Mécanique Quantique Avancée

Année 2000 – 1ère Partie

Problème 1. Soit $\mathcal{H}$ un espace de Hilbert complexe. Montrer que pour tout $\phi, \psi \in \mathcal{H}$ on a les deux identités

$$\|\psi + \phi\|^2 + \|\psi - \phi\| = 2\|\psi\|^2 + 2\|\phi\|^2, \tag{1}$$

et

$$4(\psi, \phi) = \|\psi + \phi\|^2 - \|\psi - \phi\|^2 + i\|\psi - i\phi\|^2 - i\|\psi + i\phi\|^2. \tag{2}$$

Soit B un espace de Banach dans lequel l'identité (1) est vérifiée. Montrer que B est un espace de Hilbert. *Indication : utiliser l'identité (2) pour définir un produit scalaire sur B.*

Problème 2. Soit A un opérateur autoadjoint sur l'espace de Hilbert $\mathcal{H}$. Si $f\colon \mathbb{R} \to \mathbb{C}$ est une fonction continue, comment définit-on l'opérateur $f(A)$? Montrer que si f et g sont deux fonctions continues, alors $f(A)g(A) = (fg)(A)$.

Problème 3. Soit $H_0 \equiv -\Delta_x$ l'hamiltonien libre dans $\mathbb{R}^3$, et V le potentiel de Yukawa ($\mu > 0$) :

$$V(x) \equiv \frac{e^{-\mu|x|}}{|x|}.$$

1. Montrer que pour tout $\lambda \in \mathbb{R}$, l'opérateur $H_\lambda \equiv H_0 + \lambda V(x)$ est autoadjoint sur $D(H_0)$.
2. Déterminer $\sigma_{\text{ess}}(H_\lambda)$.
3. Décrire qualitativement le spectre discret de H_λ. *Indication : distinguer $\lambda < 0$ et $\lambda > 0$.*

Problème 4. Soit $V\colon \mathbb{R} \to]-\infty, 0]$ un potentiel continu tel que $V(x) = 0$ si $|x| > L$, mais $V \not\equiv 0$. On considère l'hamiltonien $H_\lambda \equiv -\partial_x^2 + \lambda V(x)$ sur $\mathbb{R}$. On écrira $V = -F^2$.

1. Montrer que $H_\lambda \psi = -\kappa^2 \psi$, avec $\kappa > 0$ et $0 \neq \psi \in L^2(\mathbb{R})$ si et seulement si $\lambda Q_\kappa \phi = \phi$, où $Q_\kappa \equiv F(\kappa^2 + H_0)^{-1} F$ et $\phi \equiv F\psi$.
2. Montrer que Q_κ est un opérateur de Hilbert-Schmidt si $\kappa > 0$. *Indication : on utilisera la formule*
$$((\kappa^2 + H_0)^{-1} f)(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-\kappa|x-y|}}{2\kappa} f(y)\, dy.$$
3. Soit q_κ la plus grande valeur propre de Q_κ. Montrer que $\lim_{\kappa \downarrow 0} q_\kappa = +\infty$, et que $\lim_{\kappa \to +\infty} q_\kappa = 0$.
4. Montrer que si $\lambda > 0$, alors H_λ possède au moins une valeur propre négative $-\kappa(\lambda)^2$.
5. Déterminer le comportement de $\kappa(\lambda)$ lorsque $\lambda \downarrow 0$.

Mécanique Quantique Avancée

Année 2001 – 1ère Partie

Problème 1. Soit $A \neq 0$ un opérateur borné sur l'espace de Hilbert $\mathcal{H}$. On dénote par P_1 et P_2 les projections orthogonales sur $\mathrm{Ker}(A)^\perp$ et $\mathrm{Ker}(A^*)^\perp$.

1. Montrer que $T \equiv A^*A$ est auto-adjoint et que $T \geq 0$.
2. On pose $R \equiv \sqrt{T}$. Montrer que $\mathrm{Ker}(R) = \mathrm{Ker}(A)$ et que $\overline{\mathrm{Im}(R)} = \overline{\mathrm{Im}(A^*)}$. En déduire que
$$\begin{aligned} \mathcal{H}_1 &\equiv \{R\phi + \psi | \phi \in \mathcal{H}, \psi \in \mathrm{Ker}(A)\}, \\ \mathcal{H}_2 &\equiv \{A\phi + \psi | \phi \in \mathcal{H}, \psi \in \mathrm{Ker}(A^*)\}, \end{aligned}$$
sont des sous-espaces denses de $\mathcal{H}$.
3. Montrer que les formules
$$U_1(R\phi + \psi) = A\phi, \quad U_2(A\phi + \psi) = R\phi,$$
définissent des opérateurs U_i de $\mathcal{H}_i$ dans $\mathcal{H}$. Montrer que $\|U_i\chi\| = \|P_i\chi\|$ pour tout $\chi \in \mathcal{H}_i$, en conclure que $\|U_i\| = 1$.
4. Montrer que $U_1 \subset U_2^*$ et que $U_2 \subset U_1^*$. En déduire que U_1^* et U_2^* sont des opérateurs bornés sur $\mathcal{H}$, et que $\|U_1^*\| = \|U_2^*\| = 1$.
5. On pose $U \equiv \overline{U_1} = U_1^{**}$. Montrer que $U \subset U_2^*$ et en conclure que $U = U_2^*$ et donc $U^* = \overline{U_2}$.
6. Montrer que $U^*U = P_1$, $UU^* = P_2$ et $A = UR$ (décomposition polaire de A).

