Mécanique Quantique I, Corrigé 3

Assistants : joseph.saliba@epfl.ch & pierre.lugan@epfl.ch

Exercice 1 : Effet Compton relativiste

Notons l'énergie, respectivement la quantité de mouvement, du photon par E_1 et $\vec{p}_1$. De manière analogue, l'électron est décrit par E_2 et $\vec{p}_2$. Après la diffusion du photon par l'électron ces quantités sont notées : E_1', E_2', $\vec{p}_1^{\,'}$ et $\vec{p}_2^{\,'}$.

La conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement s'écrivent alors

$$\begin{cases} E_1 + E_2 = E_1' + E_2' \\ \vec{p}_1 + \vec{p}_2 = \vec{p}_1^{\,'} + \vec{p}_2^{\,'} \end{cases} \tag{1}$$

où $E_1 = |\vec{p}_1|c = h\nu$ et $E_2 = \sqrt{|\vec{p}_2|^2c^2 + m_e^2c^4} = m_ec^2$. Après la diffusion, on a de même $E_1' = |\vec{p}_1^{\,'}|c = h\nu'$ et $E_2' = \sqrt{|\vec{p}_2'|^2c^2 + m_e^2c^4}$.

La conservation de l'énergie s'écrit donc :

$$h(\nu - \nu') + m_ec^2 = \sqrt{|\vec{p}_2'|^2c^2 + m_e^2c^4} \tag{2}$$

La conservation de la quantité de mouvement projetée sur $\hat{e}_x$ et $\hat{e}_y$ donne :

$$\begin{aligned} \frac{h\nu}{c} &= \frac{h\nu'}{c}\cos\theta + |\vec{p}_2^{\,'}|\cos\psi \\ 0 &= \frac{h\nu'}{c}\sin\theta - |\vec{p}_2^{\,'}|\sin\psi \end{aligned} \tag{3}$$

De ces deux dernières équations, on tire aisément $|\vec{p}_2^{\,'}|^2$:

$$|\vec{p}_2^{\,'}|^2 = \left(\frac{h\nu}{c} - \frac{h\nu'}{c}\cos\theta\right)^2 + \left(\frac{h\nu'}{c}\right)^2 \sin^2\theta \tag{4}$$

En égalant avec la valeur de $|\vec{p}_2^{\,'}|^2$ trouvée par conservation de l'énergie on trouve sans difficulté

$$\lambda' - \lambda = \frac{h}{m_ec}(1 - \cos\theta) \tag{5}$$

On trouve bien que si $\theta = 0$, la fréquence n'est pas modifiée et $\vec{p}_2' = \vec{p}_2$. En effet, le photon n'intéragissant pas avec l'électron, il n'y a aucune raison que son énergie soit modifiée !

Exercice 2 : Atome d'hydrogène en mécanique classique

L'énergie cinétique de l'électron est donnée par son mouvement autour du proton. Puisque la perte d'énergie par radiation est petite par rapport à l'énergie de l'électron, l'orbite peut être approximée par une orbite circulaire de rayon $r(t)$ qui, à cause de la radiation, va lentement diminuer.

1. Pour un mouvement circulaire uniforme l'énergie cinétique est donnée par

$$T(r) = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}m\omega^2r^2 \tag{6}$$

La pulsation ω s'obtient aisément en faisant le bilan des forces en jeu : l'interaction électromagnétique est responsable de l'accélération et donc $e^2/4\pi\epsilon_0r^2 = ma = mv^2/r = m\omega^2r$, on trouve donc finalement

$$T(r) = \frac{1}{8\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{r} \tag{7}$$

2. La puissance rayonnée est fonction de l'accélération. Pour un mouvement circulaire on a $a = v^2/r = \omega^2 r$. On trouve donc

$$W(r) = \frac{2}{3}\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{c^3}a^2 = \frac{2}{3}\left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\right)^3 \frac{e^6}{m^2c^3r^4} \tag{8}$$

3. Le temps de vie classique d'un atome d'hydrogène, dont le rayon initial est r_0=0.5Å, est estimé par :

$$\tau \approx \frac{T(r_0)}{W(r_0)} = \frac{3}{4}(4\pi\epsilon_0)^2\frac{m^2c^3r_0^3}{e^4} \simeq 3.95\cdot 10^{-11}\,\mathrm{s} \tag{9}$$

Comme le temps de vie classique de l'atome d'hydrogène est bien plus court que l'âge de l'Univers qui est d'environ $14\cdot 10^9$ années, soit environ $4.4\cdot 10^{17}$ s, nous sommes forcés d'abandonner cette théorie dans le domaine microscopique. En effet, l'hydrogène s'étant formé dans les 3 premières minutes après le Big Bang et étant encore présent aujourd'hui, l'âge de l'Univers représente donc une sous-estimation du temps de vie de l'hydrogène.

