Mécanique quantique – L2

Antoine Bourget - Alain Comtet - Antoine Tilloy

Séance du 23 janvier 2015 - `www.phys.ens.fr/~tilloy`

TD 13 : Pertes d'énergie dans la matière (corrigé)

---

1. (a) La particule interagit avec le noyau et les électrons composant l'atome. On a :

$$\widehat{V}(t) = \frac{q}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{Ze}{||\mathbf{r}(\mathbf{t})||} - \sum_i \frac{e}{||\mathbf{r}(\mathbf{t}) - \hat{\mathbf{r}}_\mathbf{i}||}\right)$$

où Z est le numéro atomique de l'atome.

(b) Le paramètre d'impact b est défini comme la distance minimale entre la particule et l'atome. Si b est grand devant la taille de l'atome, on peut linéariser le terme d'interaction avec les électrons, en prenant $\hat{\mathbf{r}}_\mathbf{i}$ comme petit paramètre.

$$\begin{aligned}\widehat{V}(t) &= \frac{q}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{Ze}{||\mathbf{r}(\mathbf{t})||} - \sum_i \frac{e}{||\mathbf{r}(\mathbf{t}) - \hat{\mathbf{r}}_\mathbf{i}||}\right) \\ &\simeq \frac{q}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{Ze}{r(t)} - \sum_i \frac{e}{r(t)}(1 + \frac{\mathbf{r}(\mathbf{t})\cdot\hat{\mathbf{r}}_\mathbf{i}}{r^2(t)})\right) \\ &\simeq \frac{q}{4\pi\epsilon_0 r^3(t)}\mathbf{r}(\mathbf{t})\cdot\widehat{\mathbf{D}}\end{aligned}$$

2. (a) Un état $|\Psi(t)\rangle$ peut s'écrire $|\Psi(t)\rangle = \sum_j c_j(t)|j\rangle$. On applique l'équation de Schrödinger à cet état, et on a :

$$\begin{aligned}i\hbar d_t|\Psi(t)\rangle &= (\widehat{H}_0 + \widehat{V}(t))|\Psi(t)\rangle \\ \sum_j\left(i\hbar(d_t b_j - \frac{iE_j}{\hbar}b_j)e^{-i\frac{E_j t}{\hbar}}|j\rangle\right) &= \sum_j\left(b_j E_j e^{-i\frac{E_j t}{\hbar}}|j\rangle + b_j e^{-i\frac{E_j t}{\hbar}}\widehat{V}(t)|j\rangle\right)\end{aligned}$$

Ensuite, on projette cette relation sur l'état $\langle g|$ et on a :

$$\begin{aligned}i\hbar(d_t b_g - \frac{iE_g}{\hbar}b_g)e^{-i\frac{E_g t}{\hbar}} &= b_g E_g e^{-i\frac{E_g t}{\hbar}} + \sum_j\left(b_j e^{-i\frac{E_j t}{\hbar}}\langle g|\widehat{V}(t)|j\rangle\right) \\ i\hbar d_t b_g &= \sum_f\left(b_j e^{i\frac{E_g - E_j}{\hbar}t}\langle g|\widehat{V}(t)|j\rangle\right)\end{aligned}$$

Enfin, on limite cette relation au premier ordre en V : $b_i \simeq 1$, alors que b_f est du premier ordre. Pour un état excité, on a finalement

$$\begin{aligned} i\hbar d_t b_f &= e^{i\frac{E_f-E_i}{\hbar}t}\langle f|\widehat{V}(t)|i\rangle \\ b_f(t) &= \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{t} e^{i\frac{E_f-E_i}{\hbar}u}\langle f|\widehat{V}(u)|i\rangle \mathrm{d}u \end{aligned}$$

(b) Après l'interaction, l'atome est dans l'état $|\Psi\rangle = \sum_f c_f(\infty)|f\rangle + c_i(\infty)|i\rangle$. L'énergie de cet état est

$$E(\infty) = \sum_f |b_f(\infty)|^2 E_f + |b_i(\infty)|^2 E_i$$

donc $\delta E_a = \sum_f |b_f(\infty)|^2(E_f - E_i)$. On peut par ailleurs définir le temps d'interaction comme l'intervalle de temps sur lequel V prend des valeurs notables, c'est à dire $\tau = b/v$. Si ce temps est grand devant la periode d'oscillation de l'exponentielle dans l'intégrale, on peut considérer que l'intégration est dominée par celle-ci. Essentiellement, cela revient à prendre la transformée de Fourier d'une fonction large dans le domaine temporel : on obtient une fonction étroite dans le domaine spectral, qui tend vers une distribution de Dirac pour un temps d'interaction infini. Dans ce cas là, $b_f(\infty) = 0$, et l'atome ne gagne pas d'énergie. C'est le cas d'une modification adiabatique de la structure de niveaux de l'atome : il n'y a pas de transfert énergétique.