Problème 2. Soit $V = -F^2$ un potentiel borné, à support compact dans $\mathbb{R}^3$, et $N(V)$ le nombre de valeurs propres négatives de l'opérateur de Schrödinger $H_V \equiv -\Delta + V(x)$. Par le principe de Birmann-Schwinger, $N(V)$ est égal au nombre de valeurs propres du noyau
$$k_F(x,y) \equiv F(x)\frac{1}{4\pi|x-y|}F(y),$$
dans l'intervalle $]0,1]$. Pour $d \in \mathbb{R}^3$ on pose $V_d(x) \equiv V(x-d)$. Montrer que
$$\lim_{|d|\to\infty} N(V + V_d) = 2N(V).$$

Indications : Montrer que $k_{F+F_d} = k_F + k_{F_d} + r_d$, où r_d est un noyau tel que $\|r_d\| = O(|d|^{-1})$ lorsque $|d| \to \infty$. Montrer ensuite que les valeurs propres positives de $k_F + k_{F_d}$ sont identiques à celles de k_F, mais avec une multiplicité double. Conclure par un argument perturbatif.

Mécanique Quantique Avancée

Année 2002 – 1ère Partie

Problème 1. Soit A un opérateur fermé sur l'espace de Hilbert $\mathcal{H}$. Montrez que $D(A)$ muni du produit scalaire

$$\langle \psi, \phi \rangle \equiv (\psi, \phi) + (A\psi, A\phi),$$

est un espace de Hilbert.

Problème 2. Le domaine numérique d'un opérateur fermé A est défini par

$$\Theta(A) \equiv \overline{\{(\psi, A\psi) | \psi \in D(A), \|\psi\| = 1\}}.$$

1. Montrez que pour tout $\psi \in D(A)$ et $z \in \mathbb{C}$ on a $|(\psi, (z - A)\psi)| \geqslant \operatorname{dist}(z, \Theta(A)) \|\psi\|^2$, et en conclure que $\|(z - A)\psi\| \geqslant \operatorname{dist}(z, \Theta(A)) \|\psi\|$.

2. Montrez que $z - A$ est injectif si $z \notin \Theta(A)$ et que $\operatorname{Ran}(z - A)$ est dense si $\bar{z} \notin \Theta(A^*)$.

3. Montrez que si $z \notin \Theta(A) = \overline{\Theta(A^*)}$, alors $z \in \rho(A)$ et

$$\left\|(z - A)^{-1}\right\| \leqslant \frac{1}{\operatorname{dist}(z, \Theta(A))}.$$

Problème 3. Soit $\mathcal{H}$ un espace de Hilbert et $\mathcal{C}(\mathcal{H}) \subset \mathcal{B}(\mathcal{H})$ l'ensemble des opérateurs compacts sur $\mathcal{H}$. Montrez que $\mathcal{C}(\mathcal{H})$ est fermé dans la norme de $\mathcal{B}(\mathcal{H})$.

Problème 4. Soit $\chi_{_R}$ la fonction caractéristique de la boule de rayon R centrée en 0 dans $\mathbb{R}^n$. On dénote par x et $p \equiv -i\nabla$ les opérateurs de position et d'impulsion dans $\mathcal{H} \equiv L^2(\mathbb{R}^n)$.

1. Montrez que l'opérateur $C \equiv \chi_{_M}(p)\chi_{_R}(x)$ est compact. (Indication : montrez que si $\psi_n \rightharpoonup 0$ alors $\lim_n (C\psi_n)^\wedge(p) = 0$ pour tout p. Utilisez le théorème de Lebesgue pour conclure).

2. Soit F: $\mathbb{R}^n \to \mathbb{C}$ une fonction mesurable bornée tendant vers zéro à l'infini ($\lim_{R\to\infty} \sup_{|x \rhd R} |F(x)| = 0$). Montrez que $F(x) = \lim_{R\to\infty} \chi_{_R}(x)F(x)$ dans la norme de $\mathcal{B}(\mathcal{H})$.