4. Le nombre de tours avant que l'éléctron s'écrase sur le proton est

$$N = \frac{\tau}{2\pi/\omega} = \frac{3}{8\pi}(4\pi\epsilon_0)^{3/2}\frac{m^{3/2}c^3r^{3/2}}{e^3} \simeq 2.8\cdot 10^5 \tag{10}$$

Comme $N \gg 1$, il est possible de considérer le mouvement de l'éléctron comme quasi circulaire (rappel : en l'absence totale de pertes, le mouvement lié le plus général de deux corps en interaction coulombienne ou gravitationnelle est elliptique ; ce sont les conditions initiales du mouvement qui déterminent l'excentricité du mouvement ; on a supposé dans l'énoncé que ces conditions initiales sont telles que le mouvement sans rayonnement de freinage serait circulaire).

5. Montrons maintenant le théorème du viriel. Celui-ci montre qu'il existe une relation simple entre les moyenne temporelles de l'énergie cinétique et de l'énergie potentielle dans le cas d'un potentiel homogène de type $V(x) = \alpha x^n$ et où le terme cinétique est quadratique dans les vitesses.

   (a) Le Lagrangien du système est donné par :

   $$\mathcal{L} = T(\dot{x}^2) - V(x) = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - \alpha x^n \tag{11}$$

   Le terme cinétique étant quadratique dans les vitesses, on a

   $$2T = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{x}}\,\dot{x} = p\,\dot{x} = \frac{d}{dt}(p\,x) - \dot{p}\,x \tag{12}$$

   (b) La moyenne temporelle sur une orbite de durée τ est définie par

   $$\langle 2T\rangle \equiv \frac{1}{\tau}\int_0^\tau 2T\,dt = \frac{1}{\tau}\left(p\,x\Big|_0^\tau - \int_0^\tau \dot{p}\,x\,dt\right) = -\langle\dot{p}\,x\rangle \tag{13}$$

   En effet le premier terme s'annule par périodicité du mouvement.

   (c) Les équations du mouvement donnent :

   $$x\,\dot{p} = -x\,\frac{\partial H}{\partial x} = -x\,\frac{\partial V}{\partial x} = -n\,V, \tag{14}$$

   où $H = H(x,p) = \frac{p^2}{2m} + V(x)$ est le hamiltonien. En combinant avec le résultat précédent on trouve finalement :

   $$\boxed{\langle T\rangle = \frac{n}{2}\langle V\rangle} \tag{15}$$

6. Dans notre cas, le théorème du viriel donne $\langle T\rangle = -\frac{1}{2}\langle V\rangle$. Sur une orbite, r est approximativement constant et l'on a $\langle V\rangle = -e^2/4\pi\epsilon_0 r = V(r)$. L'énergie $E(r)$ définie par $E(r) = T(r) + V(r)$ est alors donnée pour un rayon r par :

$$E(r) = \frac{1}{2}\langle V\rangle = -\frac{1}{2}\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{r} \tag{16}$$

7. La puissance rayonnée à un rayon r est donnée par $W(r)$, l'équation différentielle régissant la perte d'énergie de l'électron est donc :
$$\frac{dE}{dt} = -W \tag{17}$$
En injectant le résultat (8) pour W dans l'équation précédente, on trouve :
$$-\frac{2}{3}\left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\right)^3 \frac{e^6}{m^2c^3r^4} = \frac{dE}{dt} = \frac{dE}{dr}\,\dot{r} = \frac{1}{2}\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{r^2}\,\dot{r} \tag{18}$$
et l'équation différentielle à résoudre s'écrit donc :
$$\frac{dr}{dt} = -\frac{4}{3}\left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \frac{e^4}{m^2c^3r^2} \qquad \to \qquad r^2dr = -\frac{4}{3}\left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \frac{e^4}{m^2c^3}dt \tag{19}$$
La solution est immédiate :
$$\boxed{r^3(t) = r_0^3 - 4\left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \frac{e^4}{m^2c^3}t} \tag{20}$$
En évaluant
$$r(2\pi/\omega) - r_0 = \left(r_0^3 - 4\left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \frac{e^4}{m^2c^3}\frac{2\pi}{\omega}\right)^{1/3} - r_0 = r_0\left(1-\frac{3}{N}\right)^{1/3} - r_0 \simeq -\frac{r_0}{N} \ll r_0 \tag{21}$$
on vérifie à nouveau que l'hypothèse du mouvement quasi circulaire est une bonne approximation.

