

LA MÉCANIQUE QUANTIQUE
PROBLÈMES RÉSOLUS
TOME 1

Victor Mikhailovich GALITSKY
Boris Mikhailovich KARNAKOV
Vladimir Il'yich KOGAN



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

Grenoble Sciences

Grenoble Sciences poursuit un triple objectif :

- réaliser des ouvrages correspondant à un projet clairement défini, sans contrainte de mode ou de programme,
- garantir les qualités scientifique et pédagogique des ouvrages retenus,
- proposer des ouvrages à un prix accessible au public le plus large possible.

Chaque projet est sélectionné au niveau de Grenoble Sciences avec le concours de referees anonymes. Puis les auteurs travaillent pendant une année (en moyenne) avec les membres d'un comité de lecture interactif, dont les noms apparaissent au début de l'ouvrage. Celui-ci est ensuite publié chez l'éditeur le plus adapté.

(Contact : Tél. : (33)4 76 51 46 95 - E-mail : Grenoble.Sciences@ujf-grenoble.fr)

Deux collections existent chez EDP Sciences :

- la *Collection Grenoble Sciences*, connue pour son originalité de projets et sa qualité
- *Grenoble Sciences - Rencontres Scientifiques*, collection présentant des thèmes de recherche d'actualité, traités par des scientifiques de premier plan issus de disciplines différentes.

Directeur scientifique de Grenoble Sciences

Jean BORNAREL, Professeur à l'Université Joseph Fourier, Grenoble 1

Traduction et Comité de lecture pour "La mécanique quantique"

Cet ouvrage est le fruit de la coopération établie entre les éditions MIR et Grenoble Sciences. La version française a été améliorée et remaniée par Laurent DEROME et Konstantin PROTASSOV, Maîtres de conférences à l'Université Joseph Fourier (UJF), avec les suggestions et relectures d'Elie BELORIZKY et Jean-Jacques BENAYOUN, Professeurs à l'UJF.

Grenoble Sciences reçoit le soutien
du **Ministère de l'Éducation nationale**, du **Ministère de la Recherche**,
de la **Région Rhône-Alpes**, du **Conseil général de l'Isère**
et de la **Ville de Grenoble**.

Illustration de couverture : **Alice GIRAUD**

ISBN 2-86883-585-6

© EDP Sciences, 2002

EXTRAITS

1.3 ÉLÉMENTS DE THÉORIE DES REPRÉSENTATIONS. TRANSFORMATIONS UNITAIRES

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

d'un opérateur arbitraire \widehat{f} :

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

Comparer les résultats obtenus.

$$1.41. \Psi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0), \quad \Psi_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{r}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \exp(i\mathbf{p}_0 \cdot \mathbf{r}/\hbar),$$

$$\Phi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \exp(-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}_0/\hbar), \quad \Phi_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{p}) = \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}_0).$$

$$1.42. \Phi(p) = \sqrt{a^2/\hbar} C \exp\left[-\frac{i(p-p_0)x_0}{\hbar} - \frac{(p-p_0)^2 a^2}{2\hbar^2}\right].$$

1.43. La probabilité cherchée vaut

$$w = \int_{z_1}^{z_2} \int_{p_1}^{p_2} \int_{-\infty}^{\infty} |F(x, p_y, z)|^2 dx dp_y dz,$$

où

$$F(x, p_y, z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int e^{-\frac{ip_y y}{\hbar}} \Psi(x, y, z) dy,$$

la fonction $\Psi(x, y, z)$ étant supposée normée à l'unité.

1.44. Multiplions les deux membres de la relation $\hat{R}\Psi(x) = \Psi(-x)$ à gauche par $\Psi_p^*(x)$ et intégrons. Compte tenu de la relation $\Psi_p(x) = \Psi_{-p}(-x)$, on obtient

$$\hat{R}\Phi(p) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_p^*(x) \hat{R}\Psi(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_{-p}^*(-x) \Psi(-x) dx = \Phi(-p),$$

c'est-à-dire $\hat{R}\Phi(p) = \Phi(-p)$.

Il est facile de trouver la forme de l'opérateur translation $\hat{T}_a\Psi(x) = \Psi(x+a)$ en représentation \mathbf{p} : on le représente sous la forme $\hat{T}_a = \exp(a\frac{d}{dx}) = \exp(iap/\hbar)$ (voir le problème 1.12 b). Etant donné qu'en représentation \mathbf{p} , $\hat{p} = p$, on a $\hat{T}_a = \exp(iap/\hbar)$.

