Mécanique Quantique

Exercices supplémentaires

Exercice 1: Harmoniques sphériques

1. Calculer les composantes de l'opérateur moment cinétique orbital ($\hat{\vec{L}}$) d'une particule par rapport au point O dans le repère définit par les coordonnées sphériques (r, θ, ϕ) et la base $(\vec{e}_r, \vec{e}_\theta, \vec{e}_\phi)$. En déduire les expressions de $\hat{L}_z$ et $\hat{L}_\pm$ en terme de ces coordonnées. On rappelle que $\vec{\nabla} = \vec{e}_r \partial_r + \vec{e}_\theta \frac{1}{r} \partial_\theta + \vec{e}_\phi \frac{1}{r \sin \theta} \partial_\phi$

2. On note $Y_{l,m}(\theta, \phi) = \langle \theta, \phi | l, m \rangle$, la fonction propre commune à $\hat{\vec{L}}^2$ et $\hat{L}_z$ dans la représentation (θ, ϕ). Dans l'espace de Hilbert $\mathcal{E}_\Omega$ des fonctions des variables angulaires $(\Omega = (\theta, \phi))$ le produit scalaire entre deux fonctions F et G s'écrit

$$\langle F | G \rangle = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} d\theta \, \sin \theta F^*(\Omega) G(\Omega) \qquad .$$

   (a) Quelles identités déduit-on des relations d'orthonormalisation des vecteurs $|l, m\rangle$ lorsque l'on passe en représentation (θ, ϕ) ?

   (b) En considérant l'expression de $\hat{L}_z$ en coordonnées sphériques, trouver la dépendance de $Y_{l,m}(\theta, \phi)$ en fonction de ϕ

   (c) A partir de l'identité $\hat{L}_+ |l, m = l\rangle = 0$, calculer $Y_{l,l}(\theta, \phi)$.

   (d) A partir de l'action successive de $\hat{L}_-$ sur $|l = 1, m = 1\rangle$, calculer les expressions de $Y_{1,1}(\theta, \phi), Y_{1,0}(\theta, \phi), Y_{1,-1}(\theta, \phi)$ (à un facteur de phase commin près).

3. Soit Π l'opérateur parité, montrer que $\hat{\vec{L}}$ et Π commutent. Que peut-on en conclure sur les fonctions $Y_{l,m}(\theta, \phi)$?

Exercice 2: Energie de Gross-Pitaevskii

On désire connaître l'état fondamental d'un système de N atomes identiques de masse m, satisfaisant à la "statistique de Bose" et dépourvus de spin. L'Hamiltonien du système est le suivant :

$$\hat{H} = \sum_{\alpha=1}^{N} \frac{\hat{\vec{p}}_\alpha^{\ 2}}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} V(\hat{\vec{r}}_\alpha - \hat{\vec{r}}_\beta) + \sum_{\alpha=1}^{N} V_{\text{ext}}(\hat{\vec{r}}_\alpha) \qquad . \tag{1}$$

Dans cette expression, $(\hat{\vec{r}}_\alpha, \hat{\vec{p}}_\alpha)$ sont les opérateurs associés respectivement à la position et à l'impulsion de l'atome α, V est le potentiel d'interaction entre deux atomes, enfin, V_{ext} est le potentiel imposé par l'extérieur et agissant sur chacun des atomes.

1. Pour des bosons, la "fonction d'onde à N-corps" que l'on note $|\Psi\rangle$ est totalement symétrique dans toute permutation des atomes (principe de Pauli). l'ansatz le plus simple pour décrire cette situation est le suivant:

$$|\Psi\rangle = |\phi(1)\rangle \otimes |\phi(2)\rangle \otimes |\phi(3)\rangle \ldots \otimes |\phi(N)\rangle \quad ,$$

où $|\phi(\alpha)\rangle$ est le ket normé associé à la particule α, c'est à dire qu'en notant $\vec{r}_\alpha$ la position de la particule α, on a par définition $\langle \vec{r}_\alpha|\phi(\alpha)\rangle = \phi(\vec{r}_\alpha)$.

Donner l'expression de $\langle \vec{r}_1, \vec{r}_2, ...\vec{r}_N|\Psi\rangle$ en terme des fonctions d'onde à un-corps $\{\phi(\vec{r}_\alpha)\}$.

2. Dans la phase gazeuse, la distance entre deux atomes et très grande devant la portée de l'interaction, si bien que l'on peut modéliser l'interaction par un potentiel de contact :

$$V(\vec{r}_\alpha - \vec{r}_\beta) = g\delta^{(3)}(\vec{r}_\alpha - \vec{r}_\beta) \quad ,$$

d'autre part, expérimentalement, on sait depuis quelques années piéger les atomes dans un potentiel harmonique que l'on choisit ici isotrope :

$$V_{\text{ext}}(\vec{r}) = \frac{1}{2}m\omega_{oh}^2|\vec{r}|^2 \quad .$$

Montrer que l'énergie moyenne $E = \langle\Psi|\hat{H}|\Psi\rangle$ peut-être exprimée simplement en terme de la fonction $\phi(\vec{r})$ (appelée fonction d'onde du condensat):

$$\frac{E}{N} = \int d^3\vec{r}\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\phi^*(\vec{r})\Delta\phi(\vec{r}) + \frac{g(N-1)}{2}|\phi(\vec{r})|^4 + \frac{1}{2}m\omega_{oh}^2|\vec{r}|^2|\phi(\vec{r})|^2\right\} \quad . \qquad (2)$$

Exercice 3: Collapse d'un condensat attractif

On charge un piège avec des bosons ayant une interaction effective attractive ($g < 0$). L'énergie du système est décrite par l'expression (2).

1. On pose $g = \dfrac{4\pi\hbar^2 a}{m}$. Quelle est la dimension de a ?

2. On adopte encore une fois une approche variationnelle en prenant un ansatz Gaussien pour la fonction d'onde du condensat :

$$\phi(\vec{r}) = \frac{1}{(\sqrt{\pi}a_{oh}\sigma)^{\frac{3}{2}}}\exp\left(-\frac{r^2}{2a_{oh}^2\sigma^2}\right) \quad .$$

Dans cette expression $a_{oh} = \sqrt{\dfrac{\hbar}{m\omega_{oh}}}$ est l'échelle de longueur associée au potentiel de piégeage et σ est le paramètre variationnel. Remarquons que par construction, cet ansatz est normé à l'unité. Calculer l'énergie associée à cet état en fonction de $(N, \hbar\omega_{oh}, \chi, \sigma)$, où le paramètre χ est donné par $\chi = \dfrac{aN}{a_{oh}}$.

3. Tracer l'allure qualitative de cette énergie comme fonction de σ suivant que χ est petit ou grand.

4. Evaluer le nombre maximal d'atomes que l'on peut mettre dans le piège en cherchant la valeur critique de χ, telle que $E(\sigma)$ possède un point d'inflexion à tangente horizontale.