

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

UNIVERSITE Dr. TAHAR MOULAY SAIDA
FACULTE DES SCIENCES ET DE LA TECHNOLOGIE



MÉMOIRE

Présenté en vue de l'obtention du diplôme de

Licence

Spécialité : PHYSIQUE

par :

Benhamidi Rafika

Mahsar Zahira

Sur le thème :

Atome et lumière

Soutenance prévue le 25 /05/2015 devant le jury :

Mr Smail Kouidri	MC (université de saïda)	Encadreur
Mr Hachmaoui Malika	MC (Université de Saïda)	Examinatrice
Mr Boudali Abd elkader	MC (Université de Saida)	Président
Mr Djdid Ahmed	MC (Université de Saida)	Examinateur

Universitaire 2014-2015

Table des matières

Remerciement

Dédicaces

Qui est Zeeman ?.....1

Introduction2

Chapitre I: Oscillateur harmonique

I.1.Introduction.....3

I.2.Etude classique4

I.2.1.Equation du mouvement.....4

I.2.2-simplification des équations.....4

I.3.Etude quantique.....5

I.3.1.Les propriétés générales des états propres...6

I.4.Résolution quantiques dans l'espace de Fock.....7

I.4.1 Remarque.....8

I.5.Opérateurs d'échelle.....8

I.5.1.Calcul des valeurs propres.....9

I.5.2.Etats propres de l'opérateur N11

I.6.Représentation matricielle.....12

I.7.Conclusion.....14

Chapitre II: L'oscillateur harmonique dans un champ magnétique

II.1. Introduction.....	17
II.2. Perturbation d'un niveau non dégénéré.....	17
II.3. Correction de l'énergie au 1 ^{er} ordre.....	18
II.4. Correction de l'énergie au 2 nd ordre	18
II.5. Bilan.....	19
II.6. Perturbation d'un niveau dégénéré.....	19
II.7. Effet Zeeman.....	21
II.8. L'hamiltonien du système.....	23
II.9. Conclusion.....	24

Chapitre III : Résultats et discussions

III.1. Introduction.....	25
III.2. Méthode d'Euler.....	25
III.3. Organigramme de calcul.....	27
III.4. Détermination des fonctions de bases.....	28
III.5. Détermination des nouvelles fonctions.....	28
III.5.1. potentiel harmonique.....	29
III.5.2. Fonction d'onde	30
III.5.3. La densité.....	30
III.6. Application en astrophysique.....	33
III.7. Conclusion.....	33
Conclusion générale.....	34
Bibliographe	35

REMERCIEMENTS

Merci à Dieu qui nous a donné la force de
Terminer notre formation.

Nos premiers remerciements les plus sincères
vont

D'abord à nos chers parents. Nous remercions
Aussi notre encadreur « *Mr. SMail Kouidri* » qui
nous Accompagné tout au long de notre travail
de recherche.

Nos remerciements vont également à tous les
membres

du jury et à tous ceux qui ont participé de près
ou
de loin à l'élaboration de notre mémoire.



DEDICACES

Merci ALLAH, mon dieu de m'avoir donne la capacité d'écrire et de réfléchir, la force de réaliser ce mémoire.

Avec mes sentiments le plus sincère je dédie le fruit de mon travail a:

A mon cher père

A celui qui j'offre ma réussite, mon bonheur et tout mon respect.

Qu'il trouve ici l'expression de mon affection et une récompense des sacrifices consentis pour moi

A ma chère et tendre mère

A celle qui a tout souffert, sans me faire souffrir, qu'elle trouve dans ce mémoire le témoignage de ma reconnaissance et de mon affection pour tous les sacrifices, l'extrême amour et la bonté qu'elle m'a offert pour me voir réussir

Que dieu la protège et nous préserve le bonheur et la santé

Ma grande père ben Amar qui m'accompagne par ses prieras puisse dieu prêter langue vie et bcq de sante et de bonheur dans les deux vies.

A tout Mes frères et Mes sœurs : Abdelkrim, Nacira, noura, Iman, Amar, Isam, Abd elwafi et toute la famille sans exception.

A tout mes amis : de la vie, les études Sefian, Amal, Zahira, prof hachmaoui, hadjira et toute la cite Ahmed médeghre

Enfinement a tout ceux que j'aime et que je connaisse, j'ai omis de citer.

RAFIKA



*Merci ALLAH, mon dieu de m'avoir donne la capacité d'écrire et de
reflechir, la force de réaliser ce mémoire.*

Avec mes sentiments le plus sincère je dédie le fruit de mon travail :

*À ma mère : tu représente pour moi la source de tendresse et l'exemple
de dévouement qu'n'a 'pas cesse de m'encourager.*

*À mon père : Aucune dédicace ne saurait exprimer l'amour, l'estime, le
recepé que j'ai toujours pour vous .dieu te garde et te protège et te guéris
pour nous.*

À mes adorables sœurs :Kenza , Assia.

À mes frères : Ali, Adel, mon petit frère que j'adore Abd elhadi .

*À ma grande mère : Meriem qui m'accompagne par ses prieras puisse
dieu prêter langue vie et bcq de sante et de bonheur dans les deux vies.*

À mes chers oncles,tantes leurs epous et epouses.

À ma chers tante khoukha et leurs epous Nour eldine

À mes chers cousins et cousines :Fadila,Hanane,Assma

,Sara,Heba ,Rachida,Rania.

*À mes Chers amis :zouaoui ,Imane , souad, zohra, rafika ,hadjer,
Finalement a tout ceux que j'aime et que je connaisse, j'ai omis de citer.*

ZAHIRA





Pieter Zeeman :

Physicien Néerlandais qui a reçut son prix Nobel de physique en 1902. En 1896, Zeeman découvrit que les raies spectrales d'une source de lumière soumise à un champ magnétique possèdent plusieurs composantes, chacune d'elles présentant une certaine polarisation.

Introduction

La physique des matériaux s'est développée tout au long du XXIème siècle, d'une façon spectaculaire en donnant naissance à des avancées technologiques. Ces avancées ont permis de comprendre et de prévoir toutes les propriétés des atomes. La détermination de ces propriétés se repose généralement sur le modèle proposé comme première étape et sur la résolution de la fameuse équation dite ici équation de Schrödinger.

Plusieurs modèles ont été établis dans le but de déterminer et de prévoir la forme analytique de la fonction potentielle. Dans ce travail nous allons assimiler l'étude de l'atome à un modèle de l'oscillateur harmonique ou nous supposons que l'électron est lié au noyau à travers un ressort.

Le but de ce travail de License est de calculer comme première étape les fonctions d'ondes propres et leurs énergies correspondant puis nous plongeons notre oscillateur comme deuxième étape. Le premier chapitre est destiné à exposer brièvement l'oscillateur harmonique d'une manière plus simplifiée *via* les opérateurs de création et d'annihilation.

Le deuxième chapitre est consacré à nous familiariser à l'étude de la théorie des perturbations ou nous considérons le terme interaction avec un champ magnétique comme une perturbation. Nous déterminerons les nouvelles fonctions d'onde solution de l'équation de Schrödinger.

Le dernier chapitre représente la partie la plus laborieuse de notre travail ou on applique tous l'outil théorique déjà vu au chapitre précédent à la détermination des fonctions propres de l'oscillateur harmonique en présence de la perturbation.

Enfin, on terminera ce mémoire par une conclusion.



CHAPITRE I

Oscillateur

Harmonique

L'oscillateur harmonique

I.1. Introduction

Oscillateur harmonique est un système périodique dans le temps. Il est dit harmonique si les oscillateurs effectués sont sinusoïdales, avec une amplitude et une fréquence qui ne dépendent que des caractéristiques intrinsèques du système et des conditions initiales. Cela est le cas en mécanique pour une particule évoluant à une dimension dans un potentiel quadratique, de forme générale : $V(r) = \frac{1}{2}kx^2$ k étant une constante positive ou la figure I-1 montre sa variation en fonction de x :

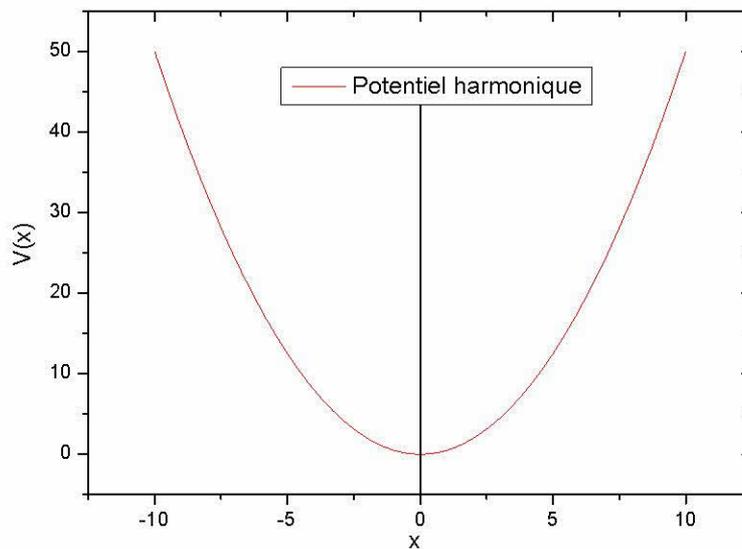


Figure I-1 : Variation du potentiel harmonique en fonction de x

Cette forme de potentiel est obtenue notamment dans le cas d'oscillations de faible amplitude autour d'une position d'équilibre stable dans un potentiel quelconque (cf. article sur l'oscillateur harmonique classique), car au voisinage de cette position d'équilibre le potentiel prend cette forme. Pour cette raison, le concept d'oscillateur harmonique joue un rôle majeur dans de nombreuses applications de la physique.