Exercice 3 : Vitesse de groupe

1. La vitesse de phase est définie par $Et - px =$ cte. Par exemple
$$Et - px = 0 \tag{22}$$
d'où
$$\frac{x}{t} = v_{\text{phase}} = \frac{E}{p} \tag{23}$$
donc
$$v_{\text{phase}} = \frac{m_0\gamma c^2}{m_0\gamma v} = \frac{c^2}{v} > c \tag{24}$$
C'est une vitesse plus grande que la vitesse de la lumière c. Elle ne peut donc pas être la vitesse de la particule.
Il est intéressant de remarquer que, aussi dans le cas non relativiste, v_{phase} n'est pas la bonne définition de la vitesse.
$$\begin{aligned} E &= \frac{p^2}{2m} \\ \frac{E}{p} &= \frac{p}{2m} = \frac{v}{2} \neq v \end{aligned} \tag{25}$$

2. Calculons directement $\langle\vec{r}\rangle(t)$; les composantes $\langle x\rangle(t) = \langle\vec{r}\rangle(t).\vec{e}_x$ etc. en découlent immédiatement.
$$\psi(\vec{r},t) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^{3/2}} A(\vec{k}) e^{i(\vec{k}.\vec{r}-\omega_{\vec{k}}t)} \tag{26}$$
$$\begin{aligned} \langle\vec{r}\rangle(t) &= \int d^3r\,\vec{r}|\psi(\vec{r},t)|^2 \\ &= \int d^3r \int\int \frac{d^3k_1}{(2\pi)^{3/2}}\frac{d^3k_2}{(2\pi)^{3/2}} A^*(\vec{k}_1)A(\vec{k}_2)\,\vec{r}\,e^{i(\vec{k}_2-\vec{k}_1)\vec{r}}e^{-i(\omega_{\vec{k}_2}-\omega_{\vec{k}_1})t} \end{aligned} \tag{27}$$

Pour absorber le facteur $\vec{r}$ présent dans l'intégrande et exprimer la position moyenne en fonction de la collection d'amplitudes complexes $A(\vec{k})$, qui définissent entièrement le paquet d'onde $\psi(\vec{r},t)$ à tout instant t, on remarque que

$$\vec{r}e^{i(\vec{k}_2-\vec{k}_1).\vec{r}} = -i\nabla_{\vec{k}_2} e^{i(\vec{k}_2-\vec{k}_1).\vec{r}} = -ie^{-i\vec{k}_1.\vec{r}}\nabla_{\vec{k}_2} e^{i\vec{k}_2.\vec{r}}, \tag{28}$$

qui est juste la généralisation tridimensionnelle de l'égalité $x\exp[i(k_x-k'_x)x] = -i\partial_{k_x}\exp[i(k_x-k'_x)x]$. On a donc

$$\langle\vec{r}\rangle(t) = -i\int d^3r \int \frac{d^3k_1}{(2\pi)^{3/2}}\,A^*(\vec{k}_1)\,e^{-i(\vec{k}_1.\vec{r}-\omega_{\vec{k}_1}t)}\int \frac{d^3k_2}{(2\pi)^{3/2}}\,A(\vec{k}_2)e^{-i\omega_{\vec{k}_2}t}\nabla_{\vec{k}_2} e^{i\vec{k}_2.\vec{r}} \tag{29}$$

L'intégrale sur $\vec{k}_2$ se calcule par parties :

$$\int \frac{d^3k_2}{(2\pi)^{3/2}}\,A(\vec{k}_2)\,e^{-i\omega_{\vec{k}_2}t}\nabla_{\vec{k}_2} e^{i\vec{k}_2.\vec{r}} = \int_{S_\infty} A(\vec{k}_2)\,e^{-i\omega_{\vec{k}_2}t}e^{i\vec{k}_2.\vec{r}}d\vec{S} - \int \frac{d^3k_2}{(2\pi)^{3/2}}\,\nabla_{\vec{k}_2}\left(A(\vec{k}_2)\,e^{-i\omega_{\vec{k}_2}t}\right)e^{i\vec{k}_2.\vec{r}}, \tag{30}$$

où S_∞ représente une surface "à l'infini" (par exemple une sphère de rayon k_2 dans la limite $k_2\to\infty$). Si cette généralisation multidimensionnelle de l'intégration par parties vous intrigue, pensez au théorème de Gauss, qui relie le flux d'un champ vectoriel $\vec{F}$ à travers une surface close à l'intégrale volumique de la divergence de $\vec{F}$ sur le volume enfermé : $\int_V \vec{\nabla}.\vec{F} = \int_{S=\partial V}\vec{F}.d\vec{S}$; pour une fonction scalaire f, on en déduit

