général la borne inférieure est obtenue quand (généralisation du problème **1B**):

$$\left( \vec{p} + i\lambda\hbar\frac{\vec{r}}{r} \right) |\psi\rangle = 0. \quad (36)$$

On a pris  $f = \hbar/r$ . Supposons que nous passons en coordonnées sphériques et que la fonction d'onde est radiale  $\psi(\vec{r}) = \psi(r)$ . Dans ce cas, si on regarde le long de la direction  $\hat{r}$  alors la composante de  $\hat{p}$  s'écrit  $-i\hbar\partial/\partial r$  et l'équation se simplifie en:

$$\frac{d\psi}{dr} - \lambda\psi = 0 \quad (37)$$

La solution de cette équation (pour pouvoir normaliser  $\lambda < 0$ ):

$$\psi(r) = Ae^{\lambda r}. \quad (38)$$

Un choix naturel basé sur les questions précédentes est  $\lambda = -1/a_B$ . On peut aussi résoudre la condition de normalisation:

$$1 = A^2 \int d^3\vec{r} e^{-2r/a_B} \rightarrow A = 1/\sqrt{\pi a_B^3}. \quad (39)$$

Ce qui donne

$$\psi_{Fond} = \frac{e^{-r/a_B}}{\sqrt{\pi a_B^3}}. \quad (40)$$

Ceci sera démontré plus tard, rigoureusement.

PC02, Phys 430 - Physique Quantique Avancée  
 Karyn Le Hur, karyn.lehur@cpht.polytechnique.fr  
 Groupes 03/10

### Force de Lorentz et Théorème d'Ehrenfest (Dirac 1925)

Le 08 Septembre 2015

*Dans cette petite classe, nous allons étudier le problème quantique d'une particule chargée en champ magnétique.*

Classiquement, une particule de charge  $q$  et de masse  $M$  dans un champ électromagnétique subit la force de Lorentz  $\mathbf{F} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})$ <sup>1</sup>.

En utilisant les résultats de mécanique classique, nous pouvons montrer que l'hamiltonien d'une particule chargée en champ magnétique prend la forme<sup>2</sup> :

$$H = \frac{1}{2}M\mathbf{v}^2, \quad (1)$$

avec les composantes de vitesse ( $i = x, y, z$ )

$$v_i = \frac{1}{M}(p_i - qA_i), \quad (2)$$

où le potentiel vecteur du champ magnétique est défini par  $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ . Nous noterons que la quantité de mouvement  $M\mathbf{v}$  diffère de l'impulsion.

On admet que le comportement *quantique* d'une particule sans spin de charge  $q$  et de masse  $M$  placée dans un champ magnétique  $\mathbf{B}$  est décrit par

$$\hat{H} = \frac{(\hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}))^2}{2M},$$

On considère le cas d'un champ magnétique  $\mathbf{B}$  uniforme selon  $z$ . Nous proposons de comprendre la forme de cet hamiltonien dans le cadre de la mécanique quantique en utilisant le théorème d'Ehrenfest. Nous introduirons la pulsation  $\omega_c = |q|B/M$ .

1. Par des considérations de symétrie, donner la direction de  $\mathbf{A}$ . Nous introduisons le potentiel  $\mathbf{A} = \frac{\mathbf{B} \times \hat{\mathbf{r}}}{2}$ . Montrer que ce choix donne une valeur correcte de  $\mathbf{B}$  (justifier physiquement le résultat).
2. Développer  $\hat{H}$ . Montrer que le terme linéaire en  $\mathbf{A}$  s'écrit  $-\gamma \hat{\mathbf{L}} \cdot \mathbf{B}$ , où  $\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}$ . Donner l'expression de  $\gamma$ .
3. On s'intéresse à la dynamique de la particule et plus particulièrement à l'évolution de  $\langle \hat{\mathbf{r}} \rangle$ . En utilisant le théorème d'Ehrenfest, montrer que  $\langle \hat{\mathbf{r}} \rangle$  obéit aux équations de la physique classique si nous introduisons l'opérateur vitesse  $\hat{\mathbf{v}} = (1/M)(\hat{\mathbf{p}} - q\hat{\mathbf{A}})$ .

---

1. Nous utilisons les définitions (internationales) du produit vectoriel  $\times = \wedge$   
 2. La preuve sera donnée en note en fin de PC ; voir aussi Livre, page 153

**Indications** : on rappelle que pour toute observable  $\langle \widehat{O} \rangle$  ne dépendant par explicitement du temps, on a

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \widehat{O} \rangle = \langle [\widehat{O}, \widehat{H}] \rangle.$$

4. Les trois composantes de la vitesse  $\widehat{\mathbf{v}} = (1/M)(\widehat{\mathbf{p}} - q\widehat{\mathbf{A}})$  peuvent-elles être mesurées simultanément ? Calculer  $d\langle \widehat{\mathbf{v}} \rangle / dt$ .
5. Faire une analogie avec la physique classique.
6. Montrer que la solution aux valeurs propres de l'énergie donne  $E_{tot} = E_{\perp} + (\hbar k_z)^2 / 2M$  avec

$$E_{\perp} = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c.$$

**Indications** : Pour la partie transverse dans le plan XY, on cherchera à faire une analogie avec l'oscillateur harmonique unidimensionnel, en choisissant la jauge dite de Landau :  $\mathbf{A} = Bx\mathbf{e}_y$  et  $\mathbf{e}_y$  est le vecteur unitaire suivant la direction  $Oy$ . Nous chercherons une fonction d'onde de la forme  $\psi(x, y) = \exp(ik_y y)X(x)$ .

7. Considérons la transformation de jauge

$$\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla\chi(\mathbf{r}, t) \quad \Phi'(\mathbf{r}, t) = \Phi(\mathbf{r}, t) - \frac{\partial\chi}{\partial t}$$

où  $\chi(\mathbf{r}, t)$  est une fonction arbitraire, correspondant aux mêmes champs électrique et magnétique et  $\Phi$  est le potentiel électrique. En présence d'un champ électrique, l'hamiltonien a un terme supplémentaire  $q\Phi$ . Vérifier que la transformation ne modifie pas la probabilité de présence de la particule en un point  $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$ .

Rappel : Théorème d'Ehrenfest

Considérons une observable  $\widehat{O}$  qui peut éventuellement dépendre du temps  $t$  et un état du système  $|\psi(t)\rangle$  régi par l'équation de Schrödinger pour l'hamiltonien  $\widehat{H}$ . Alors :

$$\frac{d\langle\widehat{O}\rangle}{dt} = -\frac{i}{\hbar}\langle\psi|[\widehat{O}, \widehat{H}]|\psi\rangle + \langle\psi|\frac{\partial\widehat{O}}{\partial t}|\psi\rangle.$$

Dans le cas où  $\widehat{O}$  ne dépend pas du temps,  $\partial\widehat{O}/\partial t = 0$ .

**Preuve** :

Puisque  $\langle O \rangle = \langle\psi|\widehat{O}|\psi\rangle$ , nous avons :

$$\frac{d\langle\widehat{O}\rangle}{dt} = \frac{d}{dt}\langle\psi|\widehat{O}|\psi\rangle + \langle\psi|\frac{\partial\widehat{O}}{\partial t}|\psi\rangle + \langle\psi|\widehat{O}\frac{d|\psi\rangle}{dt}.$$

En appliquant l'équation de Schrödinger dépendante du temps,

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{d|\psi\rangle}{dt} &= \widehat{H}|\psi\rangle \\ -i\hbar\frac{d\langle\psi|}{dt} &= \langle\psi|\widehat{H}, \end{aligned}$$

cela donne :

$$\begin{aligned} \frac{d\langle\widehat{O}\rangle}{dt} &= \frac{i}{\hbar}\langle\psi|\widehat{H}\widehat{O}|\psi\rangle + \langle\psi|\frac{\partial\widehat{O}}{\partial t}|\psi\rangle - \frac{i}{\hbar}\langle\psi|\widehat{O}\widehat{H}|\psi\rangle \\ &= -\frac{i}{\hbar}\langle\psi|[\widehat{O}, \widehat{H}]|\psi\rangle + \left\langle\frac{\partial\widehat{O}}{\partial t}\right\rangle. \end{aligned}$$

On remarque que ce qui gouverne la dépendance temporelle de grandeurs physiques est l'hamiltonien, ici associé au symbole du commutateur. Dans le cas où  $\widehat{O}$  ne dépend pas du temps, nous obtenons :

$$\frac{d\langle\widehat{O}\rangle}{dt} = -\frac{i}{\hbar}\langle\psi|[\widehat{O}, \widehat{H}]|\psi\rangle.$$

PC02, Phys 430 - Physique Quantique Avancée  
 Karyn Le Hur, karyn.lehur@cpht.polytechnique.fr  
 Groupes 03/10

## Force de Lorentz : Théorème d'Ehrenfest et importance du potentiel vecteur

Le 08 Septembre 2015

*Dans cette petite classe, nous allons étudier le problème quantique d'une particule chargée en champ magnétique.*

Classiquement, une particule de charge  $q$  et de masse  $M$  dans un champ électromagnétique subit la force de Lorentz  $\mathbf{F} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})$ <sup>1</sup>.

En utilisant les résultats de mécanique classique, nous pouvons montrer que l'hamiltonien d'une particule chargée en champ magnétique prend la forme<sup>2</sup> :

$$H = \frac{1}{2}M\mathbf{v}^2, \quad (1)$$

avec les composantes de vitesse ( $i = x, y, z$ )

$$v_i = \frac{1}{M}(p_i - qA_i), \quad (2)$$

où le potentiel vecteur du champ magnétique est défini par  $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ . Nous noterons que la quantité de mouvement  $M\mathbf{v}$  diffère de l'impulsion.

On admet que le comportement *quantique* d'une particule sans spin de charge  $q$  et de masse  $M$  placée dans un champ magnétique  $\mathbf{B}$  est décrit par

$$\hat{H} = \frac{(\hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}))^2}{2M}.$$

On considère le cas d'un champ magnétique  $\mathbf{B}$  uniforme selon  $z$ . Nous proposons de justifier la forme de cet hamiltonien dans le cadre de la mécanique quantique en utilisant le théorème d'Ehrenfest. Nous introduirons la pulsation  $\omega_c = |q|B/M$ .

1. Par des considérations de symétrie, donner la direction de  $\mathbf{A}$ . Nous introduisons le potentiel  $\mathbf{A} = \frac{\mathbf{B} \times \hat{\mathbf{r}}}{2}$ . Montrer que ce choix donne une valeur correcte de  $\mathbf{B}$  (justifier physiquement le résultat).

Choisissons la jauge particulière  $(\mathbf{B} \times \hat{\mathbf{r}})/2 = (1/2)(-B\hat{y}, B\hat{x}, 0) = \mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}})$ . Nous pouvons alors vérifier que  $\nabla \times \mathbf{A} = (0, 0, B) = B\mathbf{e}_z$ . On peut ajouter à  $\mathbf{A}$  le gradient d'une fonction quelconque de  $\hat{\mathbf{r}}$  sans changer  $\mathbf{B}(\hat{\mathbf{r}})$  (voir fin de PC). Nous ferons un rappel de la physique classique pour justifier la direction de  $\mathbf{A}$  ainsi que ce choix de forme de  $\mathbf{A}$ .

2. Développer  $\hat{H}$ . Montrer que le terme linéaire en  $\mathbf{A}$  s'écrit  $-\gamma \hat{\mathbf{L}} \cdot \mathbf{B}$ , où  $\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}$ . Donner l'expression de  $\gamma$ .

---

1. Nous utilisons les définitions (internationales) du produit vectoriel  $\times = \wedge$   
 2. Une preuve sera donnée en note en fin de PC; voir aussi Livre

On peut développer  $\hat{H} = \hat{H}_{\parallel} + \hat{H}_{\perp}$  avec :

$$\begin{aligned}\hat{H}_{\parallel} &= \frac{1}{2M} (\hat{p}_z - q\hat{A}_z)^2 \\ \hat{H}_{\perp} &= \frac{1}{2M} ((\hat{p}_x - q\hat{A}_x)^2 + (\hat{p}_y - q\hat{A}_y)^2).\end{aligned}$$

Regardons maintenant la quantité :  $\hat{L}_z B$  avec la composante du moment cinétique orbital :

$$B\hat{L}_z = B(\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x) = B(-i\hbar\hat{x}\partial/\partial y + i\hbar\hat{y}\partial/\partial x).$$

Maintenant, regardons les termes linéaires en  $\mathbf{A}$  dans l'hamiltonien :

$$-\frac{q}{2M}(\hat{p}_x\hat{A}_x + \hat{A}_x\hat{p}_x) = -\frac{q}{M}\hat{p}_x\hat{A}_x = +\frac{q}{2M}B\hat{y}\hat{p}_x = -i\hbar\frac{q}{2M}B\hat{y}\partial/\partial x.$$

De la même manière, nous avons un autre terme en  $-(q/M)\hat{p}_y\hat{A}_y = -\frac{q}{2M}B\hat{x}\hat{p}_y = +i\hbar\frac{q}{2M}B\hat{x}\partial/\partial y$ . Nous obtenons alors  $\gamma = q/(2M)$  par analogie avec le moment magnétique  $\mu = \gamma\mathbf{L}$  (rappel PHY311, Amphi06).

3. On s'intéresse à la dynamique de la particule et plus particulièrement à l'évolution de  $\langle\hat{\mathbf{r}}\rangle$ . En utilisant le théorème d'Ehrenfest, montrer que  $\langle\hat{\mathbf{r}}\rangle$  obéit aux équations de la physique classique si nous introduisons l'opérateur vitesse  $\hat{\mathbf{v}} = (1/M)(\hat{\mathbf{p}} - q\hat{\mathbf{A}})$ .

**Indications** : on rappelle que pour toute observable  $\langle\hat{O}\rangle$  ne dépendant par explicitement du temps, on a

$$i\hbar\frac{d}{dt}\langle\hat{O}\rangle = \langle[\hat{O}, \hat{H}]\rangle.$$

Nous pouvons appliquer le théorème d'Ehrenfest :

$$i\hbar\frac{d}{dt}\langle\hat{\mathbf{r}}\rangle = \langle[\hat{\mathbf{r}}, \hat{H}]\rangle = \langle[\hat{\mathbf{r}}, \hat{H}_{\parallel} + \hat{H}_{\perp}]\rangle = \langle[\hat{x}\mathbf{e}_x + \hat{y}\mathbf{e}_y + \hat{z}\mathbf{e}_z, \hat{H}_{\parallel} + \hat{H}_{\perp}]\rangle.$$

Nous avons :

$$\langle[\hat{x}, \hat{H}_{\perp}]\rangle\mathbf{e}_x = -2\gamma(i\hbar)\langle\hat{A}_x\rangle\mathbf{e}_x + (i\hbar)\frac{(2\gamma)}{q}\langle\hat{p}_x\rangle\mathbf{e}_x.$$

En introduisant  $M\hat{v}_x = (\hat{p}_x - q\hat{A}_x)$ , cela donne :

$$\langle[\hat{x}, \hat{H}_{\perp}]\rangle\mathbf{e}_x = (i\hbar)\langle\hat{v}_x\rangle\mathbf{e}_x.$$

De la même manière :

$$\langle[\hat{y}, \hat{H}_{\perp}]\rangle\mathbf{e}_y = (i\hbar)\langle\hat{v}_y\rangle\mathbf{e}_y.$$

De même, dans la direction  $z$ . Nous retrouvons alors une analogie avec la physique classique (rappelée au début de la PC) :

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{\mathbf{r}}\rangle = \langle\hat{\mathbf{v}}\rangle.$$

4. Les trois composantes de la vitesse  $\hat{\mathbf{v}} = (1/M)(\hat{\mathbf{p}} - q\hat{\mathbf{A}})$  peuvent-elles être mesurées simultanément ? Calculer  $d\langle\hat{\mathbf{v}}\rangle/dt$ .

Evaluons :

$$i\hbar\frac{d}{dt}\langle\hat{\mathbf{v}}\rangle = \langle[\hat{\mathbf{v}}, \frac{M}{2}\hat{\mathbf{v}}^2]\rangle.$$

Regardons tout d'abord

$$\begin{aligned} [\hat{v}_x, \hat{v}_y] &= \frac{1}{M^2}[\hat{p}_x - q\hat{A}_x, \hat{p}_y - q\hat{A}_y] \\ &= -\frac{q}{M^2}[\hat{p}_x, \hat{A}_y] + \frac{q}{M^2}[\hat{p}_y, \hat{A}_x] = +\frac{iq\hbar B}{M^2}\hat{I}. \end{aligned}$$

Les opérateurs  $\hat{v}_x$  et  $\hat{v}_y$  ont un commutateur non nul : en appliquant le principe d'incertitude vu dans la PC01, nous en déduisons que nous ne pouvons pas connaître précisément simultanément la composante  $x$  de la vitesse ainsi que la composante  $y$ . Notons :

$$[\hat{v}_x, \hat{v}_z] = 0.$$

Nous obtenons de même :

$$[\hat{v}_x, \hat{v}_x^2 + \hat{v}_y^2 + \hat{v}_z^2] = \hat{v}_y[\hat{v}_x, \hat{v}_y] + [\hat{v}_x, \hat{v}_y]\hat{v}_y = 2\hat{v}_y[\hat{v}_x, \hat{v}_y] = \frac{2iq\hbar B}{M^2}\hat{v}_y.$$

Nous obtenons alors :

$$[\hat{v}_y, \hat{v}_x^2 + \hat{v}_y^2 + \hat{v}_z^2] = 2\hat{v}_x[\hat{v}_y, \hat{v}_x] = \frac{-2iq\hbar B}{M^2}\hat{v}_x.$$

Nous obtenons alors :

$$i\hbar\frac{d}{dt}\langle\hat{\mathbf{v}}\rangle = \frac{2iq\hbar B}{2M}\langle\hat{v}_y\rangle\mathbf{e}_x - \frac{2iq\hbar B}{2M}\langle\hat{v}_x\rangle\mathbf{e}_y.$$

Nous obtenons trois équations :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\langle\hat{v}_x\rangle &= \frac{qB}{M}\langle\hat{v}_y\rangle \\ \frac{d}{dt}\langle\hat{v}_y\rangle &= -\frac{qB}{M}\langle\hat{v}_x\rangle \\ \frac{d}{dt}\langle\hat{v}_z\rangle &= 0. \end{aligned}$$

Considérons par exemple le cas d'un electron où  $\omega_c = |qB/m|$  et  $q < 0$ . Cela donne :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\langle\hat{v}_x\rangle &= -\omega_c\langle\hat{v}_y\rangle \\ \frac{d}{dt}\langle\hat{v}_y\rangle &= \omega_c\langle\hat{v}_x\rangle \\ \frac{d}{dt}\langle\hat{v}_z\rangle &= 0. \end{aligned}$$

5. Faire une analogie avec la physique classique.

Ces équations sont les analogues quantiques des équations de Newton dues à la force de Lorentz :

$$\begin{aligned} M\ddot{x} &= -|q|B\dot{y} \\ M\ddot{y} &= |q|B\dot{x}. \end{aligned}$$

La solution de telles équations est :

$$M\ddot{x} = -|q|B\dot{y} = -|q|B\omega_c x.$$

ou :

$$\ddot{x} = -\omega_c^2 x.$$

Nous obtenons  $x(t) = (A/\omega_c) \cos(\omega_c t + \delta)$  et  $y(t) = (A/\omega_c) \sin(\omega_c t + \delta)$  ou  $\delta$  est une phase arbitraire et comme dans la PC  $\omega_c = |q|B/m$ . Le mouvement dans le plan XY est un mouvement circulaire.

De la question précédente, nous arrivons (bien) à l'équation d'un cercle :

$$\langle \hat{v}_x \rangle^2 + \langle \hat{v}_y \rangle^2 = \text{constante}.$$

6. Montrer que la solution aux valeurs propres de l'énergie donne  $E_{tot} = E_{\perp} + (\hbar k_z)^2 / 2M$  avec

$$E_{\perp} = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c.$$

**Indications** : Pour la partie transverse dans le plan XY, on cherchera à faire une analogie avec l'oscillateur harmonique unidimensionnel, en choisissant la jauge dite de Landau :  $\mathbf{A} = Bx\mathbf{e}_y$  et  $\mathbf{e}_y$  est le vecteur unitaire suivant la direction  $Oy$ . Nous chercherons une fonction d'onde de la forme  $\psi(x, y) = \exp(ik_y y)X(x)$ .

Nous avons

$$\hat{H}_{\parallel} = \frac{\hat{p}_z^2}{2M}.$$

La solution le long de l'axe  $z$  est une solution d'onde plane. La fonction d'onde prend la forme  $\psi(x, y, z) = \phi(z)\chi(x, y)$  avec  $\phi(z) \propto \exp(ik_z z)$ . L'énergie propre prend la forme  $E_{tot} = E_{\perp} + E_{\parallel}$  avec

$$E_{\parallel} = \frac{(\hbar k_z)^2}{2M}.$$

Etudions maintenant le spectre d'énergie dans la direction transverse

$$\hat{H}_{\perp} = \frac{1}{2}M\hat{v}_x^2 + \frac{1}{2}M\hat{v}_y^2.$$

En choisissant la jauge de Landau  $\mathbf{A} = (0, Bx, 0)$  nous pouvons ré-écrire :

$$\hat{H}_{\perp} = \frac{1}{2M}\hat{p}_x^2 + \frac{1}{2M}(\hat{p}_y - qB\hat{x})^2.$$

Nous pouvons faire une analogie simple avec l'oscillateur harmonique unidimensionnel. Posons :

$$\begin{aligned} \hat{p}'_x &= \hat{p}_x \\ \hat{x}' &= \hat{x} - \frac{\hat{p}_y}{qB}, \end{aligned}$$

tel que

$$[\hat{x}', \hat{p}'_x] = i\hbar \hat{I}.$$

$\hat{p}_y$  commute avec l'hamiltonien ; la définition de  $\hat{x}'$  correspond alors à un changement de variables de la coordonnée  $x$ .

Nous obtenons alors :

$$\hat{H}_\perp = \frac{1}{2M}\hat{p}_x'^2 + \frac{1}{2M}(qB)^2\hat{x}'^2.$$

L'hamiltonien de l'oscillateur harmonique unidimensionnel est :

$$\hat{H}_\perp = \frac{1}{2M}\hat{p}_x'^2 + \frac{1}{2}M\omega^2\hat{x}'^2.$$

Nous identifions donc la pulsation de l'oscillateur :

$$\omega = \omega_c = \frac{|q|B}{M}.$$

Par analogie avec l'oscillateur harmonique, nous en déduisons alors :

$$E_{tot} = \frac{(\hbar k_z)^2}{2M} + \hbar\omega_c \left( n + \frac{1}{2} \right).$$

Nous donnerons une interprétation physique de ces niveaux de L. Landau et de leur dégénérescence (jolie démonstration, analogie avec atome d'hydrogène)

Notons que  $[\hat{H}, \hat{p}_y] = 0$ , donc

$$\chi(x, y) = \exp(ik_y y)X(x).$$

## 7. Considérons la transformation de jauge

$$\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla\chi(\mathbf{r}, t) \quad \Phi'(\mathbf{r}, t) = \Phi(\mathbf{r}, t) - \frac{\partial\chi}{\partial t}$$

où  $\chi(\mathbf{r}, t)$  est une fonction arbitraire, correspondant aux mêmes champs électrique et magnétique et  $\Phi$  est le potentiel électrique. En présence d'un champ électrique, l'hamiltonien a un terme supplémentaire  $q\Phi$ . Vérifier que la transformation ne modifie pas la probabilité de présence de la particule en un point  $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$ .

En présence d'un potentiel électrique

$$\hat{H} = \frac{(\hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}))^2}{2M} + q\Phi.$$

Une transformation unitaire satisfait  $\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}$ , tel que  $|\psi'\rangle = \hat{U}|\psi\rangle$  et  $\hat{Q}' = \hat{U}\hat{Q}\hat{U}^{-1}$  tel que :

$$\langle\psi'|\hat{Q}'|\psi'\rangle = \langle\psi|\hat{Q}|\psi\rangle.$$

Les valeurs moyennes restent inchangées par transformation unitaire.

Concernant la question de l'invariance de jauge, choisissons la fonction d'onde modifiée sous la forme :

$$\psi'(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}, t) \exp(if),$$

où  $f$  est une fonction à déterminer de  $\hat{\mathbf{r}}$ . Sous une modification du choix de jauge :

$$i\hbar\frac{\partial\psi'}{\partial t} = \frac{1}{2M}(-i\hbar\nabla - q\mathbf{A}')^2\psi' + q\Phi'\psi'.$$

Nous voulons montrer que  $f$  existe.

Nous avons

$$i\hbar\frac{\partial\psi'}{\partial t} = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} \exp(if) + i\hbar\psi i\frac{\partial f}{\partial t} \exp(if).$$

De plus,

$$\frac{1}{2M}(-i\hbar\nabla - q\mathbf{A}')\psi' = \frac{1}{2M} \exp(if)[-i\hbar\nabla - q\mathbf{A} - q\nabla\chi(\mathbf{r}, t)]\psi(\mathbf{r}, t) - \frac{i\hbar}{2M} \nabla(if)\psi(\mathbf{r}, t) \exp(if).$$

Nous constatons alors que le choix

$$q\chi(\mathbf{r}, t) = f\hbar$$

est judicieux (il est aussi en accord avec la définition de  $\Phi'$ ). Nous vérifions par exemple que

$$\psi'^*(\hat{\mathbf{p}} - q\hat{\mathbf{A}}')\psi' = \psi^*(\hat{\mathbf{p}} - q\hat{\mathbf{A}})\psi.$$

La transformation conserve aussi la probabilité de présence en un point. Plus précisément, dans ce cas :

$$|\psi'\rangle = \exp(iq\chi(\mathbf{r}, t)/\hbar)|\psi\rangle.$$

Nous introduirons l'effet Aharonov-Bohm comme application si le temps le permet.

Rappel : Théorème d'Ehrenfest

Considérons une observable  $\widehat{O}$  qui peut éventuellement dépendre du temps  $t$  et un état du système  $|\psi(t)\rangle$  régi par l'équation de Schrödinger pour l'hamiltonien  $\widehat{H}$ . Alors :

$$\frac{d\langle\widehat{O}\rangle}{dt} = -\frac{i}{\hbar}\langle\psi|[\widehat{O}, \widehat{H}]|\psi\rangle + \langle\psi|\frac{\partial\widehat{O}}{\partial t}|\psi\rangle.$$

Dans le cas où  $\widehat{O}$  ne dépend pas du temps,  $\partial\widehat{O}/\partial t = 0$ .

**Preuve** :

Puisque  $\langle O \rangle = \langle\psi|\widehat{O}|\psi\rangle$ , nous avons :

$$\frac{d\langle\widehat{O}\rangle}{dt} = \frac{d}{dt}\langle\psi|\widehat{O}|\psi\rangle + \langle\psi|\frac{\partial\widehat{O}}{\partial t}|\psi\rangle + \langle\psi|\widehat{O}\frac{d|\psi\rangle}{dt}.$$

En appliquant l'équation de Schrödinger dépendante du temps,

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{d|\psi\rangle}{dt} &= \widehat{H}|\psi\rangle \\ -i\hbar\frac{d\langle\psi|}{dt} &= \langle\psi|\widehat{H}, \end{aligned}$$

cela donne :

$$\begin{aligned} \frac{d\langle\widehat{O}\rangle}{dt} &= \frac{i}{\hbar}\langle\psi|\widehat{H}\widehat{O}|\psi\rangle + \langle\psi|\frac{\partial\widehat{O}}{\partial t}|\psi\rangle - \frac{i}{\hbar}\langle\psi|\widehat{O}\widehat{H}|\psi\rangle \\ &= -\frac{i}{\hbar}\langle\psi|[\widehat{O}, \widehat{H}]|\psi\rangle + \left\langle\frac{\partial\widehat{O}}{\partial t}\right\rangle. \end{aligned}$$

On remarque que ce qui gouverne la dépendance temporelle de grandeurs physiques est l'hamiltonien, ici associé au symbole du commutateur. Dans le cas où  $\widehat{O}$  ne dépend pas du temps, nous obtenons :

$$\frac{d\langle\widehat{O}\rangle}{dt} = -\frac{i}{\hbar}\langle\psi|[\widehat{O}, \widehat{H}]|\psi\rangle.$$

## Supplément: Hamiltonien classique d'une particule chargée en champ magnétique

Page 153 du livre, chapitre 15

Considérons les équations de Newton d'un électron de charge  $q = -|q| < 0$  se déplaçant à deux dimensions, sous l'influence de la force de Lorentz  $-|q|\mathbf{v} \times \mathbf{B}$  due à l'application d'un champ magnétique  $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$ .

Nous obtenons les équations:

$$\begin{aligned} M\ddot{x} &= -|q|B\dot{y} \\ M\ddot{y} &= |q|B\dot{x}. \end{aligned} \quad (1)$$

La solution de telles équations est:

$$M\ddot{x} = -|q|B\dot{y} = -|q|B\omega_c x. \quad (2)$$

ou:

$$\ddot{x} = -\omega_c^2 x. \quad (3)$$

Nous obtenons  $x(t) = (A/\omega_c) \cos(\omega_c t + \delta)$  et  $y(t) = (A/\omega_c) \sin(\omega_c t + \delta)$  ou  $\delta$  est une phase arbitraire et comme dans la PC  $\omega_c = |q|B/m$ . Le mouvement dans le plan XY est un mouvement circulaire.

Nous pouvons définir un Lagrangien (équation 15.8 du livre):

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial v_i} \right) - \frac{\partial L}{\partial x_i} = 0, \quad (4)$$

$\mathbf{v} = d\mathbf{r}/dt = (v_1, v_2) = (v_x, v_y)$  et  $\mathbf{r} = (x_1, x_2) = (x, y)$ , tel que les équations (1) soient satisfaites. Ici, cela donne:

$$L = \frac{M\mathbf{v}^2}{2} - |q|\mathbf{v} \cdot \mathbf{A}. \quad (5)$$

Nous pouvons vérifier en utilisant par exemple les jauges symétrique  $\mathbf{A} = (-By/2, Bx/2, 0)$  et de Landau  $\mathbf{A} = (0, Bx, 0)$ , que nous retrouvons bien les équations (1). Ceci est en fait plus général et provient de  $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ .

L'impulsion (généralisée) est définie comme

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial v_i} = Mv_i - |q|A_i. \quad (6)$$

L'Hamiltonien pour une particule dans un champ magnétique est donc de la forme

$$H = \mathbf{v} \cdot \mathbf{p} - L = \sum_i v_i (Mv_i - |q|A_i) - \frac{1}{2}M \sum_i v_i^2 + |q| \sum_i v_i A_i = \frac{1}{2}M\mathbf{v}^2. \quad (7)$$

En utilisant l'Equation (6), avec ici  $q = -|q|$ :

$$H = \frac{1}{2M} (\mathbf{p} + |q|\mathbf{A})^2. \quad (8)$$

L'équation (6) est aussi importante car elle démontre le lien entre vitesse et l'impulsion:

$$v_i = \frac{1}{M} (p_i + |q|A_i), \quad (9)$$

discuté dans le cas quantique dans la PC. Nous vérifions que la quantité de mouvement  $M\mathbf{v}$  diffère de l'impulsion.

## Question 06: Signification?

Partons d'un électron avec une charge  $q=-e$

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2m} (\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A})^2 \\ &= \frac{1}{2m} (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + 2eBx\hat{p}_y + (eB)^2 x^2) \end{aligned}$$

Notez que:  $[H, \hat{p}_y] = 0$

Les fonctions propres sont de la forme:  $\psi(x, y) = e^{ik_y y} X(x)$

$$\frac{1}{2m} \left( -\hbar^2 \nabla^2 + (eB)^2 \left( x + \frac{\hbar k_y}{eB} \right)^2 \right) X = EX$$

Nous obtenons la solution d'un oscillateur harmonique unidimensionnel où la position  $X$  est « déplacée » de la quantité

$$x_0 = \hbar k_y / eB$$

$$\psi(x, y) = e^{ik_y y} u_n(x + x_0) = e^{ieBx_0 y / \hbar} u_n(x + x_0)$$

$u_n$  sont les fonctions propres de l'oscillateur harmonique unidimensionnel.

$$\omega = \frac{eB}{m}$$

Pulsation cyclotron =  
Fréquence de l'oscillateur

# L'Énergie prend la Forme

$$E_{tot} = \frac{(\hbar k_z)^2}{2M} + \hbar\omega_c \left( n + \frac{1}{2} \right)$$

Par analogie avec les orbites de N. Bohr, les niveaux de Landau sont quantifiés.

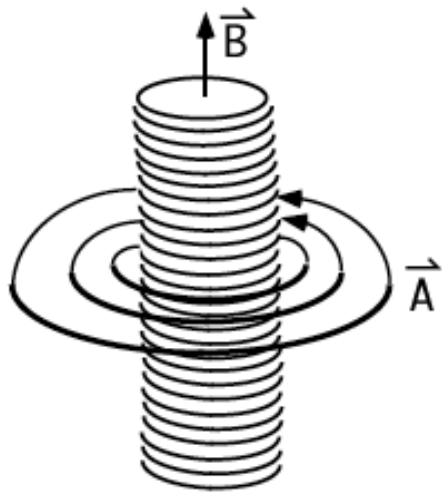
**QUESTION: Dégénérescence d'un niveau n? Que représente n?**

En utilisant les « conditions de bords » du système (PC03 intro - tableau) , la dégénérescence d'un niveau n est

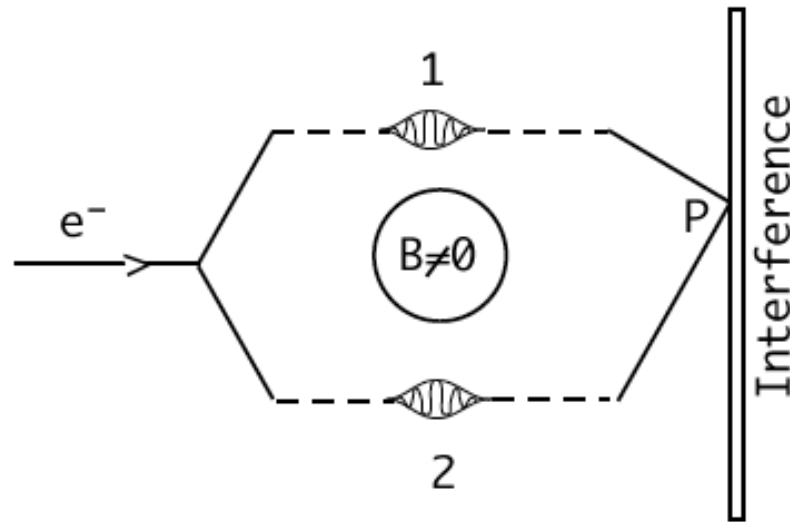
$$\nu_{max} = \frac{L_x L_y}{2\pi \ell_B^2} \quad \ell_B = \sqrt{\frac{\hbar}{eB}}$$

**POSEZ CETTE QUESTION A LA CLASSE... (voir reaction):  
Mesurez  $\nu$  (expériences de Hall quantiques: 2 prix Nobel)**

# Effet Aharonov-Bohm



Infinite solenoid



Aharonov-Bohm expt.

2 choix possibles de chemins:

$$\psi = \psi^1 + \psi^2$$

$$\psi^\alpha = \psi_0^\alpha e^{iS_\alpha/\hbar}$$

Le point important est que sur un chemin fermé

$$\Delta\varphi = S_1(P)/\hbar - S_2/\hbar = \frac{-e}{\hbar} \oint_{\text{whole path}} \mathbf{A}(\mathbf{r}') \cdot d\mathbf{r}'$$

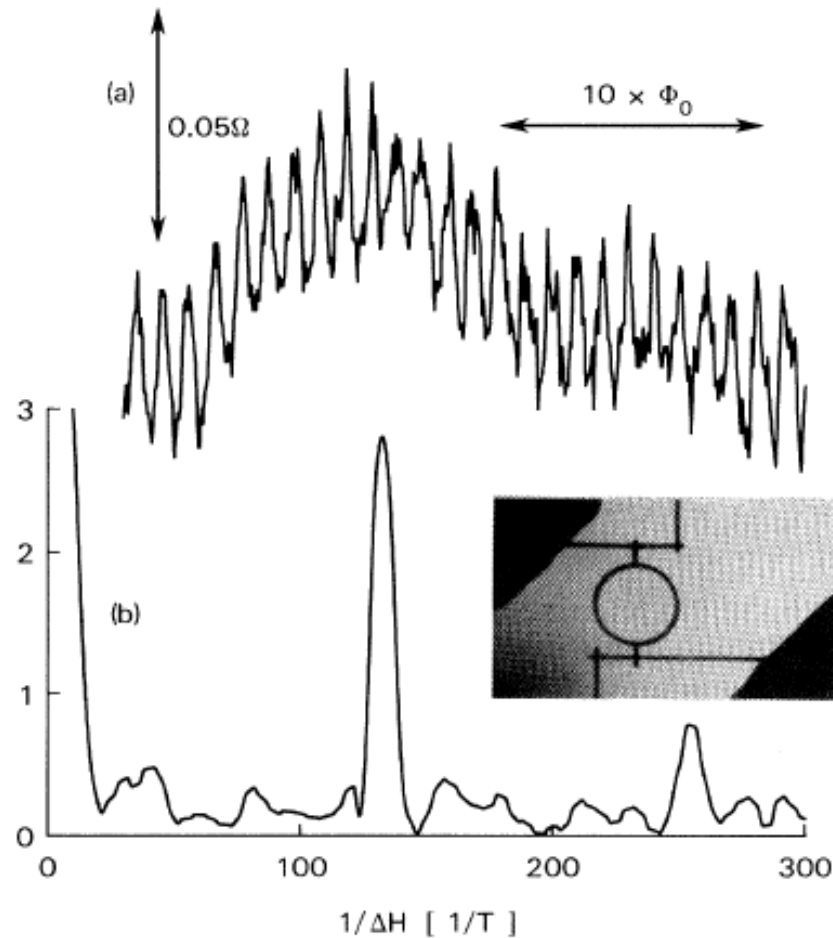
En appliquant le théorème de Stokes:

$$\begin{aligned} \frac{-e}{\hbar} \oint_{\text{whole path}} \mathbf{A}(\mathbf{r}') \cdot d\mathbf{r}' &= \frac{-e}{\hbar} \int_{\text{area encl.}} d\mathbf{a} \cdot \nabla \times \mathbf{A} \\ &= \frac{-e}{\hbar} \int_{\text{area encl.}} d\mathbf{a} \cdot \mathbf{B} \\ &= \frac{-e}{\hbar} \Phi \text{ (flux thru solenoid)} \end{aligned}$$

**La probabilité de présence sur l'écran au point  $\mathbf{r}$  au temps  $t$  présente des interférences:**

$$|\psi(\vec{r}, t)|^2 = |\psi_1(\vec{r}, t)|^2 + |\psi_2(\vec{r}, t)|^2 + 2|\psi_1(\vec{r}, t)||\psi_2(\vec{r}, t)| \cos(2\pi e\Phi/h)$$

# Expériences



## Observation of $h/e$ Aharonov-Bohm Oscillations in Normal-Metal Rings

R. A. Webb, S. Washburn, C. P. Umbach, and R. B. Laibowitz  
*IBM Thomas J. Watson Research Center, Yorktown Heights, New York 10598*  
(Received 27 March 1985)

## Observation of $h/e$ Aharonov-Bohm Oscillations in Normal-Metal Rings

R. A. Webb, S. Washburn, C. P. Umbach, and R. B. Laibowitz  
*IBM Thomas J. Watson Research Center, Yorktown Heights, New York 10598*  
 (Received 27 March 1985)

Magnetoresistance oscillations periodic with respect to the flux  $h/e$  have been observed in submicron-diameter Au rings, along with weaker  $h/2e$  oscillations. The  $h/e$  oscillations persist to very large magnetic fields. The background structure in the magnetoresistance was *not* symmetric about zero field. The temperature dependence of both the amplitude of the oscillations and the background are consistent with the recent theory by Stone.

PACS numbers: 72.15.Gd, 72.90.+y, 73.60.Dt

Electron wave packets circling a magnetic flux should exhibit the phase shift introduced by the magnetic vector potential  $\mathbf{A}$ .<sup>1</sup> In a metallic ring, small enough so that the electron states are not randomized by inelastic (or magnetic) scattering during the traversal of the arm of the ring, an interference pattern should be present in the magnetoresistance of the device.<sup>2</sup> Electrons traveling along one arm will acquire a phase change  $\delta_1$ , and electrons in the other arm will, in general, suffer a different phase change  $\delta_2$ . Changing the magnetic flux encircled by the ring will tune the phase change along one arm of the ring by a well-defined amount  $\delta_B = (e/\hbar) \int \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l}$  and by  $-\delta_B$  along the other arm. The phase tuning should appear as cycles of destructive and constructive interference of the wave packets, the period of the cycle being  $\Phi_0 = h/e$ . This interference should be reflected in the transport properties of the ring as described by Landauer's formula.<sup>2-4</sup> In this Letter, we describe the first experimental observation of the oscillations periodic with respect to  $\Phi_0$  in the magnetoresistance of a normal-metal ring.

Interference effects involving the flux  $h/e$  have been previously observed in a two-slit interference experiment involving coherent beams of electrons.<sup>5</sup> Magnetoresistance oscillations in single-crystal whiskers of bismuth periodic in  $h/e$  have been reported at low fields for the case where the extremum of the Fermi surface is cut off by the sample diameter.<sup>6</sup> Resistance oscillations of period  $h/2e$  (flux quantization) have been seen in superconducting cylinders.<sup>7</sup> Four years ago, magnetoresistance oscillations of period  $\frac{1}{2}\Phi_0$  were predicted on the basis of weak localization in multiply connected devices.<sup>8</sup> This is the same flux period as observed in superconductors, because of the similarity between the superconductor pairing and the "self-interference" described by the theory of weak localization.<sup>9</sup> Since the first experiment by Sharvin and Sharvin,<sup>10</sup> there have been several observations of the superconducting flux period  $\frac{1}{2}\Phi_0$  in normal-metal cylinders and networks of loops.<sup>11</sup> To date, there have been no observations of the one-electron flux period  $\Phi_0$ , and its existence is controversial. Several recent theoretical papers have argued that the  $h/e$  period will

be present in strictly one-dimensional rings,<sup>2</sup> and even in rings composed of wires with finite width.<sup>4</sup> Others have claimed that only  $h/2e$  oscillations will be observed regardless of device size and topology.<sup>12</sup>

Theoretical work which relies upon ensemble-averaging techniques has uniformly predicted  $h/2e$  oscillations<sup>8,12</sup>; calculations of the conductance exclusive of the averaging have predicted  $h/e$  oscillations as well.<sup>2,4</sup> The difference between a single ring and a network of rings or a long cylinder is, therefore, crucial. The network of many rings and the long cylinder extend much farther than the distance  $[L_\phi = (D\tau_\phi)^{1/2}]$ , where  $D$  is the diffusion constant and  $\tau_\phi$  is the time between phase-breaking collisions] that the electron travels before randomly changing its phase. For this reason, it is believed that samples much longer than  $L_\phi$  physically incorporate the ensemble averaging.<sup>4,13</sup> Each section (longer than  $L_\phi$ ) of a macroscopic sample is quantum-mechanically independent because the electron states are randomized between the sections. The single mesoscopic ring (diameter  $< L_\phi$ ) does not average in this way because the entire sample is quantum-mechanically coherent.<sup>4,13</sup>

There exists a further complication in normal metals; the magnetic flux penetrates the wires composing the device. Stone<sup>14</sup> has shown that the flux in the wire leads to an *aperiodic* fluctuation in the magnetoresistance. This fluctuation was the main complication in interpreting the earlier experiments<sup>15</sup> where the diameter of the ring was not much larger than the widths of the wires. On the basis of the analysis, a prediction was made that, in a ring having an area much larger than the area covered by the wires, the oscillations would be clearly observed, since the period would then be much smaller than the field scale of the fluctuations.