3. Montrez que si F et G sont mesurables, bornées et tendent vers zéro à l'inifini alors, dans la norme de $\mathcal{B}(\mathcal{H})$, $F(p)G(x) = \lim_{M\to\infty} \lim_{R\to\infty} F(p)\chi_{_M}(p)\chi_{_R}(x)G(x)$. En conclure que $F(p)G(x)$ est compact.

Problème 5. Soit A un opérateur autoadjoint. Un opérateur B est A-compact si $B(A \pm i)^{-1}$ sont compacts. Si B est A-compact, alors $B \ll A$. En particulier, si B est symétrique, $A + B$ est autoadjoint sur $D(A)$.

1. Montrez que si B est symétrique et A-compact, alors $\sigma_{\text{ess}}(A + B) = \sigma_{\text{ess}}(A)$. (Indication : utilisez le fait que $\lambda \in \sigma_{\text{ess}}(A) \Leftrightarrow \exists\, \psi_n \rightharpoonup 0, \|\psi_n\| = 1, \|(\lambda - A)\psi_n\| \to 0$.)

2. Montrez que si $V(x)$ est un potentiel mesurable et borné tendant vers zéro à l'infini, alors $\sigma_{\text{ess}}(p^2 + V(x)) = [0, \infty[$.

Centre de Physique Théorique
Université de Provence, Université de la Méditerranée, Université de Toulon et du Var

17 décembre 2003
Bibliothque, 9h–12h

Examen de Mécanique Quantique Avancée
D.E.A. P.P.-M.-P.M

On considère un électron lié à un centre attractif par un potentiel V qu'on supposera régulier et rapidement décroissant. L'hamiltonien est donc

$$H_0 = P^2 + V = -\Delta + V$$

sur $\mathcal{H} := L^2(I\!\!R)$ (on considère un modèle à une dimension pour simplifier). On supposera également que V est pair: $V(-x) = V(x)$, de telle sorte que le moment dipolaire du système dans un état propre a pour expression

$$D_n := \langle \psi_n, X\psi_n \rangle = 0.$$

On applique un champ électrique de potentiel

$$f_{\varepsilon,R}(x) := \varepsilon x \chi\left(\frac{x}{R}\right)$$

où χ est un cutoff:

$$\chi\left(\frac{x}{R}\right) := \begin{cases} 1 & \text{si } |x| \leq R \\ 0 & \text{si } |x| \geq 2R \end{cases}.$$

L'hamiltonien devient donc

$$H_{\varepsilon,R} = H_0 + f_{\varepsilon,R}(X).$$

1. Montrer que $\text{spect}_{\text{ess}}(H_{\varepsilon,R}) = \text{spect}_{\text{ess}}(H_0) = [0, \infty[$ pour tout $\varepsilon \in I\!\!R$ et tout $R > 0$.

2. On suppose aussi que tous les états propres de H_0 sont simples, c'est-à-dire de multiplicité 1. Montrer que pour tout $R > 0$ et tout état propre $H_0\psi_n = E_n\psi_n$ du système non perturbé il existe, pour ε assez petit, un état propre

$$H_{\varepsilon,R}\psi_{n,\varepsilon,R} = E_{n,\varepsilon,R}\psi_{n,\varepsilon,R}$$

du système perturbé tel que

$$\lim_{\varepsilon \to 0} E_{n,\varepsilon,R} = E_n.$$

3. On définit la susceptibilité électrique par

$$S^{(n)} := \lim_{R \to \infty} \frac{\partial}{\partial_\varepsilon} D_n(\varepsilon, R)_{|\varepsilon=0}$$

où $D_n(\varepsilon, R)$ est le moment dipolaire du système dans l'état $\psi_{n,\varepsilon,R}$

$$D_n(\varepsilon, R) := \langle \psi_{n,\varepsilon,R}, X\psi_{n,\varepsilon,R} \rangle.$$

(a) Montrer que

$$\frac{\partial}{\partial \varepsilon} D_n(\varepsilon, R)_{|\varepsilon=0} = \langle \psi_n, XQ_n(E_n - H_0)^{-1} Q_n X \chi(\frac{X}{R})\psi_n \rangle + \langle \psi_n, \chi(\frac{X}{R}) XQ_n(E_n - H_0)^{-1} Q_n X\psi_n \rangle,$$

où $Q_n := I - |\psi_n\rangle\langle\psi_n|$.