$$\int_V \vec{\nabla} f = \int_{S=\partial V} f d\vec{S}, \tag{31}$$

puisque pour tout vecteur constant $\vec{n}_0$, on a $\vec{\nabla}.(f\vec{n}_0) = (\vec{\nabla}f).\vec{n}_0 + f\vec{\nabla}.\vec{n}_0 = (\vec{\nabla}f).\vec{n}_0$, et que le théorème de Gauss appliqué à $\vec{F} = f\vec{n}_0$ implique $\left(\int_V \vec{\nabla}f - \int_{S=\partial V} f d\vec{S}\right).\vec{n}_0 = 0$. Dans notre cas, nous appliquons le résultat (31) à

$$f = f(\vec{k}_2) = A(\vec{k}_2)\,e^{-i\omega_{\vec{k}_2}t}e^{i\vec{k}_2.\vec{r}} \tag{32}$$

$$\vec{\nabla}_{\vec{k}_2} f = \vec{\nabla}_{\vec{k}_2}\left(A(\vec{k}_2)\,e^{-i\omega_{\vec{k}_2}t}\right)e^{i\vec{k}_2.\vec{r}} + A(\vec{k}_2)\,e^{-i\omega_{\vec{k}_2}t}\vec{\nabla}_{\vec{k}_2} e^{i\vec{k}_2.\vec{r}}, \tag{33}$$

ce qui donne l'équation (30) dans la limite où V devient le volume infini $\mathbb{R}^3$. On peut montrer que la transformée de Fourier d'une fonction de L^1 (c'est-à-dire de valeur absolue intégrable) s'annule à l'infini ; de façon générale, nous allons toujours supposer que c'est aussi le cas des transformées de Fourier des fonctions de L^2 (carré sommable) que nous rencontrerons, telle que les fonctions d'onde $\psi(\vec{r},t)$. Par conséquent, le terme surfacique dans l'équation (30) s'annule, et on l'on a

$$\begin{aligned}\int \frac{d^3k_2}{(2\pi)^{3/2}}\,A(\vec{k}_2)\,e^{-i\omega_{\vec{k}_2}t}\nabla_{\vec{k}_2} e^{i\vec{k}_2.\vec{r}} &= -\int \frac{d^3k_2}{(2\pi)^{3/2}}\,\nabla_{\vec{k}_2}\left(A(\vec{k}_2)\,e^{-i\omega_{\vec{k}_2}t}\right)e^{i\vec{k}_2.\vec{r}} \\ &= -\int \frac{d^3k_2}{(2\pi)^{3/2}}\left(\nabla_{\vec{k}_2}A(\vec{k}_2) - itA(\vec{k}_2)\vec{\nabla}_{\vec{k}_2}\omega_{\vec{k}_2}\right)e^{i\vec{k}_2.\vec{r}-\omega_{\vec{k}_2}t}\end{aligned} \tag{34}$$

En reportant cette expression dans l'équation (29), on obtient

$$\langle\vec{r}\rangle(t) = \vec{r}_0 + \vec{v}_G t, \tag{35}$$

avec

$$\begin{aligned}
\vec{r}_0 &= i\int \frac{d^3k_1}{(2\pi)^{3/2}}\int \frac{d^3k_2}{(2\pi)^{3/2}}\, A^*(\vec{k}_1)\vec{\nabla}A(\vec{k}_2)\, e^{-i(\omega_{\vec{k}_2}-\omega_{\vec{k}_1})t}\int d^3r\, e^{i(\vec{k}_2-\vec{k}_1).\vec{r}} \\
&= i\int \frac{d^3k_1}{(2\pi)^{3/2}}\int \frac{d^3k_2}{(2\pi)^{3/2}}\, A^*(\vec{k}_1)\vec{\nabla}A(\vec{k}_2)\, e^{-i(\omega_{\vec{k}_2}-\omega_{\vec{k}_1})t}\,(2\pi)^3\delta(\vec{k}_2-\vec{k}_1) \\
&= i\int d^3k\, A^*(\vec{k})\vec{\nabla}A(\vec{k}) \\
&= \frac{i}{2}\int d^3k\, A^*(\vec{k})\vec{\nabla}A(\vec{k}) + \frac{i}{2}\int d^3k\, A^*(\vec{k})\vec{\nabla}A(\vec{k}) \\
&= \frac{i}{2}\int d^3k\, A^*(\vec{k})\vec{\nabla}A(\vec{k}) - \frac{i}{2}\int d^3k\, \vec{\nabla}A^*(\vec{k})A(\vec{k}) \qquad \text{(IPP)} \\
&= \mathrm{Re}\left[i\int d^3k\, A^*(\vec{k})\vec{\nabla}A(\vec{k})\right] \qquad (36)
\end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned}
\vec{v}_G &= \int \frac{d^3k_1}{(2\pi)^{3/2}}\int \frac{d^3k_2}{(2\pi)^{3/2}}\, A^*(\vec{k}_1)A(\vec{k}_2)\vec{\nabla}_{\vec{k}_2}\omega_{\vec{k}_2}\, e^{-i(\omega_{\vec{k}_2}-\omega_{\vec{k}_1})t}\int d^3r\, e^{i(\vec{k}_2-\vec{k}_1).\vec{r}} \\
&= \int d^3k\, |A(\vec{k})|^2\vec{\nabla}_{\vec{k}}\omega_{\vec{k}} \qquad (37)
\end{aligned}$$