1.45. De la condition $\Psi(\mathbf{r}) = R\Psi(-\mathbf{r})$, où $R = \pm 1$ est la parité d'état, on obtient

$$\begin{aligned} \Phi(\mathbf{p}) &= \int \Psi_{\mathbf{p}}^*(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}) dV = R \int \Psi_{\mathbf{p}}^*(\mathbf{r}) \Psi(-\mathbf{r}) dV \\ &= R \int \Psi_{-\mathbf{p}}^*(-\mathbf{r}) \Psi(-\mathbf{r}) dV = R\Phi(-\mathbf{p}), \end{aligned} \quad (1)$$

(dans la transformation (1) on a tenu compte de la propriété $\Psi_p(\mathbf{r}) = \Psi_{-p}(-\mathbf{r})$).

1.46. Par définition (voir problème 1.15), on a :

$$\tilde{\Psi}(x) \equiv \hat{L}\Psi(x) = \int L(x, x') \Psi(x') dx'. \quad (1)$$

Substituons dans (1)

$$\Psi(x') = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \Phi(p') \exp\left(\frac{ip'x'}{\hbar}\right) dp',$$

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

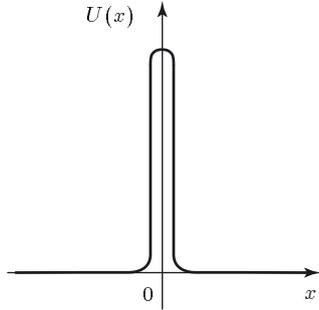


Figure 11

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

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

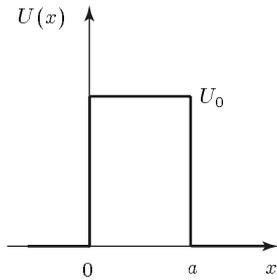


Figure 12

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

Discuter les cas particuliers suivants :

- a) $E \rightarrow \infty$ (de fait $E \gg U_0$) ;
- b) barrière de faible transparence $(U_0 - E)ma^2/\hbar^2 \gg 1$;
- c) $E \rightarrow 0$ (de fait $E \ll ma^2U_0^2/\hbar^2$ et $E \ll U_0$) ;
- d) $ma^2U_0/\hbar^2 \ll 1$ et $ma^2E/\hbar^2 \ll 1$.

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

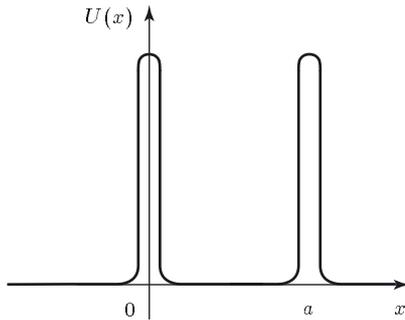


Figure 13

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

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

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

Les coefficients de réflexion $R = |A|^2$ et de transmission $D = k'|B|^2/k$:

$$R(E) = \left(\frac{\sqrt{E} - \sqrt{E - U_0}}{\sqrt{E} + \sqrt{E - U_0}} \right)^2, \quad D(E) = \frac{4\sqrt{E(E - U_0)}}{(\sqrt{E} + \sqrt{E - U_0})^2}. \quad (3)$$

et on a, comme attendu, la relation $R(E) + D(E) = 1$.

Cas limites :

$$\begin{aligned} R(E) &\approx U_0^2/16E^2 \rightarrow 0, & \text{pour } E \rightarrow \infty, \\ D(E) &\approx 4\sqrt{(E - U_0)}/U_0 \rightarrow 0, & \text{pour } E \rightarrow U_0. \end{aligned}$$

2.47. On suppose ici que les particules incidentes viennent de la gauche ($x < 0$). La solution de l'équation de Schrödinger décrivant la réflexion de ces particules est de la forme

$$\Psi_k(x) = \begin{cases} e^{ikx} + A(k)e^{-ikx}, & x < 0 \\ B(k)e^{ikx}, & x > 0. \end{cases} \quad (k = \sqrt{2mE/\hbar^2} > 0), \quad (1)$$

Les conditions de raccordement de la fonction d'onde (1) au point $x = 0$ (voir les relations (2) du problème 2.10) donnent

$$1 + A = B, \quad ik(B - 1 + A) = 2m\alpha B/\hbar^2; \quad (2)$$

$$A(k) = \frac{m\alpha}{ik\hbar^2 - m\alpha}, \quad B(k) = \frac{ik\hbar^2}{ik\hbar^2 - m\alpha}.$$