(b) Montrer que

$$S^{(n)} = 2\langle \psi_n, XQ_n(E_n - H_0)^{-1} Q_n X\psi_n \rangle.$$

(c) Montrer que dans l'état fondamental, $(n = 0)$, $S^{(n)} < 0$ et

$$|S^{(n)}| \leq \frac{2R_0^2}{\Delta E_0}$$

où $R_0 := \langle \psi_0, X^2\psi_0 \rangle^{\frac{1}{2}}$ désigne le rayon moyen de l'état fondamental et $\Delta E_0 := \operatorname{dist}(E_0, \sigma(H_0) \setminus \{E_0\})$ l'énergie d'excitation nécessaire pour quitter l'état fondamental.

4. On suppose maintenant que le champ électrique est alternatif de période T. L'hamiltonien a alors pour expression

$$H_{\varepsilon,R}(t) = H_0 + \sin(\omega t) f_{\varepsilon,R}(X), \quad \omega > 0.$$

Vérifier que l'équation de Schrödinger

$$-i\partial_t \psi(t) + H_{\varepsilon,R}(t)\psi(t) = 0$$

possède uen solution unique pour tout temps réel dès que la condition initiale est fixée.

5. (a) Démontrer que la probabilité de transition au bout d'un temps $0 < t \leq T$ de l'état fondamental ψ_0 à l'état excité ψ_n de H_0 $(n \geq 1)$ a pour expression

$$\varepsilon^2 \left| \int_0^t e^{is(E_n - E_0)} \sin(\omega s) ds \right|^2 |\langle \psi_0, X\chi(\frac{X}{R})\psi_n \rangle|^2 + \mathcal{O}(\varepsilon^3).$$

(b) On suppose ε assez petit pour que le reste $\mathcal{O}(\varepsilon^3)$ soit négligeable. Quelles sont les périodes qui favorisent la transition pour des temps courts?

Indications: on pourra supposer que

$$|\psi_n(x)| \leq C_n e^{-\alpha_n |x|}$$

pour certaines constantes $C_n > 0$ et $\alpha_n > 0$.

Examen de Mécanique Quantique Avancée
D.E.A. P.P.-M.-P.M

Problème 1. Dans la représentation d'énergie, l'espace de Hilbert d'un électron dans un conducteur unidimensionnel est

$$\mathcal{H} \equiv L^2(\Delta, de),$$

où $\Delta \equiv [-1, 1] \subset \mathbb{R}$ est la bande de conduction. L'hamiltonien est l'opérateur autoadjoint défini par

$$(H\psi)(e) = e\psi(e).$$

1. Montrer que le spectre de H est Δ et que pour tout $\psi \in \mathcal{H}$ la mesure spectrale de H pour ψ est donnée par

   $$d\mu_\psi(e) = |\psi(e)|^2\, de.$$

   En conclure que le spectre de H est absolument continu.

2. On introduit une impureté dans le conducteur dont l'hamiltonien devient

   $$H_\lambda = H + \lambda V,$$

   où le potentiel d'impureté V est donné par

   $$(V\psi)(e) = (v, \psi)v(e),$$

   avec $v \in \mathcal{H}$. Montrer que H_λ est autoadjoint et que son spectre essentiel est Δ. Indication: montrer que V est compact.

3. Vérifier que pour $z \notin \mathbb{R}$ on a

   $$(z - H_\lambda)^{-1}\psi = (z - H)^{-1}\psi + \lambda \frac{(v, (z - H)^{-1}\psi)}{1 - \lambda(v, (z - H)^{-1}v)} (z - H)^{-1}v.$$

4. Montrer que $\varepsilon \in \mathbb{R} \setminus \Delta$ est une valeur propre de H_λ si et seulement si

   $$\lambda(v, (\varepsilon - H)^{-1}v) = 1.$$

5. On suppose que

   $$v(e) = \sqrt{\frac{2}{\pi}}(1 - e^2)^{1/4}.$$

   Dans ce cas on peut montrer que pour $\varepsilon \in \mathbb{R} \setminus \Delta$,

   $$(v, (\varepsilon - H)^{-1}v) = \begin{cases} \varepsilon - \sqrt{\varepsilon^2 - 1} & \text{si } \varepsilon > 1, \\ \varepsilon + \sqrt{\varepsilon^2 - 1} & \text{si } \varepsilon < -1, \end{cases}$$

   Déterminer, en fonction de la constante de couplage λ, le spectre discret de H_λ.

Problème 2. Soit H_0 l'opérateur différentiel $-i\partial_x$ agissant dans l'espace de Hilbert $\mathcal{H} := L^2(]0, 2\pi[)$ de domaine

$$\operatorname{dom} H_0 := \{u \in \mathcal{H} \,|\, u' \in \mathcal{H},\; u(2\pi) = u(0)\}.$$

1. Démontrer que le spectre de H_0 est égal à $\mathbb{Z}$ et que chaque point du spectre est une valeur propre simple. Donner une base orthonormée de $\mathcal{H}$ constituée de vecteurs propres de H_0.