With this in mind, we constructed several devices each containing a single loop or a lone wire. The samples were drawn with a scanning transmission electron microscope (STEM) on a polycrystalline gold film 38 nm thick having a resistivity  $\rho \approx 5 \mu\Omega \cdot \text{cm}$  at  $T = 4$  K. The fabrication process has been described previously.<sup>16</sup> A photograph of the larger ring is shown in Fig. 1. Here we will describe the results from two of the

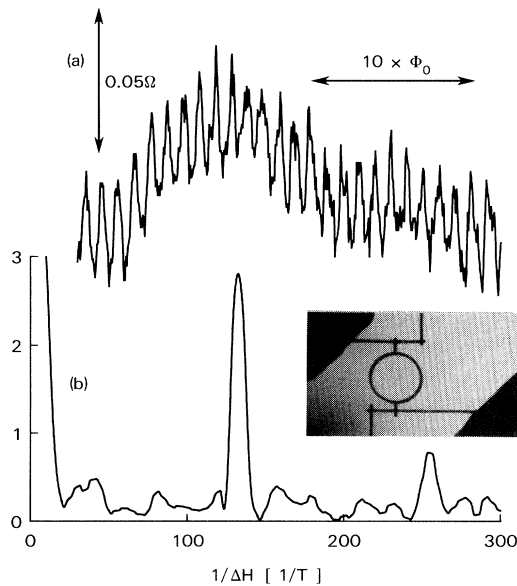


FIG. 1. (a) Magnetoresistance of the ring measured at  $T=0.01$  K. (b) Fourier power spectrum in arbitrary units containing peaks at  $h/e$  and  $h/2e$ . The inset is a photograph of the larger ring. The inside diameter of the loop is 784 nm, and the width of the wires is 41 nm.

rings (average diameters 825 and 245 nm) and a lone wire (length 300 nm). The samples were cooled in the mixing chamber of a dilution refrigerator, and the resistance was measured with a four-probe bridge operated at 205 Hz and 200 nA (rms).

Typical magnetoresistance data from the larger-diameter ring are displayed in Fig. 1(a). Periodic oscillations are clearly visible superimposed on a more slowly varying background. The period of the high-frequency oscillations is  $\Delta H = 0.00759$  T. This period corresponds to the addition of the flux  $\Phi_0 = h/e$  to the area of the hole. From the average area (one half of the sum of the area from the inside diameter and that from the outside diameter) measured with the STEM,  $\Phi_0 = 0.00780$  T. The area measurement is accurate to within  $\approx 10\%$ . As a result of the large aspect ratio, we can say unequivocally that the periodic oscillations are *not* consistent with  $h/2e$ . They are certainly the single-electron process predicted recently.<sup>2,4</sup> In the Fourier power spectrum [Fig. 1(b)] of these data, two peaks are visible at  $1/\Delta H = 131$  and  $260$   $T^{-1}$  corresponding respectively to  $h/e$  and  $h/2e$ . (Since the  $h/e$  oscillations are not strictly sinusoidal, we cannot be certain whether the  $h/2e$  peak is the self-interference process or harmonic content in the  $\Phi_0$  oscillations.) That the  $h/2e$  period is less significant than the  $h/e$  period is consistent with the theory for rings which are moderately resistive.<sup>4</sup> We note that the amplitude of the  $h/e$  oscillations at the lowest temperatures is about 0.1% of the resistance at  $H=0$ , at least a factor of 10

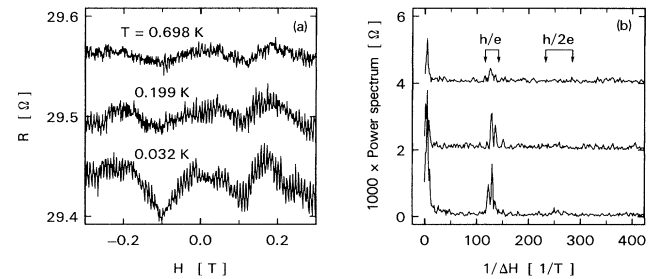


FIG. 2. (a) Magnetoresistance data from the ring in Fig. 1 at several temperatures. (b) The Fourier transform of the data in (a). The data at 0.199 and 0.698 K have been offset for clarity of display. The markers at the top of the figure indicate the bounds for the flux periods  $h/e$  and  $h/2e$  based on the measured inside and outside diameters of the loop.

larger than the oscillations observed in normal-metal cylinders and networks of loops.<sup>8,10,11</sup>

Figure 2(a) contains resistance data for three temperatures over a larger range of magnetic field. Surprisingly, the oscillations persist to rather higher magnetic field [ $H > 8$  T (our largest available field) or over 1000 periods] than expected from estimates which assumed that the phase difference between the inside edge of the ring and the outside edge should completely destroy the periodic effects. The argument that the flux in the metal should destroy the oscillations relies on the simple assumption that the wire consists of parallel but noninteracting conduction paths. If instead the electron path in the wire is sufficiently erratic to "cover" the whole area of the wire, then no phase difference exists between the inside diameter and the outside diameter.<sup>17</sup>

Figure 2(b) contains the Fourier spectra of the data in Fig. 2(a). Again, the fundamental  $h/e$  period appears as the large peak at  $1/\Delta H = 131$   $T^{-1}$ , and near  $1/\Delta H = 260$   $T^{-1}$  there is a small feature in the spectrum. There is also a peak near  $5$   $T^{-1}$  which is the average field scale of the aperiodic fluctuations.<sup>14</sup> The detailed structure of the  $h/e$  peak in the power spectrum is probably the results of mixing of the field scales corresponding to the area of the hole in the ring and the area of the arms of the ring.<sup>18</sup> (The simple difference between inside and outside area implies a splitting of more than  $20$   $T^{-1}$ , whereas the observed splitting in the peak structure has never been more than  $7$   $T^{-1}$ .) A simple extension of the multichannel Landauer formula for a ring with flux piercing the arms implies that the Aharonov-Bohm oscillations will be modulated by an aperiodic function.<sup>18</sup> Roughly speaking, the field scale in which the aperiodic function fluctuates is that for the addition of another flux quantum to the arms of the ring. The field scale of the modulating function mixes with the Aharonov-Bohm period to give structure to the peak. As seen in Fig.

2(b), the splitting of the  $h/e$  peak is about the same as the field scale of the aperiodic fluctuations. The same interference effects within the arms which cause the random background fluctuations result in the amplitude modulation of the  $h/e$  oscillations seen in Fig. 2(a).

As previously reported, at the lowest temperatures, the magnetoresistance is *not* symmetric about the point  $H=0$ . Furthermore, no constant offset in the magnetic field axis can account for the asymmetry. As the temperature increases, the asymmetry becomes less pronounced. In particular, in the range  $-0.1 \text{ T} < H < 0.1 \text{ T}$ , the data are nearly symmetric at  $T=0.7 \text{ K}$ . Büttiker and Imry have shown that the asymmetry is consistent with the multichannel Landauer formula.<sup>19</sup>

Measurements on a ring with a smaller aspect ratio (inside diameter of 208 nm and wire width of 37 nm) were also performed, and a typical power spectrum is shown in Fig. 3. The presence of Aharonov-Bohm oscillations was not immediately obvious against the background of aperiodic fluctuations.<sup>15</sup> Comparison of the ring spectrum to that of a lone wire (having approximately the same area as an arm of the ring) makes the presence of the Aharonov-Bohm oscillations clear. The power spectrum of the wire contains no peaks at  $1/\Delta H \geq 7 \text{ T}^{-1}$  whereas the ring spectrum contains several peaks between 8 and  $30 \text{ T}^{-1}$ . The field scale for interference among paths within one of the arms is given by the spectrum of the wire,<sup>14</sup> and the peaks between  $8 < 1/\Delta H < 30 \text{ T}^{-1}$  are the signature of the Aharonov-Bohm effect in the ring. The existence of several peaks in this range is consistent with the arguments made earlier about the mixing. The splittings are relatively larger here because the area of the hole and the area of the wires are not very

different.

As the temperature increases, all of the magnetoresistance fluctuations shrink. As shown previously,<sup>14,15</sup> the amplitudes  $P$  of the aperiodic fluctuations are governed roughly by  $P \propto T^{-1/2}$ . All of the states within  $k_B T$  of the Fermi energy contribute independently to the aperiodic fluctuations, and the amplitude of the fluctuations decreases as  $T^{-1/2}$  because of this temperature averaging.<sup>14</sup> We emphasize that this is *not* the usual temperature dependence seen in quasi-one-dimensional, macroscopic samples which results from the temperature dependence of  $L_\phi$ . The  $h/e$  peak amplitude also appears to be consistent with the  $T^{-1/2}$  temperature dependence. In fact, all of the peaks in the Fourier spectrum (including data reported previously<sup>14</sup>) are consistent with  $T^{-1/2}$  for  $0.05 \text{ K} < T < 0.7 \text{ K}$ .

To summarize, we have made the first observation of the normal-metal flux period  $h/e$  in very small, single loops of gold. In contrast to expectations, the oscillations persist to very high magnetic fields apparently without attenuation. Evidence was also found for oscillations of period  $h/2e$ . The detailed structure of the Fourier spectra indicates the importance of the physics of the wires.

The authors are indebted to M. Büttiker, Y. Imry, R. Landauer, D. Stone, and N. Shiren for many helpful suggestions and discussions of the theory. In particular, Y. Imry has been instrumental in both the theoretical and the experimental efforts in this field at IBM. D. Stone, through his important work on the physics of small wires in a magnetic field, proved to us that the larger-diameter ring was worth studying. We are grateful to M. Büttiker for clarifying the role of the contacts to the ring. We are also grateful to R. Koch and A. Broers for discussions and for help in developing the small samples.

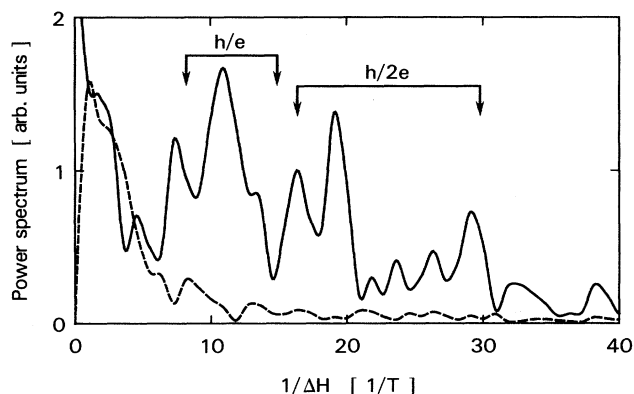


FIG. 3. Fourier transform of data from a smaller-diameter ring (solid line) and from a wire 3000 Å long by 300 Å wide (dashed line) over the range  $0 < H < 1.1 \text{ T}$ . The markers at the top indicate the  $h/e$  and the  $h/2e$  periods for the inside and outside diameters of the ring.

<sup>1</sup>Y. Aharonov and D. Bohm, Phys. Rev. 115, 485 (1959).

<sup>2</sup>M. Büttiker, Y. Imry, and R. Landauer, Phys. Lett. 96A, 365 (1983); Y. Gefen, Y. Imry, and M. Ya. Azbel', Surf. Sci. 142, 203 (1984), and Phys. Rev. Lett. 52, 129 (1984); M. Büttiker, Y. Imry, and M. Ya. Azbel', Phys. Rev. A 30, 1982 (1984).

<sup>3</sup>R. Landauer, IBM J. Res. Dev. 1, 223 (1957).

<sup>4</sup>M. Büttiker, Y. Imry, R. Landauer, and S. Pinhas, Phys. Rev. B 31, 6207 (1985).

<sup>5</sup>R. G. Chambers, Phys. Rev. Lett. 5, 3 (1960); A. Tomomura *et al.*, Phys. Rev. Lett. 48, 1443 (1982).

<sup>6</sup>N. B. Brandt *et al.*, Fiz. Nisk. Temp. 8, 718 (1982) [Sov. J. Low Temp. Phys. 8, 358 (1982)], and references cited therein.

<sup>7</sup>W. A. Little and R. Parks, Phys. Rev. A 133, 2820 (1964).

<sup>8</sup>B. L. Al'tshuler, A. G. Arnov, and B. Z. Spivak, Pis'ma

Zh. Teor. Eksp. Fiz. **33**, 101 (1981) [JETP Lett. **33**, 94 (1981)].

<sup>9</sup>G. Bergmann, Phys. Rep. **107**, 1 (1984).

<sup>10</sup>D. Yu. Sharvin and Yu. V. Sharvin, Pis'ma Zh. Teor. Eksp. Fiz. **34**, 285 (1981) [JETP Lett. **34**, 272 (1981)].

<sup>11</sup>B. L. Al'tshuler *et al.*, Pis'ma Zh. Eksp. Fiz. **35**, 476 (1982) [JETP Lett. **35**, 475 (1982)]; F. R. Ladan and J. Maurer, C. R. Acad. Sci. **297**, 227 (1983); M. Gijs, C. van Haesendonck, and Y. Bruynseraede, Phys. Rev. Lett. **52**, 2069 (1984), and Phys. Rev. B **30**, 2964 (1984); B. Pan-netier, J. Chaussy, R. Rammal, and P. Gandit, Phys. Rev. Lett. **53**, 718 (1984), and Phys. Rev. B **31**, 3209 (1985); Yu. V. Sharvin, Physica (Amsterdam) **126B**, 288 (1984); J. M. Gordon, Phys. Rev. B **30**, 6770 (1984); G. J. Dolan, Bull. Am. Phys. Soc. **30**, 395 (1985).

<sup>12</sup>J. P. Carini, K. A. Muttalib, and S. R. Nagel, Phys. Rev. Lett. **53**, 102 (1984); D. A. Browne, J. P. Carini, K. A. Mut-

talib, S. R. Nagel, Phys. Rev. B **30**, 6798 (1984).

<sup>13</sup>Y. Gefen, Y. Imry, and M. Büttiker, private communication.

<sup>14</sup>A. D. Stone, preceding Letter [Phys. Rev. Lett. **54**, 2692 (1985)].

<sup>15</sup>R. A. Webb, S. Washburn, C. P. Umbach, and R. B. Laibowitz, in *Localization, Interaction, and Transport Phenomena in Impure Metals*, edited by G. Bergmann, Y. Bruynseraede, and B. Kramer (Springer-Verlag, New York, 1984), p. 121; C. P. Umbach, S. Washburn, R. B. Laibowitz, and R. A. Webb, Phys. Rev. B **30**, 4048 (1984).

<sup>16</sup>R. B. Laibowitz and A. N. Broers, in *Treatise on Materials Science, Vol. 24*, edited by K. N. Tu and R. Rosenberg (Academic, New York, 1982), p. 285.

<sup>17</sup>We thank R. Landauer for pointing this out to us.

<sup>18</sup>A. D. Stone, to be published.

<sup>19</sup>M. Büttiker and Y. Imry, J. Phys. C **18**, 1467 (1985).

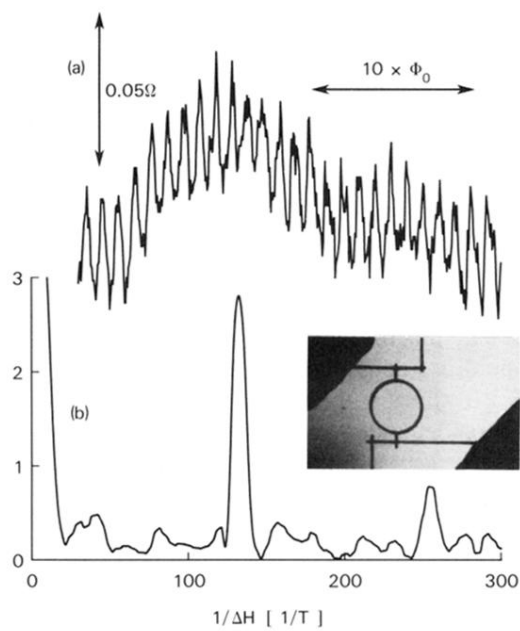


FIG. 1. (a) Magnetoresistance of the ring measured at  $T=0.01$  K. (b) Fourier power spectrum in arbitrary units containing peaks at  $h/e$  and  $h/2e$ . The inset is a photograph of the larger ring. The inside diameter of the loop is 784 nm, and the width of the wires is 41 nm.

## PC03, Phys 430 - Physique Quantique Avancée

Karyn Le Hur, karyn.le-hur@polytechnique.edu

Groupes 03/10

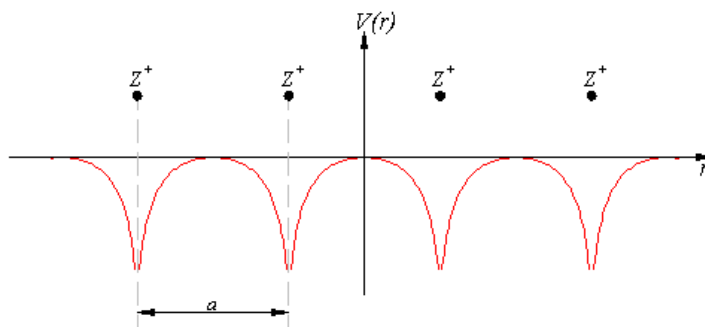
15 Septembre 2015

## Electrons Presque Libres et Théorème de Bloch

On s'intéresse dans cet exercice à un modèle de cristal unidimensionnel comme celui vu lors du deuxième amphi. On écrit l'hamiltonien sous la forme

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m_e} + V(\hat{x})$$

où  $V(x)$  est un potentiel périodique de période  $a$  (sur la figure,  $r = x$ ). Dans le cadre du modèle dit de l'électron *presque libre*, on suppose en outre que l'amplitude du potentiel périodique est suffisamment faible pour qu'on puisse considérer  $\hat{V}$  comme une perturbation par rapport à l'hamiltonien  $\hat{H}_0 = \hat{p}_x^2/(2m_e)$ .

1. Cas de l'électron libre ( $V = 0$ )

- Rappeler, dans le cas où  $V = 0$ , l'expression des fonctions propres  $\phi_q(x)$  – sans chercher à les normaliser – et des valeurs propres  $E_0(q)$  en fonction du vecteur d'onde  $q$ .
- Afin de pouvoir normaliser les fonctions propres obtenues ci-dessus, on se limite au cas d'un cristal de longueur finie  $L = Na$ , où  $N \gg 1$ , et on utilisera les conditions aux limites périodiques (voir section 4.4 du livre) pour éviter les effets de bord. Ceci revient à supposer que les fonctions d'onde sont définies pour toute valeur de  $x \in \mathbb{R}$  avec la condition  $\psi(x+L) = \psi(x)$ . Le produit scalaire hermitien entre deux états  $|\psi_1\rangle$  et  $|\psi_2\rangle$  sera alors simplement défini par

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \int_{-L/2}^{L/2} \psi_1^*(x) \psi_2(x) dx$$

En déduire les valeurs permises pour  $q$  et l'expression correctement normalisée des fonctions propres  $\phi_q(x)$ .

- Vérifier explicitement que les états  $|q\rangle$  (associés aux fonctions d'onde  $\phi_q(x)$ ) sont orthonormés.

- Approche qualitative.** On considère une onde plane  $\phi_q(x)$  se propageant dans le cristal. On décrit ici le rôle du potentiel atomique en supposant que chaque atome du cristal réfléchit partiellement l'onde incidente  $\phi_q(x)$ .

- (a) Quel est le déphasage  $\delta$  accumulé par une onde réfléchi par deux atomes consécutifs (phase accumulée sur un aller-retour entre deux atomes consécutifs) ?
- (b) En déduire dans quelle situation le potentiel atomique va significativement modifier la fonction d'onde du système.

3. **Éléments de matrice de  $\hat{V}$ .** On rappelle qu'une fonction périodique comme  $V(x)$  peut s'écrire sous la forme d'une série de Fourier

$$V(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} V_n \exp\left(i2\pi n \frac{x}{a}\right) \quad \text{avec} \quad V_n = \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} V(x) \exp\left(-i2\pi n \frac{x}{a}\right) dx.$$

$V(x)$  étant une fonction réelle, on aura en outre  $V_{-n} = V_n^*$ . (Nous supposons ici que  $L$  est suffisamment grand pour que les valeurs permises pour  $q$  dans le cas libre sont quasi-continues.)

- (a) Exprimer l'élément de matrice  $\langle q | \hat{V} | q' \rangle$  à l'aide des coefficients de Fourier  $V_n$ .
- (b) Montrer que l'élément de matrice  $\langle q | \hat{V} | q' \rangle$  est non nul seulement lorsqu'il existe une relation bien précise entre  $q$  et  $q'$ . Calculer le résultat obtenu dans ce cas.

#### 4. Application de la méthode des perturbations

- (a) Utilisons le fait que  $E_0(q) = E_0(-q)$ . Ecrire la matrice de la perturbation  $\hat{V}$  restreinte à l'espace propre associé au niveau  $E_0(q)$  dans la base  $\{|q\rangle, |-q\rangle\}$ . Que dire des éléments non diagonaux ?
- (b) Appliquer la méthode des perturbations au premier ordre pour  $q = 0$ .
- (c) Lorsque  $q \neq 0$ , il faut appliquer la méthode des perturbations dans le cas dégénéré, c'est à dire diagonaliser la restriction de l'hamiltonien au sous-espace engendré par  $\{|q\rangle, |-q\rangle\}$ . Ecrire l'hamiltonien  $\hat{H}$  dans la base  $\{|q\rangle, |-q\rangle\}$ . Le cas  $q = n\pi/a$  où  $n$  est un entier sera traité séparément.
- (d) Retrouve-t-on le résultat qualitatif obtenu à la question 2. ?
- (e) Le résultat obtenu est-il physiquement acceptable ?

#### 5. Prise en compte des niveaux quasi-dégénérés

- (a) Pour une valeur donnée de  $q$ , montrer que l'hamiltonien  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$  laisse stable l'espace propre engendré par les états du type  $\{|q + n2\pi/a\rangle, n \in \mathbb{Z}\}$ .
- (b) Il est utile de ré-écrire l'hamiltonien comme ( $q' = q - 2n\pi/a$ )

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} = \hat{H}_1 + \hat{W}$$

où

$$\hat{H}_1 = \hat{H}_0 + (E_0(q) - E_0(q'))|q'\rangle\langle q'| \quad \text{et} \quad \hat{W} = \hat{V} - (E_0(q) - E_0(q'))|q'\rangle\langle q'|$$

Pour  $q$  positif voisin de  $n\pi/a$ , montrer qu'il est légitime de se contenter de diagonaliser la restriction de l'hamiltonien à l'espace de dimension deux engendré par  $|q\rangle$  et  $|q - 2n\pi/a\rangle$ .

- (c) En déduire l'expression de  $E(q)$  pour  $q$  voisin de  $n\pi/a$ .
- (d) Représenter la fonction  $E(q)$  pour l'ensemble des valeurs de  $q$ .

#### 6. Théorème de Bloch

- (a) Montrer que la fonction d'onde ainsi obtenue est conforme au théorème de Bloch,  $\psi(x) = u(x)e^{ikx}$  où  $u(x)$  est une fonction périodique de période  $a$  ? (il est utile de poser  $q = k + \ell 2\pi/a$ )
- (b) Représenter les bandes d'énergies obtenues plus haut en fonction d'un vecteur d'onde  $k \in [-\pi/a, \pi/a[$ .

## PC3 : Méthode des perturbations

## Exercice 1 : Modèle de l'électron presque libre

On s'intéresse dans cet exercice à un modèle de cristal unidimensionnel comme celui vu lors du deuxième amphi. On écrit l'hamiltonien sous la forme

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m_e} + V(x)$$

où  $V(x)$  est un potentiel périodique de période  $a$ . Dans le cadre du modèle dit de l'électron *presque libre*, on suppose en outre que l'amplitude du potentiel périodique est suffisamment faible pour qu'on puisse considérer  $\hat{V}$  comme une perturbation par rapport à l'hamiltonien  $\hat{H}_0 = \hat{p}_x^2/(2m_e)$ .

1.1. Cas de l'électron libre ( $V = 0$ )

- (a) Rappeler, dans le cas où  $V = 0$ , l'expression des fonctions propres  $\phi_q(x)$  – sans chercher à les normaliser – et des valeurs propres  $E_0(q)$  en fonction du vecteur d'onde  $q$ .

On sait que les fonctions propres de  $\hat{H}_0$  sont les ondes planes

$$\phi_q(x) = A \exp(iqx)$$

qui sont fonctions propres de  $\hat{p}_x$  avec la valeur propre  $\hbar q$ , et donc de  $\hat{H}_0$  avec la valeur propre

$$E_0(q) = \frac{\hbar^2 q^2}{2m_e}.$$

- (b) Afin de pouvoir normaliser les fonctions propres obtenues ci-dessus, on se limite au cas d'un cristal de longueur finie  $L = Na$ , où  $N \gg 1$ , et on utilisera les conditions aux limites périodiques (voir section 4.4 du livre) pour éviter les effets de bord. Ceci revient à supposer que les fonctions d'onde sont définies pour toute valeur de  $x \in \mathbb{R}$  avec la condition  $\psi(x+L) = \psi(x)$ . Le produit scalaire hermitien entre deux états  $|\psi_1\rangle$  et  $|\psi_2\rangle$  sera alors simplement défini par

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \int_{-L/2}^{L/2} \psi_1^*(x) \psi_2(x) dx$$

En déduire les valeurs permises pour  $q$  et l'expression correctement normalisée des fonctions propres  $\phi_q(x)$ .

La condition  $\phi_q(x+L) = \phi_q(x)$  se traduit par  $\exp(iq(x+L)) = \exp(iqx)$ , soit  $\exp(iqL) = 1$ . On en déduit qu'il doit exister un nombre  $\ell \in \mathbb{Z}$  tel que  $q = \ell 2\pi/L$ . Par ailleurs, comme  $|\exp(iqx)| = 1$ , la condition de normalisation  $\langle \phi_q | \phi_q \rangle = 1$  nous donne  $|A|^2 L = 1$ , soit par exemple  $A = 1/\sqrt{L}$  et

$$\phi_q(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \exp(iqx).$$

- (c) Vérifier explicitement que les états  $|q\rangle$  (associés aux fonctions d'onde  $\phi_q(x)$ ) sont ortho-normés.

Nous avons déjà vérifié que  $\langle q | q \rangle = 1$ . Par ailleurs, pour  $q \neq q'$ , on a

$$\langle q | q' \rangle = \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} \exp(-iqx) \exp(iq'x) dx = \frac{1}{L} \left[ \frac{\exp(i(q' - q)x)}{i(q' - q)} \right]_{-L/2}^{L/2}$$

Or  $q' - q = (\ell' - \ell)2\pi/L$ , ce qui implique que la fonction  $\exp(i(q' - q)x)$  est périodique de période  $L$ . On en déduit que le terme intégré est nul et donc que  $\langle q|q' \rangle = 0$ . Les états  $|q\rangle$  sont bien orthonormés. Un argument équivalent est  $\exp(i\pi(\ell - \ell')) = \exp((-i\pi)(\ell - \ell'))$ .

**1.2. Approche qualitative.** On considère une onde plane  $\phi_q(x)$  se propageant dans le cristal. On décrit ici le rôle du potentiel atomique en supposant que chaque atome du cristal réfléchit partiellement l'onde incidente  $\phi_q(x)$ .

- (a) Quel est le déphasage  $\delta$  accumulé par une onde réfléchie par deux atomes consécutifs (phase accumulée sur un aller-retour entre deux atomes consécutifs) ?

Le déphasage entre les ondes réfléchies (ou diffusées) par deux atomes consécutifs correspond à la phase accumulée sur un aller-retour, soit une distance  $2a$ , avec un vecteur d'onde  $q$ . On a donc  $\delta = 2qa$ .

- (b) En déduire dans quelle situation le potentiel atomique va significativement modifier la fonction d'onde du système.

L'effet du potentiel atomique sera significatif lorsqu'on aura interférence constructive entre les ondes réfléchies par les différents atomes, soit  $\delta = 2\pi n$ , où  $n \in \mathbb{Z}$ . Ceci se produira pour un vecteur d'onde  $q = n\pi/a$ .

**1.3. Éléments de matrice de  $\hat{V}$ .** On rappelle qu'une fonction périodique comme  $V(x)$  peut s'écrire sous la forme d'une série de Fourier

$$V(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} V_n \exp\left(i2\pi n \frac{x}{a}\right) \quad \text{avec} \quad V_n = \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} V(x) \exp\left(-i2\pi n \frac{x}{a}\right) dx.$$

$V(x)$  étant une fonction réelle, on aura en outre  $V_{-n} = V_n^*$ . (Nous supposons ici que  $L$  est suffisamment grand pour que les valeurs permises pour  $q$  dans le cas libre sont quasi-continues.)

- (a) Exprimer l'élément de matrice  $\langle q|\hat{V}|q' \rangle$  à l'aide des coefficients de Fourier  $V_n$ .

On a

$$\begin{aligned} \langle q|\hat{V}|q' \rangle &= \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} \exp(-iqx) \left( \sum_{n=-\infty}^{+\infty} V_n \exp\left(i2\pi n \frac{x}{a}\right) \right) \exp(iq'x) dx \\ &= \sum_{n=-\infty}^{+\infty} V_n \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} \exp(-iqx) \exp\left(i\left(\frac{2\pi n}{a} + q'\right)x\right) dx \\ &= \sum_{n=-\infty}^{+\infty} V_n \langle q|(q' + 2\pi n/a) \rangle \end{aligned}$$

- (b) Montrer que l'élément de matrice  $\langle q|\hat{V}|q' \rangle$  est non nul seulement lorsqu'il existe une relation bien précise entre  $q$  et  $q'$ . Calculer le résultat obtenu dans ce cas.

Les états  $\{|q\rangle\}$  étant orthonormés, on en déduit que, pour qu'il reste un terme non nul dans la somme, il faut qu'il existe un nombre entier  $n$  tel que

$$q = q' + n \frac{2\pi}{a}$$

Deux états  $|q\rangle$  et  $|q'\rangle$  ne seront donc couplés par le potentiel périodique que si  $|q - q'|$  est un multiple de  $2\pi/a$ . L'élément de matrice sera alors  $\langle q|\hat{V}|q' \rangle = V_n$ . Nous notons aussi des propriétés intéressantes : si  $q = q'$  nous obtenons  $n = 0$  et donc  $\langle q|\hat{V}|q \rangle = V_0$ .

#### 1.4. Application de la méthode des perturbations

- (a) Utilisons le fait que  $E_0(q) = E_0(-q)$ . Ecrire la matrice de la perturbation  $\hat{V}$  restreinte à l'espace propre associé au niveau  $E_0(q)$  dans la base  $\{|q\rangle, |-q\rangle\}$ . Que dire des éléments non diagonaux ?

La restriction de  $\hat{V}$  à l'espace propre associé à  $E_0(q)$  s'écrit dans la base  $\{|q\rangle, |-q\rangle\}$  selon

$$\hat{V} = \begin{pmatrix} \langle q|\hat{V}|q\rangle & \langle q|\hat{V}|-q\rangle \\ \langle -q|\hat{V}|q\rangle & \langle -q|\hat{V}|-q\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} V_0 & \langle q|\hat{V}|-q\rangle \\ \langle -q|\hat{V}|q\rangle & V_0 \end{pmatrix}$$

D'après la question 1.3, l'élément de matrice non diagonal  $\langle -q|\hat{V}|q\rangle$  ne peut être non nul que s'il existe un nombre entier  $n$  tel que  $-q = q + n2\pi/a$ , soit  $q = n\pi/a$  (attention, ici  $n$  correspond à  $-n$  par rapport à la question 1.3.b). Dans ce cas, la matrice s'écrit

$$\hat{V} = \begin{pmatrix} V_0 & V_n^* \\ V_n & V_0 \end{pmatrix}$$

Il est aussi intéressant de faire une analogie avec le problème de double puits vu en PHYS311.

- (b) Appliquer la méthode des perturbations au premier ordre pour  $q = 0$ .

Considérons tout d'abord le niveau  $q = 0$ , qui est non dégénéré. La méthode des perturbations au premier ordre nous permet d'écrire

$$E(q) = E_0(q) + \langle q = 0|\hat{V}|q = 0\rangle = E_0(q) + V_0$$

soit un simple décalage du niveau d'énergie d'une quantité égale à la valeur moyenne du potentiel

$$V_0 = \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} V(x) dx.$$

- (c) Lorsque  $q \neq 0$ , il faut appliquer la méthode des perturbations dans le cas dégénéré, c'est à dire diagonaliser la restriction de l'hamiltonien au sous-espace engendré par  $\{|q\rangle, |-q\rangle\}$ . Ecrire l'hamiltonien  $\hat{H}$  dans la base  $\{|q\rangle, |-q\rangle\}$ . Le cas  $q = n\pi/a$  où  $n$  est un entier sera traité séparément.

Si  $q$  n'est pas un multiple de  $\pi/a$ , la réponse à la question précédente nous permet d'écrire

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} = \begin{pmatrix} E_0(q) + V_0 & 0 \\ 0 & E_0(q) + V_0 \end{pmatrix}$$

La matrice est donc déjà diagonale et on trouve à nouveau un simple décalage  $E(q) = E_0(q) + V_0$ . Considérons enfin le cas où  $q = n\pi/a$ , avec  $n \in \mathbb{Z}$ . On a alors

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} = \begin{pmatrix} E_0(q) + V_0 & V_n^* \\ V_n & E_0(q) + V_0 \end{pmatrix} = (E_0(q) + V_0)\hat{I} + \begin{pmatrix} 0 & V_n^* \\ V_n & 0 \end{pmatrix}$$

La trace de la matrice à diagonaliser est nulle et son déterminant est égal à  $-|V_n|^2$ . On en déduit que ses valeurs propres sont  $\pm|V_n|$ . On obtient donc deux niveaux d'énergie

$$E(q = n\pi/a) = E_0(q = n\pi/a) + V_0 \pm |V_n|.$$

- (d) Retrouve-t-on le résultat qualitatif obtenu à la question 1.2 ?

On retrouve bien le résultat de la question 1.2, à savoir que c'est seulement lorsque  $q$  est un multiple de  $\pi/a$  que l'interférence constructive entre les réflexions successives donne lieu à un effet significatif.

- (e) Le résultat obtenu est-il physiquement acceptable ?

Toutefois, le résultat obtenu n'est pas physiquement acceptable car il y a une discontinuité dans la fonction  $E(q)$ . Nous avons dû faire une erreur dans notre application naïve de la méthode des perturbations.

*C'est l'occasion de solliciter les élèves pour leur faire deviner l'origine de l'erreur.*

En effet, on ne peut appliquer la méthode des perturbations que lorsque le potentiel est petit devant l'écart en énergie entre les niveaux non perturbés. Ici cet écart tend vers zéro lorsque  $L \rightarrow \infty$  donc *a priori* on ne peut jamais appliquer la méthode des perturbations. Mais en fait, seuls importent les états couplés à l'état  $|q\rangle$  considéré. On voit que lorsque  $q$  est proche de  $n\pi/a$ , l'état  $q - 2n\pi/a$  est proche de  $-q$  et donc  $E_0(q - 2n\pi/a)$  est voisin de  $E_0(-q) = E_0(q)$ . Les états  $|q\rangle$  et  $|q - 2n\pi/a\rangle$  sont couplés et ont des énergies voisines. C'est là l'origine de l'échec de notre application de la méthode des perturbations.

### 1.5. Prise en compte des niveaux quasi-dégénérés

- (a) Pour une valeur donnée de  $q$ , montrer que l'hamiltonien  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$  laisse stable l'espace propre engendré par les états du type  $\{|q + n2\pi/a\rangle, n \in \mathbb{Z}\}$ .

On voit immédiatement que  $\hat{H}_0$  laisse stable l'espace propre considéré car les vecteurs de base sont des vecteurs propres de  $\hat{H}_0$ . Pour  $\hat{V}$ , on peut exprimer l'action sur un état  $|q + n2\pi/a\rangle$  à l'aide de la relation de fermeture

$$\hat{V}|q + n2\pi/a\rangle = \sum_{q'} |q'\rangle \langle q'|\hat{V}|q + n2\pi/a\rangle = \sum_{n'} V_{n'-n} |q + n'2\pi/a\rangle$$

où l'on a utilisé le résultat de la question 1.3 et plus précisément

$$\langle q'|\hat{V}|q + \frac{2\pi n}{a}\rangle = \sum_{n'=-\infty}^{+\infty} V_{n'} \langle q'|q + \frac{2\pi n}{a} + \frac{2\pi n'}{a}\rangle.$$

On vérifie ainsi que  $\hat{V}$  laisse stable le sous-espace considéré.

Une méthode exacte pour déterminer les valeurs propres de l'hamiltonien consiste ainsi à diagonaliser la restriction de  $\hat{H}$  à ce sous-espace. On va donc oublier dans toute la suite de cette question les états non couplés à  $|q\rangle$  par l'hamiltonien.

- (b) Pour  $q$  positif voisin de  $n\pi/a$ , montrer qu'il est légitime de se contenter de diagonaliser la restriction de l'hamiltonien à l'espace de dimension deux engendré par  $|q\rangle$  et  $|q - 2n\pi/a\rangle$  (cette question a été réécrite pour guider les élèves, PC longue).

Posons  $q' = q - 2n\pi/a$ . On a vu plus haut que l'échec de notre approche initiale provenait de la non prise en compte du couplage entre les états  $|q\rangle$  et  $|q'\rangle$  dont les énergies sont voisines. Il est donc légitime de dire qu'au lieu de diagonaliser l'ensemble de la matrice dans l'espace des états couplés à l'état  $|q\rangle$ , on se limite à l'espace de dimension deux engendré par  $|q\rangle$  et  $|q'\rangle$ .

On peut en donner une démonstration rigoureuse de la manière suivante. Ecrivons

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} = \hat{H}_1 + \hat{W}$$

où

$$\hat{H}_1 = \hat{H}_0 + (E_0(q) - E_0(q'))|q'\rangle\langle q'| \quad \text{et} \quad \hat{W} = \hat{V} - (E_0(q) - E_0(q'))|q'\rangle\langle q'|$$

On a maintenant  $\hat{H}_1|q'\rangle = (E_0(q') + E_0(q) - E_0(q'))|q'\rangle = E_0(q)|q'\rangle$ . Les états  $|q\rangle$  et  $|q'\rangle$  sont donc dégénérés pour  $H_1$ . Par ailleurs, comme  $q$  est voisin de  $n\pi/a$ ,  $E_0(q)$  et  $E_0(q')$  sont voisins. Le terme ajouté à  $\hat{V}$  est donc petit si bien que  $\hat{W}$  peut toujours être considéré comme une perturbation par rapport à  $\hat{H}_1$ . L'application de la méthode des perturbations dans le cas dégénéré nous permet donc d'affirmer qu'il suffit de diagonaliser la restriction de  $\hat{W}$  à l'espace engendré par  $|q\rangle$  et  $|q'\rangle$ . Ceci revient à diagonaliser  $\hat{H}$  car  $\hat{H}_1$  est proportionnel à l'identité dans ce sous-espace.

- (c) En déduire l'expression de  $E(q)$  pour  $q$  voisin de  $n\pi/a$ .

On a  $\langle q|\hat{V}|q'\rangle = V_n$  donc la matrice de  $\hat{W}$  dans la base  $\{|q\rangle, |q'\rangle\}$  s'écrit

$$\begin{aligned}\hat{W} &= \begin{pmatrix} V_0 & V_n \\ V_n^* & V_0 + E_0(q') - E_0(q) \end{pmatrix} \\ &= \left( V_0 + \frac{E_0(q') - E_0(q)}{2} \right) \hat{I} + \begin{pmatrix} -(E_0(q') - E_0(q))/2 & V_n \\ V_n^* & (E_0(q') - E_0(q))/2 \end{pmatrix}\end{aligned}$$

La trace de la matrice  $2 \times 2$  étant nulle, on peut facilement obtenir les valeurs propres qui sont égales à plus ou moins la racine carrée du déterminant

$$\pm \sqrt{\frac{(E_0(q') - E_0(q))^2}{4} + |V_n|^2}$$

En ajoutant  $E_0(q)$  pour tenir compte de  $\hat{H}_1$ , on obtient

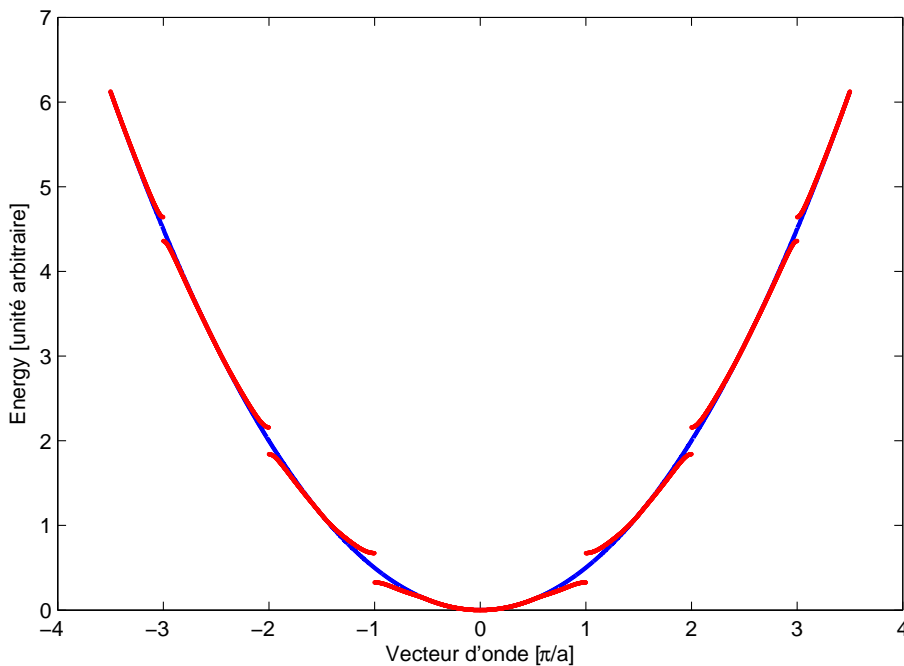
$$E(q) = V_0 + \frac{E_0(q') + E_0(q)}{2} \pm \sqrt{\frac{(E_0(q') - E_0(q))^2}{4} + |V_n|^2}$$

le signe étant choisi de façon à retrouver  $E_0(q)$  lorsque  $V \rightarrow 0$ , soit un signe négatif lorsque  $q < n\pi/a$  et un signe positif lorsque  $q > n\pi/a$ .

On retrouve bien l'ouverture d'un gap d'amplitude  $2|V_n|$  au voisinage de  $q = n\pi/a$ , mais avec cette fois une évolution progressive tendant asymptotiquement vers  $E_0(q)$ . Nous insisterons sur cette notion de 'repliement'.

- (d) Représenter la fonction  $E(q)$  pour l'ensemble des valeurs de  $q$ .

On obtient la figure ci-dessous. On observe des bandes d'énergie interdite, qui jouent un rôle majeur dans les propriétés du cristal, notamment sa nature de métal, isolant ou semiconducteur.



