L3-STUE-Géophysique

Module: Mécanique Quantique

Examen, épreuve de janvier 2008, durée 2 h

1 Formalisme de la mécanique quantique

Les deux exercices sont indépendants.

1. Montrer qu'un opérateur arbitraire $\hat{F}$ peut-être mis sous la forme $\hat{F} = \hat{A} + i\hat{B}$, où $\hat{A}$ et $\hat{B}$ sont des opérateurs *hermitiens*. Dans quel cas l'opérateur $\hat{F}^2$ est-il hermitien ?

2. On définit l'opérateur $\hat{F}(\lambda) = e^{\lambda\hat{A}}\hat{B}e^{-\lambda\hat{A}}$ où $\hat{A}$ et $\hat{B}$ sont des opérateurs arbitraires. Calculer $\frac{d\hat{F}}{d\lambda}$ puis $\frac{d^2\hat{F}}{d\lambda^2}$. En utilisant le développement en série de Taylor $\hat{F}(\lambda) = \hat{F}(\lambda_0) + \frac{1}{1!}(\lambda - \lambda_0)\left.\frac{d\hat{F}}{d\lambda}\right|_{\lambda=\lambda_0} + \frac{1}{2!}(\lambda - \lambda_0)^2\left.\frac{d^2\hat{F}}{d\lambda^2}\right|_{\lambda=\lambda_0} + \ldots$ démontrer a relation importante suivante $e^{\hat{A}}\hat{B}e^{-\hat{A}} = \hat{B} + \frac{1}{1!}[\hat{A},\hat{B}] + \frac{1}{2!}[\hat{A}[\hat{A},\hat{B}]] + \ldots.$

2 Interaction quadrupolaire d'un noyau d'hydrogène lourd (deutéron) dans un cristal

On utilisera impérativement les notations de l'énoncé et les résultats devront être formulés obligatoirement en fonction des grandeurs indiquées.

Les trois parties du problème peuvent être traitées de façon indépendante.

Un deutéron, dans un cristal, subit une interaction électrostatique (de type "quadrupolaire") avec le gradient de champ électrique créé par les atomes voisins.

2.1 Symétrie cylindrique sans et avec champ magnétique

Lorsque ce champ électrique possède une symétrie de rotation autour de l'axe Oz, le Hamiltonien du système, en l'absence de champ magnétique ($B = 0$), est

$$\hat{H}_0 = A(3\hat{I}_z^2 - 2\hbar^2\hat{1}), \tag{1}$$

où A est une constante positive, $\hat{1}$ l'opérateur identité et $\hat{I}_z$ l'opérateur représentant la composante z du moment angulaire nucléaire. $\hat{I}_z$ possède trois vecteurs propres, notés $|m>$ (avec $m = 1, -1, 0$) correspondant respectivement aux trois valeurs propres $m\hbar$. Dans tout ce qui suit on disposera toujours ces vecteurs propres dans l'ordre: $|1>, |-1>, |0>$ (cela afin de faciliter l'écriture matricielle).

1) Ecrire la matrice représentant $\hat{H}_0$ dans la base $|m>$.

2) On applique, suivant Oz, un champ magnétique uniforme constant d'intensité B. Le Hamiltonien du deutéron devient

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \gamma B \hat{I}_z, \tag{2}$$

où γ est une constante positive. Ecrire la matrice représentant $\hat{H}$ dans la base $|m>$. On notera E_{+1}, E_{-1} et E_0 les valeurs propres de $\hat{H}$, $|E_{+1}>$, $|E_{-1}>$ et $|E_0>$ les vecteurs propres correspondants. On posera $\hbar\omega_{\pm 1} = E_{\pm 1}$ et $\hbar\omega_0 = E_0$.

3) On suppose qu'à l'instant $t = 0$ le système se trouve dans l'état $|\nu(0)>= a_1|1> + a_0|0>$ (a_1 et a_0 sont deux constantes réelles). Donner l'expression de l'état du système à l'instant t, $|\nu(t)>$.

4) On considère les opérateurs $\hat{I}_+$ et $\hat{I}_-$ définis par leur action sur la base des vecteurs $|m>$:

$$\begin{array}{cc} \hat{I}_+|1>= 0 & \hat{I}_-|1>= \hbar\sqrt{2}|0> \\ \hat{I}_+|-1>= \hbar\sqrt{2}|0> & \hat{I}_-|0>= \hbar\sqrt{2}|-1> \\ \hat{I}_+|0>= \hbar\sqrt{2}|1> & \hat{I}_-|-1>= 0\ . \end{array}$$

Ces opérateurs sont-ils hermitiques ? Montrer que $\hat{I}_+$ et $\hat{I}_-$ sont adjoints l'un de l'autre.