2. Soit $V \in s\!-C^1(\mathbb{R}, \mathcal{B}(\mathcal{H}))$ une fonction fortement continuement différentiable sur $\mathbb{R}$ et à valeur dans les opérateurs bornés et symétriques sur $\mathcal{H}$. Démontrer que l'équation de Schrödinger

$$(-i\partial_t + H_0 + V(t))\psi = 0 \tag{$\sharp$}$$

définit un propagateur unitaire et fortement continu.

3. A partir de maintenant $V(t) := v(\cdot - t)$ où $v \in C^1(\mathbb{R})$ est 2π-périodique. Plus précisément: $\forall u \in \mathcal{H}$, $(V(t)u)(x) := v(x - t)u(x)$. Vérifier que V est bien dans $s\!-C^1(\mathbb{R}, \mathcal{B}(\mathcal{H}))$. Démontrer que toutes les solutions (au sens fort) de ($\sharp$) sont de la forme

$$\psi(t, x) = e^{-itv(x-t)}\psi_0(x - t), \quad t \in \mathbb{R},\; x \in [0, 2\pi[.$$

où ψ_0 désigne la valeur de la solution au temps $t = 0$ et est un élément quelconque de $\operatorname{dom} H_0$.

4. Démontrer que le propagateur associé à ($\sharp$) a pour expression

$$\forall (s, t) \in \mathbb{R}^2, \quad U(t, s) = e^{-i(t-s)H_0} e^{-i(t-s)V(s)}$$

et qu'il est 2π-périodique. En déduire qu'aucune trajectoire de ($\sharp$) n'est précompacte dans $\mathcal{H}$.

5. *Question facultative.* On suppose ici que $V(t) = \alpha(t)x^2$ où α est une fonction de classe C^1. Pour chaque t fixé calculer une approximation de l'état fondamental de $H_0 + V(t)$ en précisant une borne sur l'erreur faites dans cette approximation.

Master Recherche
Physique Théorique, Physique Mathématique
et Physique des Particules

Mécanique Quantique Avancée – Année 2005

Sur l'hilbertien $\mathcal{H} := \ell^2(\mathbb{Z}) = \{\psi : \mathbb{Z} \to \mathbb{C} \mid \sum_{x\in\mathbb{Z}} |\psi(x)|^2 < \infty\}$, muni du produit scalaire

$$(\psi, \phi) = \sum_{x\in\mathbb{Z}} \overline{\psi(x)}\phi(x),$$

l'opérateur de position X est défini par $(X\psi)(x) = x\psi(x)$.

Partie 1.a *Montrer que X est auto-adjoint sur un domaine $D(X)$ qu'on précisera. Quel est le spectre de X ? Préciser sa nature.*

La transformation de Fourier discrète

$$\widehat{\psi}(k) = \sum_{x\in\mathbb{Z}} \psi(x)e^{-ikx} := L^2 - \lim_{N\to\infty} \sum_{x=-N}^{N} \psi(x)e^{-ikx}, \tag{1}$$

définit un opérateur unitaire $F : \mathcal{H} \to L^2([-\pi, \pi], dk/2\pi)$ dont l'inverse est donné par

$$\psi(x) = \int_{-\pi}^{\pi} \widehat{\psi}(k)e^{ikx}\frac{dk}{2\pi}.$$

Dans la suite on considèrera toujours la transformée de Fourier $\widehat{\psi}(k)$ comme une fonction 2π-périodique de $\mathbb{R}$ dans $\mathbb{C}$.

Partie 1.b *Montrer que si $\psi \in D(X)$ alors $\widehat{\psi}(k)$ est une fonction continue.*

On considère l'hamiltonien H_0 définit sur $\mathcal{H}$ par

$$(H_0\psi)(x) = 2\psi(x) - \psi(x-1) - \psi(x+1).$$

Partie 2

1. *Montrer que FH_0F^* agit sur l'hilbertien $L^2([-\pi, \pi], dk/2\pi)$ comme opérateur de multiplication par $\varepsilon(k) = 2(1 - \cos k)$. En déduire une représentation spectrale de H_0. Quel est le spectre de H_0 ? Préciser sa nature.*

2. *Calculer l'opérateur vitesse $V = i[H_0, X]$ et montrer que FVF^* est l'opérateur de multiplication par $v(k) = \partial_k\varepsilon(k) = 2\sin k$. Quel est le spectre de V ? Préciser sa nature.*

3. *En supposant que $e^{itH_0}D(X) \subset D(X)$ pour tout $t \in \mathbb{R}$ montrer que l'évolution de Heisenberg de la position est donné par*

$$X_t := e^{itH_0} X e^{-itH_0} = X + tV.$$

Soit $W_n : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ l'opérateur de multiplication par la fonction w_n définie par

$$w_n(x) := \begin{cases} 1 & \text{si } x = n \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} .$$