*Un point pouvant étonner certains élèves est que la fonction obtenue est toujours discontinue. En fait, en  $q = \pi/a$ , la fonction propre est un mélange à 50% de  $q = \pi/a$  et  $q = -\pi/a$ , donc on a bien une variation continue à condition de continuer la courbe en  $-\pi/a$ . La nature continue des bandes d'énergie apparaîtra plus clairement à la question suivante.*

## 1.6. Théorème de Bloch

- (a) Montrer que la fonction d'onde ainsi obtenue est conforme au théorème de Bloch,  $\psi(x) = u(x)e^{ikx}$  où  $u(x)$  est une fonction périodique de période  $a$  ? (il est utile de poser  $q = k + \ell 2\pi/a$ )  
 Pour une valeur de  $q$  donnée, la fonction propre obtenue est un mélange entre les états  $|q\rangle$  et  $|q'\rangle$ , soit

$$\psi(x) = \alpha\phi_q(x) + \beta\phi_{q'}(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \left( \alpha e^{iqx} + \beta e^{iq'x} \right)$$

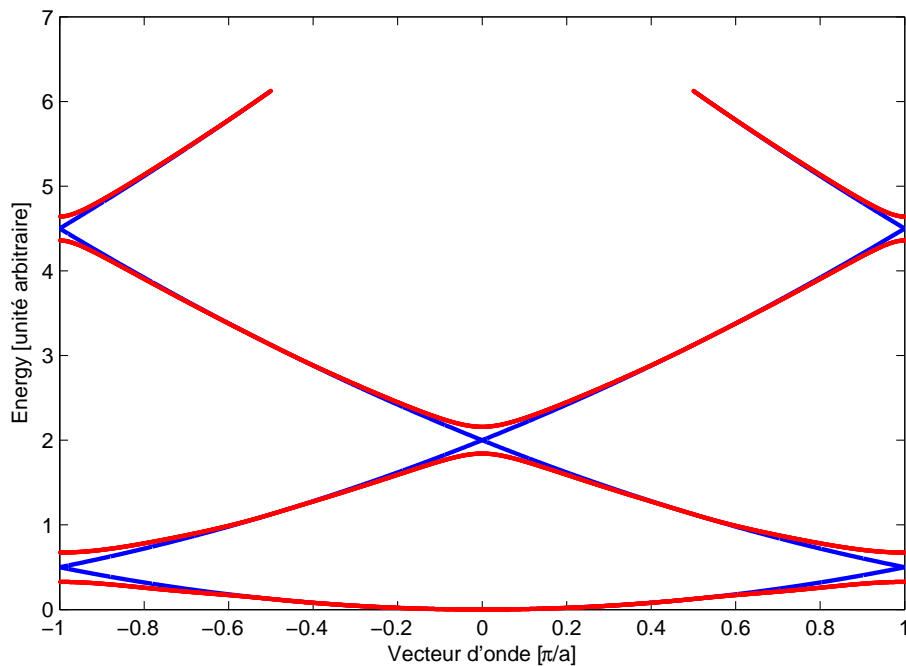
Quelle que soit la valeur de  $q$ , il existera un nombre entier  $\ell$  tel que  $q = k + \ell 2\pi/a$ , avec  $k \in [-\pi/a, \pi/a[$ . Par ailleurs,  $q' = q - n 2\pi/a = k + (\ell - n) 2\pi/a$ . La fonction propre s'écrit donc

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx} \left( \alpha e^{i\ell 2\pi x/a} + \beta e^{i(\ell-n) 2\pi x/a} \right) = u(x) e^{ikx}$$

où la fonction  $u(x)$  est à l'évidence une fonction périodique de période  $a$ . Le résultat obtenu est donc conforme au théorème de Bloch : les fonctions propres peuvent s'écrire sous la forme du produit d'une fonction périodique de période  $a$  par une onde plane associée à un vecteur d'onde  $k \in [-\pi/a, \pi/a[$ .

- (b) Représenter les bandes d'énergies obtenues plus haut en fonction d'un vecteur d'onde  $k \in [-\pi/a, \pi/a[$ .

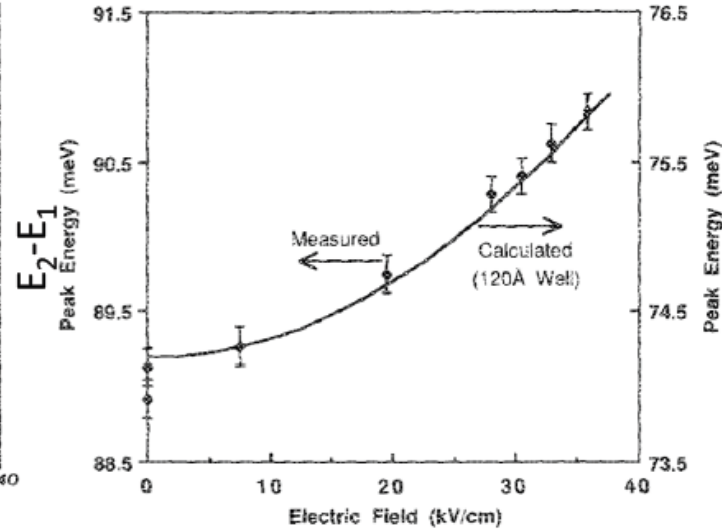
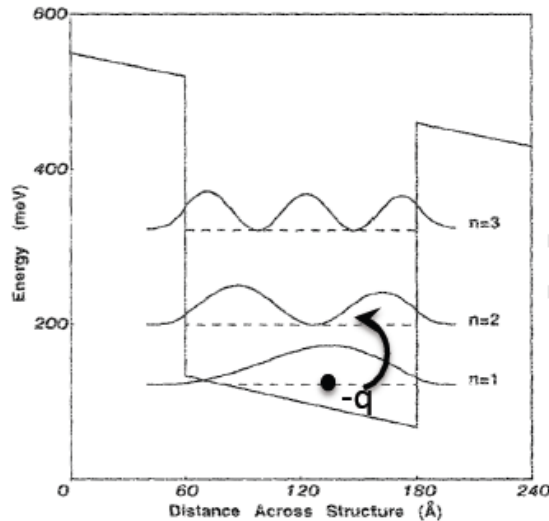
Il suffit de décaler chaque bande d'énergie d'une quantité  $\ell 2\pi/a$  où  $\ell$  est un nombre entier approprié. On obtient la figure ci-dessous.



On observe clairement que l'apparition de bandes d'énergie interdite résulte d'un phénomène d'anti-croisement entre deux états couplés et d'énergie voisine. La courbure de cet anti-croisement gouverne la masse effective des porteurs se déplaçant dans le cristal.

# Rappel PHY311: Puits quantique

J'enverrai  
Article  
Avec auteurs  
Mr A. Harwit  
J. S. Harris



Livre:  
Champ  
Magnétique  
NH3

On s'intéresse à une expérience publiée dans Applied Physics Letter 50, 685 (1987) mettant en évidence l'effet d'un champ électrique sur les niveaux d'énergie d'un électron dans un puits quantique. La figure de gauche illustre la structure étudiée : un puits quantique de GaAs/AlGaAs de 12 nm d'épaisseur. La variation des niveaux d'énergie est étudiée en fonction d'un champ électrique appliqué sur la structure, en effectuant une mesure d'absorption de lumière entre les niveaux 1 et 2. La figure de droite montre l'énergie  $E_2 - E_1$  mesurée en fonction du champ électrique appliqué  $\mathcal{E}$ . Le potentiel d'interaction entre le champ électrique et l'électron est  $\mathcal{W} = q\mathcal{E}z$  avec  $q > 0$ .

Expliquer les données expérimentales? Expliquer

# perturbation

On considère un puits quantique infini entre  $[-L/2, L/2]$ .

$E_n = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2$  avec  $m^*$  masse effective introduite en amphi 2.

$\psi_n(z) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cos \frac{n\pi z}{L}$  si  $n$  impair,  $\psi_n(z) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi z}{L}$  si  $n$  pair,

- Pas de correction à l'ordre 1 à cause de la parité de la fonction d'onde

$$E_1^{(1)} = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \cos^2 \left( \frac{n\pi z}{L} \right) q\mathcal{E}z \, dz = 0$$

$$E_2^{(1)} = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \sin^2 \left( \frac{n\pi z}{L} \right) q\mathcal{E}z \, dz = 0$$

$$E_1^{(2)} = \sum_{k \neq 1} \frac{|\langle k | -q\mathcal{E}z | 1 \rangle|^2}{E_1 - E_k} \approx \frac{|\langle 2 | -q\mathcal{E}z | 1 \rangle|^2}{E_1 - E_2} \propto \mathcal{E}^2 = - E_2^{(2)}$$

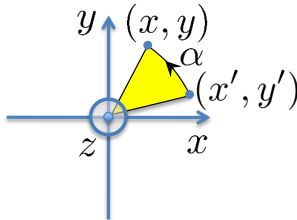
## Première partie : Moment cinétique et Rotations

L'objet de cet exercice est de vérifier explicitement que le moment cinétique orbital,  $\hat{L} = \hat{r} \times \hat{p}$ , obéit bien aux propriétés générales attendues pour un moment cinétique.

On considère pour cela une rotation d'angle  $\alpha$  autour de l'axe  $z$  transformant les coordonnées  $\{x', y', z'\}$  en  $\{x, y, z\}$ , selon la relation

$$\begin{cases} x = x' \cos \alpha - y' \sin \alpha \\ y = x' \sin \alpha + y' \cos \alpha \\ z = z' \end{cases} \quad \text{ou} \quad \begin{cases} x' = x \cos \alpha + y \sin \alpha \\ y' = -x \sin \alpha + y \cos \alpha \\ z' = z \end{cases}$$

où l'on a exprimé les coordonnées  $\{x', y', z'\}$  à partir des coordonnées  $\{x, y, z\}$  à l'aide d'une rotation d'angle  $-\alpha$ . La rotation considérée est schématisé par la figure ci-dessous.



Par définition, l'action de l'opérateur rotation  $\hat{R}_{z,\alpha}$  sur une fonction d'onde  $\psi(x, y, z)$  s'écrira alors selon la relation

$$[\hat{R}_{z,\alpha}\psi](x, y, z) = \psi(x', y', z') \quad (1)$$

1. Effectuons une *rotation*  $|\psi'(t)\rangle = \hat{R}_{z,\alpha}|\psi(t)\rangle$ . Après le temps  $dt$  petit, le Ket décrivant le système évolue comme :

$$|\psi'(t + dt)\rangle = |\psi'(t)\rangle + \frac{dt}{i\hbar} \hat{H}|\psi'(t)\rangle.$$

Vérifier que l'invariance par rotations implique  $[\hat{H}, \hat{R}_{z,\alpha}] = 0$ .

2. En supposant que l'angle  $\alpha$  est petit, développer l'expression (1) ci-dessus au premier ordre en  $\alpha$ . En déduire que  $\hat{L}_z$  est bien le générateur infinitésimal des rotations autour de l'axe  $z$ .
3. On rappelle que

$$\begin{aligned} \hat{L}_x &= \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y \\ \hat{L}_y &= \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z \\ \hat{L}_z &= \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x \end{aligned}$$

Vérifier explicitement le commutateur  $[\hat{L}_x, \hat{L}_y]$ .

4. Plaçons nous en coordonnées sphériques et effectuons une rotation d'un angle infinitesimal  $\alpha$ ,  $\hat{R}_{z,\alpha}\psi(r, \theta, \varphi) = \psi(r, \theta, \varphi - \alpha)$ . En utilisant les résultats ci-dessus, montrer

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}.$$

## Deuxième Partie : Harmoniques sphériques

1. Considérons l'espace de fonctions propres associées aux observables  $\hat{L}_z(\varphi)$  et  $\hat{L}^2(\theta, \varphi)$  avec les valeurs propres respectives  $\hbar m$  et  $\hbar^2 l(l+1)$  :

$$\hat{L}^2 Y_l^m(\theta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_l^m(\theta, \varphi)$$

et

$$\hat{L}_z Y_l^m(\theta, \varphi) = m\hbar Y_l^m(\theta, \varphi).$$

Justifier que les fonctions  $Y_l^m$  (harmoniques sphériques) prennent la forme  $F_l^m(\theta) \exp(im\varphi)$  où  $m$  est un entier. En déduire que  $l$  est un entier positif ou nul et que  $-l \leq m \leq l$ .

2. Considérons l'opérateur  $\hat{L}_+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y$ , tel que  $\hat{L}_+ Y_l^l(\theta, \varphi) = 0$ . En rappelant que,  $\hat{L}_\pm = \hbar e^{\pm i\varphi} \left( \pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$ , vérifier que  $Y_l^l(\theta, \varphi)$  est de la forme :

$$Y_l^l(\theta, \varphi) = c_l (\sin \theta)^l e^{il\varphi}.$$

Les coefficients  $c_l$  s'obtiennent par récurrence en utilisant la condition de normalisation :

$$c_l = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}}.$$

Le facteur  $(-1)^l$  est choisi pour des raisons historiques. Nous vérifions  $Y_0^0 = 1/\sqrt{4\pi}$ .

3. Sous l'opération de la parité  $\hat{\Pi}\psi(\vec{r}) = \psi(-\vec{r})$  montrer :  $Y_l^l(\pi-\theta, \pi+\varphi) = (-1)^l Y_l^l(\theta, \varphi)$ .  $\hat{L}_-$  est inchangé sous l'opération de parité et donc :  $Y_l^m(\pi-\theta, \varphi+\pi) = (-1)^l Y_l^m(\theta, \varphi)$ . Les harmoniques sphériques sont paires pour  $l$  pair, impaires pour  $l$  impair.
4. Déterminer les fonctions  $Y_l^m(\theta, \varphi)$  pour  $l = 1$ . On rappelle la relation vue en cours :

$$\hat{L}_\pm Y_{\ell, m}(\theta, \varphi) = \sqrt{\ell(\ell+1) - m(m \pm 1)} \hbar Y_{\ell, m \pm 1}(\theta, \varphi).$$

*Nous visualiserons les premières harmoniques sphériques.*

## Troisième Partie : Carbone 60

On s'intéresse dans cet exercice à la molécule de Carbone 60, représentée ci-contre, constituée de 60 atomes de carbone placés sur les sommets d'un icosaèdre tronqué similaire à un ballon de football. Notre modèle très simplifié consistera à supposer que l'électron est libre de se déplacer à la surface d'une sphère dont le rayon  $a$  est égal à celui de la molécule, soit  $a = 0.35$  nm.



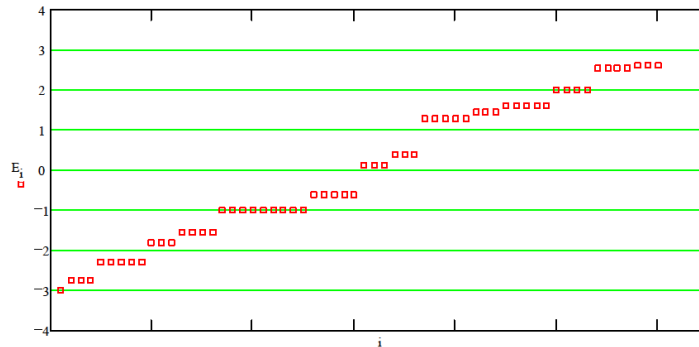
1. On traite dans un premier temps le mouvement de l'électron dans le cadre de la mécanique classique. Comme la particule est contrainte de se déplacer à la surface de la sphère, l'impulsion  $\vec{p}$  est toujours perpendiculaire à  $\vec{r}$ , donc le moment cinétique satisfait  $L = \|\vec{r} \times \vec{p}\| = rp = ap$  (PC01). On peut donc remplacer  $p$  par  $L/a$ . L'énergie cinétique de la particule s'écrit donc

$$E_c = \frac{p^2}{2m_0} = \frac{L^2}{2m_0 a^2}$$

où  $m_0$  est la masse de la particule. On retrouve ici l'expression de l'énergie cinétique de rotation avec un moment d'inertie  $m_0 a^2$ .

On décrit maintenant le mouvement de la particule à la surface de la sphère dans le cadre de la mécanique quantique. Quelle est l'expression de l'hamiltonien ?

2. En déduire les valeurs des niveaux d'énergie ainsi que leurs dégénérescence.
3. On peut faire un modèle plus précis de la structure électronique du Carbone 60 à l'aide du modèle de Hückel, que nous avons déjà utilisé en PHY311 (PC9) pour décrire la molécule de benzène. Dans le Carbone 60 chaque atome de carbone a trois plus proches voisins (contre deux dans le cas du benzène), et il faudra donc diagonaliser une matrice  $60 \times 60$  (contre seulement deux dans la matrice  $6 \times 6$  utilisée pour le benzène). Une diagonalisation à l'aide d'un calcul numérique donne les niveaux d'énergie ci-dessous (typiquement, l'écart d'énergie entre les deux premiers niveaux vaut  $0.36eV$ ). Ici,  $i$  réfère aux états propres.



Commenter le résultat obtenu, en discutant notamment la dégénérescence des niveaux d'énergie et la valeur quantitative de l'espace entre les premiers niveaux. Quelle hypothèse faut-il faire sur la masse de l'électron pour obtenir un bon accord entre les deux modèles ? Est-ce une surprise ?

## MOMENT CINÉTIQUE et Harmonique Sphérique, SOLUTION

PC04 : Groupes 03 et 10  
Mme Karyn Le Hur

## Première partie : Moment cinétique et Rotations

1. Note (amphi 02) : les étudiants m'ont posé des questions à ce sujet : ceci sera refait au tableau

Effectuons une rotation  $|\psi'(t)\rangle = \hat{R}_{z,\alpha}|\psi(t)\rangle$ . Après le temps  $dt$ ,

$$|\psi'(t+dt)\rangle = |\psi'(t)\rangle + \frac{dt}{i\hbar}\hat{H}|\psi'(t)\rangle.$$

L'invariance par rotation implique

$$\begin{aligned} |\psi'(t+dt)\rangle &= \hat{R}_{z,\alpha}|\psi(t+dt)\rangle \\ &= \hat{R}_{z,\alpha}|\psi\rangle + \frac{dt}{i\hbar}\hat{R}_{z,\alpha}\hat{H}|\psi(t)\rangle. \end{aligned}$$

Nous en déduisons alors :

$$\begin{aligned} \hat{R}_{z,\alpha}\hat{H}|\psi(t)\rangle &= \hat{H}|\psi'(t)\rangle \\ \hat{R}_{z,\alpha}\hat{H}|\psi(t)\rangle &= \hat{H}\hat{R}_{z,\alpha}|\psi(t)\rangle. \end{aligned}$$

Cela implique donc que  $[\hat{H}, \hat{R}_{z,\alpha}] = 0$ . Une autre démonstration a été faite en Amphi04 en évoquant la conservation de l'énergie moyenne, par exemple,  $\langle\psi(t)|\hat{R}_{z,\alpha}^\dagger\hat{H}\hat{R}_{z,\alpha}|\psi(t)\rangle = \langle\psi(t)|\hat{H}|\psi(t)\rangle$ .

2. Dans le cas d'un angle  $\alpha$  petit, on a au premier ordre

$$\begin{aligned} x' &= x \cos \alpha + y \sin \alpha \approx x + \alpha y \\ y' &= -x \sin \alpha + y \cos \alpha \approx -\alpha x + y \\ z' &= z \end{aligned}$$

On en déduit

$$\begin{aligned} [\hat{R}_{z,\alpha}\psi](x, y, z) &= \psi(x', y', z') \approx \psi(x + \alpha y, -\alpha x + y, z) \\ &= \psi(x, y, z) + \alpha y \frac{\partial \psi}{\partial x} - \alpha x \frac{\partial \psi}{\partial y} \\ &= \psi + \frac{i\alpha}{\hbar} y \hat{p}_x \psi - \frac{i\alpha}{\hbar} x \hat{p}_y \psi \\ &= \left( \hat{I} - \frac{i\alpha}{\hbar} \hat{L}_z \right) \psi(x, y, z) \end{aligned}$$

Comme la relation est vérifiée pour tout état  $\psi$ , on en déduit

$$\hat{R}_{z,\alpha} = \hat{I} - \frac{i\alpha}{\hbar} \hat{L}_z$$

En décomposant la rotation en rotations d'angle infinitésimal,  $\alpha' = \alpha/N$ , nous vérifions

$$\lim_{N \rightarrow +\infty} \left( 1 - \frac{i\alpha}{\hbar N} \hat{L}_z \right)^N = \exp\left(-i \frac{\alpha}{\hbar} \hat{L}_z\right).$$

Nous poserons une question sur le cas où  $\hat{J}_z \rightarrow \hat{S}_z = (\hbar/2)\hat{\sigma}_z$  (RMN, Phys311).

3. On remarque que  $\hat{y}$  et  $\hat{p}_y$  commutent avec  $\hat{L}_y$ . Donc

$$\begin{aligned} [\hat{L}_x, \hat{L}_y] &= [\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \hat{L}_y] = \hat{y} [\hat{p}_z, \hat{L}_y] - [\hat{z}, \hat{L}_y] \hat{p}_y \\ [\hat{p}_z, \hat{L}_y] &= [\hat{p}_z, \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z] = [\hat{p}_z, \hat{z}] \hat{p}_x = -i\hbar\hat{p}_x \\ [\hat{z}, \hat{L}_y] &= [\hat{z}, \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z] = -\hat{x} [\hat{z}, \hat{p}_z] = -i\hbar\hat{x} \end{aligned}$$

d'où

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = -i\hbar\hat{y}\hat{p}_x + i\hbar\hat{x}\hat{p}_y = i\hbar\hat{L}_z$$

Les deux autres relations de commutation se déduisent par permutation circulaire. On obtient bien les relations attendues pour un moment cinétique.

4. Nous avons :

$$\hat{R}_{z,\alpha}\psi(r, \theta, \varphi) = \left(1 - i\frac{\alpha}{\hbar}\hat{L}_z\right)\psi(r, \theta, \varphi) = \psi(r, \theta, \varphi - \alpha) \approx \psi(r, \theta, \varphi) - \alpha\frac{\partial\psi}{\partial\varphi}.$$

Cela donne :

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial\varphi}.$$

## Deuxième partie : Harmoniques Sphériques

1. Nous devons résoudre l'équation différentielle :

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}Y(\theta, \varphi) = \hbar mY(\theta, \varphi).$$

Cette équation admet comme solution :

$$Y(\theta, \varphi) = F_l^m(\theta) \exp(im\varphi).$$

Les angles  $\varphi = 0$  et  $\varphi = 2\pi$  sont indiscernables. La fonction d'onde doit donc satisfaire  $Y(\theta, \varphi) = Y(\theta, \varphi + 2\pi)$ . Cela implique  $\exp(2im\pi) = 1$  et donc  $m$  est un entier. Par construction du moment cinétique,  $-l \leq m \leq l$  et  $l \geq 0$ . Si  $m$  est entier,  $l$  est aussi entier. L'équation pour  $\hat{L}^2$  est aussi satisfaite car les parties en  $\exp(im\varphi)$  se simplifient à gauche et à droite dans l'équation.

2. L'équation  $\hat{L}_+ Y_l^l(\theta, \varphi) = 0$  est équivalente à :

$$\left(\frac{\partial}{\partial\theta} - l \cot\theta\right) F_l^l(\theta) = 0.$$

Notons que :

$$\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta)^l = l(\sin\theta)^{l-1} \cos\theta.$$

La solution de cette équation prend donc la forme :

$$F_l^l(\theta) = c_l(\sin\theta)^l.$$

Cela donne :

$$Y_l^l(\theta, \varphi) = c_l(\sin\theta)^l e^{il\varphi}.$$

La condition de normalisation donne :

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta |Y_l^l(\theta, \varphi)|^2 = |c_l|^2 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta (\sin \theta)^{2l} = 1.$$

Nous obtenons ainsi :

$$|c_l|^2 = \frac{1}{2\pi I(l)},$$

ou ( $u = \cos \theta$ ) :

$$I(l) = \int_0^\pi \sin \theta d\theta (\sin \theta)^{2l} = \int_{-1}^{+1} du (1 - u^2)^l.$$

$I(l)$  se calcule par récurrence et

$$c_l = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}}.$$

Le facteur  $(-1)^l$  est choisi pour des raisons historiques. Nous vérifions ainsi que  $Y_0^0 = 1/\sqrt{4\pi}$  est isotrope.

(Nous reviendrons sur l'équation  $\hat{L}_- Y_l^{-l}(\theta, \varphi) = 0$ .)

3. Sous l'opération de la parité :

$$\sin(\pi - \theta) = \sin(\theta)$$

$$\exp(im(\varphi + \pi)) = (-1)^m \exp(im\varphi),$$

et donc :

$$Y_l^l(\pi - \theta, \varphi + \pi) = (-1)^l Y_l^l(\theta, \varphi).$$

4. De la question 2. nous obtenons :

$$Y_1^1 = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{+i\varphi}.$$

$Y_1^0$  peut-être obtenu directement en appliquant  $\hat{L}_- Y_1^1(\theta, \varphi) = \sqrt{2}\hbar Y_1^0(\theta, \varphi)$ . Nous ferons cette démonstration au tableau :

$$\hat{L}_- Y_{1,1}(\theta, \varphi) = -\hbar e^{-i\varphi} \left( -\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{i\varphi} \sin \theta = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \hbar e^{-i\varphi} (-\cos \theta + i \cot \theta (i) \sin \theta) e^{i\varphi}$$

soit  $\hat{L}_- Y_{1,1}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \hbar \cos \theta$ . Cela donne :

$$Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta.$$

De la même manière, nous montrons :

$$Y_1^{-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{-i\varphi} = -(Y_1^1)^*.$$

L'interprétation géométrique sera faite explicitement en petite classe, en montrant des exemples d'harmoniques sphériques, (cas  $Y_0^0$ ,  $Y_1^m$ ,  $Y_2^m$ ).

L'espace propre considéré est de dimension 3 et est engendré par les harmoniques sphériques  $Y_1^0$  (réelle),  $Y_1^{\pm 1}$  (complexes). On peut construire les fonctions orthogonales

$$Y_x(\theta, \varphi) = \frac{-Y_1^1(\theta, \varphi) + Y_1^{-1}(\theta, \varphi)}{\sqrt{2}} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \varphi \sin \theta$$

et

$$Y_y(\theta, \varphi) = i \frac{Y_1^1(\theta, \varphi) + Y_1^{-1}(\theta, \varphi)}{\sqrt{2}} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin \varphi \sin \theta$$

Les fonctions  $Y_x$ ,  $Y_y$  et  $Y_1^0$  constituent une base de fonctions réelles de l'espace associé à  $\ell = 1$  dont les dépendances spatiales sont en  $x/r$ ,  $y/r$ , et  $z/r$ , mais - à part  $Y_1^0$  - elles ne sont pas fonctions propres de  $\hat{L}_z$ . Ces fonctions permettront de construire les orbitales  $p_x$ ,  $p_y$  et  $p_z$  chères aux chimistes.

• *Note* : Nous pouvons ré-écrire les relations vues dans l'amphi, par récurrence, comme :



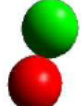













$$Y_l^m(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{(l+m)!}{(2l)!(l-m)!}} \left(\frac{\hat{L}_-}{\hbar}\right)^{l-m} Y_l^l(\theta, \varphi).$$

Cette équation peut être résolue analytiquement et cela donne, par exemple :

$$Y_l^0 = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \frac{d^l}{d(\cos \theta)^l} (1 - \cos^2 \theta)^l = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \theta).$$

Nous vérifions que les fonctions  $Y_l^0$  sont liées aux polynômes de Legendre.

Premiers harmoniques sphériques

	$m = -3$	$m = -2$	$m = -1$	$m = 0$	$m = +1$	$m = +2$	$m = +3$
$\ell = 0$				$\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$ 			
$\ell = 1$			$\frac{1}{\sqrt{4\pi}} \sqrt{\frac{3}{2}} \sin \theta e^{-i\phi}$ 	$\frac{1}{\sqrt{4\pi}} \sqrt{3} \cos \theta$ 	$\frac{1}{\sqrt{4\pi}} \sqrt{\frac{3}{2}} \sin \theta e^{i\phi}$ 		
$\ell = 2$		$\frac{1}{\sqrt{4\pi}} \frac{\sqrt{15}}{2^{3/2}} \sin^2 \theta e^{-i2\phi}$ 	$\frac{1}{\sqrt{4\pi}} \frac{\sqrt{15}}{2} \cos \theta \sin \theta e^{-i\phi}$ 	$\frac{1}{\sqrt{4\pi}} \frac{\sqrt{5}}{2} (3 \cos^2 \theta - 1)$ 	$\frac{1}{\sqrt{4\pi}} \frac{\sqrt{15}}{2} \cos \theta \sin \theta e^{i\phi}$ 	$\frac{1}{\sqrt{4\pi}} \frac{\sqrt{15}}{2^{3/2}} \sin^2 \theta e^{i2\phi}$ 	
$\ell = 3$							

Représentation graphique des premiers harmoniques sphériques.

(source : [www.quantum-physics.polytechnique.fr/physix/wiki/index.php/Harmoniques\\_Sphériques](http://www.quantum-physics.polytechnique.fr/physix/wiki/index.php/Harmoniques_Sphériques))

1. On caractérise la position de la particule sur la sphère à l'aide des angles sphériques  $\theta$  et  $\varphi$ . L'état de la particule est alors décrit par une fonction d'onde  $Y(\theta, \varphi)$  et l'espace de Hilbert est l'ensemble des fonctions  $Y(\theta, \varphi)$  de carré sommable de  $[0, \pi] \times [0, 2\pi]$  dans  $\mathbf{C}$ . Comme la particule est libre de se déplacer à la surface de la sphère, on peut supposer que l'énergie potentielle est nulle. L'hamiltonien se réduit à la seule énergie cinétique

$$\hat{H} = \frac{\hat{L}^2}{2m_0a^2}$$

2. On retrouve donc la même structure de niveaux d'énergie que pour le rotateur rigide vu en cours. Les énergies propres sont  $E_\ell = \ell(\ell + 1)\hbar^2/(2m_0a^2)$  et la dégénérescence du niveau  $\ell$  est  $2\ell + 1$ . L'état fondamental n'est pas dégénéré.
3. Si nous prenons aussi en compte l'énergie attractive due aux noyaux (protons), un électron est en fait soumis à une énergie totale :

$$E_\ell = E_0 + \frac{\hbar^2\ell(\ell + 1)}{2m_0a^2}.$$

$E_0 < 0$  car correspond à une énergie attractive. De manière intéressante, la dégénérescence des niveaux  $l = 0, l = 1, l = 2, l = 4$  semblent être bien respectées justifiant à priori que le terme d'énergie cinétique peut être décrit par un modèle d'électrons libres (sur le schéma, le niveau  $l = 3$  est quasi-dégénéré).

Il est utile de comparer l'énergie  $E_\ell$  avec celle obtenue par le modèle de Huckel (voir référence M. Ozaki et A. Takahashi, 1986) :

$$E_\ell = E_0 + \gamma\ell(\ell + 1)$$

avec  $\gamma > 0$ .

Si on calcule l'écart entre les deux premiers niveaux dans le cadre de notre modèle libre, on trouve  $\hbar^2/(m_0a^2) = 0.6$  eV, soit plus que l'écart prévu par le modèle de Hückel. Ceci n'est pas surprenant car c'est la masse effective qu'il faut considérer et non la masse d'un électron dans le vide.

## ON ELECTRONIC STATES AND BOND LENGTHS OF THE TRUNCATED ICOSAHEDRAL $C_{60}$ MOLECULE

Masa-aki OZAKI and Akira TAKAHASHI

*Department of Physics, Faculty of Science, Kyoto University, Kyoto 606, Japan*

Received 28 December 1985; in final form 15 April 1986

The electronic states and the bond lengths of the truncated icosahedral  $C_{60}$  molecule have been calculated by the Hückel and Coulson–Golebiewski self-consistent Hückel methods.  $C_{60}$  has a stable closed shell with a rather big energy gap ( $= 0.847\beta$ ) between the HOMO and the LUMO. We have obtained two kinds of bond lengths  $r_1 = 1.434 \text{ \AA}$  and  $r_2 = 1.403 \text{ \AA}$ , which correspond to the edges of the regular pentagon and the edge of a hexagon not lying on a pentagon.

### 1. Introduction

Recently Kroto et al. [1] found an interesting stable cluster  $C_{60}$  which consists of 60 carbon atoms. Concerning the question of what kind of 60-carbon atom structure might give rise to a superstable species, they suggested a truncated icosahedron, a polyhedron with 60 vertices and 32 faces, 12 of which are pentagonal and 20 hexagonal (see fig. 1). A carbon atom is placed at each vertex of this polyhedron.

In this paper we discuss  $\pi$ -electron states (we call the orbitals normal to the surface of the polyhedron “ $\pi$  orbitals”) of  $C_{60}$  by the simple Hückel method. In order to obtain information on the structure of the

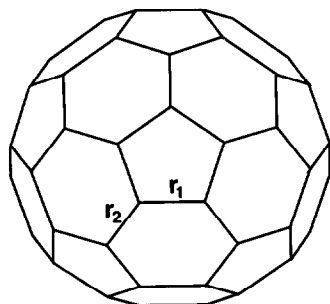


Fig. 1. Truncated icosahedron. Each carbon atom of  $C_{60}$  is supposed to lie on each vertex of this truncated icosahedron. There are two topologically different carbon–carbon bonds  $r_1$  and  $r_2$ .

$C_{60}$  molecule, we have performed a Coulson–Golebiewski self-consistent Hückel (we call it CG hereafter) [2] calculation. From the CG calculation we obtain two bond lengths  $r_1 = 1.434 \text{ \AA}$  and  $r_2 = 1.403 \text{ \AA}$  (see fig. 1 for definition of  $r_1$  and  $r_2$ ). The LUMO–HOMO energy gap is rather large, i.e.  $0.847\beta$  where  $\beta$  is the standard resonance energy.

### 2. Free electron model on the sphere

As zeroth-order approximation we can consider the  $\pi$  electrons in terms of free electrons on the sphere. Then the energy level whose angular momentum quantum number is  $l$  can be written as

$$E_l = E_0 + \gamma l(l+1), \quad (1)$$

where  $l$  ( $0, 1, 2, \dots$ ) is the angular momentum quantum number,  $E_0$  and  $\gamma$  are constants. The energy level scheme of  $E_e$  is given in fig. 2a and table 2 for the parameters  $E_0 = \alpha + 3\beta$  and  $\gamma = -(1/10)\beta$ . The occupation of the orbitals (30 orbitals with 60 electrons) is  $(l=0)^2(l=1)^6(l=2)^{10}(l=3)^{14}(l=4)^{18}(l=5)^{10}$ . The  $l=5$  shell (22 orbitals) is open shell. Then this system appears to be unstable. However because of the icosahedral symmetry the orbitals of  $l$  are decomposed into the irreducible components of the icosahedral group  $I_h$  as shown in table 1 [3]. From table 1 we can see that  $l=5$  orbitals are decomposed into

Table 1  
Partition table for the spherical harmonics of the icosahedral group [3]

$l$	Multiplicity
0 → $a_g$	1
1 → $t_{1u}$	3
2 → $h_g$	5
3 → $t_{2u} + g_u$	3 + 5
4 → $g_g + h_g$	4 + 5
5 → $t_{1u} + t_{2u} + h_u$	3 + 3 + 5
6 → $a_{1g} + t_{1g} + g_g + h_g$	1 + 3 + 4 + 5
7 → $t_{1u} + t_{2u} + g_u + h_u$	3 + 3 + 4 + 5

$t_{1u} + t_{2u} + h_u$ , and if we assume that five  $h_u$  orbitals are occupied, a closed-shell system can be obtained. Thus we see that in order to make a stable closed shell, the presence of icosahedral symmetry is essential.

### 3. The Hückel calculation

In this section we consider the simple Hückel calculation, in which the resonance integrals  $\beta$  are all equal. This corresponds to the structure of a semi-regular truncated icosahedron (edge lengths are all equal). The

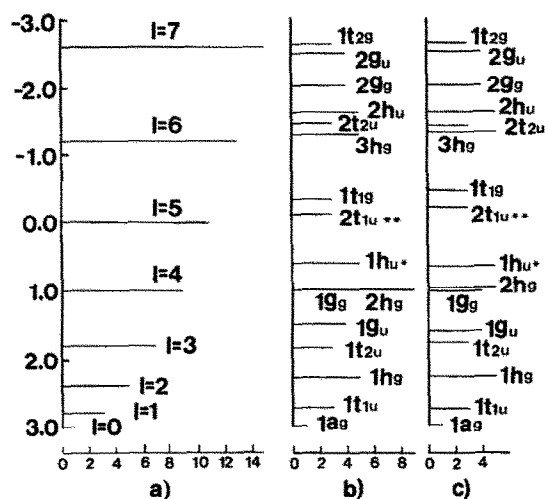


Fig. 2. The level schemes of three calculations for (a) the free electron model, (b) Hückel, and (c) CG calculation. The energy is measured from  $\alpha$  and the unit is  $\beta_g$  ( $\beta$  for graphite). The ordinate is  $\lambda$  in the energy expression  $E = \alpha + \lambda\beta_g$ . The abscissa represents the multiplicity of the level. \* and \*\* denote HOMO and LUMO, respectively.

level scheme is given in table 2 and fig. 2b. Note that there is a rather large energy gap ( $0.7566\beta$ ) between the HOMO ( $1h_u$ ) and LUMO ( $2t_u$ ). Also, note that the

Table 2  
Energy levels in three calculations. The level lies at  $\alpha + \lambda\beta_g$  with multiplicity  $m$ . Free electron energy is given by  $E_l = 3\beta - \beta l(l+1)/10$ . \* and \*\* denote HOMO and LUMO, respectively

Free electron			State	$m$	Hückel	CG
$l$	$m$	$\lambda$			$\lambda$	$\lambda$
0	1	3.000	$1a_g$	1	3.000	2.978
1	3	2.800	$1t_{1u}$	3	2.757	2.737
2	5	2.400	$1h_g$	5	2.303	2.283
3	7	1.800	$1t_{2u}$	3	1.820	1.769
4	9	1.000	$1g_u$	4	1.562	1.589
5	11	0.000	$1g_g$	4	1.000	1.023
5	13	-1.200	$2h_g$	5	1.000	0.9942
7	15	-2.600	$1h_u^*$	5	0.6180	0.6367
			$2t_{1u}^{**}$	3	-0.1386	-0.2103
			$1t_{1g}$	3	-0.3820	-0.4528
			$3h_g$	5	-1.303	-1.263
			$2t_{2u}$	3	-1.438	-1.400
			$2h_u$	5	-1.618	-1.602
			$2g_g$	4	-2.000	-1.988
			$2g_u$	4	-2.562	-2.554
			$1t_{2g}$	3	-2.618	-2.611

highest orbital does not have the energy  $E = \alpha - 3\beta$  corresponding to the antibonding limit of the alternant hydrocarbon due to the presence of 12 pentagons. The bond orders for the two kinds of bonds (1 and 2) are  $p_1 = 0.4759$  and  $p_2 = 0.6009$ . This difference of  $p_1$  and  $p_2$  suggests that bond 1 and bond 2 have different lengths. This possibility is discussed in section 4. Also note that  $1g_g$  and  $2h_g$  corresponding to  $l = 4$  are degenerate in spite of the presence of  $I_h$ . In eq. (1) by setting  $E_0 = \alpha + 3\beta$ ,  $\gamma = -\beta/10$ , low energy levels  $E_l$  ( $l = 0, 1, 2$ ) become nearly equal to the Hückel levels  $1a_g$ ,  $1t_{1u}$  and  $1h_g$ . But high energy levels  $E_l$  ( $l \geq 3$ ) do not correspond well to the Hückel levels.

#### 4. The Coulson–Golebiewski self-consistent Hückel calculation

In order to obtain reliable bond lengths of  $C_{60}$  we have performed a GC calculation [2]. The GC calculation uses the bond length–bond order ( $p$ ) relation

$$r(\text{\AA}) = 1.517 - 0.18p \quad (2)$$

and the resonance integral ( $\beta$ )–bond length ( $h$ ) relation

$$\beta = -1.563 \exp(-r/0.3727) \times 10^{33} \text{ kcal/mole.} \quad (3)$$

For the initial  $\beta$ , we use  $\beta_g$  ( $-34.52 \text{ kcal mol}^{-1}$ ) for graphite. Then, after the self-consistent iterative procedure  $\beta_g \rightarrow p \rightarrow r \rightarrow \beta' \rightarrow p' \rightarrow r' \dots$ , we finally obtained  $r_1 = 1.434 \text{ \AA}$ ,  $r_2 = 1.403 \text{ \AA}$ ,  $\beta_1 = -33.31 \text{ kcal mol}^{-1}$ ,  $\beta_2 = -36.22 \text{ kcal mol}^{-1}$ ,  $p_1 = 0.4594$ , and  $p_2 = 0.6326$ . The level scheme is summarized in table 2 and fig. 2c. The spectrum has almost similar character with the case of the Hückel calculation. Note that the HOMO–LUMO energy gap becomes larger compared with the case of the Hückel calculation ( $0.7566 \beta \rightarrow 0.8470 \beta$ ). Then we can expect that the structure with the above bond lengths is more stable. Also note that the degenerate levels  $1g_g$  and  $2h_g$  in the Hückel calculation split in the GC calculation.

The diameter  $D$  of the truncated icosahedron with  $r_1$  and  $r_2$  can be calculated by the equation

$$D = [\tau^2(2r_1 + r_2)^2 + r_2^2]^{1/2}, \quad (4)$$

where  $\tau = (5^{1/2} + 1)/2$  is the golden ratio.  $r_1 = 1.434 \text{ \AA}$  and  $r_2 = 1.403 \text{ \AA}$  give  $D = 7.053 \text{ \AA}$ .

#### 5. Conclusion

The Hückel and Coulson–Golebiewski self-consistent Hückel calculations for  $C_{60}$  with the truncated icosahedral structure have been performed. It is shown that there is a rather large HOMO–LUMO energy gap ( $=0.8470 \beta$ ) and the system is electronically stable. Two types of bonds which correspond to edges of regular pentagons and edges of non-regular hexagons not lying on pentagons have bond lengths  $r_1 = 1.434 \text{ \AA}$  and  $r_2 = 1.403 \text{ \AA}$ .

Because of the icosahedral symmetry, all energy levels except  $1a_g$  have triplet, quartet and quintet degeneracies. This high degeneracy might cause many interesting phenomena in  $C_{60}$  derivatives such as  $C_{60}$  transition-metal compounds [1].

After this work was completed, we saw the paper by Haymet [4] which reports Hückel molecular orbital calculations on  $C_{60}$  and  $C_{120}$ . His result for  $C_{60}$  is the same as our Hückel calculation.

#### Acknowledgement

The author would like to thank Professor H. Fukutome for helpful discussion.

#### References

- [1] H.W. Kroto, J.R. Heath, S.C. O'Brien, R.F. Curl and R.E. Smalley, *Nature* 318 (1985) 162.
- [2] C.A. Coulson and A. Golebiewski, *Proc. Phys. Soc. (London)* 78 (1961) 1310.
- [3] N.V. Cohan, *Proc. Cambridge Phil. Soc. Math. Phys.* 54 (1958) 28.
- [4] A.D.J. Haymet, *Chem. Phys. Letters* 122 (1985) 421.

### Rotateur Quantique: Molécule di-atomique (fin de l'amphi 04)

Nous pouvons représenter une molécule di-atomique, composée de deux atomes, comme un objet rigide (rotateur) avec un moment d'inertie  $I$ . La molécule est décrite par un Hamiltonien de rotation,  $\hat{H} = \hat{L}^2/(2I)$ , où  $\hat{L}$  est l'opérateur moment cinétique par rapport au centre de gravité. Dans le cas d'une rotation dans un plan, l'opérateur de moment cinétique est défini comme  $\hat{L} = -i\hbar d/d\theta$  et  $\theta$  réfère à l'angle de la rotation.

1. Quelles sont les valeurs propres et fonctions propres de l'Hamiltonien.

Nous devons résoudre

$$-\frac{\hbar^2}{2I} \frac{d^2}{d\theta^2} \psi = \lambda \psi.$$

Les solutions sont de la forme  $\psi_m(\theta) = \exp(im\theta)/\sqrt{2\pi}$  avec  $m \in \mathcal{Z}$ . Les valeurs propres sont  $\hbar^2 m^2 / 2I$ . L'énergie de rotation est quantifiée.