Les coefficients de réflexion $R(E) = |A|^2$ et de transmission $D(E) = |B|^2$ possèdent la propriété $R + D = 1$, de plus

$$\begin{aligned} R(E) &\approx m\alpha^2/2E\hbar^2 \rightarrow 0, & \text{pour } E \rightarrow \infty, \\ D(E) &\approx 2E\hbar^2/m\alpha^2 \rightarrow 0, & \text{pour } E \rightarrow 0. \end{aligned}$$

Comme dans les relations (2), $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$, les fonctions $A(E)$ et $B(E)$ sont des fonctions analytiques de la variable complexe E qui possèdent les points singuliers suivants :

- a) les points $E = 0$ et $E = \infty$ sont des points de branchement ;
- b) un pôle au point E_0 est défini par la condition $i\sqrt{2mE_0} = m\alpha/\hbar$.

Comme les fonctions $A(E)$ et $B(E)$ possèdent des points de branchement, elles constituent des fonctions multiformes (dans le problème concerné, à deux feuillets). Pour la définition univoque des fonctions $A(E)$ et $B(E)$ dans le plan de la variable complexe E , faisons dans ce plan une coupure suivant le demi-axe réel $E > 0$ (fig. 20) et définissons le *feuillet physique* par la condition suivant laquelle pour les points du plan E , adjoints directement au "bord" supérieur de la coupure (les points de type 1 sur la figure), la phase du nombre E est nulle (le feuillet physique est l'un des feuillets de la surface de Riemann des fonctions multiformes). Ainsi pour des valeurs

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

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

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

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

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

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

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

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

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

En posant dans (1) $\rho = a = \text{const}$, on obtient l'hamiltonien d'un rotateur plan dans un champ magnétique ($I = \mu a^2$) :

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2I} \frac{d^2}{d\varphi^2} + \frac{i\epsilon\hbar B}{2\mu c} \frac{d}{d\varphi} + \frac{\epsilon^2 B^2 I}{8\mu^2 c^2}.$$

Il est évident que les fonctions propres de l'opérateur $\hat{l}_z = -i\partial/\partial\varphi$ sont fonctions propres de l'hamiltonien ; elles sont donc de la forme

$$\begin{aligned} \Psi_m &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \\ E_m &= \frac{\hbar^2 m^2}{2I} - \frac{\epsilon\hbar B m}{2\mu c} + \frac{\epsilon^2 B^2 I}{8\mu^2 c^2} \end{aligned} \quad (2)$$

L'expression (2) montre que le champ peut être omis car c'est une grandeur constante indépendante de l'état du rotateur. D'après (2), le champ magnétique lève la double dégénérescence des niveaux d'énergie excités du rotateur libre.

L'interprétation de l'expression (2) de E_m est évidente : dans l'état décrit par la fonction d'onde Ψ_m le rotateur possède un moment magnétique \mathcal{M} dont la composante selon z est $\frac{e\hbar m}{2\mu c}$; ainsi l'énergie d'interaction avec le champ magnétique vaut

$$-\mathcal{M} \cdot \mathbf{B} = -\frac{e\hbar B m}{2\mu c}.$$

6.14. Vu que les valeurs propres E_t de l'hamiltonien du mouvement transversal de la particule, $\hat{H}_t = \frac{1}{2\mu} (\hat{\mathbf{p}}_t - \frac{\epsilon}{c} \mathbf{A}_t)^2$, sont positives (voir 1.23), qu'en dehors du solénoïde, la particule est libre et que pour $E_t > 0$ il n'y pas de solution décroissante de l'équation de Schrödinger d'une particule libre lorsque $\rho \rightarrow \infty$, le solénoïde ne peut "lier" la particule.

On est en mesure de montrer directement, à partir de la forme de l'équation de Schrödinger, que le spectre de l'opérateur \hat{H}_t ($E_t > 0$) est continu. Pour cela, utilisons le choix suivant de potentiel vecteur $\mathbf{A} \equiv \mathbf{A}_t = \frac{1}{2} f(\rho) \mathbf{n}_0 \wedge \mathbf{r}$, où le vecteur \mathbf{n}_0 est dirigé suivant l'axe du solénoïde et où la fonction $f(\rho)$ et $\mathbf{B} = \text{rot } \mathbf{A} = (0, 0, B(\rho))$ sont définis par

$$f(\rho) = \begin{cases} B_0, & \rho < R, \\ \left(\frac{R}{\rho}\right)^2 B_0, & \rho > R, \end{cases} \quad B(\rho) = \begin{cases} B_0, & \rho < R, \\ 0, & \rho > R. \end{cases}$$