La mécanique quantique a révolutionné un grand nombre de concepts fondamentaux dont l'oscillateur harmonique est l'exemple le plus familier car sa reformulation dans le cadre quantique, nous a permis d'élucider plusieurs résultats expérimentaux, notamment en physique de la matière condensée. Son étude nous amène à introduire des outils mathématiques d'ordre d'intérêt considérable en physique générale et plus particulièrement en physique des matériaux. Nous concentrerons notre étude à l'oscillateur harmonique à une dimension

I.2. Etude classique

L'hamiltonien classique d'un oscillateur harmonique unidimensionnel s'écrit :

$$H = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \quad (I-1)$$

Où $\frac{1}{2} m\omega^2 x^2$ représente le potentiel harmonique et $\frac{p_x^2}{2m}$ est l'énergie cinétique, ω est la fréquence (angulaire) appelée pulsation propre de l'oscillateur.

Notre objectif est de déterminer les solutions propres de cet oscillateur, ceci revient à minimiser l'énergie totale autrement dit à développer le potentiel harmonique au voisinage $X = X_0$ sous la forme de Taylor :

$$V(x) = V(x_0) + \frac{1}{2} \left(\frac{d^2V}{dx^2} \right) (x - x_0) + \dots \quad (I-2)$$

Avec la supposition $\left(\frac{d^2V}{dx^2} \right) > 0$,

I.2.1 Equation du mouvement

La détermination des équations du mouvement repose sur les équations de Hamilton où

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = \frac{p_x}{m} \\ \frac{dp_x}{dt} = -m\omega^2 x \end{cases} \quad (I-3)$$

La deuxième équation montre bien qu'un oscillateur harmonique est soumis à une force de rappel.

I.2.2 Simplification des équations

Pour mieux donner une forme plus symétrique à ces équations on devrait réécrire le hamiltonien précédent sous une forme plus réduite, en introduisant de nouvelles variables canonique :

$$p_x \equiv \frac{p_x}{\sqrt{m\omega}} \quad , \quad X \equiv \sqrt{m\omega} x \quad (I-4)$$

Ce qui permet de le mettre sous la forme :

$$H = \frac{\omega}{2} \left(\frac{p_x^2}{m\omega} + m\omega x^2 \right) = \frac{\omega}{2} (p_x^2 + X^2) \quad (I-5)$$

Comme $\{X, p_x\} = 1$, la transformation $(x, p_x) \rightarrow (X, p_x)$ est canonique, et donc laisse inchangée la forme des équations de Hamiltonien. Les équations du mouvement précédentes deviennent alors :

$$\begin{cases} \frac{dX}{dt} = \omega p_x \\ \frac{dp_x}{dt} = -\omega X \end{cases} \quad (I-6)$$

L'introduction de la grandeur complexe $\alpha \equiv \frac{X + ip_x}{\sqrt{2}}$, permet de regrouper ces deux équations en une équation unidimensionnelle :

$$\frac{d\alpha}{dt} = -i\omega\alpha \quad (I-7)$$

Dont la solution générale est de la forme $\alpha(t) = \alpha_0 e^{-i\omega t}$, avec $\alpha_0 = \alpha(t=0)$ et par suite une particule de masse m dans ce potentiel a un mouvement sinusoïdal de pulsation ω .

L'énergie de la particule est une constante du mouvement positive ou nulle

$$H = \frac{1}{2} m (\dot{x}^2 + \omega^2 x^2) \quad (I-8)$$

Dont la valeur dépend des conditions initiales de façon continue, sans restriction.

Le Hamiltonien réduit précédent s'écrit en fonction de α sous la forme :

$$H = \omega \alpha^* \alpha \quad (I-9)$$

I.3. Etude quantique

Revenons à notre hamiltonien (I-1) et réécrivons-le en fonction des opérateurs de création et d'annihilation qui agissent sur un espace de Fock. Cet espace qui est vectoriel ou les opérateurs qui appartient à lui ne sont plus des fonctions analytiques mais des opérateurs généralement hermétique où leurs valeurs propres sont réelles autrement dit énergies.

La résolution de ce système d'une manière quantique revient à résoudre la fameuse équation de Schrödinger :

$$\hat{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle \quad (I-10)$$

où E est l'énergie associée à un état propre $|\psi\rangle$ du système.

La meilleure formulation de résoudre (I-10) est de la présenter en représentation position, en tenant en compte que :

$$\hat{x} = x \hat{I} \quad \text{Et} \quad \hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \quad (I-11)$$

Ce qui donne l'équation différentielle suivante pour la fonction d'onde en notation de Dirac :

$$\psi(x) = \langle x | \psi \rangle \quad (I-12)$$

Et l'équation (I-10) deviendrait :

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \left(E - \frac{m\omega^2}{2} x^2 \right) \psi(x) = 0 \quad (I-13)$$

La résolution mathématique de cette équation ne présente pas de difficultés majeures, bien qu'elle conduise à des calculs assez complexes. Toutefois une telle méthode est surtout peu explicite physiquement, aussi est-il préférable d'employer une autre approche, très féconde, développée par Paul Dirac, qui non seulement permet d'obtenir les valeurs propres du être généralisée à d'autres situations. Nous en donnerons ici un exemple plus familier le cas d'un oscillateur harmonique classique à une dimension modélisé par un potentiel quadratique, typiquement (m étant la masse du système) :

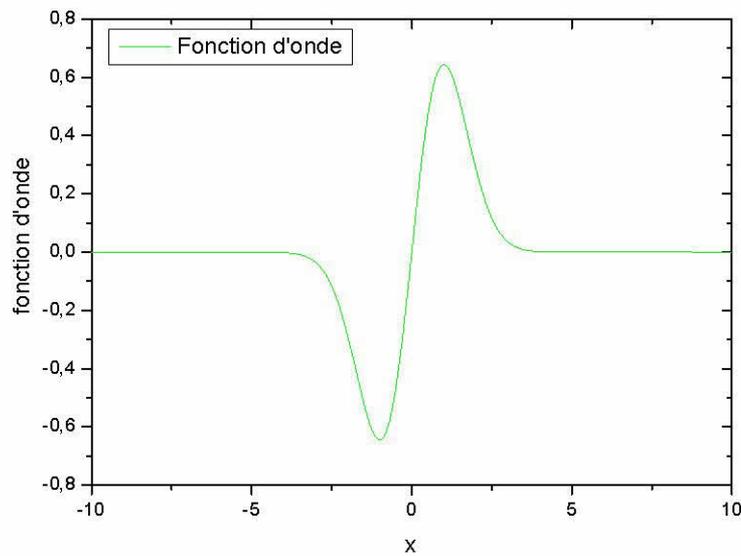


Figure I-2 : Présentation de la fonction d'onde

Montre l'allure de la fonction d'onde de l'oscillateur harmonique. Le caractère harmonique du potentiel réel conduit à des niveaux d'énergie bien spécifiés

I.3.1 Les propriétés générales des états propres

Avant toute résolution, il est possible de déduire certaines propriétés des valeurs et états propres du hamiltonien quantique précédent.

1. Les valeurs propres E de \hat{H} sont toujours positives ou nulle :

En effet pour un état $|\psi\rangle$ > quelconque, il est évident que $\|\hat{x}|\psi\rangle\|^2 \geq 0$

$$\|\hat{x}|\psi\rangle\|^2 = \langle\psi|\hat{x}^+\hat{x}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{x}^2|\psi\rangle = \langle\hat{x}^2\rangle \geq 0 \quad (\text{I-14})$$

De façon évidente, il en est de même pour le terme en \hat{p}_x^2 , donc pour tout état $|\psi\rangle$, $\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle$

2. L'énergie de l'état fondamental est nécessairement non nulle :

D'après ce qui précède il est possible d'introduire les variances des valeurs moyennes de \hat{x} et de \hat{p}_x , soit $(\Delta x)^2 = \langle\hat{x}^2\rangle - \langle\hat{x}\rangle^2$ et $(\Delta p)^2 = \langle\hat{p}_x^2\rangle - \langle\hat{p}_x\rangle^2$. par suite en choisissant un état « d'essai » $|\psi\rangle$ tel que $\langle\hat{x}\rangle = 0$ et $\langle\hat{p}_x\rangle = 0$, la valeur moyenne de \hat{H} s'exprime sous la forme :

$$\langle\hat{H}\rangle = \frac{1}{2m}\langle\hat{p}_x^2\rangle + \frac{m\omega^2}{2}\langle\hat{x}^2\rangle. \quad (\text{I-15})$$

La relation d'incertitude $\Delta x\Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$ implique alors qu'au mieux $\langle\hat{p}_x^2\rangle = \frac{\hbar^2}{4\langle\hat{x}^2\rangle}$, la valeur moyenne du hamiltonien pour un état quelconque est donc a minima telle que :

$$\langle \hat{H} \rangle \geq \frac{\hbar^2}{8m\langle \hat{x}^2 \rangle} + \frac{m\omega^2 \langle \hat{x}^2 \rangle}{2} \quad (\text{I-16})$$

Cette valeur peut être minimisée par rapport à $\langle \hat{x}^2 \rangle$, considéré comme variable, ce qui implique $\frac{\partial \langle \hat{H} \rangle}{\partial u} = 0 = -\frac{\hbar^2}{8m\langle \hat{x}^2 \rangle^2} + \frac{m\omega^2}{2}$ soit finalement $\langle \hat{x}^2 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}$ pour la valeur de $\langle \hat{x}^2 \rangle$ minimisant $\langle \hat{H} \rangle$.

Il vient par substitution dans l'expression précédente : $\langle \hat{H} \rangle \geq \frac{\hbar\omega}{2}$.

Par suite l'état fondamental de l'oscillateur harmonique quantique à une énergie non nulle (énergie du point zéro), contrairement au cas classique, et ceci résulte directement de la relation quantique entre \hat{x} et \hat{p}_x .

