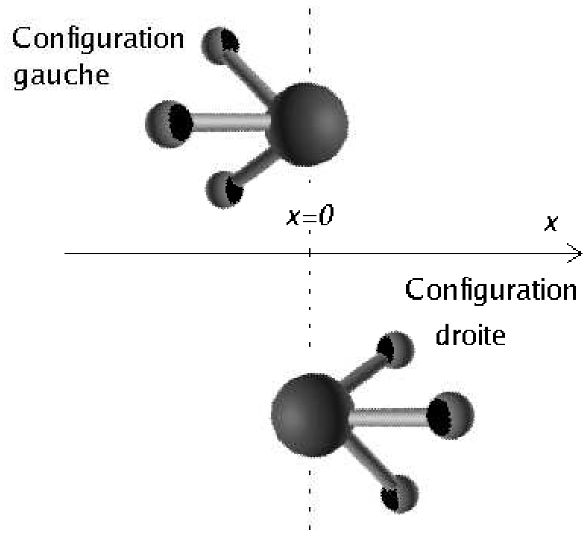
Mécanique Quantique

TD n°4 : Systèmes à deux niveaux

Retournement de la molécule d'ammoniac

La molécule d'ammoniac est constituée d'un atome d'azote et de trois atomes d'hydrogène. On la représente schématiquement sous la forme d'une pyramide. On étudie dans cet exercice les deux états possibles de la molécule liés à la position relative du plan constitué par les trois atomes d'hydrogène par rapport à l'atome d'azote.



1. **Modélisation**

Le mouvement d'ensemble des trois atomes d'hydrogène (masse $3m_H$) par rapport à l'atome d'azote (masse m_N) revient comme dans le problème à deux-corps à celui d'une particule fictive de masse effective $m = \dfrac{3m_H m_N}{3m_H + m_N}$ évoluant dans un potentiel unidimensionnel (direction x). La figure (1) donne la modélisation du potentiel vu par cette particule fictive. On suppose que $U_0 \gg \dfrac{\hbar^2}{ma^2}$ et $U_0 \gg \dfrac{\hbar^2}{m(b-a)^2}$. On utilisera les nota-

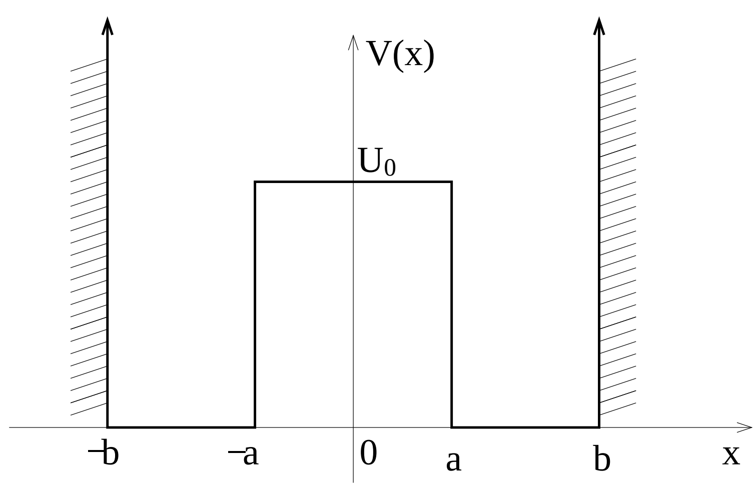


Figure 1: Schématisation du potentiel associé à l'inversion de la molécule d'ammoniac

tions suivantes dans la suite de l'énoncé:

- ϵ_∞ énergie la plus basse correspondant à la limite stricte $U_0 \to \infty$.
- $\phi_G(x)$: fonction d'onde de plus basse énergie pour un quanton localisé principalement dans le puits de gauche et $\phi_D(x)$ pour le puits de droite.
- $\phi_P(x), \phi_I(x)$: fonctions d'ondes paires et impaires de plus basses énergies.

(a) Quelles seraient les deux fonctions propres d'énergies les plus basses ϕ_G et ϕ_D dans la limite stricte $U_0 \to \infty$. Calculer les fonctions d'ondes paires et impaires de même énergie.

(b) Toujours dans cette limite, montrer que toute combinaison linéaire de ϕ_G et ϕ_D est un état stationnaire du Hamiltonien (noté $\hat{H}_0$).

(c) On note l'énergie d'un niveau $E = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m}$ et on introduit la variable $\hbar q = \sqrt{2m(U_0 - E)}$. Représenter qualitativement les deux fonctions d'ondes d'énergies les plus basses (ϕ_P état pair et ϕ_I état impair) pour $U_0 < \infty$. Montrer que la condition de quantification des niveaux d'énergie est donnée par l'équation:

$$\tan\left(k(b-a)\right) = -\frac{k}{q}\left(\tanh(qa)\right)^{\pm 1} \quad ,$$

où l'exposant -1 intervient pour les fonctions d'ondes paires et l'exposant +1 pour les fonctions d'ondes impaires.