Soit aussi $g : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ une fonction de classe C^∞ sur $\mathbb{R}$; on considère la famille d'opérateurs $\{H_{g(t)}\}_t$ agissant dans $\mathcal{H}$ où

$$H_{g(t)} = H_0 - g(t) W_0.$$

Partie 3

1. *Expliquer pourquoi (i) $H_{g(t)}$ est autodajoint pour tout $t \in \mathbb{R}$, puis (ii) pourquoi l'équation de Schrödinger:*

   $$(-i\partial_t + H_{g(t)})\psi = 0$$

   possède une solution unique $\mathbb{R} \ni t \mapsto \psi_g(t, \cdot) \in \mathcal{H}$, pour tout temps t réel, dès que ψ est fixée au temps s. On note U_g le propagateur correspondant et $\mathcal{T}_g := \{U_g(t, 0)\psi, t \geq 0\}$ la trajectoire vers le futur de condition initiale ψ en $t = 0$.

2. *Dans cette question g est constante et strictement positive. Démontrer que $E(g) =: -\omega^2$ est une valeur propre isolée de H_g si et seulement si*

   $$1 = g(R_0(-\omega^2) w_0, w_0) \qquad (\sharp)$$

   où $R_0(z) := (H_0 - z)^{-1}$ désigne la résolvante de H_0 en $z \in \mathbb{C}$. Indications: Calculer $R_g(z) := (H_g - z)^{-1}$ en fonction de $R_0(z)$ à l'aide de la deuxième équation résolvante et remarquer que $W_0 = W_0^2$ est un opérateur de rang 1.

3. *(i) Vérifier que l'équation $(\sharp)$ possède une solution $E(g) = -\omega^2$ unique dans $(-\infty, 0[$, et ceci pour tout $g > 0$. (ii) Vérifier qu'elle a pour valeur*

   $$E(g) = -2 - \sqrt{4 + g^2}$$

   et (iii) que la transformée de Fourier du vecteur propre correspondant, ψ_g, a pour expression:

   $$\widehat{\psi}_g(k) = C \frac{1}{\varepsilon(k) - E(g)}$$

   où C est une constante de normalisation que l'on déterminera. (iv) Déduire de ce qui précède que cette valeur propre est simple.

4. *Dans cette question* $g := g(\lambda) := 1 - \lambda$ *avec* $\lambda < 1$. *Dire pourquoi* $E(g(0))$ *est stable sous la perturbation* $(-g(\lambda) + g(0))W_0$. *Calculer le développement à l'ordre 2 en* λ *de* $E(g(\lambda))$ *en donnant une estimation de l'erreur.*

5. *Dans cette question* $g = 0$. *La trajectoire du système quantique gouverné par* H_0 *de condition initiale* ψ_1 *est-elle bornée? Est-elle précompacte?*

6. *Dans cette question* $g(t) = 1 - \lambda \sin(\nu t)$, *avec* $\nu > 0$ *et* $0 < \lambda < 1$ *fixés. On considère les trajectoires* $\mathcal{T}_1$ *et* $\mathcal{T}_g$ *des systèmes quantiques d'hamiltoniens:* $H_1 := H_{g:=1}$ *et* $H_{g(t)}$ *respectivement, de condition initiale* ψ_1, *l'état propre normalisé de* H_1. *Soit* $\tau \in]0, 1[$, *déterminer un intervalle* $[0, t_\tau]$, $t_\tau > 0$, *tel que la trajectoire* $\mathcal{T}_g$ *devie au plus de* 100τ *pourcents de* $\mathcal{T}_1$*; en d'autres termes déterminer* $t_\tau > 0$ *tel que:* $\forall t \in [0, t_\tau]$ *l'on ait la fidélité* $F(t, 0, \psi_1) \geq 1 - \tau$.

Des intégrales pouvant être utiles:

$$\int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi(\varepsilon(k) + \omega^2)} = \frac{1}{\omega\sqrt{4 + \omega^2}}, \qquad \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{(\varepsilon(k) + \omega^2)^2} = \frac{2\pi\left(\omega^2 + 2\right)}{\omega^3\left(\omega^2 + 4\right)^{3/2}}.$$