3. Le confinement de la particule dans ce potentiel indique que le spectre de ces énergies sera direct.

4. Le système ne fait apparaître qu'un seul degré de liberté, il n'y aura donc un seul nombre quantique

I.4. Résolution quantique dans l'espace de Fock

Introduction des opérateurs de création et d'annihilation nous permet de donner à l'hamiltonien une forme plus adaptable. Ceci est aisé dans la mesure où il est aisé d'introduire une « échelle » d'énergie pour le système en utilisant la quantité $\hbar\omega$, par suite (\hbar est la constante de Planck réduite) :

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{x}^2 = \hbar\omega \left[\frac{\hat{p}_x^2}{2m\hbar\omega} + \frac{m\omega^2 \hat{x}^2}{2\hbar\omega} \right] = \frac{\hbar\omega}{2} \left[\left(\frac{\hat{p}_x}{\sqrt{m\hbar\omega}} \right)^2 + \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{x} \right)^2 \right] \quad (\text{I-17})$$

Il est facile de simplifier l'écriture de \hat{H} , en utilisant les opérateurs sans dimension (mais hermitiens) suivants :

$$\hat{p} = \frac{\hat{p}_x}{\sqrt{m\hbar\omega}}, \text{ et } \hat{X} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{x} \quad (\text{I-18})$$

Compte tenu de relation de commutation $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$, la relation de commutation entre ces nouveaux opérateurs s'écrit :

$$[\hat{X}, \hat{P}] = i\hat{I} \quad (\text{I-19})$$

En termes de ces opérateurs « réduit » le hamiltonien de l'oscillateur harmonique unidimensionnel s'écrit sous la forme :

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2} (\hat{X}^2 + \hat{P}^2) \quad (\text{I-20})$$

I.4.1 Remarque

- La quantité $\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ a la dimension d'une longueur.
- Les opérateurs « réduits » d'énergie, de position et d'impulsion quantiques ont des expressions qui rappellent celles utilisées dans le cas classique, sauf pour l'utilisation de la quantité \hbar .

I.5 Opérateurs d'échelle

En utilisant la relation de commutation entre les opérateurs « réduits » de position et d'impulsion il est facile de vérifier l'identité suivante :

$$(\hat{X} - i\hat{p})(\hat{X} + i\hat{p}) = \hat{X}^2 + \hat{p}^2 + i(\hat{X}\hat{p} - \hat{p}\hat{X}) = 2\hat{\mathcal{H}} - \hat{I} \quad (\text{I-21})$$

Ceci suggère l'introduction des opérateurs non-hermétiques, appelés « opérateurs d'échelle », adjoints l'un de l'autre :

$$\begin{cases} \hat{a} = \frac{(\hat{X} + i\hat{p})}{\sqrt{2}} \\ \hat{a}^+ = \frac{(\hat{X} - i\hat{p})}{\sqrt{2}} \end{cases} \quad (\text{I-22})$$

Ces opérateurs sont dits respectivement d'annihilation et de création de quantum d'énergie, pour des raisons qui apparaîtront plus bas. Il est facile de déterminer le commutateur entre ces deux opérateurs: $[\hat{a}, \hat{a}^+] = \hat{I}$

De même, les opérateurs \hat{X} et \hat{P} s'expriment sous la forme :

$$\begin{cases} \hat{X} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a}^+ + \hat{a}) \\ \hat{P} = i\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a}^+ - \hat{a}) \end{cases}$$

Le hamiltonien du système peut alors s'écrire sous la forme :

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{a}^+ \hat{a} + \frac{1}{2} \hat{I} \right) + \hbar\omega \left(\hat{N} + \frac{1}{2} \hat{I} \right), \quad (\text{I-23})$$

Où $\hat{N} \equiv \hat{a}^+ \hat{a}$, est appelé opérateur nombre de particules.

Par suite, la détermination des valeurs propres du hamiltonien se ramène à celles de l'opérateur sans dimensions \hat{N} , qui est évidemment hermitien puisque

$$\hat{N}^+ = (\hat{a}^+ \hat{a})^+ = \hat{a}^+ (\hat{a}^+)^+ = \hat{N} \quad (\text{I-24})$$

Par suite, ses valeurs propres sont réelles.

Remarques

- L'opérateur d'échelle \hat{a} peut être considéré comme le « pendant quantique » de la quantité complexe α définie dans le cas classique, partie 1.
- Il est intéressant alors de comparer l'expression du hamiltonien classique « réduit » avec celle obtenu dans le cas quantique. En dehors du facteur \hbar , la principale différence vient de l'apparition du terme supplémentaire en 1/2 dans le cas quantique, lie au caractère non commutatif des opérateurs d'échelle (en fait, de \hat{x} et \hat{p}_x), qui donnera lieu à l'apparition de l'énergie dite de « point zéro ».

I.5.1 Calcul des valeurs propres

Les états propres communs de \hat{N} et \hat{H} sont notés $|n\rangle$, avec pour valeurs propres :

$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle$, la valeur propre V étant a priori un réel. Les valeurs propres de \hat{H} sont alors de la forme $E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right)$. dans la mesure où cela ne change pas les résultats pour les valeurs propres il n'est pas nécessaire dans un premier temps de prendre en compte une éventuelle dégénérescence de ces états propres.

Relations de commutation utiles

À Partir de la relation de commutation précédentes entre les opérateurs d'échelle, il vient facilement :

$$\bullet \quad [\hat{N}, \hat{a}] = \hat{N} \hat{a} - \hat{a} \hat{N} = \hat{a}^+ \hat{a} \hat{a} - \hat{a} \hat{a} \hat{a}^+ = -[\hat{a}, \hat{a}^+] \hat{a} = -\hat{a} \quad (\text{I-25 a})$$

$$\bullet \quad [\hat{N}, \hat{a}^+] = \hat{N} \hat{a}^+ - \hat{a}^+ \hat{N} = \hat{a}^+ \hat{a}^+ \hat{a} - \hat{a}^+ \hat{a} \hat{a}^+ = \hat{a}^+ [\hat{a}, \hat{a}^+] = \hat{a}^+ \quad (\text{I-25 b})$$

Ces divers relations rendent possible la détermination des valeurs propres de \hat{N} .

Action des opérateurs d'échelle sur les états propres $|n\rangle$

En utilisant les notations et relations précédentes, il vient facilement :

$[\hat{N}, \hat{a}]|n\rangle = \hat{N}(\hat{a}|n\rangle) = -\hat{a}|n\rangle$, ce qui donne :

$$\hat{N}(\hat{a}|n\rangle) = (n - 1)(\hat{a}|n\rangle) \quad (\text{I-26})$$

Autrement dit ($\hat{a}|n\rangle$) est un vecteur propre de \hat{N} de valeur propre $(n - 1)$, il est possible de poser :

$\hat{a}|n\rangle = \alpha|n - 1\rangle$, avec α nombre complexe qui peut être déterminé à un phase près en utilisant le fait que :

$$|\alpha|^2 = \|\hat{a}|n\rangle\|^2 = \langle n|\hat{a}^+ \hat{a}|n\rangle = n \quad (\text{I-27})$$

Et comme nécessairement $\|\hat{a}|n\rangle\|^2 \geq 0$ il est possible d'en déduire successivement :

1. que les valeurs propres n de \hat{N} sont positives ou nulles ;
2. que si en particulier $n = 0$, alors $\hat{a}|0\rangle = \vec{0}$ et inversement si $\hat{a}|n\rangle = \vec{0}$ alors

$\hat{a}^+ \hat{a}|n\rangle = \vec{0} = \hat{N}|n\rangle$ et donc tout état respectant cette condition est propre de \hat{N} de valeur propre $n = 0$;

3. qu'en effectuant un choix de phase tel que α soit réel, il vient :
 $\alpha = \sqrt{n}$, soit encore :

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n - 1\rangle \quad (\text{I-28})$$

par suite l'opérateur \hat{a} abaisse la valeur propre v d'une unité, d'où le nom d'opérateur d'annihilation de quantum (de vibration) donné plus haut.

En procédant de même avec \hat{a}^+ il est possible de vérifier avec la même convention de phase que $\hat{a}^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$, par suite l'opérateur \hat{a}^+ accroît la valeur propre \mathcal{V} d'une unité, d'où le nom d'opérateur de création de quantum (de vibration) donné plus haut.

Valeurs propres de l'opérateur \hat{N}

Soit état propre $|v\rangle$ avec v non entier, positif, N étant le premier entier tel que $N > v$, il résulte de la relation $\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$, que l'application à N reprises de l'opérateur d'annihilation \hat{a} permettrait d'obtenir un état propre de \hat{N} avec une valeur propre négative, ce qui n'est pas possible puisque les valeurs propres de \hat{N} sont positives ou nulles.

En revanche si $v = n$, n entier strictement positif, n applications successives de \hat{a} donnent : $(\hat{a})^n|n\rangle = \sqrt{n!}|0\rangle$, et une nouvelle application de \hat{a} donne alors le vecteur nul.

Par suite les seules valeurs propres \mathcal{V} de l'opérateur \hat{N} sont les entiers n positif ou nul.

L'application d'opérateur « nombre » de quanta de vibration » donnée plus haut est donc justifiée.

Les résultats précédents donnent alors :

Les énergies accessibles par l'oscillateur sont : $E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right)$ avec n entiers positifs ou nul.

Ces états ont les propriétés générales suivantes :

- Les énergies accessibles par l'oscillateur sont quantifiées. Ce résultat a de nombreuses répercussions en physique statistique par exemple : de fait, il est impossible de décrire correctement les propriétés thermiques des solides (capacité calorifique par exemple) sans tenir compte du caractère quantifié des états de vibrations des atomes qui les constituent.
- Les états d'énergie sont espacés de la même quantité $\hbar\omega$. Ceci permet de considérer que le passage de l'état n à l'état $n+p$ correspond à « l'absorption » de p quanta d'énergie par le système. Cette façon de penser est en fait très féconde : ainsi l'étude des vibrations dans les solides conduit-elle à introduire la notion de phonon, qui se comporte comme des quasi-particules. De même, et de façon plus significative, la quantification du champ électromagnétique conduit à introduire les modes propres de ce champ, appelé « photons ».