5) On définit les opérateurs

$$\hat{I}_x = (1/2)(\hat{I}_+ + \hat{I}_-) \quad \text{et} \quad \hat{I}_y = (1/2i)(\hat{I}_+ - \hat{I}_-)\ . \tag{3}$$

Calculer les valeurs moyennes, à l'instant t, $< I_x > (t) \equiv < \nu(t)|\hat{I}_x|\nu(t) >$ et $< I_y > (t) \equiv < \nu(t)|\hat{I}_y|\nu(t) >$ lorsque le système est dans l'état $|\nu(t)>$ défini à la question 3). Que peut-on dire, sans calcul, de l'évolution de la valeur moyenne de $\hat{I}_z$?

6) Montrer que le vecteur $\vec{I}$, de l'espace ordinaire à trois dimensions, de composantes $(< I_x > (t), < I_y > (t), < I_z > (t))$ garde au cours du temps une longueur constante (que l'on exprimera en fonction de a_1), fait un angle constant α avec l'axe Oz (on en calculera la tangente en fonction de a_1) et tourne autour de Oz avec une vitesse angulaire constante que l'on calculera en fonction de A, B et γ.

2.2 Sans symétrie et sans champ magnétique

On suppose à présent que le champ électrique du cristal ne possède pas de symétrie de révolution suivant Oz. En l'absence de champ magnétique ($B = 0$), le Hamiltonien du deutéron s'écrit:

$$\hat{H}'_0 = \hat{H}_0 + (A\eta/2)(\hat{I}_+^2 + \hat{I}_-^2), \tag{4}$$

où η est une constante telle que $0 \leq \eta \leq 1$.

1) Ecrire la matrice représentant $\hat{H}'_0$ dans la base des vecteurs propres $|m>$ de $\hat{I}_z$, toujours rangés dans l'ordre indiqué plus haut. Calculer en fonction de A, η et $\hbar$ les valeurs propres de $\hat{H}'_0$, que l'on notera $E'_+ = \hbar\omega'_+$, $E'_- = \hbar\omega'_-$ et

$E'_0 = \hbar\omega'_0$ avec $E'_+ > E'_- > E'_0$. Exprimer les vecteurs propres correspondants dans la base $|m>$.

2) En supposant toujours qu'à l'instant $t = 0$, le système se trouve dans l'état $|\nu(0)>= a_1|1> +a_0|0>$, calculer le vecteur d'état $|\nu(t)>$ du système à l'instant t, dans la base $|m>$. Calculer également les valeurs moyennes des opérateurs $\hat{I}_x$, $\hat{I}_y$ et $\hat{I}_z$ lorsque le système est dans l'état $|\nu(t)>$, en fonction de A, $\hbar$, a_1, t et η.

2.3 Sans symétrie et avec champ magnétique

On applique maintenant un champ magnétique uniforme et constant B le long de Oz. Le Hamiltonien devient:

$$\hat{H}' = \hat{H}'_0 - \gamma B\hat{I}_z \tag{5}$$

1) Ecrire la matrice représentant $\hat{H}'$ dans la base des vecteurs propres de $\hat{H}'_0$, rangés dans l'ordre $|E'_+>$, $|E'_->$, $|E'_0>$. Calculer les valeurs propres de $\hat{H}'$, notées E'_1 E'_2 E'_3 (dans l'ordre $E'_1 > E'_2 > E'_3$), en fonction de A, B, η, γ et $\hbar$.

2) Tracer les courbes de variation de ces valeurs propres en fonction du paramètre $\gamma\hbar B$. Déterminer les limites des vecteurs propres et valeurs propres de $\hat{H}'$ dans les deux cas: (i) $\gamma B/\eta A\hbar \to 0$; (ii) $\gamma B/\eta A\hbar \to \infty$.

3) Montrer qu'il existe une valeur B_0 de B pour laquelle l'une des valeurs propres de $\hat{H}'$ est dégénérée. Calculer B_0 en fonction de A, γ, $\hbar$ et η, ainsi que les valeurs propres et les vecteurs propres de $\hat{H}'$ dans ce cas. Montrer que pour $\eta \to 0$ on retrouve des résultats cohérents.

4) Application numérique: Pour un cristal ferroélectrique de $NaD_3(SeO_3)_2$, on trouve pour l'un des sites à température ordinaire: $\omega'_+ - \omega'_-$ =34.56 KHz et $B_0 = 23.6$ Gauss. Sachant que $\gamma = 4.10^7$ Hz/tesla et que 1 tesla=10^4 Gauss, calculer $A\hbar$ et η.