2. Que vaut  $\langle \hat{L} \rangle = \int_0^{2\pi} d\theta \psi^*(\theta) \hat{L} \psi(\theta)$  si la fonction d'onde  $\psi(\theta)$  du système est réelle:

0

$\hbar$

$2\hbar$

Supposons  $\psi$  réelle.

$$\langle \hat{L} \rangle = -i\hbar \int_0^{2\pi} \psi(\theta) \frac{d}{d\theta} \psi(\theta) d\theta.$$

Nous pouvons intégrer par parties  $u = \psi$  et  $dv = d\psi/d\theta$  et vérifier:

$$\langle \hat{L} \rangle = -i\hbar \psi^2(\theta) \Big|_0^{2\pi} - \langle \hat{L} \rangle = -i\hbar \frac{\psi^2(\theta)}{2} \Big|_0^{2\pi} = 0.$$

$$\psi(0) = \psi(2\pi).$$

$$\hat{H} = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(r) = \frac{1}{2}m\vec{v}_r^2 + \frac{1}{2}m\vec{v}_\perp^2 + V(r).$$

Le moment cinétique satisfait:  $|\vec{L}| = |\vec{r} \times m\vec{v}| = mr|v_\perp|$ .

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_r^2}{2m} + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} + V(r).$$

Les fonctions d'onde solutions de  $\hat{H}\psi(r, \theta, \varphi) = E\psi(r, \theta, \varphi)$  sont de la forme  $R(r)Y_l^m(\theta, \varphi)$ . Cela mène alors à l'équation unidimensionnelle:

$$\left( \frac{\hat{p}_r^2}{2m} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} + V(r) \right) R(r) = ER(r).$$

# Atome d'hydrogène: masse réduite

- Notion de Masse réduite  $\mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} \approx m_e.$

AMPHI05

## L'équation radiale

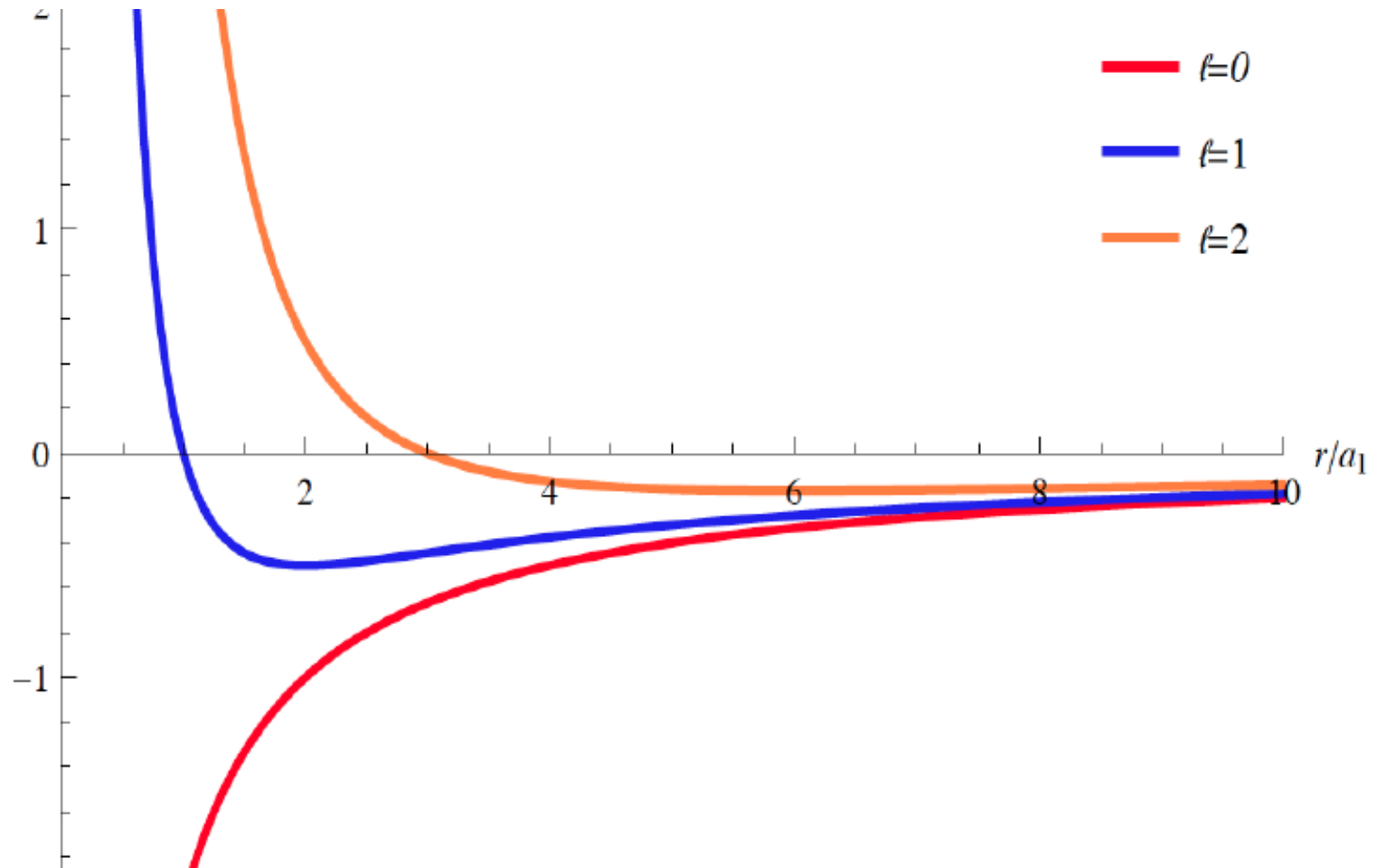
$$\left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mu r^2} + V(r) \right) R(r) = ER(r)$$

On introduit la fonction d'onde réduite  $u(r) = r R(r)$  avec  $\int_0^\infty |u(r)|^2 dr = 1$

Equation radiale :

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 u}{dr^2} + V_{\text{eff},\ell}(r)u(r) = Eu(r)$$

# Potentiel Effectif



DM2: Taille du proton

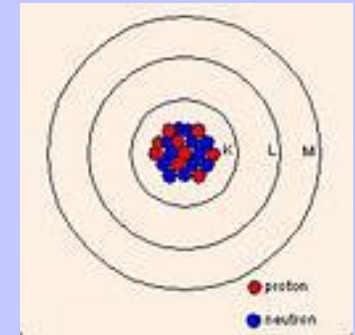
Figures de Laurent  
Sanchez-Palencia

# Orbitales 1S, 2S, 2P (DM2)...

- Niveau K (n=1)

Etat 1S  $n = 1, l = 0, m = \pm 0$

C'est l'état fondamental de symétrie sphérique 1S



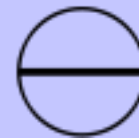
- Niveau L (n=2)

3 orbitales 2P



Etat 2S

$n = 2; l = 0; m = \pm 0$



$n = 2; l = 1; m = \pm 0$



$n = 2; l = 1; m = \pm 1$

# Table Périodique

Catégorie		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	
1	1	1,0 H Hydrogène																	2 4,0 He Hélium	
2	2	3 6,9 Li Lithium	4 9,0 Be Béryllium											5 10,8 B Bore	6 12,0 C Carbone	7 14,0 N Azote	8 16,0 O Oxygène	9 19,0 F Fluor	10 20,2 Ne Néon	
3	3	11 23,0 Na Sodium	12 24,3 Mg Magnésium											13 27,0 Al Aluminium	14 28,1 Si Silicium	15 31,0 P Phosphore	16 32,1 S Soufre	17 35,5 Cl Chlore	18 39,9 Ar Argon	
4	4	19 39,1 K Potassium	20 40,1 Ca Calcium	21 45,0 Sc Scandium	22 47,9 Ti Titane	23 50,9 V Vanadium	24 52,0 Cr Chrome	25 54,9 Mn Manganèse	26 55,8 Fe Fer	27 58,9 Co Cobalt	28 58,7 Ni Nickel	29 63,5 Cu Cuivre	30 65,4 Zn Zinc	31 69,7 Ga Gallium	32 72,6 Ge Germanium	33 74,9 As Arsenic	34 79,0 Se Sélénium	35 79,9 Br Brome	36 83,8 Kr Krypton	
5	5	37 85,5 Rb Rubidium	38 87,6 Sr Strontium	39 88,9 Y Yttrium	40 91,2 Zr Zirconium	41 92,9 Nb Niobium	42 95,9 Mo Molybdène	43 (98) Tc Technétium	44 101,1 Ru Ruthénium	45 102,9 Rh Rhodium	46 106,4 Pd Palladium	47 107,9 Ag Argent	48 112,4 Cd Cadmium	49 114,8 In Indium	50 118,7 Sn Étain	51 121,8 Sb Antimoine	52 127,6 Te Tellure	53 126,9 I Iode	54 131,3 Xe Xénon	
6	6	55 132,9 Cs Césium	56 137,3 Ba Baryum	57 138,9 La Lanthane	72 178,5 Hf Hafnium	73 180,9 Ta Tantale	74 183,8 W Tungstène	75 186,2 Re Rhenium	76 190,2 Os Osmium	77 192,2 Ir Iridium	78 195,1 Pt Platine	79 197,0 Au Or	80 200,6 Hg Mercure	81 204,4 Tl Thallium	82 207,2 Pb Plomb	83 209,0 Bi Bismuth	84 (209) Po Polonium	85 (210) At Astate	86 (222) Rn Radon	
7	7	87 (223) Fr Francium	88 (226) Ra Radium	89 (227) Ac Actinium	104 (261) Rf Rutherfordium	105 (262) Db Dubnium	106 (266) Sg Seaborgium	107 (264) Bh Bohrium	108 (269) Hs Hassium	109 (268) Mt Meitnerium	110 (269) Uun Ununillium	111 (272) Uuu Ununium	112 (277) Uub Ununbium	114 Uuq Ununquadium	116 Uuh Ununhexium	118 Uuo Ununoctium				
	6				58 140,1 Ce Cérium	59 140,9 Pr Prasodyme	60 144,2 Nd Néodyme	61 (145) Pm Prométhium	62 150,4 Sm Samarium	63 152,0 Eu Europium	64 157,4 Gd Gadolinium	65 158,9 Tb Terbium	66 162,5 Dy Dysprosium	67 164,9 Ho Holmium	68 167,3 Er Erbium	69 168,9 Tm Thulium	70 173,0 Yb Ytterbium	71 175,0 Lu Lutétium		
	7				90 232,0 Th Thorium	91 231,0 Pa Protactinium	92 238,0 U Uranium	93 (237) Np Neptunium	94 (244) Pu Plutonium	95 (243) Am Américium	96 (247) Cm Curium	97 (247) Bk Berkélium	98 (251) Cf Californium	99 (254) Es Einsteinium	100 (257) Fm Fermium	101 (258) Md Mendélévium	102 (259) No Nobélium	103 (260) Lw Lawrencium		


Numéro atomique → Z

Masse molaire atomique (g.mol<sup>-1</sup>) → M

Symbole atomique → X

Famille →

Nom →



Dmitri Ivanovitch Mendeleïev (1834 - 1907) est un chimiste russe connu pour ses travaux sur la classification périodique des éléments. En 1869, il publia une première version de son tableau périodique des éléments appelé aussi tableau de Mendeleïev. Il clarifia que les éléments chimiques pouvaient être arrangés selon un modèle qui permettait de prévoir les propriétés des éléments non encore découverts.

PC05, Phys 430 - Mécanique Quantique Avancée  
 Karyn Le Hur, karyn.le-hur@polytechnique.edu  
 Groupes 03/10  
 Mardi 29 Septembre 2015

### Atome d'Hydrogène et Atome de Rydberg

Dans cette petite classe, nous partirons de l'équation radiale pour l'atome d'hydrogène et étudierons ce problème par résolution algébrique. Nous nous intéresserons aussi aux atomes de Rydberg pour lesquels l'image de Bohr semi-classique s'applique.

## 1 Equation Radiale sans dimension

On considère l'équation radiale pour l'atome d'hydrogène, pour une valeur donnée  $l$  du moment cinétique orbital :

$$\hat{H}_l u(r) = \left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{e^2}{r} \right) u(r) = E u(r). \quad (1)$$

On utilise comme unité de longueur le rayon de Bohr (ici noté)  $a_1 = \hbar^2/(\mu e^2)$  et comme unité d'énergie  $E_I = \mu e^4/(2\hbar^2) = e^2/(2a_1) \approx 13.6\text{eV}$  correspondant à l'énergie d'ionisation de l'atome d'hydrogène.

En introduisant les variables sans dimensions  $\rho = r/a_1$  et  $\epsilon = E/E_I$ , montrer que l'équation aux valeurs propres s'écrit :

$$\hat{h}_l u(\rho) = \left( -\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{l(l+1)}{\rho^2} - \frac{2}{\rho} \right) u(\rho) = \epsilon u(\rho). \quad (2)$$

## 2 Résolution Algébrique de l'équation radiale

Nous allons résoudre cette équation radiale en introduisant une méthode algébrique.

1. Nous introduisons l'opérateur différentiel

$$\hat{a}_l = \frac{1}{l+1} - \frac{l+1}{\rho} - \frac{d}{d\rho}. \quad (3)$$

Déterminer son adjoint  $\hat{a}_l^\dagger$ .

2. Calculer  $\hat{a}_l \hat{a}_l^\dagger$  et exprimer le résultat obtenu à l'aide de  $\hat{h}_l$ .
3. Calculer  $\hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l$  et exprimer le résultat obtenu à l'aide de  $\hat{h}_{l+1}$ .
4. On considère un état propre  $|u\rangle$  de  $\hat{h}_l$  associé à la valeur propre  $\epsilon$ . Que dire de  $\hat{a}_l^\dagger |u\rangle$ ? Calculer la norme de  $\hat{a}_l^\dagger |u\rangle$ . En déduire une borne inférieure de  $\epsilon$ .
5. Par analogie avec l'oscillateur harmonique, et l'image de Dirac, ainsi que celle de Cartan pour le moment cinétique, déterminer les valeurs autorisées pour  $\epsilon$  dans le cas d'un état lié impliquant  $\epsilon < 0$ .

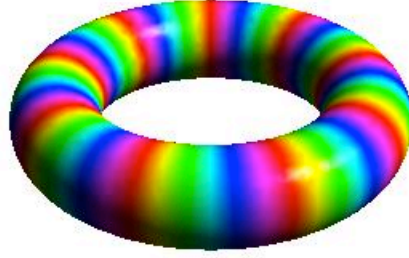


FIGURE 1 – Exemple : atome de Rydberg (Johannes Rydberg, 1854-1919)

6. En utilisant le fait que  $\hat{a}_{n-1}^\dagger |u\rangle = 0$ , montrer que la fonction d'onde radiale prend la forme :

$$u_{n,n-1}(\rho) \propto \rho^n \exp(-\rho/n). \quad (4)$$

7. Que dire de  $\hat{a}_{l-1} |u\rangle$  ?  
 8. En déduire une méthode permettant de construire l'ensemble des fonctions propres radiales associées aux états propres de l'atome d'hydrogène.

### 3 Atome de Rydberg

Nous nous concentrons ici sur la physique des atomes de Rydberg tels que  $l = l_{max} = n - 1$  et  $n \gg 1$ .

1. En utilisant les résultats de 2.6, montrer que la fonction d'onde présente un pic étroit au voisinage de  $r = a_1 n^2$ . Quelle est la largeur  $\Delta r$  de ce pic ?
2. Concernant la partie angulaire de la fonction d'onde, nous rappelons que  $Y_l^l(\theta, \varphi) \propto e^{il\varphi} (\sin \theta)^l$ . En déduire que si  $l \gg 1$  alors  $|Y_l^l(\theta, \varphi)|^2$  est non nul uniquement au voisinage de  $\theta = \pi/2$ . Déduire que pour  $n \gg 1$ , les états  $l = n - 1$  et  $|m| = l$  sont localisés dans un tore horizontal de rayon  $n^2 a_1$  dont la section est un cercle de rayon  $a_1 n^{3/2}$ .
3. Comparer les orbites avec celles obtenues dans la prescription de Bohr.

*Nous préparerons un QUIZZ sur les atomes hydrogénoïdes.*

PC05, Phys 430 - Mécanique Quantique Avancée  
 Karyn Le Hur, karyn.le-hur@polytechnique.edu  
 Groupes 03/10  
 Mardi 29 Septembre 2015

### Atome d'Hydrogène et Atome de Rydberg

Dans cette petite classe, nous partirons de l'équation radiale pour l'atome d'hydrogène et étudierons ce problème par résolution algébrique. Nous nous intéresserons aussi aux atomes de Rydberg pour lesquels l'image de Bohr semi-classique s'applique.

## 1 Equation Radiale sans dimension

On considère l'équation radiale pour l'atome d'hydrogène, pour une valeur donnée  $l$  du moment cinétique orbital :

$$\hat{H}_l u(r) = \left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{e^2}{r} \right) u(r) = E u(r). \quad (1)$$

On utilise comme unité de longueur le rayon de Bohr (ici noté)  $a_1 = \hbar^2/(\mu e^2)$  et comme unité d'énergie  $E_I = \mu e^4/(2\hbar^2) = e^2/(2a_1) \approx 13.6\text{eV}$  correspondant à l'énergie d'ionisation de l'atome d'hydrogène.

En introduisant les variables sans dimensions  $\rho = r/a_1$  et  $\epsilon = E/E_I$ , montrer que l'équation aux valeurs propres s'écrit :

$$\hat{h}_l u(\rho) = \left( -\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{l(l+1)}{\rho^2} - \frac{2}{\rho} \right) u(\rho) = \epsilon u(\rho). \quad (2)$$

• Il est peut-être utile de développer le calcul : nous multiplions tout d'abord l'équation (1) par  $2/e^2$  :

$$\left( -\frac{\hbar^2}{\mu e^2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{\mu r^2 e^2} - \frac{2}{r} \right) u(r) = \frac{2E}{e^2} u(r).$$

En multipliant par  $a_1$ , cela donne maintenant le résultat demandé :

$$\left( -\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{l(l+1)}{\rho^2} - \frac{2}{\rho} \right) u(\rho) = \epsilon u(\rho).$$

## 2 Résolution Algébrique de l'équation radiale

Nous allons résoudre cette équation radiale en introduisant une méthode algébrique.

1. Nous introduisons l'opérateur différentiel

$$\hat{a}_l = \frac{1}{l+1} - \frac{l+1}{\rho} - \frac{d}{d\rho}. \quad (3)$$

Déterminer son adjoint  $\hat{a}_l^\dagger$ .

• Il y a ici une subtilité concernant l'adjoint du dernier opérateur. Nous reviendrons sur la démonstration que  $\hat{p}_x = -i\hbar\partial/\partial x$  est hermitien. En jouant avec l'Intégration par Parties dans la deuxième ligne :

$$\begin{aligned}\langle p \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi^*(x, t) \left( -i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} \right) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi^*(x, t) \hat{p} \psi(x, t) \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi(x, t) \left( i\hbar \frac{\partial \psi^*(x, t)}{\partial x} \right) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi^*(x, t) \hat{p}^\dagger \psi(x, t) = \langle p \rangle^*.\end{aligned}$$

(Nous avons des fonctions dans  $L^2(\mathbb{R})$ ). Cela implique donc que  $\hat{p} = \hat{p}^\dagger$  et donc que  $\partial/\partial x$  est anti-hermitien.

Dans le contexte présent, cela implique donc que :

$$\hat{a}_l^\dagger = \frac{1}{l+1} - \frac{l+1}{\rho} + \frac{d}{d\rho}.$$

2. Calculer  $\hat{a}_l \hat{a}_l^\dagger$  et exprimer le résultat obtenu à l'aide de  $\hat{h}_l$ .

• En utilisant le fait que  $\frac{d}{d\rho} \left( \frac{1}{\rho} f(\rho) \right) = -\frac{1}{\rho^2} f(\rho) + \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} f(\rho)$  nous obtenons 9 termes qui peuvent être développés :

$$\begin{aligned}\hat{a}_l \hat{a}_l^\dagger &= \left( \frac{1}{l+1} - \frac{l+1}{\rho} - \frac{d}{d\rho} \right) \left( \frac{1}{l+1} - \frac{l+1}{\rho} + \frac{d}{d\rho} \right) \\ &= \frac{1}{(l+1)^2} - \frac{1}{\rho} + \frac{1}{l+1} \frac{d}{d\rho} - \frac{1}{\rho} + \frac{(l+1)^2}{\rho^2} - \frac{l+1}{\rho} \frac{d}{d\rho} - \frac{1}{l+1} \frac{d}{d\rho} + \frac{l+1}{\rho} \frac{d}{d\rho} - \frac{l+1}{\rho^2} - \frac{d^2}{d\rho^2} \\ &= -\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} - \frac{2}{\rho} + \frac{1}{(l+1)^2} \\ &= \hat{h}_l + \frac{1}{(l+1)^2}.\end{aligned}$$

3. Calculer  $\hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l$  et exprimer le résultat obtenu à l'aide de  $\hat{h}_{l+1}$ .

$$\begin{aligned}\hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l &= \left( \frac{1}{l+1} - \frac{l+1}{\rho} + \frac{d}{d\rho} \right) \left( \frac{1}{l+1} - \frac{l+1}{\rho} - \frac{d}{d\rho} \right) \\ &= \frac{1}{(l+1)^2} - \frac{1}{\rho} - \frac{1}{l+1} \frac{d}{d\rho} - \frac{1}{\rho} + \frac{(l+1)^2}{\rho^2} + \frac{l+1}{\rho} \frac{d}{d\rho} + \frac{1}{l+1} \frac{d}{d\rho} - \frac{l+1}{\rho} \frac{d}{d\rho} + \frac{l+1}{\rho^2} - \frac{d^2}{d\rho^2} \\ &= -\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{(\ell+1)(\ell+2)}{\rho^2} - \frac{2}{\rho} + \frac{1}{(l+1)^2} \\ &= \hat{h}_{l+1} + \frac{1}{(l+1)^2}\end{aligned}$$

4. On considère un état propre  $|u\rangle$  de  $\hat{h}_l$  associé à la valeur propre  $\epsilon$ . Que dire de  $\hat{a}_l^\dagger |u\rangle$  ? Calculer la norme de  $\hat{a}_l^\dagger |u\rangle$ . En déduire une borne inférieure de  $\epsilon$ .

• D'après ce qui précède, la relation  $\hat{h}_l |u\rangle = \epsilon |u\rangle$  peut s'écrire

$$\left( \hat{a}_l \hat{a}_l^\dagger - \frac{1}{(l+1)^2} \right) |u\rangle = \epsilon |u\rangle$$

En faisant agir l'opérateur  $\hat{a}_\ell^\dagger$  sur cette équation, on obtient

$$\left( \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell - \frac{1}{(\ell+1)^2} \right) \hat{a}_\ell^\dagger |u\rangle = \hat{a}_\ell^\dagger \epsilon |u\rangle$$

Soit  $\hat{h}_{\ell+1} \hat{a}_\ell^\dagger |u\rangle = \epsilon \hat{a}_\ell^\dagger |u\rangle$ . Le vecteur  $\hat{a}_\ell^\dagger |u\rangle$  est donc soit nul soit vecteur propre de  $\hat{h}_{\ell+1}$  pour la même valeur propre  $\epsilon$ .

$$\|\hat{a}_\ell^\dagger |u\rangle\|^2 = \langle u | \hat{a}_\ell \hat{a}_\ell^\dagger |u\rangle = \langle u | \left( \hat{h}_\ell + \frac{1}{(\ell+1)^2} \right) |u\rangle = \epsilon + \frac{1}{(\ell+1)^2} \geq 0.$$

Nous déduisons

$$\epsilon \geq -\frac{1}{(\ell+1)^2}.$$

5. Par analogie avec l'oscillateur harmonique, et l'image de Dirac, ainsi que celle de Cartan pour le moment cinétique, déterminer les valeurs autorisées pour  $\epsilon$  dans le cas d'un état lié impliquant  $\epsilon < 0$ .

- Pour une valeur donnée de  $\epsilon < 0$ , l'action successive de  $\hat{a}_\ell^\dagger, \hat{a}_{\ell+1}^\dagger, \hat{a}_{\ell+2}^\dagger$ , etc. permet de grimper dans l'échelle des valeurs de  $\ell$  jusqu'à un point où l'inégalité démontrée à la question précédente ne sera plus valable, ce qui est absurde. Comme pour l'oscillateur harmonique ou la théorie du moment cinétique, il faut donc que le processus s'arrête. On en déduit qu'il existe une valeur  $\ell_{max}$  de  $\ell$  telle que  $|u\rangle$  soit vecteur propre de  $\hat{h}_{\ell_{max}}$  pour la valeur propre  $\epsilon$  mais que  $\hat{a}_{\ell_{max}}^\dagger |u\rangle$  soit le vecteur nul. En considérant le nombre entier défini par  $n = \ell_{max} + 1$ , on en déduit que les seules valeurs permises des énergies des états liés vérifient la condition

$$\epsilon = \epsilon_n = -\frac{1}{n^2}.$$

(pour  $n = 1$ , nous vérifions que la limite  $-1$  est atteinte.)

6. En utilisant le fait que  $\hat{a}_{n-1}^\dagger |u\rangle = 0$ , montrer que la fonction d'onde radiale prend la forme :

$$u_{n,n-1}(\rho) \propto \rho^n \exp(-\rho/n). \quad (4)$$

- On sait que dans ce cas la fonction radiale obéit à la relation  $\hat{a}_{n-1}^\dagger |u\rangle = 0$ . On obtient donc l'équation différentielle d'ordre 1

$$\left( \frac{1}{n} - \frac{n}{\rho} + \frac{d}{d\rho} \right) u(\rho) = 0$$

Le terme en  $n/\rho$  dans l'équation différentielle incite à faire le changement de variable  $u(\rho) = \rho^n v(\rho)$ . On a alors

$$\frac{du}{d\rho} = \frac{n}{\rho} u + \rho^n \frac{dv}{d\rho}$$

En remplaçant dans l'équation différentielle, on obtient

$$\frac{1}{n} \rho^n v(\rho) + \rho^n \frac{dv}{d\rho} = 0$$

soit

$$\frac{1}{n} v(\rho) + \frac{dv}{d\rho} = 0$$

équation différentielle linéaire à coefficients constants dont la solution est  $v(\rho) \propto \exp(-\rho/n)$ . On en déduit

$$u_{n,n-1}(\rho) \propto \rho^n \exp\left(-\frac{\rho}{n}\right)$$

7. Que dire de  $\hat{a}_{\ell-1}|u\rangle$  ?

- D'après ce qui précède, la relation  $\hat{h}_\ell|u\rangle = \epsilon|u\rangle$  peut s'écrire

$$\left(\hat{a}_{\ell-1}^\dagger \hat{a}_{\ell-1} - \frac{1}{\ell^2}\right)|u\rangle = \epsilon|u\rangle$$

En faisant agir l'opérateur  $\hat{a}_{\ell-1}$  sur cette équation, on obtient

$$\left(\hat{a}_{\ell-1} \hat{a}_{\ell-1}^\dagger - \frac{1}{\ell^2}\right)\hat{a}_{\ell-1}|u\rangle = \hat{a}_{\ell-1}\epsilon|u\rangle$$

Soit  $\hat{h}_{\ell-1}\hat{a}_{\ell-1}|u\rangle = \epsilon\hat{a}_{\ell-1}|u\rangle$ . Le vecteur  $\hat{a}_{\ell-1}|u\rangle$  est donc soit nul soit vecteur propre de  $\hat{h}_{\ell-1}$  pour la même valeur propre  $\epsilon$ .

8. En déduire une méthode permettant de construire l'ensemble des fonctions propres radiales associées aux états propres de l'atome d'hydrogène.

- On obtiendra les autres fonctions radiales à l'aide de la relation

$$|u_{n,\ell-1}\rangle = \frac{\hat{a}_{\ell-1}|u_{n,\ell}\rangle}{\|\hat{a}_{\ell-1}|u_{n,\ell}\rangle\|}$$

Remarquons que

$$\|\hat{a}_{\ell-1}|u_{n,\ell}\rangle\|^2 = \langle u_{n,\ell}|\hat{a}_{\ell-1}^\dagger \hat{a}_{\ell-1}|u_{n,\ell}\rangle = \langle u_{n,\ell}|\left(\hat{h}_\ell + \frac{1}{\ell^2}\right)|u_{n,\ell}\rangle = -\frac{1}{n^2} + \frac{1}{\ell^2} > 0$$

car  $\ell < n$ .

Note : Il y a un point subtil, nous n'avons pas parlé du nombre quantique  $m$ . Nous reviendrons sur ce point.

### 3 Atome de Rydberg

Nous nous concentrons ici sur la physique des atomes de Rydberg tels que  $l = l_{max} = n - 1$  et  $n \gg 1$ .

1. En utilisant les résultats de 2.6, montrer que la fonction d'onde présente un pic étroit au voisinage de  $r = a_1 n^2$ . Quelle est la largeur  $\Delta r$  de ce pic ?

- Nous avons montré précédemment que si  $l = l_{max} = n - 1$  alors  $u_{n,l_{max}} \propto \rho^n \exp(-\rho/n)$  avec  $\rho = r/a_1$ . Etudions la fonction  $f_n(x) \propto x^n \exp(-x/n)$  au voisinage de  $x_0 = n^2$ . En faisant un développement de Taylor autour de  $x_0$  :

$$f_n(x) = f_n(x_0) \left(1 + \frac{(x - x_0)}{x_0}\right)^n \exp -[(x - x_0)/n].$$

Maintenant

$$\left(1 + \frac{(x - x_0)}{x_0}\right)^n = \exp\left(n \ln\left(1 + \frac{(x - x_0)}{x_0}\right)\right) \approx \exp\left(n\left(\frac{(x - x_0)}{n^2} - (x - x_0)^2 \frac{1}{2n^4}\right)\right).$$

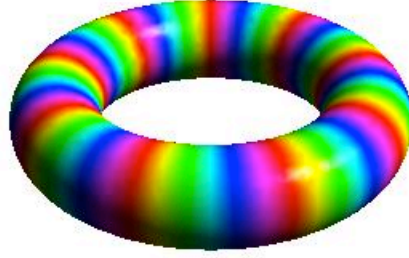


FIGURE 1 – Exemple : atome de Rydberg (Johannes Rydberg, 1854-1919)

Pour  $x \approx x_0 = n^2$  nous obtenons ainsi :

$$f_n(x) \approx f_n(x_0) \exp\left(-\frac{(x - x_0)^2}{2n^3}\right).$$

La fonction d'onde est bien piquée en  $n^2$  avec un écart type de l'ordre de  $\Delta\rho = (n^3)^{1/2}$ . Pour  $n \gg 1$ , nous vérifions  $\Delta\rho/\rho \rightarrow 0$ .

- Concernant la partie angulaire de la fonction d'onde, nous rappelons que  $Y_l^l(\theta, \varphi) \propto e^{il\varphi}(\sin\theta)^l$ . En déduire que si  $l \gg 1$  alors  $|Y_l^l(\theta, \varphi)|^2$  est non nul uniquement au voisinage de  $\theta = \pi/2$ . Déduire que pour  $n \gg 1$ , les états  $l = n - 1$  et  $|m| = l$  sont localisés dans un tore horizontal de rayon  $n^2 a_1$  dont la section est un cercle de rayon  $a_1 n^{3/2}$ .

• Nous avons :

$$|Y_l^l(\theta, \varphi)|^2 = |c_l|^2 (\sin\theta)^{2l}.$$

Si  $l$  est grand ( $l \gg 1$ ) :

$$(\sin\theta)^{2l} \approx \exp((2l) \ln(\sin\theta)),$$

la fonction d'onde sera caractérisée par  $\sin\theta \approx 1$  soit  $\theta = \pi/2$ . Nous pouvons poser  $\tilde{\theta} = \pi/2 - \theta$ . Nous obtenons ainsi

$$|Y_l^l(\theta, \varphi)|^2 = |c_l|^2 \exp(2l \ln \cos \tilde{\theta}) \approx |c_l|^2 \exp\left(2l \ln(1 - \tilde{\theta}^2/2)\right) \approx |c_l|^2 \exp(-\tilde{\theta}^2 l).$$

L'incertitude sur l'angle  $\theta$  est  $\approx 1/\sqrt{l}$ . En multipliant par  $n^2 a_1$  (rayon moyen), cela génère une section en forme de cercle de périmètre  $\sim (1/\sqrt{l})n^2 a_1 \approx n^{3/2} a_1$ . Nous ferons un dessin.

- Comparer les orbites avec celles obtenues dans la prescription de Bohr.

• Dans la prescription de Bohr, pour un mouvement circulaire :

$$\frac{\mu v^2}{r} = \frac{e^2}{r^2}.$$

Nous utilisons la masse réduite  $\mu \sim m_e$ . Nous en déduisons alors  $v^2 = e^2/(\mu r)$  (1). En utilisant la quantification du moment cinétique de Bohr  $2\pi r = n\lambda$  avec  $n = 1, 2, 3, \dots$ . Cela donne  $2\pi r = nh/p = nh/(\mu v)$  (2). L'équation (2) est équivalente à  $v^2 = (nh)^2/(\mu^2(2\pi)^2 r^2)$ . En comparant avec l'expression (1), nous obtenons :

$$r = \frac{n^2 \hbar^2}{e^2 \mu} = n^2 a_1.$$

Pour  $n$  grand, cette image classique est bien adaptée pour décrire les atomes de Rydberg.

*Nous préparerons un QUIZZ sur les atomes hydrogénoïdes.*

**PC6 : Horloges atomiques au césium**  
**Groupe 03/10 - Mardi 06 Octobre 2015**  
**Mme Karyn Le Hur, karyn.le-hur@polytechnique.edu**

Par définition, la seconde est la durée de 9 192 631 770 périodes de la radiation correspondant à la transition entre les niveaux hyperfins  $F=3$  et  $F=4$  de l'état fondamental  $^6S_{1/2}$  de l'atome de Césium 133. L'exercice 1 porte sur la structure hyperfine de l'atome de Césium 133, tandis que l'exercice 2 porte sur la méthode des franges de Ramsey, qui donne aux horloges atomiques leur précision exceptionnelle.

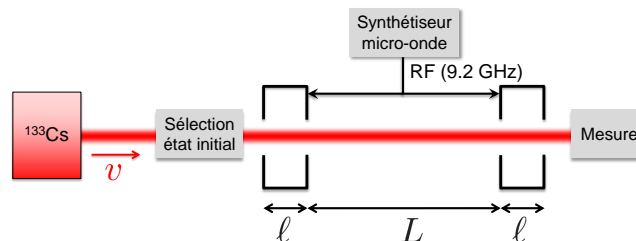
### Exercice 1 : Structure Hyperfine et Alcalins

On s'intéresse dans cet exercice à la structure hyperfine du niveau fondamental de l'atome de Césium 133. Cet atome, de numéro atomique 55, est un alcalin - i.e. situé en première colonne du tableau périodique des éléments. Pour déterminer la structure hyperfine, on ne considérera donc que son électron célibataire, en couche 6s. Par ailleurs, le noyau du Césium 133 possède un spin  $S_n$  égal à  $7/2$ . Comme on ne s'intéresse qu'au niveau électronique fondamental, on ne considérera dans l'exercice que les degrés de liberté de spin du noyau et de l'électron. On appelle  $\vec{F} = \vec{S}_n + \vec{S}_e$  le moment cinétique total et on note  $\mathcal{E}_{F,m}$  l'espace propre commun à  $\hat{F}^2$  et  $\hat{F}_z$  pour les valeurs propres  $F(F+1)\hbar^2$  et  $m\hbar$ .

- 1.1. Quelle est la dimension de l'espace de Hilbert ? Donner les valeurs propres  $m\hbar$  de l'opérateur  $\hat{F}_z$ , ainsi que leurs dégénérescences.
- 1.2. On appelle  $\mathcal{E}_m$  l'espace propre de  $\hat{F}_z$  associé à la valeur propre  $m\hbar$ . Donner une relation entre la dimension de l'espace  $\mathcal{E}_m$  et les dimensions des espaces  $\mathcal{E}_{F,m}$ .
- 1.3. Déterminer la dimension de l'espace  $\mathcal{E}_{F,F}$  puis celle des espaces  $\mathcal{E}_{F,m}$ , d'abord pour  $F = 4$  puis pour  $F = 3$ .
- 1.4. Quelles sont finalement les valeurs possibles de  $F$  et  $m$  ?
- 1.5. Que peut-on en conclure sur la structure hyperfine du niveau fondamental du Césium 133 ?

### Exercice 2 : Les franges de Ramsey

La méthode dite des franges de Ramsey, qui a valu à son inventeur le prix Nobel de physique en 1989, consiste à utiliser une succession de deux chambres d'interaction afin d'améliorer la précision d'une mesure de fréquence de résonance.



On considère l'application de cette méthode à l'horloge atomique représentée ci-dessus. On utilise un jet atomique d'atomes de Césium, préparés dans un état hyperfin déterminé, qui passent dans une première cavité où il sont soumis à un champ microonde alternatif pendant une durée  $\tau = \ell/v$ . Après un temps  $T = L/v$ , les atomes traversent une seconde cavité microonde pendant la même durée  $\tau$ . Un dispositif de mesure permet enfin de déterminer la probabilité de transition induite par le dispositif.

On admet qu'en appliquant un champ magnétique statique approprié il est possible de cliver par effet Zeeman les sous-niveaux  $F = 3$  et  $F = 4$ , ce qui permet de se ramener à un système à deux niveaux  $|-\rangle = |F = 3, m = 0\rangle$  et  $|+\rangle = |F = 4, m = 0\rangle$ , qui seront les seuls états considérés dans la suite de l'exercice. L'hamiltonien du système couplé au champ magnétique oscillant s'écrit alors

$$\hat{H}(t) = \frac{\hbar\omega_0}{2} (|+\rangle\langle+| - |-\rangle\langle-|) + \hbar\omega_1 \cos\omega t (|+\rangle\langle-| + |-\rangle\langle+|)$$

où  $\omega_0/(2\pi) \approx 9.2$  GHz est la fréquence de transition entre les deux états hyperfins et  $\omega_1$  est proportionnel à l'amplitude du champ magnétique oscillant, de fréquence  $\omega$ . On pose  $|\psi(t)\rangle = a_+(t)|+\rangle + a_-(t)|-\rangle$ .

**2.1.** Ecrire les équations différentielles dont sont solutions  $a_+(t)$  et  $a_-(t)$ .

**2.2.** Afin de résoudre le système d'équations obtenu, on introduit le changement de variable

$$a_{\pm}(t) = \gamma_{\pm}(t)e^{\mp i\omega t/2}.$$

Etablir l'équation différentielle portant sur  $\gamma_{\pm}(t)$ .

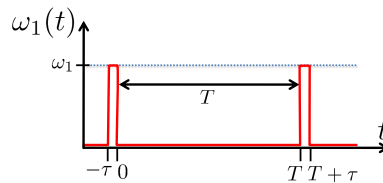
**2.3.** Dans le cas où  $|\omega - \omega_0| \ll \omega_0$ , montrer que l'on peut négliger le terme dépendant du temps dans l'équation obtenue.

**2.4.** En vous inspirant d'une analogie avec un phénomène connu, justifier pour quelle raison cette approximation s'appelle l'*approximation de l'onde tournante* (rotating wave approximation, ou RWA). Interpréter dans ce cadre le changement de variable introduit à la question 2.

**2.5.** On fait maintenant l'approximation que la fréquence  $\omega$  est très proche de  $\omega_0$ , ce qui nous permet de négliger le terme diagonal dans l'équation d'évolution de  $\gamma_{\pm}(t)$ . Résoudre le système d'équations obtenu et en déduire l'expression de  $\gamma_{\pm}(t)$  en fonctions des conditions initiales  $\gamma_{\pm}(t_0)$ .

**2.6.** Qu'obtient-on dans le cas où la durée d'interaction  $t - t_0 = \tau$  est choisie de sorte que  $\omega_1\tau = \pi/2$ ? (Cette contrainte sur le temps s'appelle effectuer une rotation de  $\pi/2$ )

**2.7.** On s'intéresse maintenant au problème de l'horloge atomique à deux cavités discutée plus haut. On considérera que l'atome est initialement préparé dans l'état  $|-\rangle$ , puis séjourne dans la première cavité pour  $-\tau \leq t \leq 0$  et dans la seconde cavité pour  $T \leq t \leq T + \tau$ . Cela revient à prendre une fréquence  $\omega_1(t)$  constante par morceau, comme représenté ci-dessous.



**2.8.** Déterminer  $\gamma_+(T)$  et  $\gamma_-(T)$  à l'entrée de la deuxième cavité.

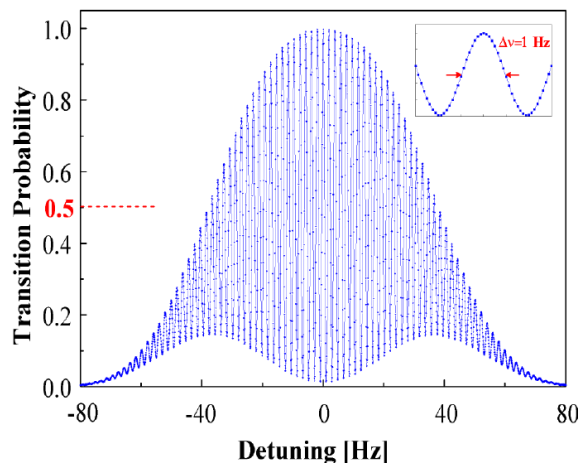
**2.9.** Nous effectuons maintenant une rotation de  $\pi/2$  dans la deuxième cavité signifiant

$$\gamma_+(T + \tau) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\gamma_+(T) - i\gamma_-(T)).$$

Déterminer la probabilité  $\mathcal{P}(\omega)$  de mesurer le système dans l'état  $|+\rangle$  en sortie de la seconde cavité.

**2.10.** Question Guidée : Interpréter ce résultat en termes d'interférences entre deux chemins quantiques.

**2.11.** La figure ci-dessous représente le résultat d'une expérience effectuée à l'aide d'une fontaine atomique, dispositif qui consiste à jeter les atomes en l'air pour qu'ils soient en chute libre pendant un temps  $T$  entre leurs deux passages dans une même cavité. Quelles sont les valeurs utilisées pour  $T$  et  $\tau$ ? Quelle est la hauteur de la fontaine?



## PC6 : Horloges atomiques au césium

Par définition, la seconde est la durée de 9 192 631 770 périodes de la radiation correspondant à la transition entre les niveaux hyperfins  $F=3$  et  $F=4$  de l'état fondamental  $^6S_{1/2}$  de l'atome de Césium 133. L'exercice 1 porte sur la structure hyperfine de l'atome de Césium 133, tandis que l'exercice 2 porte sur la méthode des franges de Ramsey, qui donne aux horloges atomiques leur précision exceptionnelle.

### Exercice 1 : Structure Hyperfine et Alcalins

On s'intéresse dans cet exercice à la structure hyperfine du niveau fondamental de l'atome de Césium 133. Cet atome, de numéro atomique 55, est un alcalin - i.e. situé en première colonne du tableau périodique des éléments. Pour déterminer la structure hyperfine, on ne considérera donc que son électron célibataire, en couche 6s. Par ailleurs, le noyau du Césium 133 possède un spin  $S_n$  égal à  $7/2$ . Comme on ne s'intéresse qu'au niveau électronique fondamental, on ne considérera dans l'exercice que les degrés de liberté de spin du noyau et de l'électron. On appelle  $\vec{F} = \vec{S}_n + \vec{S}_e$  le moment cinétique total et on note  $\mathcal{E}_{F,m}$  l'espace propre commun à  $\hat{F}^2$  et  $\hat{F}_z$  pour les valeurs propres  $F(F+1)\hbar^2$  et  $m\hbar$ .

**1.1.** Quelle est la dimension de l'espace de Hilbert ? Donner les valeurs propres  $m\hbar$  de l'opérateur  $\hat{F}_z$ , ainsi que leurs dégénérescences.