Comme cela a déjà mis en évidence qualitativement, l'énergie de l'état fondamental est non nulle, avec $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$, appelé souvent « énergie du point zéro » de l'oscillateur. Il a déjà été montré que cette situation, très différente du cas classique, résulte de la relation d'incertitude de Heisenberg.

Détermination des états propres

Non-dégénérescence de l'état fondamental

En supposant que l'état fondamental est k -fois dégénéré, il est possible de poser $|0\rangle = |0, \lambda\rangle$ avec $\lambda = 1, 2, \dots, k$. Comme pour tout λ $\hat{a}|0, \lambda\rangle = 0$, il est possible de revenir à la définition

l'opérateur d'annihilation \hat{a} et de donner l'équation différentielle correspondante en représentation position que doivent satisfaire les fonctions d'onde $\psi_0^\lambda(x)$ pour tout k :

$$\frac{d\psi_0^\lambda}{dx} + \frac{m\omega}{\hbar} x \psi_0^\lambda(x) = 0 \quad (I-29)$$

Cette équation est aisément soluble par séparation des variables et abouti à une même fonction, à une constante (complexe en général) de normalisation près :

$$\psi_0(x) = C_0 \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right).$$

La normalisation de ce résultat, permet d'obtenir $C_0 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}$. Par suite, les solutions étant proportionnelles entre elles, l'état fondamental est non dégénéré.

Il est alors facile de voir que tous les états propres du hamiltonien sont non dégénérés : en effet si c'était le cas il serait possible à partir de deux états

$|n, 1\rangle$ et $|n, 2\rangle$ de même énergie E_n d'obtenir, par application à n reprises de l'opérateur d'échelle \hat{a} deux états fondamentaux dégénérés $|0, 1\rangle$ et $|0, 2\rangle$ distincts, ce qui est impossible du fait de la non-dégénérescence de l'état fondamental.

I.5.2 États propres de l'opérateur N

Une démonstration par récurrence utilisant l'opérateur de création de quantum de vibration montre que les états propres de $\hat{a}^+ \hat{a}$ s'écrivent :

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^+)^n |0\rangle.$$

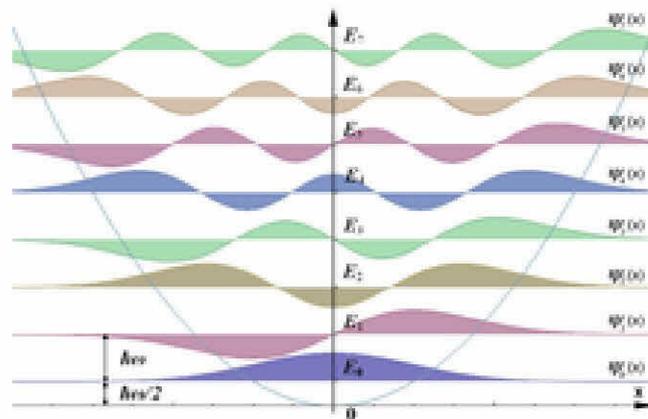


Figure I-3 :

Représentation des sept premiers niveaux d'énergie et des fonctions d'onde associées $\psi_n(x)$ de l'oscillateur harmonique quantique unidimensionnel.

En représentation position, il suffit de substituer l'expression de \hat{a} et de $\psi_0(x) = \langle x|0\rangle$ pour obtenir l'expression de la fonction d'onde $\psi_n(x) = \langle x|n\rangle$ sous la forme :

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \left(X - \frac{d}{dX}\right)^n \exp\left(-\frac{X^2}{2}\right) \quad \text{avec } X = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \text{ position réduite.}$$

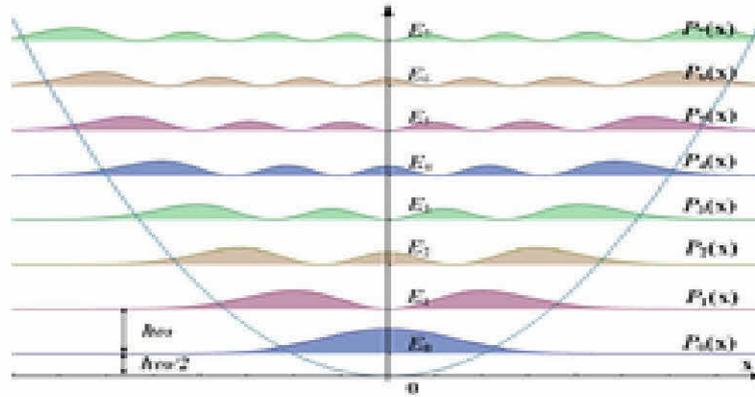


Figure I-4 :

Représentation similaire à la précédente, avec cette fois-ci les allures des densités de probabilité de présence $|\psi_n(x)|^2$ pour les premiers états d'énergie de l'oscillateur harmonique unidimensionnel.

En introduisant les polynômes d'Hermite $H_n(X)$ sous la forme dite « physique » définie par

$\exp\left(-\frac{X^2}{2}\right) H_n(X) = \left(X - \frac{d}{dX}\right)^n \exp\left(\frac{X^2}{2}\right)$ il est finalement possible d'obtenir l'expression générale de la fonction d'onde $\psi_n(x)$:

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right) \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right) \quad (\text{I-30})$$

Il est facile de vérifier que ces fonctions d'ondes sont orthogonales entre elles et normalisées à l'unité, en utilisant les relations d'orthogonalité des polynômes d'Hermite. Par ailleurs, la parité de la fonction d'onde $\psi_n(x)$ est celle de n .

Cette dernière relation nous permet de retrouver explicitement autant de fonctions d'ondes que nécessaire. Par exemple pour $n = 1$ il vient :

$$\psi_1(x) = \left(\frac{4}{\pi} \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^3\right)^{\frac{1}{4}} x \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{m\omega}{\hbar} x^2\right) \quad (\text{I-31})$$

I.6. Représentation matricielle

- La matrice représentative de l'hamiltonien \hat{H} sur la base des $|n\rangle$ est, par construction, diagonale.

On a

$$\hat{H} = \hbar\omega \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 + \frac{1}{2} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 2 + \frac{1}{2} & \dots \end{pmatrix} \quad (\text{I-32})$$

- Sachant que $\hat{a}^+|n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle$, en multipliant à gauche par $|k\rangle$ il vient

$$\hat{a}^+_{k,n} = \sqrt{n+1} \langle k|n+1\rangle = \sqrt{n+1} \delta_{k,n+1} \quad (\text{I-33})$$

La matrice représentative de \hat{a}^+ sur la base des $|n\rangle$ est donc

$$\hat{a}^+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \ddots \end{pmatrix} \quad (\text{I-34})$$

Puisque $\hat{a}_{n,k} = \hat{a}^+_{k,n}$, la matrice \hat{a} est construite en transposant \hat{a}^+ :

$$\hat{a} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \ddots \end{pmatrix} \quad (\text{I-35})$$

- Il est alors facile de construire les matrices représentatives des observables \hat{x} et \hat{p} puisque :

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \hat{X} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^+) \quad \text{et} \quad \hat{p} = \sqrt{\hbar m\omega} \hat{P} = -i \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} (\hat{a} - \hat{a}^+). \quad (\text{I-36})$$

Donc

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 1 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \ddots \end{pmatrix}$$

$$\hat{p} = \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 & \dots \\ i & 0 & -i\sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & i\sqrt{2} & 0 & -i\sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & i\sqrt{3} & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \ddots \end{pmatrix} \quad (\text{I-37})$$

- Les seuls éléments de matrices non nuls de ces opérateurs sont donc ceux pris entre les états $|n\rangle$ et $|n \pm 1\rangle$.

Les valeurs moyennes de la position et de l'impulsion sont nulles lorsque le système est dans un état propre $|n\rangle$.

I.7. Conclusion

L'étude de l'oscillateur harmonique d'une manière quantique nous conduit à déterminer les différentes énergies possibles ainsi que leurs fonctions d'ondes correspondantes. Le calcul de la variation des énergies d'une manière perturbative par effet d'une interaction d'un champ magnétique est l'objectif du deuxième chapitre.



CHAPITRE II

Oscillateur

Harmonique

Dans Un Champ

Magnétique

Oscillateur harmonique dans un champ magnétique

II.1 Introduction :

Avant de passer à étudier l'effet Zeeman d'une manière rigoureuse nous exposons une petite introduction qui traduit le rôle que jouerait la théorie des perturbations pour résoudre ce fameux problème qui parle de l'oscillateur harmonique dans un champ magnétique et qui détermine les énergies possibles, leurs corrections ainsi que les états fondamentales correspondant. Nous donnerons ici un bref aperçu:

II. 1. 1 Principe général

1. Position du problème

Pour pouvoir améliorer la précision sur le calcul des énergies, nous utilisons un traitement perturbatif des états électronique. Dans ce chapitre nous nous limiterons à la théorie des perturbations stationnaires pour des états non-dégénérés. Supposons que nous souhaitions améliorer la qualité de description d'un état ϕ dont nous connaissons une approximation raisonnable ϕ_0 d'énergie E_0 . L'idée de base de la théorie des perturbations consiste en la séparation de l'hamiltonien en :

$$H = H_0 + W \quad (\text{II-1})$$

où H_0 est un Hamiltonien que l'on sait diagonaliser et dont ϕ_p^0 est un état propre d'énergie E_0 .

$$H_0 |\phi_p^i\rangle = E_p^0 |\phi_p^i\rangle \quad (\text{II-2})$$

Notons de manière générale $\phi_p^i(r)$ les fonctions propres de H_0 et E_p leurs énergies propres associées.

et W une perturbation dont les éléments matriciels sont petits devant ceux de H_0 (ou plus précisément devant les différences d'éléments de matrice de H_0 comme cela sera précisé plus loin). Ainsi, l'effet de W est de "perturber légèrement" les valeurs propres de H_0 . Cette situation se rencontre, soit lorsque W correspond à une interaction contrôlée et de force variable (par exemple application d'un champ extérieur (électrique ou magnétique) sur l'atome, soit lorsque W est associé à un effet interne à l'atome (interaction spin-orbite par exemple).