En résumé :

$$\boxed{\langle\vec{r}\rangle(t) = \underbrace{\int d^3k\, A^*(k)i\vec{\nabla}_{\vec{k}}A(k)}_{\vec{r}_0} + \underbrace{\int d^3k\, |A(k)|^2\vec{\nabla}_{\vec{k}}\omega_k\cdot t}_{\vec{v}_G t}} \qquad (38)$$

3. Pour un paquet très étroit en k centré autour de $\vec{k}_0$ on peut faire l'approximation :

$$\vec{v}_G = \int d^3k\, |A(k)|^2\vec{\nabla}_{\vec{k}}\omega_k \simeq \vec{\nabla}_{\vec{k}_0}\omega_{k_0}\int d^3k\, |A(k)|^2 = \vec{\nabla}_{\vec{k}_0}\omega_{k_0} \qquad (39)$$

puisque la fonction d'onde est normée et donc $\int d^3k\, |A(k)|^2 = 1$.

4. On étudie la vitesse de groupe cas par cas :
   (a) Dans ce cas on a :
   — $[\lambda] = [m^{-1}]$
   — Le paramètre d'expension est $\epsilon_a = \lambda_a m$, qui est indépendant de k_0.
   — La vitesse de groupe est donnée par :

$$\vec{v}_G = \nabla_{\vec{k}}H_a(\vec{k})|_{\vec{k}=\vec{k}_0} = \begin{pmatrix} (k_0/m)\cos\theta \\ 0 \\ (k_0/m)(1+\lambda_a m)\sin\theta \end{pmatrix} \qquad (40)$$

   pour $\lambda_a = 0$ on retrouve bien :

$$\vec{v}_G = \vec{k}_0/m = \vec{v}_{\text{classique}} \qquad (41)$$

   — On souhaite trouver l'angle effectif $\theta_{\text{eff}} = \theta + \delta\theta$ au premier ordre en λ_a. Celui-ci est défini par $\vec{v}_G = |\vec{v}_G|(\cos\theta_{\text{eff}}, 0, \sin\theta_{\text{eff}})$. On a donc :

$$\tan\theta_{\text{eff}} = \tan\theta\,(1+\lambda_a m) = \tan(\theta+\delta\theta) \simeq \tan\theta + \frac{1}{\cos^2\theta}\delta\theta \qquad (42)$$

   On a donc

$$\delta\theta = \frac{\lambda_a m}{2}\sin(2\theta) \quad \rightarrow \quad \theta^a_{\text{eff}} = \theta + \frac{\lambda_a m}{2}\sin(2\theta) \qquad (43)$$

   — On note que θ^a_{eff} ne dépend pas de k_0, comme on s'y attendait avec l'analyse dimensionnelle.

(b) Dans ce cas on a :
- $[\lambda_b] = [m^{-1}k^{-2}]$
- Le paramètre d'expension est $\epsilon_b = \lambda_b m k_0^2$, qui dépendant de k_0.
- La vitesse de groupe est donnée par :

$$\vec{v}_G = \nabla_{\vec{k}} H_b(\vec{k})|_{\vec{k}=\vec{k}_0} = \begin{pmatrix} (k_0/m)\cos\theta \\ 0 \\ (k_0/m)(1+\lambda_b m k_0^2 \sin^2\theta)\sin\theta \end{pmatrix} \tag{44}$$

- De la même façon qu'avant, on trouve :

$$\theta_{\text{eff}}^b = \theta + \frac{\lambda_b m k_0^2}{2} \sin(2\theta)\sin^2\theta \tag{45}$$

- On note que θ_{eff}^b dépend de k_0, comme on s'y attendait avec l'analyse dimensionnelle.