En suivant les règles du moment cinétique, l'espace de Hilbert est le produit tensoriel entre l'espace de dimension  $2 \times 7/2 + 1 = 8$  associé au spin nucléaire et l'espace de dimension 2 associé au spin électronique. C'est donc un espace de dimension  $8 \times 2 = 16$ . La base tensorielle  $|7/2, m_n\rangle \otimes |1/2, \pm 1/2\rangle$  est une base propre de  $\hat{F}_z$  avec les valeurs propres  $m\hbar$  où  $m = m_n \pm 1/2$ . On en déduit que les valeurs possibles de  $m$  sont les entiers compris entre  $-4$  et  $+4$ . Les valeurs  $m = \pm 4$  sont non dégénérées (vecteur propre  $|7/2, \pm 7/2\rangle \otimes |1/2, \pm 1/2\rangle$ ) tandis que les autres valeurs sont dégénérées deux fois.

On vérifie que  $1 + 7 \times 2 + 1 = 16$ .

**1.2.** On appelle  $\mathcal{E}_m$  l'espace propre de  $\hat{F}_z$  associé à la valeur propre  $m\hbar$ . Donner une relation entre la dimension de l'espace  $\mathcal{E}_m$  et les dimensions des espaces  $\mathcal{E}_{F,m}$ .

Une base possible de  $\mathcal{E}_m$  est la juxtaposition des bases des espaces  $\mathcal{E}_{F,m}$  pour  $F \geq |m|$ , donc

$$\dim \mathcal{E}_m = \sum_{F \geq |m|} \dim \mathcal{E}_{F,m}.$$

**1.3.** Déterminer la dimension de l'espace  $\mathcal{E}_{F,F}$  puis celle des espaces  $\mathcal{E}_{F,m}$ , d'abord pour  $F = 4$  puis pour  $F = 3$ .

On sait que

$$\dim \mathcal{E}_4 = \sum_{F \geq 4} \dim \mathcal{E}_{F,4} = \dim \mathcal{E}_{4,4}$$

car  $F$  ne peut pas prendre de valeur strictement supérieure à 4. Donc  $\dim \mathcal{E}_{4,4} = \dim \mathcal{E}_4 = 1$ . Or la théorie générale du moment cinétique nous dit que, pour une même valeur de  $F$ , tous les espaces  $\mathcal{E}_{F,m}$  ont la même dimension, donc  $\dim \mathcal{E}_{4,m} = 1$ .

On peut en déduire que

$$\dim \mathcal{E}_3 = \sum_{F \geq 3} \dim \mathcal{E}_{F,3} = \dim \mathcal{E}_{4,3} + \dim \mathcal{E}_{3,3} = 1 + \dim \mathcal{E}_{3,3}$$

Or  $\dim \mathcal{E}_3 = 2$  donc  $\dim \mathcal{E}_{3,3} = 1$ . On en conclut que  $\dim \mathcal{E}_{3,m} = 1$ .

**1.4.** Quelles sont finalement les valeurs possibles de  $F$  et  $m$  ?

En additionnant les dimensions des espaces propres associés à  $F = 3$  et  $F = 4$ , on vérifie  $(2 \times 3 + 1) + (4 \times 4 + 1) = 7 + 9 = 16$ , ce qui correspond à la dimension totale de l'espace de Hilbert. Il n'y a donc pas d'autre valeur possible de  $F$ . On peut écrire

$$\mathcal{E}_{5/2} \otimes \mathcal{E}_{1/2} = \mathcal{E}_3 \oplus \mathcal{E}_4.$$

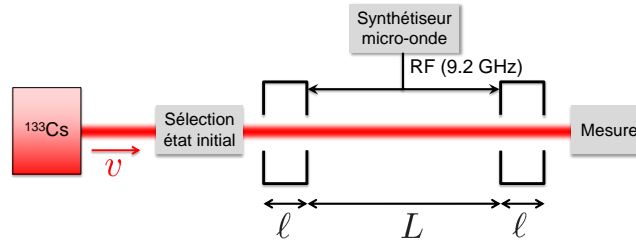
**1.5.** Que peut-on en conclure sur la structure hyperfine du niveau fondamental du Césium 133 ?  
 La suite du raisonnement est similaire à ce qui a été vu en cours dans le cas de l'hydrogène. Le terme d'interaction s'écrit

$$\hat{S}_e \cdot \hat{S}_n = \frac{1}{2} (\hat{F}^2 - \hat{S}_n^2 - \hat{S}_e^2)$$

La méthode des perturbations nous permet donc de prévoir un clivage du niveau fondamental en deux sous-niveaux correspondant respectivement à  $F = 3$  et  $F = 4$ .

## Exercice 2 : Les franges de Ramsey

La méthode dite des franges de Ramsey, qui a valu à son inventeur le prix Nobel de physique en 1989, consiste à utiliser une succession de deux chambres d'interaction afin d'améliorer la précision d'une mesure de fréquence de résonance.



On considère l'application de cette méthode à l'horloge atomique représentée ci-dessus. On utilise un jet atomique d'atomes de Césium, préparés dans un état hyperfin déterminé, qui passent dans une première cavité où ils sont soumis à un champ microonde alternatif pendant une durée  $\tau = \ell/v$ . Après un temps  $T = L/v$ , les atomes traversent une seconde cavité microonde pendant la même durée  $\tau$ . Un dispositif de mesure permet enfin de déterminer la probabilité de transition induite par le dispositif.

On admet qu'en appliquant un champ magnétique statique approprié il est possible de cliver par effet Zeeman les sous-niveaux  $F = 3$  et  $F = 4$ , ce qui permet de se ramener à un système à deux niveaux  $|-\rangle = |F = 3, m = 0\rangle$  et  $|+\rangle = |F = 4, m = 0\rangle$ , qui seront les seuls états considérés dans la suite de l'exercice. L'hamiltonien du système couplé au champ magnétique oscillant s'écrit alors

$$\hat{H}(t) = \frac{\hbar\omega_0}{2} (|+\rangle\langle+| - |-\rangle\langle-|) + \hbar\omega_1 \cos\omega t (|+\rangle\langle-| + |-\rangle\langle+|)$$

où  $\omega_0/(2\pi) \approx 9.2$  GHz est la fréquence de transition entre les deux états hyperfins et  $\omega_1$  est proportionnel à l'amplitude du champ magnétique oscillant, de fréquence  $\omega$ . On pose  $|\psi(t)\rangle = a_+(t)|+\rangle + a_-(t)|-\rangle$ .

**2.1.** Ecrire les équations différentielles dont sont solutions  $a_+(t)$  et  $a_-(t)$ .

L'équation de Schrödinger s'écrit

$$i\hbar \begin{pmatrix} \dot{a}_+ \\ \dot{a}_- \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \omega_0 & \omega_1(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) \\ \omega_1(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) & -\omega_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_+ \\ a_- \end{pmatrix}$$

soit

$$\dot{a}_\pm = -\frac{i}{2} (\pm\omega_0 a_\pm + \omega_1(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) a_\mp)$$

**2.2.** Afin de résoudre le système d'équations obtenu, on introduit le changement de variable

$$a_\pm(t) = \gamma_\pm(t) e^{\mp i\omega t/2}$$

Etablir l'équation différentielle portant sur  $\gamma_\pm(t)$ .

On a

$$\begin{aligned} \dot{\gamma}_\pm &= -\frac{i}{2} (\pm(\omega_0 - \omega)\gamma_\pm + \omega_1(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t})e^{\pm i\omega t}\gamma_\mp) \\ &= -\frac{i}{2} (\pm(\omega_0 - \omega)\gamma_\pm + \omega_1(1 + e^{\pm 2i\omega t})\gamma_\mp) \end{aligned}$$

**2.3.** Dans le cas où  $|\omega - \omega_0| \ll \omega_0$ , montrer que l'on peut négliger le terme dépendant du temps dans l'équation obtenue.

En l'absence de champ oscillant, la fréquence caractéristique d'évolution de  $\gamma(t)$  est  $(\omega - \omega_0)/2$ , très petite devant  $\omega_0$ . Le terme en  $\exp(\pm 2i\omega t)$  évolue donc très vite à cette échelle et aura donc une contribution nulle en moyenne, à l'inverse du terme constant dont la contribution ne change jamais de signe. Sous cette hypothèse, l'équation d'évolution se réduit donc à

$$\dot{\gamma}_{\pm} = -\frac{i}{2} (\pm(\omega_0 - \omega)\gamma_{\pm} + \omega_1\gamma_{\mp}).$$

On retrouve les mêmes équations qu'en résonance magnétique nucléaire.

**2.4.** En vous inspirant d'une analogie avec un phénomène connu, justifier pour quelle raison cette approximation s'appelle l'*approximation de l'onde tournante* (rotating wave approximation, ou RWA). Interpréter dans ce cadre le changement de variable introduit à la question 2.

En considérant que le système à deux niveaux est un spin 1/2, on voit que l'hamiltonien considéré est exactement le même qu'en résonance magnétique nucléaire, à ceci près que le terme non diagonal est  $\omega_1 \cos \omega t$  au lieu de  $\omega_1 e^{i\omega t}$  pour un champ tournant en RMN. On peut en fait considérer que le champ magnétique oscillant considéré ici est la superposition de deux champs tournants en sens contraires. Les deux termes apparaissant dans l'équation correspondent aux contributions de ces deux champs tournants. On a vu en RMN qu'il y avait une résonance lorsque  $\omega$  était proche de  $\omega_0$ . Dans ce cas, un des deux champs tournants sera résonnant, tandis que celui qui tourne dans le mauvais sens aura une contribution négligeable en raison de son écart considérable ( $2\omega_0$ ) à la résonance. D'où l'approximation dite du champ tournant utilisée ici : on ne conserve que le champ tournant dans le bon sens. A noter qu'en pratique les expériences de RMN ne sont pas effectuées avec un champ tournant (comme vu en PHY311 pour simplifier la théorie) mais avec un champ oscillant comme dans cet exercice.

Par ailleurs, si l'on interprète notre système comme un spin 1/2, le changement de variable proposé ici correspond à une rotation d'angle  $\omega t$ , ce qui revient à dire que l'on se place dans le référentiel tournant. Dans ce référentiel, l'un des deux champs tournant est fixe tandis que l'autre tourne à  $2\omega$ , ce qui explique la forme de l'équation différentielle obtenue.

Par analogie avec la PC07 PHY311 sur la RMN, nous pouvons donc définir un hamiltonien effectif  $\hat{H}_{eff}$  dans la base tournée :

$$\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \omega_0 - \omega & \omega_1 \\ \omega_1 & -\omega_0 + \omega \end{pmatrix}$$

**2.5.** On fait maintenant l'approximation que la fréquence  $\omega$  est très proche de  $\omega_0$ , ce qui nous permet de négliger le terme diagonal dans l'équation d'évolution de  $\gamma_{\pm}(t)$ . Résoudre le système d'équations obtenu et en déduire l'expression de  $\gamma_{\pm}(t)$  en fonctions des conditions initiales  $\gamma_{\pm}(t_0)$ .

L'équation s'écrit alors

$$\dot{\gamma}_{\pm} = -\frac{i\omega_1}{2}\gamma_{\mp}.$$

En dérivant à nouveau, on obtient

$$\ddot{\gamma}_{\pm} = -\frac{i\omega_1}{2}\dot{\gamma}_{\mp} = -\frac{\omega_1^2}{4}\gamma_{\pm}.$$

La solution générale de cette équation s'écrit

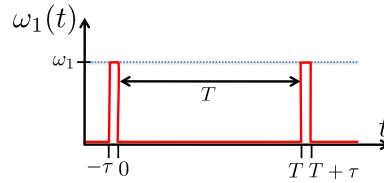
$$\gamma_{\pm}(t) = \gamma_{\pm}(t_0) \cos \frac{\omega_1(t-t_0)}{2} - i\gamma_{\mp}(t_0) \sin \frac{\omega_1(t-t_0)}{2}.$$

**2.6.** Qu'obtient-on dans le cas où la durée d'interaction  $t - t_0 = \tau$  est choisie de sorte que  $\omega_1\tau = \pi/2$ ? (Cette contrainte sur le temps s'appelle effectuer une rotation de  $\pi/2$ )

On obtient alors

$$\gamma_{\pm}(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\gamma_{\pm}(t_0) - i\gamma_{\mp}(t_0)).$$

**2.7.** On s'intéresse maintenant au problème de l'horloge atomique à deux cavités discutée plus haut. On considérera que l'atome est initialement préparé dans l'état  $|-\rangle$ , puis séjourne dans la première cavité pour  $-\tau \leq t \leq 0$  et dans la seconde cavité pour  $T \leq t \leq T + \tau$ . Cela revient à prendre une fréquence  $\omega_1(t)$  constante par morceau, comme représenté ci-dessous.



On fera l'hypothèse que  $\omega_1\tau = \pi/2$  et que  $|\omega - \omega_0|\tau \ll \pi$ . On utilisera la condition initiale  $\gamma_-(-\tau) = 1$ . Que valent  $\gamma_+(0)$  et  $\gamma_-(0)$  à la sortie de la première cavité?

En appliquant les résultats obtenus plus haut, on obtient

$$\gamma_+(0) = -\frac{i}{\sqrt{2}}\gamma_-(-\tau) = -\frac{i}{\sqrt{2}} \quad \text{et} \quad \gamma_-(0) = \frac{1}{\sqrt{2}}\gamma_-(-\tau) = \frac{1}{\sqrt{2}}.$$

**2.8.** Déterminer  $\gamma_+(T)$  et  $\gamma_-(T)$  à l'entrée de la deuxième cavité.

Il y a un point subtil ici. Entre les temps 0 et  $T$ , le système dans la base tournée évolue avec  $\omega_1 = 0$  (pas de champ magnétique oscillant). En utilisant  $\hat{H}_{eff}$  et l'opérateur d'évolution temporel, cela donne  $\gamma_{\pm}(T) = \gamma_{\pm}(0) \exp(\pm i(\omega - \omega_0)T/2)$ , soit

$$\gamma_+(T) = -\frac{i}{\sqrt{2}} \exp\left(+i\frac{(\omega - \omega_0)T}{2}\right) \quad \text{et} \quad \gamma_-(T) = \frac{1}{\sqrt{2}} \exp\left(-i\frac{(\omega - \omega_0)T}{2}\right).$$

**2.9.** Nous effectuons maintenant une rotation de  $\pi/2$  dans la deuxième cavité signifiant

$$\gamma_+(T + \tau) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\gamma_+(T) - i\gamma_-(T)).$$

Déterminer la probabilité  $\mathcal{P}(\omega)$  de mesurer le système dans l'état  $|+\rangle$  en sortie de la seconde cavité.

Enfin, en sortie de la seconde cavité, on a

$$\begin{aligned} \gamma_+(T + \tau) &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\gamma_+(T) - i\gamma_-(T)) \\ &= -\frac{i}{2} \left( \exp\left(+i\frac{(\omega - \omega_0)T}{2}\right) + \exp\left(-i\frac{(\omega - \omega_0)T}{2}\right) \right) \\ &= -i \cos \frac{(\omega - \omega_0)T}{2} \end{aligned}$$

On en déduit

$$\mathcal{P}(\omega) = |a_+(T + \tau)|^2 = |\gamma_+(T + \tau)|^2 = \cos^2 \frac{(\omega - \omega_0)T}{2} = \frac{1}{2} (1 + \cos((\omega - \omega_0)T))$$

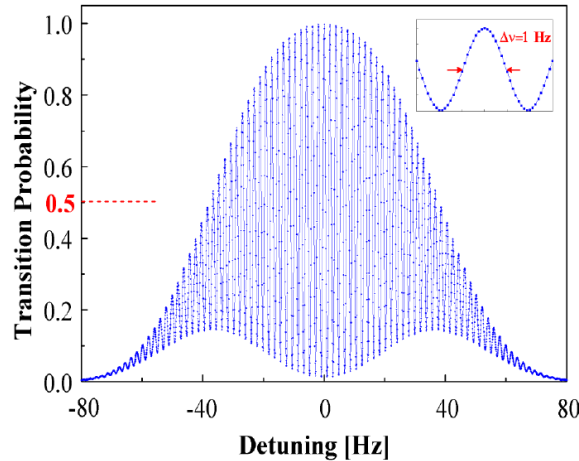
On obtient donc des franges de période  $2\pi/T$ . Ce sont les franges de Ramsey.

**2.10.** Interpréter ce résultat en termes d'interférences entre deux chemins quantiques.

On peut voir cette expérience comme un interféromètre, les deux chemins correspondant aux situations où l'atome passe de l'état  $|-\rangle$  à l'état  $|+\rangle$  soit dans la première cavité, soit dans la seconde. Dans le premier cas, l'atome interagit avec un champ microonde de phase nulle dans la première cavité, puis accumule une phase  $-\omega_0 T/2$  lors de son trajet dans l'état  $|+\rangle$  entre les deux cavités. Dans le second cas, l'atome accumule d'abord une phase  $+\omega_0 T/2$  entre les deux cavités, puis interagit avec un champ microonde de phase  $-\omega T$  (l'autre composante tournante étant non résonnante). La phase totale est donc  $(\omega_0/2 - \omega)T$ . La différence de phase entre les deux chemins de l'interféromètre est égale à  $(\omega_0 - \omega)T$ , d'où l'observation de franges en  $\cos(\omega_0 - \omega)T$ .

**2.11.** La figure ci-dessous représente le résultat d'une expérience effectuée à l'aide d'une fontaine atomique, dispositif qui consiste à jeter les atomes en l'air pour qu'ils soient en chute libre pendant

un temps  $T$  entre leurs deux passages dans une même cavité. Quelles sont les valeurs utilisées pour  $T$  et  $\tau$ ? Quelle est la hauteur de la fontaine?



La période théorique en pulsation est  $2\pi/T$ , soit  $1/T$  en fréquence. La mesure nous donne une période de 2 Hz, soit  $T = 0.5$  s. La durée de la chute dans la fontaine est donc de  $T/2 = 0.25$  s, ce qui correspond à une hauteur  $h = 1/2g(T/2)^2 \approx 30$  cm.

L'ensemble du pic a une largeur d'environ 80 Hz. On obtiendrait le même pic, sans franges, avec une seule cavité. Le signal de résonance disparaît lorsque  $|\omega - \omega_0|\tau > \pi$ . Cela nous permet d'en conclure que  $\tau$  est de l'ordre d'une dizaine de ms.  $\tau$  est effectivement très inférieur à  $T$ , ce que l'on pouvait déduire du grand nombre de franges. On peut également rappeler les oscillations de Rabi déjà vues en PHY311 pour le problème de la RMN (PC7). On sait que cela donne une résonance lorentzienne de largeur  $2\omega_1$ .

**Note :** Pour un traitement plus quantitatif, il faut résoudre l'équation d'évolution sans faire l'approximation  $\omega \sim \omega_0$ . En dérivant à nouveau l'équation

$$\dot{\gamma}_{\pm} = -\frac{i}{2} (\pm(\omega_0 - \omega)\gamma_{\pm} + \omega_1\gamma_{\mp}).$$

on obtient

$$\begin{aligned} \ddot{\gamma}_{\pm} &= -\frac{i}{2} (\pm(\omega_0 - \omega)\dot{\gamma}_{\pm} + \omega_1\dot{\gamma}_{\mp}) \\ &= -\frac{1}{4} (\pm(\omega_0 - \omega) (\pm(\omega_0 - \omega)\gamma_{\pm} + \omega_1\gamma_{\mp}) + \omega_1 (\mp(\omega_0 - \omega)\gamma_{\mp} + \omega_1\gamma_{\pm})) \\ &= -\frac{(\omega_0 - \omega)^2 + \omega_1^2}{4} \gamma_{\pm} \end{aligned}$$

On retrouve donc les oscillations de Rabi de fréquence  $\Omega = \sqrt{(\omega_0 - \omega)^2 + \omega_1^2}$  avec

$$\gamma_{\pm}(t) = \gamma_{\pm}(t_0) \cos \frac{\Omega(t - t_0)}{2} + \frac{2}{\Omega} \dot{\gamma}_{\pm}(t_0) \sin \frac{\Omega(t - t_0)}{2}.$$

Avec la condition initiale  $\gamma_{-}(-\tau) = 1$ , on a

$$\dot{\gamma}_{+}(-\tau) = -\frac{i}{2} ((\omega_0 - \omega)\gamma_{+}(-\tau) + \omega_1\gamma_{-}(-\tau)) = -\frac{i\omega_1}{2}.$$

et

$$\gamma_{+}(0) = -i\frac{\omega_1}{\Omega} \sin \frac{\Omega\tau}{2}.$$

soit

$$\mathcal{P}(\omega) = \frac{\omega_1^2}{(\omega_0 - \omega)^2 + \omega_1^2} \sin^2 \left( \frac{\pi}{4} \sqrt{1 + \left( \frac{\omega_0 - \omega}{\omega_1} \right)^2} \right)$$

ce qui nous donne une lorentzienne un peu déformée par le  $\sin^2$ . La largeur est un peu plus étroite que  $2\omega_1$  mais cela ne change pas l'ordre de grandeur.

# Horloges atomiques et atomes ultrafroids

Claude Cohen-Tannoudji

Congrès du Centenaire de l'UdPPC  
Besançon, 27 Octobre 2006



1530

Collège de France



CENTRE NATIONAL  
DE LA RECHERCHE  
SCIENTIFIQUE



# Plan de l'exposé

## 1 – Horloges atomiques traditionnelles

- Principe de l'horloge à Césium
- Importance de la durée de l'interaction
- Comment allonger cette durée. Franges de Ramsey

## 2 – Atomes ultrafroids

- Forces exercées par la lumière sur les atomes
- Ralentissement et refroidissement des atomes

## 3 – Horloges atomiques utilisant des atomes ultrafroids

- Fontaines atomiques
- Horloges spatiales
- Quelques applications

# **MESURE DU TEMPS ET HORLOGES ATOMIQUES**

# Mesure du temps

## Basée sur des phénomènes périodiques

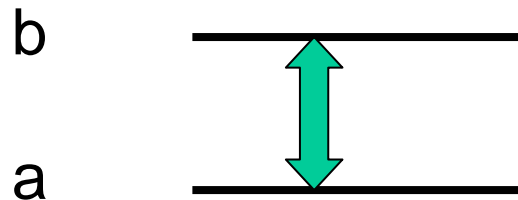
Fréquence  $\nu$

Période  $1/\nu$

Fréquence angulaire  $\omega=2\pi\nu$

## Exemples de phénomènes périodiques

- Rotation de la terre sur elle-même et autour du soleil
- Pendule
- Oscillateur à quartz
- Fréquence  $\nu_A$  d'une transition atomique



$$E_b - E_a = h\nu_A = \hbar\omega_A \quad \hbar = h / 2\pi$$

$h$  : Constante de Planck =  $6.63 \times 10^{-34}$  J.s

# Horloges atomiques

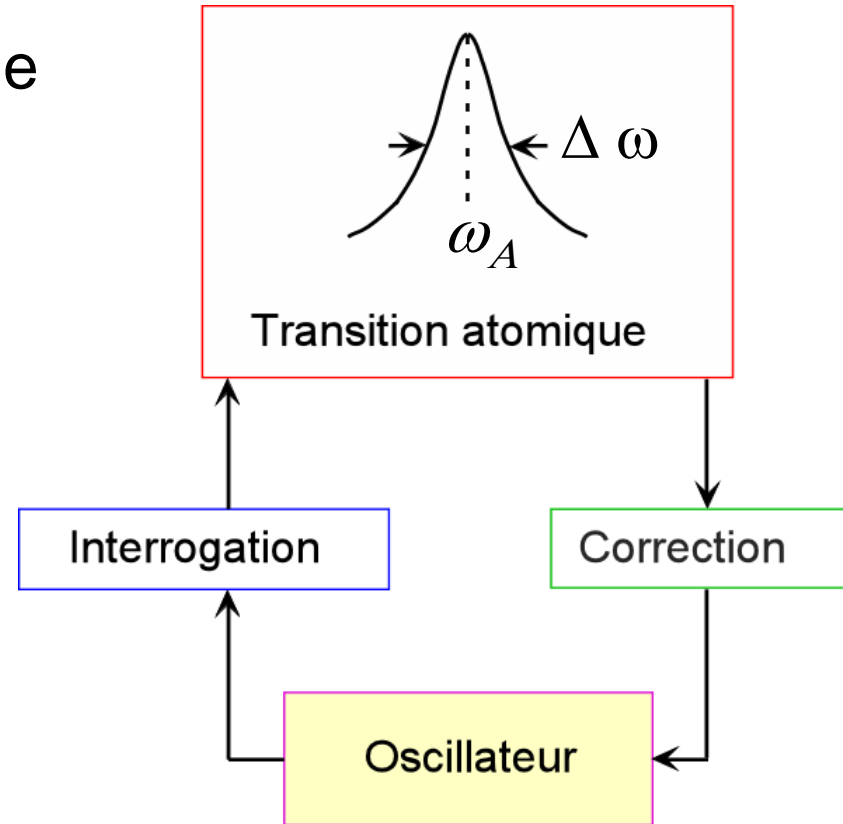
Un oscillateur de fréquence  $\omega_0$  génère une onde électromagnétique qui excite une transition a - b

La probabilité de transition a  $\rightarrow$  b mesurée en fonction de  $\omega_0$  a la forme d'une courbe de résonance centrée en  $\omega_A = (E_b - E_a) / \hbar$  et de largeur  $\Delta\omega$

Une boucle d'asservissement assujettit  $\omega_0$  à rester égale à la fréquence atomique  $\omega_A$

Une horloge atomique est un oscillateur dont la fréquence est verrouillée sur celle d'une transition atomique

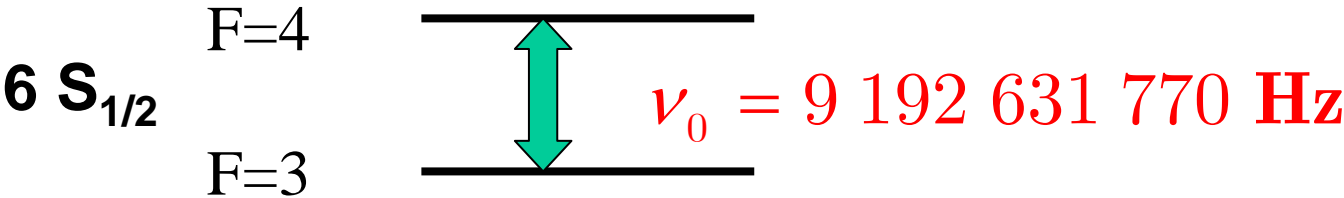
Plus  $\Delta\omega$  est petit, plus l'asservissement sera précis



# Définition de la seconde

La seconde est la durée de 9 192 631 770 périodes de la radiation correspondant à la transition entre les deux niveaux hyperfins  $F=4$  et  $F=3$  de l'état électronique fondamental du césium 133;

Ces deux niveaux correspondent à des orientations parallèle et antiparallèle des spins  $S=1/2$  de l'électron de valence et  $I=7/2$  du noyau de Cs



Caractère universel de cette transition

## Problèmes à résoudre

- Calculer la forme de la résonance atomique et sa largeur  $\Delta\omega$
- Comment rendre  $\Delta\omega$  aussi petite que possible

# Horloge atomique à Césium

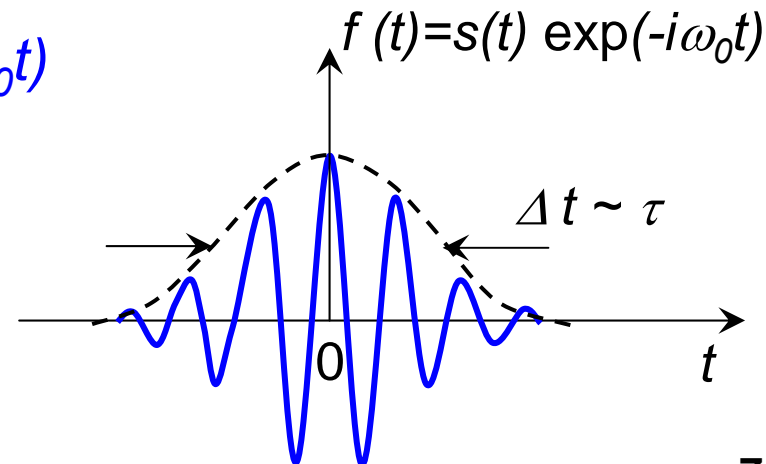


Un atome de vitesse  $v$  traverse la cavité de longueur  $\ell$  en un temps  $\tau = \ell / v$ . Il ne ressent l'effet du champ que pendant ce temps  $\tau$ . Il entre dans l'état  $a$  ( $F=3$ ). Quelle est la probabilité  $P(a \rightarrow b)$  qu'il sorte dans l'état  $b$  ( $F=4$ )?

## Perturbation ressentie par l'atome

Onde électromagnétique  $f(t) = s(t) \exp(-i\omega_0 t)$  de fréquence  $\omega_0$  multipliée par une enveloppe  $s(t)$

- ayant la forme d'une courbe en cloche
- nulle pour  $t = -\infty$  et  $t = +\infty$
- de largeur  $\Delta t \sim \tau$



# Probabilité de transition $P(a \rightarrow b)$

**Résultat du calcul quantique** (à l'ordre le plus bas en champ)

(voir Mécanique Quantique, C.C-T, B.Diu, F.Laloë, Tome 2, Chap XIII)

$$P(a \rightarrow b) \propto \left| \int_{-\infty}^{+\infty} f(t) \exp(i\omega_A t) dt \right|^2 = |g(\omega_A)|^2$$

## Transformée de Fourier

Toute fonction  $f(t)$  peut être mise sous forme d'une somme d'exponentielles  $\exp(-i\omega t)$  de toutes les fréquences possibles  $\omega$

$$f(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(\omega) \exp(-i\omega t) d\omega \quad \text{où} \quad g(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(t) \exp(+i\omega t) dt$$

$f(t)$  et  $g(\omega)$  sont transformées de Fourier (TF) l'une de l'autre

## Interprétation physique

$P(a \rightarrow b)$  est proportionnelle au carré du module de la TF de la perturbation  $f(t)$  à la fréquence  $\omega_A$  de la transition atomique

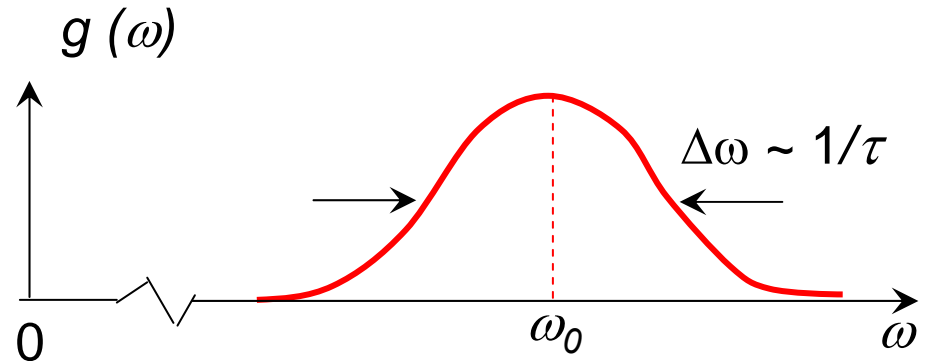
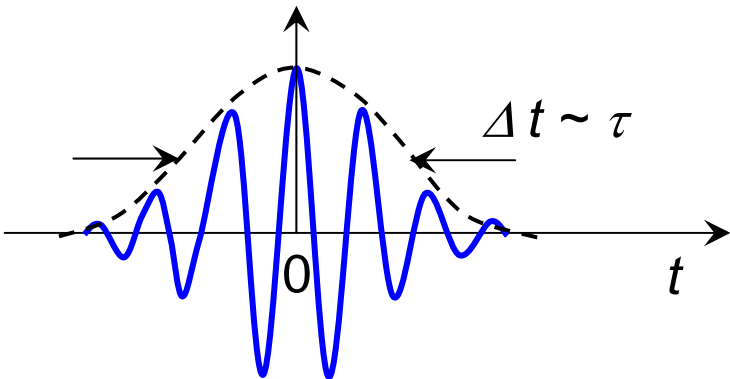
C'est la composante  $|g(\omega_A)|^2$ , à la fréquence atomique  $\omega_A$ , de la « densité spectrale » de la perturbation  $f(t)$  qui intervient dans la probabilité de transition  $a \rightarrow b$

# Cas d'une enveloppe gaussienne

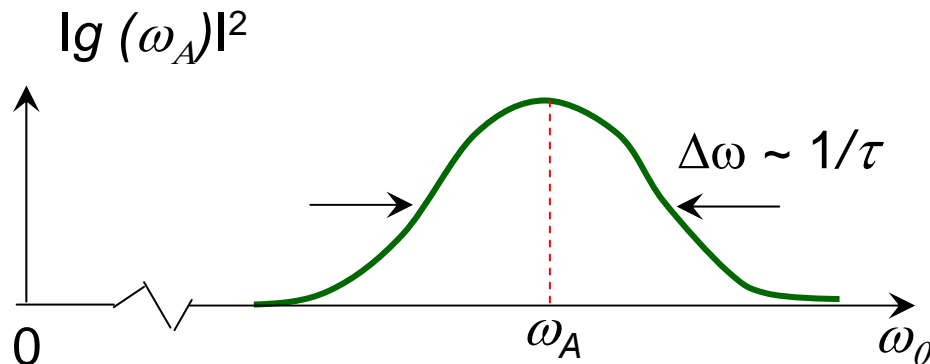
Un calcul analytique de  $g(\omega)$  est alors possible

$$f(t) = \exp(-t^2 / \tau^2) \exp(-i\omega_0 t) \rightarrow g(\omega) \propto \exp\left[-(\omega - \omega_0)^2 \tau^2 / 4\right]$$

$$f(t) = \exp(-t^2 / \tau^2) \exp(-i\omega_0 t)$$



**Forme de raie :  $P(a \rightarrow b) \propto |g(\omega_A)|^2$  en fonction de  $\omega_0$**



Gaussienne centrée sur la fréquence atomique  $\omega_A$  avec une largeur  $\Delta\omega$  de l'ordre de  $1/\tau$

# Relation d'incertitude temps fréquence

$$\Delta t \sim \tau$$

$$\Delta \omega \sim 1/\tau$$

$$\Delta t \times \Delta \omega \sim 1$$

Plus  $\Delta t$  est petit, c'est-à-dire plus la durée d'interaction est courte, plus la largeur  $\Delta \omega$  de la résonance est grande

Ces résultats demeurent valables pour une enveloppe non nécessairement gaussienne ayant une forme analogue

## Lien avec un problème d'acoustique

Un instrument à percussion donne des impulsions sonores très brèves, ayant donc un spectre de fréquences très large. Pour pouvoir amplifier toutes ces fréquences avec le même gain de manière à ne pas déformer la forme de l'impulsion, il faut donc un amplificateur à bande large

## Relation d'incertitude temps énergie

En multipliant  $\Delta \omega$  par  $\hbar$  et en utilisant  $E = \hbar \omega$ , on obtient:

$$\Delta t \sim \tau$$

$$\hbar \Delta \omega = \Delta E \sim \hbar / \tau$$

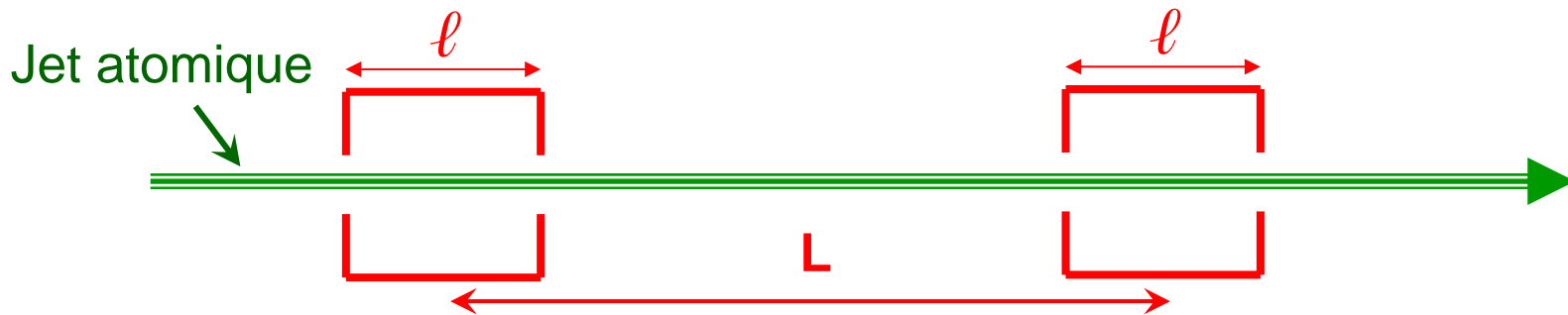
$$\Delta t \times \Delta E \sim \hbar$$

# Ordres de grandeur

La transition micro onde utilisée dans l'horloge atomique à césium a une fréquence de l'ordre de  $9.2 \text{ GHz} = 9.2 \times 10^9 \text{ Hz}$ , et donc une longueur d'onde de l'ordre de  $3 \text{ cm}$ .

Il est difficile de faire des cavités micro onde résonnantes à ces longueurs d'onde beaucoup plus longues que  $3 \text{ cm}$ . Pour des atomes sortant d'un four à césium avec des vitesses de l'ordre de  $300 \text{ m/s}$ , le temps d'interaction est de l'ordre de  $10^{-4} \text{ s}$

## Méthode de N. Ramsey pour augmenter ce temps



Utilisation de 2 cavités séparés par une distance  $L \gg l$ .

Apparition dans la résonance de structures de largeur déterminée par le temps  $T = L / v \gg \tau = l / v$

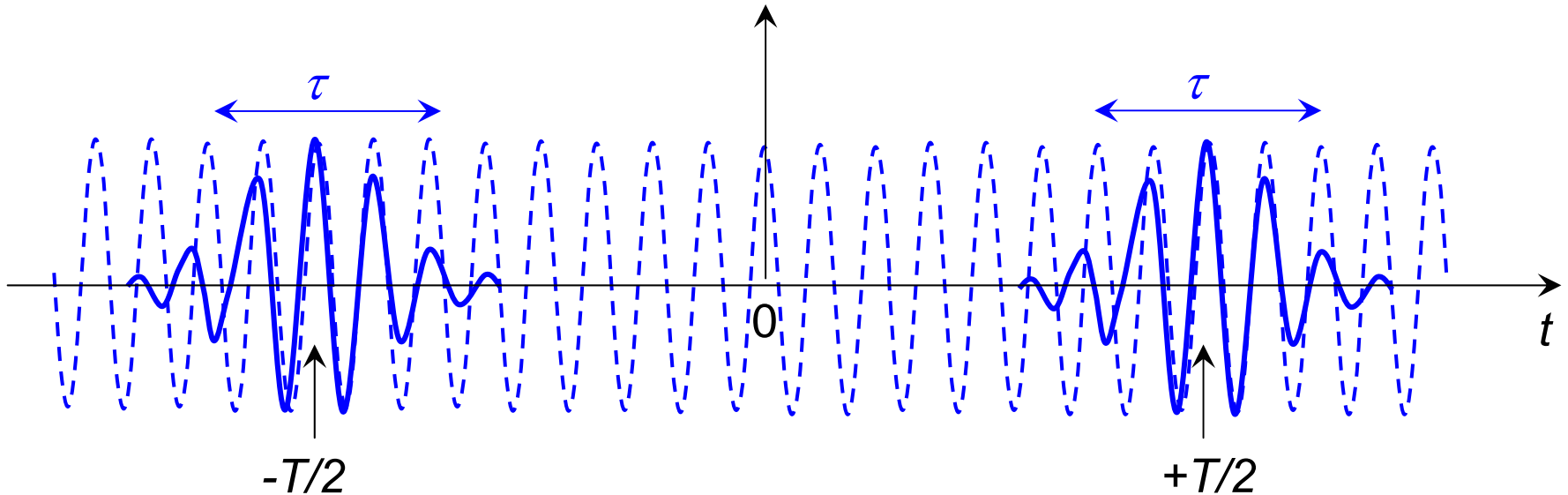


Norman Ramsey

# Franges de Ramsey

Les 2 cavités sont alimentées par la même source. L'atome est soumis à une perturbation  $f(t)$  ayant la forme d'une porteuse de fréquence  $\omega_0$  multipliée par 2 enveloppes  $s(t+T/2)$  et  $s(t-T/2)$  respectivement centrées en  $-T/2$  et  $+T/2$  avec  $T=L/v$

$$f(t) = e^{i\omega_0 t} s(t + T/2) + e^{i\omega_0 t} s(t - T/2)$$

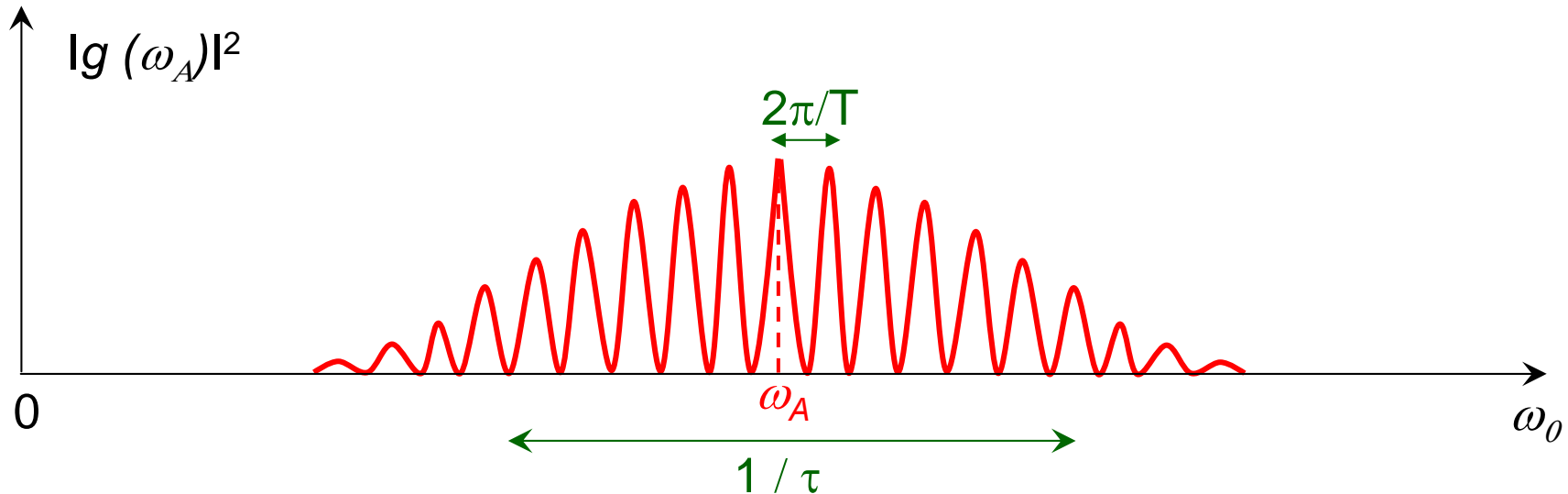


Si  $s(t)$  est une gaussienne, on sait calculer analytiquement  $g(\omega)$

$$g(\omega) \propto \exp\left[-(\omega - \omega_0)^2 \tau^2 / 4\right] \cos\left[(\omega - \omega_0)T / 2\right]$$

## Franges de Ramsey (suite)

**Forme de raie** :  $P(a \rightarrow b) \propto |\lg(\omega_A)|^2$  en fonction de  $\omega_0$



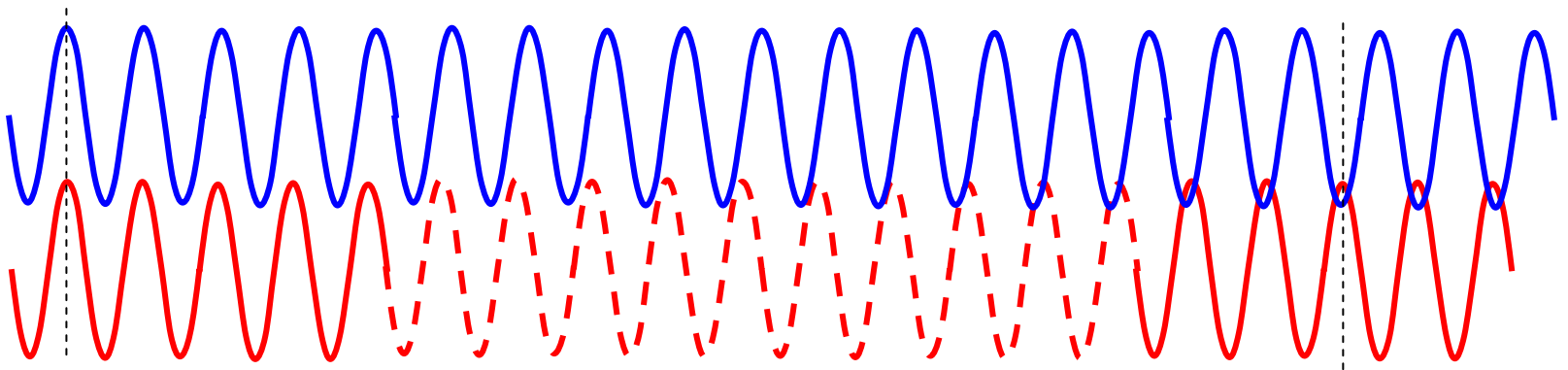
Franges d'interférence de période  $2\pi/T$  à l'intérieur du profil de largeur  $1/\tau$  associé à une seule cavité

### **Analogie avec les franges d'Young en optique**

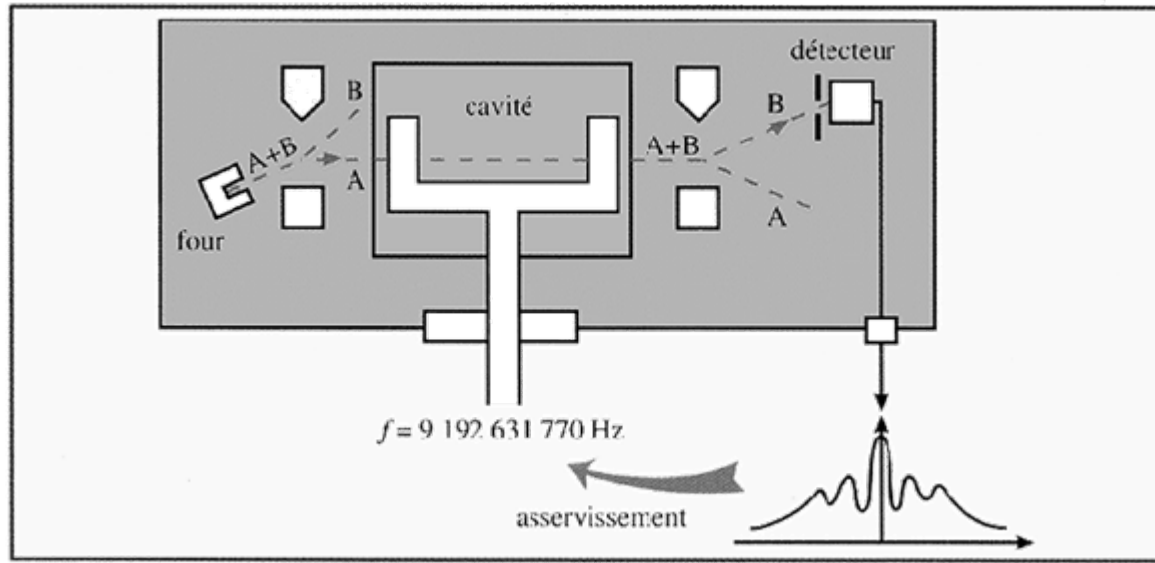
Franges d'interférence, dont la période est déterminée par la distance entre les 2 fentes, apparaissant à l'intérieur d'une tache de diffraction, dont la largeur est déterminée par la largeur de chaque fente

# Interprétation physique au moyen d'un exemple simple

- Balançoire de fréquence propre  $\omega_A$  (sans amortissement)
- Un dispositif applique à la balançoire des poussées périodiques avec une fréquence  $\omega_0$  pendant un temps  $\tau$ . La balançoire oscille en phase avec le poussée ( $\tau$  est suffisamment court pour que le déphasage entre  $\omega_A$  et  $\omega_0$  ne se fasse pas sentir)
- Le dispositif de poussée est débranché. Il continue à osciller à sa fréquence propre, de même que la balançoire
- Ce dispositif est rebranché au bout d'un temps  $T$ . Si les oscillations à  $\omega_A$  et  $\omega_0$  se sont déphasées de  $\pi$ , c-à-d si  $(\omega_0 - \omega_A)T = \pi$ , la poussée est opposée à l'oscillation de la balançoire et la stoppe.
- Interprétation du 1er zéro de  $P(a \rightarrow b)$  pour  $\omega_0 = \omega_A = \pi/T$



# Schéma de principe d'une horloge



## Ordres de grandeur

La largeur de la frange de Ramsey centrale est de l'ordre de  $1/T \sim v/L$ , plus petite que la largeur  $1/\tau \sim v/l$  obtenue avec une seule cavité. Si  $l=3\text{cm}$ ,  $L=1\text{m}$ , on gagne un facteur de l'ordre de  $L/l \sim 30$  sur le temps d'interaction, et donc sur la finesse de raie.