La théorie des perturbations consiste à partir des états propres et valeurs propres de H_0 , à déduire une expression approchée des valeurs propres et états propres de H .

On suppose que H et W sont indépendants du temps ce qui mène à des perturbations stationnaires.

Pour exprimer clairement la petitesse des éléments de matrice de W devant ceux de H_0 , on introduit le paramètre sans dimension λ_0 où en exprimant W sous la forme :

$$W = \lambda_0 \widehat{W} \quad (\text{II-3})$$

avec $|\lambda_0| \ll 1$ et \widehat{W} opérateur d'éléments de matrice comparables à ceux de H_0 . L'introduction de ce paramètre λ_0 prend tout son sens dans le cas d'une perturbation liée à un champ extérieur de force variable. Nous verrons en fait que le résultat est indépendant de ce paramètre qui par contre permet de mieux séparer les différents ordres de perturbation.

2. Résolution approchée de l'équation aux valeurs propres :

La résolution de l'équation de Schrödinger par cette théorie repose sur le développement de ces valeurs propres $E(\lambda)$ et de ces kets propres $|\Psi(\lambda)\rangle$ en puissance par :

$$E(\lambda) = \sum_{q=0}^{\infty} \lambda^q \varepsilon_q \quad (\text{II-4})$$

$$|\Psi(\lambda)\rangle = \sum_{q=0}^{\infty} \lambda^q |q\rangle \quad (\text{II-5})$$

Et on cherche les corrections successives apportées à l'énergie $\lambda^q \varepsilon_q$ et aux états propres $\lambda^q |q\rangle$. Or, ces corrections sont plus petites, ce qui nous permet de procéder itérativement le processus en s'arrêtant lorsque la précision requise sera suffisante. L'équation aux valeurs propres n'est définie qu'à un facteur près. Nous imposerons $|\Psi(\lambda)\rangle$ d'être normé et que sa phase soit réelle et positive.

Alors en utilisant le fait que ces fonctions sont normalisées :

$$|\langle \Psi(\lambda) | \Psi(\lambda) \rangle|^2 = 1 \quad (\text{II-6})$$

Et en identifiant les ordres en λ , on obtient pour les ordres 0 et 1 :

$$\langle 0|0\rangle = 1 \quad (\text{II-7})$$

$$\langle 0|1\rangle + \langle 1|0\rangle = 0 \quad (\text{II-8})$$

Ce qui nous donne $\langle 0|1\rangle = 0$ (car $\langle 0|\Psi(\lambda)\rangle$ est réel).

En réécrivant maintenant l'équation de Schrödinger aux valeurs propres sous la forme :

$$[H_0 + \lambda \widehat{W}] \sum_{q=0}^{\infty} \lambda^q |q\rangle = \left(\sum_{q'=0}^{\infty} \lambda^{q'} \varepsilon_{q'} \right) \left(\sum_{q=0}^{\infty} \lambda^q |q\rangle \right) \quad (\text{II-9})$$

Et en égalisant les ordres entre les deux membres on obtient pour les termes d'ordre 0, 1, 2 et q en λ :

$$(H_0 - \varepsilon_0)|0\rangle = 0 \quad (\text{II-10})$$

$$(H_0 - \varepsilon_0)|1\rangle + (\widehat{W} - \varepsilon_1)|0\rangle = 0 \quad (\text{II-11})$$

$$(H_0 - \varepsilon_0)|2\rangle + (\widehat{W} - \varepsilon_1)|1\rangle - \varepsilon_2|0\rangle = 0 \quad (\text{II-12})$$

$$(H_0 - \varepsilon_0)|q\rangle + (\widehat{W} - \varepsilon_1)|q - 1\rangle - \varepsilon_2|q - 2\rangle \dots - \varepsilon_q|0\rangle \quad (\text{II-13})$$

L'état $|0\rangle$ est donc état propre de H_0 avec la valeur propre ε_0 qui est donc une des valeurs propres de H_0 .

II.2 Perturbation d'un niveau non dégénéré :

Considérons un niveau d'énergie non dégénéré de H_0 , d'énergie E_p^0 et état propre $|\varphi_p\rangle$.

Compte tenu de ce qui précède, on a :

$$\varepsilon_0 = E_p^0 \quad (\text{II-14})$$

$$|\varphi_p\rangle = |0\rangle \quad (\text{II-15})$$

II.3 Corrections de l'énergie au 1^{er} ordre

En projetant l'équation (II-11) d'ordre 1 sur $\langle \varphi_q^i |$

(avec $q \neq p$) on obtient :

$$\langle \varphi_q^i | (H_0 - \varepsilon_0) | 1 \rangle + \langle \varphi_q^i | (\widehat{W} - \varepsilon_1) | 0 \rangle = 0 \quad (\text{II-16})$$

ce qui nous donne

$$\langle \varphi_q^i | 1 \rangle = \frac{\langle \varphi_q^i | \widehat{W} | \varphi_p \rangle}{E_p^0 - E_q^0} \quad (\text{II-17})$$

On peut ainsi obtenir successivement les projections de $|1\rangle$ sur tous les états $\langle \varphi_q^i |$ possibles.

Il vient donc :

$$|1\rangle = \sum_{q \neq p} \sum_i \frac{\langle \varphi_q^i | \widehat{W} | \varphi_p \rangle}{E_p^0 - E_q^0} |\varphi_q^i\rangle$$

(II-18)

II.4 Corrections de l'énergie au 2nd ordre

On projette maintenant l'équation (II-12) d'ordre 2 sur, on obtient

$$\langle \varphi_p | (H_0 - \varepsilon_0) | 2 \rangle + \langle \varphi_p | (\widehat{W} - \varepsilon_1) | 1 \rangle - \varepsilon_2 \langle \varphi_p | | 0 \rangle = 0$$

(II-19)

Et en utilisant les mêmes relations vues précédemment:

$$\varepsilon_2 = \sum_{q \neq p} \sum_i \frac{|\langle \varphi_q^i | \widehat{W} | \varphi_p \rangle|^2}{E_p^0 - E_q^0}$$

(II-20)

L'effet du niveau E_q^0 est donc de "repousser" le niveau d'énergie E_p^0 . On remarque que pour un état fondamental, on a toujours $E_p^0 < E_q^0$ (pour tout q). La correction en énergie du 2nd ordre est donc toujours négative.

II.5 Bilan

En réécrivant l'ensemble des corrections trouvées, en remarquant que dans chaque terme il apparaît $\lambda \widehat{W}$ qui est égal à W une fois que l'on a substitué λ_0 à λ , on obtient:

$$E_p \simeq E_p^0 + \langle \varphi_p | W | \varphi_p \rangle + \sum_{q \neq p} \sum_i \frac{|\langle \varphi_q^i | \widehat{W} | \varphi_p \rangle|^2}{E_p^0 - E_q^0}$$

(II-21)

$$|\Psi_p\rangle \simeq |\varphi_p\rangle + \sum_{q \neq p} \sum_i \frac{\langle \varphi_q^i | W | \varphi_p \rangle}{E_p^0 - E_q^0} |\varphi_q^i\rangle$$

(II-22)

qui ne fait plus apparaître le paramètre λ introduit. On voit ici que les conditions de validité (ordres successifs d'importance décroissant suffisamment rapidement pour obtenir une convergence de la série) imposent la condition:

$$\langle \varphi_q^i | W | \varphi_p \rangle \ll E_p^0 - E_q^0 \quad (\text{II-23})$$

II.6 Perturbation d'un niveau dégénéré

La difficulté tient au fait que l'état $|0\rangle$, état propre de H_0 , n'est plus déterminé de façon unique. Il peut être égal à l'un quelconque des états $|\varphi_q^i\rangle$ ou à une combinaison linéaire de ceux-ci. C'est à dire qu'il appartient au sous-espace propre associé à E_p^0 que nous notons \mathcal{E}_p .

Le niveau E_p^0 dégénéré g_p fois ($(|\varphi_q^i\rangle, i=1, g_p)$ états propres de H_0) donne naissance, sous l'effet de la perturbation W à f_p énergies distinctes $1 \leq f_p \leq g_p$.