L'hamiltonien \hat{H}_t prend la forme

$$\hat{H}_t = \frac{1}{2\mu} \left[-\frac{\hbar^2}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{\hbar^2}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{i\epsilon\hbar f(\rho)}{c} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{\epsilon^2 \rho^2 f^2(\rho)}{4c^2} \right].$$

Les fonctions propres de cet opérateur peuvent être choisies sous la forme

$$\Psi_{E_t m} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \frac{\chi(\rho)}{\sqrt{\rho}}.$$

Dans ce cas, l'équation de Schrödinger prend la forme classique d'une équation de Schrödinger unidimensionnelle ($\chi(0) = 0$) :

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\chi'' + \left[\frac{\hbar^2(m^2 - 1/4)}{2\mu\rho^2} - \frac{e\hbar m f(\rho)}{2\mu c} + \frac{e^2\rho^2 f^2(\rho)}{8\mu c^2} \right] \chi = E_t \chi,$$

avec une énergie potentielle effective

$$U_{\text{eff}} = \frac{1}{2\mu} \left\{ \left(\frac{\hbar m}{\rho} - \frac{e\rho f(\rho)}{2c} \right)^2 - \frac{\hbar^2}{4\rho^2} \right\},$$

dont l'allure est donnée sur la fig. 25 (la forme de la courbe dépend des valeurs des paramètres m , B_0 , etc. ; le dessin correspond au cas $m \neq 0$ et à une valeur suffisamment grande de B_0 , de sorte que $B_0 R^2 \gg \hbar c/|e|$).

Sur la base de considérations générales (entre la nature du spectre d'énergie et la forme du potentiel), on constate que, pour le potentiel U_{eff} du problème et $E_t > 0$ quelconque, il n'y a qu'une solution (et une seulement) de l'équation de Schrödinger (la seconde diverge pour $\rho \rightarrow 0$). Cette solution ne décroît évidemment pas lorsque $\rho \rightarrow \infty$, de sorte qu'elle décrit une particule qui n'est pas localisée dans un domaine limité de l'espace.

La figure permet également de saisir la différence qualitative entre les cas où $R \neq \infty$ et $R = \infty$.

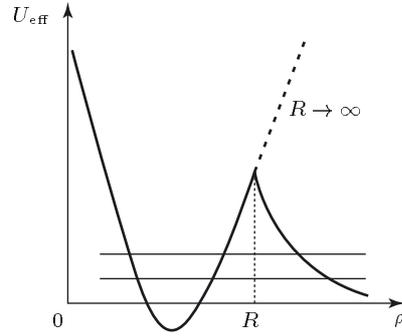


Figure 25

Pour $R \neq \infty$, il y a des niveaux d'énergie quasi discrets (les niveaux les plus bas sont marqués sur la figure). Pour $R \rightarrow \infty$, la largeur de ces niveaux tend vers zéro, et ils se transforment en niveaux habituels du spectre discret d'une particule chargée dans un champ magnétique homogène.

6.15. La solution du problème s'obtient à partir de la solution du problème précédent.

6.16. Pour résoudre ce problème, utilisons la méthode variationnelle.

Avec le choix de jauge du potentiel vecteur $\mathbf{A} = \frac{1}{2}\mathbf{B}_0 \wedge \mathbf{r}$, l'hamiltonien de la particule prend la forme (on utilise le système de coordonnées cylindriques avec l'axe z est dirigé le long du champ magnétique)

$$\hat{H} = \hat{H}_t^{(0)} + \frac{\hat{p}_z^2}{2\mu} + U(r), \quad (1)$$

où

$$\hat{H}_t^{(0)} = -\frac{\hbar^2}{2\mu\rho} \frac{\partial}{\partial\rho} \rho \frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{\hbar^2}{2\mu\rho^2} \hat{l}_z^2 - \frac{e\hbar B \hat{l}_z}{2\mu c} + \frac{e^2 B^2 \rho^2}{8\mu c^2}.$$

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

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

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

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

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

où B_0, B_1, ω_0 sont des constantes.