## Comment aller plus loin?

Au lieu d'augmenter  $L$  pour diminuer  $v/L$ , on peut essayer de diminuer  $v$ , c-à-d utiliser des atomes ultrafroids.

# ATOMES ULTRAFROIDS

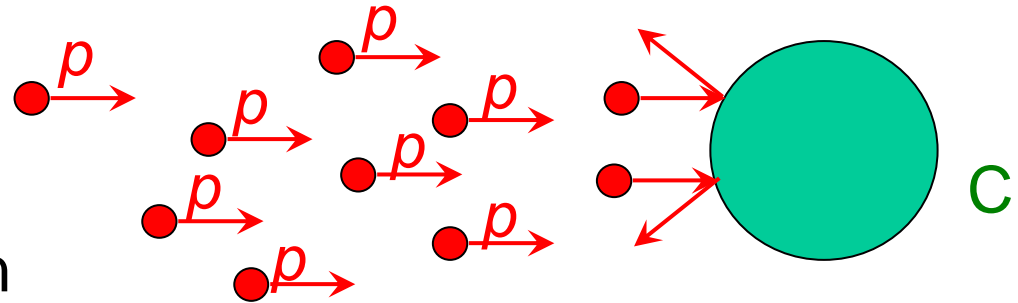
## Idée générale

Exciter l'atome sur une transition optique. Les photons laser absorbés par l'atome ont une énergie  $E=h\nu$  et une quantité de mouvement  $p=h\nu/c$ . Le transfert de cette quantité de mouvement aux atomes donne naissance à une force radiative s'exerçant sur les atomes et permettant de les ralentir et de les refroidir

# Forces exercées par la lumière sur les atomes

## Un exemple simple

Cible C bombardée par des projectiles  $p$  venant tous de la même direction



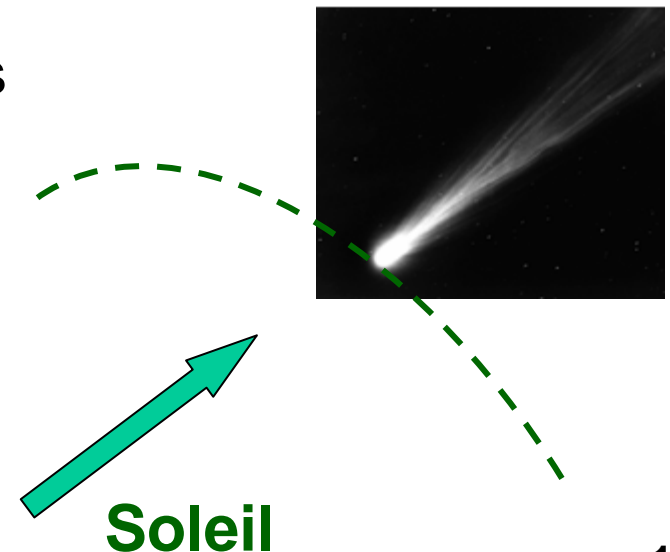
Par suite du transfert de quantité de mouvement des projectiles  $p$  à la cible C, la cible c est poussée

## Atome dans un faisceau lumineux

Situation analogue, les photons incidents diffusés par l'atome C jouant le rôle des projectiles  $p$

Explication de la queue des comètes

Dans un faisceau laser résonnant, la force de pression de radiation peut être considérable



## Recul d'un atome absorbant un photon



L'atome dans l'état g absorbe un photon d'impulsion  $h\nu/c$ .

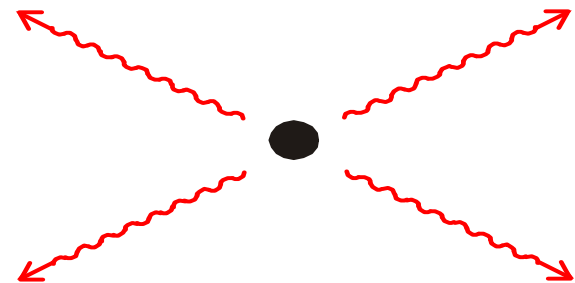
Il passe dans l'état e en gagnant l'impulsion  $h\nu/c$ .

Il recule donc avec une vitesse  $v_{\text{rec}} = h\nu / Mc$ .

## Émission spontanée d'un photon

Après un temps moyen  $\tau_R$  (durée de vie de e, de l'ordre de  $10^{-8}$  sec),  
L'atome retombe dans e en émettant spontanément un photon, avec  
des probabilités égales dans 2 directions opposées

En moyenne, l'impulsion perdue  
lors d'un tel processus d'émission  
spontanée est nulle.



## Changement moyen de vitesse $\delta v$ lors d'un tel cycle

Absorption suivie d'une émission spontanée.

$$\delta v = v_{\text{rec}} = h\nu / Mc \quad \text{de l'ordre de } 10^{-2} \text{ m/s}$$

## Atome dans un faisceau laser résonant

Nombre moyen de cycles par seconde :  $W$

$$W \approx 1 / \tau_R \approx 10^8 \text{ s}^{-1}$$

## Accélération $a$ (ou décélération) moyenne de l'atome

$a$  = changement de vitesse par seconde  
= changement de vitesse  $\delta v$  par cycle  
x nombre de cycles par seconde  $W$   
=  $v_{\text{rec}} \times (1 / \tau_R)$

$$a = 10^{-2} \times 10^8 \text{ m/s}^2 = 10^6 \text{ m/s}^2 = 10^5 \text{ g}$$

Force de pression de radiation considérable!

# Ralentissement et refroidissement des atomes par des faisceaux laser

Les forces exercées par les lasers sur les atomes permettent

- de réduire leur vitesse moyenne

**Ralentissement laser des atomes**

- de réduire la dispersion de vitesse autour de la valeur moyenne (réduction de l'agitation désordonnée)

**Refroidissement laser des atomes**

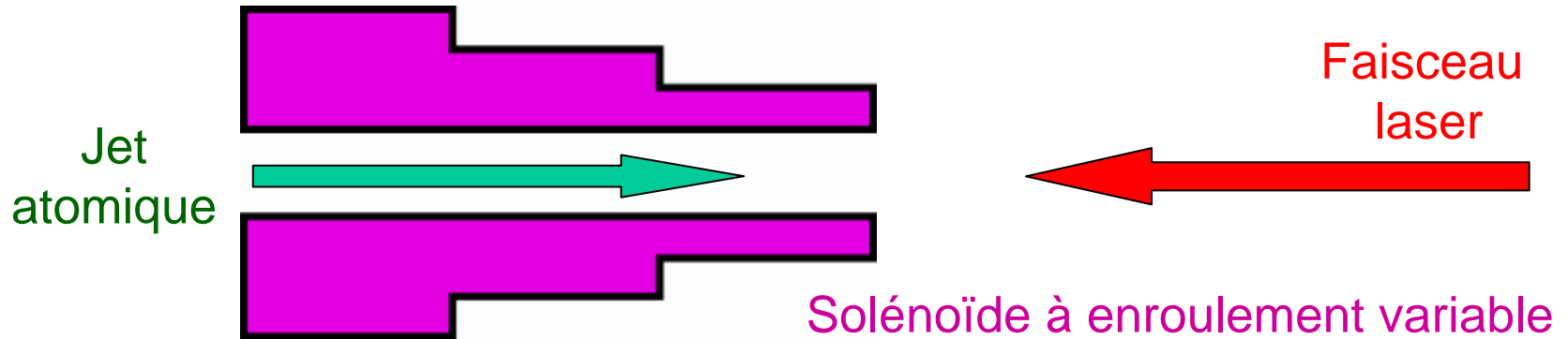
Obtention de températures de l'ordre de quelques  $10^{-6}$  K et de vitesses atomiques de l'ordre de quelques mm/s

A température ambiante ( $T = 300$  K), les vitesses atomiques sont de l'ordre de 1 km/s

**Les atomes les plus froids de l'univers!**

**Le rayonnement fossile du big bang est à 2.7 K**

# Ralentissement d'un jet atomique

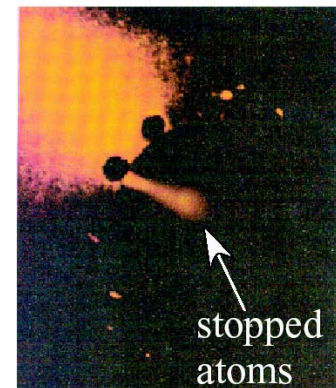


Les atomes sortant d'un four avec une vitesse  $v_0=10^3$  m/s sont ralentis par la force de pression de radiation du laser et s'arrêtent au bout d'un temps  $t= v_0/a = 10^3/10^6 = 10^{-3}$ s . Ils parcourent une distance  $L = v_0^2 / 2a = 0.5$  m

Ralentisseur Zeeman J. Prodan, W. Phillips, H. Metcalf, P.R.L. 49, 1149 (1982)

Le désaccord Doppler dû à la décélération des atomes est compensé par un déplacement Zeeman dépendant de la position créé par un gradient de champ magnétique le long de la direction du jet atomique

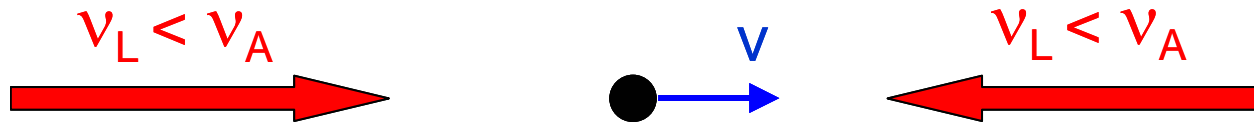
Autre solution : balayage de la fréquence laser



# Refroidissement laser Doppler

Hänsch, Schawlow, Wineland, Dehmelt

2 ondes laser se propageant dans des directions opposées, de même intensité, de même fréquence  $\nu_L$  inférieure à la fréquence atomique  $\nu_A$



## Atome au repos ( $v=0$ )

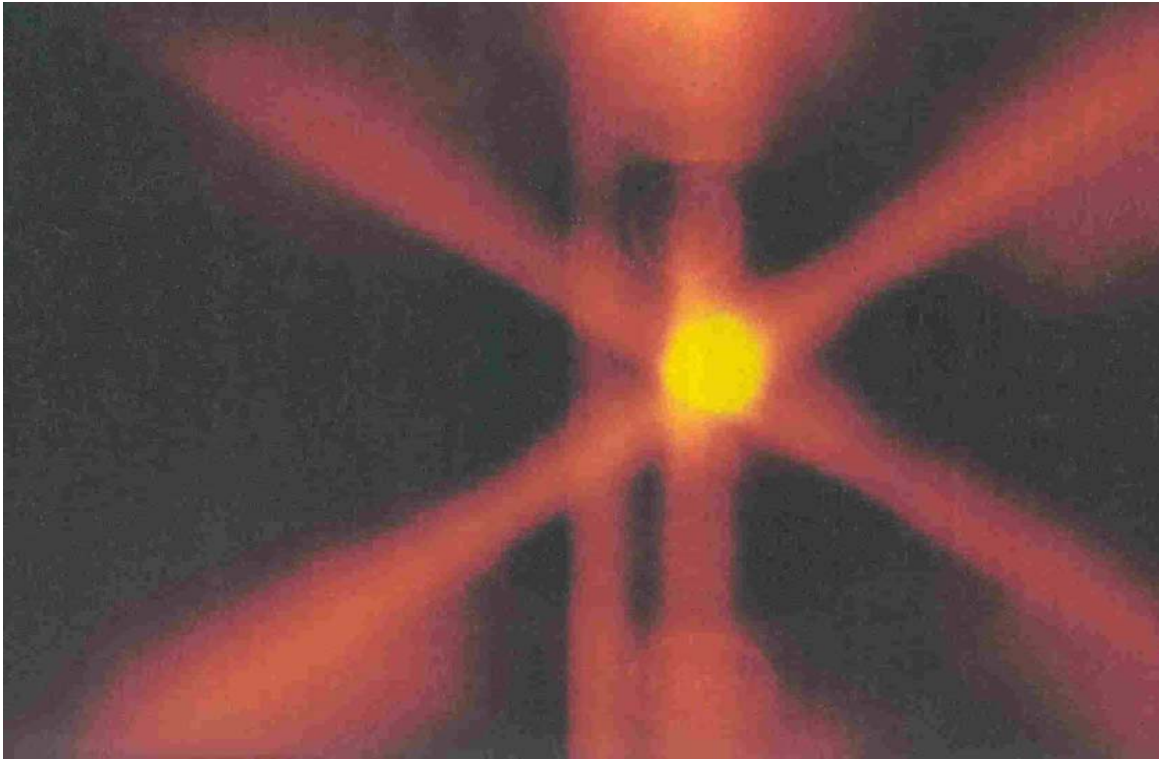
Les 2 forces de pression de radiation se compensent

## Atome en mouvement de vitesse $v$

A cause de l'effet Doppler, l'onde laser se propageant en sens opposé de  $v$  se rapproche de résonance et exerce une force plus grande que l'onde se propageant dans le même sens, qui s'éloigne de résonance

Force de friction globale non nulle  $F = -\alpha v$

« Mélasse optique »



Exemple de mélasse  
optique (Sodium)

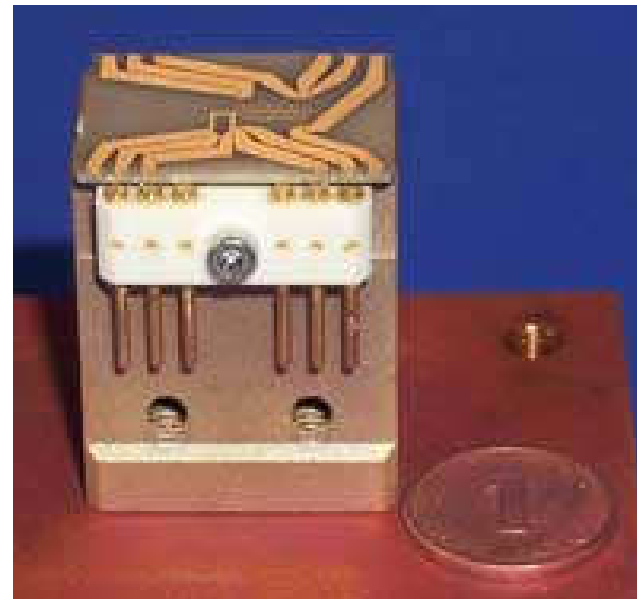
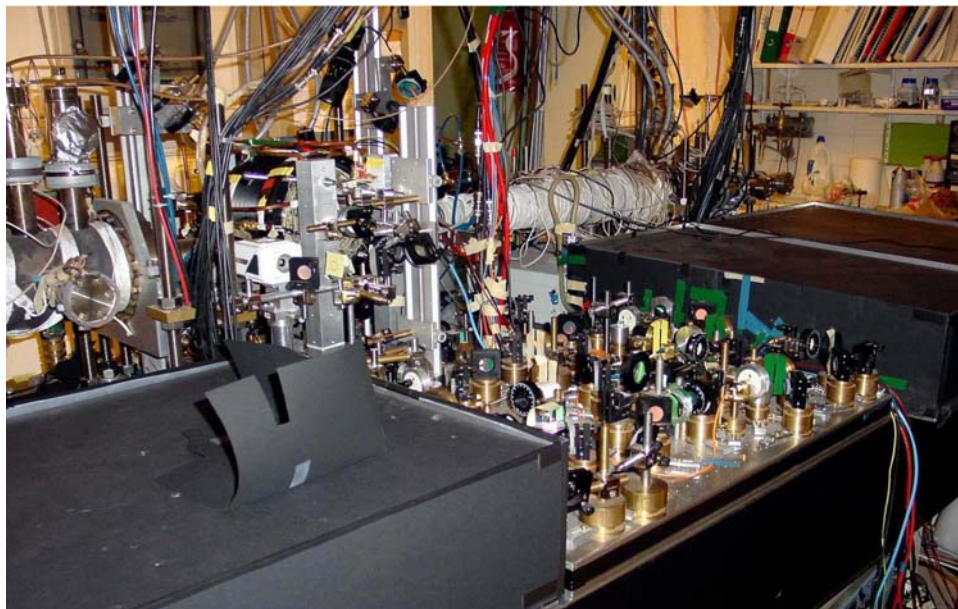
D'autres mécanismes de refroidissement plus efficaces que le refroidissement Doppler (refroidissement "Sisyphé", subrecul) ont été mis en évidence.

On sait aussi piéger les atomes dans des gradients de champ magnétiques ou d'intensité laser, puis refroidir les atomes ainsi piégés par évaporation.



Une expérience typique

Une “puce” à atomes froids



# **HORLOGES ATOMIQUES UTILISANT DES ATOMES ULTRAFROIDS**

# Principe des horloges (terrestres) à atomes ultrafroids

## Contraintes dues à la gravité

Pour éviter les perturbations de la fréquence  $\omega_A$  de la transition micro onde dues au faisceaux laser de piégeage et refroidissement, ces derniers doivent être coupés lors de la traversée des atomes dans la ou les cavités micro onde.

Les atomes de la mélasse tombent alors sous l'effet de la pesanteur!

## Idée de la fontaine

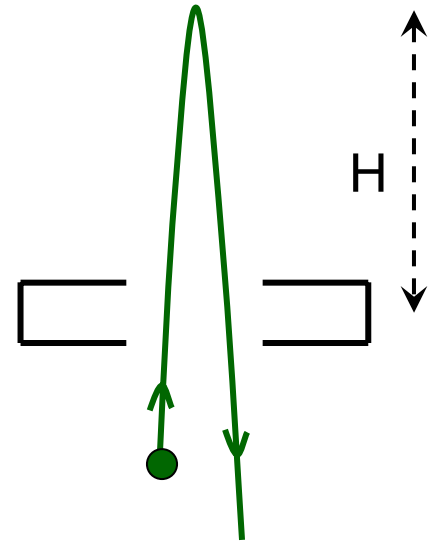
Lancer les atomes de la mélasse verticalement au moyen d'une impulsion laser pour leur faire traverser la même cavité 2 fois, une fois à la montée, une fois à la descente, et obtenir ainsi 2 interactions séparées par un temps  $T$

$$g(T/2)^2 / 2 = H \quad \rightarrow \quad T = 2\sqrt{2H/g}$$

$$H = 50 \text{ cm} \quad \rightarrow \quad T = 0.6 \text{ s}$$

Gain d'un facteur 200 par rapport aux horloges traditionnelles

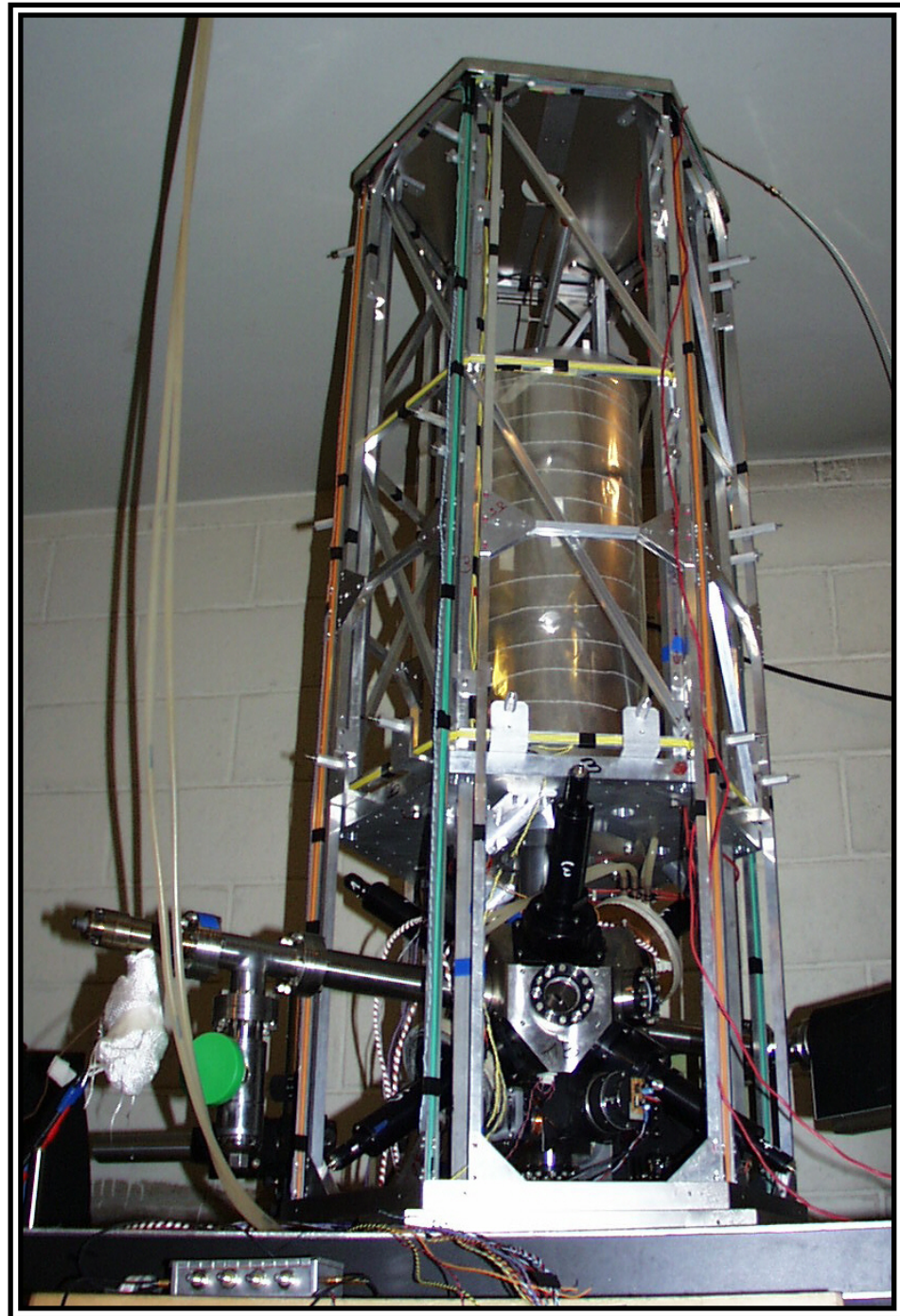
( $L = 1 \text{ m}$ ,  $v = 300 \text{ m/s}$   $\rightarrow$   $T = L/v = 0.003 \text{ s}$ )



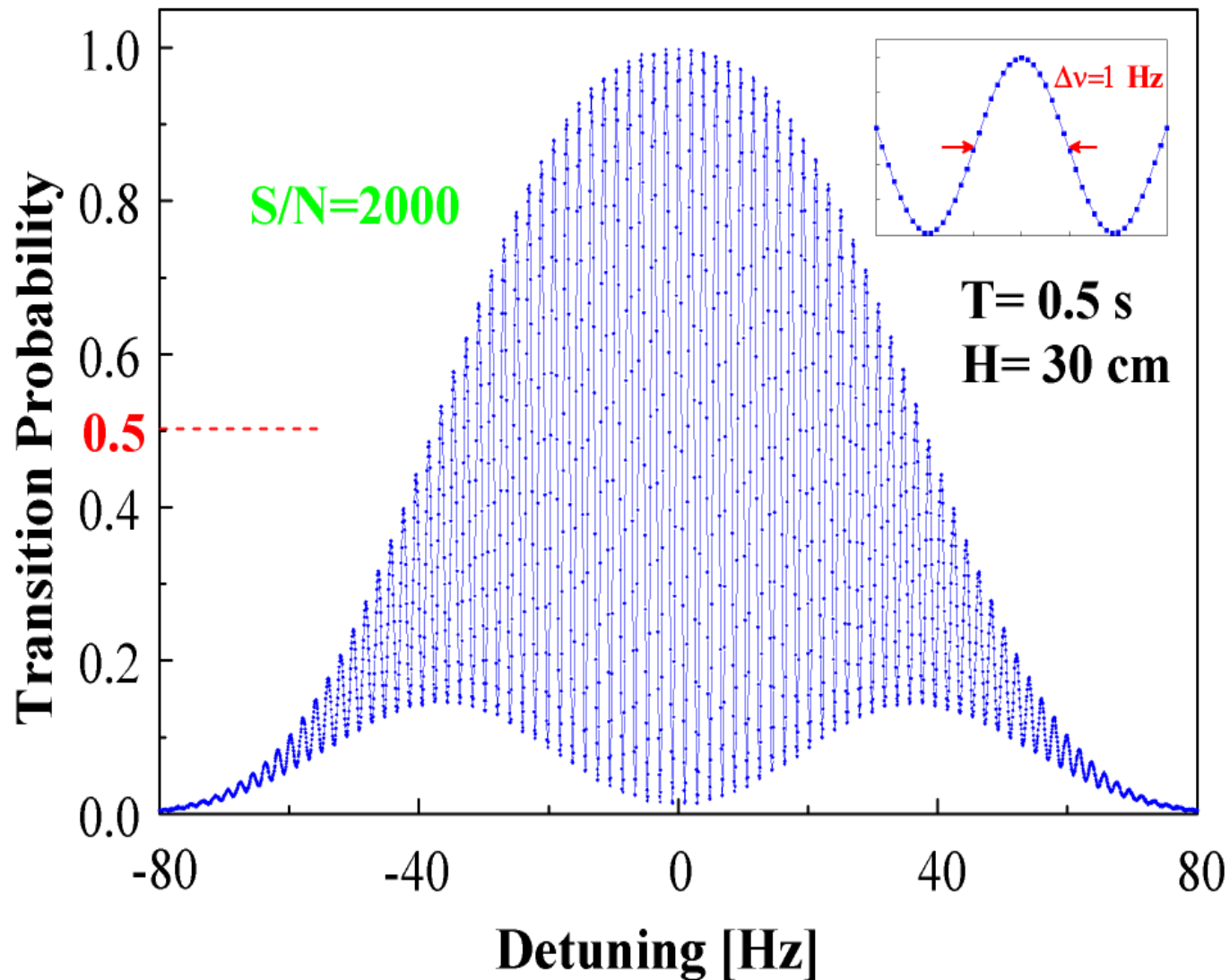




# Fontaine atomique du BNM-LPTF



# Franges de Ramsey dans une fontaine atomique



G. Santarelli et al., Phys. Rev. Lett. 82, 4619 (1999)

# Performances des fontaines atomiques

## Stabilité de fréquence

$1.6 \times 10^{-16}$  pour un temps d'intégration de  $5 \times 10^4$  s

## Exactitude

$7 \times 10^{-16}$

Une stabilité de  $10^{-16}$  correspond à moins de 1 seconde d'erreur sur 300 millions d'années

## Comment aller plus loin?

Travailler en apesanteur de manière à éviter la chute des atomes. On peut alors les lacer avec une très faible vitesse sans qu'ils tombent et leur faire traverser 2 cavités

Des horloges terrestres aux horloges spatiales

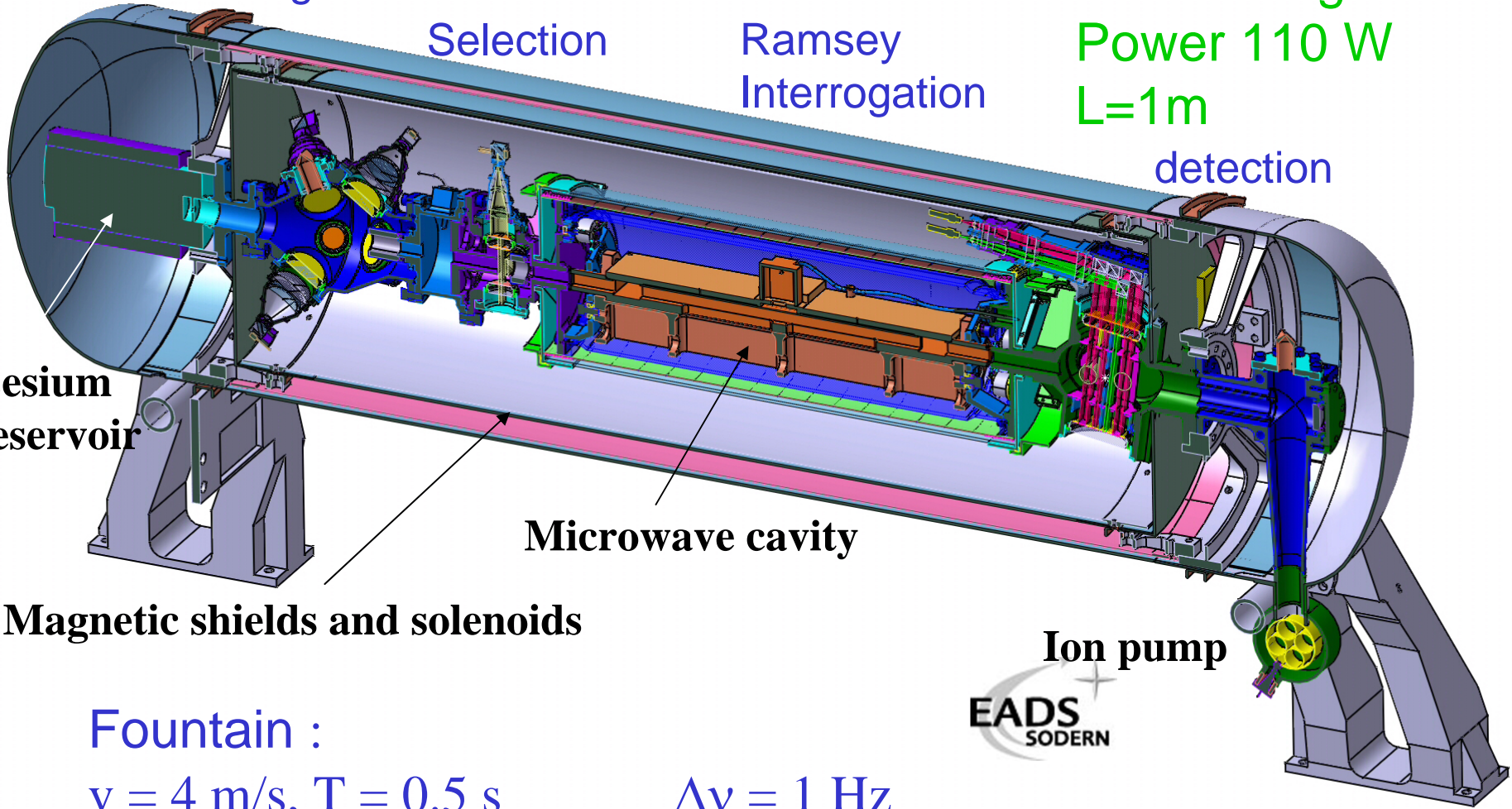
Cooling zone

Selection

Ramsey  
Interrogation

Mass 91 kg  
Power 110 W  
L=1m

detection



Cesium  
reservoir

Microwave cavity

3 Magnetic shields and solenoids

Ion pump



Fountain :

$$v = 4 \text{ m/s}, T = 0.5 \text{ s}$$

$$\Delta v = 1 \text{ Hz}$$

- PHARAO :

$$v = 0.05 \text{ m/s}, T = 5 \text{ s}$$

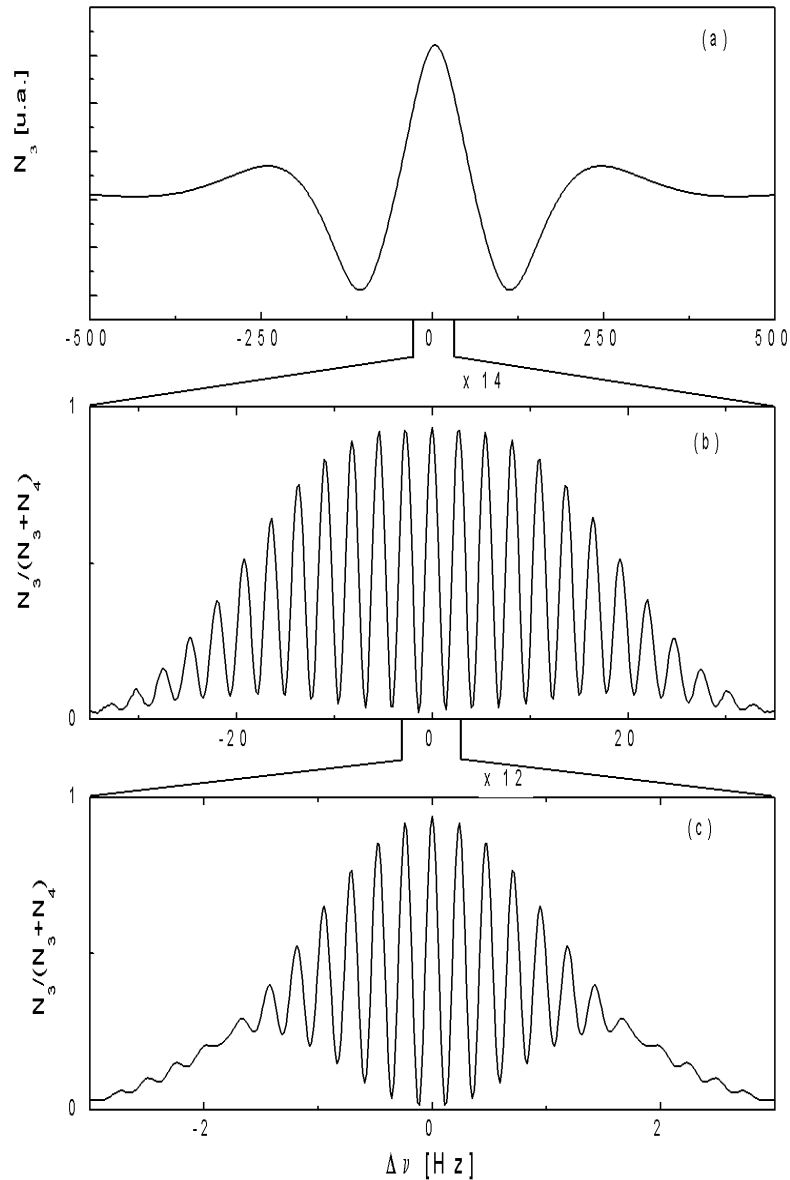
$$\Delta v = 0.1 \text{ Hz}$$

# Vols paraboliques





# Gains de sensibilité



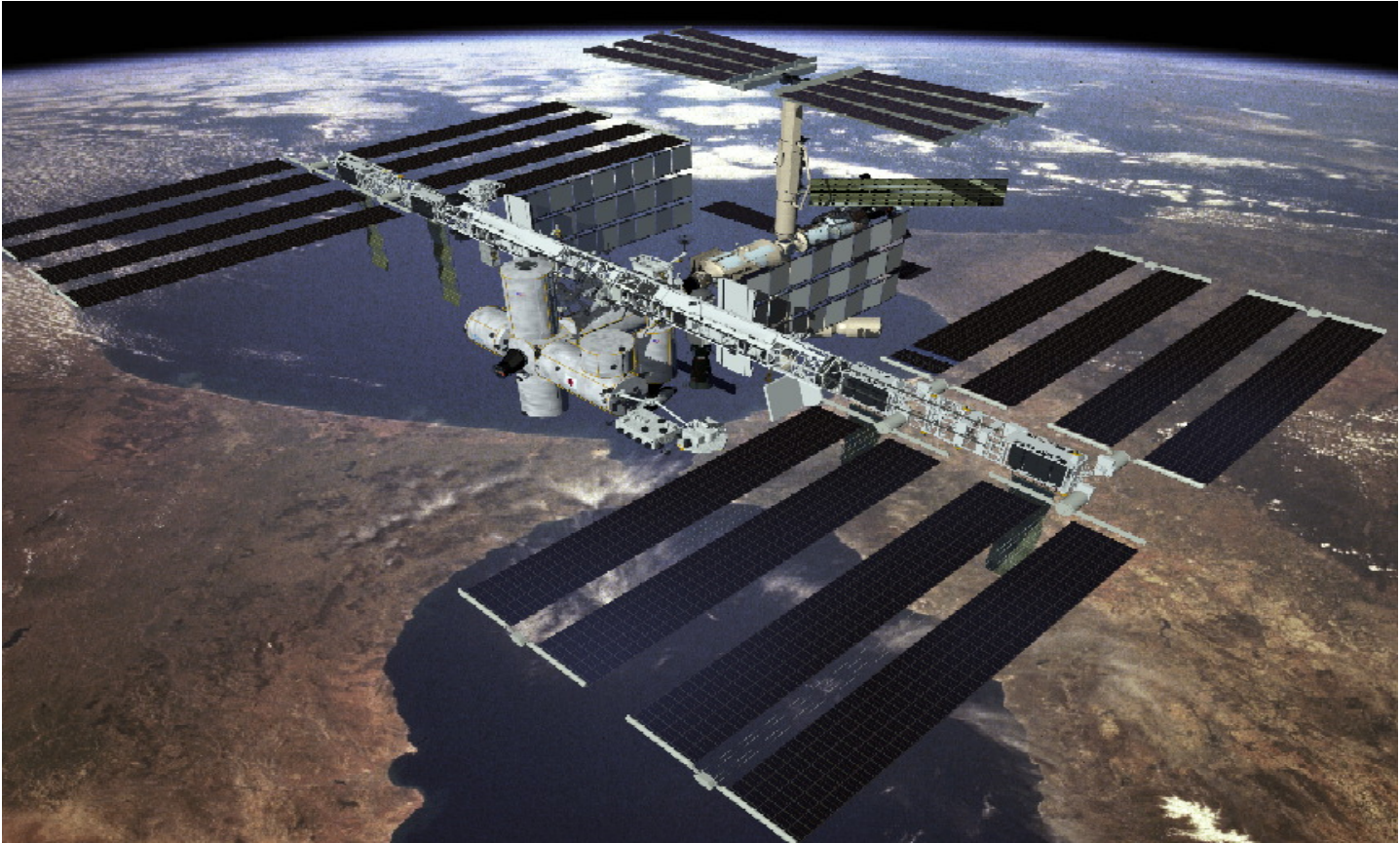
- Jet thermique :  
 $v = 100$  m/s,  $T = 5$  ms  
 $\Delta\nu = 100$  Hz

- Fontaine :  
 $v = 4$  m/s,  $T = 0.5$  s  
 $\Delta\nu = 1$  Hz

- PHARAO :  
 $v = 0.05$  m/s,  $T = 5$  s  
 $\Delta\nu = 0.1$  Hz

# ACES sur la station spatiale

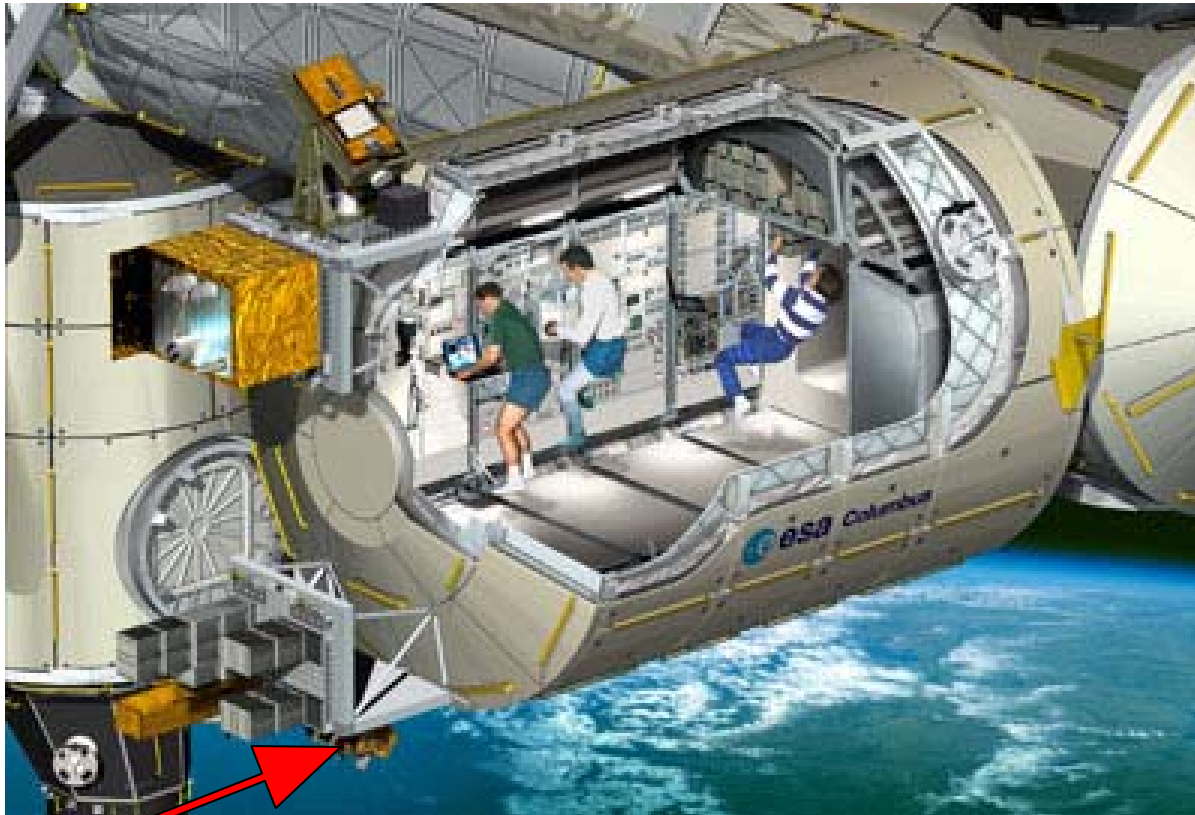
cnes  
esa



- Référence de temps
- Validation des horloges spatiales
- Tests de physique fondamentale

C. Salomon *et al* , C. R. Acad. Sci. Paris, t.2, Série IV, p. 1313-1330 (2001)

# ACES ON COLUMBUS EXTERNAL PLATFORM



**ACES**

**M = 227 kg**

**P = 450 W**



# Quelques applications des horloges à atomes ultrafroids

- Positionnement (système GPS), navigation
- Géodésie
- Interférométrie à longue base
- Synchronisation d'horloges éloignées
- Tests de théories fondamentales
  - Déplacement gravitationnel de la fréquence d'une horloge
  - Variation dans le temps des constantes fondamentales

## Déplacement gravitationnel de la fréquence d'une horloge

Un observateur à l'altitude  $z$  recevant le signal d'une horloge située à l'altitude  $z+\delta z$  mesure une fréquence  $\omega_A(z+\delta z)$  différente de celle,  $\omega_A(z)$ , de sa propre horloge

$$\frac{\omega_A(z+\delta z) - \omega_A(z)}{\omega_A(z)} = \frac{\delta \omega_A}{\omega_A} = \frac{g \delta z}{c^2}$$

$$g = 10 \text{ m/s}^2 \quad \delta z = 1 \text{ m} \quad c = 3 \times 10^8 \text{ m/s} \quad \rightarrow \quad \delta \omega / \omega = 10^{-16}$$

2 horloges à des altitudes différentes de 1 mètre ont des fréquences apparentes différant en valeur relative de  $10^{-16}$ . Une horloge spatiale à 400 kms d'altitude diffère de l'horloge terrestre de  $4 \times 10^{-11}$ . Possibilité de vérifier cet effet avec une précision 25 fois meilleure que tous les tests antérieurs

Autre application possible: détermination du géoïde, lieu des points où le potentiel de gravitation a une valeur donnée

## Recherche en laboratoire d'une dérive éventuelle des constantes fondamentales

À cause des corrections relativistes, la structure hyperfine d'un atome alcalin dépend de la constante de structure fine et du numéro atomique  $Z$ .