En projetant l'équation (1.9b) d'ordre 1 sur $\langle \varphi_q^i |$ on obtient :

$$\langle \varphi_q^i | \widehat{W} | 0 \rangle = \varepsilon_1 \langle \varphi_q^i | 0 \rangle \quad (\text{II-24})$$

puis en insérant une relation de fermeture:

$$\sum_q \sum_j \langle \varphi_p^i | \widehat{W} | \varphi_q^j \rangle \langle \varphi_q^j | 0 \rangle = \varepsilon_1 \langle \varphi_p^i | 0 \rangle \quad (\text{II-25})$$

Comme $|0\rangle \in \llbracket \mathcal{E} \rrbracket_p$, le produit scalaire $\langle \varphi_q^i | 0 \rangle$ n'est non nul que si $q = p$. Il reste donc

$$\sum_j \langle \varphi_p^i | \widehat{W} | \varphi_q^j \rangle \langle \varphi_q^j | 0 \rangle = \varepsilon_1 \langle \varphi_p^i | 0 \rangle \quad (\text{II-26})$$

Les éléments de matrice $\langle \varphi_q^i | \widehat{W} | \varphi_q^i \rangle$ sont en fait les éléments de matrice de la restriction de \widehat{W} au sous-espace propre \mathcal{E}_p que nous noterons \widehat{W}_p . L'ensemble des g_p equations (II-26) pour $i=1, g_p$ représente une équation aux valeurs propres dans \mathcal{E}_p . L'état $|0\rangle$ est donc un état propre de \widehat{W}_p . La résolution de l'équation aux valeurs propres :

$$\widehat{W}_p |0\rangle = \varepsilon_1 |0\rangle \quad (\text{II-27})$$

Nous donne donc simultanément les corrections, à l'ordre 1 de la théorie des perturbations, aux états propres et valeurs propres. On remarque donc que pour trouver l'ensemble des corrections à l'ordre 1 de la théorie des perturbations, il suffit de diagonaliser successivement les restrictions \widehat{W}_p à chacun des sous-espaces propres \mathcal{E}_p de H_0 . L'étape suivante consiste à prendre en compte les éléments non-diagonaux de W entre sous-espaces propres distincts de H_0 . On se trouvera alors dans la situation d'états non dégénérés. Dans la pratique, on pourra rencontrer des situations moins "tranchées" que les cas décrits ci-dessus ou plus précisément dans lesquelles la séparation entre H_0 et W n'est pas basé sur des considérations physiques, mais plutôt mathématiques. Par exemple, lorsqu'un ensemble est composé d'états couplés entre eux par une interaction comparable plus grande que leur écart, on peut retirer de H_0 la quantité correspondant à ces écarts d'énergie (que l'on place alors dans la perturbation) de manière à obtenir des états dégénérés pour H_0 . A l'inverse, il peut être intéressant (en terme de rapidité de convergence de la série de perturbation) de transférer vers H_0 la partie diagonale de W .

En conclusion, la théorie des perturbations stationnaires est très largement utilisée en Physique Atomique, notamment dans l'étude de l'hamiltonien de l'atome, dont les états sont fortement dégénérés. Ayant trouvé les énergies des configurations, on s'attachera à lever leur dégénérescence, et on obtiendra les "termes", puis les niveaux de structure fine. Enfin, si on plonge le système atomique dans des champs extérieurs, électrique (effet Stark) ou magnétique (effet Zeeman, Résonance magnétique, RMN, etc..), on pourra lever partiellement ou totalement la dégénérescence des niveaux pour obtenir les sous niveaux Zeeman, par exemple.

II.7 Effet Zeeman

L'effet Zeeman apparaît lorsqu'une source de lumière est soumise à un champ magnétique statique : les raies spectrales de cette source possèdent plusieurs composantes, chacune d'elles présentant une certaine polarisation. L'effet a été découvert par le physicien néerlandais Pieter Zeeman qui a reçu le prix Nobel de physique de 1902 pour cette découverte. Il existe deux types: l'effet Zeeman normal et l'effet Zeeman anormal.

L'effet Zeeman normal qui peut être décrit à l'aide d'un modèle semi-classique. Cela signifie que l'on considère l'électron comme une particule, orbitant de façon classique autour du noyau. Par contre, le moment angulaire est quantifié.

L'électron sur son orbite de rayon r et de vitesse v représente donc un courant électrique I exprimé par :

$$I = -e \cdot \frac{v}{2\pi r} \quad (\text{II-28})$$

Ce courant génère un moment magnétique :

$$\vec{\mu}_l = I \cdot \vec{S} = -ev \frac{r}{2} \cdot \hat{n} \quad (\text{II-29})$$

Le vecteur \vec{S} est perpendiculaire à l'aire comprise par l'électron sur son orbite. Le moment magnétique peut aussi être exprimé à l'aide du moment angulaire de l'électron :

$$\vec{\mu}_l = -\frac{e}{2m_e} \cdot \vec{l} \quad (\text{II-30})$$

En effectuant une comparaison avec la définition du moment angulaire :

$$\vec{l} = \vec{r} \times \vec{p} = m_e \cdot r \cdot v \cdot \hat{n} \quad (\text{II-31})$$

L'équation pour l'énergie potentielle dans un champ magnétique donne

$$E_{pot} = -\vec{\mu}_l \cdot \vec{B} \quad (\text{II-32})$$

$$E_{pot} = \frac{e}{2m_e} \cdot \vec{l} \cdot \vec{B} \quad (\text{II-33})$$

ce qui donne déjà la décomposition des raies spectrales.

Supposant que le champ magnétique pointe vers l'axe z, la quantification du moment angulaire ($l_z = m \cdot \hbar$) permet de simplifier l'équation :

$$E_{pot} = \frac{e \cdot \hbar}{2m_e} m \cdot B = \mu_B \cdot m \cdot B \quad (\text{II-34})$$

où m est le nombre quantique magnétique et μ_B le magnéton de Bohr.

II.8 L'hamiltonien du système

Essayons maintenant de réécrire notre nouveau hamiltonien sous une forme simplifiée :

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2 - g\mu_B \vec{S}\vec{B} \quad (\text{II-35})$$

Où l'hamiltonien de l'oscillateur harmonique est :

$$H_{oscillateur} = \hbar\omega \left(aa^+ + \frac{1}{2} \right) \quad (\text{II-36})$$

Et $-g\mu_B \vec{S}\vec{B}$ est l'interaction champ magnétique-spin.

Essayons maintenant de réécrire ce nouveau hamiltonien dans une base commune définie par les kets propres :

$$H|\psi\rangle = \left(\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2 - g\mu_B \vec{S}\vec{B} \right) |\psi\rangle \quad (\text{II-37})$$

$$H|\psi\rangle = \left(\hbar\omega \left(aa^+ + \frac{1}{2} \right) - g\mu_B \vec{S}\vec{B} \right) |\psi\rangle \quad (\text{II-38})$$

$$H|\psi\rangle = \left[\hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) - g\mu_B B_z \frac{1}{2} \hbar \right] |\psi\rangle \quad (\text{II-39})$$

Les corrections possibles attribuées aux énergies s'écrivent comme :

$$\Delta E_0 = E_0 - g\mu_B B_z \frac{1}{2} \hbar \quad (\text{II-40})$$

Avec $E_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega$ est l'énergie de l'état fondamental.

Ce qui nous permettra de déduire une nouvelle expression :

$$\Delta E_n = E_n - g\mu_B B_z \frac{1}{2} \hbar \quad (\text{II-41})$$

II.9 Conclusion

Maintenant nous arrivons à la partie où nous avons des équations théoriques spécifiant la théorie des perturbations accessibles aux calculs numériques, nous allons nous concentrer à convertir tout ce que nous avons vu aux chapitres précédents à des équations numériques qui est l'objectif du troisième chapitre.



CHAPITRE III

Résolutions

Et Discussions

Résultats et discussions

III.1 Introduction

Nous arrivons maintenant à la partie la plus importante de notre travail où nous allons convertir tout ce que nous avons vu aux chapitres I et II comme équations théoriques, aux équations numériques accessible aux calculs.

Nous commencerons par la résolution de l'équation unidimensionnel :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 - g\mu_B S_z B_z - E \right] \psi(x) = 0 \quad (\text{III}_1)$$

Résoudre (III-1) numériquement revient à construire un organigramme de calcul inspirés par un programme écrit en fortran qui repose sur la méthode d'Euler décrite comme suit :

III.2 Méthode d'Euler

Pour résoudre numériquement l'équation de Schrödinger, il semble pertinent d'appliquer la méthode de discrétisation de l'espace et des opérateurs. Sous les hypothèses que $\Psi(\mathbf{x})$ est au moins de classe C^2 , un développement de Taylor nous permet d'écrire les deux égalités suivantes :

$$\Psi(x+h) - \Psi(x) = h \frac{d\Psi}{dx}(x) + \frac{h^2}{2!} \frac{d^2\Psi}{dx^2}(x) \quad (\text{III}_2)$$

$$\Psi(x-h) - \Psi = -h \frac{d\Psi}{dx}(x) + \frac{h^2}{2!} \frac{d^2\Psi}{dx^2}(x) + O(h^3) \quad (\text{III}_3)$$

Le somme de ces deux égalités :

$$\frac{\Psi(x+h) + \Psi(x-h) - 2\Psi(x)}{h^2} = \frac{d^2\Psi}{dx^2}(x) + O(h^2) \quad (\text{III}_4)$$

Apparaît alors équivalent discret de l'opérateur Δ (à une dimension, mais le cas à trois dimensions s'en déduit aisément). La précision de cette expression est en $O(h^2)$.

En discrétisant l'espace d'un pas "h" et en injectant le résultat précédent dans l'équation de Schrödinger, il vient :

$$\frac{\Psi(x+h) + \Psi(x-h) - 2\Psi(x)}{h^2} + f(x)\Psi(x) = 0 \quad (\text{III}_5)$$

$$\Psi(x+h) + \Psi(x-h) - 2\Psi(x) + h^2 f(x)\Psi(x) + O(h^4) = 0 \quad (\text{III}_6)$$

Cette équation peut être réécrite de façon à faire apparaître une relation de récurrence entre les valeurs de Ψ aux nœuds du maillage. Le pas de la discrétisation est fixé à h et l'origine est définie par le point O.