(d) Montrer que dans la limite considérée, la différence d'énergie associée aux états ϕ_P et ϕ_I s'écrit sous la forme:

$$\Delta = \epsilon_I - \epsilon_P = \frac{4\pi^2\hbar^2 \exp(-2Ka)}{mK(b-a)^3} \quad \text{avec} \quad \hbar K = \sqrt{2mU_0} \quad .$$

(e) <u>Application numérique</u>: calculer la fréquence de Bohr et la longueur d'onde associées à la transition entre les deux états ϕ_I et ϕ_P, sachant que $\epsilon_I - \epsilon_P \simeq 10^{-4}$ ev.

Dans la suite, on choisit les phases pour les états $|\phi_P\rangle$ et $|\phi_I\rangle$, telles que

$$\langle x|\phi_P\rangle = \phi_P(x) > 0 \quad \textit{et} \quad \langle x|\phi_I\rangle = \phi_I(x) > 0 \quad \textit{lorsque} \quad x > 0.$$

D'autre part, on restreint la base des états accessibles à une combinaison linéaire des deux états $|\phi_P\rangle$ et $|\phi_I\rangle$.

2. Base des états "droites-gauches"

On introduit une nouvelle base constituée par les états

$$|\phi_D\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\phi_P\rangle + |\phi_I\rangle\right) \quad , \quad |\phi_G\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\phi_P\rangle - |\phi_I\rangle\right)$$

(a) Justifier l'appelation "états droite-gauche" pour $|\phi_D\rangle$ et $|\phi_G\rangle$. Montrer que $\{|\phi_D\rangle, |\phi_G\rangle\}$ forme une base dans l'espace de Hilbert considéré.

(b) Donner la matrice représentant l'Hamiltonien $\hat{\mathcal{H}}_0$:

- dans la base $\{|\phi_P\rangle, |\phi_I\rangle\}$

- dans la base $\{|\phi_D\rangle, |\phi_G\rangle\}$.

(c) Les états $|\phi_G\rangle$ et $|\phi_D\rangle$ sont-ils états stationnaires du Hamiltonien ?

(d) On définit l'observable $\hat{\mathcal{O}}$ dont les états propres sont $|\phi_D\rangle$ (valeur propre $+1$) et $|\phi_G\rangle$ (valeur propre -1). Donner les représentations de $\hat{\mathcal{O}}$ dans les bases $\{|\phi_D\rangle, |\phi_G\rangle\}$ et $\{|\phi_P\rangle, |\phi_I\rangle\}$.

(e) A l'instant initial, la fonction d'onde est $|\psi(t=0)\rangle = |\phi_D>$. Quelle est l'évolution ultérieure de l'état du système ? Exprimer en fonction des données du problème la valeur moyenne de l'observable $\hat{\mathcal{O}}$:

$$\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle (t) = \langle \psi(t) | \hat{\mathcal{O}} | \psi(t) \rangle \quad .$$

Justifier le nom de fréquence d'inversion pour la quantité $\dfrac{\omega_i}{2\pi} = \dfrac{\Delta}{2\pi\hbar}$.

3. Interaction avec un champ électrique statique

La molécule d'ammoniac possède un dipôle électrique orienté suivant x, de l'atome d'azote vers le plan d'hydrogène. On note son amplitude d_0. On décrit l'interaction dipôle-champ électrique ($\overrightarrow{E} = \mathcal{E}\vec{u}_x$) avec l'Hamiltonien simplifié suivant:

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 - d_0 \mathcal{E} \hat{\mathcal{O}} \quad .$$

(a) Exprimer les énergies propres en présence du champ $\overrightarrow{E}$ en fonction des données du problème.

(b) Quelles sont les expressions des états propres dans les limites $d_0\mathcal{E} \gg \Delta$ et $d_0\mathcal{E} \ll \Delta$?

(c) Tracer qualitativement l'évolution des deux énergies propres en fonction de $\mathcal{E}$.

4. Interaction avec un champ électrique oscillant

Dans cette partie, le champ électrique oscille avec une pulsation ω: $\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_0 \cos(\omega t)$. On notera dans la suite $\gamma = d_0 \mathcal{E}_0$.

(a) On considère un état quelconque que l'on décompose sous la forme

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left(-i\frac{\epsilon_I + \epsilon_P}{2\hbar} t\right) \left[\alpha(t) \exp\left(i\frac{\omega t}{2}\right) |\phi_P\rangle + \beta(t) \exp\left(-i\frac{\omega t}{2}\right) |\phi_I\rangle\right] \quad .$$

Etablir le système différentiel vérifié par les amplitudes $(\alpha(t), \beta(t))$.

(b) En négligeant les coefficients dépendant du temps dans le système précédent, montrer que α et β sont des fonctions sinusoïdales ayant pour pulsation

$$\Omega = \frac{1}{2}\sqrt{(\omega - \omega_i)^2 + \frac{\gamma^2}{\hbar^2}}$$

(c) On prépare les molécules dans l'état $|\phi_I\rangle$ à l'instant $t = 0$ ($\beta(0) = 1$ et $\alpha(0) = 0$). Donner l'expression de la probabilité qu'a le système de passer au niveau fondamental après un temps t. Décrire l'évolution du système lorsque $\omega \simeq \omega_i$.