J. Prestage, R. Tjoelker, L. Maleki, Phys. Rev. Lett. 74, 3511 (1995)

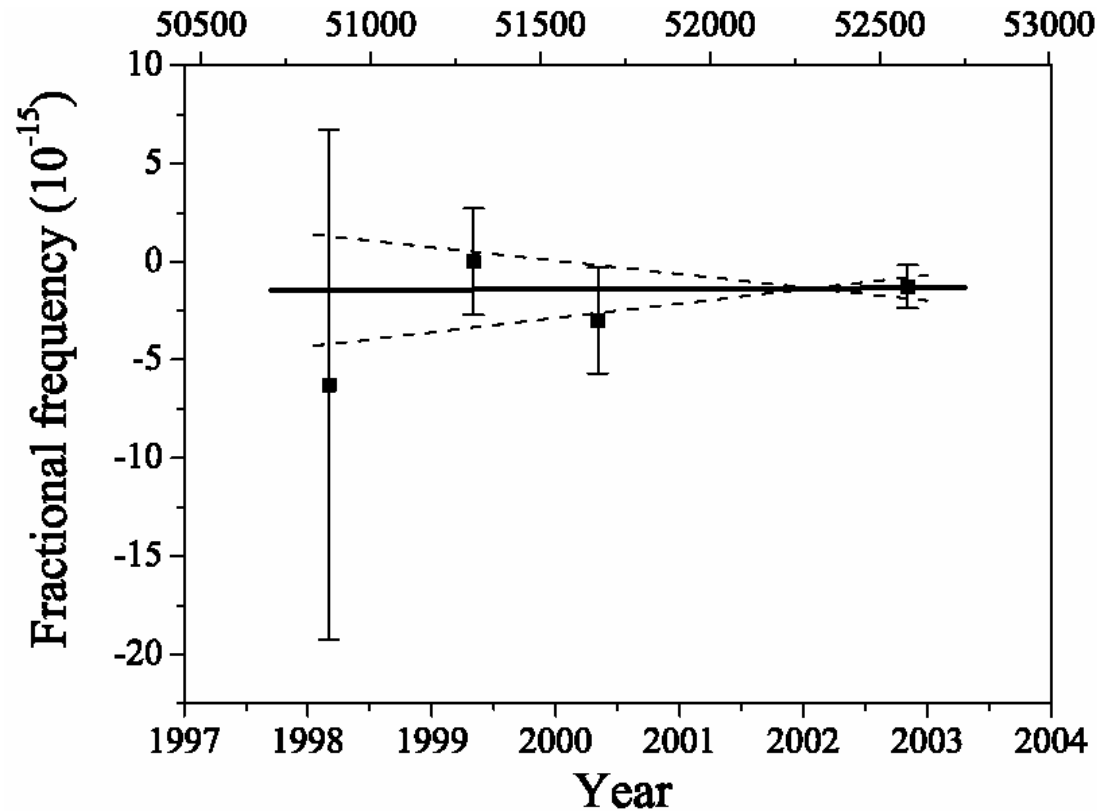
En comparant les fréquences hyperfines du césium et du rubidium mesurées sur 2 fontaines, et en suivant le rapport de ces 2 fréquences sur plusieurs années, on peut donc mettre une borne supérieure sur

$$\frac{\dot{\alpha}}{\alpha} = \frac{1}{\alpha} \frac{d\alpha}{dt}$$

### Autres tests (non de laboratoire)

- Réacteur nucléaire naturel d'Oklo (Gabon)
- Spectroscopie d'absorption de la lumière émise par des quasars lointains

# Résultats des mesures effectuées au BNM-SYRTE (Paris)



H. Marion *et al* , Phys. Rev. Lett. 90, 150801 (2003)

$$\frac{d}{dt} \ln \left( \frac{\nu_{Rb}}{\nu_{Cs}} \right) = (0.2 \pm 7) \times 10^{-16} / \text{an}$$

$$\frac{\dot{\alpha}}{\alpha} = (-0.4 \pm 16) \times 10^{-16} / \text{an}$$

## Quelques autres aspects non traités ici

Étude des effets limitant la précision et la stabilité

- Déplacements de fréquence dus aux collisions entre atomes
- Déplacements dus au rayonnement du corps noir
- Effet Zeeman quadratique
- Facteurs de bruit. Bruit de projection quantique

Horloges optiques

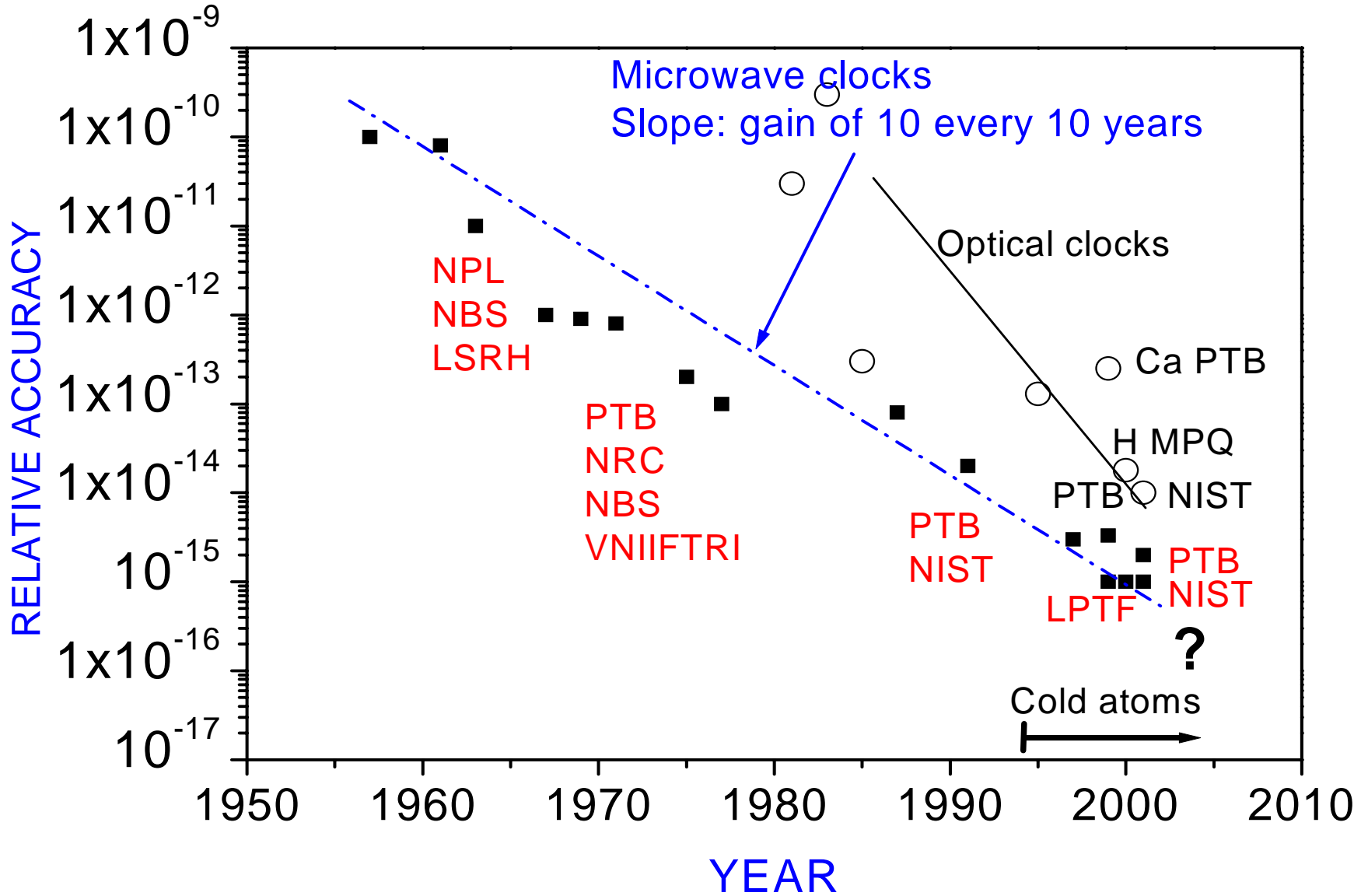
Utilisation d'une transition optique plutôt que micro onde pour verrouiller la fréquence de l'horloge

Utilisation de niveaux excités de très longue durée de vie

Exemples d'horloges optiques

- Utilisation d'ions piégés
- Utilisation d'atomes neutres piégés dans un réseau optique

# ACCURACY OF THE ATOMIC TIME



# Supplément pour la PC07:

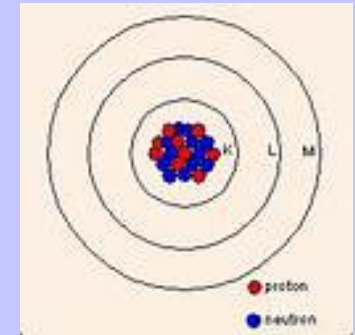
- Il y a quelques règles à suivre quand vous dessinez les modèles Bohr-Rutherford
  - Thomson-Perrin: rôles précurseurs
1. Indiquer le nombre de protons et de neutrons dans le noyau de l'atome
  2. Placer les électrons sur les niveaux d'énergie (orbites).

# Orbitales 1S, 2S, 2P...

- Niveau K ( $n=1$ )

Etat 1S  $n = 1, l = 0, m = \pm 0$

C'est l'état fondamental de symétrie sphérique 1S



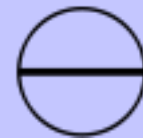
- Niveau L ( $n=2$ )

3 orbitales 2P



Etat 2S

$n = 2; l = 0; m = \pm 0$



$n = 2; l = 1; m = \pm 0$



$n = 2; l = 1; m = \pm 1$

# Table Périodique

		1		2		3		4		5		6		7		8		9		10		11		12		13		14		15		16		17		18	
Période	1	1	2																	2	4,0																
	1	H Hydrogène																	He Hélium																		
2	3	4																	5	10,8	6	12,0	7	14,0	8	16,0	9	19,0	10	20,2							
2	Li Lithium	Be Béryllium																	B Bore	C Carbone	N Azote	O Oxygène	F Fluor	Ne Neon													
3	11	12																	13	27,0	14	28,1	15	31,0	16	32,1	17	35,5	18	39,9							
3	Na Sodium	Mg Magnésium																	Al Aluminium	Si Silicium	P Phosphore	S Soufre	Cl Chlore	Ar Argon													
4	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36	37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54	
4	K Potassium	Ca Calcium	Sc Scandium	Ti Titane	V Vanadium	Cr Chrome	Mn Manganèse	Fe Fer	Co Cobalt	Ni Nickel	Cu Cuivre	Zn Zinc	Ga Gallium	Ge Germanium	As Arsenic	Se Sélénium	Br Brome	Kr Krypton																			
5	37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54	55	56	57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71		
5	Rb Rubidium	Sr Strontium	Y Yttrium	Zr Zirconium	Nb Niobium	Mo Molybdène	Tc Technétium	Ru Ruthénium	Rh Rhodium	Pd Palladium	Ag Argent	Cd Cadmium	In Indium	Sn Étain	Sb Antimoine	Te Tellure	I Iode	Xe Xénon																			
6	55	56	57	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86	87	88	89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103		
6	Cs Césium	Ba Baryum	La Lanthane	Hf Hafnium	Ta Tantale	W Tungstène	Re Rhenium	Os Osmium	Ir Iridium	Pt Platine	Au Or	Hg Mercure	Tl Thallium	Pb Plomb	Bi Bismuth	Po Polonium	At Astate	Rn Radon																			
7	87	88	89	104	105	106	107	108	109	110	111	112		114		116		118																			
7	Fr Francium	Ra Radium	Ac Actinium	Rf Rutherfordium	Db Dubnium	Sg Seaborgium	Bh Bohrium	Hs Hassium	Mt Meitnerium	Uun Ununillium	Uuu Unununium	Uub Unbibium		Uuq Ununquadium		Uuh Ununhexium		Uuo Ununoctium																			
				58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71																				
				Ce Cérium	Pr Praséodyme	Nd Néodyme	Pm Prométhium	Sm Samarium	Eu Europium	Gd Gadolinium	Tb Terbium	Dy Dysprosium	Ho Holmium	Er Erbium	Tm Thulium	Yb Ytterbium	Lu Lutétium																				
				90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103																				
				Th Thorium	Pa Protactinium	U Uranium	Np Neptunium	Pu Plutonium	Am Américium	Cm Curium	Bk Berkélium	Cf Californium	Es Einsteinium	Fm Fermium	Md Mendélévium	No Nobélium	Lw Lawrencium																				

Numéro atomique → Z


Symbole atomique → X

Nom

M → Masse molaire atomique (g.mol<sup>-1</sup>)

Famille



Dmitri Ivanovitch Mendeleïev (1834 - 1907) est un chimiste russe connu pour ses travaux sur la classification périodique des éléments. En 1869, il publia une première version de son tableau périodique des éléments appelé aussi tableau de Mendeleïev. Il clarifia que les éléments chimiques pouvaient être arrangés selon un modèle qui permettait de prévoir les propriétés des éléments non encore découverts.

# Atome d'Helium (PC07)

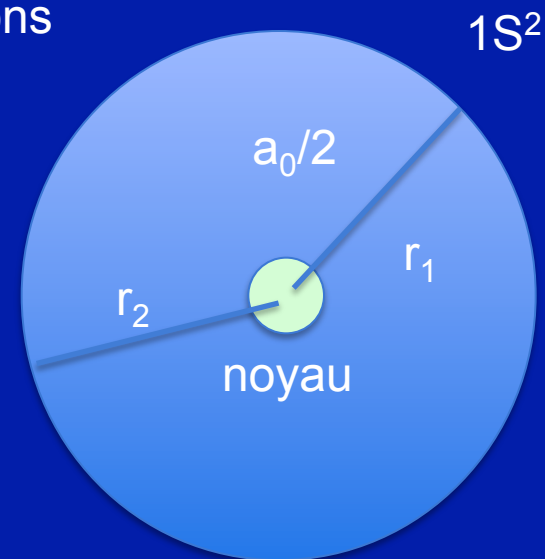
- Z=2 protons dans le noyau  
2 electrons autour du noyau

$a_0$  rayon de Bohr

Etat fondamental: Ignorons la répulsion entre electrons  
Les deux électrons se placent dans le niveau 1s

$$\psi_{100}(\vec{r}_1)\psi_{100}(\vec{r}_2) = C^2 \exp(-Z(r_1 + r_2)/a_0)$$

$$C = \frac{\sqrt{Z^3}}{\sqrt{\pi a_0^3}}$$



La force Coulombienne entre électrons fait que leur **distance moyenne** est de l'ordre de  $4a_0/5$  (en utilisant la théorie des perturbations):  $E_{\text{exp}} = -79\text{eV}$

Méthode variationnelle plus adaptée ici

# Effet du Spin

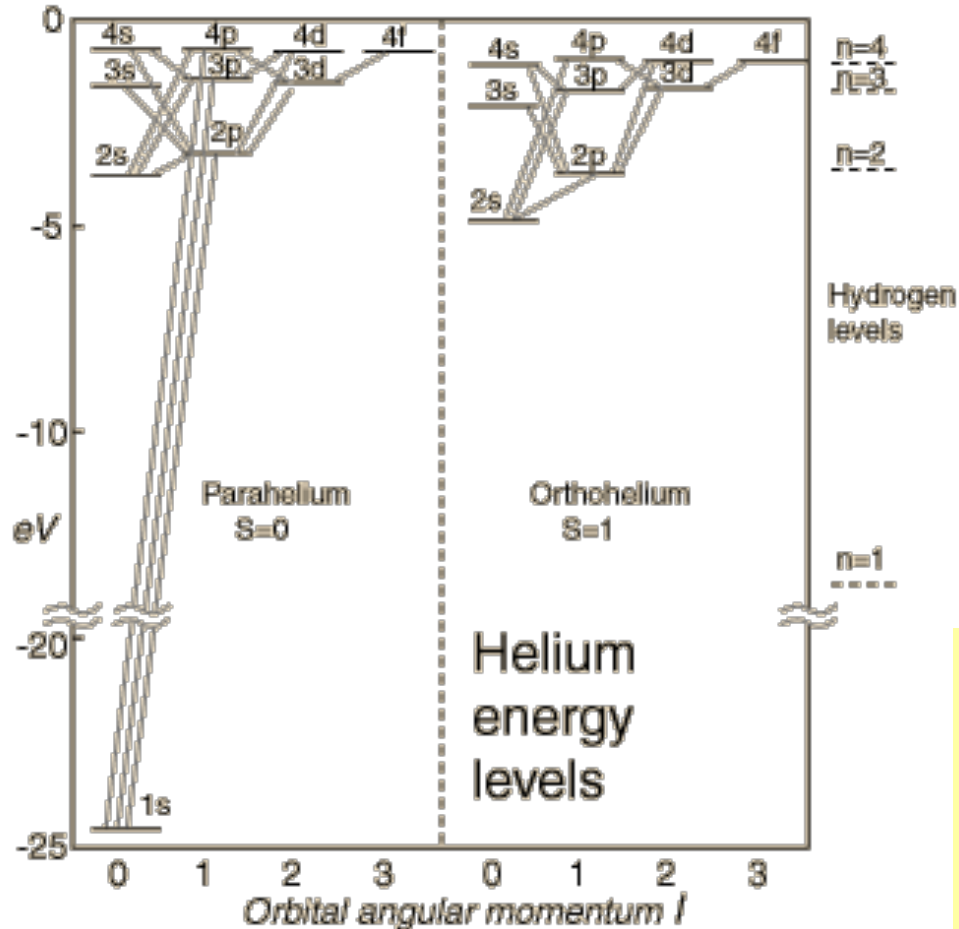
Puisque les électrons sont des fermions, la fonction d'onde est antisymétrique sous l'échange des deux particules:

- L'état fondamental «  $1S^2$  » est dans l'état singulet de spin (notations amphi 06):

$$|s = 0, m = 0\rangle = \frac{|+-\rangle - |-+\rangle}{\sqrt{2}}$$

Etat fondamental (parahélium) non dégénéré

# Etats Excités de l'Atome d'He



L'électron dans l'état excité peut avoir **son spin**

**anti-parallèle** au spin de l'électron 1S (état  $s=0$  de spin, singulet)  
**parahélium**

**parallèle** au spin de l'électron 1S (état  $s=1$  de spin, triplet)  
**orthohélium**

$$|s = 1, m = 1\rangle = |++\rangle$$

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

$$|s = 1, m = -1\rangle = |--\rangle$$

Pour obtenir l'énergie de l'état, soustraire 54.4 eV

# Hamiltonien Effectif

- L'effet de la répulsion Coulombienne peut être décrit par un Hamiltonien effectif

$$\tilde{W} = \alpha + \beta \hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_2$$

$$\tilde{W} = \alpha - \frac{3\beta\hbar^2}{4} + \frac{\beta}{2} \hat{\mathbf{S}}^2$$

L'énergie « d'échange » est moins importante pour l'état triplet à cause du principe de Pauli impliquant  $\beta < 0$  (application en matière condensée, physique statistique, **magnétisme**)

# Supplément: Statistique Quantique

En **1956**, Robert Hanbury Brown et Richard Twiss ont mesuré la corrélation entre des photons provenant d'une même source thermique.

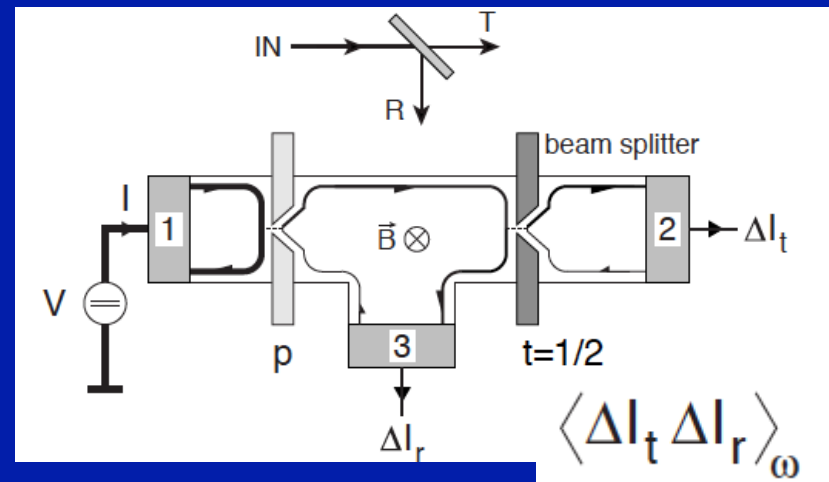
Ils ont mis en évidence que les photons émis par une telle source arrivent préférentiellement **groupés** sur le détecteur.

Ce groupement caractérise les bosons provenant d'une source non-cohérente.

Les fermions manifestent un **anti-groupement** dans les mêmes conditions.

Cet effet est observé dans des structures mésoscopiques: expérience du groupe de Basel (C. Schonenberger et al, 1999) et Stanford (Y. Yamamoto, 1999) par exemple

**He3-He4 (froids)**: expériences de l'institut d'Optique Palaiseau, C. Westbrook et al, 2007



Mesure de corrélations de courant

PC07, Phys 430 - Mécanique Quantique Avancée  
 Karyn Le Hur, karyn.le-hur@polytechnique.edu  
 Groupes 03 et 10

**Atome d'Helium, Addition de spins-1/2, Statistique Quantique**

Le Mardi 13 Octobre 2015

Cette petite classe est basée sur les amphis 04-07.

**Atome d'hélium: Introduction**

1. Nous considérons un électron soumis à l'attraction due à  $Z$  protons:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_e} - \frac{Ze^2}{|\hat{\mathbf{r}}|}. \quad (1)$$

Quelle est l'énergie de l'état fondamental ( $E_I = m_e e^4 / (2\hbar^2) = \hbar^2 / (2m_e a_0^2) \approx 13.6 eV$ . Le rayon de Bohr est  $a_0$ ). Ecrire la fonction d'onde de l'état fondamental.

2. Considérons maintenant deux fermions *indiscernables* quantiques. Justifier que l'état du système doit toujours être décrit par un Ket  $|\psi\rangle$  satisfaisant la condition  $\hat{P}_{12}|\Psi\rangle = -|\Psi\rangle$ , où  $\hat{P}_{12}$  est l'opérateur de permutation des deux particules.

**Modèle simple de l'atome d'hélium**

Les niveaux d'énergie électronique de l'atome d'hélium  ${}^4_2\text{He}$  (2 électrons, 2 protons, 2 neutrons) peuvent être décrits dans le référentiel du noyau supposé fixe par l'hamiltonien

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W} \quad \text{avec}$$

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m_e} + \frac{\hat{\mathbf{p}}_2^2}{2m_e} - \frac{2e^2}{|\hat{\mathbf{r}}_1|} - \frac{2e^2}{|\hat{\mathbf{r}}_2|} \quad \text{et} \quad \hat{W} = \frac{e^2}{\hat{r}_{12}} \quad (\hat{r}_{12} = |\hat{\mathbf{r}}_1 - \hat{\mathbf{r}}_2|)$$

où les indices 1 et 2 numérotent les électrons. dans ce problème, on néglige en première approximation toute contribution des moments magnétiques.

1. Dans un premier temps, on néglige l'interaction entre les électrons. Donner dans ce cas l'énergie du niveau fondamental de l'atome d'hélium. Quel est l'état de spin des deux électrons ? En déduire la dégénérescence du niveau fondamental.
2. On considère le niveau excité correspondant à un électron dans l'état orbital 1s ( $n = 1, \ell = 0, m = 0$ ) et un électron dans l'état orbital 2s ( $n = 2, \ell = 0, m = 0$ ). On choisit de décrire tous les états possibles comme un produit des composantes orbitales, fonction de  $\mathbf{r}_1$  et  $\mathbf{r}_2$ , et des composantes de spin. On écrit les composantes de spin dans la base des vecteurs propres de  $\hat{\mathbf{S}}^2$  et  $\hat{S}_z$ , où  $\hat{\mathbf{S}} = \hat{\mathbf{S}}_1 + \hat{\mathbf{S}}_2$  et les composantes orbitales de façon symétrique ou anti-symétrique:

$$\psi^S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{1s}(\mathbf{r}_1)\psi_{2s}(\mathbf{r}_2) + \psi_{2s}(\mathbf{r}_1)\psi_{1s}(\mathbf{r}_2))$$

$$\psi^A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{1s}(\mathbf{r}_1)\psi_{2s}(\mathbf{r}_2) - \psi_{2s}(\mathbf{r}_1)\psi_{1s}(\mathbf{r}_2)).$$

Quelle est l'énergie du premier niveau excité de l'He, en absence de  $\hat{W}$ ? Quelles sont les fonctions d'ondes correspondantes et quelle est la dégénérescence de ce niveau en tenant compte du principe de Pauli?

3. On considère maintenant le terme de répulsion coulombienne  $\hat{W}$  entre les électrons et on suppose qu'on peut le traiter en perturbation au premier ordre. Calculer l'effet de  $\hat{W}$  sur le niveau fondamental de  $\hat{H}$  au premier ordre de la théorie de perturbations. On donne l'intégrale:

$$\int \int \frac{e^{-2(x_1+x_2)}}{|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|} d^3 \mathbf{x}_1 d^3 \mathbf{x}_2 = \frac{5\pi^2}{8}. \quad (2)$$

En déduire la distance moyenne entre électrons. Donner en électron-volts la valeur de l'énergie du niveau fondamental à cet ordre de calcul. Comparer avec le résultat expérimental de la mesure d'énergie du niveau de l'état fondamental de l'atome d'hélium: (proche de) -79eV. Proposer une méthode plus adaptée pour résoudre le problème.

4. L'effet de la répulsion Coulombienne dans le cas où un électron est dans l'état orbital 1s et l'autre dans l'état orbital 2s fait intervenir les quantités:

$$\begin{aligned} K &= \langle 1 : 1s; 2 : 2s | \hat{W} | 1 : 1s; 2 : 2s \rangle \\ J &= \langle 1 : 2s; 2 : 1s | \hat{W} | 1 : 1s; 2 : 2s \rangle, \end{aligned} \quad (3)$$

qui ne sont pas à calculer explicitement. Supposons maintenant que l'on s'intéresse à l'opérateur

$$\tilde{W} = \alpha + \beta \hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_2. \quad (4)$$

Trouver les états propres de  $\tilde{W}$  et les valeurs propres associées en fonction de  $\alpha$  et  $\beta$ . Montrer que l'effet de l'interaction Coulombienne entre électrons peut être décrit par cet Hamiltonien "effectif" d'échange avec les contraintes:

$$\begin{aligned} \alpha + \frac{\beta \hbar^2}{4} &= K - J \\ \alpha - \frac{3\beta \hbar^2}{4} &= K + J. \end{aligned} \quad (5)$$

Quel est le signe de  $\beta$ ? Comparer les résultats avec les données expérimentales.

### Lame Séparatrice et Statistique Quantique

On considère une particule préparée à un instant initial  $t_i$  dans un paquet d'ondes  $\psi(\mathbf{r}, t_i) = \phi_1(\mathbf{r})$  et arrivant sur une lame séparatrice 50%-50%. A un instant ultérieur  $t_f$ , le paquet d'ondes a traversé la lame et peut s'écrire  $\psi(\mathbf{r}, t_f) = (\phi_3(\mathbf{r}) + \phi_4(\mathbf{r}))/\sqrt{2}$ , où  $\phi_3, \phi_4$  désignent des paquets normalisés (et essentiellement orthogonaux) se propageant dans chacune des voies de sorties (voir figure).

1. On prépare la particule dans un état  $\psi'(\mathbf{r}, t_i) = \phi_2(\mathbf{r})$ , symétrique de  $\phi_1(\mathbf{r})$  par rapport à la lame et tel que  $\langle \phi_2 | \phi_1 \rangle = 0$  (voir figure). Quel est l'état  $\psi'(\mathbf{r}, t_f)$  de la particule à l'instant  $t_f$ ?
2. On prépare à l'instant  $t_i$  deux fermions dans le même état de spin, l'un dans l'état  $|\phi_1\rangle$  et l'autre dans l'état  $|\phi_2\rangle$ . Quels sont les états initial et final du système? Peut-on détecter les deux fermions dans la même voie de sortie? Même question si les deux particules sont des bosons.

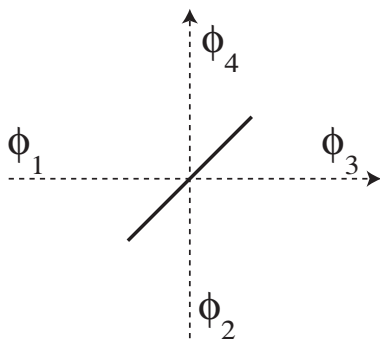


Figure 1: Lame séparatrice & paquets d'onde entrant  $\phi_1, \phi_2$  et sortant  $\phi_3, \phi_4$ .

# Introduction : PC07 introduction et rappels

1) Analogie avec l'atome d'hydrogène

$$e^4 \mapsto Z^2 e^4 \quad e^2 = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0}$$

Nous en déduisons donc que les énergies sont modifiées comme

NOTE :  $\frac{2e^2}{a_0} = 54.4 \text{ eV}$        $-Z^2 E_I$        $E_I = \frac{m_e e^4}{(2\hbar^2)}$

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2}$$

énergie fondamentale  $-4 \cdot 13.6 \text{ eV} = -54.4 \text{ eV}$

$$E_I = \frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2}$$

fonction d'onde de l'état fondamental

$$\psi_{100}(\vec{r}) = C \exp(-Zr/a_0)$$

rayon de Bohr  $a_0/Z$

## 2) COLLISION (exemple) indiscernabilité

1,  $\psi_1 \rightarrow \leftarrow \psi_2$  2,      PRINCIPE de PAULI

Après collisions soit

1,  $\psi_1 \leftarrow \rightarrow \psi_{2,2}$

2,  $\psi_1 \leftarrow \rightarrow \psi_{2,1}$

fonction d'onde de la forme

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1:\psi_1\rangle \otimes |2:\psi_2\rangle - |2:\psi_1\rangle \otimes |1:\psi_2\rangle)$$

fermions  $\psi = 0$  si  $\psi_1 = \psi_2$

$$\hat{P}_{12} |\psi\rangle = -|\psi\rangle$$

# PC07 Modèle simple de l'atome d'hélium

ATOME d'hélium 2 électrons, 2 protons, 2 neutrons  
Référentiel du noyau supposé FIXE (He<sup>4</sup>)

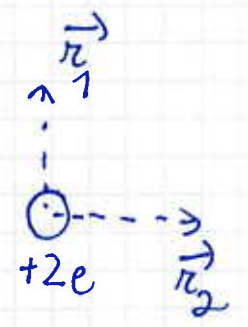
$$\hat{H} = (\hat{H}_0 + \hat{W})$$

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}_1^2}{2m_e} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m_e} - \frac{2e^2}{|\vec{r}_1|} - \frac{2e^2}{|\vec{r}_2|}$$

$$\hat{W} = \frac{e^2}{|\vec{r}_{12}|}$$

$$|\vec{r}_{12}| = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$$

N.B  $\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} = e^2$



La différence à ce niveau-ci comparativement à l'atome d'hydrogène est que l'atome d'hélium contient 2 protons

1) Les états pour le système à 2 électrons sont donnés par: ( $W=0$ ) (invariante par rotation du problème)

$$|n_1 \ell_1 m_1\rangle \otimes |n_2 \ell_2 m_2\rangle \otimes [ |s_1 m_1^s\rangle \otimes |s_2 m_2^s\rangle ]$$

degrés de liberté motionnels pour les 2 particules

degrés de liberté de spin

\*\* Cette description sera insuffisante lorsque nous traiterons l'interaction de Coulomb (entre les électrons)


Pour sommes dans le cas où  $s_1 = s_2 = \frac{1}{2}$   
Les résultats possibles d'une mesure de  $\hat{S}_{1z}$  sont  $m_1^s \hbar$

avec  $m_l^0 = \pm \frac{1}{2}$

Rappel dans l'état fondamental par analogie avec le problème de l'atome d'hydrogène

$m_1 = 1 \quad l_1 = 0 = m_1$   
 $m_2 = 1 \quad l_2 = 0 = m_2$

la partie orbitale de l'état fondamental s'écrit

$\psi_{100}(\vec{r}) = C \exp(-Zr/a_1)$  

$a = a_0 = a_1$  : Rayon de Bohr  $Z=2$  protons

la constante de normalisation est  $C = \frac{\sqrt{Z^3}}{\sqrt{\pi a_1^3}}$

$a_1$  (rappel de la PC01)

$\frac{a_1}{Z} = \frac{\hbar^2}{m_e Z e^2} = a_1^{eff}$

Rayon de Bohr effectif pour le problème avec  $Z$  protons.

L'énergie de chaque électron est  $-Z^2 E_I$

$E_I = \frac{m_e e^4}{(2\hbar^2)}$

chaque électron a une énergie :

$-\frac{2m_e e^4}{\hbar^2}$

l'énergie totale du système à 2 électrons est :

$E_f = \left( -\frac{4m_e e^4}{\hbar^2} \right)$

Pour l'atome d'hydrogène on rappelle

(3)

$$\frac{m_e e^4}{2\hbar^2} = 13,6 \text{ eV}$$

$$E_f (\text{héium}) = 8 \cdot (-13,6) \\ = -108,8 \text{ eV}$$

(si on néglige la force de Coulomb entre les 2 électrons)

Rappel sur l'importance de la STATISTIQUE des particules.

Puisque les électrons sont des fermions, la fonction d'onde totale est antisymétrique sous l'échange de 2 particules.

Cela est RELIÉ au principe dit de PAULI : nous ne pouvons pas placer 2 fermions dans le même état quantique.

La partie orbitale étant symétrique :

$$\psi_{100}(\vec{r}_1) \psi_{100}(\vec{r}_2) = C^2 \exp\left[-Z(r_1 + r_2)/a_1\right]$$

il faut que les 2 spins soient dans l'état singulet.

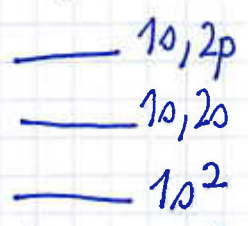
NOTONS  $|+\rangle = \left|s = \frac{1}{2} \quad m_s = \frac{1}{2}\right\rangle$

$$|-\rangle = \left|s = \frac{1}{2} \quad m_s = -\frac{1}{2}\right\rangle$$

l'état fondamental s'écrit donc

$$|\psi_f\rangle = |1: 100\rangle \otimes |2: 100\rangle \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |1: +; 2: -\rangle - |1: -; 2: +\rangle \right)$$

2) Les états excités de l'atome d'hélium sont bâtis avec un des 2 électrons dans son état fondamental et un électron dans l'état orbital 2s.



Un état excité général s'écrit :  $\psi_{nlm} \psi_{100}$

Soit un électron dans l'état orbital 1s ( $n=1, l=0, m=0$ ) et un électron dans l'état orbital 2s ( $n=2, l=0, m=0$ )

La partie orbitale peut maintenant être dans un état symétrique ou anti-symétrique

$$|\psi_{orb}^S\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1:1s; 2:2s\rangle + |1:2s; 2:1s\rangle)$$

Rappel nous sommes dans la situation de particules (indiscernables)

$$|\psi_{orb}^A\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1:1s; 2:2s\rangle - |1:2s; 2:1s\rangle)$$

de même la partie spin peut être soit dans l'état singulet ou soit dans l'état triplet

SINGULET (Parahélium)  $|\psi_{spin}^S\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1:+\rangle \otimes |2:-\rangle - |1:-\rangle \otimes |2:+\rangle)$

↑  
produit tensoriel

TRIPLET (Ortho-hélium) (i)  $|1:+\rangle \otimes |2:+\rangle$

RAPPEL (ii)  $\frac{1}{\sqrt{2}} (|1:+\rangle \otimes |2:-\rangle - |1:-\rangle \otimes |2:+\rangle)$

(iii)  $|1:-\rangle \otimes |2:-\rangle$

notations livre 335

# ETAT SINGULET de spin

(5)

symétrique "orbitale"

ETAT PARA-HELIUM

$$|\psi\rangle_{\text{singulet}} = |\psi_{\text{orb}}^s\rangle \otimes |\psi_{\text{spin}}^s\rangle$$

↓  
symétrique

↓  
singulet  
(anti-symétrique)

ETAT TRIPLET de spin : la partie orbitale est anti-symétrique

$$|\psi\rangle_{\text{triplet}} = |\psi_{\text{orb}}^A\rangle \otimes \begin{cases} (i) \\ (ii) \\ (iii) \end{cases}$$

ENERGIE du 1<sup>er</sup> état excité

1 électron dans l'état fondamental  $E = -\frac{2m_e e^4}{\hbar^2} = -54,4 \text{ eV}$

1 électron dans l'état (2s)  $E = -\frac{m_e e^4}{2\hbar^2} = -13,6 \text{ eV}$

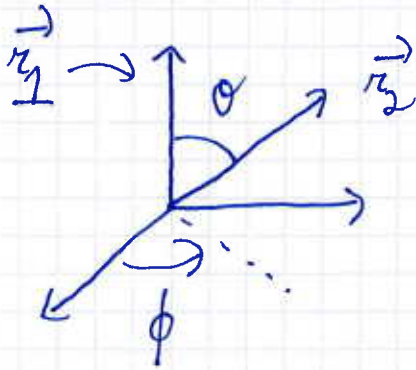
$$E(1s) + E(2s) = (-54,4 - 13,6) = -68 \text{ eV}$$

3) ETAPE supplémentaire : On considère maintenant le terme de répulsion Coulombienne

$$\hat{W} = \frac{e^2}{\hat{r}_{12}} \quad \hat{r}_{12} = |\hat{r}_1 - \hat{r}_2|$$

Nous pouvons calculer l'effet de l'interaction de Coulomb perturbativement. (6)

Plaçons-nous dans l'état fondamental de l'atome d'Helium



(PCO)  $\square$  cas non-dégénéré

$$\Delta E = \langle \psi_f | \hat{W} | \psi_f \rangle$$

$$= \iint d^3 \vec{r}_1 d^3 \vec{r}_2 \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} |\psi_{100}(\vec{r}_1)|^2 |\psi_{100}(\vec{r}_2)|^2$$

$$C = \frac{\sqrt{Z^3}}{\sqrt{\pi a_1^3}}$$

$$\Delta E = e^2 C^4 \int d^3 \vec{r}_1 \int d^3 \vec{r}_2 \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \exp - 4(r_1 + r_2)/a_1$$

Dans le texte, nous donnons l'intégrale

$$I = \iint \frac{e^{-2(x_1 + x_2)}}{|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|} d^3 \vec{x}_1 d^3 \vec{x}_2 = \frac{5\pi^2}{8}$$

$$\vec{x}_1 = \frac{2\vec{r}_1}{a_1}$$

$$\vec{x}_2 = \frac{2\vec{r}_2}{a_1}$$

$$d^3 \vec{x} = \left(\frac{2}{a_1}\right)^3 d^3 \vec{r}$$

$$\Delta E = e^2 C^4 \left(\frac{a_1}{2}\right)^6 \left(\frac{2}{a_1}\right)^3 I = \frac{e^2 Z^6}{\pi^2 a_1^6} \left(\frac{a_1}{2}\right)^5 \frac{5\pi^2}{8}$$

$$= e^2 \frac{Z^6}{2^5} \frac{5}{8 a_1} \quad Z=2$$

Donc

$$\Delta E = e^2 \frac{2}{8} \left(\frac{5}{a_1}\right) = \frac{e^2}{d}$$

$d = \frac{4}{5} a_1$  distance moyenne entre électrons

A cet ordre du calcul l'énergie de l'état fondamental est donc  $E_f = -108,8 + 34 = -74,8 \text{ eV}$

La prédiction expérimentale donne :  $E_f = -79 \text{ eV}$  (7)  
Le modèle simple donne un résultat relativement proche de l'expérience. (méthode "champ moyen"  $Z_{\text{eff}} \approx 1.69$ )

#### 4) Hamiltonien effectif dépendant des spins

De manière similaire au cas précédent, nous pouvons traiter l'interaction de Coulomb dans le cas où un électron est dans l'orbitale  $1s$  et l'autre électron dans l'orbitale  $2s$ .