La fonction d'onde discrète s'écrit alors $\Psi_n = \Psi(nh)$ avec n un entier. De même, $f_n = f(nh)$. En ces termes, l'équation s'écrit :

$$\Psi_{n+1} = [1 - h^2 f_n] \Psi_n - \Psi_{n-1} + O(h^4) \quad (\text{III}_7)$$

Le potentiel V étant à support compact il existe M tel que V soit nul ($V = 0$) pour $x < 0$ et $x > M$ (quitte à redéfinir le point O). Les solutions sur ces parties où le potentiel est nul ($V = 0$) sont connues : ce sont des ondes planes de la forme : pour $k = \sqrt{cE}$

$$\Psi(x < 0) = e^{ikx} + B e^{-ikx} \quad (\text{III}_8)$$

$$\Psi(x > M) = C e^{ikx} \quad (\text{III}_9)$$

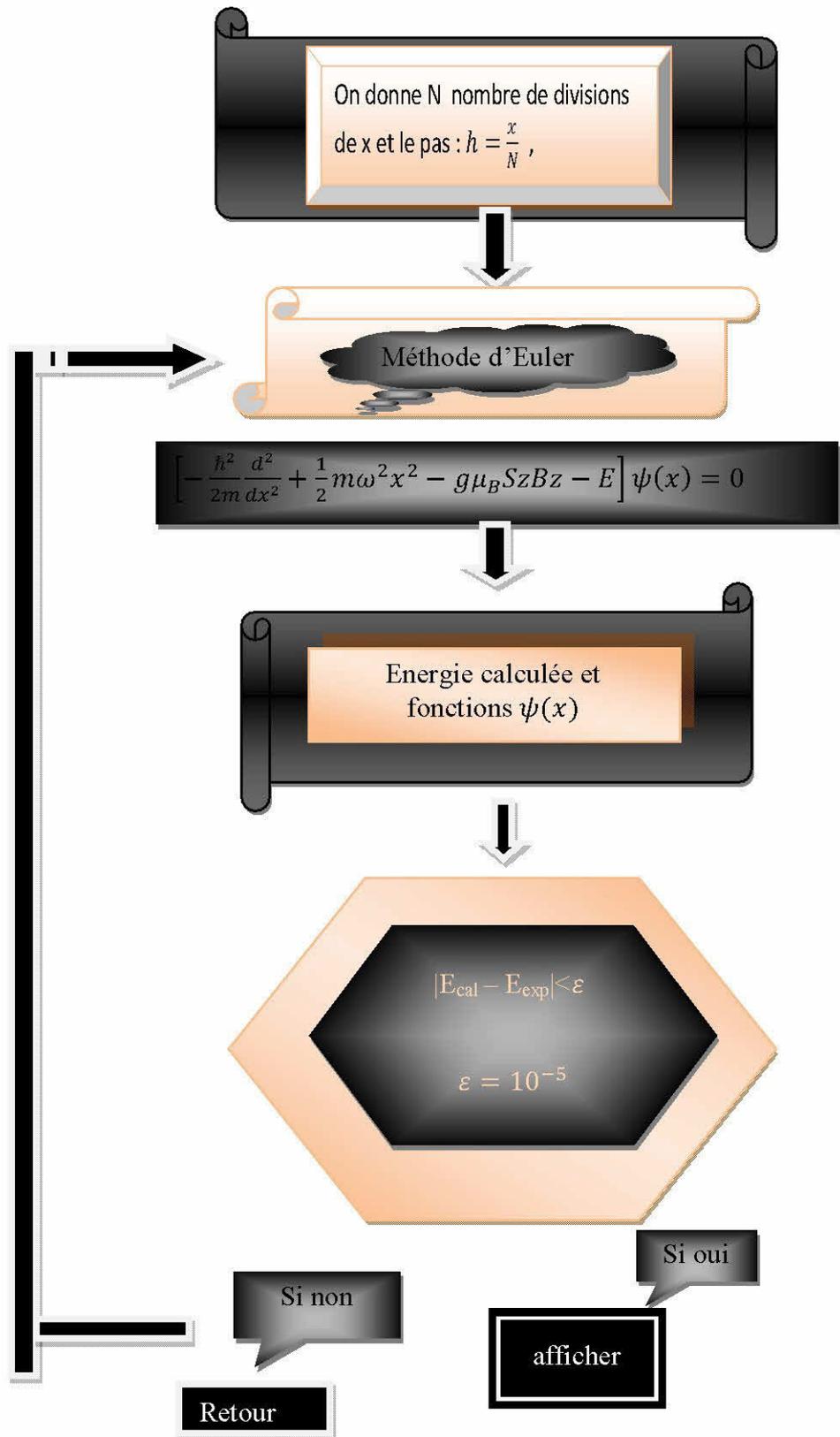
à un terme complexe A près qui n'est pas intéressant ici (ainsi B est directement le coefficient de réflexion en amplitude et C celui de transmission en amplitude).

Lors de la résolution numérique, l'algorithme débute à $x = -2h$. La connaissance des deux premières valeurs de Ψ_n (il s'agit de l'onde plane écrite précédemment) permet d'initier la récurrence qui donne accès à tous les Ψ_n .

Une fois que l'algorithme arrive à $x = M$, il renvoie la valeur de C (le coefficient de transmission en amplitude) et refait les calculs dans le sens inverse (par symétrie la formule est la même) une fois revenue à $x = 0$, il renvoie une nouvelle valeur de B .

Pour la bonne valeur de B , la distance entre le complexe d'entrée et celui de sortie est nulle. Il est donc nécessaire de faire appel à un autre algorithme qui va chercher le minimum de la fonction qui prend B comme argument et qui renvoie la distance (au carré) entre le complexe B d'entrée et celui de sortie.

III.3 Organigramme de calcul



Dans un premier temps on résout l'équation de Schrödinger relatif à l'oscillateur harmonique ou on connaît ces solutions, puis en deuxième étape nous écrivons notre nouvelle solution avec l'ajout de la perturbation comme une combinaison linéaire des fonctions de base de l'oscillateur harmonique et nous déterminerons les nouvelles solutions ainsi que leurs énergies correspondantes et par conséquent les décalages induites par l'ajout de cette perturbation on dit ici que ces nouveaux d'énergies sont clivés.

III.4 Détermination des fonctions de bases

Les fonctions de base sont déterminées par l'application de l'opérateur d'annihilation et de création agissant sur un espace de Fock sur l'état fondamental

III.5 Déterminations des nouvelles fonctions

Les fonctions de base sont déterminées par l'application de l'opérateur d'annihilation et de création agissant sur un espace de Fock sur l'état fondamental La détermination des nouvelles fonctions solution de l'équation de Schrödinger pour ce système repose sur le facteur interaction qui est traduit par l'ajout du spin. Ce fameux facteur responsable de l'interaction d'ou l'effet Zeeman. Les niveaux d'énergies ainsi déterminées présentent un décalage par rapport aux niveaux d'énergie en absence de perturbation ce qui nous permet de dire qu'il y a un clivage des niveaux. Comme première détermination on trouve les fonctions ou on présente que la première fonction dont la figure III. 2 donne toute les informations possibles.

III.5.1 Potentiel harmonique

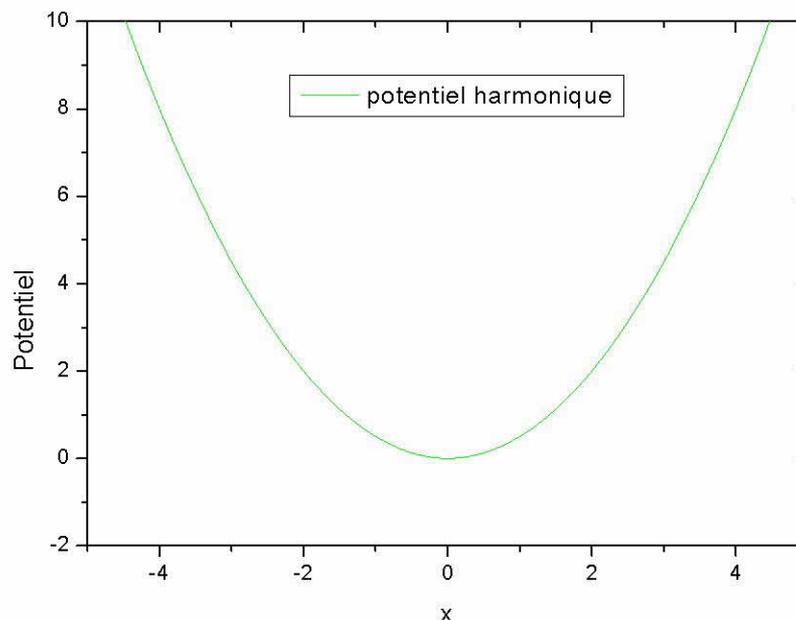


Figure III.1: Présentation du potentiel harmonique

On remarque d'après cette figure que le potentiel a la forme d'une parabole répondant bien à la formule théorique déjà vue précédemment.

III.5.2 fonction d'onde

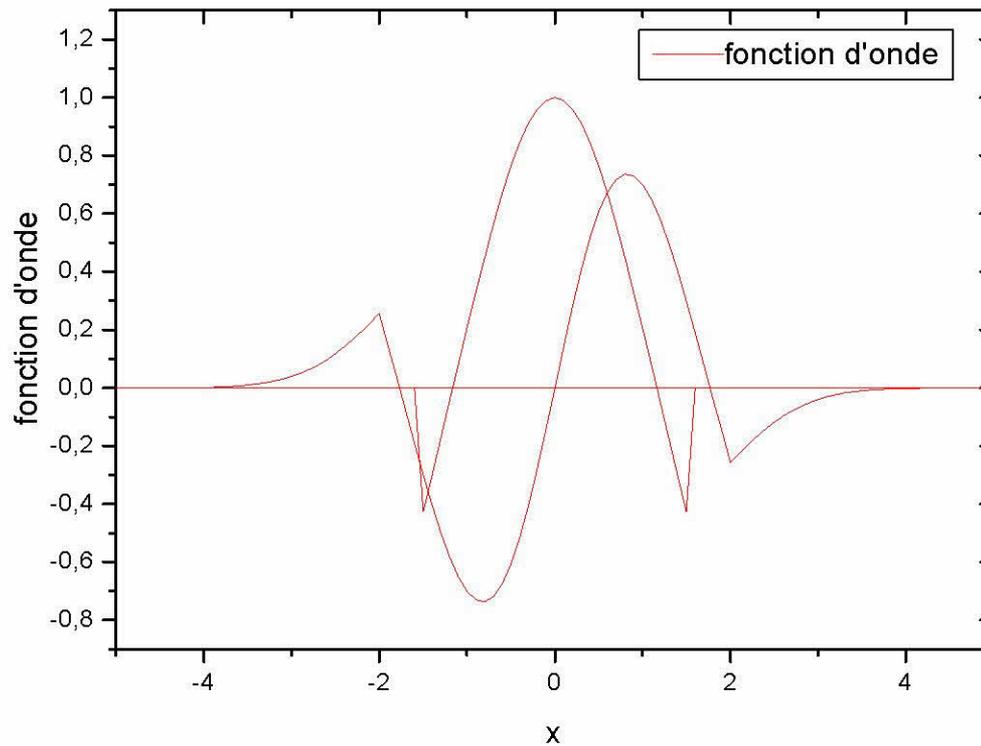


Figure III.2: Présentation de la fonction d'onde

La figure 2 montre la variation de la fonction d'onde via la distance x . On remarque bien que cette fonction présente des oscillations autour de l'origine correspondant alors au mouvement harmonique de l'électron autour du noyau.