Master Recherche

Physique Théorique, Physique Mathématique

et Physique des Particules

Mécanique Quantique Avancée – Année 2006

On considère le mouvement d'un électron non-relativiste sans spin de masse 1 sur un système composé de trois fils semi-infinis soudés en un point commun 0 (voir la figure 1). L'espace de Hilbert de ce système est donc

$$\mathcal{H}^0 = \left\{ \psi(x) = \begin{pmatrix} \psi_1(x) \\ \psi_2(x) \\ \psi_3(x) \end{pmatrix} \middle| \psi_i \in L^2([0,\infty[, dx) \right\} = L^2([0,\infty[, dx) \oplus L^2([0,\infty[, dx) \oplus L^2([0,\infty[, dx),$$

où $\psi_j(x)$ est l'amplitude de probabilité pour trouver l'électron à distance x du point de jonction dans le fil j. Le produit scalaire dans $\mathcal{H}^0$ est donné par

$$(\psi, \phi) = \sum_{j=1}^{3} \int_0^\infty \overline{\psi_j(x)} \phi_j(x) dx.$$

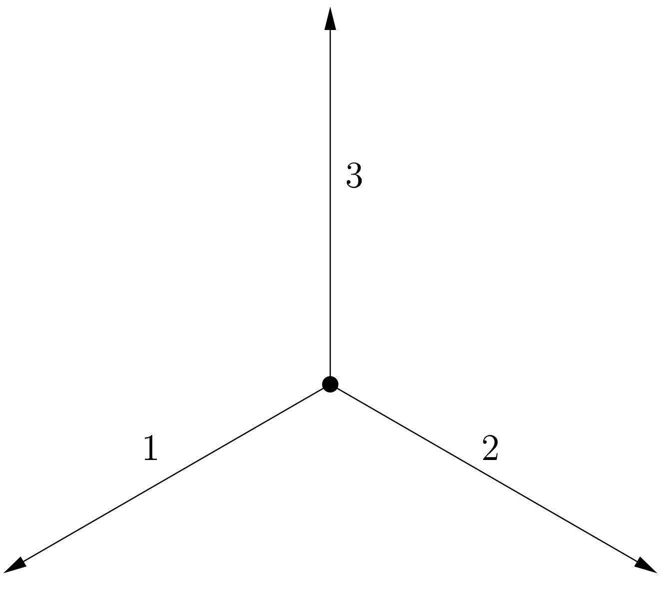

Figure 1. Les 3 fils semi-infinis avec un point de jonction.

L'hamiltonien H^0 est donné par

$$(H^0\psi)_j(x) = -\psi_j''(x),$$

avec les conditions suivantes au point de jonction

$$\psi_1(0) = \psi_2(0) = \psi_3(0), \quad \psi_1'(0) + \psi_2'(0) + \psi_3'(0) = 0. \tag{1}$$

1. Quelle est l'interprétation physique des conditions (1) ? Pourquoi de telles conditions sont mathématiquement nécessaires ?

2. Montrer que l'opérateur H^0 est symétrique sur le domaine

$$\mathcal{D} = \{\psi \in \mathcal{H}^0 | \psi_j \in C^\infty([0,\infty[), \lim_{x\to\infty} \psi_j(x) = \lim_{x\to\infty} \psi_j'(x) = 0, \psi \text{ satisfait les conditions (1)}\}.$$

3. Que doit-on montrer pour prouver que H^0 est essentiellement auto-adjoint sur $\mathcal{D}$?

Dans la suite, on dénote ausi par H^0 l'unique extension autoadjointe de cet opérateur. Le spectre de H^0 est $\Sigma = [0, \infty[$. Pour $z \in \mathbb{C} \setminus \Sigma$ sa résolvente $R^0(z) = (H^0 - z)^{-1}$ s'écrit

$$(R^0(z)\psi)_j(x) = \sum_{k=1}^{3} \int_0^\infty G^0_{jk}(z; x, y)\psi_k(y)\,dy,$$

où la fonction de Green G^0 est donnée par

$$G^0_{jk}(z; x, y) = \delta_{jk} \frac{e^{-w|x-y|} - e^{-w|x+y|}}{2w} + \frac{2}{3}\,\frac{e^{-w|x+y|}}{2w},$$

avec $w = \sqrt{-z}$, cette racine étant déterminée par la condition $\operatorname{Re} w > 0$.

On coupe maintenant le fil numéro 3 à distance L du point de jonction (voir figure 2). Pour ce faire on impose, en plus des conditions (1), une condition de Dirichlet en $x = L$ c'est-à-dire

$$\psi_3(L) = 0.$$

L'espace de Hilbert du nouveau système est

$$\mathcal{H} = L^2([0, \infty[, dx) \oplus L^2([0, \infty[, dx) \oplus L^2([0, L], dx).$$

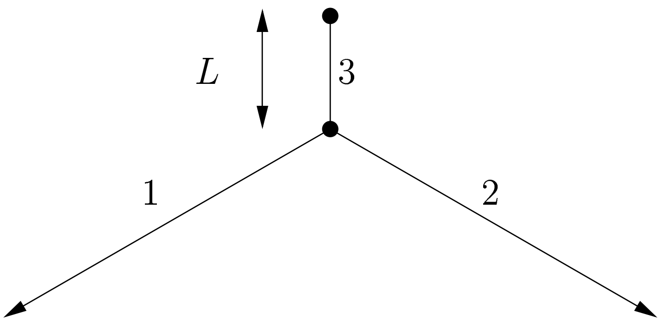

Figure 2. Deux fils semi-infinis couplés à un fil de longueur L.