Les 2 types d'énergie suivants jouent un rôle dans le calcul

$$K = \langle 1:1s; 2:2s | \hat{W} | 1:1s; 2:2s \rangle$$

$$J = \langle 1:2s; 2:1s | \hat{W} | 1:1s; 2:2s \rangle$$

Pour étudier l'effet de  $\hat{W}$ , il faut diagonaliser la matrice suivante dans la base  $|1:1s; 2:2s\rangle$  et  $|1:2s; 2:1s\rangle$

$$\begin{pmatrix} K & J \\ J & K \end{pmatrix}$$

On trouve les valeurs propres  $(K+J)$  et  $(K-J)$  associées.

On peut remplacer  $\hat{W}$  par un opérateur effectif

$$\tilde{W} = \alpha + \beta \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$$

où  $\vec{S}_1$  et  $\vec{S}_2$  désignent les 2 spins des électrons.

$$\tilde{W} = \left( \alpha - \frac{3\beta \hbar^2}{4} + \frac{\beta}{2} \vec{S}^2 \right) \quad \vec{S} = (\vec{S}_1 + \vec{S}_2)$$

Les états propres de  $\tilde{W}$  sont :

les états triplets avec la valeur propre :

(8)

$$\alpha - \frac{3\beta \hbar^2}{4} + \frac{\beta}{2} \hbar^2 \frac{s(s+1)}{2}$$

$$\alpha + \hbar^2 \beta - \frac{3\beta \hbar^2}{4} = \alpha + \frac{\beta \hbar^2}{4}$$

l'état singulet avec la valeur propre  $\alpha - \frac{3\beta \hbar^2}{4}$

L'énergie de l'état  $S=0$  est plus haute en énergie, donc nous identifions (dans ce cas l'énergie d'échange est plus grande)

$$\alpha + \frac{\beta \hbar^2}{4} = K - J$$

$$\alpha - \frac{3\beta \hbar^2}{4} = K + J \quad (K, J) > 0$$

$$\beta \hbar^2 = -2J$$

$$\beta = -\frac{2J}{\hbar^2}$$

$$\alpha = K - J + \frac{2J}{4\hbar^2} \hbar^2 = K - \frac{J}{2}$$

L'effet de l'interaction d'échange est "équivalente" à l'effet de la répulsion Coulombienne. Quand les 2 particules sont dans l'état  $1s$   $\mathcal{K}_0 = \langle 1:1s; 2:1s | \hat{V} | 1:1s; 2:1s \rangle \approx 34 \text{ eV}$  ( $\beta > 0$ )

NOTE: Nous pouvons montrer que l'interaction magnétique entre électrons est NEGLIGEABLE ( $10^4$  fois plus faible que l'énergie d'interaction électrostatique)

NOTE 2: Considérons le moment cinétique orbital  $\hat{L} = \hat{L}_1 + \hat{L}_2$

$$\left[ \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}, \hat{L} \right] = 0 \quad \hat{L} \text{ est une constante du mouvement}$$

variable relative  $\frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$

$\hat{L}^2, \hat{S}^2, \hat{L}_z, \hat{S}_z$  constituent un EOC

# Statistique Quantique

$$\rightarrow \begin{matrix} \uparrow R = |r|^2 \\ \downarrow T = |t|^2 \end{matrix}$$

$|\phi_{in}\rangle \in \{|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle\}$  temps  $t_i$

Une séparatrice processus unitaire

$$|\phi_1^{final}\rangle = \hat{u}_1 |\phi_1\rangle = r |\phi_4\rangle + t |\phi_3\rangle \quad r = t = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$R = |r|^2 \quad T = |t|^2 \quad R + T = 1$$

$\phi_3, \phi_4$  paquets d'onde normalisés

1) Paquet d'onde issu de  $|\phi_2\rangle$

$$|\phi_2^{final}\rangle = \hat{u}_2 |\phi_2\rangle = t' |\phi_4\rangle + r' |\phi_3\rangle$$

$$\langle \phi_1 | \phi_2 \rangle = 0 \quad |t'|^2 = T \quad R = |r'|^2$$

$$\langle \phi_1 | \phi_2 \rangle = 0 \quad \text{impose } [r^* t' + t^* r] = 0$$

$$\text{Coefficients réels : } t' = -\frac{1}{\sqrt{2}} \quad r' = +\frac{1}{\sqrt{2}}$$

2) FERMIONS

$$|\psi\rangle = |\phi_1; +\rangle$$

$$|\chi\rangle = |\phi_2; +\rangle$$

particules de spin  $-\frac{1}{2}$

Principe de Pauli

$$|\phi_{in}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [ |1:\psi; 2:\chi\rangle - |2:\psi; 1:\chi\rangle ]$$

$$|1:\psi; 2:\chi\rangle = |1:\psi\rangle \otimes |2:\chi\rangle$$

Les 2 fermions ne peuvent occuper la même voie de sortie

$$|\phi_{final}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} ( |1:\tilde{\psi}; 2:\tilde{\chi}\rangle - |2:\tilde{\psi}; 1:\tilde{\chi}\rangle )$$

(voir preuve similaire bosons)

phénomène d'anti-regroupement (anti-bunching)

$$|\tilde{\psi}\rangle = |\phi_4; +\rangle \quad |\tilde{\chi}\rangle = |\phi_3; +\rangle$$

BOSONS :

$$|\phi_{in}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [ |1:\psi; 2:\chi\rangle + |2:\psi; 1:\chi\rangle ]$$

La fonction d'onde tend à favoriser les bosons dans le même état quantique.

Evaluons  $\hat{u}_1 \hat{u}_2 |\phi_{in}\rangle$

$$\begin{aligned} \hat{u}_1 \hat{u}_2 |1:\psi; 2:\chi\rangle &= \hat{u}_1 |1:\psi\rangle \otimes \hat{u}_2 |2:\chi\rangle \\ &= (\alpha |1:\tilde{\psi}\rangle + \beta |1:\tilde{\chi}\rangle) \otimes (\alpha' |2:\tilde{\psi}\rangle + \alpha'' |2:\tilde{\chi}\rangle) \end{aligned}$$

$$\hat{u}_1 \hat{u}_2 |1:\psi; 2:\chi\rangle = \frac{1}{2} ( |1:\tilde{\psi}\rangle + |1:\tilde{\chi}\rangle ) \otimes ( -|2:\tilde{\psi}\rangle + |2:\tilde{\chi}\rangle )$$

$$\hat{u}_2 \hat{u}_1 |2:\psi; 1:\chi\rangle = \frac{1}{2} ( -|1:\tilde{\psi}\rangle + |1:\tilde{\chi}\rangle ) \otimes ( |2:\tilde{\psi}\rangle + |2:\tilde{\chi}\rangle )$$

Cela donne :

$$\hat{u}_1 \hat{u}_2 |\phi_{in}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \begin{array}{c} \uparrow \\ (-|1:\tilde{\psi}\rangle \otimes |2:\tilde{\psi}\rangle + |1:\tilde{\chi}\rangle \otimes |2:\tilde{\chi}\rangle) \\ \downarrow \end{array} \right)$$

$2\alpha\alpha' = -1$ 
 $2\alpha\alpha'' = +1$

Les bosons préfèrent choisir les mêmes nombres quantiques (phénomène de regroupement ; bunching)

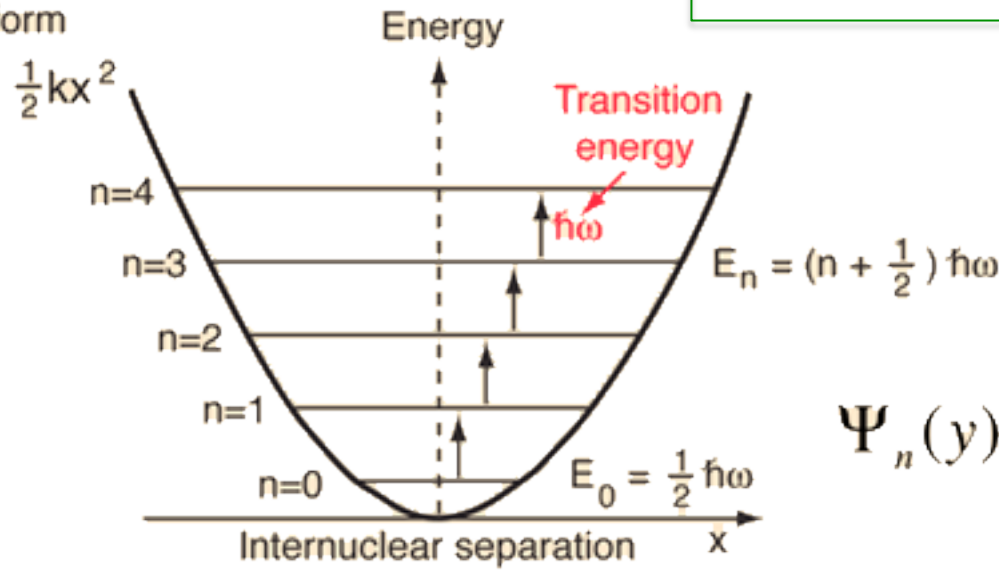
4 He : superfluides 

3 He : fermions 

# Rappel : approximation harmonique

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \Psi(x) = E \Psi(x)$$

Potential energy of form



$$E_0 = \frac{\hbar \omega}{2}$$

$$\Psi_n(y) = \left( \frac{\alpha}{\pi} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(y) e^{-y^2/2}$$

Etat fondamental dans le piège (Gaussien):

$$\Psi(x) = C e^{-\alpha x^2/2}$$

$$y = \sqrt{\alpha} x$$

$$\alpha = \frac{m \omega}{\hbar}$$

**But de l'exercice: chercher une fonction TEST de cette forme pour des potentiels Gaussiens**

# Rappel PC05 PHY311

$$\frac{1}{2} \left( X^2 - \frac{d^2}{dX^2} \right) \phi(X) = \epsilon(X)$$

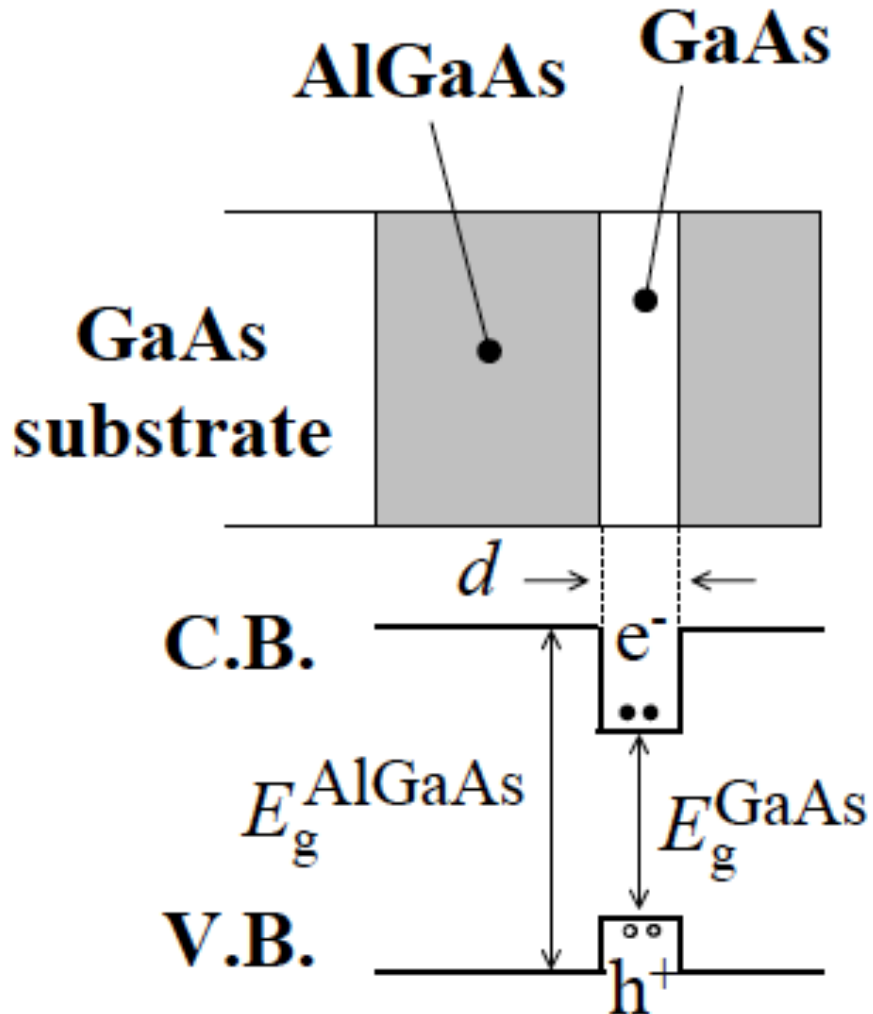
où  $\epsilon = E/(\hbar\omega)$ ,  $X = x/\sqrt{q}$  et  $q = \hbar/(m\omega)$ . Les solutions sont les polynômes d'Hermite :  $c_n \exp(-X^2/2)H_n(X)$ .

PC08 PHY430 Exercice 1, nous trouvons pour le potentiel Gaussien avec la Méthode variationnelle

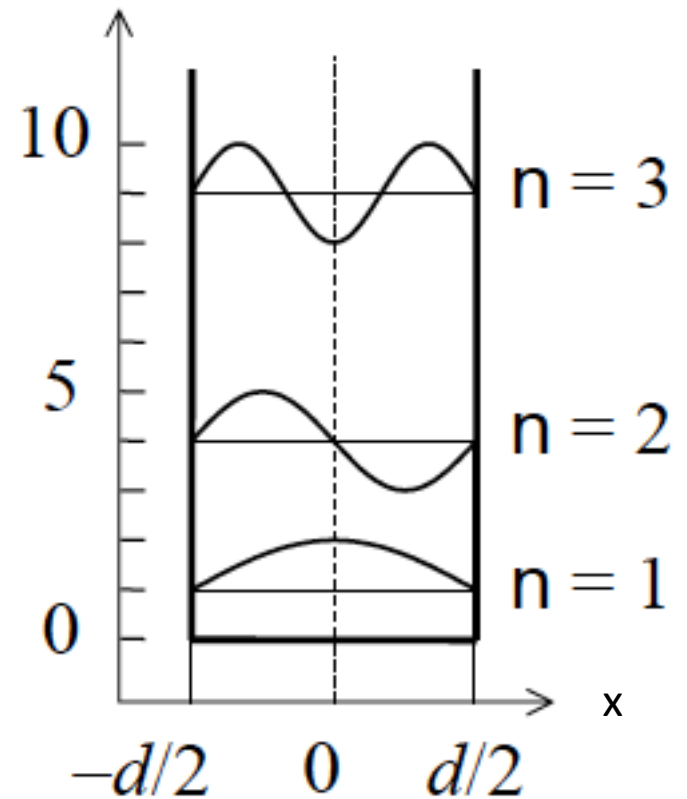
$$\left( -\frac{1}{2} \frac{d^2}{d\xi^2} - v_0 e^{-\xi^2} \right) \psi = \epsilon \psi$$

Si  $E$  est petit ( $E_0$ ), la fonction d'onde est très confinée autour de  $\xi = 0$ . L'analogie avec l'oscillateur Harmonique est donc  $X^2 = v_0 \xi^2$  (l'énergie est shiftée de  $-v_0$  en unités de  $\hbar\omega$ )

# Puits Quantiques: Semi-Conducteurs (PC08 PHY430)

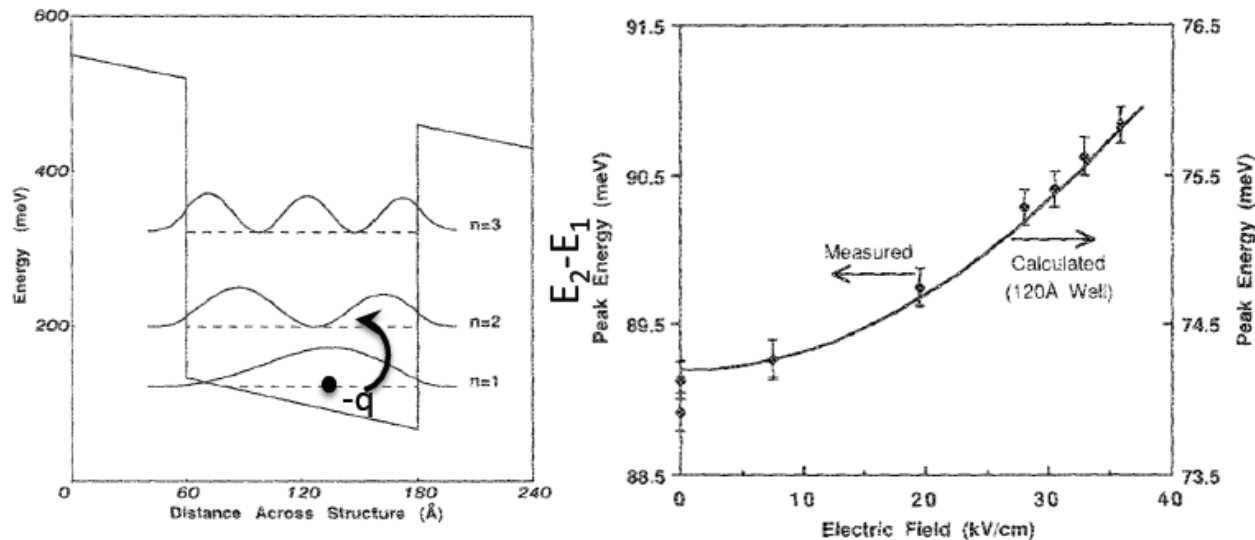


Puits Rectangulaire: exemple PHY311  
Deuxième exercice



Discuter dopage, texte : premier exercice

# Rappel: Puits quantique PC03 PHY430



Livre:  
Champ  
Magnétique  
NH3

On s'intéresse à une expérience publiée dans Applied Physics Letter 50, 685 (1987) mettant en évidence l'effet d'un champ électrique sur les niveaux d'énergie d'un électron dans un puits quantique. La figure de gauche illustre la structure étudiée : un puits quantique de GaAs/AlGaAs de 12 nm d'épaisseur. La variation des niveaux d'énergie est étudiée en fonction d'un champ électrique appliqué sur la structure, en effectuant une mesure d'absorption de lumière entre les niveaux 1 et 2. La figure de droite montre l'énergie  $E_2 - E_1$  mesurée en fonction du champ électrique appliqué  $\mathcal{E}$ . Le potentiel d'interaction entre le champ électrique et l'électron est  $\mathcal{W} = q\mathcal{E}z$  avec  $q > 0$ .

# Perturbations: exemple

On considère un puits quantique infini entre  $[-L/2, L/2]$ .

$E_n = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2$  avec  $m^*$  masse effective introduite en amphi 2.

$\psi_n(z) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cos \frac{n\pi z}{L}$  si  $n$  impair,  $\psi_n(z) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi z}{L}$  si  $n$  pair,

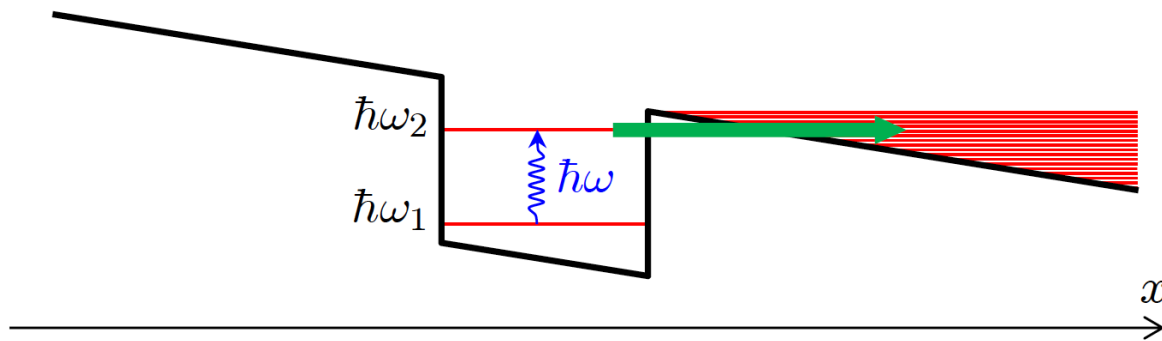
- Pas de correction à l'ordre 1 à cause de la parité de la fonction d'onde

$$E_1^{(1)} = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \cos^2 \left( \frac{n\pi z}{L} \right) q\mathcal{E}z \, dz = 0$$

$$E_2^{(1)} = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \sin^2 \left( \frac{n\pi z}{L} \right) q\mathcal{E}z \, dz = 0$$

$$E_1^{(2)} = \sum_{k \neq 1} \frac{|\langle k | -q\mathcal{E}z | 1 \rangle|^2}{E_1 - E_k} \approx \frac{|\langle 2 | -q\mathcal{E}z | 1 \rangle|^2}{E_1 - E_2} \propto \mathcal{E}^2 = - E_2^{(2)}$$

# Radiation: Infra-Rouge



Deuxième  
exercice

Rappel PC06 (horloge atomique – perturbation AC couplant les deux niveaux)

Notations: introduction

$$|\psi(t=0)\rangle = \gamma_1|1\rangle + \gamma_2|2\rangle$$

Au temps  $t$ , l'évolution des deux états se met sous la forme

$$|\psi(t)\rangle = \gamma_1(t)e^{-i\omega_1 t}|1\rangle + \gamma_2(t)e^{-i\omega_2(t)}|2\rangle$$

Notez qu'en utilisant les transparents précédents, les fréquences  $\omega_1$  et  $\omega_2$  sont modifiées par l'application du champ électrique suivant  $x$ .

Nous repartirons de la PC06,  $\gamma_1(t) = c_1(t) \exp(i(E_1/\hbar)t)$  et  $\gamma_2(t) = c_2(t) \exp(i(E_2/\hbar)t)$ . Cela donne :

$$i \frac{d\gamma_2(t)}{dt} = \frac{\xi E_0}{2\hbar} (e^{-i(\omega-\omega_{21})t} + e^{i(\omega+\omega_{21})t}) \gamma_1(t)$$

avec la condition initiale  $\gamma_1(0) = 1$  et  $\gamma_2(0) = 0$ .  $\xi$  est le paramètre de couplage entre les deux états.

Comme dans la PC06, nous négligerons le terme très oscillant en  $e^{i(\omega+\omega_{21})t}$ .

En suivant le point de vue de la règle d'or de Fermi (ou perturbations dépendant du temps ici), décomposons  $\gamma_1(t)$  et  $\gamma_2(t)$  en puissances de  $E_0$ . A l'ordre 1 en  $E_0$ , nous obtenons alors l'équation

$$i \frac{d\gamma_2^{(1)}(t)}{dt} \approx \frac{\xi E_0}{2\hbar} e^{-i(\omega-\omega_{21})t} \gamma_1^{(0)}(t)$$

A l'ordre zéro en  $E_0$ ,  $\gamma_1^{(0)}(t) = \gamma_1^{(0)}(0) = 1$ . Nous pouvons donc intégrer l'équation pour  $\gamma_2^{(1)}(t)$  et obtenir une solution particulière

$$\gamma_2^{(1)}(t) \approx \frac{1}{\omega - \omega_{21}} \frac{\xi E_0}{2\hbar} e^{-i(\omega-\omega_{21})t}$$

L'un des buts de l'exercice est d'appliquer la théorie des perturbations dépendant du temps et de comprendre la rôle du paramètre  $\Gamma_2$  dans le problème.

PC08, Phys 430 - Mécanique Quantique  
 Karyn Le Hur, karyn.le-hur@polytechnique.edu  
 Groupes 03 et 10

**Puits Quantiques: Méthode Variationnelle et Perturbations**

Le Mardi 20 Octobre 2015

Un puits quantique peut être fabriqué par l'empilement successif de couches planes de différents matériaux semiconducteurs. On ne s'intéressera pas ici au mouvement des électrons dans le plan des couches et on considèrera donc uniquement le mouvement selon l'axe  $x$ , perpendiculaire au plan des couches. En utilisant des alliages de différents semiconducteurs comme par exemple  $\text{Ga}_\eta\text{Al}_{1-\eta}\text{As}$  avec  $\eta \in [0, 1]$ , il est possible de fabriquer des puits de potentiel de forme quasi-arbitraire.

Dans les deux exercices, on utilisera pour l'électron la **masse effective** de GaAs,  $m = 0.07 m_0$  (DM1), où  $m_0$  est la masse de l'électron dans le vide. Le premier exercice porte sur le cas d'un puits de forme gaussienne, et le second sur la détection de rayonnement infrarouge à l'aide d'un puits de forme rectangulaire.

## 1 Puits quantique Gaussien (1 heure)

On suppose que l'énergie potentielle, de forme gaussienne, s'écrit  $V(x) = -V_0 \exp(-x^2/w^2)$  avec  $V_0 = 0.7$  eV et  $w = 2.15$  nm. On admet que le choix de ces paramètres donne lieu à deux états liés et on rappelle que

$$I_0(\alpha) = \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\alpha x^2) dx = \sqrt{\pi/\alpha}, \quad I_2(\alpha) = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \exp(-\alpha x^2) dx = \sqrt{\pi/4\alpha^3}.$$

1. Discuter la parité de l'état fondamental et du premier état excité.
2. Ecrire l'équation de Schrödinger indépendante du temps en fonctions des variables sans dimension  $\xi = x/w$ ,  $v_0 = mV_0w^2/\hbar^2$  et  $\epsilon = mEw^2/\hbar^2$ .
3. On utilise la *méthode variationnelle* à l'aide de la fonction d'essai

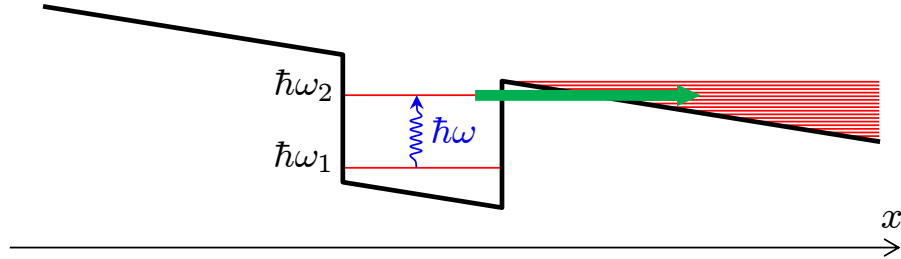
$$\psi_\alpha(\xi) = (2\alpha/\pi)^{1/4} \exp(-\alpha\xi^2).$$

Vérifier que cette fonction est normée et établir la condition vérifiée par  $\alpha$  pour minimiser l'énergie.

4. En déduire qu'il existe toujours au moins un état lié.
5. A l'aide des valeurs numériques de  $V_0$  et  $w$  données dans l'énoncé, nous obtenons  $v_0 = 3$ . Vérifier que dans ce cas la valeur  $\alpha = 0.87$  est la valeur optimale recherchée. Comparer l'énergie obtenue avec la solution numérique exacte,  $\epsilon_0 = -1.96$ .
6. Comment la méthode variationnelle peut-elle être employée pour estimer l'énergie du premier état excité?
7. Si on utilise comme fonction d'essai la fonction normée  $\varphi_\beta(\xi) = (2^5\beta^3/\pi)^{1/4}\xi \exp(-\beta\xi^2)$ , la minimisation de l'énergie donne  $\beta = 0.54$  et  $\epsilon(\beta) = -0.31$ , ce qui est proche de la valeur exacte calculée numériquement,  $\epsilon_1 = -0.37$ . Expliquer pour quelle raison cette valeur est moins proche du résultat exact que pour l'état fondamental.

## 2 Photodétecteur infrarouge à puits quantique (1 heure)

Un photodétecteur est un dispositif permettant de convertir un flux lumineux en courant électrique. On s'intéresse ici à un détecteur infrarouge à puits quantique (QWIP, pour Quantum Well Infrared Photodetector), qui exploite la transition induite optiquement entre les niveaux  $n = 1$  et  $n = 2$  d'un puits quantique placé dans un champ électrique statique. Une fois passés dans l'état excité  $n = 2$ , les électrons sortent du puits par effet tunnel pour contribuer au courant de photodétection.



On s'intéresse à la projection de l'état du système  $|\psi(t)\rangle$  sur l'état  $n = 2$ , que l'on écrira selon l'expression  $\langle 2|\psi(t)\rangle = \gamma_2(t) \exp(-i\omega_2 t)$ . Le dispositif est soumis à un faisceau lumineux associé au champ électrique  $E(t) = E_0 \cos \omega t$  polarisé selon l'axe  $x$ , de fréquence  $\omega$  proche de  $\omega_{21} = \omega_2 - \omega_1$ . On écrit l'équation d'évolution de  $\gamma_2(t)$  selon la relation

$$\frac{d\gamma_2(t)}{dt} = i\Omega_0 e^{i(\omega_{21} - \omega)t} - \frac{\Gamma_2}{2} \gamma_2(t), \quad (1)$$

où le terme en  $\Gamma_2$  a été introduit de manière phénoménologique.

1. On s'intéresse dans un premier temps au cas où  $\Omega_0 = 0$ . Quelle serait alors l'évolution en fonction du temps de  $\gamma_2(t)$ ? Quelle serait l'évolution de la population dans l'état  $n = 2$ ? Quelle est l'origine physique du terme en  $\Gamma_2$  ?
2. Comment se compare  $\Gamma_2$  au terme équivalent  $\Gamma_1$  que l'on aurait pour le niveau  $n = 1$  ?
3. On suppose que le système est initialement dans l'état  $|1\rangle$ . A l'aide de la méthode des perturbations dépendant du temps, justifier la forme du premier terme du membre de droite de l'Eq. (1). Donner l'expression de  $\Omega_0$ . Voir aussi note 1 plus bas.
4. En écrivant  $\gamma_2(t) = \beta_2 \exp(i(\omega_{21} - \omega)t)$ , trouver une solution particulière de (1).
5. La solution générale est

$$\gamma_2(t) = \frac{\Omega_0 e^{i(\omega_{21} - \omega)t}}{(\omega_{21} - \omega) - i\frac{\Gamma_2}{2}} + A \exp(-\Gamma_2 t/2).$$

Le second terme, qui tend exponentiellement vers zéro, peut être négligé en régime permanent. Calculer  $\langle 2|\psi(t)\rangle$  en régime forcé.

6. En déduire l'expression du photocourant en fonction de la fréquence  $\omega$ .
7. Interpréter ce résultat à l'aide de la relation d'incertitude temps-énergie.
8. Comment pourrait-on faire pour augmenter la largeur de la bande spectrale de sensibilité du photodétecteur?

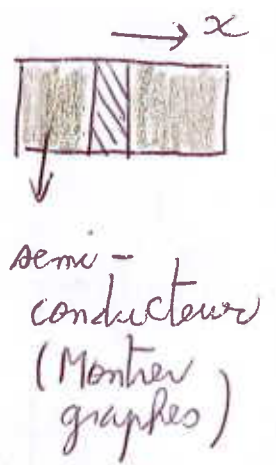
**Note:** Un ordre de grandeur de la largeur  $L$  du puits quantique pour que ce dispositif soit sensible à un rayonnement de longueur d'onde  $\lambda = 5\mu\text{m}$  peut être estimé. On peut utiliser les niveaux d'énergie du puits infini, ce qui donne

$$3 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_{\text{eff}} L^2} = \frac{hc}{\lambda}$$

soit

$$L = \sqrt{\frac{3h\lambda}{8m_{\text{eff}}c}} = \sqrt{\frac{3 \times 6.63 \cdot 10^{-34} \times 5 \cdot 10^{-6}}{8 \times 0.07 \times 9.1 \cdot 10^{-31} \times 3 \cdot 10^8}} \approx 8 \text{ nm.}$$

# PC08 Puits Quantique



Electrons soumis à une force confinante  
 → gaps différents dans les différentes couches

$$V(x) = -V_0 \exp(-x^2/w^2)$$

1)  $V(\hat{x})$  invariant sous l'opération de la parité

$$\hat{H} \hat{\Pi} |\psi\rangle = \hat{\Pi} \hat{H} |\psi\rangle = E \hat{\Pi} |\psi\rangle$$

$\hat{\Pi} |\psi\rangle$  est un état propre de  $\hat{H}$ .

$$\hat{\Pi} |\psi\rangle = e^{i\phi} |\psi\rangle$$

$$\hat{\Pi}^2 = \hat{1}$$

PAIR (pas de noeud)  
 IMPAIR (1 noeud)

$$e^{i\phi} = \pm 1$$

état fondamental  
 1<sup>er</sup> état excité

2) nous introduisons les dimensions réduites

$$\xi = \frac{x}{w}$$

$$v_0 = mV_0w^2/\hbar^2$$

$$E = mEw^2/\hbar^2$$

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - V_0 \exp(-x^2/w^2) \right) \psi = E \psi$$

multiplions par  $(m w^2 / \hbar^2)$

$$\left( -\frac{w^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - v_0 \exp(-x^2/w^2) \right) \psi = E \psi$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} = \frac{d^2}{dx^2}$$

$$\text{Soit } \left( -\frac{1}{2} \frac{d^2}{d\xi^2} - v_0 e^{-\xi^2} \right) \psi = E \psi$$

3) MÉTHODE variationnelle (fonction essai qui respecte la parité)

$$\psi_\alpha(\xi) = \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{1/4} \exp(-\alpha \xi^2)$$

Vérifions que cette fonction est normée.

$$\langle \psi_\alpha | \psi_\alpha \rangle = \sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-2\alpha \xi^2) d\xi$$

$$= \sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}} I_0(2\alpha) = 1$$

Nous avons 2 termes dans l'hamiltonien

$$E(\alpha) = (E_{\text{cinétique}} + E_{\text{potentielle}})$$

$$\langle E_c \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_\alpha^*(x) \left( -\frac{1}{2} \frac{d^2 \psi_\alpha}{d\xi^2} \right) d\xi$$

Nous pouvons intégrer par parties (pour des fonctions  $\psi_\alpha$  dans  $L^2(\mathbb{R})$ )

$$\langle E_c \rangle = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \left| \frac{d\psi_\alpha}{d\xi} \right|^2 d\xi$$

D'un autre côté, nous voyons immédiatement le lien avec le calcul de

$$\begin{aligned} \langle \psi | \hat{p}^2 | \psi \rangle &= \langle \psi | \hat{p} \hat{p} | \psi \rangle \\ &= \| \hat{p} | \psi \rangle \|^2 \end{aligned}$$

$$\frac{d\psi_\alpha}{d\xi} = -2\alpha \xi \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{1/4} \exp(-\alpha \xi^2)$$

$$\left|\frac{d\psi_\alpha}{d\xi}\right|^2 = 4\alpha^2 \xi^2 \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{1/2} \exp(-2\alpha \xi^2)$$

Nous obtenons alors

$$\langle E_c \rangle = \frac{1}{2} \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} 4\alpha^2 \xi^2 e^{-2\alpha \xi^2} d\xi$$

$$= 2\alpha^2 \sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \xi^2 e^{-2\alpha \xi^2} d\xi$$

$$= 2\alpha^2 \sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}} I_2(2\alpha) = \frac{\alpha}{2}$$

de la même manière, pour le terme d'énergie potentielle

$$\langle E_v \rangle = -v_0 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2} |\psi_\alpha(\xi)|^2 d\xi$$

$$= -v_0 \sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}} I_0(2\alpha+1) = -v_0 \sqrt{\frac{2\alpha}{2\alpha+1}}$$

Méthode variationnelle

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} (\langle E_c \rangle + \langle E_v \rangle) = 0 \Rightarrow \frac{1}{2} - v_0 \left(\frac{2}{2}\right)^{-\frac{1}{2}} \frac{1}{\sqrt{2\alpha+1}} + (2\alpha)^{1/2} \left(-\frac{2}{2}\right) (2\alpha+1)^{-\frac{1}{2}}$$

$$\text{Soit } \frac{1}{2} - v_0 2 \left( \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{2\alpha}} \frac{1}{\sqrt{2\alpha+1}} - \frac{1}{2} (2\alpha)^{1/2} \frac{1}{(2\alpha+1)^{3/2}} \right)$$

$$= 0$$

$$\frac{1}{2} - v_0 2 \left[ \frac{1}{2(2\alpha+1)^{3/2}} \left[ -(2\alpha)^{1/2} + \frac{(2\alpha+1)}{\sqrt{2\alpha}} \right] \right] = 0$$

$$\frac{1}{2} - \frac{v_0 2}{2(2\alpha+1)^{3/2}} \left[ \frac{-2\alpha+2\alpha+1}{\sqrt{2\alpha}} \right] = 0$$

$$\text{Soit } \frac{1}{2} - \frac{v_0 2}{2} \sqrt{\frac{1}{2\alpha(2\alpha+1)^3}} = 0$$

$$\frac{v_0^2}{2\alpha(2\alpha+1)^3} = \frac{1}{4}$$

Faire attention aux calculs.

$$2v_0^2 = \alpha(2\alpha+1)^3$$

4) La fonction  $\alpha(2\alpha+1)^3$  est une fonction monotone dans  $\mathbb{R}_+$ . Solution unique.

$$E(\alpha) = \frac{\alpha}{2} - v_0 \sqrt{\frac{2\alpha}{2\alpha+1}}$$

$$v_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \alpha(2\alpha+1)^3 \right)^{1/2}$$

$$E(\alpha) = \frac{\alpha}{2} - \alpha(2\alpha+1) = -\frac{\alpha(4\alpha+1)}{2}$$

$E(\alpha) < 0$  il existe au moins 1 état  $\alpha$  lié

$$\alpha > 0 \\ E(\alpha) < 0$$

5)  $\begin{cases} \alpha = 0.87 \\ \text{Nous remarquons } v_0^2 \text{ de l'ordre de } 8,95 \\ v_0 \text{ est proche de } 3 \text{ (valeur énoncée)} \end{cases}$

$$E(\alpha) \approx \frac{0.87}{2} - v_0 \sqrt{\frac{2\alpha}{2\alpha+1}} \approx 0.435 - 3 \times 0,7937 \approx -1.944 \approx -1.95$$

L'énergie est très proche de la valeur exacte  $E_0 = -1.96$

6) Nous pourrions essayer une fonction test IMPAIRE, bien choisie.

7) Les deux fonctions d'essai utilisées correspondent aux solutions  $m=0$  et  $m=1$  d'un oscillateur harmonique. Dans notre cas le potentiel est  $V(x) = -V_0 \exp(-x^2/w^2)$ . Plus l'énergie du niveau est grande et plus les corrections au potentiel quadratique sont importantes.

2) Photo-détecteur infra-rouge à puits quantique

1) si  $\Omega_0 = 0$   $\frac{d\gamma_2}{dt} = -\frac{\Gamma_2}{2} \gamma_2(t)$

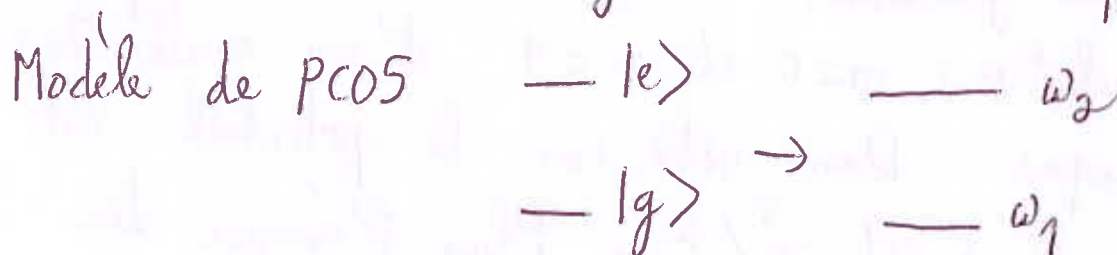
$$\gamma_2(t) = \gamma_2(0) \exp(-\Gamma_2 t/2)$$

$$|\langle 2 | \psi(t) \rangle|^2 = |\gamma_2(t)|^2 \\ = |\gamma_2(0)|^2 \exp(-\Gamma_2 t)$$

La population du niveau 2 décroît exponentiellement dû au couplage avec le réservoir (continuum d'états à droite).  $(\Gamma_2 t)$  probabilité de sauter à DROITE en temps  $t$

2) On peut négliger le couplage tunnel du niveau 1 avec le réservoir de droite donc  $\Gamma_1^{-1} \gg \Gamma_2^{-1}$   
 $\Gamma_1 \rightarrow 0$

3) Interaction de type dipolaire  
 Perturbation de la forme  $\hat{W}(t) = -q \hat{x} E_0 \cos(\omega t)$



$$\hat{x} = \hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \text{ base } \{|1\rangle, |2\rangle\}$$

Perturbations dépendant du temps (Amphi 08)

$$i\hbar \dot{\gamma}_2^{(1)}(t) = \sum_n \gamma_n^{(0)}(t) e^{i\omega_{2n}t} \langle 2 | \hat{W}(t) | n \rangle$$

formule générale

Ici, sommation triviale : 1 seul niveau  $|1\rangle$ .

Nous obtenons

$$i\hbar \dot{\chi}_2^{(1)}(t) = -qE_0 \frac{\langle 2 | \hat{\sigma}_x | 1 \rangle}{2} \left( e^{i(\omega_{21} - \omega)t} + O\left(e^{i(\omega_2 + \omega)t}\right) \right)$$

Approximation onde tournante

$$R_0 = \frac{qE_0}{2\hbar} \langle 2 | \hat{\sigma}_x | 1 \rangle$$

4) Soit  $\chi_2(t) = \beta_2 \cdot \exp(i(\omega_{21} - \omega)t)$  (solution particulière)

$$\frac{d\chi_2(t)}{dt} = iR_0 e^{i(\omega_{21} - \omega)t} - \frac{\Gamma_2}{2} \chi_2(t)$$

cela donne :

$$\begin{aligned} \frac{d\chi_2}{dt} &= i(\omega_{21} - \omega) \beta_2 e^{i(\omega_{21} - \omega)t} \\ &= iR_0 e^{i(\omega_{21} - \omega)t} - \frac{\Gamma_2}{2} \beta_2 e^{i(\omega_{21} - \omega)t} \end{aligned}$$

Cette hypothèse donne :

$$\beta_2 = \frac{R_0}{(\omega_{21} - \omega) - i\frac{\Gamma_2}{2}}$$

5) Le second terme peut être négligé (régime forcé)

$$\langle 2 | \psi(t) \rangle = \chi_2(t) \exp(-i\omega_2 t)$$

$$= \frac{\Omega_0 \exp(-i\omega t) \exp(-i\omega_1 t)}{(\omega_{21} - \omega) - i\frac{\Gamma_2}{2}}$$

$$\frac{\Omega_0 \exp(-i\omega t) \exp(-i\omega_1 t)}{(\omega_{21} - \omega) - i\frac{\Gamma_2}{2}}$$

$$6) I = q |\chi_2(t)|^2 \Gamma_2 = \frac{dQ}{dt}$$

$\frac{dQ}{dt} = |\chi_2(t)|^2 \Gamma_2 dt$  probabilité qu'un électron sorte  
par effet tunnel pendant le temps  $dt$

$$I = q \Gamma_2 \frac{\Omega_0^2}{(\omega_{21} - \omega)^2 + \frac{\Gamma_2^2}{4}}$$

7) incertitude sur énergie du photon,  $\Delta E \approx \hbar \Gamma_2$

$\Delta t = 1/\Gamma_2$  temps de vie dans l'état  $n=2$

$$\Delta E \Delta t \approx \hbar$$

8) Il suffit d'augmenter le taux d'effet tunnel  $\Gamma_2$ .