III.5.3 La densité

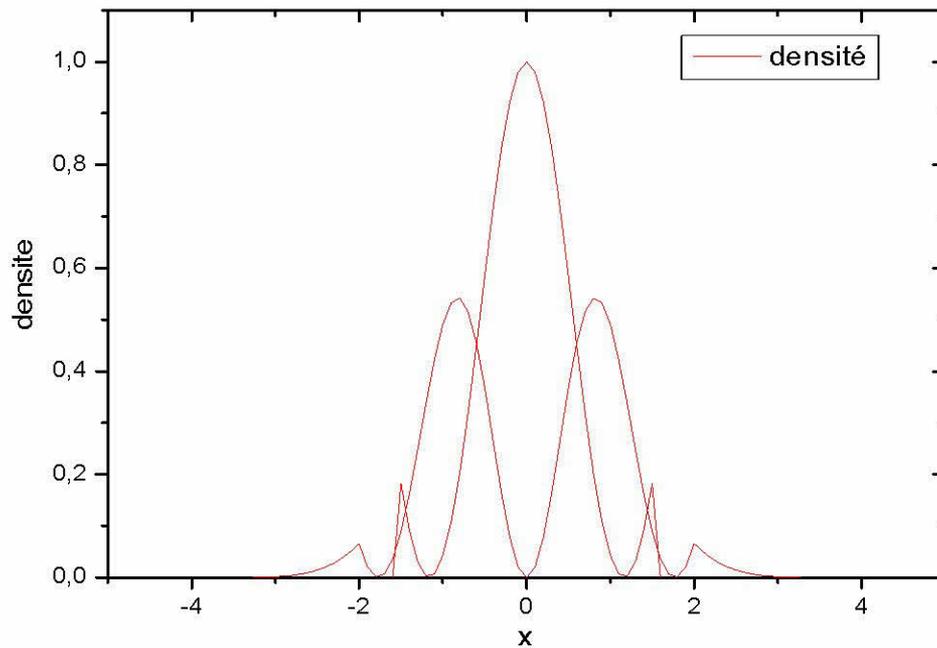


Figure III.3: Présentation de la densité

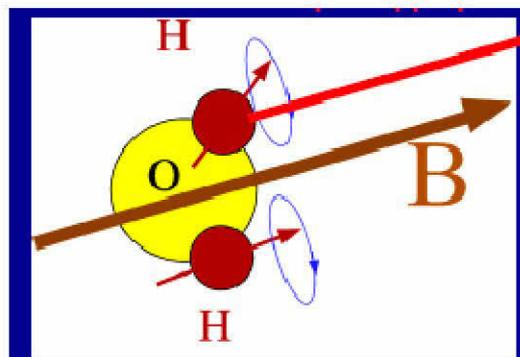
D'après cette figure 2 on peu dire que la densité présente un maximum au point d'abscisse zéro nommé centre du piège potentiel pratiquement nul.

Application

Comme première application on trouve l'imagerie par RMN dont le processus est indiqué comme :

L'observation statique ou dynamique d'un cerveau repose sur l'aspect suivant, on mouille la tête d'un patient avec un peu d'eau ce qui laisse les atomes d'H d'acquérir une structure magnétique à deux niveaux, séparés par un intervalle proportionnel à B qui s'écrit comme :

$$E_{\text{emise}} - E_{\text{frequence}} = h\nu_{\text{radiofrequence}}$$



La diffusion de radiofréquences de fréquence variable dans un champ magnétique inhomogène permet de cartographier l'intérieur du corps.



Image correspondant à un cerveau

Cette observation nous permet d'analyser l'état statique et dynamique du cerveau toute en se basant sur l'effet de la résonance.

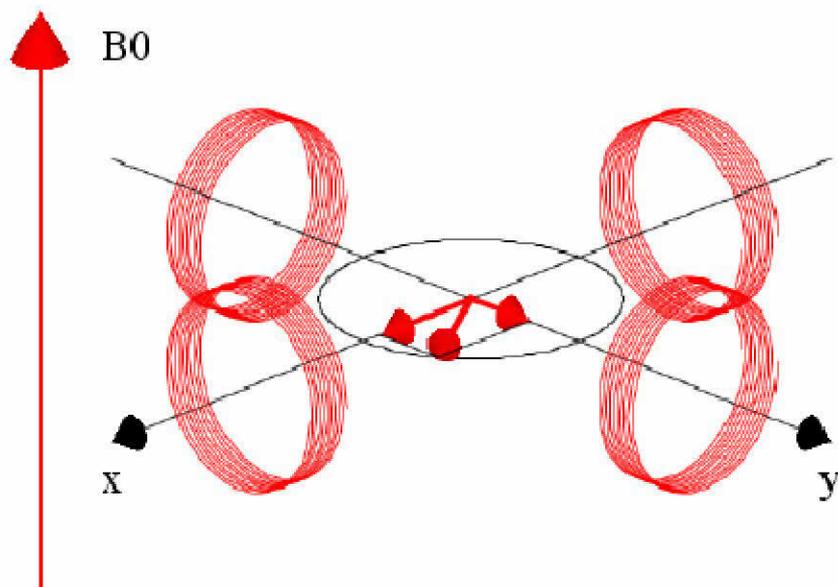


Image présentant l'oscillation du champ magnétique

III.6 Application en astrophysique

En astrophysique, une des premières applications de l'effet Zeeman a été la découverte, par George et al. en 1908, des champs magnétiques intenses associés aux taches solaires. Horace W. Babcock est parvenu en 1947 à étendre ce type de mesure sur des étoiles autres que le Soleil. Aujourd'hui, la mesure du champ magnétique solaire est effectuée quotidiennement, via l'effet Zeeman, par des instruments embarqués sur satellite. Par ailleurs, la mesure de l'effet Zeeman permet de calculer l'intensité des champs magnétiques de notre Galaxie.

III.7. Conclusion

Dans ce chapitre nous avons calculés numériquement les fonctions d'ondes ainsi que leurs énergies possibles pour un oscillateur harmonique à 1 dimension en se basant sur la méthode d'Euler. Nous avons considérées l'interaction avec un champ magnétique comme étant une perturbation qui clive les énergies dont l'écart est fonction du champ magnétique. Nous passerons maintenant à vous donner une petite conclusion qui sera In Chaâ El Lah le fruit de notre étude de License.

Conclusion générale

Ce travail entre dans le cadre de préparation d'un diplôme de licence LMD option physique son titre intitulé : **Atome et lumière**

Ou on a assimilé l'atome ici comme un oscillateur harmonique c'est à dire que l'électron est lié au noyau a travers un ressort de raideur k et le faite quand a plongé l'atome dans un champ magnétique ça revient à étudier toute les interactions possibles induites par la lumière ce qui nous permet de dire que ce processus définit l'interaction atome-lumière qui présente l'un des actes principales du monde tel que nous le percevons depuis l'origine du temps jusqu'à la découverte des lois quantiques qui régissent leurs interactions.

Cette étude nous a aidés à développer nos équations théoriques et de déduire l'impact physique qui se résume sur l'application de ce processus à notre vie quotidienne. Il s'agit de décrire quantitativement les modifications apportés par cette perturbation quant ce système est soumis à un champ magnétique. D'ailleurs comme conséquence de ce que nous avons fait on trouve l'imagerie par résonance magnétique nucléaire, le laser ...etc.

Nous espérons que nous avons bien étudié les atomes et leurs interactions avec la lumière en les faisant danser pour pouvoir exploiter un jour la logique quantique pour mieux communiquer et calculer.

Référence :

- D. Blokintsev, Principes de mécanique quantique, éditions Mir, Moscou, 1981.
- J.M. Lévy-Leblond, F. Balibar, Quantique. Rudiments, Inter-Editions, Paris, 1984.
- Cl. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloe, Mécanique quantique, tomes I & II, Hermann, 1980.
- E. Merzbacher, Quantum Mechanics, John Wiley, 3rd ed., 1998.
- S. Gasiorowicz, Quantum Physics, John Wiley, 1997.
- L.D. Landau, E.M. Lifshitz, Quantum Mechanics, Pergamon Press, 3rd ed., 1981.
- V.K. Thankappan, Quantum Mechanics, John Wiley, 2nd ed., 1993.
- A.B. Wolbarst, Symmetry and Quantum Mechanics, Van Nostrand Reinhold Comp., 1977.
- W. Louisell, Radiation and noise in Quantum Electronics, McGraw-Hill, 1964.
- A.Z. Capri, Nonrelativistic Quantum Mechanics, Benjamin/Cummings, 1985.
- J.J. Sakurai, Modern Quantum Mechanics, Benjamin/Cummings, 1985.
- W. Greiner, B. Müller, Quantum Mechanics, vol. I & II, Hermann, 1980.
- T. Fließbach, Quantenmechanik, Spektrum Akademischer Verlag, 1995.
- R.W. Robinett, Quantum Mechanics, Oxford University Press, 1997.
- M.q.p 1383-Aslangul-claude Deboeck.
- P.180Duraau D.EMq.Masson.