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

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

On peut résoudre ce problème de deux manières :

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

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

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

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

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

CHAPITRE 8

CALCUL DES PERTURBATIONS. PERTURBATIONS SOUDAINES ET ADIABATIQUES

8.1. Les fonctions propres et les valeurs propres de l'hamiltonien non perturbé sont de la forme (voir 2.1)

$$\Psi_n^{(0)} = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi(n+1)x}{a}, \quad E_n^{(0)} = \frac{\hbar^2 \pi^2 (n+1)^2}{2ma^2}, \quad n = 0, 1, \dots$$

Un calcul simple donne

$$\begin{aligned} \text{a) } E_n^{(1)} = V_{nn} &= V_0 \left\{ \frac{1}{2} + \frac{1 + (-1)^n}{\pi^2 (n+1)^2} \right\}; \\ \text{b) } E_n^{(1)} = V_{nn} &= \frac{V_0}{a} \left\{ a - 2b + \frac{a}{\pi(n+1)} \sin \frac{2\pi(n+1)b}{a} \right\}. \end{aligned}$$

La condition de validité du calcul des perturbations $V_{nm} \ll |E_n^{(0)} - E_m^{(0)}|$ donne

$$|V_0| \ll \frac{\hbar^2 \pi^2}{ma^2} (n+1). \quad (1)$$

La relation (1) montre que quelle que soit l'amplitude des perturbations $|V_0|$, pour n suffisamment grand, le calcul des perturbations permet de déterminer le déplacement des niveaux d'énergie.

8.2. Dans l'expression de $E_n^{(1)}$,

$$E_n^{(1)} = \int_0^a V(x) \frac{2}{a} \sin^2 \frac{\pi(n+1)x}{a} dx = \frac{1}{a} \int_0^a V(x) \left\{ 1 - \cos \frac{2\pi(n+1)x}{a} \right\} dx,$$

le second terme sous le signe intégral contenant $\cos \frac{2\pi(n+1)x}{a}$ oscille rapidement pour $n \gg 1$, de sorte que, pour $n \rightarrow \infty$, l'intégrale concernée tend vers 0 :

$$\int_0^a V(x) \cos \frac{2\pi(n+1)x}{a} dx = -\frac{a}{2\pi(n+1)} \int_0^a \frac{\partial V}{\partial x} \sin \frac{2\pi(n+1)x}{a} dx \rightarrow 0.$$

où P_l et $P_l^{[m]}$ sont respectivement les polynômes de Legendre et les fonctions de Legendre associées.

Quelques premières harmoniques sphériques sont :

$$\begin{aligned} Y_{00} &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, & Y_{10} &= i\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, & Y_{20} &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (1 - 3 \cos^2 \theta), \\ Y_{1,\pm 1} &= \mp i\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi}, \\ Y_{2,\pm 1} &= \pm \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \cos \theta \sin \theta e^{\pm i\varphi}, & Y_{2,\pm 2} &= -\sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\varphi}. \end{aligned}$$

FONCTIONS DE BESSEL

La fonction de Bessel est la solution régulière en $z = 0$ de l'équation de Bessel

$$z^2 w'' + zw' + (z^2 - \nu^2)w = 0.$$

Elle est donnée par la série

$$J_\nu(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k (z/2)^{2k+\nu}}{\Gamma(k+\nu+1)\Gamma(k+1)}.$$

La deuxième solution indépendante (singulière en $z = 0$) de l'équation de Bessel est donnée par la fonction de Neumann $N_\nu(z)$ définie comme

$$N_\nu(z) = \frac{J_\nu(z) \cos \pi\nu - J_{-\nu}(z)}{\sin \pi\nu}.$$

Pour $\nu = n$,

$$N_n(z) = \lim_{\nu \rightarrow n} N_\nu(z).$$

On utilise également les fonctions d'Hankel $H_\nu^{(1)}(z)$ et $H_\nu^{(2)}(z)$ définies comme

$$H_\nu^{(1,2)}(z) \equiv J_\nu(z) \pm iN_\nu(z).$$

Pour l'argument z imaginaire, on introduit les fonctions de Bessel modifiées et les fonctions de MacDonald :

$$\begin{aligned} I_\nu(z) &\equiv i^{-\nu} J_\nu(iz), \\ K_\nu(z) &\equiv \frac{\pi}{2} i^{\nu+1} H_\nu^{(1)}(iz). \end{aligned}$$

Pour $z \rightarrow 0$, ces fonctions ont le comportement

$$\begin{aligned} J_\nu(z) &\approx \frac{1}{\Gamma(\nu+1)} \left(\frac{z}{2}\right)^\nu, \\ N_\nu(z) &\approx -\frac{\Gamma(\nu)}{\pi} \left(\frac{2}{z}\right)^\nu \quad \text{pour } \nu > 0, & N_0(z) &\approx \frac{2}{\pi} \ln \frac{\gamma z}{2}, \\ K_n(z) &\approx \frac{(n-1)!}{2} \left(\frac{2}{z}\right)^n \quad \text{pour } n = 1, 2, \dots, & K_0(z) &\approx \ln \frac{2}{\gamma z} \end{aligned}$$