(c) Inversement, si le temps d'interaction est court devant la période de l'exponentielle, on peut négliger cette dernière, dans ce cas :

$$\begin{aligned} b_f(\infty) &= \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\langle f|\widehat{V}(t)|i\rangle \mathrm{d}t \\ &= \frac{q}{i\hbar 4\pi\epsilon_0}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{(b^2+v^2t^2)^{3/2}}\left(\langle f|\widehat{D_Y}|i\rangle vt + \langle f|\widehat{D_X}|i\rangle b\right)\mathrm{d}t \\ &= \frac{q}{i\hbar 4\pi\epsilon_0 b^2}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{(1+v^2t^2/b^2)^{3/2}}\langle f|\widehat{D_X}|i\rangle \mathrm{d}t \\ &= \frac{2q}{i\hbar 4\pi\epsilon_0 bv}\langle f|\widehat{D_X}|i\rangle \end{aligned}$$

On retrouve bien le résultat de l'énoncé :

$$\delta E_a = \frac{4q^2}{(4\pi\epsilon_0)^2\hbar^2 v^2 b^2}\sum_f (E_f - E_i)|\langle f|\widehat{D_X}|i\rangle|^2$$

3. (a) On cherche à calculer le commutateur suivant :

$$\begin{aligned} [\widehat{\mathbf{D}}, \widehat{\mathbf{\Pi}}] &= \sum_{k,k'}[-e\hat{\mathbf{r}}_{\mathbf{k}}, \frac{\hat{\mathbf{p}}_{\mathbf{k'}}}{-Ze}] \\ &= \frac{1}{Z}\sum_{k,k'}[\hat{\mathbf{r}}_{\mathbf{k}}, \hat{\mathbf{p}}_{\mathbf{k'}}] \\ &= i\hbar\mathbb{1}_3 \end{aligned}$$

où $\mathbb{1}_3$ désigne l'identité de $\mathbb{R}^3$.

(b) Tel que le hamiltonien est défini, $\widehat{\mathbf{D}}$ commute avec le terme potentiel, donc on se ramène à calculer :

$$
\begin{aligned}
[\widehat{\mathbf{D}}, \widehat{H}_0] &= \frac{-e}{2m}\sum_{k,k'}[\hat{\mathbf{r}}_{\mathbf{k}}, \hat{\mathbf{p}}^{\mathbf{2}}_{\mathbf{k'}}] \\
&= i\hbar\frac{-e}{2m}\sum_{k} 2\hat{\mathbf{p}}_{\mathbf{k}} \\
&= i\hbar\frac{Ze^2}{m}\widehat{\mathbf{\Pi}}
\end{aligned}
$$

Par ailleurs, on peut prendre l'élément de matrice de ce commutateur entre $\langle e|$ et $|f\rangle$, et on obtient directement la relation demandée.

(c) On choisit de prendre la relation de commutation de la question 3,a, sur l'axe Ox et de regarder un de ses éléments de matrice diagonaux :

$$
\begin{aligned}
i\hbar &= \langle f|[\hat{D}_X, \hat{\Pi}_X]|f\rangle \\
&= \sum_e \langle f|\hat{D}_X|e\rangle\langle e|\hat{\Pi}_X|f\rangle - \langle f|\hat{\Pi}_X|e\rangle\langle e|\hat{D}_X|f\rangle \\
&= \sum_e \langle f|\hat{D}_X|e\rangle\frac{m(E_f - E_e)}{i\hbar Ze^2}\langle e|\hat{D}_X|f\rangle - \frac{m(E_f - E_e)}{-i\hbar Ze^2}\langle f|\hat{D}_X|e\rangle\langle e|\hat{D}_X|f\rangle \\
&= \frac{2m}{i\hbar Ze^2}\sum_e (E_f - E_e)|\langle f|\hat{D}_X|e\rangle|^2
\end{aligned}
$$

4. En combinant les réponses précédentes, on arrive au résultat

$$
\delta E_a = \frac{2Z}{mv^2}\left(\frac{qe}{4\pi\epsilon_0 b}\right)^2
$$