4. Expliquer pourquoi on s'attend à ce que ce nouveau système possède des résonances.

5. Montrer que la fonction de Green du nouveau système est donnée par

$$G_{jk}(z; x, y) = G^0_{jk}(z; x, y) - \frac{G^0_{j3}(z; x, L)G^0_{3k}(z; L, y)}{G^0_{33}(z; L, L)}.$$

6. Etudier les zéros de la fonction $f(w) = G^0_{33}(z; L, L)$ dans le plan de la variable $w = \sqrt{-z}$. Spécifier quelle partie de ce plan correspond au plan coupé «physique» $\mathbb{C} \setminus \Sigma$ et quelle partie correspond à la seconde feuille de Riemann.

7. Comment interprétez-vous ces résulats en terme de valeurs propres et de résonances du système.

8. On tronque maintenant les trois fils à distance L. L'espace de Hilbert des états du système est alors $\mathcal{H}^2 := L^2(0,L) \oplus L^2(0,L) \oplus L^2(0,L)$. Soit H^2 l'hamiltonien de domaine

$$\operatorname{dom} H^2 \ni u = u_1 \oplus u_2 \oplus u_3, \qquad \Longleftrightarrow \qquad u_i, u_i', u_i'' \in L^2(0,L), i = 1,2,3$$

et u obéit aux conditions (1) et

$$u_1(L) = u_2(L) = u_3(L) = 0. \tag{3}$$

(a) Faculative. Démontrer que le spectre de H^2 est discret.

(b) Démontrer que le spectre de H^2 est

$$\operatorname{spect} H^2 \ni E \iff E = k_n^2, \quad \text{où} \quad k_n := \frac{n\pi}{2L} \text{ et } n \in I\!N^\star := \{1, 2, \ldots\}.$$

Vérifier que E_n est simple ssi n est impair et que le vecteur propre correspondant est de la forme

$$\varphi_n(x) = A \sin\left(\frac{n\pi}{2L}(x-L)\right)\begin{pmatrix}1\\1\\1\end{pmatrix}$$

avec A à déterminer pour que φ_n soit normalisé.

(c) Facultative. Vérifier que $E_n := k_n^2$ est une valeur propre double si n est pair; puis qu'une base de l'espace propre associé à E_n est par exemple

$$\left\{\sin\left(\frac{n\pi}{2L}(x-L)\right)\begin{pmatrix}1\\-1\\0\end{pmatrix}, \sin\left(\frac{n\pi}{2L}(x-L)\right)\begin{pmatrix}0\\1\\-1\end{pmatrix}\right\}.$$

9. Soit $V : \mathcal{H}^2 \to \mathcal{H}^2$ l'opérateur défini par

$$Vu = \bigoplus_{i=1}^{3} V_i u_i,$$

où V_i désigne un opérateur de multiplication par une fonction v_i bornée sur $(0,L)$.

(a) Expliquer pourquoi $H^2 + \lambda V$ est auto-adjoint.

(b) Expliquer pourquoi toutes les valeurs propres de H^2 sont stable sous la perturbation λV, $\lambda \in I\!R$, lorsque $\lambda \to 0$.

(c) Expliquer pourquoi la valeur propre $E_n(\lambda)$ de $H^2 + \lambda V$, n impair, est analytique en λ dans une voisinage de 0.

(d) Calculer le développement de Taylor de $E_n(\lambda)$ à l'ordre 1 (DT1) en $\lambda = 0$ dans le cas où

$$v_i(x) = x\delta_{1,i}. \tag{4}$$

Donner une estimation sur l'erreur commise en remplaçont $E_n(\lambda)$ par son DT1.

(e) Pour quelle raison a-t-on seulement considéré les valeurs propres de nombre quantique n impairs dans l'approximation de $E_n(\lambda)$ ci-dessus.

10. Soit $V(t) = \cos(\omega t)V$ avec V défini par (4) et $\omega > 0$.

(a) Expliquer pourquoi l'équation de Schrödinger

$$(-i\partial_t + H^2 + \lambda V(t))\psi = 0, \quad \psi(0) = \psi_0 \in \operatorname{dom} H^2$$

possède une solution unique au sens fort.

(b) Donner le comportement à temps petit de la probabilité de transition du fondamental de H^2 a son sous espace propre le plus proche en énergie, sous l'action de l'évolution associée à $H^2 + V(t)$.