UNIVERSITE PAUL SABATIER TOULOUSE III

M1 Sciences de l'univers et technologies spatiales

année 2018/2019

EXAMEN TERMINAL de compléments de mécanique quantique EMSUA1B1

Session du 11 juin 2019

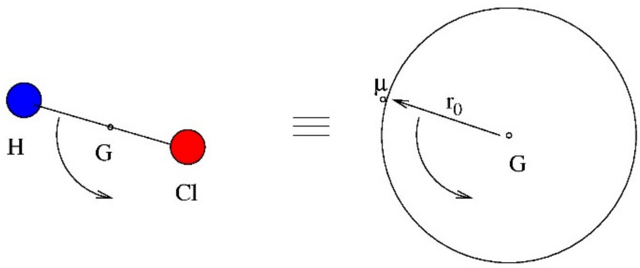
Durée : 1h30 - Tous documents interdits

Questions de cours :

- A quelle condition un opérateur A est-il hermitique ?
- Soit P_i l'opérateur de projection. Rappeler sa définition dans la base $|u_i>$ et donner la relation de fermeture.

Exercice La molécule *HCl* placé dans un champ électrique

Dans ce problème nous négligeons les mouvements de vibration de la molécule *H-Cl* ; seule la rotation rigide de la molécule est considérée. Le mouvement est donc celui d'un point dont la masse réduite vaut $\mu = (M_H M_{Cl}) / (M_H + M_{Cl})$, sur une sphère de rayon $r_0 = |\boldsymbol{r}_H - \boldsymbol{r}_{Cl}|$, autour du centre de gravité G.



L'état classique de la molécule est donc caractérisé par un point sur la sphère, alors que l'état quantique est caractérisé par une fonction d'onde $\Psi(\theta, \varphi)$ en coordonnées sphériques. On rappelle le produit scalaire $<\Psi_1 | \Psi_2> = \int \Psi_1^*(\theta,\varphi)\Psi_2(\theta,\varphi) d\Omega$ avec $d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$.

1. Soit $I = \mu r_0^2$ le moment d'inertie et $\boldsymbol{L}$ le moment angulaire de la molécule ; donner le Hamiltonien décrivant ce mouvement de rotation libre H_0 en fonction de μ, r_0 et ω vitesse angulaire de la rotation, puis en fonction de $\boldsymbol{L}$ et I.

2. Sachant que les harmoniques sphériques $Y_{l,m}(\theta,\varphi)$, aussi notée $|l, m>$ forment une base de l'espace L^2, rappeler les règles de sélection sur l et m ainsi que les actions des opérateurs $L^2 | l, m>$ et $L_z | l, m>$. En déduire le spectre de H_0, soit les niveaux d'énergie, la multiplicité ainsi que la base des espaces propres d'énergie. On notera que $\hbar^2 / 2I \sim 1{,}3\text{x}10^{-3}$ eV pour la molécule de *HCl*.

3. La molécule de *HCl* possède un moment dipolaire électrique permanent $\boldsymbol{D}$. Le Hamiltonien d'interaction de la molécule avec un champ électrique externe $\boldsymbol{E}$ selon z est donnée par $H_1 = -\boldsymbol{D}.\boldsymbol{E}$. Ecrire le Hamiltonien total $H = H_0 + H_1$ de la molécule en présence de ce champ en faisant apparaitre $D = |\boldsymbol{D}|$, $E = |\boldsymbol{E}|$ ainsi que $\cos\theta$.

4. Montrer la relation $[H, L_z] = 0$. Comment pourra-t-on utiliser cette propriété pour chercher le spectre de H, plus facilement que dans l'espace L^2 entier ? On rappelle qu'un espace propre associé à la valeur propre a est l'ensemble des vecteurs Ψ tels que

$A\Psi = a\ \Psi$. Si deux opérateurs A et B commutent alors chaque espace propre de A est invariant par l'opérateur B et inversement.

5. On suppose $\boldsymbol{E}$ faible, et l'on traite H en théorie des perturbations. Utilisant la question précédente, dans quel espace va-t-on chercher le spectre de H ? Va-t-on utiliser la théorie des perturbations pour niveaux non dégénérés ou pour niveaux dégénérés ? Calculer la correction des niveaux d'énergie $E^{(1)}$ au 1^er^ ordre. On rappelle que si $H_0|\,n> = \varepsilon_n\,|\,n>$ est connu, si $H = H_0 + H_1$ et que l'on cherche à résoudre $H|\,\Psi_n> = E_n\,|\,\Psi n>$ alors au premier ordre (en $\| H_1 \| << 1$), $E_n \sim \varepsilon_n + E^{(1)}$ avec $E^{(1)}) = <n\,|H_1|\,n>$. On rappelle également que la fonction $Y_{l,\,m}(\theta, \varphi)$ a la parité $(-1)^l$.